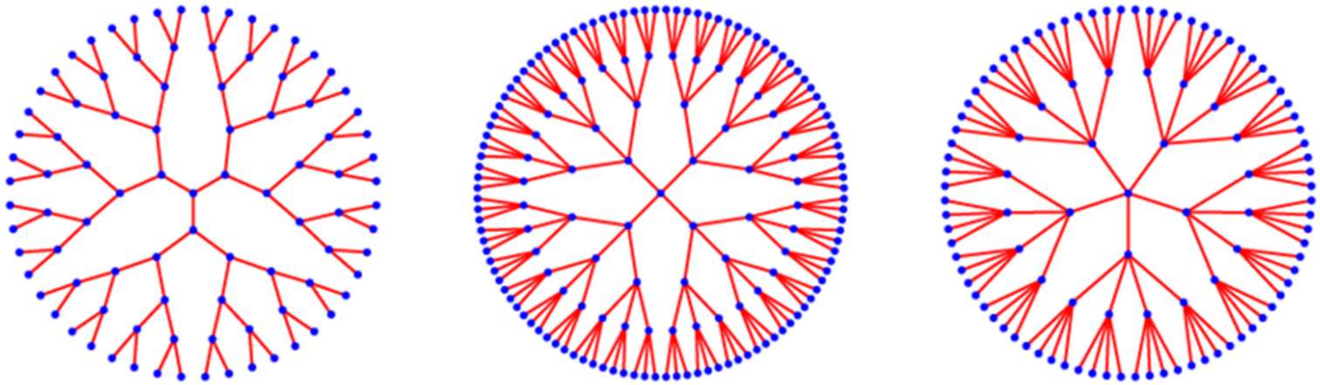
Festkörperphysik

1^{st} Exercise Session | Wanda Duss

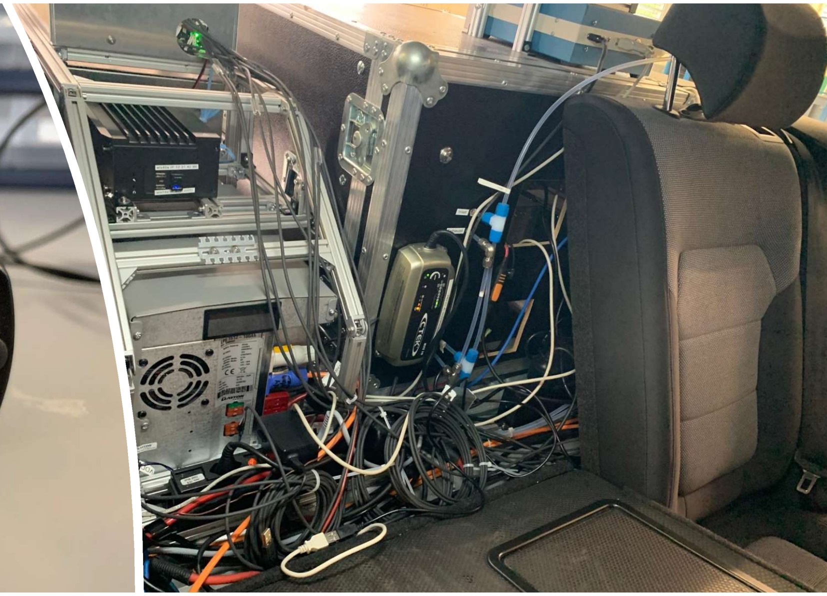
About Me

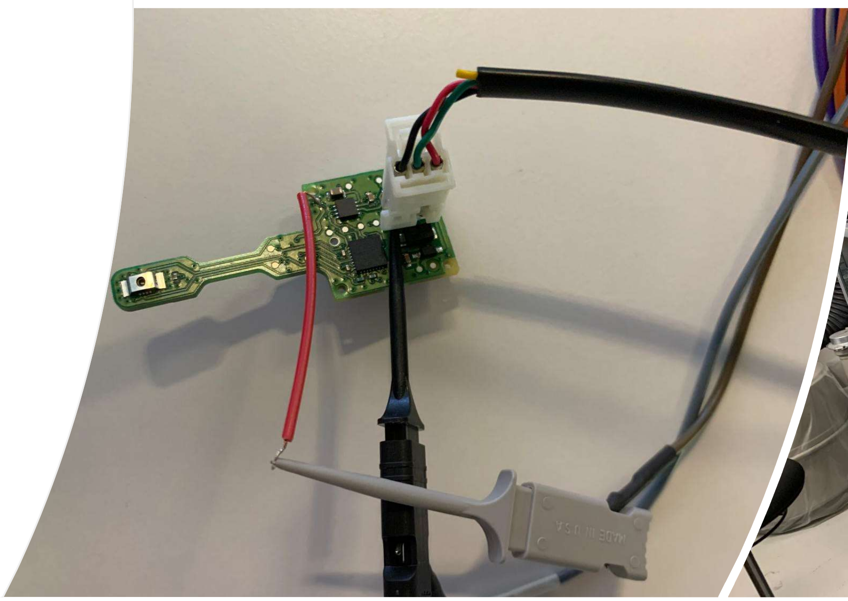
- Wanda Duss [she/her], wandaphilomena.duss@uzh.ch
- 4th Semester Master “Physik der Kondensierten Materie” @ UZH
  Mit Minor in Philosophie
- Aktuell an Masterarbeit im Bereich der theoretischen topologischen Festkörperphysik



Letztes Semester: Sensirion

If you have questions: approach me



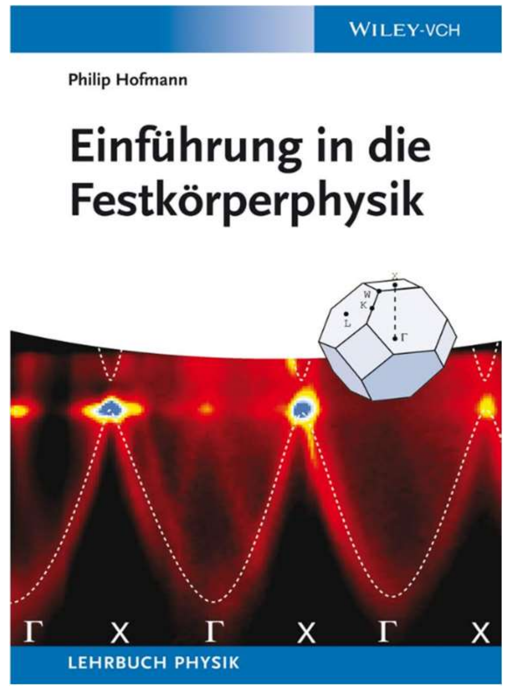


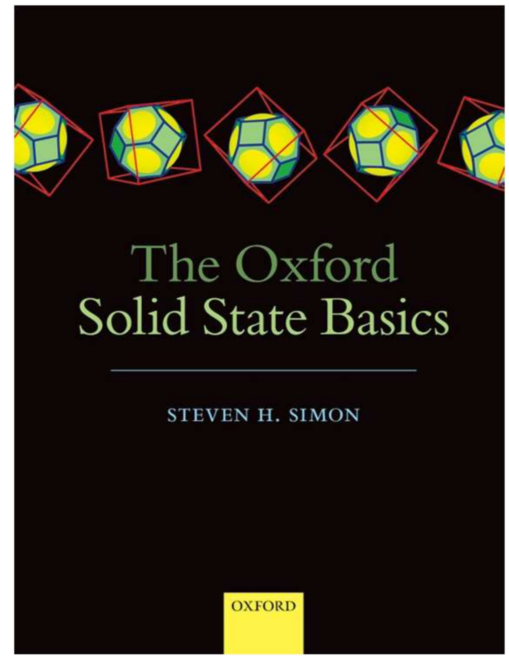
Literaturhinweis

Hofmann: Sehr einfach, inhaltlich etwas minimalistisch

Simon: Einfach, intuitiv, gute Inhaltsdichte, andere Struktur

(vs. Gross & Marx eher sehr ausführlich)





A short Roadmap

1) Starre Atomgitter

Beschreibung?

Streuung an Ebenen

2) Bindungen

Warum sind Materialien stabil?

Starke & schwache Bindungen

3) Nicht so starre Gitter

Schwingungen

Woher kommt die Energie für Schwingungen

Wärme?

Statistical Physics appears

4) Elektronen

Tragen Ladung

Können sich frei bewegen??

El. Leitfähigkeit

5) Spin

Magnetisierung?

Ionen & Elektronen haben Spin

Grundbegriffe Review

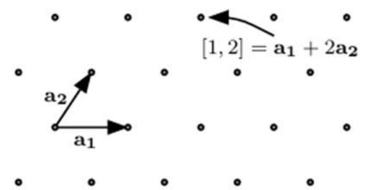


Fig. 12.1 A lattice is defined as integer sums of of primitive lattice vectors.

Gitter

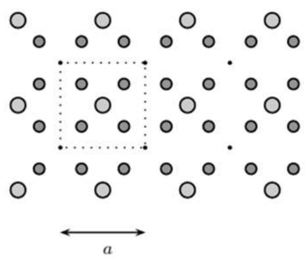
Menge v. Punkten die durch vielfache v. erzeugenden Vektoren bestimmt sind

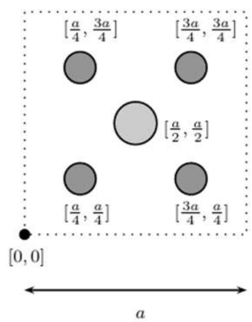
+

= kristall

Basis

Was wir an die Gitterpunkte setzen



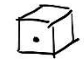


Einheitszelle

Eine Raumeinheit die, wenn man sie aneinanderreiht, den ganzen Raum ausfüllt und dabei die Raumstruktur reproduziert

→ **Primitiv**

Raumeinheit enthält nur einen Gitterpunkt



"Zentriertes Gitter"

Enthält im inneren der Einheitszelle einen oder mehrere zusätzliche Gitterpunkte

Bravais - Gitter

Die 14 unterschiedlichen Gitter welche in 3D existieren

Worin unterscheiden sie sich?

Warum benutzen wir nicht nur primitive EZ?

⇒ Symmetry

1) Bravais-Gitter

Weshalb kommt ein tetragonal basiszentriertes Bravaisgitter nicht vor?

Reminder: Bravais-Gitter ist die minimale Menge der Gitter unter Punktgruppen-Symmetrie (Rotationen, Spiegelungen) + Zentrierungsmöglichkeiten (Body, Face, Base)

In anderen Worten: Bravais-Gitter können durch anders gewählte Basisvektoren nicht ineinander überführt werden.

Betrachte ein tetragonal basiszentriertes Gitter

X-Y-Ebene

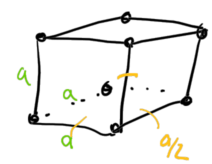
Durch anders gewählte Basisvektoren finden wir, dass es sich hier um ein einfaches tetragonales Bravaisgitter handelt

Packungsdichte bei gleichgrossen, sich berührenden Kugeln

Kernidee: Wieviel % des Volumens eines Raums lässt sich mit harten Kugeln füllen, wenn diese auf einem Gitter angeordnet sind?

Vorgehen

1. Grösse der Kugel durch geometrische Überlegungen bestimmen
   ↳ Was ist des maximale Radius den ich um einen Gitterpunkt ziehen kann, ohne mit anderem Radius zu kreuzen



2. Volumen der Kugel bestimmen $V = \frac{4}{3}\pi r^3$

$$V = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{\pi a^3}{6}$$

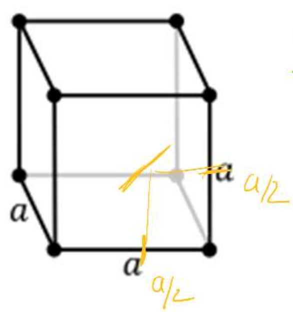
3. Packing density $= \dfrac{\text{Anzahl Kugeln in EZ} \times V_{Kugel}}{V_{EZ}}$

$$\rho = \frac{1 \times \pi a^3/6}{a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 51\%$$

2) Kubische Gitter

Geben Sie für einfach kubische, bcc und fcc Gitter der Gitterkonstante *a* die folgenden Grössen an:

- Volumen der Einheitszelle V
- Anzahl primitiver Gitterpunkte pro Einheitszelle N
- Volumen der primitiven Elementarzelle V_{Pr}
- Zahl der nächsten Nachbarn (sog. Koordinationszahl) K
- Abstand nächster Nachbarn d
- Packungsdichte bei sich berührenden kugelförmigen Atomen ρ_P



$V = a^3$, $N = 8 \times 1/8 = 1$

$V_{Pr} = a^3 = (a/2 - (-a/2))^3$

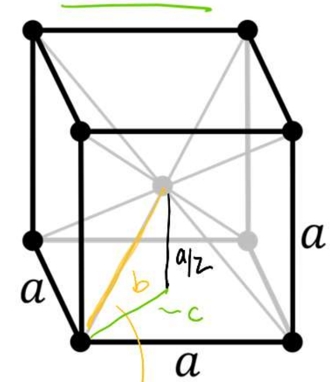
$K = 6$ $\quad d = a$

$$\boxed{\rho_{Pa} = \frac{N \times V_K}{V}}$$

$V_K = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{d}{2}\right)^3 = \frac{\pi a^3}{6}$ Volumen d. Kugeln gefüllt

$$\rho_{Pa} = \frac{1 \times \pi a^3}{6 a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 52\%$$

BCC



$V = a^3$ $\quad N = 8 \times 1/8 + 1 = 2$

$V_{pr} = V/N = a^3/2$

oder durch Basisvektoren des primitiven Einheitszelle.

Pythagoras: $c = \sqrt{a^2/4 + a^2/4} = \frac{\sqrt{2}}{2} a^2$

$b = \sqrt{a^2/4 + c^2} = \sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{1}{2} a^2}$

$= \frac{\sqrt{3}}{2} a$

$K = 8$ (siehe etwa zentrales Punkt) , $d = \frac{\sqrt{3}}{2} a$

$V_K = \frac{4\pi}{3} r^3 = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{1}{2} \times \frac{\sqrt{3}}{2} a\right)^3 = \frac{4 \times \cancel{3} \times \sqrt{3} \times \pi}{\cancel{3} \times 64} a^3 = \frac{\sqrt{3}}{16}\pi a^3$

$$\rho_{Pa} = \frac{N \times V_K}{V} = \frac{2 \times \sqrt{3}/16\, \pi \cancel{a^3}}{\cancel{a^3}} = \frac{\pi \sqrt{3}}{8}$$

3) Gitterkonstante von Au

Gold hat ein kubisches fcc Gitter und eine Dichte von 19.3 g/cm³. Berechnen Sie die Gitterkonstante, den Abstand nächster Nachbarn und den Radius eines Goldatoms (Annahme: sich berührende Kugeln).

Um diese Aufgabe zu lösen, benötigen wir eine zusätzliche Information $\Rightarrow$ Gewicht eines Goldatoms

Um Gitterkonst. zu bestimmen, benötigen wir die Anzahl Atome pro Volumen.

I.e. $n_{au} = \frac{\#}{V} = \rho_{au} \times \frac{1}{m_{au}}$

$$\boxed{M_{au} = 197\ g/mol}$$

$\Rightarrow m_{au} = M_{au}/N_a$

$$n_{au} = \frac{\rho_{au} \times N_a}{M_{au}} = \frac{19.3\ \cancel{g}/cm^3}{197\ \cancel{g}/\cancel{mol}} \times 6 \times 10^{23} \frac{1}{\cancel{mol}} = 5{,}9 \times 10^{22} \frac{1}{cm^3}$$

Anzahl Goldatome pro volumen cm^3

Volumen der primitiven Einheitszelle ist genau $1/n_{au}$

$$V_{Au} = \frac{1}{n_{au}} = \frac{1\ cm^3}{5{,}9 \times 10^{22}}$$

Gehen zu üblicher Grossenordnung $\Rightarrow$ Angstrom Å $[10^{-10} m]$

$$= \frac{(10^8)^3\ \text{Å}^3}{5{,}9 \times 10^{22}} = \frac{1}{5{,}9} \times 10^2\ \text{Å} \cong 16{,}95\ \text{Å}$$

$\Rightarrow$ Note: Hier benutzen wir, dass die Atome dicht gepackt sind so dass $V_{Au} = V_{prim}$

Vom FCC (A2) wissen wir, dass $V_{EZ} = V_{prim} \times 4 = a^3$

$$\Rightarrow a = \sqrt[3]{4 \times 16{,}95\ \text{Å}^3} = 4{,}08\ \text{Å}$$

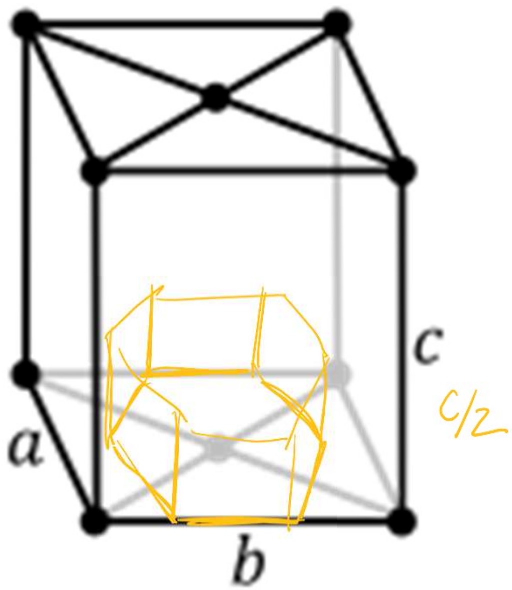
$$d_{NN} = \frac{\sqrt{2}}{2} a \qquad R = \frac{1}{2} d_{nn}$$

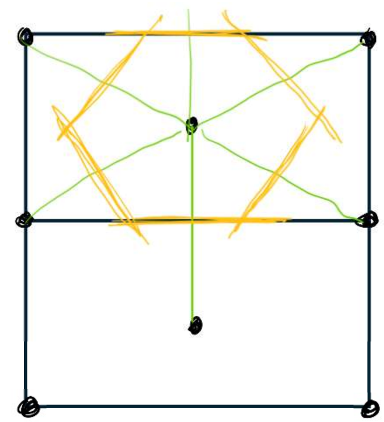
4) Wigner-Seitz-Zelle

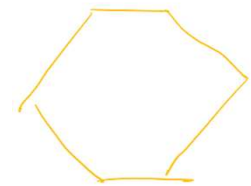
Reminder : Mittelsenkrechte zu allen Nachbaren konstruieren

Konstruieren Sie die Wigner-Seitz-Zelle des orthorhombisch basiszentrierten Gitters falls a_1:a_2:a_3 = 4:2:3.

Betrachten zuerst die a-b Ebene



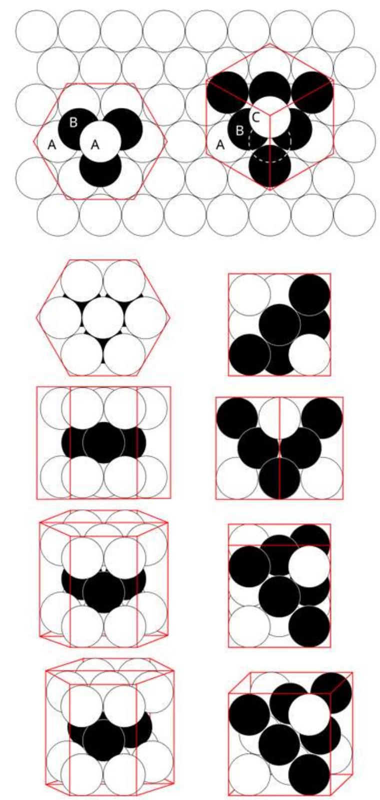


=> 

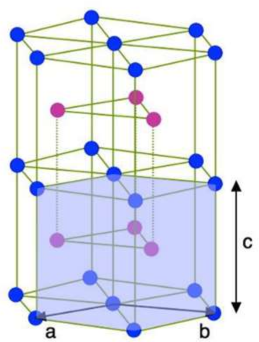
↳ die asymm. der Längen erzeugt einen zusätzlichen "dent"

5) Kugelpackungen

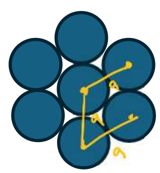
Bestimmen Sie das Verhältnis *c/a* einer idealen hexagonal dicht gepackten Kugelpackung (hcp). Ist die Packungsdichte einer fcc Kugelpackung grösser oder kleiner als die einer hcp Kugelpackung?



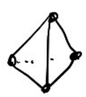
Hexagonal dichteste Kugelpackung (HCP)



Jede Kugel im hexagonalen Gitter hat Radius a/2, weil alle Gitterpunkte in der Ebene denselben Abstand (a) zueinander haben

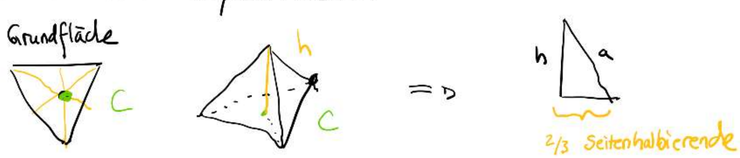


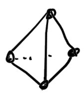
hcp: A-B-A



Die 4 Kugeln formen eine gleichseitige Pyramide mit Seitenlänge a

Höhe der Pyramide:

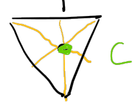


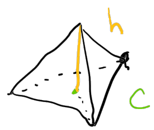


Die 4 Kugeln formen eine gleichseitige Pyramide mit Seitenlänge a

Höhe der Pyramide:

Grundfläche



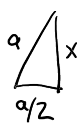


$\Rightarrow$

$\frac{2}{3}$ Seitenhalbierende $= X$

Geometrie

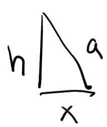
Seitenlänge



$$\rightarrow \quad X = \sqrt{a^2 - a^2/4} \cdot \frac{2}{3}$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{3} a$$

Höhe:



$$\rightarrow \quad h = \sqrt{a^2 - x^2}$$

$$= \sqrt{a^2 - \tfrac{3}{9} a^2}$$

$$= \sqrt{6}/3 \, a$$

Gesucht: c/a

C ist die höhe der Einheitszelle.

(siehe vorherige Slide)

$$\Rightarrow \quad c = 2 \times h \qquad \text{s.t.} \quad \frac{c}{a} = \frac{2 \times \frac{\sqrt{6}}{3} a}{a} = \sqrt{\frac{24}{9}}$$

$$= \sqrt{8/3} \approx 1{,}633$$

Packungsdichte ist dieselbe, die Höhenberechnung erfolgt gemäss demselben Argument (gleichseitige Pyramide) einfach etwas verschoben im lattice.
Die Kugeln haben dieselbe grösse, etc.
Die Einheitszelle ist zwar grösser aber die Anzahl Kugeln in der EZ steigt proportional