Struktur der Materie - Festkörperphysik
Übungsblatt 2

Besprechung am Do. 28. Nov. 2013

Aufgabe 1.4: Netzebenen und Millerindizes

vom Übungsblatt zum 21.11.

a) Bestimmen Sie die Millerindizes für die in Abbildung 1 a) gezeigten Richtungen A - F.
Lösung: A:(1 0 0) B: (1 1 0) C: (1 1 1) D: (1 0 $\frac{1}{2}$) E: (0 $\bar{1}$ 0) F: ($\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 1)

b) Bestimmen Sie die Millerindizes für die vier in Abbildung 1 b) gezeigten Ebenen. Der Ursprung ist rot markiert.
Lösung: i) (0 0 $\bar{1}$) ii) (0 1 $\bar{1}$) iii) (2 0 1) iv) (2 1 2)

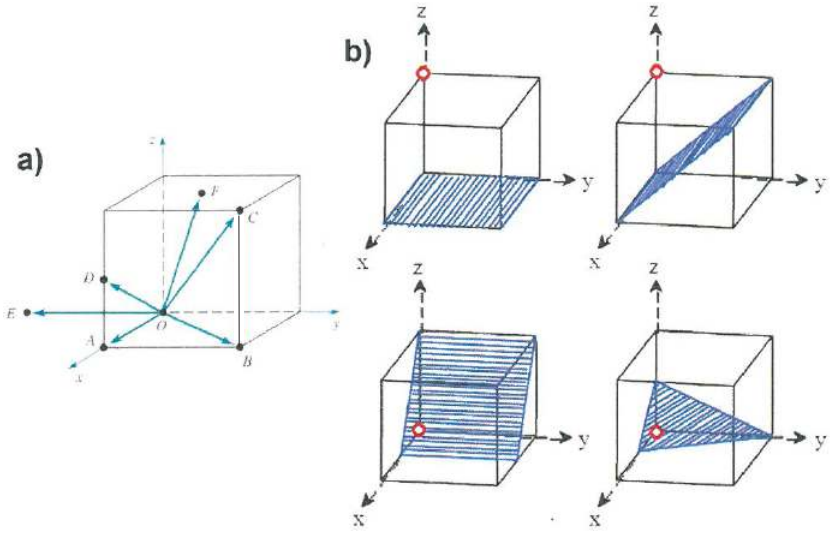

Abbildung 1: a) Kristallrichtungen und b) Netzebenen zu Aufgabe 1.4.

Aufgabe 2.1: Lennard-Jones-Potenzial

Berechnen Sie den Gleichgewichtsabstand und die Bindungsenergie von Ne ($\sigma = 2.79$ Å, $\varepsilon = 3.1$ meV) für die fcc- und die bcc-Struktur. In welcher Struktur kristallisiert Ne demnach?
Lösung: Kittel Kap. 3 ; bcc: Gittersummen 12.2533, 9.11418 $\Rightarrow$ $R_0 = 2.98$ Å, $\sigma/R_0 = 1.07$, $E_{\text{bcc}} = -25.5$ meV
fcc: $R_0 = 3.04$ Å, $\sigma/R_0 = 1.09$, $E_{\text{fcc}} = -26.7$ meV

Aufgabe 2.2: Ionenkristalle

LiCl kristallisiert in fcc-Struktur. Experimentell findet man den Gleichgewichtsabstand zwischen nächsten Nachbarn $R_0 = 2,570$ Å und die Bindungsenergie pro Ionenpaar $E_{\text{B}} = 8,85$ eV.

Berechnen Sie daraus die Materialkonstanten ρ und λ, mit denen der repulsive Anteil des Gitterpotenzials beschrieben wird.
Lösung: Kittel Kap. 3; $\rho = 0.250$ Å, $\lambda = 4560$ eV

Aufgabe 2.3: Reziprokes Gitter

Berechnen Sie die Basisvektoren des reziproken Gitters zur einfach kubischen, fcc- und bcc-Struktur. Was fällt Ihnen auf?
Lösung:
$\mathbf{b}_i = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{\det|\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3|}$ für alle zykl. Permutation (i, j, k) der Indizes (1,2,3)
Volumen der prim. Zelle $\det|\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3|$ s. Aufgabe 1.2
primitive Basis sc:

$$a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ reziproke Basis:

$$\frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

primitive Basis bcc:

$$\frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ reziproke Basis:

$$\frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

primitive Basis fcc:

$$\frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ reziproke Basis:

$$\frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

sc$\rightarrow$sc, bcc$\rightarrow$fcc, fcc$\rightarrow$bcc

Aufgabe 2.4: Röntgenstrukturbestimmung

Ein einfach kubischer Kristall mit Gitterkonstante $a = 3,83$ Å wird mit dem Debye-Scherrer-Verfahren untersucht, als Quelle dient Cu $K_\alpha = 1,541$ Å. Bestimmen Sie für folgende Reflexe den Bragg-Winkel und den Netzebenenabstand:

- (100)
- (110)
- (111)
- (034).

Lösung: $2d \sin\vartheta = \lambda \Rightarrow \sin\vartheta = \frac{\lambda}{2d}$
Abstände der Ebenen im reziproken Raum: $\left(\frac{1}{d_{hkl}}\right)^2 = \left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2$, hier $a = b = c$ (kubisch!)

- $d_{(100)} = a \Rightarrow \vartheta_{(100)} = 11,6°$
- $d_{(110)} = a/\sqrt{2} \Rightarrow \vartheta_{(110)} = 16,5°$
- $d_{(111)} = a/\sqrt{3} \Rightarrow \vartheta_{(111)} = 20,4°$
- $d_{(34)} = 5a \Rightarrow \sin\vartheta_{(034)} > 1$, kein Reflex!

Aufgabe 2.5: Strukturfaktoren

Berechnen Sie den Strukturfaktor für das NaCl-Kristallgitter. Wie unterscheidet sich das Beugungsmuster von dem eines einatomigen Kristalls mit sc bzw. fcc Struktur bei gleicher Gitterkonstante (vgl. Vorlesung)?
Lösung: $S_\mathrm{G} = \sum_j f_j \exp(-2\pi i\,(hx_j + ky_j + lz_j))$, verwende pseudokubische Basis
Na-Plätze: (normales fcc)

$$(0,0,0)$$
$$\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$$
$$\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$$
$$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$$

Cl-Plätze: (fcc + $\left(\frac{1}{2},0,0\right)$)

$$\left(\frac{1}{2},0,0\right)$$
$$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$$
$$\left(1,0,\frac{1}{2}\right)$$
$$\left(1,\frac{1}{2},0\right)$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow S_{\mathrm{NaCl}} &= f_{\mathrm{Na}}\left(1+(-1)^{k+l}+(-1)^{h+l}+(-1)^{h+k}\right) \\
&\quad + f_{\mathrm{Cl}}\left((-1)^{h}+(-1)^{h+k+l}+(-1)^{l}+(-1)^{k}\right) \\
&= \begin{array}{ll} 4(f_{\mathrm{Na}}+f_{\mathrm{Cl}}) & h,k,l \text{ gerade} \\ 4(f_{\mathrm{Na}}-f_{\mathrm{Cl}}) & h,k,l \text{ ungerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{array}
\end{aligned}
$$

Zum Vergleich: fcc (einatomig) $\rightarrow$ dieselben Reflexe wie NaCl, aber alle gleich stark; sc (einatomig) $\rightarrow$ **alle** Reflexe gleich, unabh. von h, k, l.