Struktur der Materie - Festkörperphysik
Übungsblatt 1

Besprechung am Do. 21. Nov. 2013

Aufgabe 1.1: Kugelpackungen

(s. Kittel, Kapitel 1)

a) Berechnen Sie für Kristalle mit

- einfach kubischem (sc),

  Lösung: $R = a/2$, $V_{\text{at}} = 8 \times \frac{1}{8} \times \frac{4}{3}\pi R^3 \Rightarrow \frac{V_{\text{at}}}{V_{\text{Zelle}}} = \frac{\pi}{6} = 52\%$

- kubisch raumzentriertem (bcc),

  Lösung: $R = a\sqrt{3}/4$, $V_{\text{at}} = (8 \times \frac{1}{8} + 1) \times \frac{4}{3}\pi R^3 \Rightarrow 68\%$

- kubisch flächenzentriertem (fcc) und

  Lösung: $R = a/2\sqrt{2}$, $V_{\text{at}} = (8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2}) \times \frac{4}{3}\pi R^3 \Rightarrow 74\%$

- hexagonal dichtgepacktem (hcp) Gitter

  Lösung: 74%

die Raumausfüllung, d.h. den Anteil am Gesamtvolumen, der mit Atomen besetzt ist. Hierbei wird angenommen, dass die Atome sich berühren und kugelförmig sind mit einem festen Radius R.

b) Berechnen Sie die Radien der größten Kugeln, die in die Tetraederlücken und die Oktaederlücken einer dichtesten Kugelpackung passen.

Lösung:
Tetraederlücken: $r = \frac{\sqrt{3}-\sqrt{2}}{4}a = \frac{\sqrt{6}}{2}R = 0.22R$
Oktaederlücken: $r = \frac{\sqrt{2}-1}{2\sqrt{2}}a = (\sqrt{2}-1)R = 0.41R$

Aufgabe 1.2: Einheitszelle und primitive Zelle

(s. Kittel, Kapitel 1)

Berechnen Sie die Volumina der jeweiligen Einheitszelle und der zugehörigen primitiven Zelle im

- einfach kubischen (sc),

  Lösung: $V_{\text{EZ}} = a^3 = V_{\text{pZ}}$

- kubisch raumzentrierten (bcc) und

Lösung:
primitive Basis:

$$\frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow V_{\mathrm{pZ}} = \frac{1}{2}a^3 = \frac{1}{2}V_{\mathrm{EZ}}$

- kubisch flächenzentrierten (fcc) Gitter.

  Lösung:
  primitive Basis:

$$\frac{a}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Die Gitterkonstante betrage jeweils a.

Aufgabe 1.3: Gitterkonstanten

Berechnen Sie die Gitterkonstanten der folgenden kubischen Kristalle:

- Kupfer (fcc); Dichte $\rho = 8,94\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^3}$,

  Lösung: $\rho = \frac{M_{\mathrm{EZ}}}{a^3}$, $M_{\mathrm{EZ}} = 4 \times M_{\mathrm{Cu}} = 4 \times 63.55\frac{\mathrm{g}}{6\times10^{23}}$

- CsCl (bcc) ; Dichte $\rho = 3,97\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^3}$.

  Vergleichen Sie mit experimentell ermittelten Literaturwerten (s. Lehrbücher).

Aufgabe 1.4: Netzebenen und Millerindizes

Wird erst in der Übung am **28.11.** besprochen!

a) Bestimmen Sie die Millerindizes für die in Abbildung 1 a) gezeigten Richtungen A - F.

Lösung: A:(1 0 0) B: (1 1 0) C: (1 1 1) D: $(1\ 0\ \frac{1}{2})$ E: $(0\ \bar{1}\ 0)$ F: $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 1)$

b) Bestimmen Sie die Millerindizes für die vier in Abbildung 1 b) gezeigten Ebenen. Der Ursprung ist rot markiert.

Lösung: i) $(0\ 0\ \bar{1})$ ii) $(0\ 1\ \bar{1})$ iii) (2 0 1) iv) (2 1 2)

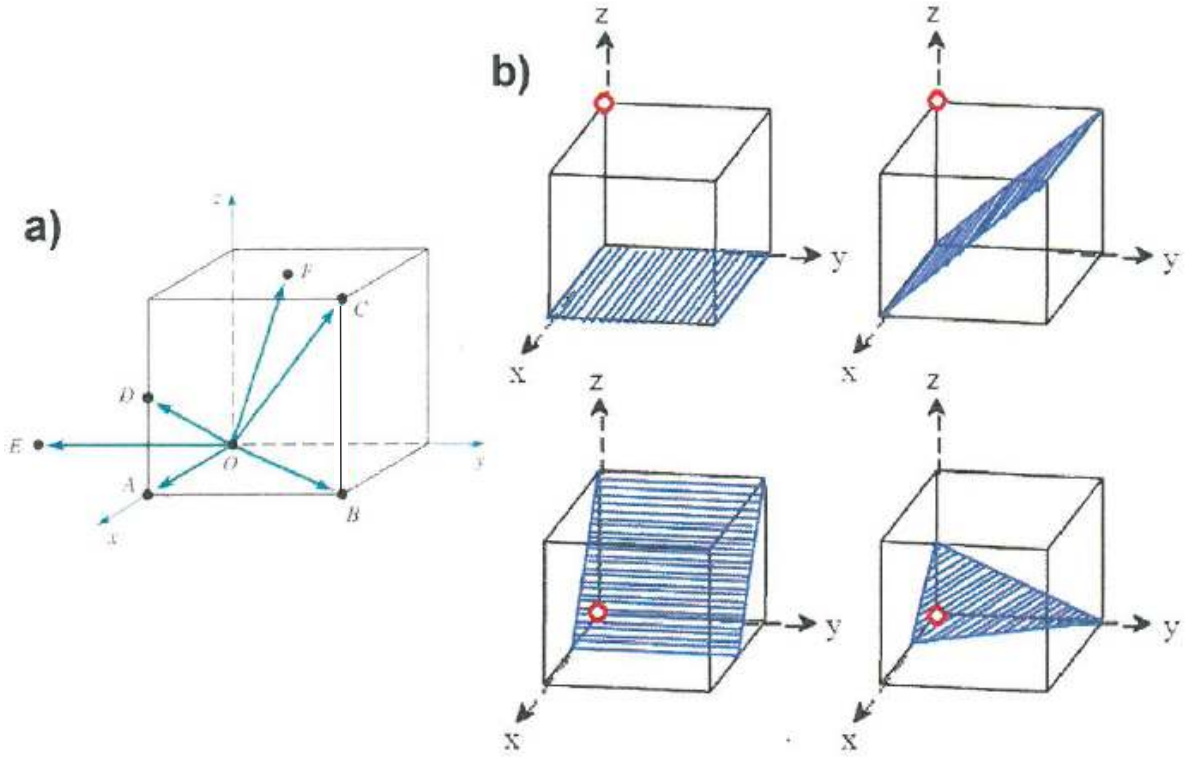

Abbildung 1: a) Kristallrichtungen und b) Netzebenen zu Aufgabe 1.4.