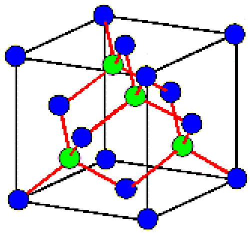
Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Übung 5: Gitter und Ebenen (idealer Kristall)

Aufgabe 9: Einheitszelle von Silizium, Internationales Einheitensystem (SI)

Betrachten Sie die Einheitszelle von Silizium:



Es handelt sich um die Diamantstruktur, d. h. um einen kubisch-flächenzentrierten Kristall mit zweiatomiger Basis. Zu jedem Gitterplatz gehören zwei Silizium-Atome im Abstand eines Viertels der Raumdiagonalen; in dem hier gezeigten Bild ist das jeweils zweite Si-Atom grün eingezeichnet.

a) Zeichnen Sie die Projektionen der Si-Einheitszelle entlang der [010]-, [110]-, und der [111]-Richtung; berücksichtigen Sie dabei auch die Atome der Nachbarzellen! (Hinweise: Diese Richtungen beziehen sich auf das kubische Grundgitter. „Projektion“ bedeutet, daß Sie alles, was Sie in der betreffenden Blickrichtung vom Kristall sehen, in einer Ebene zeichnen.)

Die Gitterkonstante von Silizium beträgt[1] $a = (543{,}102.051.1 \pm 0{,}000.008.9) \times 10^{-12}$ m.

b) Wieviele Si-Einheitszellen bilden einen Kubikzentimeter? Wieviele Si-Atome gehören zur Einheitszelle? Wieviele Atome besitzt ein Si-Kristall pro Kubikzentimeter? Geben Sie das Ergebnis mit Toleranz an; berücksichtigen Sie den relativen Fehler in linearer Ordnung.

Das häufigste Silizium-Isotop ist ^{28}Si mit einer relativen Atommasse[2] von $(27{,}976.926.535 \pm 0{,}000.000.003)$ u, wobei[3] 1 u = $(1{,}660.539.066.60 \pm 0{,}000.000.000.50) \times 10^{-27}$ kg.

c) Bestimmen Sie den Durchmesser einer Kugel aus (hypothetisch perfekt reinem) ^{28}Si, die eine Gesamtmasse von nahezu exakt einem Kilogramm hat. Welche Toleranz darf dabei nicht überschritten werden, um 1 kg auf 1×10^{-8} kg genau zu erhalten? Eine chemisch veränderte (oxidierte) Oberfläche soll dabei nicht betrachtet werden; berücksichtigen Sie alle relativen Fehler in linearer Ordnung. (Bemerkung: Derartige Kugeln sind zur hochpräzisen Bestimmung der Avogadro-Konstante hergestellt worden.)

Aufgabe 10: Miller-Indizes in zwei Dimensionen

Betrachten Sie ein zweidimensionales Gitter, das durch die Gittervektoren

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } \vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0{,}5 \end{pmatrix}$$

aufgespannt wird (siehe unten; der Ursprung des Koordinatensystems ist dunkel markiert).

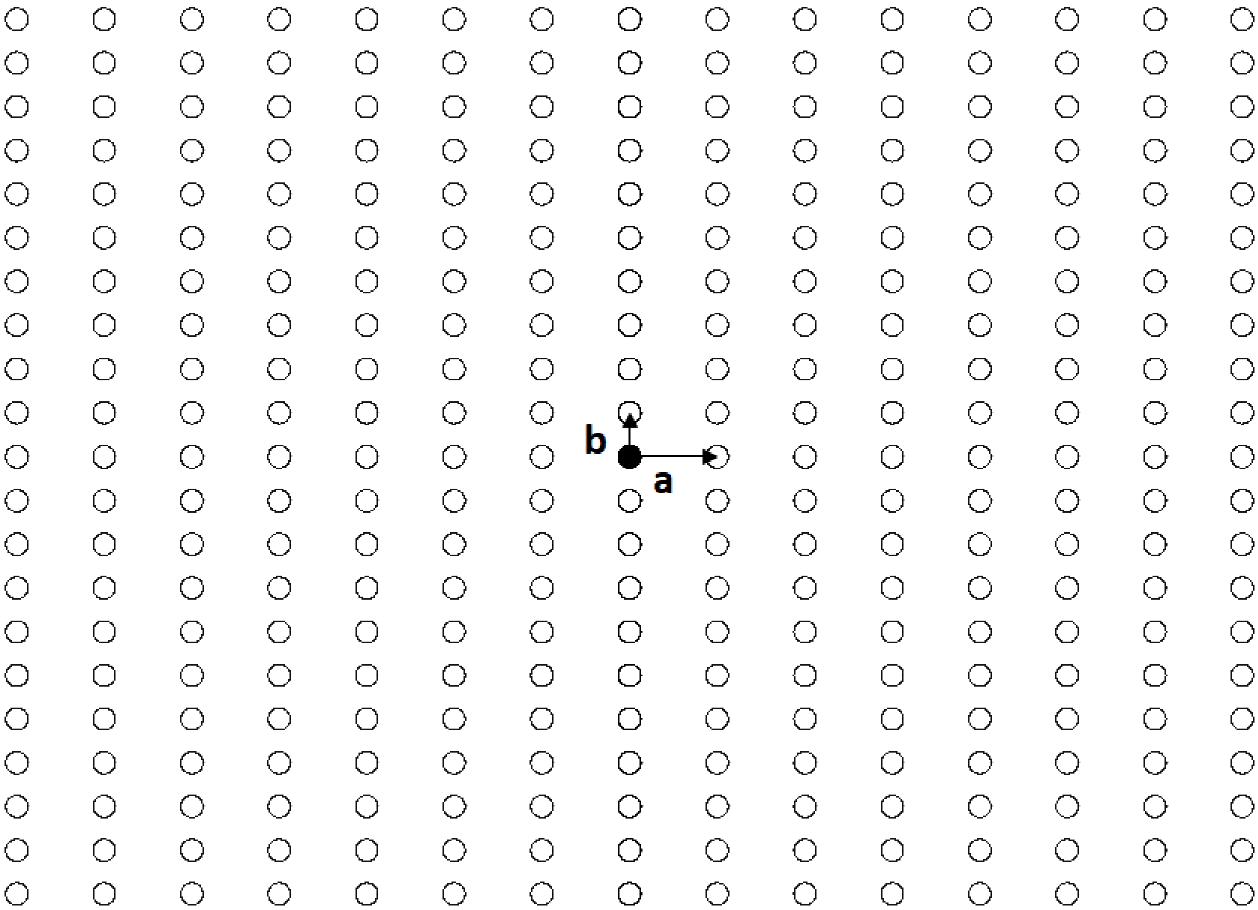
[1] Quelle: `https://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?asil`, abgerufen: Mai 2021
[2] Quelle: `https://www.internetchemie.info/chemische-elemente/silicium-isotope.php`
[3] Quelle: `https://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?u`, abgerufen: Mai 2021

a) Um welchen Gittertyp (Symmetrie) handelt es sich?

b) Geben Sie zwei weitere Paare von Vektoren an, durch die dieses Gitter ebenfalls aufgespannt wird.

c) Zeichnen Sie folgende, durch ihre Miller-Indizes gegebenen Gitter„ebenen“ (hier sind die Ebenen natürlich Geraden) in dieses Gitter ein:

$$(2\ 1), (\bar{1}\ 2), (5\ \bar{3}), (\bar{4}\ \bar{1}), (1\ 0), (2\ 0), (4\ 2)$$



Aufgabe 11: Ebenenabstand

Die Ebene $(h\,k\,l)$ liege in einem kubischen Kristallgitter.

a) Geben Sie einen Vektor an, der senkrecht auf dieser Ebene steht; zeigen Sie explizit, daß der von Ihnen angegebene Vektor tatsächlich senkrecht auf der Ebene $(h\,k\,l)$ steht. (Hinweise: Erinnern Sie sich an die in der Vorlesung erwähnte Beziehung zwischen Ebene und Richtung mit denselben Miller-Indizes in einem kubischen Kristall und verwenden Sie unmittelbar die Definition der Miller-Indizes laut Vorlesung.)

b) Bestimmen Sie den Abstand zweier **direkt** aufeinander folgender paralleler Ebenen $\{h\,k\,l\}$. [Hinweise: Verwenden Sie das Ergebnis von Aufgabenteil a) und die Hessesche Normalform der Ebenengleichung. Was können Sie der Lösung von Aufgabe 10 bezüglich des Abstands der Ebene $(h\,k\,l)$ vom Ursprung bzw. der Anzahl der Ebenen zwischen dem Ursprung und der Ebene, die man anhand der Miller-Indizes zeichnet, entnehmen?]