

Übungen zur Einführung in die Festkörperphysik SS15

Vorlesung: Prof. S.F. Fischer; Übungen: Dr. R. Mitdank, D. Kojda, C. Grosse



Aufgaben zur 5. Übung - Besprechung am 20.05. bzw. 22.05.15

17. Auslöschung von Röntgenreflexen in kubischen Substanzen

Der "Strukturfaktor" S_{hkl} eines Gitters liefert Informationen über die Intensität auftretender Reflexe (von Röntgen-, Elektronen- oder Neutronenstrahlen). Für die Intensität I eines Reflexes mit den Indizes (hkl) gilt dabei $I_{hkl} \sim |S_{hkl}|^2$.

Der Strukturfaktor beschreibt die Wirkung von Interferenzen im Innern von Einheitszellen und ist durch

$$S_{hkl} = \sum_j f_j \exp[-2\pi i(h\rho_j + k\sigma_j + l\tau_j)]$$

gegeben. Hierin ist die Position eines Atoms j durch

$$\vec{r}_j = \rho_j \vec{a}_1 + \sigma_j \vec{a}_2 + \tau_j \vec{a}_3$$

beschrieben, während f_j den atomaren Streufaktor von Atomen der Sorte j darstellt.

Den Vektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ entsprechen primitive Translationen des Kristallgitters.

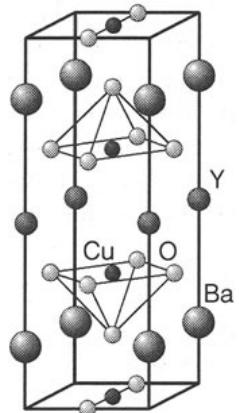
Für welche Werte von $\Sigma = h^2 + k^2 + l^2$ sind im Falle eines primitiv kubischen (sc), eines raumzentriert kubischen (bcc), bzw. eines flächenzentriert kubischen Gitters (fcc) Röntgenreflexe zu erwarten? (Diskutieren Sie die Werte von Σ im Intervall $1 \leq \Sigma \leq 20$.

18. Pulverdiffraktometrie

Der 1987 entdeckte Hochtemperatursupraleiter $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_7$ besitzt eine orthorhombische Einheitszelle (Abb.) mit den Gitterkonstanten $a = 0,383 \text{ nm}$, $b = 0,389 \text{ nm}$ und $c = 1,17 \text{ nm}$.

a) Berechnen Sie aus den Gitterkonstanten und der molaren Masse der Substanz die theoretische Dichte ρ_{th} ("Röntgendichte") eines $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_7$ -Einkristalls. Weshalb liegt die Dichte polykristalliner Sinterproben stets deutlich unterhalb dieses berechneten Wertes?

b) Berechnen Sie die Abstände d_{hkl} von Ebenenscharen mit den Indizes (004) , (005) , (012) , (013) , (102) , (103) , (110) , (111) , (112) und (113) in $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_7$ und daraus mit Hilfe der Braggschen Gleichung erster Ordnung die Beugungswinkel 2θ , unter denen für $\text{Cu}-\text{K}_{\alpha}$ -Strahlung ($\lambda = 0,15406 \text{ nm}$) Beugungsreflexe zu erwarten sind?



19. Orthorhombische Gitter

Wie lauten die Bedingungen für die Nichtauslöschung eines Röntgenreflexes hkl bei einem primitiv orthorhombischen, einem innenzentriert orthorhombischen, sowie einem flächenzentriert orthorhombischen Gitter?

20. Streuung von Elektronenwellen

Der atomare Streufaktor (Atomformfaktor) $f(\Delta\vec{k})$ für die Streuung eines Elektrons an einem Atom ist gegeben durch die Fouriertransformation des Streupotentials $U_{\text{Atom}}(\vec{r})$ des Atoms:

$$f(\Delta\vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{\text{all space}} U_{\text{Atom}}(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3\vec{r},$$

wobei m die Elektronenmasse, $\Delta\vec{k} = \vec{k}_d - \vec{k}_i$ und \vec{k}_d und \vec{k}_i die Wellenvektoren der gestreuten und der eintreffenden Elektronenwelle sind. Für die Streuung von Elektronen an einem Atom sei als Modell das abgeschirmte Coulomb-Potential $U_{\text{Atom}}(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-r/r_0}$ angenommen, wobei r_0 eine Konstante, Z die Ordnungszahl und r der Abstand vom Zentrum des Atoms sind. Bestimmen Sie den Atomformfaktor $f(\Delta\vec{k})$ für dieses Potential.