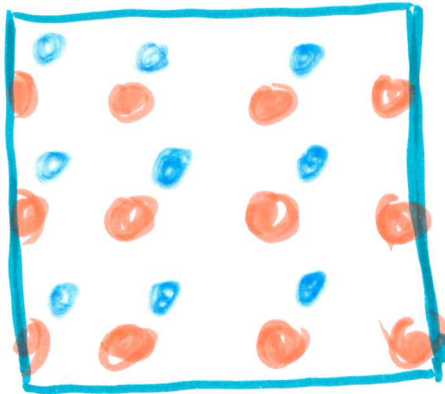


1. Kristalle in 2D

a) Anzeige



Anzeigeoptionen

- ☐ Gitter
- ☐ Kristall
- ☒ Anzahl Gitterzellen
(oder vielleicht besser Anzahl der Atome)

b) Parameterwahl:

- man kann eines der 5 Bravaisgitter wählen
- man kann die Gitterparameter a_1 (a_2) verändern
- Positionen einer max. 2 atomige Basis

über
"Gitter"
erstellbar

→ radius
→ atom # ZA

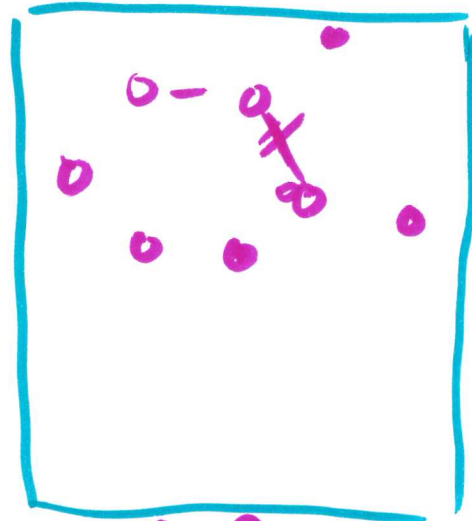
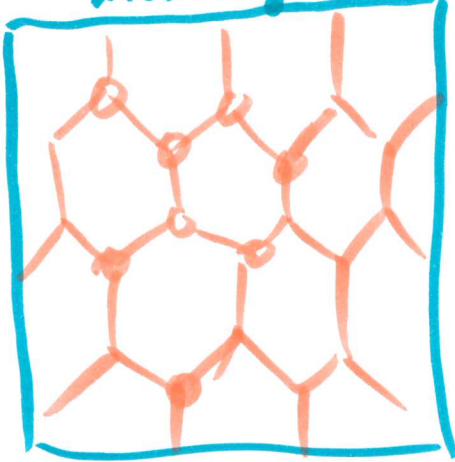
sollte man
bereits vorsehen

→ kann
man als
Farbe
kodieren!

2. Erweiterung von (1):

- Reziprokes Gitter und Röntgenstrahlung
- Baut komplett auf 1 auf!

Anzeige aus 1



h-Raum
mit Shan

h-Raum
mit
Struktur

3. Kristalle in 3D

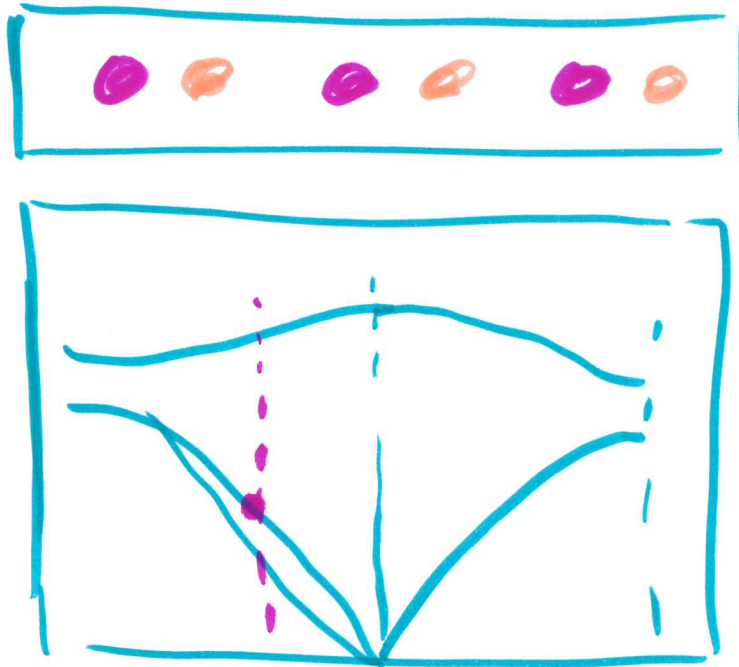
- Völlig analog zu (1) aber für 3D \Rightarrow 14 Bravaisgitter mehr Parameter für das Gitter.
- Beschränkung auf eine max. 2-achsig Basis.
- ausgefallte interaktive 3D-Anzeige

4. Miller Indizes

- Basierend auf (3) jetzt aber nur für kubische Gitter (sc, bcc & fcc)
dafür mit der Möglichkeit Miller Indizes anzugeben und Netzebenen darzustellen.

5. Phonon-Moden einer 2 atomigen Kette

a) Anzeige: linearen Kette



Animiert

- ☐ Animation Ein/Aus
- ☐ Anzahl Atome

man ~~setzt~~ kann
einen Punkt
auswählen und
die Mode
wird oben
angezeigt

b) Parametersatz:

α ... Gitterkonstante


m_1, m_2 ... Masse könnte farblich
dargestellt werden (optional nur

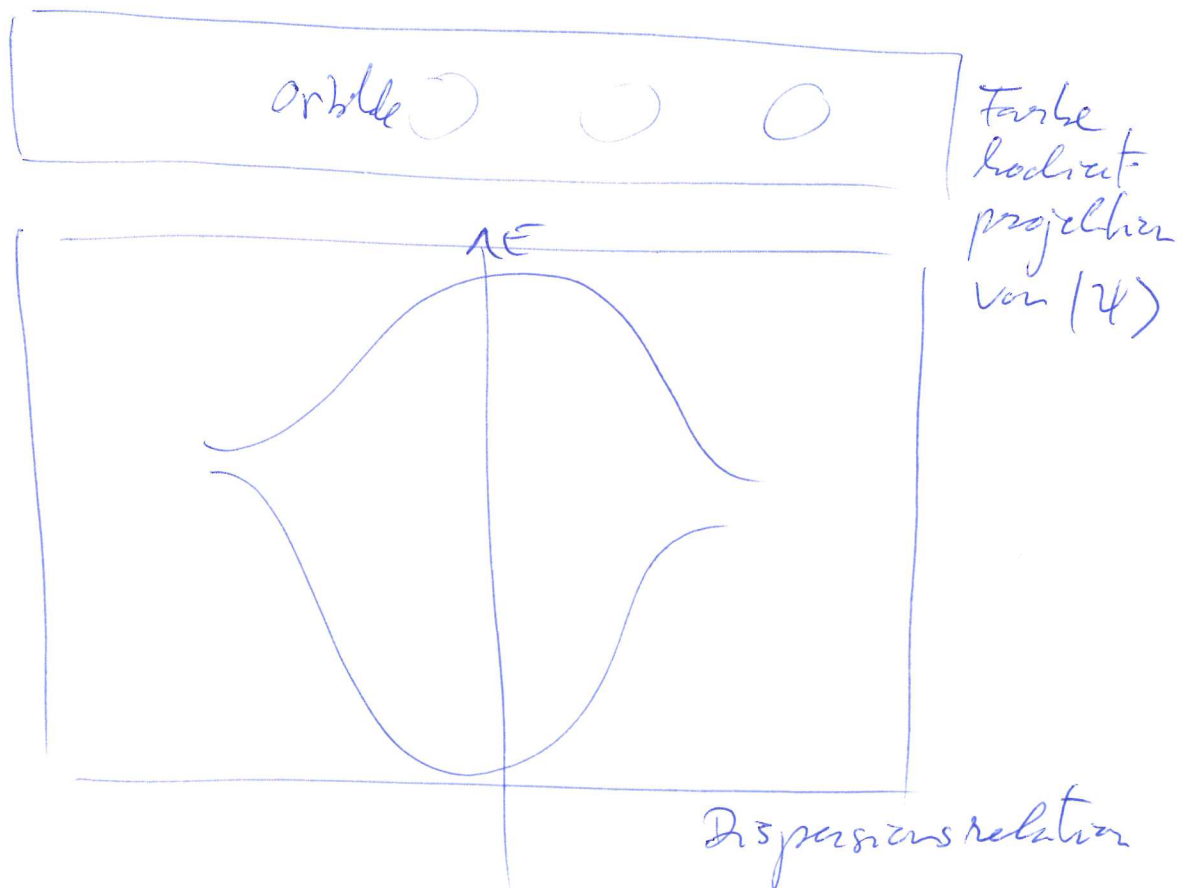
b_1, b_2

1 Atom zu
haben gilt es)

6. Tight-binding Modell

1D

- analog zu 5 
- max. 2 Orbitale ($|s\rangle$ $|p_x\rangle$) pro Einheitszelle
 $\frac{\epsilon_{p/2}}{\epsilon_{s/2}}$
 ϵ_1, ϵ_2



b) Parameter:

$$\epsilon_1, \epsilon_2$$

$$t$$

$$a$$