

3. Übung (Abgabe Di. 14. November zu Beginn der Übung bzw. Vorlesung)

9. Primitive Gittervektoren

- (a) Bestimmen Sie die primitiven Gittervektoren für die fcc- (face-centered cubic = kubisch flächenzentriert) und bcc-Struktur (body-centered cubic = kubisch raumzentriert). Wie groß sind die primitiven Einheitszellen im Vergleich zum Volumen der kubischen Einheitszelle?
- (b) Wie groß ist die Anzahl der übernächsten Nachbarn in beiden Gittern?

(2 Punkte)

10. Wigner-Seitz-Zelle

Zeichnen Sie jeweils die Wigner-Seitz-Zelle für die fünf zweidimensionalen Bravais-Gitter.

(2 Punkte)

11. Miller Indizes

- (a) Zeichnen Sie die Ebenen $(1\ 2\ 1)$, $(1\ \bar{1}\ 1)$, $(0\ \bar{2}\ \bar{1})$ und $(\bar{1}\ 0\ 1)$ im einfach kubischen sowie im hexagonalen System ein.
- (b) Bestimmen Sie von der (100) - und der $(0\ \bar{2}\ \bar{1})$ -Ebene des fcc-Gitters die Miller-Indizes bezogen auf das Koordinatensystem der primitiven Elementarzelle des fcc-Gitters.

(2 Punkte)

12. Raumfüllung

Berechnen Sie die Raumfüllung der hexagonal und der kubisch dichtesten Kugelpackung sowie der Diamantstruktur. Betrachten Sie dazu die Atome als sich berührende, harte Kugeln und bestimmen Sie, welches Volumen in % sie einnehmen bezogen auf die Einheitszelle.

(3 Punkte)

13. Symmetrie von physikalischen Größen

Die dielektrische Funktion ϵ ist im Allgemeinen ein Tensor 2. Stufe, d.h. sie kann durch eine 3×3 -Matrix dargestellt werden:

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}.$$

Im Falle eines isotropen Materials reduziert sich dieser Tensor zu einem Skalar, $D_i = \sum_j \epsilon_{ij} E_j = \epsilon E_i$. Bei nicht isotropen Materialien sind die einzelnen Komponenten ϵ_{ij} durch die Symmetrie des Kristallgitters bestimmt. Dadurch reduziert sich die Anzahl unabhängiger Komponenten. Bestimmen Sie die Form von ϵ (im xyz -Koordinatensystem) im Falle eines hexagonalen Gitters, wobei die c -Achse (= 6-fache Drehachse) entlang der z -Achse sein soll.

(2 Punkte)