

Übung 6

Ausgabe: 09.12.2024 Abgabe: 16.12.2024 Besprechung: 06.01.2025

Verständnisfragen und Vorlesungswiederholung:

(keine schriftliche Beantwortung; mündliche Diskussion in der Übung)

1. Erläutern Sie die Unterschiede zwischen einer primitiven Einheitszelle, einer konventionellen Einheitszelle und der Wigner-Seitz-Zelle eines Kristallgitters!
2. Erklären Sie den Unterschied zwischen Achsensystemen und Bravaisgittern.
3. Was ist die Bedeutung der Stapelfolge in dichtesten Kugelpackungen?
4. Unterscheiden Sie Kristallbaufehler nach ihrer Dimensionalität, und geben Sie Beispiele an.
5. Was ist das reziproke Gitter?

1. Aufgabe: Verbindung mikroskopischer und makroskopischer Größen (2 P)

Berechnen Sie die Gitterkonstante der NaCl-Einheitszelle aus der Kenntnis der Gitterstruktur (s. Abb. 1), der Massendichte von Kochsalz ($\rho_{NaCl} = 2165 \text{ kg/m}^3$) und den molaren Massen der beteiligten Atome ($A_{Na} = 22,99 \text{ g/mol}$, $A_{Cl} = 35,45 \text{ g/mol}$).

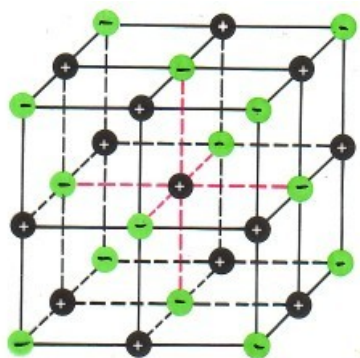
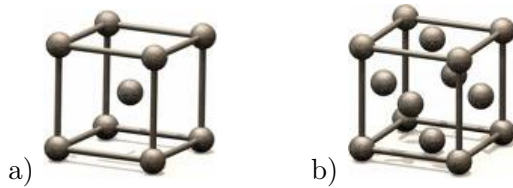


Abbildung 1: NaCl-Struktur

2. Aufgabe: Raumausfüllung in kubischen Gittern (4 P)

In Hartkugelmodellen werden die Atome näherungsweise als gleich große, sich berührende harte Kugeln behandelt. Berechnen Sie für die folgenden kubischen Kristallstrukturen jeweils die entsprechende Raumausfüllung, und geben Sie (mit Begründung) die Anzahl der Atome in der konventionellen Einheitszelle sowie die Anzahl der nächsten Nachbarn an:

- a) kubisch-raumzentriert (= bcc, body-centered cubic), (2 P)
- b) kubisch-flächenzentriert (= fcc, face-centered cubic). (2 P)



3. Aufgabe: Hexagonale Kristallstrukturen (6 P)

Viele Metalle kristallisieren aufgrund der hohen Packungsdichte in hexagonal dichtesten Kugelpackungen. Betrachten Sie einige Eigenschaften hexagonaler Strukturen:

- a) Das hexagonale Gitter wird häufig wie in Abb. 2 dargestellt. Die Achse mit der höchsten Zähligkeit wird als c -Achse bezeichnet. Zeigen Sie, dass die dargestellte Zelle bereits drei primitive Einheitszellen (PEZ) enthält und weisen Sie nach, dass durch Parallelverschiebung einer solchen PEZ das hexagonale Gitter vollständig aufgebaut werden kann. Wie groß ist das Volumen der PEZ? (2 P)
- b) Warum kann es sich bei der Zelle aus Abb. 2 grundsätzlich nicht um eine PEZ handeln? (1 P)
- c) Abb. 3 zeigt ein zugehöriges Gitter mit Basis, das durch die Stapelfolge ABABAB... von hexagonal dichtest gepackten Ebenen entsteht. Zeigen Sie durch explizite Rechnung, dass die Packungsdichte harter Kugeln in diesem Fall identisch mit der des fcc-Gitters ist! (2 P)
- d) Wie groß ist das Achsenverhältnis c/a bei einer hexagonal dichtesten Kugelpackung („ideales c/a -Verhältnis“)? (1 P)

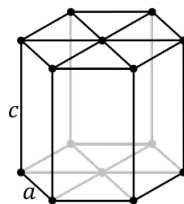


Abb. 2: Hexagonales Gitter

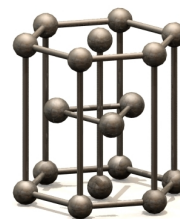


Abb. 3: Hexagonal dichteste Kugelpackung

4. Aufgabe: N-zählige Drehachsen u. Translationssymmetrie (3 P)

Symmetrioperationen bilden ein Bravais-Gitter auf sich selbst ab. Ist die Rotation um einen Winkel $\alpha = \frac{360^\circ}{n}$ eine Symmetrioperation, so spricht man von einer n -zähligen Symmetrie des Gitters. Zeigen Sie auf elementare Weise, dass nur wenige n -zählige Symmetrien verträglich mit der Forderung nach Translationssymmetrie sind. Geben Sie die zulässigen n -zähligen Symmetrien explizit an!

Anleitung: Betrachten Sie eine Gerade, auf welcher Gitterpunkte liegen. Rotiert man die Gerade um zulässige Rotationswinkel $\pm\alpha$, so müssen per Definition wieder Punkte des Gitters auf der Geraden liegen. Dies führt auf eine Bestimmungsgleichung für die mit der Translationssymmetrie des Gitters verträglichen Rotationswinkel.

5. Aufgabe: Leerstellenkonzentration in Aluminium (3 P)

Leerstellen (engl. vacancies) sind Kristallbaufehler, die auch im thermodynamischen Gleichgewicht vorhanden sind. Betrachten Sie das Metall Aluminium mit einer Schmelztemperatur von $T_M = 933$ K. Die Leerstellenkonzentration am Schmelzpunkt liegt bei $c_V = 9,0 \cdot 10^{-4}$ (d.h. auf 9 von 10.000 Gitterplätzen befindet sich eine Leerstelle). Bei Raumtemperatur (300 K) beträgt die Leerstellenkonzentration hingegen nur $c_V = 2,1 \cdot 10^{-11}$. Berechnen Sie hieraus die Bildungsenergie E_V einer Leerstelle, und geben Sie diese in eV an.

Anleitung: Beschreiben Sie die Temperaturabhängigkeit der Leerstellenkonzentration als einen einfachen thermisch aktivierten Prozess.

6. Aufgabe: Beugung mit Elektronen und Neutronen (2 P)

Strukturanalysen werden auch mit Elektronen und Neutronen durchgeführt. Um Aussagen über die Kristallstruktur zu bekommen, müssen die Wellenlängen dabei in der Größenordnung der Gitterkonstanten liegen.

- a) Bei welcher Energie beträgt die de Broglie-Wellenlänge eines Elektrons bzw. Neutrons 0,2 nm? (1 P)
- b) Bei welcher Temperatur besitzen die jeweiligen Teilchen eine entsprechende thermische Energie? (1 P)