

Übungen zur Vorlesung
Halbleiterphysik

Übungsblatt 1 vom 15.04.2013

Aufgabe 1: Wiederholung festkörperphysikalischer Grundlagen: Gitter und Symmetrien

Auf der nächsten Seite dieses Übungsblattes finden Sie eine Skizze, welche die atomare Anordnung von Kohlenstoffatomen in dem zweidimensionalen Halbmetall Graphen darstellt. Jedes Kohlenstoffatom (Kreise) ist mit drei kovalenten Bindungen (Linien) mit seinen nächsten Nachbarn verbunden. Wegen seiner zweidimensionalen Natur eignet sich das Graphengitter besonders gut, um die wichtigsten Prinzipien bei der Beschreibung periodischer Festkörper noch einmal zu wiederholen. Drucken Sie für die Bearbeitung der folgenden Teilaufgaben die Skizze, falls nötig auch mehrfach, aus und tragen Sie die verlangten Konstruktionen in die Ausdrucke ein.

- a) Begründen Sie: Die Zentren der Atome bilden **kein** Gitter für die gezeigte periodische Struktur!
- b) Bestimmen Sie alle Operationen der Punktgruppe der Kristallstruktur!
- c) Zeichnen Sie (z.B. in Form von Kreuzen) das Punktgitter und dazu eine primitive, Einheitszelle mit symmetriangepasster Basis in die Skizze ein!
- d) Zeichnen Sie die Einheitsvektoren des Gitters in die Skizze ein und bestimmen Sie deren Länge in Einheiten der Bindungslänge zwischen den Atomen!
- e) Zeichnen Sie das reziproke Gitter mit seinen Einheitsvektoren in die Skizze ein und bestimmen Sie deren Länge in Einheiten der reziproken Bindungslänge!
- f) Diskutieren Sie das reale und das reziproke Gitter im Vergleich!
- g) Konstruieren Sie die erste und die zweite Brillouin-Zone in das reziproke Gitter hinein und diskutieren Sie die Orientierung der ersten!
- h) Konstruieren Sie eine zusammenhängende Teilfläche der ersten Brillouin-Zone so, dass nach Anwendung aller Symmetrioperationen des Kristallgitters auf diese Teilfläche gerade eine exakte Überdeckung (ohne Lücken und Überschneidungen) der ersten Brillouin-Zone resultiert. Der so bestimmte Teil der Brillouin-Zone heißt ihr ‚irreduzibler Teil‘ und ist von großer Bedeutung für die Darstellung von Bandstrukturen und Dispersionsrelationen.
- i) Beschreiben Sie die gezeigte atomare Anordnung durch ein Gitter mit rechteckiger Symmetrie und geben Sie dazu eine geeignete Einheitszelle an! Welche Nachteile hätte eine solche Beschreibung?
- j) (Hexagonales) Bornitrid besteht aus schwach durch van-der-Waals-Kräfte gebundenen hexagonalen Lagen in denen sich Bor und Stickstoffatome abwechseln. (Die Präparation einzelner Schichten von Bornitrid, quasi eines Bornitren analog zum Graphen aus Graphit, ist bisher nicht gelungen.) Wenn Sie benachbarte Kreise in der angehängten Skizze jeweils unterschiedlich markieren (z.B. durch Ausfüllen und nicht-Ausfüllen), dann sehen Sie eine Repräsentation von Bornitren anstelle von Graphen. Wie ändert sich dadurch die Kristallstruktur im Hinblick auf Punktgitter, Basis und Symmetrien?

