2. Übungsblatt

Verteilung 2. Oktober 2007
Besprechung 10./11. Oktober 2007

Struktur eines Festkörpers (Teil 2) und Streuung an einem Festkörper (Teil 1)

Aufgabe 1: *NaCl-Struktur*

Das Bravais-Gitter von NaCl ist kubisch flächenzentriert (fcc) mit einer Basis bestehend aus einem Natrium-Ion bei $\mathbf{0}$ und einem Chlorid-Ion im Zentrum der (konventionellen) kubischen Elementarzelle (2-atomige Basis). Die kubische Zelle wird durch die Vektoren $\mathbf{a} = a\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{b} = a\hat{\mathbf{y}}, \mathbf{c} = a\hat{\mathbf{z}}$ aufgespannt und besitzt die Punktsymmetrie des Gitters. (a=5.64Å).

1. Wieviele Na^+ und Cl^- Ionen sind in der kubischen Elementarzelle enthalten? Finden Sie die Lage dieser Ionen im System **xyz**.
2. Finden Sie die Elementarzelle mit dem kleinsten Volumen (d. h. die *primitive Einheitszelle*), mit der man durch Translationen entlang Gittervektoren die NaCl-Struktur konstruieren kann. Bestimmen Sie das Vektortripel $\mathbf{a_1'}, \mathbf{a_2'}, \mathbf{a_3'}$, das diese Zelle aufspannt, die Lage aller Ionen in der Zelle und berechnen Sie das Volumen der Einheitszelle. Machen Sie eine Skizze!

Bem.: Die primitive Einheitszelle besitzt in diesem Fall nicht mehr die Punktsymmetrie des Gitters!

Aufgabe 2: *Packung von harten Kugeln*

Man baut einen einfachen kubischen (*sc*) Kristall aus sich berührenden, nicht-deformierbaren Kugeln. Wie gross ist dabei der Füllfaktor (Volumen der Kugel dividiert durch das Gesamtvolumen)? Vergleichen Sie diesen Wert mit dem für die dichteste Kugelpackung, d.h. führen Sie die analoge Rechung für eine kubisch flächenzentrierte (*fcc*) und eine hexagonal dichtgepackte (*hcp*) Struktur durch.
Tipp: Für die hexagonal dichtgepackte Struktur gilt $c=a\sqrt{8/3}$. Zeigen und benutzen Sie diese Relation.

Aufgabe 3: *Bragg-Bedingung*

Eine Bragg-Ebene ist definiert durch die Beziehungen $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k} = \mathbf{G}$ und $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$, wobei $\mathbf{k}$ den gestreuten, $\mathbf{k}_0$ den einfallenden Wellenvektor und $\mathbf{G}$ einen beliebigen reziproken Gittervektor bezeichnet.
Zeigen Sie die dazu äquivalente Beziehung $\mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{G}} = |\mathbf{G}|/2$, wobei $\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{G}/|\mathbf{G}|$ einen normierten reziproken Gittervektor darstellt. Was ist die geometrische Bedeutung dieser Beziehung im reziproken Raum (d.h. im k-Raum)? Machen Sie eine Skizze!

Aufgabe 4: *Die Brillouin-Zonen*

Gegeben sei ein rechteckiges Bravais-Gitter im zweidimensionalen Raum (Gittervektoren $a\hat{\mathbf{x}}, b\hat{\mathbf{y}}, a = b/2$).
Zeichnen Sie die 1. Brillouin-Zone, welche definiert ist durch die Punkte im reziproken Raum, die vom Ursprung aus erreicht werden können, ohne eine Bragg-Ebene zu überqueren (siehe Aufgabe 3).
Analog muss für die 2. Brillouin Zone genau eine Bragg-Ebene überquert werden. Führen Sie die Konstruktion entsprechend weiter und zeichnen Sie die 2., 3. , ... Brillouin-Zone! Machen Sie sich klar, dass auch die höheren Brillouin-Zonen (ebenfalls primitive!) Elementarzellen des reziproken Gitters sind!
Tipp: Die 1. Brillouin-Zone im reziproken Raum konstruiert man genauso wie die Wigner-Seitz-Elementarzelle im Konfigurationsraum.