

### Übungsblatt 3

#### 1. kubische Gitter

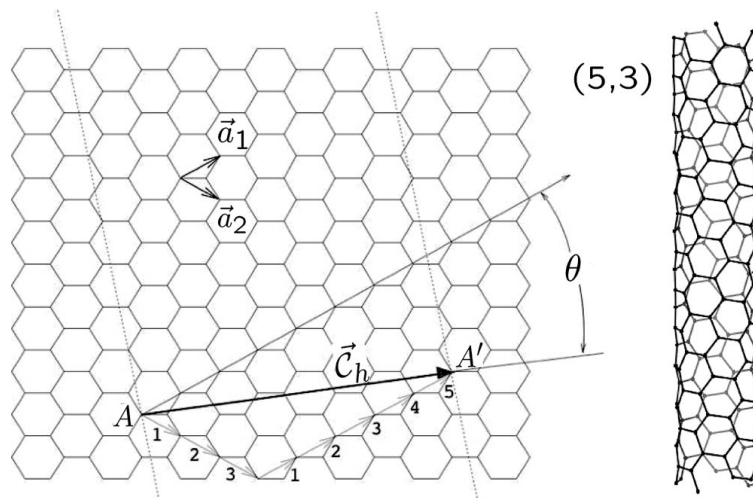
Primitive Gittervektoren für einfache, raumzentrierte und flächenzentrierte kubische Gitter sind gegeben durch

$$A_{sc} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, A_{bcc} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ und } A_{fcc} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

- i. Bestimmen Sie die Winkel zwischen den primitiven Gittervektoren der kubischen Gitter.
- ii. Bestimmen Sie die Volumina der Elementarzellen. Wie viele Gitterpunkte befinden sich im Volumen  $a^3$ ? Wie groß ist der Abstand zu den nächsten und zweitnächsten Nachbarn. Wieviele gibt es davon?
- iii. Bestimmen Sie primitive Gittervektoren der jeweiligen reziproken Gitter durch Lösen des Gleichungssystems  $A^T B = 2\pi E$ . Woher kommt der Name *reziprokes* Gitter? Finden Sie den Gittertyp der reziproken Gitter. Bestimmen Sie die reziproken Gitter der reziproken Gitter.
- iv. Bestimmen Sie die Gitterebenen mit Miller Indizes (100), (110) und (111). Wie dicht liegen die Gitterpunkte auf diesen Ebenen?

#### 2. Nanotubes

Kohlenstoff-Nanoröhrchen kann man sich als aufgerollte Graphen-Lagen vorstellen. Dazu definieren wir einen Vektor  $\mathbf{C}_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ , wobei  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  die in der folgenden Abbildung eingezeichneten primitiven Translationen des Graphen sind. Im Nanoröhrchen sind dann alle Atome der Graphen-Lage, die sich durch ein ganzzahliges Vielfaches von  $\mathbf{C}_h$  unterscheiden, identisch.  $\mathbf{C}_h$ , d.h. die ganzen Zahlen  $(n, m)$  charakterisieren das Nanoröhrchen vollständig.



- i. Bestimmen Sie den Radius eines  $(n, m)$ -Nanoröhrchens.
- ii. Der Winkel zwischen  $\mathbf{C}_h$  und  $\mathbf{a}_1$  heißt *chiraler Winkel*. Bestimmen Sie den chiralen Winkel für ein  $(n, m)$ -Nanoröhrchens. Wie sind die Hexagone entlang des Umfangs eines  $(n, 0)$ - bzw.  $(n, n)$ -Nanoröhrchens orientiert? Weshalb heißen diese Röhrchen achiral?
- iii. Bestimmen Sie den primitiven Translationsvektor  $\mathbf{T}$  entlang eines  $(n, m)$ -Nanoröhrchens. Wieviele Atome liegen in der Einheitszelle?
- iv. Vergleichen Sie  $(n, m)$ - und  $(m, n)$ -Nanoröhrchen.
- v. Berechnen Sie den Radius, Periodizität und Zahl der Atome pro Einheitszelle für ein  $(14, 7)$ - und ein  $(11, 11)$ -Kohlenstoff-Nanoröhrchen. (C=C Bindungslänge 1.42 Å).