WALTHER–MEIßNER–INSTITUT
Bayerische Akademie der Wissenschaften
Lehrstuhl für Technische Physik E23, Technische Universität München
Prof. Dr. Rudolf Gross, Dr. Stephan Geprägs
Tel.: +49 (0)89 289 14225
E-mail: stephan.gepraegs@wmi.badw.de

03. November 2016

Blatt 3

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I
WS 2016/2017

2 Strukturanalyse

2.1 Reziprokes Gitter eines hexagonalen Raumgitters

Betrachten Sie ein Raumgitter mit hexagonaler Symmetrie (Achsen und Winkel der konventionellen Einheitszelle mit $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| \neq |\mathbf{c}|$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$). Wählen Sie geeignete primitive Gittervektoren mit diesen Eigenschaften (aber $\gamma = 60°$) und benutzen Sie diese, um die primitiven Gittervektoren des reziproken Gitters zu definieren. Es ist geschickt, $\mathbf{a}||\hat{\mathbf{x}}$ und $\mathbf{c}||\hat{\mathbf{z}}$ zu wählen, wobei $\hat{\mathbf{x}}$ und $\hat{\mathbf{z}}$ die Einheitsvektoren in x- und z-Richtung sind. Welche Symmetrie besitzt das reziproke Gitter? Durch welche Symmetrieoperationen kann man das reziproke Gitter wieder in das Raumgitter überführen? Welche Volumina haben die primitive Zellen des Raumgitters und des reziproken Gitters?

2.2 Volumen der Brillouin-Zone

Seien $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ und $\mathbf{a}_3$ die primitiven Vektoren des Bravais-Gitters und $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ und $\mathbf{b}_3$ diejenigen des reziproken Gitters. Zeigen Sie, dass

(a) $\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \dfrac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$

(b) das Volumen der ersten Brillouin-Zone gleich $\dfrac{(2\pi)^3}{V_c}$ ist, wobei V_c das Volumen der primitiven Zelle des Kristalls ist.

2.3 Strukturanalyse – Laue- und Debye-Scherrer-Verfahren

Betrachten Sie die beiden Laue-Aufnahmen in Abbildung 1.

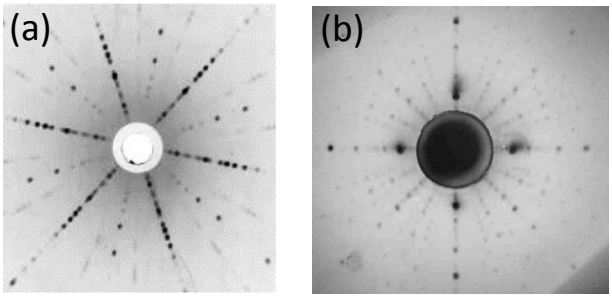

Abbildung 1: Laue-Aufnahmen von zwei Kristallen mit unterschiedlicher Kristallstruktur.

(a) Um welche Kristallstrukturen handelt es sich? Sind eindeutige Aussagen über die Kristallstruktur möglich? Welche Größe muss man neben der Lage der Punkte auswerten, um den Typ das Bravais-Gitters oder die Atompositionen zu bestimmen?

(b) Wie muss das Röntgen-Spektrum für eine Laue- bzw. eine Debye-Scherrer-Aufnahme beschaffen sein?

(c) Skizzieren Sie das Debye-Scherrer-Beugungsbild, das man mit einem ebenen Flächendetektor aufnimmt, der senkrecht zum Röntgen-Strahl steht wie in Abbildung 2 gezeigt ist.

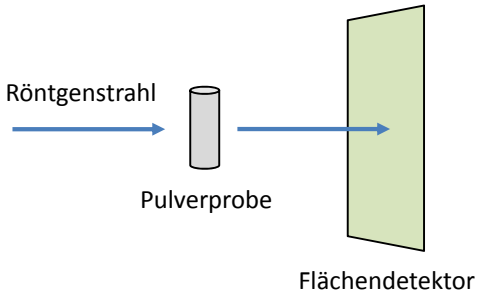

Abbildung 2: Schematische Darstellung der experimentellen Anordnung in einem Debye-Scherrer-Experiment.

(d) Berechnen Sie die relativen Durchmesser von mindestens vier Debye-Scherrer-Ringen für ein Pulver aus einfach kubischen Kristallen und erläutern Sie, von welchen Netzebenen die Ringe kommen.

2.4 Strukturanalyse von Kupfer

Kupfer hat ein kubisch flächenzentriertes Gitter mit einem Atom pro Gitterpunkt.

(a) Bestimmen Sie den Abstand der nächsten Nachbarn in Einheiten der Kantenlänge a der kubischen Einheitszelle.

(b) Der Bragg-Peak 2. Ordnung an der (001)-Ebene unter Verwendung von Cu-K_α-Strahlung ($\lambda = 1.5413$ Å) erscheint bei einem Einfallswinkel von $\theta = 25.24°$. Bestimmen Sie hieraus die Gitterkonstante a von Cu.

(c) Warum tritt der (001)-Reflex 1. Ordnung nicht auf?

(d) Bestimmen Sie die Dichte von Kupfer ρ_{Cu} mit der Atommasse von Kupfer $m_{\mathrm{Cu}} = 63.55\,u$ ($u = 1.660\,538\,782(83) \times 10^{-27}$kg).