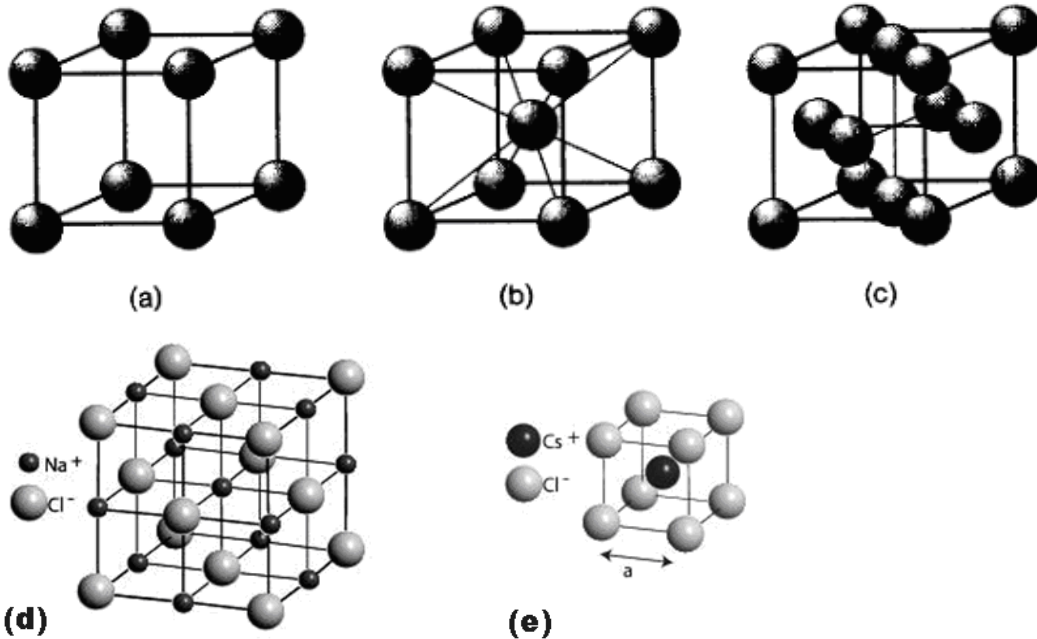


Übungen Festkörper (WS 2018/2019) (wird im Laufe des Semesters vervollständigt)

Aufgabe 0)

(a0)

Es sollen aus folgenden Einheitszellen in allen Raumrichtungen unendlich periodisch fortgesetzte Festkörper aufgebaut werden:



Geben sie an, wie viele Atome sich genau in einer solchen Einheitszelle befinden müssen, damit beim periodischen Fortsetzen, keine Atome doppelt gezählt werden!

Aufgabe 1)

(a47)

In der Abbildung sind die drei kubischen Bravais-Gitter abgebildet. Berechnen Sie die maximale Raumerfüllung, welche sich nach dem Modell harter Kugeln (die sich gerade so berühren) für diese drei Gitter ergibt.

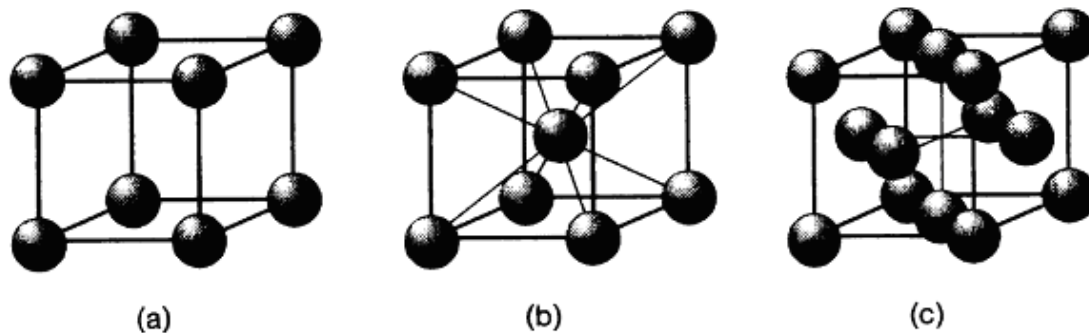


Abb. 1.1. Einheitszellen des (a) primitiv kubischen, des (b) innen-zentriert kubischen und des (c) flächenzentriert kubischen Gitters.

Aufgabe 2)**(a75)**

Wie ist der Raumfüllungsfaktor im tetragonal-primitiven Gitter mit $a=b=c/2$, wenn sich benachbarte Atome, die durch Kugeln beschrieben werden, gerade berühren?

Aufgabe 3)**(a33)**

Nehmen Sie an, dass identische Kugeln mit dem Radius R in einer hexagonal dichtesten Kugelpackung angeordnet sind. Welcher Teil des gesamten Volumens der Elementarzelle wird durch die Kugeln eingenommen?

Aufgabe 4)**(a5)**

Geben Sie für einen Eisenkristall (kubisch-raumzentriert, $a = 2.87 \text{ \AA}$) die Anzahl und Abstände der nächsten bis viertnächsten Nachbarn an.

Aufgabe 5)**(a1)**

Berechnen Sie die Gitterkonstanten der folgenden Metalle:

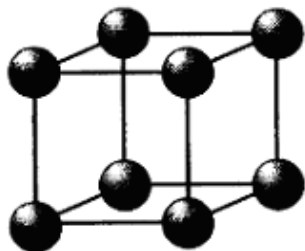
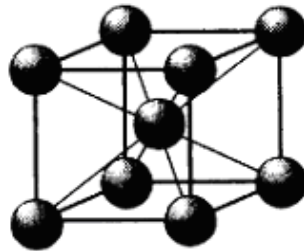
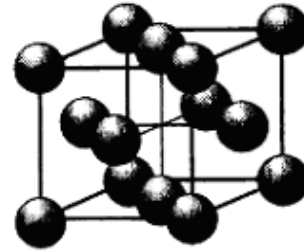
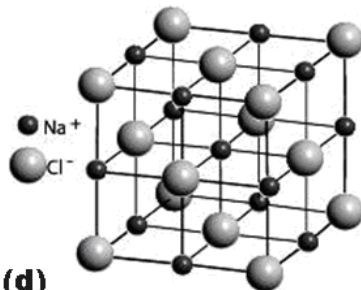
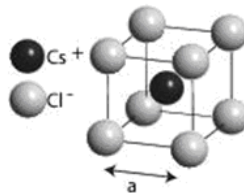
(a) Eisen (kubisch-raumzentriert; $7,874 \text{ g/cm}^3$)

(b) Nickel (kubisch-flächenzentriert; $8,908 \text{ g/cm}^3$)

(Massszahlen: Fe = 55.85, Ni=58,71)

Aufgabe 6)**(a0)**

Es sollen aus folgenden Einheitszellen in allen Raumrichtungen unendlich periodisch fortgesetzte Festkörper aufgebaut werden:

**(a)****(b)****(c)****(d)****(e)**

Geben sie an, wie viele Atome sich genau in **primitiven** Einheitszelle befinden müssen, damit beim periodischen Fortsetzen, keine Atome doppelt gezählt werden! Welche Form und welche Gittervektoren hat die primitive Elementarzelle?

Aufgabe 7)**(a42)**

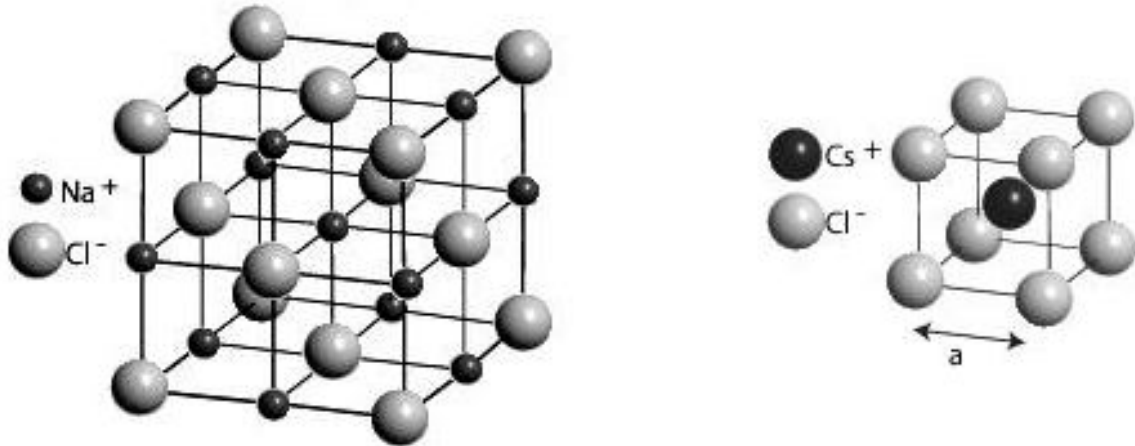
Das Bravais-Gitter von NaCl ist kubisch flächenzentriert (fcc) mit einer Basis bestehend aus einem Natrium-Ion bei 0 und einem Chlorid-Ion im Zentrum der (konventionellen) kubischen Elementarzelle (2-atomige Basis). Die kubische Zelle wird durch die Vektoren $a = (a,0,0)$; $b = (0,a,0)$; $c = (0,0,a)$ aufgespannt mit $a = 5.64 \text{ \AA}$.

a) Wieviele Na^+ und Cl^- Ionen sind in der kubischen Elementarzelle enthalten? Finden Sie die Lage dieser Ionen im System xyz.

b) Finden Sie die Elementarzelle mit dem kleinsten Volumen (d. h. die primitive Einheitszelle), mit der an durch Translationen entlang der Gittervektoren die NaCl-Struktur konstruieren kann. Bestimmen Sie das Vektortripel, das diese Zelle aufspannt, die Lage aller Ionen in der Zelle und berechnen Sie das Volumen der Einheitszelle. Machen Sie eine Skizze!

Aufgabe 8)**(a34)**

Wichtige Ionenkristall-Strukturen sind die NaCl- und die CsCl-Struktur (siehe Abbildung)



a) Beschreiben Sie die Unterschiede der Atomanordnungen in beiden Verbindungen benennen Sie die Gittertypen.

b) Wovon hängt es ab, in welcher Struktur ein ionischer Festkörper kristallisiert; wann tritt die NaCl-, wann die CsCl-Struktur auf?

Aufgabe 9)**(a35)**

Berechnen Sie, bei welchen Verhältnissen der Radien der beteiligten Atome r_1/r_2 die NaCl bzw. die CsCl Struktur zur dichteren Packung führt.

Aufgabe 10)**(a12)**

a) Welche Spiegelebenen existieren in einem einfach-kubischen Gitter?

b) In welchen der Richtungen $[100]$, $[110]$ und $[111]$ liegen Drehachsen des einfach-kubischen Gitters? Wie hoch ist jeweils ihre Zähligkeit? Wie hoch ist jeweils die Zahl äquivalenter Achsen?

Aufgabe 11)**(a11)**

Geben Sie die **primitive** Elementarzelle sowie die Chemische Formel für die folgenden periodisch angeordneten linearen Ketten an:

- a) ...-A-B-C-A-B-C-A-B-C-A...
- b) ...-A-B-C-B-A-B-C-B-A-B-...
- c) ...-A-B-C-C-B-A-B-C-C-B-...
- d) ...-A-B-C-C-B-A-A-B-C-C-...

Fassen Sie A, B und C als dichtgepackte farbige Kugeln mit identischem Durchmesser d auf. Wie groß sind die Gitterkonstanten für die 4 Strukturen? Welche der Strukturen besitzen Inversionszentren und wo liegen diese?

Aufgabe 12)**(a2)**

Gegeben ist eine zweidimensionale Kristallstruktur, deren Atome auf den Ecken eines Honigwabengitters liegen.

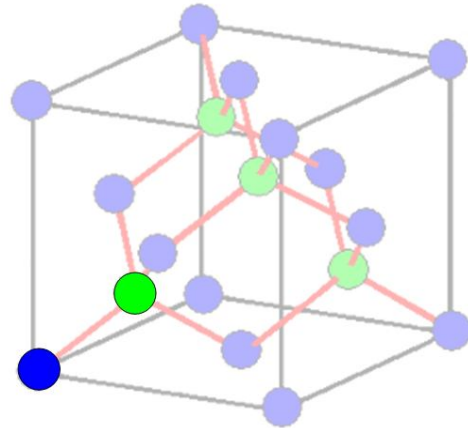
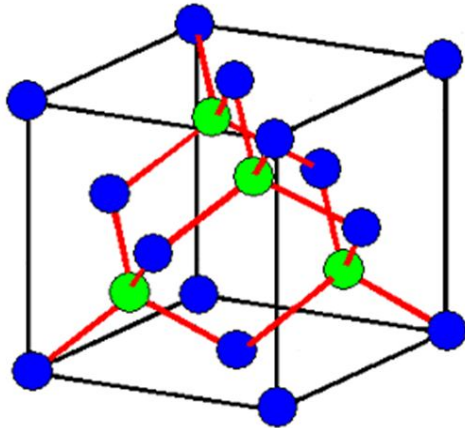
- (a) Warum ist dieses Gitter kein Bravaisgitter?
 - (b) Wählen Sie eine Basis, so dass sich ein Bravaisgitter ergibt. Welches Bravaisgitter erhält man?
 - (c) Skizzieren Sie zwei Möglichkeiten für primitive Elementarzellen.
-

Aufgabe 13)**(a4)**

Die Diamantstruktur kann als kubisch-flächenzentriertes Bravaisgitter aufgefasst werden, dessen Basis aus Kohlenstoffatomen bei $(0,0,0)$ und $(1/4,1/4,1/4)$ besteht.

- (a) Zeichnen Sie die $(1\bar{1}0)$ und (001) Ebene. Die Gitterkonstante der gewöhnlichen Einheitszelle von Diamant ist $a = 3.57 \text{ \AA}$. Wie groß ist der minimale Abstand zwischen Kohlenstoffatomen in der (001) Ebene? Wie groß ist der Abstand nächster Nachbarn in der Diamantstruktur?
- (b) Wie viele Atome gehören zur gewöhnlichen Einheitszelle?
- (c) Wieso kann unter der Annahme einer einatomigen Basis kein Bravaisgitter gefunden werden?

Diamantstruktur:



- Struktur fcc-abgeleitet durch Besetzung von **Tetraederplätzen**
- lockere Packung basierend auf **sp^3 -Hybridbindung**

Aufgabe 14)

(a83)

Warum kommt bei den Bravaisgittern im 3-dimensionalen das raumzentrierte monokline Gitter nicht vor?

Aufgabe 15)

(a84)

Warum ist bei den Bravaisgittern im 3-dimensionalen im orthorhombischen System die Zentrierung von nur zwei Rechteckflächen nicht erlaubt? Zu welchem Bravaisgitter würde sie eine solche Kristallstruktur zuordnen?

Aufgabe 16)

(a61)

Konstruieren Sie die Wigner-Seitz-Zelle in dem Bild der Gitterpunkte eines Flächengitters!

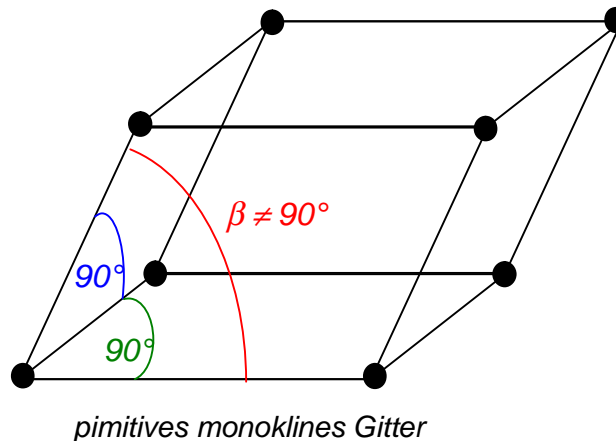
○ ○ ○

○ ○ ○

○ ○ ○

Aufgabe 17)**(a85)**

Skizzieren Sie die Wigner-Seitz Zelle des einfach-monoklinen Gitters.
(Winkel zwischen \vec{a}_1 und $\vec{a}_2 \neq \pi/2$ und $\vec{a}_3 \perp \vec{a}_1, \vec{a}_2$)



Aufgabe 18)**(a78)**

Interferenzen an Kristallgittern werden nicht nur mit Röntgen-Strahlen beobachtet, sondern auch mit Elektronen- und Neutronenstrahlen, sofern die Wellenlänge klein genug ist.

Zeigen sie für ein einfach kubisches Gitter mit der Gitterkonstante a , das gelten muss: $\lambda \leq 2a$

Es soll ein einfach kubisches Gitter mit $a = 3 \text{ \AA}$ untersucht werden.

Wie groß ist :

- die minimale Spannung zwischen Anode und Kathode einer Röntgen-Röhre ?
- die Beschleunigungsspannung einer Elektronenkanone ?
- die minimale kinetische Energie bzw. die tiefste Temperatur thermischer Neutronen ?

Aufgabe 19)**(a72)**

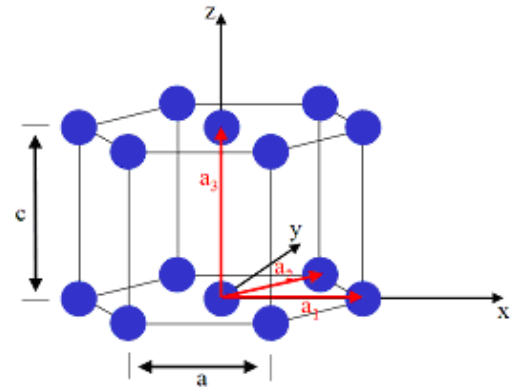
a) Zeigen Sie, dass das reziproke Gitter des einfach kubischen Gitters wieder ein kubisches Gitter bildet.

b) Wie sieht das reziproke Gitter des tetragonal raumzentrierten Gitters aus?

Aufgabe 20)

(a06)

Eine hexagonal-primitive Kristallstruktur liege mit ihrer hexagonalen Ebene in der x-y Ebene eines kartesischen Koordinatensystems. Die primitiven Einheitsvektoren haben die Längen a und c. Berechnen Sie die Einheitsvektoren des reziproken Gitters. Welche Struktur hat das reziproke Gitter?



Hinweis: $\cos(60^\circ) = \frac{1}{2}$ $\sin(60^\circ) = \frac{\sqrt{3}}{2}$

Aufgabe 21)

(a07)

Erklären Sie mit Hilfe einer Ewald-Konstruktion, unter welcher Bedingung in einem Neutronenstreuexperiment an einem großen Einkristall das gestreute Neutron ein weiteres Mal abgelenkt wird, bevor es den Kristall wieder verlässt.

Aufgabe 22)

(a67)

Füllen Sie folgende Tabelle zu den am häufigsten für die Strukturanalyse verwendeten experimentellen Verfahren aus, die auf Beugungseffekten beruhen!

Name des Verfahrens	Skizze des Versuchsaufbaus	Strahlungseigenschaften	Probeneigenschaften	Ewald-konstruktion	Ziel des Verfahrens
Laue-Verfahren					
Debye-Scherrer-Verfahren					

Drehkristall-Verfahren					
-------------------------------	--	--	--	--	--

Aufgabe 23)

(a81)

Das Laue-Verfahren wird oft bei bekannter Kristallstruktur dazu benutzt, um einen Kristall im Raum zu orientieren. Im Gegensatz zum Debye-Scherrer-Verfahren wird hierbei ein Röntgenstrahl mit kontinuierlichem Spektrum auf den Kristall gerichtet.

Schätzen Sie die maximal mögliche Anzahl von Interferenzpunkten ab, wenn die Spannung an der Röntgenröhre 60 kV beträgt und der Kristall ein einfach kubisches Gitter mit einer Gitterkonstante von 2 Å ist!

Aufgabe 24)

(a08)

Ist es richtig, dass bei der Streuung an einem Pulver eines Bravaisgitters mit monochromatischer Strahlung beliebiger Wellenlänge immer zumindest ein Debye-Scherrer Ring beobachtet wird? (Begründung !)

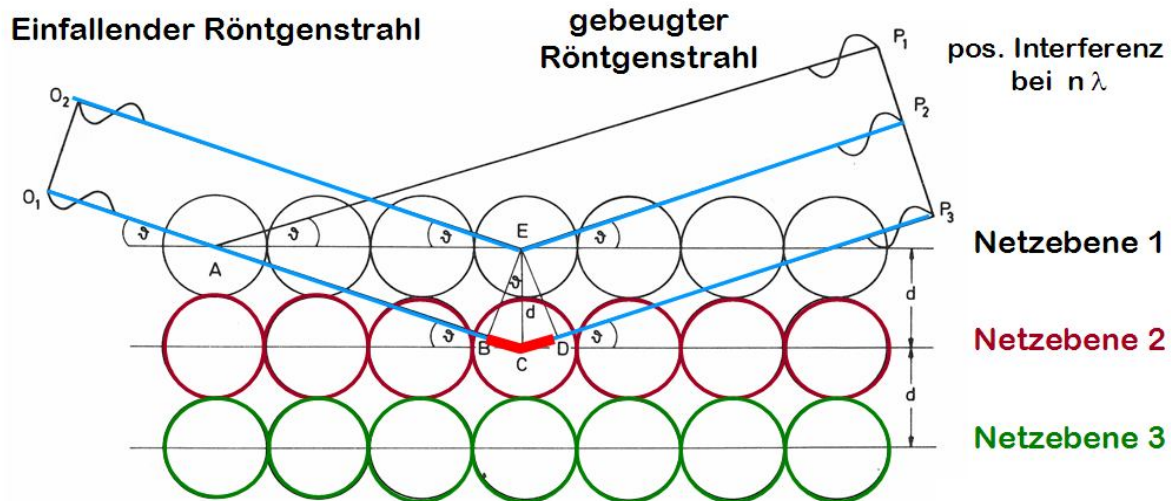
Aufgabe 25)

(a58)

Sie untersuchen eine Pulverprobe eines kubischen Materials unter Verwendung von Cu-K_α-Strahlung mit einer Wellenlänge von $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$. Sie erhalten Röntgen-Reflexe bei den Winkeln:

$$2\theta_1 = 26.59^\circ, 2\theta_2 = 37.96^\circ \text{ und } 2\theta_3 = 46.95^\circ.$$

- (a) Handelt es sich bei dem untersuchten Material um eine amorphe oder kristalline Substanz?
- (b) Berechnen Sie den Abstand der Netzebenen, von denen die Beugungsreflexe stammen, unter der Annahme, dass es sich um Beugungsreflexe 1. Ordnung handelt.
- (c) Welchen Flächen im Elementarwürfel des kubischen Materials entsprechen diese Netzebenen?



Aufgabe 26)

(a59)

Obwohl wir zwischen verschiedenen Bindungstypen unterscheiden, treten diese in Festkörpern üblicherweise nicht in reiner Form auf. Diskutieren Sie, welche Bindungstypen in folgenden Festkörpern relevant sind und welcher Bindungstyp dominiert: Krypton, Kochsalz (NaCl), Natrium, Graphit, Diamant, Ar, NH_3 , CH_4 , Polyethylen.

Aufgabe 27))

Wiederholen sie folgende Fragen und Antworten aus der der Vorlesung Atome und Moleküle:

- Was ist die Schrödingergleichung ? Wie wurde sie hergeleitet ?
- Wie wird die Wellenfunktion interpretiert ?
- Was versteht man unter Normierung der Wellenfunktion ?
- Welche Einheit hat die Wellenfunktion?
- Was sind gebundene Zustände und was sind ungebundene Zustände ?
- Wie sieht die Wellenfunktion in einem endlichen und in einem unendlichen 1-dim. Potentialtopf aus ?
- Erklären sie ein Beispiel für die 2-dimensionale Schrödingergleichung !
- Wie sehen die Lösungen im 2-dim. Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden aus ?
- Welche Energiewerte ergeben sich im 2-dim. Potentialtopf ?
- Wie sehen die Lösungen im 3-dim. Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden aus ?
- Welche Energiewerte ergeben sich im 3-dim. Potentialtopf ?
- Was sind Energieentartungen im mehrdimensionalen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden?
- Was besagt das Pauli-Prinzip und wo kam es her?