

5. Übung zur Struktur der Materie WS 2018/19

Ausgabe: 09.11.2018
Abgabe: bis 16.11.2018 12:00 Uhr

Prof. Dr. D. Suter
Dr. J. Weingarten

Aufgabe 1: Reziprokes Gitter

6 Punkte

Das reziproke Gitter als Fourierraum zum Kristallgitter ist ein zentrales Konzept in der Festkörperphysik.

- a) Erklären Sie kurz das Konzept des reziproken Gitters. Klären Sie dabei:
- wie Sie die reziproken Gittervektoren aus dem direkten Gitter erhalten und in welcher Relation diese aufeinander stehen,
 - welche Dimension die reziproken Gittervektoren haben und
 - wozu das reziproke Gitter nützlich ist.
- b) Bestimmen Sie die reziproken Gittervektoren eines
- sc-Gitters
 - bcc-Gitters
 - fcc-Gitters

und geben Sie jeweils den erhaltenen Gittertyp und die neuen Gitterkonstanten an.

Aufgabe 2: Reziprokes Gitter und Volumina des hexagonalen Bravais-Gitters

8 Punkte

- a) Zeigen Sie, dass die Volumina des Bravais-Gitters (primitive Gittervektoren \vec{a}_i) und des reziproken Gitters (primitive Gittervektoren \vec{b}_i) über die Beziehung

$$\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (1)$$

verknüpft sind.

- b) Geben Sie die Gittervektoren des hexagonalen Bravais-Gitters an. Die Gitterkonstanten seien a und c . Bestimmen Sie das Volumen im Bravais-Gitter und im reziproken Gitter.
Hinweis: Es ist zweckmäßig, einen Gittervektor parallel zur x - und einen parallel zur z -Achse zu wählen.
- c) Bestimmen Sie die reziproken Gittervektoren, welchen Gittertyp erhalten Sie, welche Gitterkonstanten ergeben sich?

Aufgabe 3: Reflexion an Ewald-Konstruktion

6 Punkte

Weißes Röntgenlicht fällt in $[100]$ -Richtung auf einen einfach-kubischen Kristall mit einatomiger Basis und der Gitterkonstante $a = 0,5 \text{ nm}$. Untersuchen Sie die Reflexion 1. Ordnung an einer (120) -Netzebene.

- Geben Sie zunächst den zugehörigen reziproken Gittervektor \vec{G}_{120} an und berechnen Sie den Abstand d_{120} der (120) -Ebene.
- Zeichnen Sie in ein rechtwinkliges Koordinatensystem die (120) -Netzebene ein und konstruieren Sie den reflektierten Strahl. Bestimmen Sie aus der Zeichnung die Wellenlänge λ der zugehörigen Welle.

Allgemein wird eine Ewald-Kugel wie folgt gebildet:

Von einem beliebigen Gitterpunkt des reziproken Gitters als Koordinatenursprung des reziproken Raumes trägt man den einlaufenden Wellenzahlektor $-\vec{k}_0$ ab. Den Endpunkt dieses Vektors wählt man als Mittelpunkt einer Kugel mit Radius k . Ein Beugungsreflex tritt immer dann auf, wenn auf der Ewaldschen Kugel ein Gitterpunkt des reziproken Gitters liegt. Der gebeugte Strahl weist in diesem Fall in die Richtung von \vec{k} .

Hinweis: Denken Sie daran, dass Sie die Konstruktion im reziproken Raum ausführen. Wählen Sie einen geeigneten Achsenmaßstab und tragen Sie ihn in die Zeichnung ein. (Wenn Sie den Achsenmaßstab zweckmäßig wählen, gibt es fast nichts zu rechnen.) Alternativ können Sie die Wellenlänge auch rein rechnerisch bestimmen.