

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I

WS 2017/2018

2 Strukturanalyse

2.5 Strukturfaktor von CsCl und CsI

CsCl und CsI haben beide eine einfach kubische Struktur. Bei der Röntgenbeugung von CsCl und CsI stellen Sie fest, dass bei CsI der (100) Reflex ausgelöscht ist, während er bei CsCl klar vorhanden ist. Wie kann man dieses experimentelle Ergebnis erklären?

2.6 Strukturfaktor von Diamant

Die Kristallstruktur der Diamantstruktur ist fcc mit einer zweiatomigen Basis. Die konventionelle Zelle der Diamantstruktur enthält insgesamt 8 Atome.

- Bestimmen Sie den Strukturfaktor S_{hkl} der so gewählten Basis.
- Berechnen Sie die Millerschen Indizes, für die eine Auslöschung von Reflexen auftritt.
- Zeigen Sie ferner, dass die erlaubten Beugungsreflexe entweder die Bedingung (i) $h + k + \ell = 4n$ mit $n \in \mathbb{Z}$ erfüllen, wobei alle Indizes *gerade* sind, oder aber die Bedingung (ii) erfüllen, dass alle Indizes *ungerade* sind.
- Was ändert sich, wenn wir von einer Diamant zu einer Zinkblende-Struktur übergehen?

2.7 Ein Debye-Scherrer Experiment

In einem Debye-Scherrer Pulverdiffraktionsexperiment haben wir mit monochromatischer Röntgen-Strahlung drei Proben *A*, *B* und *C* untersucht. Wir wissen schon, dass die drei untersuchten Materialien eine fcc-, bcc- und Diamantstruktur besitzen, wir wissen aber noch nicht, welche Probe welche Struktur hat. Unsere Debye-Scherrer-Aufnahmen der drei Proben zeigen bei folgenden Winkeln Diffraktionsringe:

Probe A	Probe B	Probe C
42.2°	28.8°	42.8°
49.2°	41.0°	73.2°
72.0°	50.8°	89.0°
92.1°	59.6°	115.0°

- (a) Identifizieren Sie die Kristallstrukturen der Proben A, B und C. Nehmen Sie dazu an, dass die beobachteten Röntgenreflexe Beugungsreflexen 1. Ordnung entsprechen.
- (b) Die Wellenlänge der Röntgenstrahlung sei $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$ (Cu-K $_{\alpha}$ -Strahlung). Welche Gitterkonstante a hat die konventionelle kubische Zelle?

2.8 Beugungseffekte an einem eindimensionalen Gitter

Wir betrachten ein eindimensionales Gitter:

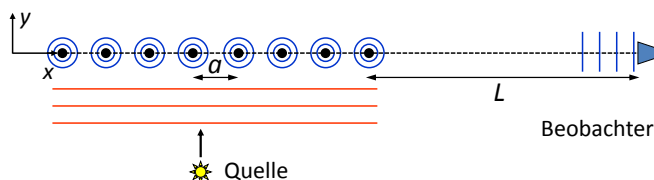


Abbildung 1: Beugung an einem eindimensionalen Gitter von $N \gg 1$ Gitterpunkten an den Positionen $x_n = na$. Hierbei ist n eine ganze Zahl und a die Gitterkonstante.

Wir nehmen nun an, dass auf den Gitterpunkten Atome sitzen, die kohärent von einer ebenen Welle $\Psi_Q = \Psi_{Q,0} e^{i(k_0 y - \omega t)}$ angeregt werden (die Quelle befindet sich in großer Entfernung senkrecht zum eindimensionalen Gitter, so dass sie beim Gitter als ebene Welle approximiert werden kann). Die Atome werden durch die einlaufende Welle angeregt und strahlen nun selbst Kugelwellen ab. Da wir eine kohärente Anregung vorausgesetzt haben, strahlen alle Atome kohärent und ohne Phasenschiebung (alle Atome des Gitters sitzen auf der gleichen Wellenfront der einlaufenden Welle) mit der Frequenz ω ab: $\Psi = \frac{\Psi_0}{r} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$.

- (a) Welche Intensität I wird mit einem Detektor gemessen, der sich weit weg vom Gitter im Abstand L auf der x -Achse befindet? Die am Detektor gemessene Intensität I zeigt als Funktion des Wellenvektors k bzw. der Wellenlänge λ charakteristische Maxima. Wie sieht $I(k)$ aus und für welche k treten Hauptmaxima auf?
- (b) Wie groß ist die detektierte Intensität bei diesen Maxima?
- (c) Wie groß ist die Halbwertsbreite der Maxima?
- (d) Wie groß ist der Wert der über k integrierten Intensität für verschiedene N ?

2.9 Atomformfaktor von atomarem Wasserstoff

Für das Wasserstoffatom ist im Grundzustand die Elektronendichte durch $\rho_H(r) = |\Psi_{100}(r)|^2 = e^{-2r/a_B} / \pi a_B^3$ mit a_B dem Bohrsche Radius gegeben. Zeigen Sie, dass der atomare Formfaktor $f(\mathbf{q})$ durch

$$f(\mathbf{q}) = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{q a_B}{2}\right)^2\right]^2}$$

gegeben ist, wobei $\mathbf{q} = \Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ der Streuvektor ist.