

Übungen zur Festkörperphysik I

Lösungen zu Serie 3

1 Streutheorie

a)

$$\begin{aligned}
 S_{\mathbf{G}} &= \sum_j f_j \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \\
 &= \sum_j f_j \exp \left(\begin{pmatrix} ha^* \\ kb^* \\ lc^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_j a \\ y_j b \\ z_j c \end{pmatrix} \right) \\
 &= \sum_j f_j \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j))
 \end{aligned}$$

b) **sc**: $S_{\mathbf{G}} = f_j$. Alle Ebenen sind erlaubt.

$$\mathbf{bcc}: S_{\mathbf{G}} = f_j(1 + e^{\pi i(h+k+l)}).$$

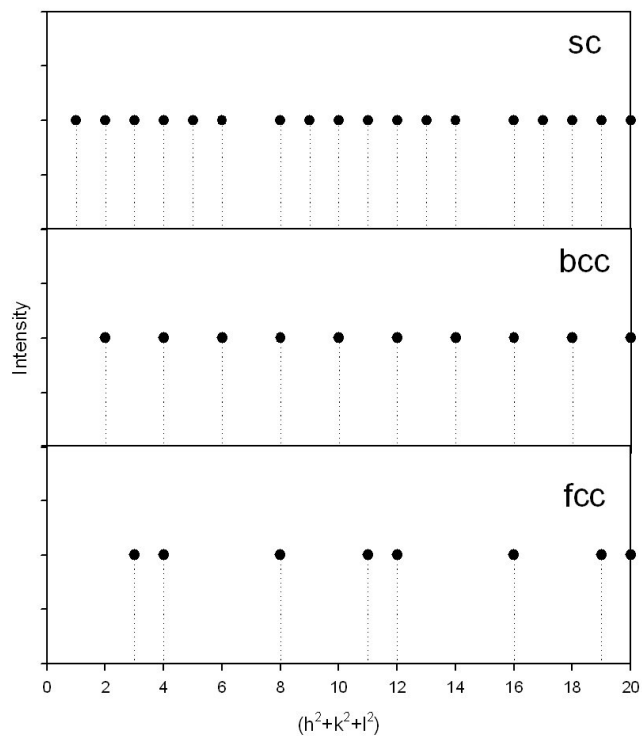
$$\text{Somit folgt: } S_{\mathbf{G}} = \begin{cases} 0, & \text{wenn } h+k+l \text{ ungerade ist} \\ 2f_j, & \text{wenn } h+k+l \text{ gerade ist} \end{cases}$$

$$\mathbf{fcc}: S_{\mathbf{G}} = f_j(1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)}).$$

$$\text{Somit folgt: } S_{\mathbf{G}} = \begin{cases} 0, & \text{wenn } h, k, l \text{ gemischt gerade/ungerade sind} \\ 4f_j, & \text{wenn } h, k, l \text{ alle gerade oder alle ungerade sind} \end{cases}$$

Σ	sc	bcc	fcc
1	100	-	-
2	110	110	-
3	111	-	111
4	200	200	200
5	210	-	-
6	211	211	-
7	-	-	-
8	220	220	220
9	300/221	-	-
10	310	310	-
11	311	-	311
12	222	222	222
13	320	-	-
14	321	321	-
15	-	-	-
16	400	400	400
17	410/322	-	-
18	411/330	411/330	-
19	331	-	331
20	420	420	420

c)



- d) Das reziproke Gitter eines orthorhombisch C Gitters ist wieder ein orthorhombisch C Gitter.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{g}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\
 &= 2\pi \frac{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c \end{pmatrix}}{\frac{1}{4} \begin{pmatrix} a \\ -b \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c \end{pmatrix}} \\
 &= 2\pi \frac{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} bc \\ -ac \\ 0 \end{pmatrix}}{\frac{1}{2} abc} \\
 &= \frac{\mathbf{a}_1 \pi}{a_1^2}
 \end{aligned}$$

Genau gleich findet man $\mathbf{g}_2 = \frac{\mathbf{a}_2 \pi}{a_2^2}$ und $\mathbf{g}_3 = \frac{\mathbf{a}_3 \pi}{a_3^2}$.

Der Strukturfaktor ist $S_{\mathbf{G}} = f_j(1 + e^{\pi i(h+k)})$ und der Reflex von (100) ist ausgelöscht.

2 Röntgenbeugung

- a) Oberes Bild entspricht fcc, das untere bcc.

- b) Für kubische Gitter gilt $d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$, was zu $a = \frac{\lambda \sqrt{h^2+k^2+l^2}}{2 \sin^2 \theta}$ führt.

bcc: Der (200) - Reflex bei $2\theta \simeq 65^\circ$ beispielsweise führt zu $a = 2.867 \text{ \AA}$

fcc: (200) - Reflex bei $2\theta \simeq 50^\circ$ ergibt $a = 3.645 \text{ \AA}$

Die Muster wurden für folgende Gitterkonstanten berechnet: bcc: $2.8665 \text{ \AA}$

fcc: $3.63 \text{ \AA}$

3 Neutronenbeugung

- a) Weil $2\theta = 2 \arcsin \left(\frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \right) \simeq \frac{\lambda}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ ergibt sich für eine doppelt so grosse Einheitszelle die halbe Grösse für 2θ .
- b) Die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Reflexe macht eine Unterscheidung möglich (siehe Abbildung 1).

4 Elektronbeugung

- a) $\lambda = d \sin \theta = 2.15 \text{ \AA} \cdot \sin 50^\circ = 1.647 \text{ \AA}$
- b) Benutzt man, dass die Energie der Elektronen gegeben ist durch $E_e = \frac{1}{2}mv^2$, sowie die de Broglie Beziehung, findet man $\lambda = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{m_e \sqrt{\frac{2E_e}{m_e}}} = 1.67 \text{ \AA}$

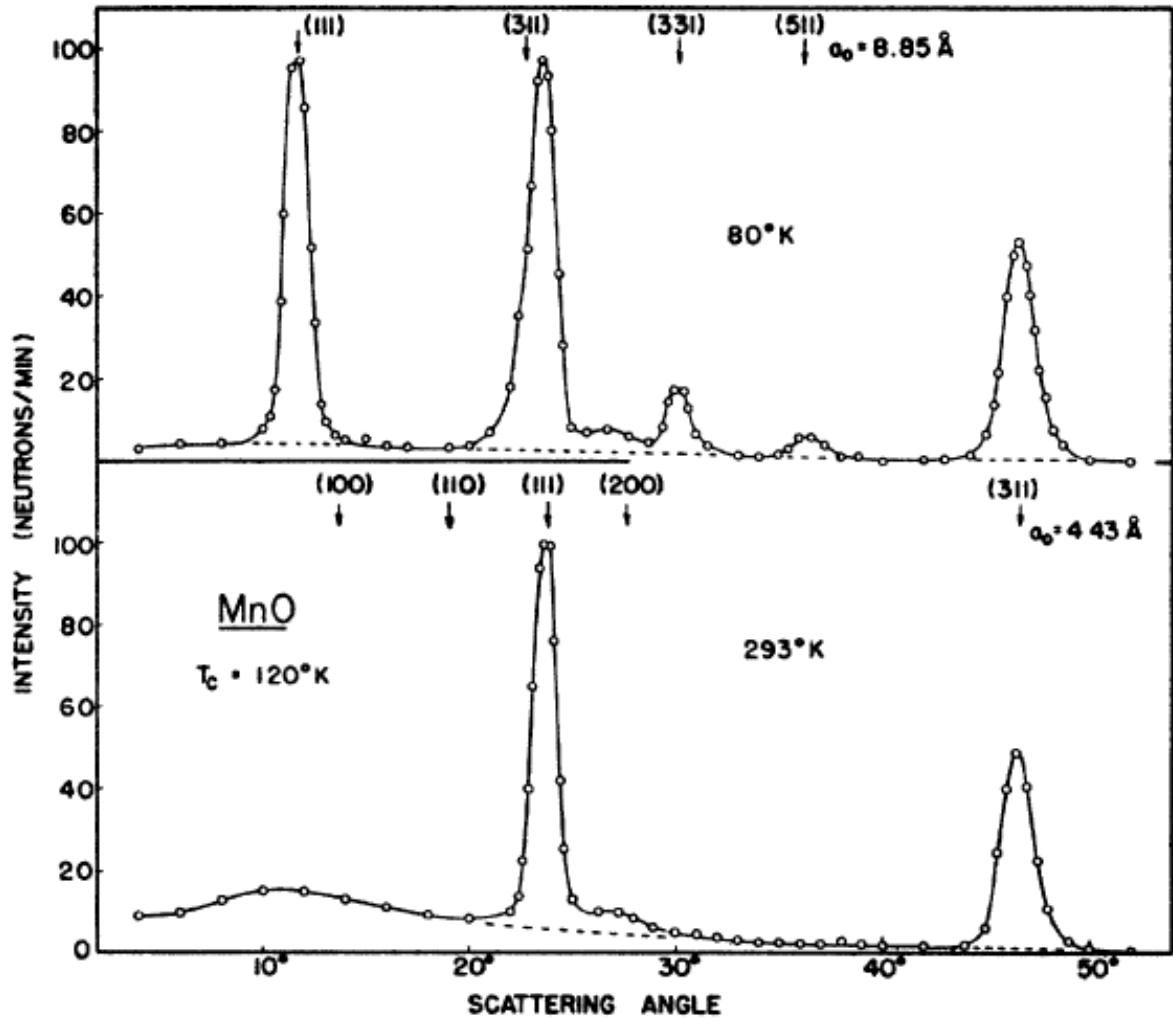


Abbildung 1: Im unteren Teil sieht man die erlaubten starken Reflexe (111) und (311), sowie den schwachen Reflex (200), der aufgrund der verschiedenen Vorzeichen der Formfaktoren (Streulängen) von Mn und O herrührt. Der breite Peak bei ca. 10° ist magnetischer Herkunft (diffuse magnetische Streuung in der paramagnetischen Phase). Bei 80 K (oben) verschwindet dieser diffuse Peak, die anderen (nuklearen) Peaks sind jedoch noch vorhanden. Dazu kommen neue, magnetische Peaks: (111), (311), (331) und (511), wobei (311) als Schulter im nuklearen (111) Peak zu sehen ist. Die (hkl) im oberen Bild beziehen sich auf die magnetische Einheitszelle, während die (hkl) im unteren Teil sich auf die chemische Einheitszelle beziehen.