Physik der Materie II

FSU Jena - SS 2008

Übungsserie 03 - Lösungen

Stilianos Louca

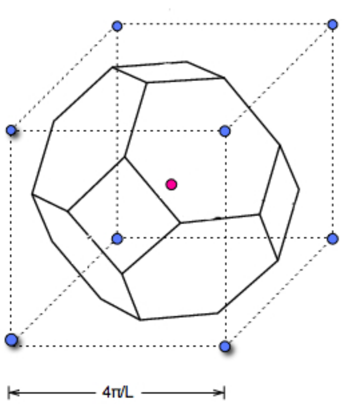
6. Juni 2008

Aufgabe 01

Sei L die Länge der Würfelkante des kubisch Flächenzentrierten Gitters $\mathcal{G}$. Aus Übungsserie 02 wissen wir: das reziproke Gitter $\mathcal{G}_r$ eines kubisch flächenzentrierten Raumgitters ist ein kubisch Raumzentriertes Gitter mit der Kantenlänge $L_r := \frac{4\pi}{L}$. Die reziproken Basisvektoren waren gegeben durch

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{L}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \ , \ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{L}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \ , \ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{L}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

so dass sich die folgende Brillouin Zone ergibt:



a) Ein parallel zur Würfelkante (vom Zentrum ausgehend) liegender Wellenvektor trifft zum ersten Mal auf eine Bragg-Ebene (Zonen-Grenze) wenn seine Länge der halben Würfelbreite entspricht:

$$|k| = \frac{L_r}{2} = \frac{2\pi}{L}$$

b) Ein parallel zu einer Raumdiagonalen liegender Wellenvektor trifft zum ersten Mal auf eine der *schief-liegenden* Bragg-Ebenen (vgl. Bild), so dass sich seine Länge als 1 Viertel der Raumdiagonalenlänge ergibt, das heißt

$$|k| = \frac{\sqrt{3}L_r}{4} = \frac{\sqrt{3}\pi}{L}$$

Aufgabe 02

a) Bei einem Einfallswinkel ϑ auf eine Netzebenen-Schar mit dem Netzebenen-Abstand d tritt genau dann eine Braggsche Reflexion k-ter Ordnung auf, wenn $2d\sin\vartheta = k\lambda$ ist. Für $k=1$ ist dies prinzipiell nur dann möglich wenn $2d \geq \lambda$ ist, das heißt in unserem Fall

$$d \geq \frac{\lambda}{2} = 0.135\ nm$$

b) Betrachten die primitiven Translationsvektoren

$$\vec{a}_i := a \cdot \vec{e}_i$$

und die dazugehörigen reziproken Vektoren

$$\vec{b}_i = \frac{2\pi}{a\vec{e}_1 \cdot (a\vec{e}_2 \times a\vec{e}_3)} \cdot a^2 \vec{e}_i = \frac{2\pi}{a} \cdot \vec{e}_i \quad , \quad \text{Bemerke: } \vec{e}_1 = \vec{e}_2 \times \vec{e}_3 \text{ usw.}$$

Dann ist der Netzebenen-Abstand d_{hkl} der Schar (hkl) gegeben durch

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\left|h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3\right|} = \frac{a}{|h\vec{e}_1 + k\vec{e}_2 + l\vec{e}_3|} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

Es treten grundsätzlich nur die Reflexe auf, für die gilt $2d_{hkl}\sin\vartheta = k\lambda$. Die maximale Reflexionsordnung $k_{\max}$ ist dann für eine bestimmte Schar (hkl) gegeben durch

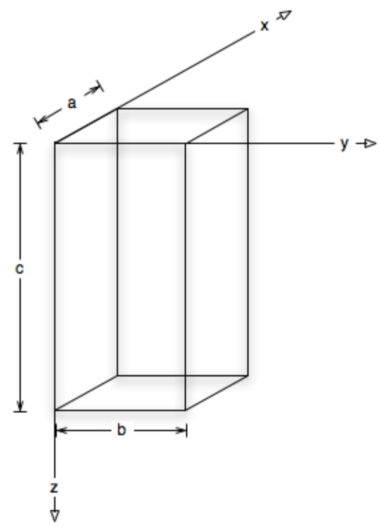
$$k_{\max} = \left\lfloor \frac{2d_{hkl}}{\lambda} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{2a}{\lambda\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \right\rfloor$$

Speziell in unserem Fall, ist $k_{\max} = \left\lfloor \frac{2.474}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \right\rfloor$. Unterscheiden für $h \geq k \geq l \geq 0$ die Fälle:

- $h=1,\ k=l=0$. Dann ist $k_{\max} = \lfloor 2.474 \rfloor = 2$. Es können also Reflexionen 1. und 2. Ordnung auftreten.
- $h=k=1,\ l=0$. Dann ist $k_{\max} = \lfloor 1.75 \rfloor = 1$. Es kann nur Reflexion 1. Ordnung auftreten.
- $h=k=l=1$. Dann ist $k_{\max} = \lfloor 1.43 \rfloor = 1$. Es kann nur Reflexion 1. Ordnung auftreten.
- $h=2,\ k=l=0$. Dann ist $k_{\max} = \lfloor 1.24 \rfloor = 1$. Es kann nur Reflexion 1. Ordnung auftreten.
- $h=2,\ k=1,\ l=0$. Dann ist $k_{\max} = \lfloor 1.11 \rfloor = 1$. Es kann nur Reflexion 1. Ordnung auftreten.
- $h=2,\ k=l=1$. Dann ist $k_{\max} = \lfloor 1.01 \rfloor = 1$. Es kann nur Reflexion 1. Ordnung auftreten.
- Restlichen Fälle: $h \geq k \geq 2,\ l \geq 0$. Dann ist $\frac{2.474}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} < 1$, so dass keine Reflexe auftreten können.

Aufgabe 03

Setzen den Koordinatenursprung in die obere Kante:



so dass die Einheitsvektoren gegeben sind durch

$$\vec{a}_1 = a\vec{e}_1 \ , \ \vec{a}_2 = b\vec{e}_2 \ , \ \vec{a}_3 = c\vec{e}_3$$

Das Volumen der Einheitszelle ergibt sich demnach als

$$V_e = \vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_2 \times \vec{e}_3) = abc$$

so dass sich die reziproken Gittervektoren ergeben als

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_e}\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot \vec{e}_1 \ , \ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_e}\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{2\pi}{b} \cdot \vec{e}_2 \ , \ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_e}\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{c} \cdot \vec{e}_3$$

a) Der Netzebenen-Abstand einer Schar (h, k, l) ist gegeben durch

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\left|h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3\right|} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

Der einer Reflexion n-ter Ordnung entsprechende Glanzwinkel 2ϑ ist entsprechend gegeben durch

$$\vartheta = \arcsin\left(\frac{n\lambda}{2d_{hkl}}\right)$$

so dass sich speziell in unserem Fall ergibt:

$$d_{004} = \frac{c}{4} \approx 0.293 \ nm \ \longrightarrow \ \vartheta \in \{15.24°, 31.72°, 52.06°\}$$

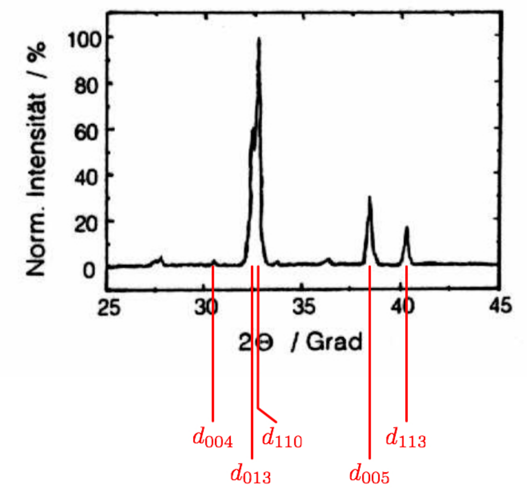
$$d_{005} = \frac{c}{5} \approx 0.234 \ nm \ \longrightarrow \ \vartheta \in \{19.22°, 41.18°, 80.95°\}$$

$$d_{013} \approx 0.275 \ nm \ \longrightarrow \ \vartheta \in \{16.24°, 34.01°, 57.05°\}$$

$$d_{110} \approx 0.273 \ nm \ \longrightarrow \ \vartheta \in \{16.40°, 34.37°, 57.86°\}$$

$$d_{113} \approx 0.224 \ nm \ \longrightarrow \ \vartheta \in \{20.15°, 43.55°\}$$

b) Die entsprechenden Ebenenscharen sind in unterer Intensitäts-Aufnahme eingezeichnet:



c) Suchen zur Ebene (hkl) solch eine Ebene (h'k'l') und Beugungsordnung $n \geq 2$ so dass der Reflex 1. Ordnung an (hkl) und der Reflex n-ter Ordnung an (h'k'l') gleiche Winkel aufweisen, also:

$$\frac{n}{d_{h'k'l'}} \stackrel{!}{=} \frac{1}{d_{hkl}} \ \longrightarrow \ \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}} \stackrel{!}{=} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{nh'}{a}\right)^2 + \left(\frac{nk'}{b}\right)^2 + \left(\frac{nl'}{c}\right)^2}}$$

Es ist z.B. $d_{002} = 0.585\ nm$ so dass sich ein Reflexionswinkel 2. Ordnung $\vartheta_2 = 15.23°$ ergibt. Dieser wäre nicht zu unterscheiden vom Reflexionswinkel 1. Ordnung von (004). Analog würde auch die Ebene (001) ein Reflexionsmaximum 5. Ordnung bei $19.22°$ aufweisen, was identisch mit dem Reflex 1. Ordnung der (005) Ebene wäre.