

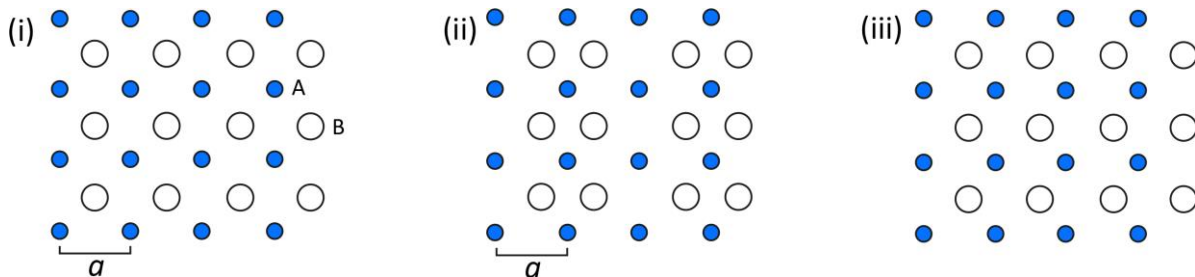
Übungsblatt 3

Abgabe bearbeiteter Übungszettel bis Freitag, 27. Oktober, 12 Uhr!

Aufgabe 1: Zweidimensionales Gitter

In den unten stehenden Abbildungen sind drei unterschiedliche zweidimensionale Gitter von fiktiven Ionenkristallen dargestellt. Sie bestehen aus zwei Atomsorten A (kleine dunkle Kreise) und B (große weiße Kreise) mit negativer bzw. positiver Ladung.

- Welches Punktgitter beschreibt die Translationssymmetrie des abgebildeten Kristalls in (i) vollständig? Geben Sie primitive Gittervektoren an!
- Geben Sie eine Basis für die Atome der Elementarzelle an!
- Nehmen wir nun an, dass der Kristall eine Phasenumwandlung macht. Dabei werden die B-Atome im Zentrum benachbarter Einheitszellen spiegelsymmetrisch längs der horizontalen Achse um $\pm \delta a$ gegeneinander verschoben, wie in Abb. (ii) gezeigt. Welche Gittersymmetrie liegt nun vor?
- Geben Sie die neuen primitiven Gitter- und die Basisvektoren an!
- Zeichnen Sie das reziproke Gitter und die erste Brillouin-Zone für den Kristall vor und nach der Verzerrung!
- Nun soll angenommen werden, dass die B-Atome in jeder der ursprünglichen Zellen um den gleichen Betrag δa verschoben werden, siehe Abb. (iii). Wie ändert sich die Translationssymmetrie gegenüber (i)?
- Welche der beiden Verzerrungen (ii) und (iii) koppelt an ein elektrisches Feld?



Aufgabe 2: Reziprokes Gitter

- Bestimmen Sie die primitiven Einheitsvektoren eines bcc- und fcc-Gitters!
- Bestimmen Sie das reziproke Gitter zu einem bcc-Gitter!
- Zeigen Sie, dass das reziproke Gitter des reziproken Gitters wieder das Gitter im Ortsraum ist!

Aufgabe 3: hcp-Struktur

Zeigen Sie, dass das Verhältnis der beiden unabhängigen Längen in der Einheitszelle, c/a , in einer hexagonal dicht-gepackten Kristallstruktur gleich $\sqrt{8/3}$ ist!

Aufgabe 4: Miller-Indizes

Die Miller-Indizes (hkl) dienen zur eindeutigen Festlegung von Netzebenen, in denen die Atome eines Kristalls liegen. Zu ihrer Bestimmung werden die folgenden Schritte unternommen:

- Bestimmung der Schnittpunkte einer Ebene mit den drei Kristallachsen in Einheiten von a_i , $i=1,2,3$! Hat eine Ebene keinen Schnittpunkt mit einer bestimmten Achse, so wird sein Wert zu Unendlich angenommen!
- Berechnung der Kehrwerte dieser Schnittpunkte!
- Berechnung der drei kleinsten ganzen Zahlen h , k , und l , die im selben Verhältnis zueinander stehen wie die Kehrwerte.

Die Gesamtheit aller über die Kristallsymmetrie äquivalenten Ebenen wird mit $\{hkl\}$ bezeichnet.

- (a) Zeigen Sie, dass der Vektor im reziproken Raum $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ senkrecht auf der Ebene mit den entsprechenden Miller-Indizes steht!
- (b) Zeigen Sie, dass der Abstand der nächsten Ebenen in der Schar, charakterisiert durch (hkl) , gegeben ist durch $d_{hkl} = 2\pi/|\mathbf{G}_{hkl}|$.