

4. Übungsblatt zur Einführung in die Festkörperphysik

Ausgabe: 01.11.2021

Wintersemester 2021/22

Abgabe: 08.11.2021, 08:15 im Moodle

Prof. Dr. D. Suter

Aufgabe 1: Auslöschungsgesetze für Röntgenreflexe (6 Punkte)

Der Strukturfaktor F_{hkl} eines Gitters liefert Informationen über die Intensität der in Beugungsexperimenten auftretenden Reflexe. Für die Intensität eines Reflexes (hkl) gilt dabei $I_{hkl} \propto |F_{hkl}|^2$. Der Strukturfaktor ist gegeben durch

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \exp \left(2\pi i \left(h\rho_j + k\sigma_j + l\tau_j \right) \right)$$

mit dem atomaren Streufaktor f_j (auch Formfaktor) der Atome j in einer Einheitszelle. Die Position eines Atoms j in einer Einheitszelle wird durch den Vektor $\vec{r}_j = \rho_j \vec{a}_1 + \sigma_j \vec{a}_2 + \tau_j \vec{a}_3$ mit den primitiven Translationen \vec{a}_i eines dreidimensionalen Kristallgitters beschrieben.

- Wie lauten die Bedingungen für die Nichtauslöschung eines Röntgenreflexes mit den Indizes (hkl) bei einem kubisch primitiven (sc), einem kubisch raumzentrierten (bcc), sowie einem kubisch flächenzentrierten (fcc) Gitter? Gehen Sie in allen Fällen von nur einer Atomsorte aus.
- Gelten Die Auslöschungsgesetze aus a) auch dann, wenn die benachbarte Struktur aus Atomen verschiedener Sorten zusammengesetzt ist? Vergleichen Sie hierzu die Auslöschungsgesetze von Elementen, welche in einem bcc- bzw. fcc-Gitter kristallisieren mit denjenigen, welche für chemische Verbindungen mit Cäsiumchlorid- bzw. Natriumchloridstrukturen zu erwarten sind.

Aufgabe 2: Atomformfaktor von atomarem Wasserstoff (4 Punkte)

Der atomare Formfaktor $f(\vec{q})$ ist definiert als die Fourier-Transformierte der Elektronendichte $\rho(\vec{r})$:

$$f(\vec{q}) = \int d^3r \rho(\vec{r}) \exp(-i\vec{q}\vec{r})$$

Für das Wasserstoffatom ist im Grundzustand die Elektronendichte durch $\rho_H(r) = |\Psi_{100}|^2 = \frac{1}{\pi a_B^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_B}\right)$, wobei a_B der Bohrsche Radius ist, gegeben. Zeigen Sie, dass entsprechend der atomare Formfaktor für Wasserstoff $f_H(\vec{q})$ durch

$$f_H(\vec{q}) = \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{qa_B}{2}\right)^2\right)^2}$$

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

Hinweis: Ein Integral der Form $\int dx x \sin(bx) \exp(-ax)$ lässt sich nur umständlich analytisch lösen und darf nachgeschlagen werden.

Aufgabe 3: Formfaktor von Fullerenen (6 Punkte)

Das Molekül C_{70} hat das Aussehen eines Rugby-Balls und gehört zur Gruppe der Fullerene. In dieser Aufgabe soll das Molekül vereinfachend von sphärischer Gestalt sein. C_{70} kann in einer fcc-Struktur mit einer Gitterkonstante $a = 15.01 \text{ \AA}$ kristallisieren. Aus röntgendiffraktometrischen Messungen ist bekannt, dass der (115)-Reflex schwach ist. Nehmen Sie in dieser Aufgabe an, dass die Ladung gleichmäßig an der Oberfläche der Kugel verteilt ist. Der Radius der C_{70} -Kugel beträgt $R = 4.0 \text{ \AA}$.

- Die Ladungsverteilung auf dem Molekül kann folgendermaßen beschrieben werden: $q(r) = \delta(r - R) \cdot q_0$. Berechnen Sie den Faktor q_0 unter Berücksichtigung, dass jedes Kohlenstoffatom sechs Elektronen in der Hülle besitzt.
- Berechnen Sie den Formfaktor des C_{70} -Moleküls.
- Berechnen und vergleichen Sie die Strukturfaktoren für den (115) und (103)-Reflex.

Aufgabe 4: Strukturanalyse mit Debye-Scherrer (5 Punkte)

In dieser Aufgabe soll die Struktur dreier Pulverproben A, B und C mit Hilfe des Debye-Scherrer-Experiments analysiert werden. Eine schematische Zeichnung des Versuchsaufbaus ist in Abbildung 1 gegeben.

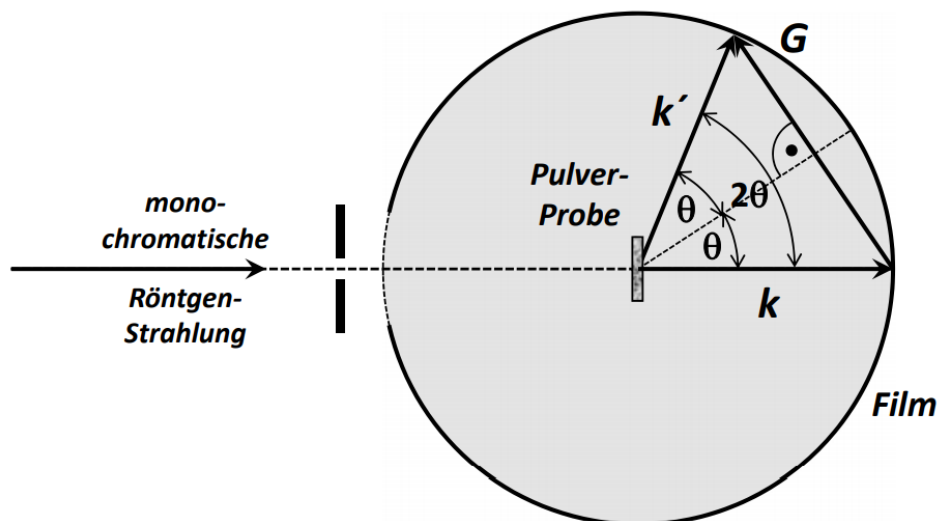


Abbildung 1: Schematischer Aufbau eines Debye-Scherrer-Experiments

Die drei Proben werden mit monochromatischer $\text{Cu-K}\alpha$ -Röntgenstrahlung der Wellenlänge $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$ bestrahlt und auf einem Schirm, der die Probe umgibt, zeigen sich Diffraktionsringe bei bestimmten Winkeln, welche in Tabelle 1 gegeben sind.

- Handelt es sich bei einer oder mehreren der Proben um amorphe Substanzen? Begründen Sie ihre Antwort.

Probe A	Probe B	Probe C
42.2°	28.8°	42.8°
49.2°	41.0°	73.2°
72.0°	50.8°	89.0°
87.3°	59.6°	115.0°

Tabelle 1: Position der Diffraktionsringe eines Debye-Scherrer-Experiments für drei unterschiedliche Proben A, B und C.

- b) Zeigen Sie, dass eine der Proben ein kubisch-flächenzentriertes Gitter und eine andere eine Diamantstruktur besitzt. Nehmen Sie an, dass es sich bei den Röntgenreflexen um Reflexe erster Ordnung handelt.
- c) Berechnen Sie für Probe B den Abstand der Netzebenen von denen die Beugungsreflexe stammen.