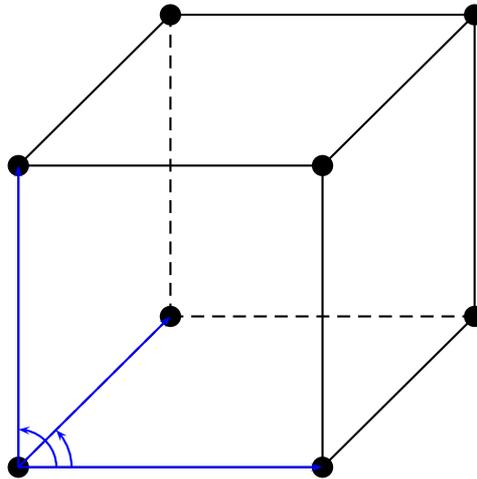


3 Übungsblatt Festkörperphysik

3.1 (Primitive Gittervektoren)

(a)



cubic

Das Volumen für die kubische Einheitszelle lässt sich mit den Vektoren:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

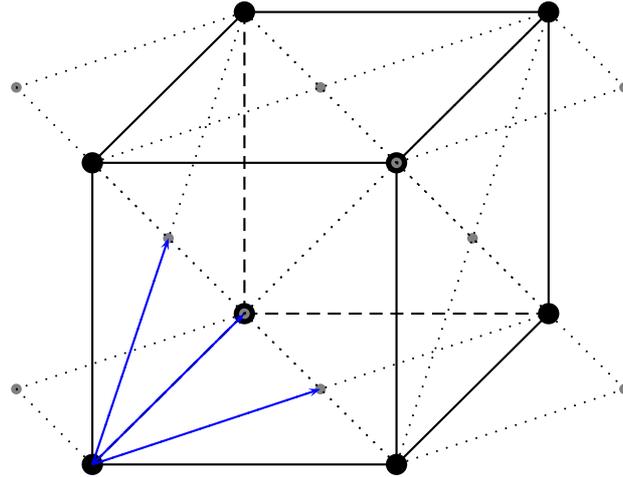
mit Hilfe des Spatproduktes berechnen:

$$V_{kubisch} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = \left| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \right| = \left| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot (1, 0, 0) \right| = 1,$$

wobei für die Beträge der Vektoren:

$$a_1 = 1, a_2 = 1, a_3 = 1,$$

gilt.



face – centered cubic

Die primitiven Gittervektoren der fcc-Struktur sind von folgender Form:

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

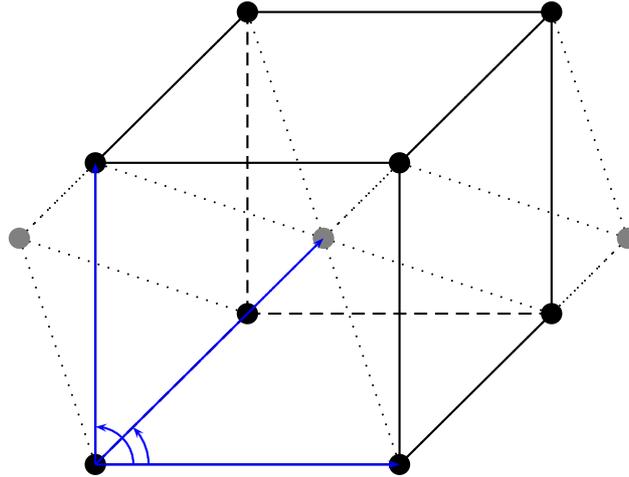
für die Beträge folgt somit:

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

hieraus ergibt sich mit dem Spatprodukt ein Volumen von:

$$V_{fcc} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = \left| \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \right| = \left| \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \right| = \frac{2}{8} = \frac{1}{4}.$$

Im Vergleich zur kubischen Einheitszelle beträgt das Volumen ein Viertel.



body – centered cubic

Die primitiven Gittervektoren der bcc-Struktur sind von folgender Form:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

für die Beträge folgt somit:

$$a_1 = 1, \quad a_2 = 1.5, \quad a_3 = 1,$$

hieraus ergibt sich mit dem Spatprodukt ein Volumen von:

$$V_{bcc} = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = \left| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \right| = \left| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} (1, 0, -1) \right| = \frac{1}{2}.$$

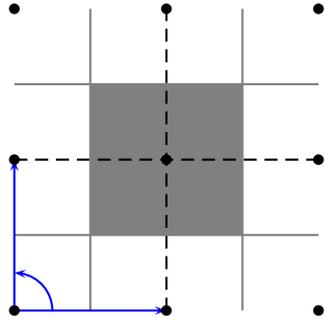
Somit ergibt sich auch für die bcc-Struktur, dass das Volumen ihrer primitiven Einheitszelle der Hälfte des Volumens der kubischen Einheitszelle entspricht.

(b)

Wir können aus den oberen Skizze erkennen (mit ein wenig Vorstellungskraft noch ein paar Kügelchen einbilden), dass sich für die fcc-Struktur 6 übernächste Nachbarn und für die bcc-Struktur auch 6 übernächste Nachbarn ergeben, dies entspricht den direkten Nachbarn der primitiven kubischen Elementarzelle.

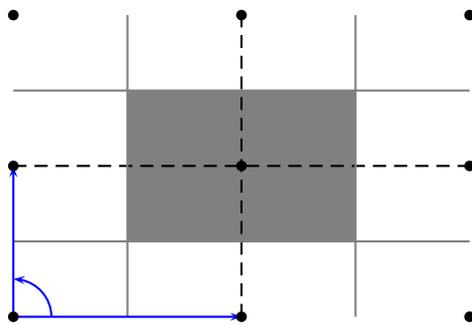
3.2 (Wigner-Seitz-Zelle)

Wir betrachten die Wigner-Seitz-Zellen für die zweidimensionalen Bravais-Gitter.



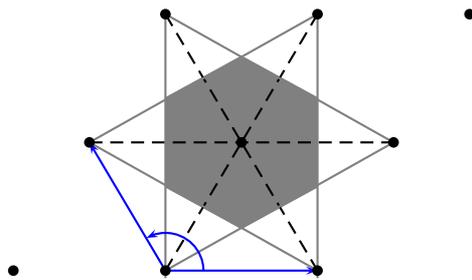
Quadratgitter

allgemein: $a_1 = a_2$; $\varphi = 90^\circ$



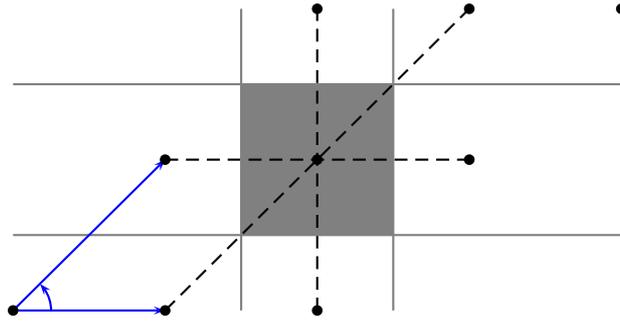
Rechteckgitter

allgemein: $a_1 \neq a_2$; $\varphi = 90^\circ$ hier: $a_1 = 2a_2$; $\varphi = 90^\circ$



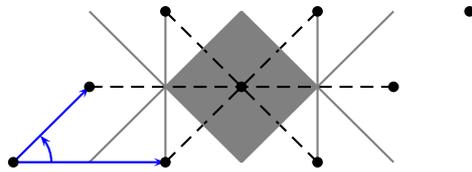
hexagonales Gitter

allgemein: $a_1 = a_2$; $\varphi = 120^\circ$



Parallelogramm Gitter

allgemein: $a_1 \neq a_2$; $\varphi \neq 90^\circ$ hier: $\sqrt{2}a_1 = a_2$; $\varphi = 45^\circ$

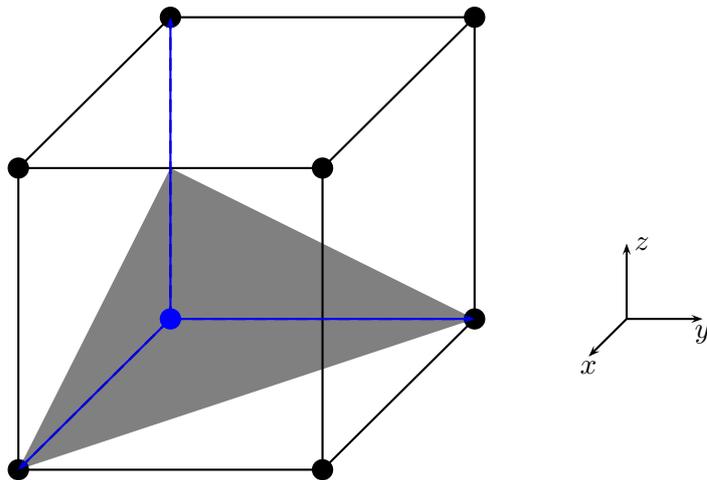


zentriertes Rechteckgitter

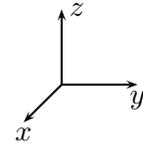
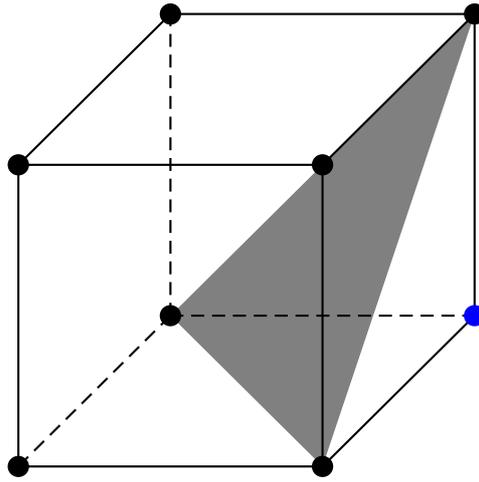
allgemein: $a_1 \neq a_2$; $\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = \frac{a_1^2}{2}$ hier: $\frac{\sqrt{2}}{2}a_1 = a_2$; $\varphi = 45^\circ$

3.3 (Miller Indizes)

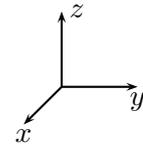
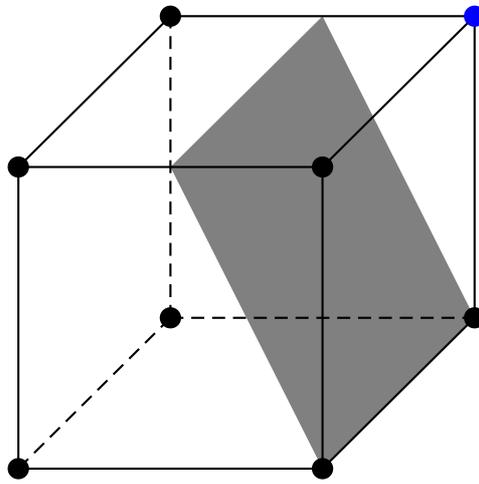
(a)



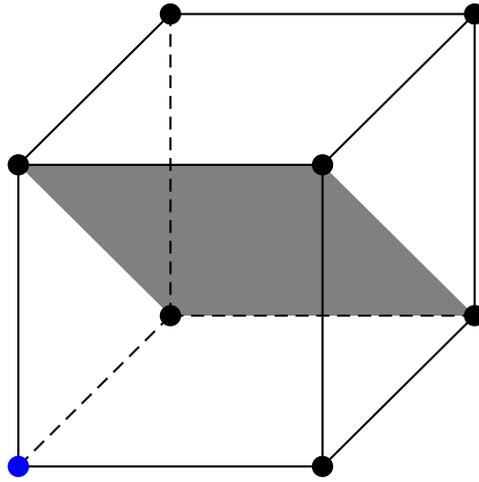
(121)



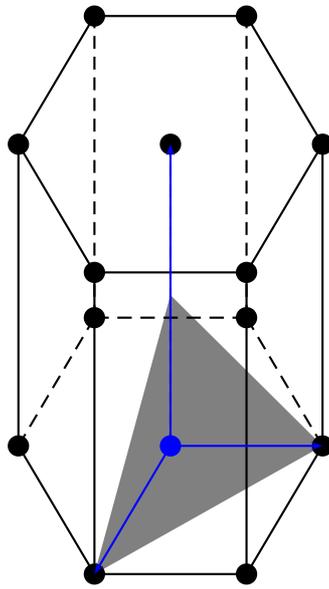
$(\bar{1}\bar{1}1)$



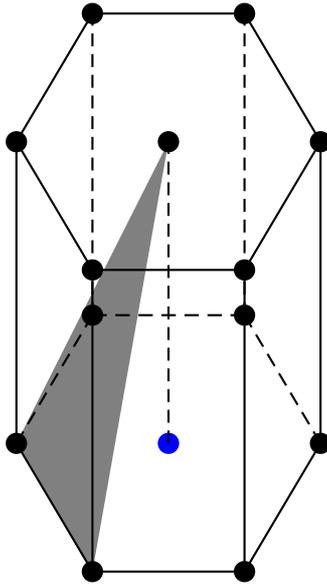
$(0\bar{2}\bar{1})$



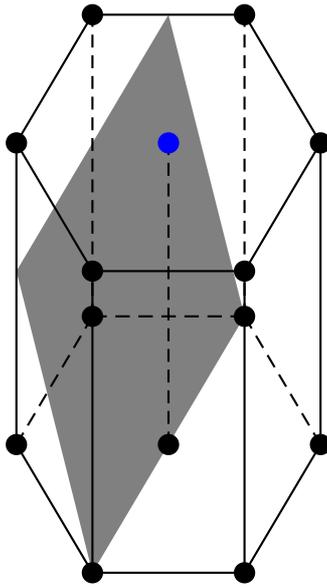
($\bar{1}01$)



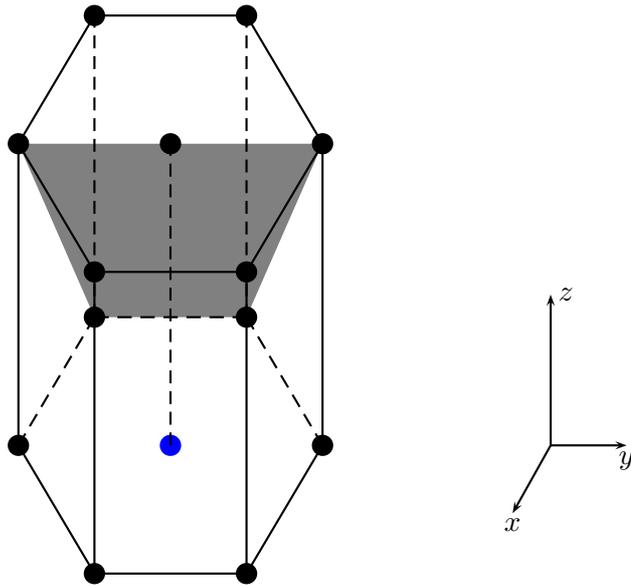
(121)



$(\bar{1}\bar{1}1)$



$(0\bar{2}\bar{1})$



($\bar{1}01$)

(b)

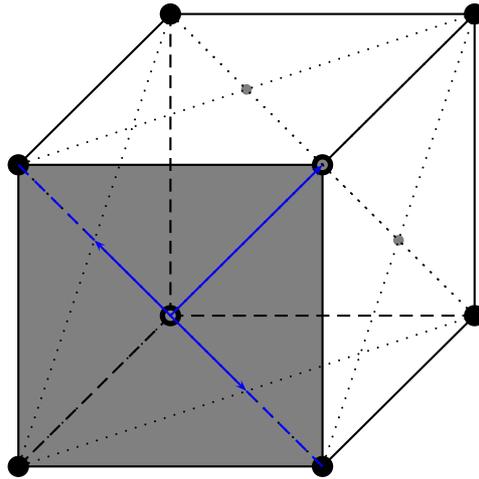
Wir betrachten die (100) – und $(0\bar{2}\bar{1})$ –Ebenen des fcc-Gitters, es sind die Miller-Indizes bezogen auf die primitive Elementarzelle des fcc-Gitters zu bestimmen. Für die primitiven Gittervektoren ergibt sich somit:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \vec{a}_{1,fcc} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{a}_{2,fcc} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_{3,fcc} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

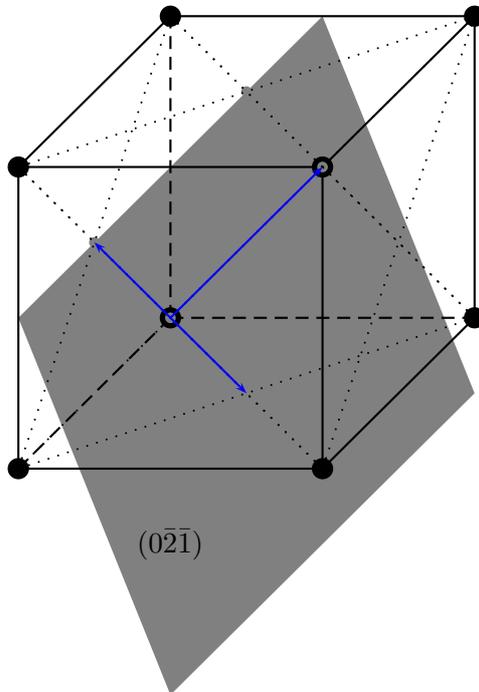
Die Basistransformation liefert somit eine Transformationsmatrix:

$$T_{fcc} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Somit folgt für die Ebenen $(100) \rightarrow (110)$, aus den Schnittpunkten $(22\infty) \rightarrow (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0) \rightarrow (110)$ und $(0\bar{2}\bar{1}) \rightarrow (0\bar{1}\bar{2})$. Dies kann man schnell erkennen, wenn man die folgende Skizze betrachtet:



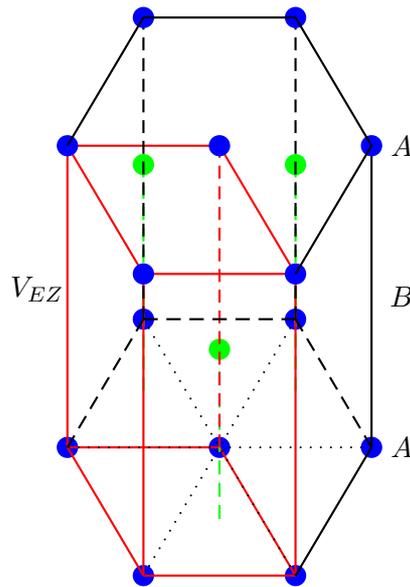
$(100) \rightarrow (110)$



3.4 (Raumfüllung)

Wir betrachten die Raumfüllung der dichtesten Kugelpackung, hierzu betrachten wir die Elementarzelle und berechnen die Packung dieser.

Für die hexagonal dichteste Kugelpackung folgt, wenn wir die folgende Skizze betrachten, wobei wir eine ABAB... Struktur besitzen, dass die hexagonale Struktur erhalten wird:



hcp

Für das Volumen der Elementarzelle erhalten wir (die Grundfläche entspricht einem Rhombus/Raute): $V_{EZ,hcp} = a^2 \sin \varphi c = \frac{a^2}{2} \sqrt{3} c$. Für das Verhältnis von a zu c folgt im idealen Fall: $\frac{c}{a} = 1.633$. Somit folgt also für $a = 1$ ein Volumen von:

$$V_{EZ,hcp} = 1.414.$$

Wir erhalten, da in 2D der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten $d = a_1 = a_2 = a$ beträgt einen maximalen Radius von der Hälfte des Abstandes, womit sich ein Radius von $r_{hcp} = \frac{a}{2}$ ergibt.

Wir besitzen pro Elementarzelle $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot 1 = 2$ Atome, wobei die 8 Atome in den Ecken der Elementarzelle sitzen und von der A Schicht stammen, während das in der Mitte sitzende Atome aus der B Lage stammt. Somit folgt, also für das Volumen das die Kugeln einnehmen:

$$V_K = \frac{4}{3} \pi r_{hcp}^3 = 0.524.$$

Für das Gesamte Volumen das die Kugeln einnehmen folgt somit:

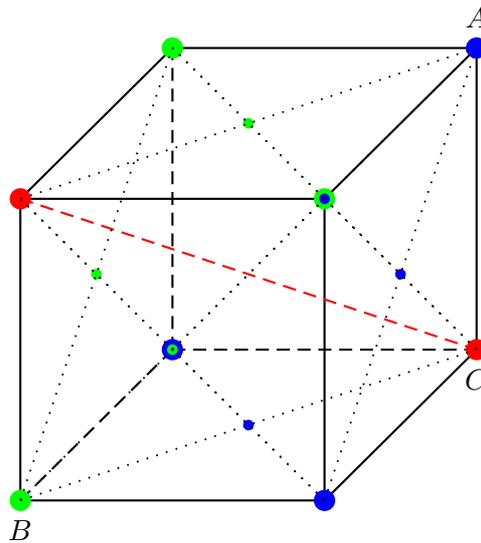
$$V_{hcp} = 2V_K = 1.047.$$

Damit erhalten wir eine Raumfüllung von:

$$\frac{V_{hcp}}{V_{EZ,hcp}} = 0.74.$$

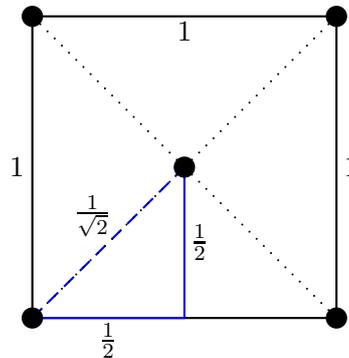
Dies entspricht einer Raumfüllung von 74%.

Als zweites betrachten wir die kubisch dichteste Kugelpackung, wobei sich für die ABCABC... Struktur die *fcc* Struktur ergibt, wie man auf der Skizze erkennen kann:



face – centered cubic

Betrachten wir nun, um den maximalen Radius der angenommenen Kugeln zu bestimmen eine 2D Skizze:



2D face – centered cubic

Da der Abstand zwischen den zwei nächsten Kugeln $d = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ist, kann jede identische Kugel maximal den halben Abstand als Radius haben. Somit ergibt sich ein Kugelradius von $r_{fcc} = \frac{1}{2\sqrt{2}}$.

Es ergibt sich für die kubisch dichteste Kugelpackung mit einem Kugelradius von $r_{fcc} = \frac{1}{2\sqrt{2}}$ und einer Anzahl von 4 Kugeln in der Elementarzelle:

$$V_K = \frac{4}{3}\pi r_{fcc}^3 = 0.185.$$

Somit folgt für das gesamte Volumen, dass die Kugeln ausfüllen:

$$V_{fcc} = 4 \cdot 0.185 = 0.74.$$

Bezogen auf die Einheits-elementarzelle mit der Seitenlänge 1 folgt somit für die Raumerfüllung, die das Verhältnis zwischen Gesamtvolumen und durch die Kugeln ausgefülltes Volumen beschreibt:

$$\frac{V_{fcc}}{V_{EZ}} = \frac{0.74}{1} = 0.74.$$

Dies entspricht einer Raumfüllung von 74%. Somit sind die hexagonal und kubisch dichteste Kugelpackung von der Raumfüllung identisch.

Betrachten wir nun zuletzt die Raumfüllung der Diamantstruktur.

Die Elementarzelle der Diamantstruktur besitzt 8 Atome ($8 \cdot \frac{1}{8}$ Ecken, $6 \cdot \frac{1}{2}$ Kanten, $4 \cdot 1$ Volle Atome $\rightarrow 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} + 4 \cdot 1 = 8$). Für den Abstand zwischen zwei Atomen folgt, da wir zwei ineinander geschobene *fcc*-Gitter haben, wobei eine Verschiebung von $\frac{1}{4}$ auf der Raumdiagonale gegeben ist (somit folgt als Zwischenwert $d_{xy} = \sqrt{\left(\frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{8}}$, somit ergibt sich als gesamter Abstand $d_{xyz} = \sqrt{\left(\sqrt{\frac{1}{8}}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2} = \sqrt{\frac{3}{16}}$: $d = \sqrt{\frac{3}{16}}$, somit folgt ein maximaler Radius von der Hälfte also $r_C = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{16}}$. Für die Kugeln folgt somit ein Volumen von:

$$V_C = \frac{4}{3}\pi r_C^3 = 0.0425.$$

Die Multiplikation von 8 liefert das gesamte ausgefüllte Volumen durch die Kugeln:

$$8 \cdot V_C = 0.34.$$

Da wir die Einheitszelle betrachten, welche ein Volumen von eins liefert, bringt der Vergleich:

$$\frac{V_C}{V_{EZ}} = 0.34.$$

Für die Diamantstruktur ergibt sich eine Raumfüllung von 34%, somit ist sie viel geringer als die vorher bestimmten Raumfüllungen.

3.5 (Symmetrie von physikalischen Größen)

Wir betrachten die dielektrische Funktion ε für den Fall eines hexagonalen Gitters, wobei allgemein für ε gilt:

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

Wir betrachten den Fall, dass wir die Drehachse entlang der z -Achse legen, wobei die Drehachse 6-zählig ist, da wir eine hexagonale Gitterstruktur betrachten, womit wir jede 60° dieselbe Struktur erhalten können. Wir betrachten den Kommutator von ε und der Drehmatrix R :

$$[\varepsilon, R] = 0$$

Diese muss verschwinden, da die dielektrische Funktion invariant zur Drehung sein sollte. Somit können wir ε bestimmen:

$$[\varepsilon, R] = \varepsilon R - R\varepsilon = 0,$$

hieraus folgt mit:

$$\varepsilon R = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos 60^\circ & -\sin 60^\circ & 0 \\ \sin 60^\circ & \cos 60^\circ & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xy} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \frac{1}{2}\varepsilon_{yx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yy} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \frac{1}{2}\varepsilon_{zx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{zy} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{zx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix},$$

$$R\varepsilon = \begin{pmatrix} \cos 60^\circ & -\sin 60^\circ & 0 \\ \sin 60^\circ & \cos 60^\circ & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\varepsilon_{xx} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yx} & \frac{1}{2}\varepsilon_{xy} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yy} & \frac{1}{2}\varepsilon_{xz} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yz} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yx} & \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xy} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yy} & \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xz} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xy} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \frac{1}{2}\varepsilon_{yx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yy} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \frac{1}{2}\varepsilon_{zx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{zy} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{zx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\varepsilon_{xx} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yx} & \frac{1}{2}\varepsilon_{xy} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yy} & \frac{1}{2}\varepsilon_{xz} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yz} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yx} & \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xy} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yy} & \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xz} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xy} - \left(\frac{1}{2}\varepsilon_{xx} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yx}\right) & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{xy} - \left(\frac{1}{2}\varepsilon_{xy} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yy}\right) & \varepsilon_{xz} - \left(\frac{1}{2}\varepsilon_{xz} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yz}\right) \\ \frac{1}{2}\varepsilon_{yx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yy} - \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yx}\right) & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yy} - \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xy} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yy}\right) & \varepsilon_{yz} - \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xz} + \frac{1}{2}\varepsilon_{yz}\right) \\ \frac{1}{2}\varepsilon_{zx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{zy} - \varepsilon_{zx} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{zx} + \frac{1}{2}\varepsilon_{zy} - \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} - \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2}(\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}) & \frac{\sqrt{3}}{2}(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{xx}) & \frac{1}{2}\varepsilon_{xz} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{yz} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}(\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{xx}) & -\frac{\sqrt{3}}{2}(\varepsilon_{yx} + \varepsilon_{xy}) & \frac{1}{2}\varepsilon_{yz} - \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{xz} \\ -\frac{1}{2}\varepsilon_{zx} + \frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{zy} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{zx} - \frac{1}{2}\varepsilon_{zy} & 0 \end{pmatrix} = 0$$

Hm, alternativ kann ich noch das anbieten:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \cos 60^\circ & -\varepsilon_{xy} \sin 60^\circ & 0 \\ \varepsilon_{yx} \sin 60^\circ & \varepsilon_{yy} \cos 60^\circ & 0 \\ 0 & 0 & 1 \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & -\sqrt{3}\varepsilon_{xy} & 0 \\ \sqrt{3}\varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 2\varepsilon_{zz} \end{pmatrix}.$$