2. Übung zu FKP WS 2021/22

Ausgabe:18.10.2021 Prof. D. Suter
Abgabe: 25.10.2021

1: Kugelpackung im Harte-Kugel-Modell **(6 Punkte)**

Im Harte-Kugel-Modell sitzen die Atome in einem Gitter als starre, sich berührende Kugeln auf ihren Gitterplatzen. Mit dieser vereinfachenden Annahme kann man den maximalen Anteil des Zellvolumens abschätzen, der von den Atomen beansprucht werden kann. Berechnen Sie diesen maximalen Anteil für

- **(a)** ein einfach kubisches Gitter (sc),
- **(b)** ein kubisch raumzentriertes Gitter (bcc),
- **(c)** ein kubisch flächenzentriertes Gitter (fcc).

Geben Sie für alle drei Strukturen explizit die Zahl der nächsten Nachbarn, die Zahl der Gitterpunkte im Einheitsvolumen a^3 und den Abstand d der nächsten Nachbarn in Einheiten des Gittervektors $|\vec{\mathrm{a}}|$ an.

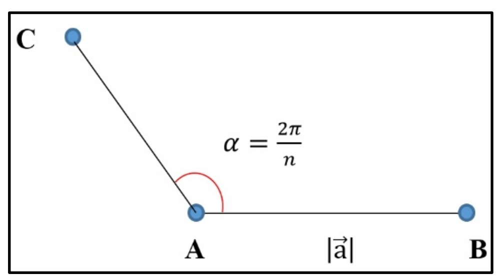
2. Kristallstrukturen **(6 Punkte)**

(a) Berechnen Sie die GaAs Gitterkonstante, also die Länge der (nichtprimitiven) kubischen Einheitszelle. Benutzen Sie hierfür die Dichte $\rho = 5{,}32\ \frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^3}$ und die Atommassen: $\mathrm{A_{Ga}} = 69{,}73u$, $\mathrm{A_{As}} = 74{,}92u$.

(b) Ein Natriumkristall liegt bei Raumtemperatur in einem bcc - Gitter mit einatomiger Basis und einer Gitterkonstante $\mathrm{a}_{bcc} = 0{,}423\ \mathrm{nm}$ vor. Bei einer Temperatur von etwa $23\ \mathrm{K}$ gibt es einen strukturellen Phasenübergang und es bildet sich eine Tieftemperaturphase mit einer hcp - Struktur (hexagonal closed pack). Berechnen Sie die Gitterkonstanten a und c der hcp - Struktur unter der Annahme, dass sich die Dichte nicht ändert. Nehmen Sie weiter an, dass die hcp - Struktur durch das Längenverhältnis $\mathrm{c/a} = \sqrt{8/3} \approx 1{,}633$ wie im Fall einer dichten Kugelpackung gekennzeichnet ist.

3. $\boldsymbol{n}$-zählige Rotationssymmetrie **(6 Punkte)**

Es gibt nur begrenzt viele rotationssymmetrische Formen, mit denen man eine Ebene lückenlos füllen kann. Diese Aussage ist gleichbedeutend damit, dass n-zählige Rotationsachsen, also Rotationswinkel $\alpha = \frac{2\pi}{n}$, nur für bestimmte n; $n \in \mathbb{N}$ existieren. Zeigen Sie dies, indem Sie die Translationsvektoren $\vec{\mathrm{a}}_+$ und $\vec{\mathrm{a}}_-$ berechnen, die durch Drehung um $\alpha = \pm\frac{2\pi}{n}$ aus einem Translationsvektor $\vec{\mathrm{a}}$ hervorgehen (siehe die Abbildung).



Warum muss die Summe $\vec{\mathrm{a}}_+ + \vec{\mathrm{a}}_-$ ein ganzzahliges Vielfaches von $\vec{\mathrm{a}}$ sein? Welche n sind damit erlaubt?