

Frankfurt, 21.10.2019

Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

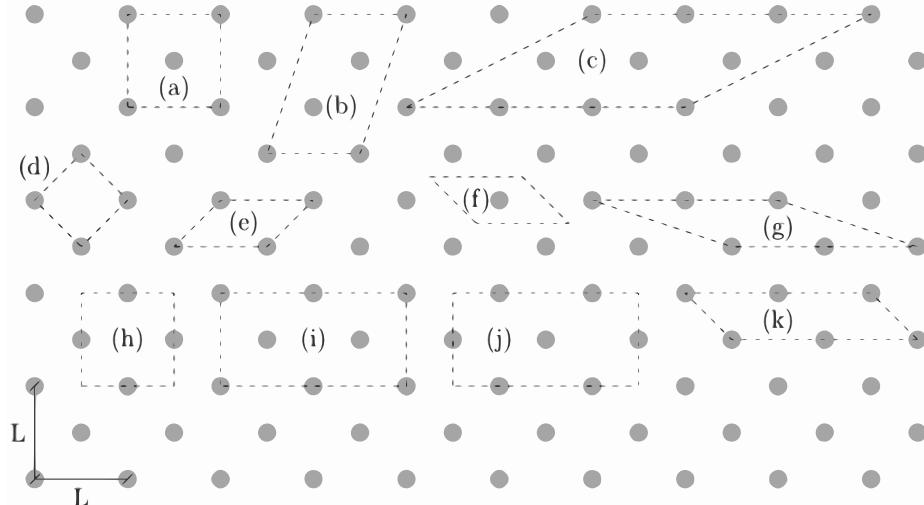
Wintersemester 2019/20

Blatt 0

(Präsenzübung)

Aufgabe 1 (Kristallsymmetrien, Einheitszellen und Bravais-Gitter) (0 Punkte)

Die Abbildung zeigt einen Teil eines zweidimensionalen Kristalls, bestehend aus Atomen einer einzigen Spezies. Diese sind als graue Kreise dargestellt.



- Listen Sie alle Punktsymmetrieeoperationen auf, die den Kristall auf sich selbst abbilden.
- Welche der mit Buchstaben beschrifteten Einheitszellen sind gültig? Begründen Sie Ihre Aussage.
- Welche der angegebenen Einheitszellen sind primitiv? Begründen Sie Ihre Aussage.
- Welche der primitiven Einheitszellen würde sich aus der Wigner-Seitz-Konstruktion ergeben?
- Ist die Erfüllung aller Punktsymmetrieeoperationen des Kristalls notwendige Eigenschaft einer primitiven Einheitszelle?
- Berechnen Sie die Fläche aller angegebenen Einheitszellen als Vielfache der Fläche der primitiven Einheitszelle.
- Geben Sie die Basisvektoren an, die jede der angegebenen Einheitszellen aufspannen. Zeichnen Sie das resultierende Bravais-Gitter und geben Sie eine mögliche atomare Basis in Bezug auf die Vektoren des Bravais-Gitters an.

Aufgabe 2 (Kristalle und Quasikristalle) (0 Punkte)

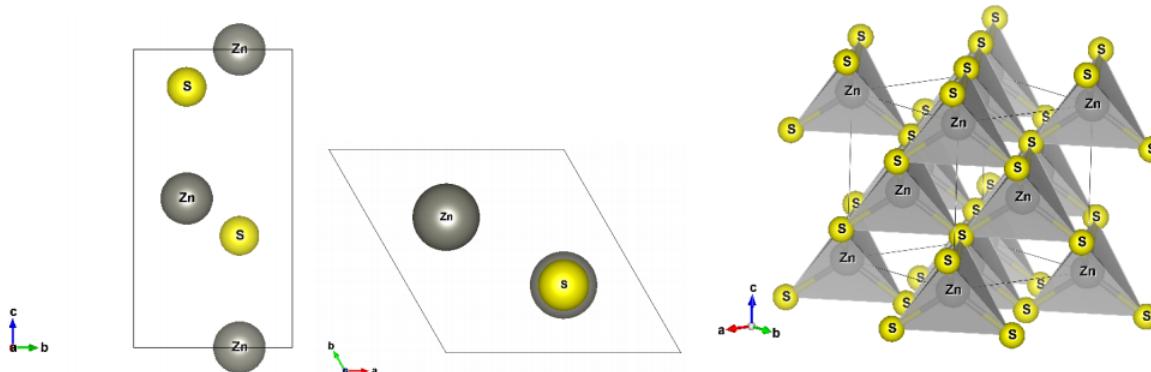
Zeigen Sie, dass es keinen Kristall mit fünfzähliger Symmetrie geben kann.
Inwieweit treten diese dennoch in der Natur auf?

Aufgabe 3 (Kristallstruktur von Zinksulfid) (0 Punkte)

In der Natur findet man ZnS in zwei kristallinen Phasen: Wurtzit und Sphalerit (Zinkblende). Die zur Bearbeitung der Aufgabe notwendigen Zahlenwerte finden Sie in der Tabelle am Ende der Aufgabe.

- Geben Sie gültige Basisvektoren und einen vollständige atomare Basis *mit möglichst kleiner Einheitszelle* für beide Strukturen an.
- Berechnen Sie die Abstände zwischen nächsten Nachbarn in beiden Phasen.
- Berechnen Sie die Teilchenanzahldichte beider Phasen.

In den folgenden Abbildungen sind die Kristallstrukturen von Wurtzit (links, mittig) und Sphalerit (rechts) dargestellt.



Das Gitter und die atomaren Positionen sind gegeben durch:

	Wurtzit	Sphalerit
a in Å	3.8227	5.4093
b in Å	3.8227	5.4093
c in Å	6.2607	5.4093
α in Grad	90	90
β in Grad	90	90
γ in Grad	120	90
Zn	(1/3, 2/3, 0), (2/3, 1/3, 1/2)	(0, 0, 0), (0, 1/2, 1/2), (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0)
S	(1/3, 2/3, 0.3748), (2/3, 1/3, 0.8748)	(1/4, 1/4, 1/4), (3/4, 3/4, 1/4), (3/4, 1/4, 3/4), (1/4, 3/4, 3/4)

Hinweis: Um sich einen besseren visuellen Eindruck von der Struktur zu verschaffen, können Sie das Programm VESTA verwenden. Dieses ist kostenlos erhältlich unter:

<http://jp-minerals.org/vesta/en/download.html>

Die beiden Kristallstrukturen erhalten Sie in einem standardisierten Dateiformat unter:

http://itp.uni-frankfurt.de/~zantout/solid_state_lecture/cifs.zip