

Übungen zur Festkörperphysik I

Serie 3: Elastische Streuung am Gitter

Verteilung: 7.11.2005

Abgabe: 15.11.2005

Rückgabe: 22.11.2005

Kurzfragen

- Welche Größen bestimmen das Beugungsbild einer periodischen Struktur?
- Welche Wechselwirkungen liegen den verschiedenen Beugungsexperimenten zugrunde? Welche Vor-/Nachteile bringt das mit sich?
- Was passiert mit dem Beugungsbild, wenn die Kristalle sehr klein sind?

1 Streutheorie

Für eine gegebene Kristallstruktur repräsentiert jeder Punkt im reziproken Gitter einen möglichen Reflex. Die Intensität der Streuung ist proportional zum Quadrat des Strukturformfaktors, welcher gegeben ist durch:

$$S_{\mathbf{G}} = \sum_j f_j \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j)$$

mit einem reziproken Gittervektor $\mathbf{G} = ha^* + kb^* + lc^*$, der Position eines Atoms innerhalb einer Einheitszelle \mathbf{r}_j , dem atomaren Formfaktor f_j , einer atomspezifischen Größe. Die Summe läuft über die ganze Einheitszelle.

- Zeigen Sie, dass $S_{\mathbf{G}} = \sum_j f_j \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j))$, mit den Koordinaten x_j, y_j und z_j des j -ten Atoms (in der Einheitszelle) und den Miller'schen Indizes hkl .
- Berechnen Sie den Strukturformfaktor für die drei kubischen Gitter (sc, bcc, fcc) unter der Annahme, dass alle Atome identisch sind. Welche Reflexe sind erlaubt?
- Erstellen Sie eine Tabelle mit $\Sigma = h^2 + k^2 + l^2$ als Index mit den erlaubten Streuebenen für die kubischen Gitter bis $\Sigma = 20$. Stellen Sie Intensität versus Σ graphisch dar.

Hinweis: Die Tabelle fängt so an:

Σ	sc	bcc	fcc
1	100	-	-
2	110	110	-
3	111	-	111
4	\vdots	\vdots	\vdots

- In einem orthorhombischen Gitter sind alle Winkel 90 Grad, die Längen der Basisvektoren sind jedoch verschieden: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ und $a \neq b \neq c$.

Orthorhombisch C bedeutet, dass das Gitter 1 weiterer, flächenzentrierter Gitterpunkt auf einer Fläche hat. Diese Struktur ist also nicht primitiv, d.h. sie kann nicht

durch Vektoren $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + ua + vb + wc$, mit dem Gittervektor \mathbf{r} und den ganzzahligen Koordinaten u, v, w dargestellt werden. Was ist das reziproke Gitter eines orthorhombisch C Gitters? Was ist der Strukturfaktor, wenn alle Atome von der gleichen Sorte sind? Ist die Reflexion an (100) erlaubt?

2 Röntgenbeugung

Röntgenstrahlen sind Photonen und wechselwirken mit den Elektronen im Festkörper. Die Abbildung zeigt eine Vorrichtung, mit der eine Pulverprobe mittels Röntgendiffraktion charakterisiert wird. Die Intensität wird als Funktion von 2θ aufgenommen und man erhält ein 1D Beugungsbild eines 3D reziproken Gitters.

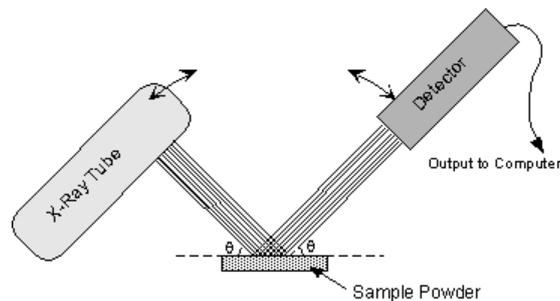


Abbildung 1: Skizze eines Röntgenpulverdiffraktometers.

- Eisen hat eine bcc-Struktur bis 910°C , oberhalb wird es in eine fcc-Struktur umgewandelt. Figur 2 zeigt die berechneten Intensitätsmuster der beiden Strukturen. Benutzen Sie Aufgabe 1, um herauszufinden, welches Bild welchem Gitter entspricht.
- Das Intensitätsmuster wurde jeweils für eine Wellenlänge von $\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$ berechnet. Schätzen sie die Gitterkonstanten für Eisen in beiden Konfigurationen ab.

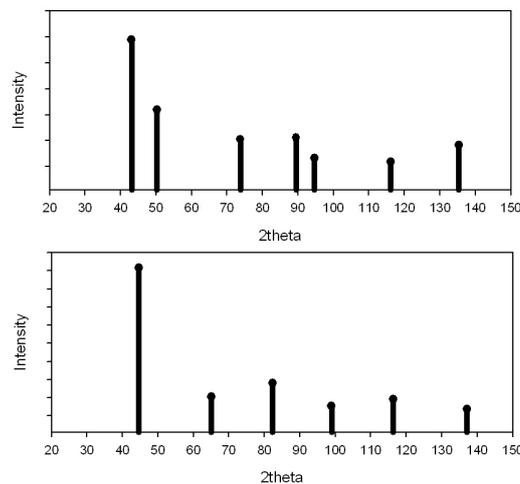
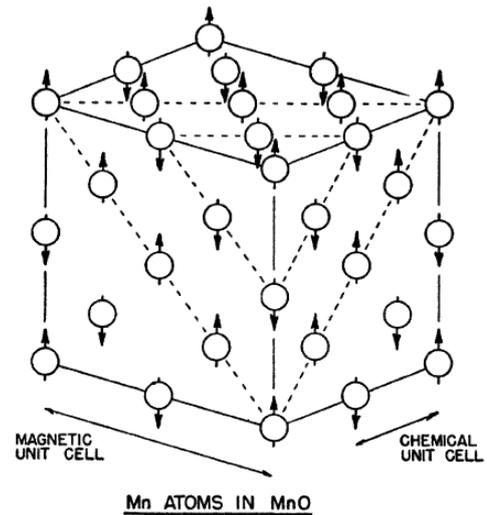


Abbildung 2: Berechnete Beugungs-Intensitäten als Funktion des Winkels 2θ für Eisen

3 Neutronenbeugung

Neutronen sind ungeladene Teilchen und können deshalb tief in Materie eindringen. Die Streuung erfolgt an den Atomkernen. Zusätzlich besitzen die Neutronen einen Spin $S = 1/2$ und somit ein magnetisches Moment, welches mit den magnetischen Momenten der Atome (teilweise gefüllte Schalen) wechselwirken kann. Dies ermöglicht es, nicht nur Gitterinformationen zu erhalten, sondern durch magnetische Streuung auch etwas über die magnetische Struktur eines Materials zu erfahren.

- a) MnO ist ein fcc Antiferromagnet mit einer kritischen Temperatur $T_N = 120$ K. Die Gitterkonstanten der magnetischen Einheitszelle sind doppelt so gross wie die der chemischen Einheitszelle (siehe Figur). Bei welchen Winkeln relativ zu den Beugungsmaxima von den Kernen würde man erwarten, unterhalb von T_N magnetische Maxima zu erhalten?
- b) Ohne die Kristallstruktur zu kennen, kann man den Ursprung (magnetisch oder nicht) der Beugungsmaxima bestimmen. Wie?

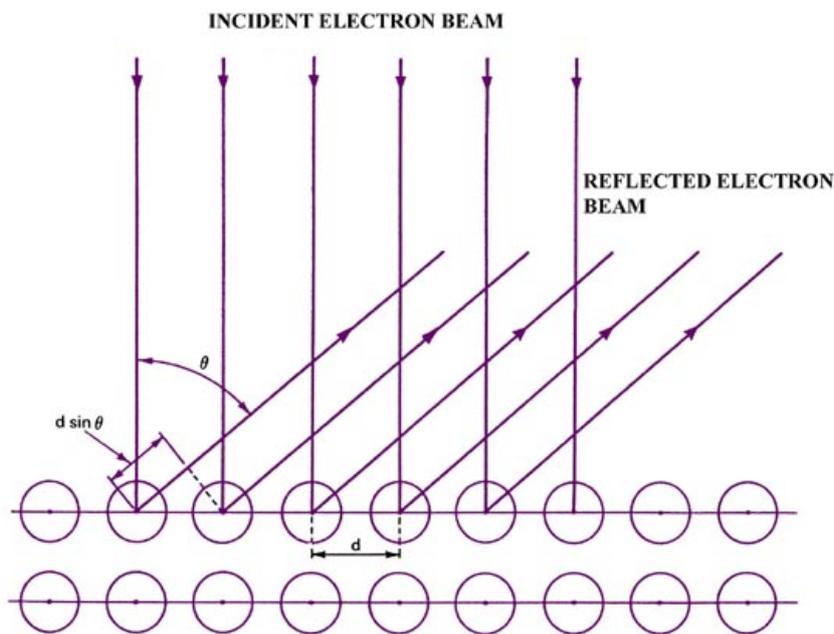


Antiferromagnetische Struktur in MnO. (Physical Review **83**(2), 333 1951)

Fortsetzung auf der Rückseite.

4 Elektronenbeugung

Elektronen sind nicht nur Teilchen sondern auch Wellen und streuen an periodischen atomaren Strukturen. Dies wurde erstmals 1927 im Davisson-Germer Experiment demonstriert. Dieses Experiment diente als unumstösslicher Beweis für die Hypothese von de Broglie über die Wellennatur von Teilchen - ein Nobelpreis für Davisson im Jahr 1937 war die Folge. Da die Elektronen geladene Teilchen sind, dringen Sie nur wenig in Materie ein und somit sind Elektronenstromethoden vor allem für Oberflächenuntersuchungen interessant. Im Davisson-Germer Experiment wurden Elektronen an Nickelatomen an der Oberfläche eines Nickelkristalls ($d = 2.15 \text{ \AA}$) gestreut. Ein Strahl mit Elektronen der Energie von 54 eV wurde senkrecht auf die Oberfläche gerichtet. Viele Elektronen wurden reflektiert, aber bei $\theta = 50^\circ$ (relativ zum einfallenden Strahl) konnte man ein intensives Beugungsmaximum messen.



- Wie gross ist die Wellenlänge der Elektronen, wenn bei $\theta = 50^\circ$ ein Maximum beobachtet werden kann?
- Vergleichen Sie diesen experimentellen Wert mit jenem, der aus der de Broglie-Beziehung hervorgeht: $\lambda = \frac{h}{mv}$.