

Übungsblatt 4

1. geometrischer Strukturfaktor

- i. Bestimmen Sie den geometrischen Strukturfaktor von Diamant. Für welche reziproken Gittervektoren verschwindet der Strukturfaktor. Was bedeutet das für die Streuung an Diamant?
- ii. Betrachten Sie ein raumzentriert kubisches (bcc) Gitter als ein einfach kubisches (sc) Gitter mit zwei Atomen pro Einheitszelle. Bestimmen Sie den geometrischen Strukturfaktor. Welche Streumatrix-Elemente $\langle \mathbf{k}' | \rho | \mathbf{k} \rangle$ sind für ein solches einfach kubisches Gitter ungleich Null? Vergleichen Sie mit der von Laue Bedingung für ein bcc Gitter mit einem Atom pro Einheitszelle.

2. periodische Randbedingungen

Gegeben sei ein Gitter mit primitiven Translationen \mathbf{a}_i , $i = 1, 2, 3$. Betrachten Sie die Superzelle, die von den drei linear unabhängigen Translationen $\mathbf{l}_j = \sum_i l_{j,i} \mathbf{a}_i$ aufgespannt wird. Bestimmen Sie das Volumen der Superzelle. Wieviele inäquivalente \mathbf{k} -Vektoren gibt es, für die die Bloch Funktion periodisch unter den Translationen \mathbf{l}_j sind. Drücken Sie diese durch die primitiven reziproken Gittervektoren \mathbf{b}_i aus.

3. Schraubungen und Gleitspiegelungen

Betrachten Sie die hexagonal dichteste Kugelpackung. Identifizieren Sie eine Schraubung und eine Gleitspiegelung der Kristallstruktur.

4. crystallographic information files

Bestimmen Sie die Kristallstruktur von Graphit aus folgendem cif-file Fragment.

Die volle Spezifikation finden Sie unter

<http://icsdweb.fiz-karlsruhe.de/index.php> (Suche: graphite)

```
#####
# Hull, A.W. (1917)
# Physical Review (1,1893-132,1963/141,1966-188,1969) 10, 661-696
# Structure of graphite
# CIF by ICSD-for-WWW, Copyright 2003 FIZ-Karlsruhe & A.W.Hewat (hewat@ill.fr)
# NOT TO BE PUBLISHED IN ANY FORM. See http://icsd.ill.fr/icsd/conditions.html
#####
_cell_length_a          2.47
_cell_length_b          2.47
_cell_length_c          6.80
_cell_angle_alpha       90.
_cell_angle_beta        90.
_cell_angle_gamma       120.
_cell_volume            35.931
_cell_formula_units_Z   4
_symmetry_space_group_name_H-M  'P 63/m m c'
_symmetry_Int_Tables_number 194
```

```
loop_
_symmetry_equiv_pos_site_id
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 1 'x, x-y, -z+1/2'
 2 '-x+y, y, -z+1/2'
 3 '-y, -x, -z+1/2'
 4 '-x+y, -x, -z+1/2'
 5 '-y, x-y, -z+1/2'
 6 'x, y, -z+1/2'
 7 '-x, -x+y, z+1/2'
 8 'x-y, -y, z+1/2'
 9 'y, x, z+1/2'
10 'x-y, x, z+1/2'
11 'y, -x+y, z+1/2'
12 '-x, -y, z+1/2'
13 '-x, -x+y, -z'
14 'x-y, -y, -z'
15 'y, x, -z'
16 'x-y, x, -z'
17 'y, -x+y, -z'
18 '-x, -y, -z'
19 'x, x-y, z'
20 '-x+y, y, z'
21 '-y, -x, z'
22 '-x+y, -x, z'
23 '-y, x-y, z'
24 'x, y, z'
loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_oxidation_number
C0+ 0.
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_Wyckoff_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_occupancy
C1 C0+ 2 b 0 0 0.25 0.0 1.
C2 C0+ 2 c 0.3333 0.6667 0.25 0.0 1.
```