

Formelsammlung Festkörperphysik 1

<Marco.Moeller@macrolab.de>

Stand: 01.07.2007 - Version: 0.0.4

ERHÄLTlich UNTER [HTTP://PRIVAT.MACROLAB.DE](http://privat.macrolab.de)

Diese Formelsammlung basiert auf der Vorlesung "Festkörperphysik 1" von Prof. Franz Fujara an der Technischen Universität Darmstadt im Sommersemester 2007.

Die folgende Formelsammlung steht zum kostenlosen Download zur Verfügung. Das Urheberrecht und sonstige Rechte an dem Text verbleiben beim Verfasser, der keine Gewähr für die Richtigkeit und Vollständigkeit der Inhalte übernehmen kann.

Inhaltsverzeichnis

1 Bausteine der Struktur: Atome, Moleküle, Ionen	1
1.1 Bausteine	1
1.1.1 Bausteine	1
1.1.2 Größe, Abstände	1
1.2 Ordnung und Unordnung	2
1.2.1 Unordnung	2
1.2.2 Ordnung	2
1.2.3 Zwischenbereich	2
2 Der kristalline Zustand	2
2.1 Kristallgitter	2
2.2 Primitive Einheitszelle	2
2.3 Systematik der Bravaisgitter	2
2.4 Reziprokes Gitter	3
2.5 Strukturbestimmung	3

1 Bausteine der Struktur: Atome, Moleküle, Ionen

1.1 Bausteine

1.1.1 Bausteine

Bausteine Siehe Periodensystem der Elemente

Struktur Anordnung der Bausteine

Inerter Baustein wenn Elctronenstruktur bei Annäherung anderer Bausteine unverändert bleibt

Molekül ist hier Äquivalent zu Inerter Baustein verwendet

- die einzigen inerten Atome sind die Edelgasatome: He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn
- ansonsten polyatomare Moleküle
- Stabilitätsgrenzen von Molekülen
 - Ionisation (z.B. Polarisation)
 - Dissoziation (z.B. thermische D.)

Kondensierte Materie Flüssigkeiten, Festkörper

1.1.2 Größe, Abstände

einzelne Atome haben keine scharf definierten Größen und Abstände: siehe Wellenfunktion des Elektrons beim Wasserstoff

kristalline Festkörper haben scharf definierte Nächste Nachbarn (*Nahordnung*), und sogar *Fernordnung*.

Ionenkristall In sehr guter Näherung (2% Fehler) kann jedes einzelne Ion durch eine harte Kugel eines gegebenen Radius beschrieben werden.

Metalle lassen sich ebenfalls durch harte Kugeln mit gegebenem Radius beschreiben.

- beachte: Metallradien ein und des selben Element ist größer als Ionenradius

Kovalent gebundene Kristalle lassen sich nur mit dem Molekül als kleinste Einheit als harte Kugeln beschreiben → *Van der Waals Radius*. Die einzelnen Atome des Moleküls nicht.

1.2 Ordnung und Unordnung

1.2.1 Unordnung

existiert in Gasen

Phasenübergang 1. Ordnung ist durch die *Unstetigkeit* in den Thermodynamischen Variablen gekennzeichnet

Phasenübergang 2. Ordnung ist durch die *Stetigkeit* in den Thermodynamischen Variablen gekennzeichnet

Freie Energie $F = U - S \cdot T$ wird minimiert bei der Phasenwahl

- U innere Energie
- S Entropie
- T Temperatur

messbar sind nur Mittelwerte

1.2.2 Ordnung

existiert in Kristallen

messbar sind einzelne Teilchen

1.2.3 Zwischenbereich

messbar sind Einzelne Teilchen

reale Systeme: z.B. Körner

Partielle Ordnung: Manche Freiheitsgerade wie in Gas, manche wie in Festkörper

- Polymere, Legierungen, Verbundwerkstoffe, Biologische Systeme, Flüssigkristalle

2 Der kristalline Zustand

2.1 Kristallgitter

Basis das einzelne Atom oder Atomgruppe. Jedem Gitterpunkt wird eine identische Gruppe von Atomen oder Atomgruppen (Basisgruppe) zugeordnet

Raumperiodische Anordnung *Bravais-Gitter* (*Synonym Translationsgitter*). Drei Basisvektoren (oder primitive Translationen) $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$; von jeden Punkt des Raumgitters die anderen Gitterpunkte durch eine Translation

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

mit $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$ erreicht werden können.

2.2 Primitive Einheitszelle

Volumen $V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

Typen gibt es 14 verschiedene

- <http://de.wikipedia.org/wiki/Bravais-Gitter>

Eindeutigkeit ist nicht gegeben

Wigner-Seitz-Zelle lässt sich wie folgt eindeutig definieren:

- die kleinstmögliche Einheitszelle
- die nur einen Gitterpunkt in ihren Zentrum enthält
- die alle Symmetrien des zugehörigen Kristallgitters aufweist
- alle Orte im Inneren der Wigner-Seitz-Zelle liegen diesem Gitterpunkt näher als benachbarte Gitterpunkte

Ort wird in relativen Koordinaten zu den Basisvektoren angegeben.

- Mittelpunkt ist z.B. $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

Richtungen werden auch als Vektor angegeben. Negative Komponenten werden durch ein Querstrich der Zahl angegeben ($-1 \rightarrow \bar{1}$)

Ebenen werden durch "*Miller-Indizes*" angegeben. Dies ist der auf die Länge 1 normierte Normalenvektor der Ebene.

Netzebene (oder *Gitterebene*) bezeichnet man eine Ebene, die durch Gitterpunkte (Atompositionen) im Raumgitter eines Kristalls verläuft. Ihre Lage wird durch die Millerschen Indizes (hkl) beschrieben.

Eine Netzebenenchar besteht aus allen parallel verlaufenden Netzebenen mit jeweils dem Netzebenenabstand dhkl. Dieser kann aus den Millerschen Indizes und den Gitterkonstanten berechnet werden. Für orthorhombische und höher symmetrische Gitter gilt folgende Formel:

$$d_{hkl} = \left[\left(\frac{h}{a} \right)^2 + \left(\frac{k}{b} \right)^2 + \left(\frac{l}{c} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

2.3 Systematik der Bravaisgitter

Affine Transformation $T(\vec{r}) = \vec{r}' = \hat{R}\vec{r} + t$

- Primitive Translationen
 $\vec{t}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$
- Punktoperationen
 $\hat{R} = \text{Drehmatrize (also } \det(C_p) = 1)$

2.4 Reziprokes Gitter

- ist eine mathematische Hilfskonstruktion zur Beschreibung eines Kristallgitters
- wird benutzt zur Behandlung von WW von Wellen mit räumlichen periodischen Strukturen

Definition Die Gesamtheit aller Wellenvektoren \vec{k} , deren dazugehörigen ebenen Wellen $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ die Periodizität eines gegeb. Bravaisgitters $\{\vec{R}\}$ aufweist, wird als dessen Reziprokes Gitter bezeichnet.

- $\{\vec{R}\}$ Direktes Gitter
→ $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3\}$ dessen Basis
- $\{\vec{b}\}$ reziprokes Gitter
→ $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$ dessen Basis
→ $\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$
→ $\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}$
→ $\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}$
→ $[\vec{b}_i] = \frac{1}{\text{Länge}}$
→ $\vec{b}_i \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$
→ $\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3$
→ $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$
→ $\vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi \underbrace{(k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3)}_{\in \mathbb{Z}}$
→ $V_B = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{V_a}$

Erste Brillouin-Zone ist die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters

2.5 Strukturbestimmung

Strahlungsarten gibt es vom Prinzip 3 die zur Analyse genutzt werden

Neutronen haben keine Elektromagnetische Wechselwirkungen mit Elektronenhüllen, sondern nur mit den auf dieser Skala punktförmigen Kernen

- Typische Energie $10^{-1} eV$
- $E \sim k \sim \lambda^{-2}$

Elektronen Nur Oberflächenanalyse. Wechselwirken mit der Elektronenhülle

- Typische Energie $10^2 eV$
- $E \sim k \sim \lambda^{-2}$

Licht Wechselwirkt mit Elektronenhülle

- Typische Energie $10^4 eV$
- $E \sim k \sim \lambda^{-1}$

Laue-Bedingung Konstruktive Interferenz gdw.;

$$\vec{k} + \vec{k}' = \Delta \vec{k} = \vec{K} = \text{Reziproker Gitterpunkt}$$

Bragg-Gleichung relativ zu den Netzebenen des Kristalls

$$2d \sin \theta = m\lambda$$

- $m \in \mathbb{Z}$
- θ ist der Winkel zwischen der Ebene und dem einfallender bzw. ausfallender Strahl.
- Spiegelung / Reflektion an Netzebene

Ewald-Kugel ist ein Konstruktion um die Interferenzmaxima zu konstruieren

- Man zeichne den einfallenden \vec{k} Vektor beginnend an einem beliebigen Punkt in das Reziproke Gitter ein.
- Um die Spitze dieses Pfeils eine Kugel mit dem Radius $|\vec{k}'|$ zeichnen.
- Vektoren von der spitze von \vec{k} zu Punkten des reziproken Gitters auf dieser Kugeloberfläche sind Ausfallsrichtungen in denen ein Interferenzmaximum liegt.

Experimentelle Verfahren zur Bestimmung des Reziproken Gitters

Laue-Verfahren besteht darin, das mit einem kontinuierlichen Spektrum $k_0 > k > k_1$ bestrahlt wird. Der Kristall wird immer aus der gleichen Richtung und die Streuintensitäten bestimmt werden.

Drehkristallverfahren bestrahlt wird mit monochromatischer γ Strahlung. Der Kristall wird gedreht. Die Streuintensitäten werden bestimmt.

Debye-Scherrer-Verfahren monochromatische γ . Nutzen eines Pulvers. Jede Christallorientierung gleichhäufig vorhanden. Es entstehen Ringe im Spektrum.

Index

Bausteine, 1
Bravais-Gitter, 2
Bravaisgitter, 2
Brillouin-Zone, 3

Debye-Scherrer-Verfahren, 3
Drehkristallverfahren, 3

Einheitszelle, 2
Erste Brillouin-Zone, 3
Ewald-Kugel, 3

Fernordnung, 1

Gitterebene, 2

Inerter Baustein, 1

Kristallgitter, 2

Laue-Bedingung, 3
Laue-Verfahren, 3

Miller-Indizes, 2
Molekül, 1

Nahordnung, 1
Netzebene, 2

Reziprokes Gitter, 3

Struktur, 1
Strukturbestimmung, 3
Synonoy Translationsgitter, 2

Van der Waals Radius, 1

Wigner-Seitz-Zelle, 2