

1. Übungsblatt: Struktur eines Festkörpers (Teil 1)

Aufgabe 1: Rotationssymmetrie

Wir untersuchen die erlaubten Gittersymmetrien für n -zählige Rotationsachsen, d.h. mit einem Rotationswinkel $\Phi = 2\pi/n$. Welche Werte kommen für n in Frage? Man betrachte vier Gitterpunkte A, B, C und D in der Ebene orthogonal zu einer n -zähligen Rotationsachse. A und B seien nächste Nachbarn im Bravais-Gitter mit Abstand a , durch die je eine der n -zähligen Rotationsachsen verlaufen soll. Die Rotation um B bringe A zu C und die Rotation um A bringe B zu D. Zeigen Sie, dass die geometrischen Eigenschaften des Gitters nur $n = 1, 2, 3, 4$ und 6 erlauben.

Tip: Machen Sie eine Skizze. Welche Bedingungen müssen die Seiten des resultierenden Trapezes erfüllen, wenn A, B, C und D Gitterpunkte sind?

Aufgabe 2: Reziprokes Gitter

Die Gittervektoren des reziproken Gitters können aus den Beziehungen

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad \mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)} \quad \mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}$$

berechnet werden, wenn die Gittervektoren des ursprünglichen dreidimensionalen Gitters $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ gegeben sind.

- a) Zeigen Sie, dass die Vektoren $\mathbf{g}_i$ ($i = 1, 2, 3$) die Bedingung $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ erfüllen.
- b) Beweisen Sie, dass das reziproke des reziproken Gitters wieder das ursprüngliche Gitter ist (vollständige Gleichheit zeigen!).
- c) Zeigen Sie, dass die Vektoren des reziproken Gitters die untenstehende Beziehung erfüllen:

$$\mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

Wie ist dieser Ausdruck zu interpretieren?

- d)* In einem Experiment zur Röntgenstrukturanalyse eines Kristalls beobachten Sie das Beugungsbild in grosser Entfernung vom Kristall. Überlegen Sie sich verschiedene Möglichkeiten, das Experiment durchzuführen, um möglichst aufschlussreiche Beugungsbilder beobachten zu können.

Tip: Zeigen und benutzen Sie für den Beweis in Teilaufgabe b) den Ausdruck $\exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}) = 1$, wobei $\mathbf{R}$ ein Gittervektor im direkten Raum und $\mathbf{G}$ ein Gittervektor im reziproken Raum ist.

Aufgabe 3: Bravais-Gitter

Bestimmen Sie das Bravais-Gitter, welches den Punkten mit ganzzahligen Koordinaten (l, m, n) zugeordnet wird, wenn

- a) l, m, n entweder alle gerade oder alle ungerade sind.
- b) die Summe von l, m und n eine gerade Zahl ist.

Tip: Jeder Gitterpunkt kann über $l\hat{x} + m\hat{y} + n\hat{z}$ erreicht werden.

Siehe Rückseite

Aufgabe 4: Punktsymmetrien

Zählen Sie alle Symmetrie-Achsen und -Ebenen für die hexagonale Einheitszelle (siehe Figur) des hexagonalen Gitters auf und zeichnen Sie diese ein.

Bilden die Ecken des hexagonalen Gitters in der Ebene ein Bravais-Gitter?

Machen Sie sich klar, dass die primitive Einheitszelle des hexagonalen Gitters nicht hexagonal ist.

