Heiko Dumlich 6. November 2006

2 Übungsblatt Festkörperphysik

2.1 (Gitterkonstante im Kochsalz)

Wir betrachten eine Elementarzelle von $NaCl$. Wir nutzen die Dichte, die mit $\rho = 2.167 \frac{g}{cm^3} = 2.167 \cdot 10^6 \frac{g}{m^3}$ angegeben wurde. Es gilt:

$$\rho = \frac{m}{V}, \tag{1}$$

wobei wir davon ausgehen, dass die Elementarzelle aus 4 Na und 4 Cl Ionen besteht. Es ist zu beachten, dass die Ionen auf den Ecken eines Würfels sitzen und somit nur zu $\frac{1}{8}$ zu dieser Elementarzelle gehören und noch in 7 anderen Elementarzellen liegen. Da jedoch 8 Ionen pro Elementarzelle $\frac{1}{8}$ dieser angehören, kann man annehmen, dass ein Teilchen in dieser Elementarzelle sitzt. Wenn wir den Abstand zwischen zwei gleichen Ionen berechnen wollen, welcher der Gitterkonstante entspricht, müssen wir nur das Doppelte der Kantenlänge der würfelförmigen Elementarzelle berechnen. Wir wissen, dass ein Mol eine Anzahl von $N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$ Teilchen besitzt, da die Anzahl jede Elementarzelle einem Teilchen entspricht, besitzen wir dieselbe Anzahl an Elementarzellen wie Teilchen. Betrachten wir nun die molare Masse der Ionen, so folgt für Natrium $M_{Na} = 22.990 \frac{g}{mol}$ und für Chlor $M_{Cl} = 35.453 \frac{g}{mol}$. Für das Volumen der Elementarzelle gilt $V_{EZ} = r^3$. Da Natrium und Chlor je die Hälfte der Masse der Elementarzelle ausmachen, kann der Mittelwert der molaren Massen genommen werden $M_{NaCl} = \frac{22.990+35.453}{2} \frac{g}{mol} = 29.222 \frac{g}{mol}$. Um das Volumen einer Elementarzelle zu bestimmen, teilen wir das Gesamtvolumen in $V = N_A \cdot V_{EZ}$, auf, wobei V_{EZ} dem Volumen der Elementarzelle entspricht und wir N_A Elementarzellen besitzen. Somit folgt

$$N_A \cdot V_{EZ} = \frac{M_{NaCl}}{\rho} \Leftrightarrow r_{EZ}^3 = \frac{M_{NaCl}}{\rho N_A},$$

$$d = 2r = 2 \cdot \sqrt[3]{\frac{M}{\rho N_A}}.$$

Nun können wir die Werte einsetzen und finden:

$$d = 2 \cdot \sqrt[3]{\frac{29.222}{2.167 \cdot 10^6 \frac{1}{\mathrm{m}^3} \cdot 6.022 \cdot 10^{23}}} = 2 \cdot \sqrt[3]{2.239 \cdot 10^{-29}}\mathrm{m} = 2 \cdot 2.819 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} = 563.8\,\mathrm{pm}$$

Als Literaturwert finden wir $d = 5.64\,\text{Å} = 564.02\,\mathrm{pm}$, somit stimmt der berechnete Wert gut mit dem Literaturwert überein.

2.2 (Symmetrieoperation im Raum)

Wir betrachten die Operationen Drehung, Inversion und Spiegelung als 3x3-Matrizen. Zuerst die Drehmatrix um die z-Achse:

$$C_{360} = 360 = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Nun die Spiegelung:

$$m\,(\bar{2}) = \sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

und zuletzt die Inversion:

$$i = \bar{1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Es ist zu zeigen, dass die Drehinversion $\bar{6}$ identisch mit der Drehspiegelung S_3 ist. Hierzu berechnen wir beide Symmetrieoperationen und vergleichen danach:

$$\bar{6} = 6 \cdot \bar{1} = \begin{pmatrix} \cos 60° & -\sin 60° & 0 \\ \sin 60° & \cos 60° & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$S_3 = C_3 \cdot \sigma = \begin{pmatrix} \cos(-120°) & -\sin(-120°) & 0 \\ \sin(-120°) & \cos(-120°) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Wenn man nicht in $-120°$ Richtung drehen möchte kann man alternativ auch die Spiegelachse:

$$m\,(\bar{2}) = \sigma = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

wählen, somit ergibt sich:

$$S_3 = C_3 \cdot \sigma = \begin{pmatrix} \cos 120° & -\sin 120° & 0 \\ \sin 120° & \cos 120° & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Dies zeigt also die Symmetrie der Drehinversion und Drehspiegelung.

2.3 (Punktsymmetrie im Bravais-Gitter)

Die Symmetrieoperationen die die fcc-Struktur in sich selber überführen sind:

$$3 \cdot (4, C_4)$$

$$4 \cdot (3, C_3)$$

$$3 \cdot (m, \sigma) = 3 \cdot (\bar{2}; 2, S_2)$$

$$6 \cdot (m, \sigma) = 6 \cdot (\bar{2}; 2, S_2)$$

$$1 \cdot (\bar{1}, i)$$

$$(1, C_1 = E)$$

$$3 \cdot (\bar{4}, S_4)$$

Die Bilder sind im Anhang zu finden.

2.4 (Bravais-Gitter in drei Dimensionen)

(a)

Die Bedingung eines Bravais-Gitters ist, dass die periodische Anordnung von Punkten im Raum so ist, dass das Translationsgitter von jedem Punkt aus betrachtet exakt gleich aussieht. Dies kann nicht erreicht werden, wenn eine Struktur gleichzeitig kubisch flächen- und raumzentriert sein soll. Die Koordinationszahl der kubisch raumzentrierten Struktur beträgt KZ=8 und die der kubisch flächenzentrierten Struktur KZ=6. Dies zeigt das eine Basis nicht gefunden werden kann und zudem die Gitter nicht von jedem Punkt gleich aussehen können.

(b)

siehe Anhang