

3. Übung zu FKP WS 2021/22

Ausgabe: 25.10.2021

Prof. D. Suter

Abgabe: 01.11.2021

1. Gitterstruktur von Graphen

(8 Punkte)

Um sich weiterhin mit Gitterstrukturen bekannt zu machen, soll Graphen näher untersucht werden. Abbildung 1 zeigt schematisch die zweidimensionale Kohlenstoffstruktur von Graphen mit der Gitterkonstanten a . Die graue Fläche markiert die zu verwendende zweiatomige Basis.

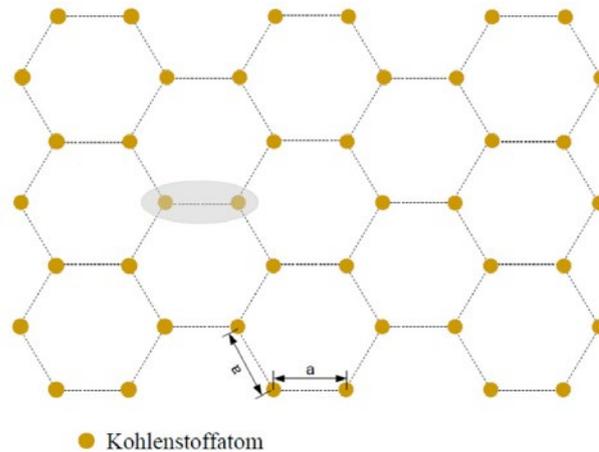


Abbildung 1: Zweidimensionale Gitterstruktur der Kohlenstoffatome von Graphen

(a) Berechnen Sie sowohl die primitiven Translationsvektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 als auch die reziproken Gittervektoren \vec{b}_1 und \vec{b}_2 des Gitters. Fertigen Sie zudem eine Skizze an, welche die berechneten Vektoren, \vec{a}_1, \vec{a}_2 und \vec{b}_1, \vec{b}_2 , in der Gitterstruktur verdeutlicht.

Tipp: Die zweidimensionalen reziproken Gittervektoren werden durch die Eigenschaften $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ bestimmt.

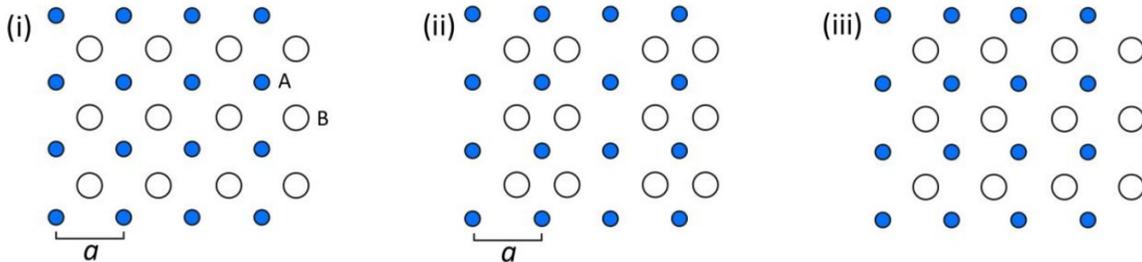
(b) Wie groß ist der „Netzebenen“-Abstand bei gegebenen Miller-Indices (h, k) ? Zeichnen Sie einige „Netzebenen“ (11) und berechnen Sie den Netzebenenabstand.

(c) Berechnen Sie ein weiteres Paar von Gittervektoren und reziproken Gittervektoren. Wie ändert sich der neue Netzebenen-Abstand der Ebenenschar (11)?

2. Zweidimensionales Gitter

(6 Punkte)

In den unten stehenden Abbildungen sind drei unterschiedliche zweidimensionale Gitter von fiktiven Ionenkristallen dargestellt. Sie bestehen aus zwei Atomsorten A (kleine dunkle Kreise) und B (große weiße Kreise) mit negativer bzw. positiver Ladung.



- (a) Welches Punktgitter beschreibt die Translationssymmetrie des abgebildeten Kristalls in (i) vollständig? Geben Sie primitive Gittervektoren an!
- (b) Geben Sie eine Basis für die Atome der Elementarzelle an!
- (c) Nehmen wir nun an, dass der Kristall eine Phasenumwandlung macht. Dabei werden die B-Atome im Zentrum benachbarter Einheitszellen spiegelsymmetrisch längs der horizontalen Achse um $\pm\delta a$ gegeneinanderverschoben, wie in Abb. (ii) gezeigt. Welche Gittersymmetrie liegt nun vor?
- (d) Geben Sie die neuen primitiven Gitter- und Basisvektoren an!
- (e) Zeichnen Sie das reziproke Gitter und die erste Brillouin-Zone für den Kristall vor und nach der Verzerrung!
- (f) Nun soll angenommen werden, dass die B-Atome in jeder der ursprünglichen Zellen um den gleichen Betrag δa verschoben werden, siehe Abb. (iii). Wie ändert sich die Translationssymmetrie gegenüber (i)?
- (g) Welche der beiden Verzerrungen (ii) und (iii) koppelt an ein elektrisches Feld?

3. Reziprokes Gitter

(3 Punkte)

- (a) Bestimmen Sie die primitiven Einheitsvektoren eines bcc- und fcc-Gitters!
- (b) Bestimmen Sie das reziproke Gitter zu einem bcc-Gitter.
- (c) Zeigen Sie, dass das reziproke Gitter des reziproken Gitters wieder das Gitter im Ortsraum ist!

4. hcp-Struktur

(2 Punkte)

Zeigen Sie, dass das Verhältnis der beiden unabhängigen Längen in der Einheitszelle, $\frac{c}{a}$, in einer hexagonal dicht-gepackten Kristallstruktur gleich $\sqrt{\frac{8}{3}}$ ist.