

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I WS 2018/2019

2 Strukturanalyse

2.1 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

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

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

2.2 Ebenen und Vektoren im Raumgitter bzw. reziproken Gitter

Beweisen Sie, daß

- (a) Jeder Ebenschar im Raumgitter mit Ebenenabstand d , die alle Punkte des dreidimensionalen Bravais-Gitters enthält, entsprechen zu diesen äquidistanten Ebenen senkrechte Gittervektoren \mathbf{G} des reziproken Gitters, wobei der kürzeste dieser reziproken Gittervektoren die Länge $2\pi/d$ besitzt.
- (b) *Umkehrung*: Zu jedem reziproken Gittervektor \mathbf{G} gehört eine senkrechte auf \mathbf{G} stehende Ebenschar des Raumgitters, deren einzelne Ebenen jeweils den Abstand d haben und alle Punkte des Bravais-Gitters enthalten, wobei $2\pi/d$ die Länge des kürzesten reziproken Gittervektors parallel zu \mathbf{G} ist.

2.3 Reziprokes Gitter eines hexagonalen Raumgitters

Betrachten Sie ein Raumgitter mit hexagonaler Symmetrie (Achsen und Winkel der konventionellen Einheitszelle mit $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| \neq |\mathbf{a}_3|$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$). Wählen Sie geeignete primitive Gittervektoren mit diesen Eigenschaften, wobei \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 einen Winkel von 60° zueinander einschließen. Benutzen Sie diese, um die primitiven Gittervektoren des reziproken Gitters zu definieren. Es ist geschickt, $\mathbf{a}_1 \parallel \hat{\mathbf{e}}_1$ und $\mathbf{a}_3 \parallel \hat{\mathbf{e}}_3$ zu wählen, wobei $\hat{\mathbf{e}}_1$ und $\hat{\mathbf{e}}_3$ die Einheitsvektoren in x- und z-Richtung sind. Welche Translationssymmetrie besitzt das reziproke Gitter? Durch welche Symmetrioperationen kann man das reziproke Gitter wieder in das Raumgitter überführen? Welche Volumina haben die primitive Zellen des Raumgitters und des reziproken Gitters?

2.4 Strukturanalyse – Laue- und Debye-Scherrer-Verfahren

Betrachten Sie die beiden Laue-Aufnahmen in Abbildung 1.

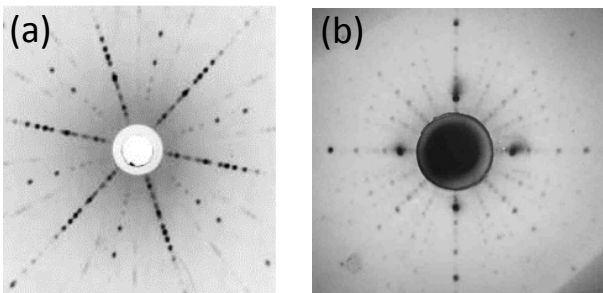


Abbildung 1: Laue-Aufnahmen von zwei Kristallen mit unterschiedlicher Kristallstruktur.

- Wie muss das Röntgen-Spektrum für eine Laue- bzw. eine Debye-Scherrer-Aufnahme beschaffen sein?
- 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 des Bravais-Gitters oder die Atompositionen zu bestimmen?
- 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.

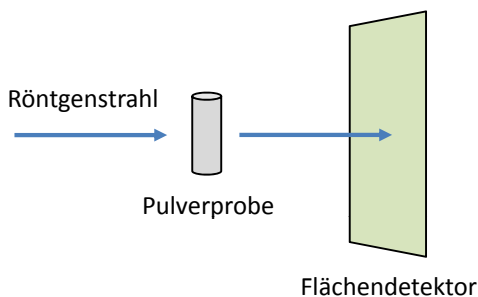


Abbildung 2: Schematische Darstellung der experimentellen Anordnung in einem Debye-Scherrer-Experiment.

- 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.