

Übungen zur Vorlesung Festkörperphysik WS 07/08

Prof. G. Maret

Blatt 2, Besprechung 8./9.11.07

1. Aufgabe: Hexagonales Raumgitter

Für die primitiven Translationsvektoren des hexagonalen Raumgitters kann man schreiben

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{\mathbf{z}} \quad (1)$$

a) Zeigen Sie, dass das Volumen der primitiven Zelle gleich $\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$ ist.

b) Zeigen Sie, dass

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{\mathbf{x}} + \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{b}_2 = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{\mathbf{x}} + \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\hat{\mathbf{z}} \quad (2)$$

die primitiven Translationen des reziproken Gitters sind, so dass das Gitter nach einer axialen Drehung zu sich selbst reziprok ist.

2. Aufgabe: Volumen der Brillouin Zone

Zeigen Sie, dass das Volumen der ersten Brillouin Zone gleich $(2\pi)^3/V_z$ ist, wobei V_z das Volumen der primitiven Zelle des Kristalls ist. Hinweis: Das Volumen einer Brillouinzone ist gleich dem Volumen des primitiven Parallelepipeds im Fourierraum. Beachten Sie die Vektoridentität $(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = (\mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b})\mathbf{a}$.

3. Aufgabe: Breite des Beugungsmaximums

Wir nehmen an, dass in einem linearen Kristall auf jedem Gitterpunkt $\rho_m = m \cdot \mathbf{a}$ (m ist eine ganze Zahl) ein identisches, punktförmiges Streuzentrum sitzt. Die Gesamtamplitude der Streustrahlung ist proportional zu $F = \sum \exp[-ima \cdot \Delta\mathbf{k}]$. Die Summe über M Gitterpunkte hat den Wert

$$F = \frac{1 - \exp[-iM(\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k})]}{1 - \exp[-i(\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k})]}, \quad (3)$$

unter Verwendung der Reihenentwicklung

$$\sum_{m=0}^{M-1} x^m = \frac{1 - x^M}{1 - x}. \quad (4)$$

a) Die gestreute Intensität ist proportional zu $|F|^2$. Zeigen Sie dass gilt:

$$|F|^2 \equiv F^*F = \frac{\sin^2 \frac{1}{2}M(\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k})}{\sin^2 \frac{1}{2}(\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k})} \quad (5)$$

b) Wir wissen, dass für $\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h$ (h ist eine ganze Zahl) ein Beugungsmaximum erscheint. Wir ändern $\Delta \mathbf{k}$ geringfügig und definieren ein ϵ in $\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h + \epsilon$ derart, dass ϵ den Ort des 1. Nulldurchgangs der Funktion $\sin \frac{1}{2} M(\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k})$ angibt. Zeigen Sie, dass $\epsilon = 2\pi/M$, so dass die Breite des Beugungsmaximums proportional zu $1/M$ ist und dadurch für grosse Werte von M extrem klein werden kann. Das gleiche Ergebnis gilt für einen dreidimensionalen Kristall.

4. Aufgabe: Kristallstruktur Analyse mittels Debye-Scherrer Verfahren

Pulverproben von je einer einatomigen fcc, bcc und Diamant Kristallstruktur (A,B,C) werden mithilfe des Debye-Scherrer Verfahrens auf ihre Kristallstruktur hin untersucht. Nachstehende Tabelle zeigt die Winkel Φ (relativ zum Strahl) unter denen die ersten vier Beugungsringe beobachtbar sind.

A	B	C
42,2°	28,8°	42,8°
49,2°	41,0°	73,2°
72,0°	50,8°	89,0°
87,3°	59,6°	115,0°

- Identifizieren Sie die Kristallstrukturen der Proben A, B und C.
- Bestimmen Sie in jedem Fall die Seitenlänge der konventionellen kubischen Zelle. Die Wellenlänge der einfallenden Röntgenstrahlung sei $\lambda = 0.15$ nm.
- Unter welchen Winkeln würden die ersten vier Beugungsringe erscheinen, wenn man den Kristall mit Diamantstruktur durch einen anderen mit Zinkblendestruktur und einer kubischen Einheitszelle derselben Seitenlänge ersetzen würde.

5. Aufgabe: Strukturfaktor

Berechnen sie den Strukturfaktor $f_c(\mathbf{q}_{hkl})$ für die kubisch-flächenzentrierte Struktur. Für welche Indizes (hkl) findet man Auslöschung der gebeugten Strahlen?