

Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

2. Beugungsmethoden und reziprokes Gitter

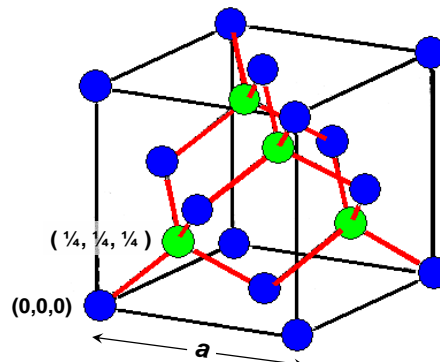
2.7 Strukturamplitude von CsCl und CsI

CsCl und CsI haben beide eine einfach kubische Struktur. Bei der Röntgenbeugung von CsCl und CsI stellen Sie fest, dass bei CsI der (100) Reflex ausgelöscht ist, während er bei CsCl klar vorhanden ist. Wie kann man dieses experimentelle Ergebnis erklären?

2.8 Strukturamplitude von Diamant

Als konventionelle Zelle für die Diamantstruktur benutzt man üblicherweise einen Würfel (siehe Abbildung). Die konventionelle Zelle enthält dann insgesamt 8 Atome. Die Kristallstruktur ist fcc mit einer zweiatomigen Basis.

1. Bestimmen Sie den Strukturfaktor S_{hkl} der so gewählten Basis.
2. Berechnen Sie die Millerschen Indizes, für die eine Auslöschung von Reflexen auftritt. Zeigen Sie ferner, dass die erlaubten Beugungsreflexe entweder die Bedingung (i) $h+k+l = 4n$ mit $n \in \mathbb{Z}$ erfüllen, wobei alle Indizes *gerade* sind, oder aber die Bedingung (ii) erfüllen, dass alle Indizes *ungerade* sind.



2.9 Atomformfaktor von atomarem Wasserstoff

Für das Wasserstoffatom ist im Grundzustand die Elektronendichte durch $\rho_H(r) = |\psi_{100}(r)|^2 = e^{-2r/a_0}/\pi a_0^3$ gegeben. Hierbei ist a_0 der Bohrsche Radius. Zeigen Sie, dass der atomare Formfaktor $f(\mathbf{q})$ durch

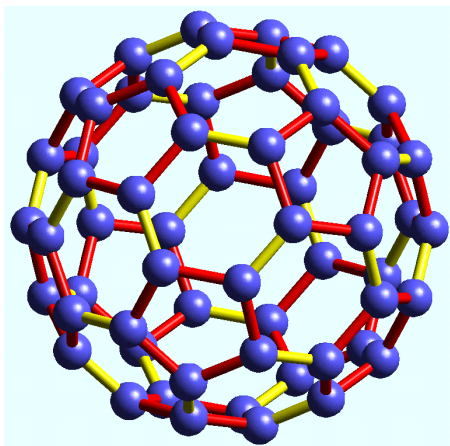
$$f(\mathbf{q}) = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{qa_0}{2}\right)^2\right]^2}$$

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

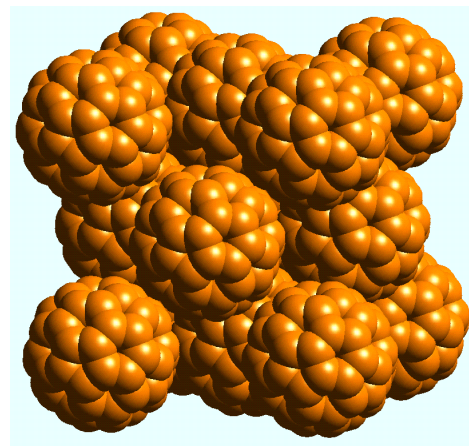
2.10 Formfaktor von Fullerenen

Die Moleküle der Zusammensetzung C_{60} bezeichnet man als Fullerene. Durch Einbringen von anderen Atomen D in den Käfig der Kohlenstoffatome erhält man Moleküle der Form D_xC_{60} . Da die Form der C_{60} -Moleküle derjenigen eines Fußballs ähnlich ist, werden sie auch als Fußballmoleküle bezeichnet (siehe Abbildung). Mit diesen Fußballmolekülen können wir einen Festkörper aufbauen, z.B. einen fcc-Kristall. Interessanterweise wurde in einem aus D_xC_{60} Molekülen aufgebauten Festkörper zum ersten Mal in einer organischen Verbindung Supraleitung gefunden, was einen beträchtlichen Boom in der Forschung an dieser Stoffgruppe ausgelöst hat. Der Festkörper besitzt die fcc-Struktur mit einem Gitterabstand $a = 14.11 \text{ \AA}$. In röntgendiffraktometrischen Messungen zeigte sich, dass der (200) Reflex sehr schwach ist. Zur Analyse wollen wir annehmen, dass die Ladung auf der Oberfläche des Fußballs verteilt ist, wobei der Radius des Fußballs $R = 3.5 \text{ \AA}$ beträgt. Berechnen Sie mit diesen Angaben den Formfaktor des C_{60} -Moleküls. Wie sieht die Intensität des (111) Reflexes aus?

Starthinweis: Die Ladungsverteilung auf dem Molekül kann man mit der Delta-Funktion beschreiben: $q(\mathbf{r}) = \delta(r - R) \cdot q_0$. Den Faktor q_0 kann man ausrechnen, wenn man berücksichtigt, dass jedes Kohlenstoffatom 6 Ladungen besitzt.



C60-Molekül



fcc-Kristall aus C60-Molekülen

Lösungen der Übungsaufgaben zur

Festkörperphysik I, WS 2010/2011

2. Beugungsmethoden und reziprokes Gitter

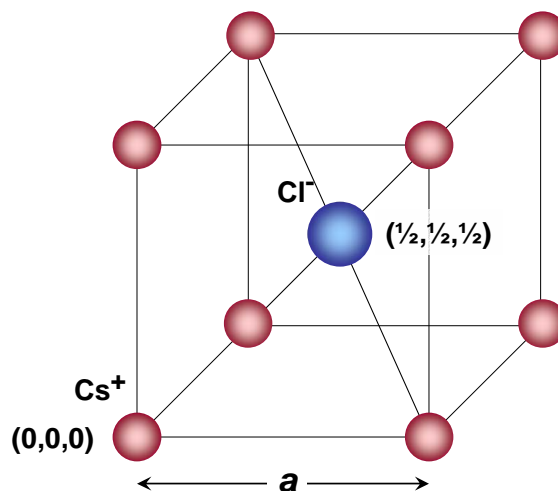
2.7 Strukturamplitude von CsCl und CsI

Der Strukturfaktor ist durch

$$S_{hkl} = \sum_j f_j e^{-2\pi i n(hu_j + kv_j + \ell w_j)} .$$

gegeben. Bei der CsCl (CsI) Struktur (siehe Abbildung) enthält die primitive Zelle ein Molekül mit den Atompositionen (000) und $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$, d.h. $u_1 = v_1 = w_1 = 0$ und $u_2 = v_2 = w_2 = \frac{1}{2}$. Für $n = 1$ (Beugungsreflexe erster Ordnung) erhalten wir dann den Strukturfaktor

$$S_{hkl} = f_1 + f_2 e^{-i\pi(h+k+\ell)} = \begin{cases} f_1 + f_2 & \text{für } h+k+\ell = \text{gerade} \\ f_1 - f_2 & \text{für } h+k+\ell = \text{ungerade} \end{cases} .$$

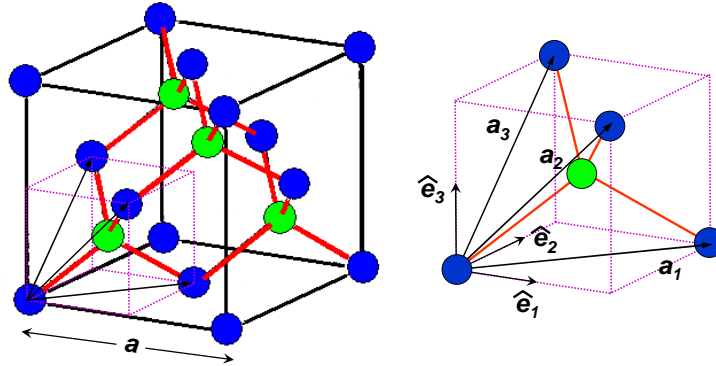


Wir sehen also, dass der (100) Reflex für CsCl und CsI zwar abgeschwächt sein sollte, aber eigentlich nicht ausgelöscht sein sollte. Warum verschwindet nun der Reflex bei CsI? Die Antwort ist einfach: Bei CsI hat das Cs^+ - und das I^- -Ion genau die gleiche Elektronenzahl, nämlich 54, und die Elektronenhülle der Ionen entspricht der Xe-Edelgaskonfiguration. Da für Röntgenlicht der Atomformfaktor von der Ladungsdichte der Elektronenhülle bestimmt wird, haben wir für CsI den Fall $f_1 = f_2$ vorliegen und der (100) Reflex wird in der Tat nicht nur unterdrückt sondern völlig ausgelöscht. Für CsCl besitzt die Elektronenhülle des Cl^- -Ions dagegen eine Argon-Edelgaskonfiguration. Deshalb ist $f_1 \neq f_2$ und der (100) Beugungsreflex kann beobachtet werden.

Das CsI Kristallgitter kann aufgrund der Gleichheit der Elektronenkonfigurationen der beteiligten Ionen auch als bcc-Gitter aufgefasst werden, für das Reflexe mit $h + k + \ell = \text{ungerade}$ verschwinden.

2.8 Strukturamplitude von Diamant

Zur Berechnung des Strukturfaktors von Diamant beschreiben wir zweckmässigerweise die Diamantstruktur durch ein fcc-Gitter mit einer zweiatomigen Basis. Die konventionelle kubische Zelle enthält dann nicht wie beim fcc-Gitter üblich 4 sondern 8 Kohlenstoffatome. (vgl. hierzu Übungsblatt 2, Aufgabe 1.6).



1. Als erster möglicher Schritt zur Lösung des Problems kann man vom Resultat von Blatt 2, Aufgabe 1.6 ausgehen und dieses wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}(u_\mu, v_\mu, w_\mu) &= \frac{a}{4} \{ \hat{\mathbf{e}}_1(1 + 4u_\mu) + \hat{\mathbf{e}}_2(1 + 4v_\mu) + \hat{\mathbf{e}}_3(1 + 4w_\mu) \} \\
 &= \sum_{j \in \text{Basis}} a \left\{ \underbrace{u_\mu \hat{\mathbf{e}}_1 + v_\mu \hat{\mathbf{e}}_2 + w_\mu \hat{\mathbf{e}}_3}_{\equiv \mathbf{p}_\mu} + \underbrace{x_j \hat{\mathbf{e}}_1 + y_j \hat{\mathbf{e}}_2 + z_j \hat{\mathbf{e}}_3}_{\mathbf{q}_j} \right\} \\
 &= \sum_j (\mathbf{p}_\mu + \mathbf{q}_j)
 \end{aligned}$$

Hier gilt für das fcc-Gitter

$$(u_\mu, v_\mu, w_\mu) = \begin{cases} (0, 0, 0) & ; \mu = 1 \\ (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) & ; \mu = 2 \\ (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) & ; \mu = 3 \\ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) & ; \mu = 4 \end{cases}$$

und für die Basis kann man schreiben

$$(x_j, y_j, z_j) = \begin{cases} (0, 0, 0) & ; \quad j = 1 \quad \text{erstes Basisatom} \\ (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) & ; \quad j = 2 \quad \text{zweites Basisatom} \end{cases}$$

Damit lässt sich die gesamte Strukturamplitude des Diamantgitters in der folgenden Form schreiben:

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{G}}^{\text{ges}} &= f \sum_{\mu, j} e^{-i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{p}_{\mu} + \mathbf{q}_j)} \\ &= \sum_{\mu} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{p}_{\mu}} f \sum_j e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{q}_j} \\ &= \underbrace{\sum_{\mu} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{p}_{\mu}}}_{S_{\mathbf{G}}^{\text{fcc}}} \underbrace{\sum_j f_j e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{q}_j}}_{S_{\mathbf{G}}^{\text{Basis}}} \\ &= S_{\mathbf{G}}^{\text{fcc}} \cdot S_{\mathbf{G}}^{\text{Basis}} \end{aligned} \quad (1)$$

Zusatzbemerkung: Diesen Sachverhalt kann man, wie in der Vorlesung gezeigt wurde, auch noch anders ableiten: Die Gitter-Funktion hat im Ortsraum und im reziproken Raum die Form

$$\begin{aligned} g^{\text{fcc}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mu} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mu}) \\ \mathcal{FT}\{g^{\text{fcc}}\} &= \int d^3r e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{p}_{\mu}) = \sum_{\mu} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\mu}} \equiv S_{\mathbf{G}}^{\text{Gitter}} \\ \mathbf{p}_{\mu} &= u_{\mu} \hat{\mathbf{e}}_1 + v_{\mu} \hat{\mathbf{e}}_2 + w_{\mu} \hat{\mathbf{e}}_3 \end{aligned}$$

Nun definieren wir Basis-Funktionen $\rho_j(\mathbf{r})$ im Ortsraum, wobei der Index j die Basisatome numeriert. Im reziproken Raum hat man dann

$$\begin{aligned} f_j &= \int d^3\tilde{r} e^{-i\mathbf{G} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \rho_j(\tilde{\mathbf{r}}) \\ S_{\mathbf{G}}^{\text{Basis}} &= \sum_j f_j e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{q}_j} \\ \mathbf{q}_j &= x_j \hat{\mathbf{e}}_1 + y_j \hat{\mathbf{e}}_2 + z_j \hat{\mathbf{e}}_3 \end{aligned}$$

Die gesamte Strukturamplitude ergibt sich dann nach dem Faltungssatz

$$S_{\mathbf{G}}^{\text{ges}} = \mathcal{FT}\{g^{\text{fcc}} \otimes f\} = S_{\mathbf{G}}^{\text{fcc}} \cdot S_{\mathbf{G}}^{\text{Basis}}$$

Wir betrachten zunächst den Strukturfaktor des reinen fcc-Gitters:

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{G}}^{\text{Gitter}} &\equiv S_{hkl}^{\text{fcc}} = \sum_{\mu} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\mu}} \\ &= 1 + e^{-i\pi(k+\ell)} + e^{-i\pi(h+\ell)} + e^{-i\pi(h+k)} \\ &= \begin{cases} 4 & ; \quad \text{falls alle } h, k, l \text{ gerade oder ungerade} \\ 0 & ; \quad \text{falls ein Index gerade und die anderen beiden ungerade} \\ & \quad \text{oder umgekehrt} \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

Wir sehen, dass beim fcc-Gitter keine Reflexe auftreten können, für die die Indizes teilweise gerade und ungerade sind.

der Strukturfaktor der zweiatomigen Basis ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
S_{\mathbf{G}}^{\text{Basis}} &\equiv S_{hkl}^{\text{Basis}} = f \sum_j e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{b}_j} \\
&= f \left\{ 1 + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+\ell)} \right\} \\
&= \begin{cases} 2f & ; \text{ falls } h+k+\ell = 4n \text{ mit } n \in \mathbb{Z} \\ 0 & ; \text{ falls } h+k+\ell = 4n+2 \text{ mit } n \in \mathbb{Z} \\ f(1+i) & ; \text{ falls } h+k+\ell = 2n+1 \text{ mit } n \in \mathbb{Z} \end{cases} \quad (3)
\end{aligned}$$

2. Aus (1) bis (3) sehen wir, dass Nullstellen, also eine Auslöschung von Reflexen wegen des fcc-Gitters immer schon dann vorliegt, wenn nicht alle Millerschen Indizes gerade oder ungerade sind. Durch den Strukturfaktor der Basis verschwinden aber von diesen für das fcc-Gitter erlaubten Reflexe nochmals alle Reflexe mit den geraden Indizes, für die $h+k+\ell = 4n+2$ mit $n \in \mathbb{Z}$ gilt. Für $h+k+\ell = 4n$ ist dagegen $S_{hkl} = 8f$. Ist $h+k+\ell$ dagegen eine ungerade Zahl und sind alle drei Millerschen Indizes ungerade, so ist $S_{hkl} = 4f(1+i)$. Wir erhalten also

$$\begin{aligned}
S_{hkl} &= S_{hkl}^{\text{fcc}} \cdot S_{hkl}^{\text{Basis}} \\
&= \begin{cases} 8f & \text{falls } h, k, \ell \text{ gerade und } h+k+\ell = 4n \text{ mit } n \in \mathbb{Z} \\ 0 & \text{falls } h, k, \ell \text{ gerade und } h+k+\ell = 4n+2 \text{ mit } n \in \mathbb{Z} \\ 4f(1+i) & \text{falls } h, k, \ell \text{ ungerade} \end{cases}
\end{aligned}$$

Betrachten wir beispielsweise den (222) Reflex, so erhalten wir für den Strukturfaktor der Basis: $S_{hkl}^{\text{Basis}} = 1 + e^{-i\frac{\pi}{2}6} = 1 + e^{-3\pi i} = 0$. Also ist ein solcher Reflex ausgelöscht.

2.9 Atomformfaktor von atomarem Wasserstoff

Der Atomformfaktor ist definiert als die Fouriertransformierte der Elektronendichte $\rho_H(\mathbf{r})$:

$$f(\mathbf{q}) = \int d^3r \rho_H(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

Da $\rho_H(\mathbf{r})$ sphärisch symmetrisch ist, empfiehlt sich die Verwendung von sphärischen Polarkoordinaten:

$$\begin{aligned}
d^3r &= r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \\
f(\mathbf{q}) &= \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \rho_H(\mathbf{r}) e^{iqr \cos \vartheta} \\
&\stackrel{x=\cos \vartheta}{=} \int_0^\infty dr r^2 \int_{-1}^1 dx \int_0^{2\pi} d\varphi \rho_H(\mathbf{r}) e^{iqr x}
\end{aligned}$$

Die φ -Integration ergibt trivialerweise 2π und das Integral über $x = \cos \vartheta$ kann man wie folgt auswerten:

$$\int_{-1}^1 dx e^{iqr x} = \left\{ \frac{e^{iqr x}}{iqr} \right\}_{-1}^1 = 2 \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2i qr} = 2 \frac{\sin qr}{qr}$$

Das Resultat für $f(\mathbf{q})$ lautet somit

$$f(\mathbf{q}) = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 \frac{\sin qr}{qr} \rho_H(r)$$

nach Einsetzen von $\rho_H(r)$ hat man

$$\begin{aligned} f(\mathbf{q}) &= \frac{4}{qa_0^3} \int_0^\infty dr r e^{-\frac{2r}{a_0}} \sin qr \\ &\stackrel{\zeta=qr}{=} \frac{4}{(qa_0)^3} \int_0^\infty d\zeta \zeta \sin \zeta e^{-\frac{2\zeta}{qa_0}} \end{aligned}$$

Dieses Integral ist tabelliert (vgl. z. B. Bronstein–Semendjajew, Integral Nummer 463, oder MAPLE):

$$\int dx x \sin bx e^{-ax} = -\left(\frac{bx}{a^2 + b^2} + \frac{2ab}{(a^2 + b^2)^2}\right) e^{-ax} \cos bx - \left(\frac{ax}{a^2 + b^2} + \frac{a^2 - b^2}{(a^2 + b^2)^2}\right) e^{-ax} \sin bx$$

An der oberen Grenze ($x \rightarrow \infty$) verschwinden diese Terme $\propto e^{-ax}$. An der unteren Grenze ($x = 0$) überlebt nur der zweite Term in der linken runden Klammer. Also hat man

$$\int_0^\infty dx x \sin bx e^{-ax} = \frac{2ab}{(a^2 + b^2)^2}$$

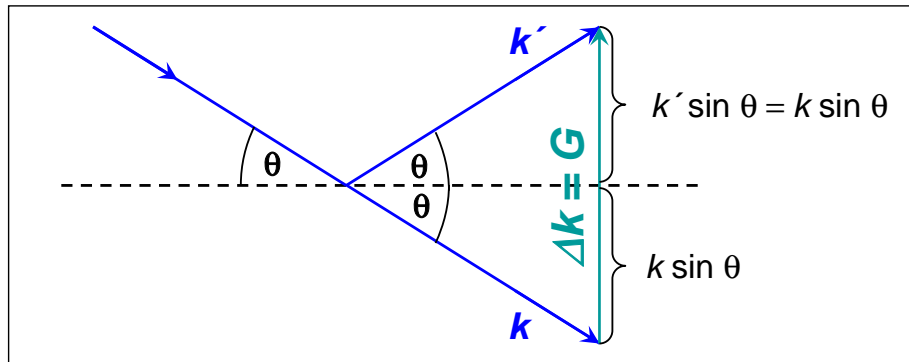
Für unser Problem kann man identifizieren $a = 2/qa_0$ und man bekommt als Endresultat für den atomaren Formfaktor

$$f(\mathbf{q}) = \frac{16}{[4 + (qa_0)^2]^2} = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{qa_0}{2}\right)^2\right]^2}$$

Man beachte, dass im Falle der Streuung an einem einzelnen Atom alle Streuvektoren \mathbf{q} erlaubt sind. Im Gegensatz dazu erhalten wir im Kristall, wo die von–Laue–Bedingung $\mathbf{q} \equiv \Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$ gilt, nur Streureflexe für ganz bestimmte Streuvektoren

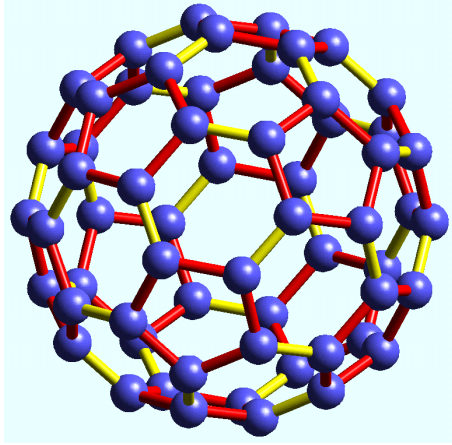
$$\|\Delta\mathbf{k}\| = 2k \sin \theta = \frac{4\pi}{\lambda}$$

wobei θ der Glanzwinkel ist.

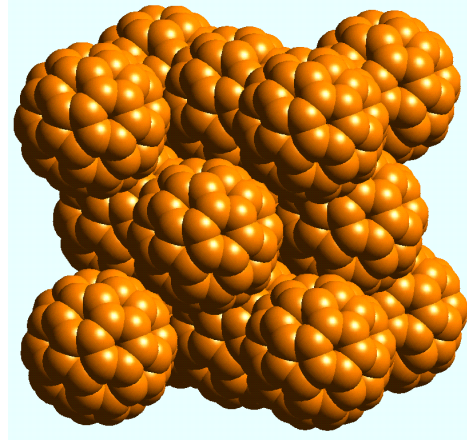


Mit der obigen Beziehung $\Delta k = 2k \sin \theta = (4\pi/\lambda) \sin \theta$ erhalten wir das Ergebnis $f(\Delta k) \propto 1/\sin^4 \theta$. Dies ist das bekannte Ergebnis der Rutherford-Streuung. Man beachte hierbei, dass der Winkel θ bei unserer Diskussion nur der halbe Streuwinkel ist. Bei der Rutherford-Streuung wird aber der volle Streuwinkel verwendet, weshalb dort im Ausdruck für den Streuquerschnitt $1/\sin^4(\theta/2)$ auftritt.

2.10 Formfaktor von Fullerenen



C60-Molekül



fcc-Kristall aus C60-Molekülen

Die Ladungsverteilung des C₆₀-Moleküls ist durch $q(\mathbf{r}) = e\rho(\mathbf{r}) = q_0\delta(r - R)$ ($r = \|\mathbf{r}\|$). Als erstes Ziel bestimmen wir die unbekannte Konstante Flächenladungsdichte q_0 aus der Bedingung, dass das C-Atom 6 Elektronen und somit das C₆₀-Molekül eine Gesamtladung $Q = 60 \cdot 6e = 360e$ aufweist. Dann kann man schreiben

$$Q = 360e = q_0 \int d^3r q(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dr r^2 \underbrace{\int_{-1}^1 d\cos\theta}_{=2} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{=2\pi} \delta(r - R) = 4\pi R^2 q_0$$

Damit haben wir erhalten

$$q_0 = \frac{360e}{4\pi R^2}$$

Als zweites Ziel berechnen wir nun den Formfaktor (vgl. Aufgabe 2.9)

$$\begin{aligned} f(\mathbf{q}) &= \int d^3r \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{e} \int d^3r q(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{e} \int_0^\infty dr r^2 q(r) \int_{-1}^1 dx \int_0^{2\pi} d\varphi e^{iqr x} \end{aligned}$$

Wie in Aufgabe (2.9) gilt

$$\int_{-1}^1 dx e^{iqr x} = 2 \frac{\sin qr}{qr}$$

und man erhält

$$f(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{e} \int_0^\infty dr r^2 \frac{\sin qr}{qr} \frac{360e}{4\pi R^2} \delta(r - R) = 360 \frac{\sin qR}{qR}$$

Der Wellenvektor $\mathbf{q} = \Delta\mathbf{k}$ ist hier wieder mit dem Streuvektor $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$ zu identifizieren. Im Gegensatz zum Formfaktor für das Wasserstoffatom finden wir für das C₆₀-Molekül eine

oszillierenden Funktion, wobei die Amplitude für größere Streuvektoren $\Delta \mathbf{k}$ abnimmt.

Wir betrachten jetzt den (200) Beugungsreflex. Für diesen gilt $\Delta k = G = 2 \cdot 2\pi/a = 4\pi/14.11 \text{ \AA}^{-1}$. Der Strukturfaktor S_{hkl} für das von den C_{60} -Molekülen gebildete fcc-Gitter

$$S_{hkl} = f \left[1 + e^{-i\pi(k+\ell)} + e^{-i\pi(h+\ell)} + e^{-i\pi(h+k)} \right]$$

ist $4f$, falls die Millerschen Indizes h, k, ℓ alle gerade oder alle ungerade sind. Wir erhalten somit für den (200) Beugungsreflex den Strukturfaktor

$$S_{200} = 4f = 4 \cdot 360 \frac{\sin\left(\frac{4\pi}{a}R\right)}{\frac{4\pi}{a}R} = 1440 \frac{\sin\left(\frac{4\pi}{14.11}3.5\right)}{\frac{4\pi}{14.11}3.5} = 11.16 \text{ .}$$

Dieser Wert ist in der Tat sehr klein und resultiert aus dem oszillierenden Atomformfaktor, der für den den betreffenden Wert $GR = 3.117$ sehr klein ist, da $GR \simeq \pi$. Vergleichen wir dies mit dem (111) Reflex, so ist hier $G = \sqrt{3}\frac{2\pi}{a} = \sqrt{3}\frac{2\pi}{14.11} \text{ \AA}^{-1}$ und damit $\sin(GR) = 0.428$. Da für h, k, ℓ ungerade der Strukturfaktor des fcc-Gitters ebenfalls $4f$ beträgt, erhalten wir $S_{111} = 229$. Der Strukturfaktor und damit die Streuamplitude ist also für diesen Reflex um etwa den Faktor 20 größer.

Für den Strukturfaktor des Wasserstoffatoms haben wir $f \propto 1/\Delta k^4$ erhalten. Im Gegensatz dazu ergibt sich für das C_{60} -Molekül $f \propto \sin \Delta k / \Delta k$, also eine oszillierende Funktion. Woran liegt das? Die Antwort lautet: an der radialen Form der Ladungsverteilung. Beim C_{60} -Molekül hat die von uns angenommene Ladungsverteilung einen scharfen Rand. Dieser scharfe Rand führt zu der oszillierenden Form der Fourier-Transformierten. Dies ist analog zur Beugung an der Lochblende. Deren Durchlassfunktion besitzt auch einen scharfen Rand und wir erhalten als Beugungsmuster ebenfalls eine oszillierende Funktion. Die Ladungsverteilung des Wasserstoffatoms hat dagegen aufgrund der e-Funktion einen weichen Rand. Für die Fourier-Transformierte erhalten wir eine Funktion ohne Oszillation. Weiteres Beispiel: die Fourier-Transformierte einer Gauß-Funktion (weicher Rand) ist wiederum eine Gauß-Funktion (also keine oszillierende Funktion).