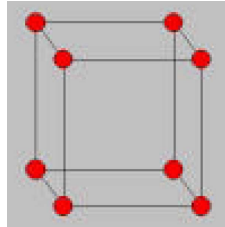


Lösungen zu Blatt 4

Aufgabe 12: Packungsdichte

i) sc, kubisch primitiv:



Die Kugeln (Atome) stoßen entlang a aneinander.

$$\Rightarrow a = 2r, \quad \Rightarrow r = \frac{a}{2}$$

Ein Atom pro Einheitszelle!

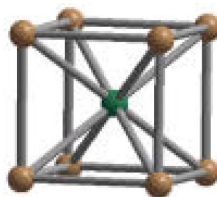
$$V_{\text{Atome}} = \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4}{3}\pi \frac{a^3}{8} = \frac{\pi a^3}{6}$$

$$V_{\text{Einheitszelle}} = a^3$$

$$\text{Packungsdichte} = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{EZ}}} = \frac{\frac{\pi a^3}{6}}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0,524 \hat{=} 52,4\%$$

D.h. der zur Verfügung stehende Raum wird nur zu 52,4% von den Atomen ausgefüllt.

ii) bcc, kubisch raumzentriert:



Atome stoßen entlang der Raumdiagonalen $a\sqrt{3}$ aneinander.

$$\Rightarrow a\sqrt{3} = 4r, \quad \Rightarrow r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$$

Zwei Atome pro Einheitszelle!

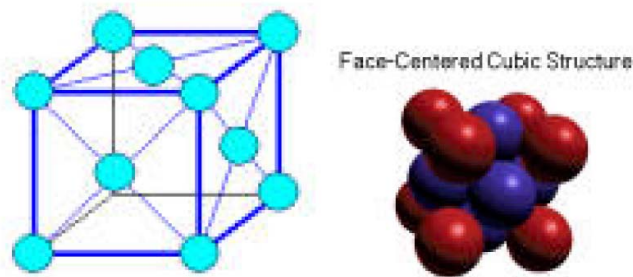
$$V_{\text{Atome}} = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{8}{3} \pi \frac{3\sqrt{3}}{4^3} a^3 = \frac{2}{16} \pi \sqrt{3} a^3 = \frac{1}{8} \pi \sqrt{3} a^3$$

$$V_{\text{Einheitszelle}} = a^3$$

$$\text{Packungsdichte} = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{EZ}}} = \frac{\sqrt{3}}{8} \pi = 0,68 \hat{=} 68\%$$

Der zur Verfügung stehende Raum wird zu 68% von den Atomen ausgefüllt.

iii) fcc, kubisch flächenzentriert:



Hier stoßen die Atome entlang der Flächendiagonalen $a\sqrt{2}$ aneinander.

$$\Rightarrow a\sqrt{2} = 4r, \quad \Rightarrow r = \frac{\sqrt{2}}{4} a$$

Vier Atome pro Einheitszelle!

$$V_{\text{Atome}} = \frac{4^2}{3} \pi r^3 = \frac{4^2}{3} \pi \frac{2\sqrt{2}a^3}{4^3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi a^3$$

$$V_{\text{Einheitszelle}} = a^3$$

$$\text{Packungsdichte} = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{EZ}}} = \frac{\sqrt{2}6}{\pi} = 0,74 \hat{=} 74\%$$

Der Anteil des ausgefüllten Raumes entspricht 0,74. fcc ist die dichteste „Kugelpackung“ zusammen mit hcp (hexagonal close-packed).

Aufgabe 13: Miller Indizees und Ebenenvektor

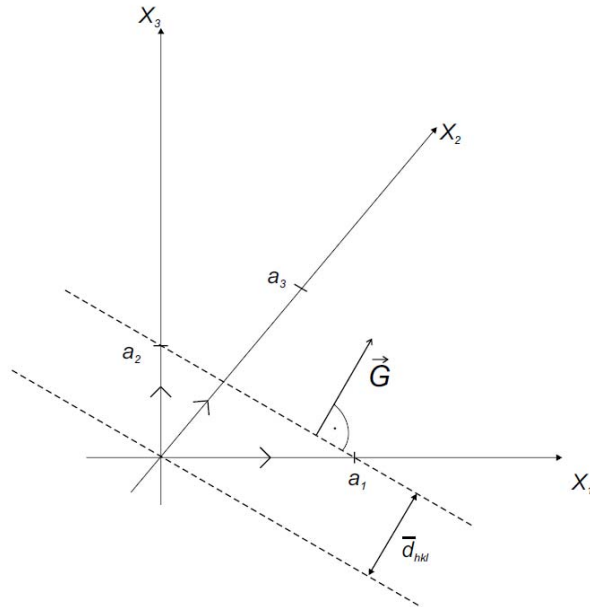


Abbildung 1: Darstellung der Netzebenen mit dem Abstand \bar{d}_{hkl} und des reziproken Gittervektors \vec{G}

Es gilt für den Translationsvektor \vec{T} im normalen Raum:

$$\vec{T} = a_i \vec{x}_1 + a_j \vec{x}_2 + a_k \vec{x}_3 = \begin{pmatrix} a_i \\ a_j \\ a_k \end{pmatrix}, \text{ wobei } a_i, a_j, a_k \text{ ganze Zahlen sind.}$$

Und es gilt für den reziproken Gittervektor \vec{G} im reziproken Raum:

$$\vec{G} = b_i \vec{g}_1 + b_j \vec{g}_2 + b_k \vec{g}_3 = \begin{pmatrix} b_i \\ b_j \\ b_k \end{pmatrix}, \text{ wobei } b_i, b_j, b_k \text{ ganze Zahlen sind.}$$

Das reziproke Gitter und das Kristallgitter stehen durch folgende Definition zueinander in Beziehung:

$$\vec{x}_i \cdot \vec{g}_j = 2\pi \delta_{ij}.$$

a):

Die Punkte a_1, a_2, a_3 in Abb. 1 (nächste Seite) sind die Schnittpunkte mit den Koordinatenachsen. Wie man leicht sieht, liegen die zwei Vektoren $\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} a_1 \\ -a_2 \\ 0 \end{pmatrix}$ und

$$\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ -a_3 \end{pmatrix} \text{ in der Ebene.}$$

Aus der Konstruktionsvorschrift für Miller-Indizes ergibt sich der Zusammenhang:

$$\vec{G} = \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{N}{a_1} \\ \frac{N}{a_2} \\ \frac{N}{a_3} \end{pmatrix} = \frac{N}{a_1} \vec{g}_1 + \frac{N}{a_2} \vec{g}_2 + \frac{N}{a_3} \vec{g}_3$$

Dabei ist N die Zahl, die für den Kehrwert der Koordinaten die entsprechenden ganzzahligen Miller-Indizes liefert. Ausgehend von der gegebenen Geometrie, ergibt das Skalarprodukt von \vec{G} mit \vec{v}_1 und \vec{v}_2 die folgenden Werte:

$$\vec{G} \cdot \vec{v}_1 = \frac{N}{a_1} \vec{g}_1 \cdot a_1 \vec{x}_1 + \frac{N}{a_2} \vec{g}_2 \cdot -a_2 \vec{x}_2 = N2\pi - N2\pi = 0$$

$$\vec{G} \cdot \vec{v}_2 = \frac{N}{a_1} \vec{g}_1 \cdot a_1 \vec{x}_1 + \frac{N}{a_3} \vec{g}_3 \cdot -a_3 \vec{x}_3 = N2\pi - N2\pi = 0$$

Damit steht \vec{G} senkrecht auf der Ebene $(h \ k \ l)$.

b):

Da \vec{G} senkrecht auf der Ebene steht, ist $\frac{\vec{G}}{|\vec{G}|}$ der normierte Normalenvektor \vec{n}_0 der Ebene („Stichwort Hessische Normalform“ (HNF)). Der Abstand der Ebene zum Ursprung berechnet sich nach der HNF mit Hilfe eines beliebigen Stützvektors \vec{r} der Ebene (hier wählen wir $\vec{r} = a_1 \vec{x}_1$) nach:

$$\bar{d}_{hkl} = \vec{n}_0 \cdot \vec{r} = \frac{\vec{G}}{|\vec{G}|} \cdot a_1 \cdot \vec{x}_1 = \frac{N}{a_1} \cdot \frac{a_1 2\pi}{|\vec{G}|} = \frac{N2\pi}{|\vec{G}|}.$$

Wie man sich anhand von Beispielen leicht klar macht, ist N die Anzahl der Ebenen zwischen der dargestellten Ebene und dem Ursprung. Damit ergibt sich der Abstand zweier Ebenen zu:

$$d_{hkl} = \frac{\bar{d}_{hkl}}{N} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}.$$

Aufgabe 14: Zweidimensionales Gitter

a):

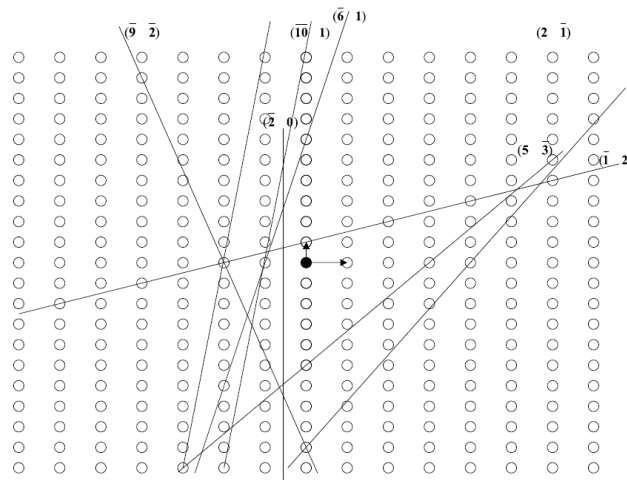
Im Zweidimensionalen gibt es insgesamt fünf Gitter: das quadratische, das rechtwinklige, das zentriert-rechtwinklige, das hexagonale und das schräge (bzw. schiefe) Gitter. In unserem Beispiel handelt sich um das rechtwinklige Gitter im Zweidimensionalen.

b):

Die Angaben hier sind Beispiele.

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0,5 \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0,5 \end{pmatrix}; \quad \vec{a} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1,5 \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0,5 \end{pmatrix};$$

c)



| Miller Indizes | → | Kehrwerte | $\xrightarrow{\cdot N}$ | Achsenschnittpunkte |
|----------------------|---|--------------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $(\bar{1}0, 1)$ | → | $(-\frac{1}{10}, 1)$ | $\xrightarrow{\cdot 10}$ | $(-1, 10)$ |
| $(\bar{1}, 2)$ | → | $(-1, \frac{1}{2})$ | $\xrightarrow{\cdot 2}$ | $(-2, 1)$ |
| $(9, \bar{4})$ | → | $(\frac{1}{9}, -\frac{1}{4})$ | $\xrightarrow{\cdot 36}$ | $(4, -9)$ |
| $(2, \bar{1})$ | → | $(\frac{1}{2}, -1)$ | $\xrightarrow{\cdot 2}$ | $(1, -2)$ |
| $(\bar{9}, \bar{2})$ | → | $(-\frac{1}{9}, -\frac{1}{2})$ | $\xrightarrow{\cdot 18}$ | $(-2, -9)$ |
| $(\bar{6}, 1)$ | → | $(-\frac{1}{6}, 1)$ | $\xrightarrow{\cdot 6}$ | $(-1, 6)$ |
| $(\bar{2}, 0)$ | → | $(-\frac{1}{2}, \infty)$ | → | $(-\frac{1}{2}, \infty)$ |
| $(5, \bar{3})$ | → | $(\frac{1}{5}, -\frac{1}{3})$ | $\xrightarrow{\cdot 15}$ | $(3, -5)$ |

Vorsicht!!!!

Hier eine Anleitung zum Einzeichnen der Ebenen. Gültig nur im Zweidimensionalen!

Millerindizes vertauschen, dabei aber das Minuszeichen stehen lassen. Man wähle ein Bezugspunkt und markiere den Gitterpunkt in \vec{a} - und \vec{b} -Richtung, die den vertauschten Millerindizes entsprechen. Verbinden dieser zwei Punkte ergibt eine der Ebenen der zugehörigen Ebenenschar.

Hinweis: Enthält der Millerindex eine Null, muss anders verfahren werden, da sonst die Symmetrie der Ebenenschar nicht klar wird. In so einem Fall nimmt man die korrekte Konstruktion über den Reziprokwert vor.

Aufgabe 15: kubisch flächenzentrierter Kristall mit einatomiger Basis

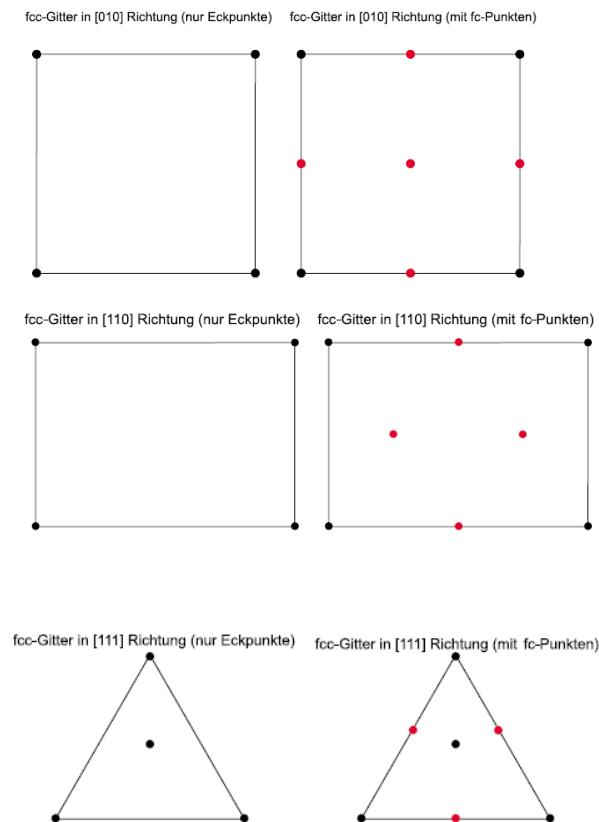
a):

Vier Atome pro Einheitszelle: $\frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 4$.

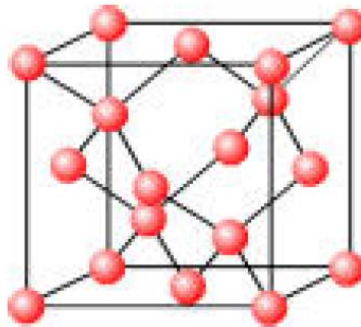
Oder fcc-Gitter mit 2 atomiger Basis: Also 4 (Anzahl fcc Gitterplätze) \cdot 2 (Anzahl Basisatome)

b):

Die Projektionen:



Aufgabe16: kubisch flächenzentrierter Kristall mit zweiatomiger Basis (Silizium oder Diamant)



a):

8 Atome pro Einheitszelle: $\frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 + 4 \cdot 1 = 8$.

b):

Zunächst wird berechnet, wie viele Einheitszellen in 1 cm^3 enthalten sind:

$$\frac{1 \text{ cm}^3}{a^3} = \frac{(0,01 \text{ m})^3}{(543,07 \cdot 10^{-12} \text{ m})^3} = 6,24 \cdot 10^{21}$$

$$\Rightarrow 6,24 \cdot 10^{21} \cdot 8 = 4,99 \cdot 10^{22}$$

Ein Kubikzentimeter eines Siliziumkristalls enthält $4,99 \cdot 10^{22}$ Atome.

Auf der nächsten Seiten sind die Projektionen zu sehen. Das Diamant-Gitter setzt sich aus 8 Eckatomen, 6 flächenzentrierten Atomen (fc-Atome) und 4 im Würfel enthaltenen Atomen (bc-Atome) zusammen.

c):
Die Projektionen:

