

# 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

$$S_{hkl} = \sum_j f_j \exp[-2\pi i(h\rho_j + k\sigma_j + l\tau_j)] \text{ gegeben. Hierin ist die Position eines Atoms } j \text{ durch}$$

$\vec{r}_j = \rho_j \vec{a}_1 + \sigma_j \vec{a}_2 + \tau_j \vec{a}_3$  beschrieben, während  $f_j$  den atomaren Streufaktor von Atomen der Sorte  $j$  darstellt.

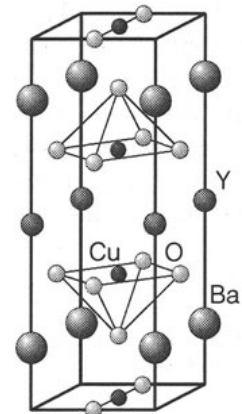
Den Vektoren  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  entsprechen primitive Translationen des Kristallgitters.

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  $\Sigma$  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  $\rho_{\text{th}}$  ("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 Bragg'schen Gleichung erster Ordnung die Beugungswinkel  $2\theta$ , unter denen für  $\text{Cu-K}_\alpha$ -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)  $f(\vec{\Delta k})$  für die Streuung eines Elektrons an einem Atom ist gegeben durch die Fouriertransformation des Streupotentials  $U_{\text{Atom}}(\vec{r})$  des Atoms:

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

wobei  $m$  die Elektronenmasse,  $\vec{\Delta k} = \vec{k}_d - \vec{k}_i$  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  $f(\vec{\Delta k})$  für dieses Potential.