Goethe-Universität Frankfurt
Fachbereich Physik

Lehrende: Prof. Dr. Roser Valentí, Raum 01.130
Übungsgruppenleitung: Karim Zantout, Room 01.142

Frankfurt, 25.10.2019

Einführung in die Theoretische Festkörperphysik

Wintersemester 2019/20

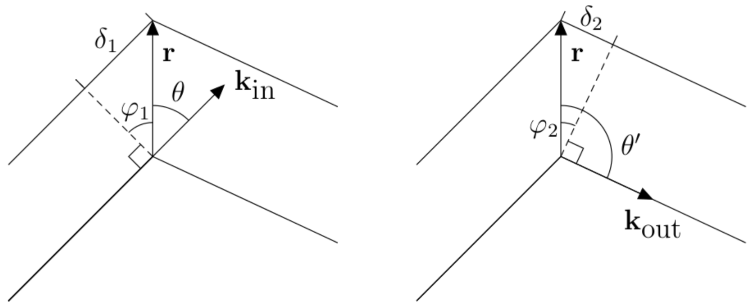
Blatt 2

(Abgabe: 04.11.2019)

Aufgabe 1 (**Berechnung des Strukturfaktors**) (5 Punkte)

Röntgenstrahlen treffen auf einen Kristall. Die gestreuten Strahlen werden auf einem Detektor aufgefangen. Da die Röntgenstrahlen an verschiedenen Punkten der Probe gestreut wurden, bildet sich auf dem Detektor ein Interferenzmuster, das den unterschiedlichen zurückgelegten Weglängen entspricht.

a) Berechnen Sie die Phasendifferenz zwischen zwei Wellen, die jeweils am Koordinatenursprung und an einem Punkt $\vec{r}$ gestreut werden. Verwenden Sie die in der unten gezeigten Figur angegebenen Größen.



b) Die Streuamplitude $F(\vec{K})$ nach einem einzelnen Streuereignis (Mehrfachstreuung der Einfachheit halber vernachlässigt) erhält man als Integral der Dichte multipliziert mit der Phasendifferenz über das Volumen der Probe. Zeigen Sie, dass man die Streuamplitude als

$$F(\vec{K}) = NS(\vec{K}) \tag{1}$$

schreiben kann. Hierbei ist N die Anzahl der Einheitszellen in der Probe,

$$S(\vec{K}) = \sum_{j=1}^{n_{\text{atom}}} f_j e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_j} \tag{2}$$

der sogenannte Strukturfaktor, n_{atom} die Anzahl der Atome in der atomaren Basis und

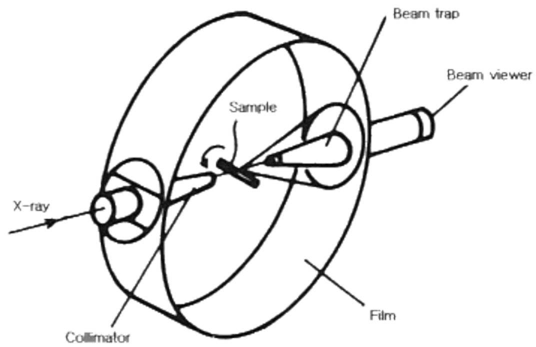
$$f_j = \int_V d^3r\, n_j(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}} \tag{3}$$

der atomare Formfaktor des j-ten Atoms mit Position $\vec{r}_j$.

c) Berechnen Sie den Strukturfaktor für ein einfach kubisches Gitter (sc), ein raumzentriertes kubisches Gitter (bcc), ein flächenzentriertes kubisches Gitter (fcc) und für die Zinkblendestruktur. Nehmen Sie an, dass die jeweiligen Kristalle aus einer einzigen atomaren Spezies bestehen. Betrachten Sie alle Strukturen als einfach kubisches Gitter mit entsprechender Basis. Wann verschwindet der Strukturfaktor?

Aufgabe 2 (**Debye-Scherrer-Methode**) (5 Punkte)

Die Figur zeigt den experimentellen Aufbau eines Experiments nach dem Debye-Scherrer-Verfahren. Photonen werden hierbei an einer polykristallinen Probe gestreut und das resultierende Beugungsmuster mit einem Film erfasst.



In einem Debye-Scherrer-Versuch an einem kubischen Kristall werden Ringe mit folgenden Winkeln gefunden: $2\theta_i = \{42.8°, 73.2°, 89.0°, 115.0°\}$. Dabei ist 2θ der Winkel zwischen Einfalls- und Austrittsrichtung und i die Nummer des Beugungsrings.

a) Geben Sie einen expliziten Ausdruck für den Betrag eines reziproken Gittervektors, $\vec{K} = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3$, eines einfach kubischen Bravais-Gitters an. Die Koeffizienten n_j sind dabei ganzzahlig und $\vec{b}_j$ sind die Basisvektoren des reziproken Gitters. Es sei a die Gitterkonstante.

b) Geben Sie ausgehend von der Laue-Streubedingung einen Ausdruck für $\sin(\theta_i)$ als Funktion des sogenannten Reflexindex $N = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ an. Zu jedem Winkel $2\theta_i$ gehört ein solcher Index N_i. Bestimmen Sie N_1, welches zum Beugunsring mit kleinstem Winkel gehört, sodass alle N_i ganzzahlig sind.

c) Welche kubische Struktur ist mit den experimentell ermittelten Daten kompatibel, falls die Probe aus einer einzelnen atomaren Spezies besteht? Greifen Sie auf die in Aufgabe 3.1 gewonnenen Erkenntnisse zurück und begründen Sie Ihre Aussage.