Übungen zur Festkörperphysik I

Serie 2: Kristallgitter, Bindungsenergie

Verteilung: 31.10.2005 Abgabe: 8.11.2005 Rückgabe: 15.11.2005

Kurzfragen

a) Welches sind die zwei Hauptaspekte zur Beschreibung der Kristallstruktur?

b) Welche Methoden gibt es, um die Struktur eines Kristalls zu bestimmen?

c) Sie haben drei farblose, transparente Kugeln, eine aus amorphem Glas, eine aus kristallinem Quarz und eine aus Steinsalz. Welche Experimente machen Sie, um herauszufinden, welche Kugel aus welchem Material ist?

1 Zwischengitterplätze

a) Betrachten Sie ein Bravais-Gitter, das mit sich berührenden Kugeln (Radius R) besetzt ist. In den Zwischengitterplätzen befinden sich kleine Kugeln mit dem grösstmöglichen Radius r_M. Wie gross sind die Verhältnisse r_M/R für die bcc, sc und die fcc Struktur?

b) Unterhalb 910 °C nimmt Eisen (Fe) eine bcc Struktur an (α-Fe, $a = 2.87$Å). Zwischen 910 °C und 1390 °C kommt Fe in der fcc Struktur vor (γ-Fe, $a = 3.64$Å). Wenn geschmolzenes Eisen mit weniger als 1% Kohlenstoff (C) auskühlt, entstehen 2 Phasen: Eine fast reine Fe α-Phase und eine metastabile Phase Fe_3C. Wie kann man dies verstehen?
Hinweis: Vergleichen Sie den sogenannten kovalenten Radius von Kohlenstoff ($r_C = 0.77$Å) mit r_M aus a).

2 Reziprokes Gitter

Die Gittervektoren des reziproken Gitters können aus den Beziehungen

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad \mathbf{g}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad \mathbf{g}_3 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

berechnet werden, wenn die Gittervektoren des Gitters im direkten Raum $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ gegeben sind.

a) Zeigen Sie, dass die Vektoren $\mathbf{g}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ die Bedingung $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ erfüllen.

b) Beweisen Sie, dass das reziproke des reziproken Gitters wieder das ursprüngliche Gitter ist.

c) Zeigen Sie, dass die Vektoren des reziproken Gitters die untenstehende Beziehung erfüllen:

$$\mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

Wie ist dieser Ausdruck zu interpretieren?

3 Bragg-Bedingung und Streuteilchen

a) Eine Bragg-Ebene ist definiert durch den dazu senkrechten Vektor $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k} = \mathbf{G}$ und $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$, wobei $\mathbf{k}$ und $\mathbf{k}_0$ den gestreuten bzw. den einfallenden Wellenvektor und $\mathbf{G}$ einen beliebigen Vektor des reziproken Gitters bezeichnen.

   Zeigen Sie, dass die zur Bragg-Bedingung äquivalente Laue-Bedingung $\mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{G}} = |\mathbf{G}|/2$, gilt, wobei $\mathbf{G}$ wiederum ein Vektor des reziproken Gitters ist und $\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{G}/|\mathbf{G}|$. Was ist die geometrische Bedeutung dieser Beziehungen im reziproken bzw. direkten Raum? Machen Sie eine Skizze!

b) Um Informationen über Kristallstrukturen zu erhalten, werden verschiedene Streu-/Beugungstechniken eingesetzt: Photonen, Neutronen, Elektronen. Überlegen Sie sich, wie gross die Energie und die Geschwindigeit der Teilchen in etwa sein müssen, um ein Beugungsbild eines Kristalls beobachten zu können. Nehmen Sie eine Gitterkonstante von 3Å an. Welche Teilchenquellen kommen in Betracht?

4 NaCl: Bindungsenergie und Kompressibilität

Die Gesamtenergie eines Ionenkristalls wie NaCl (zwei verschachtelte fcc-Gitter) kann häufig in sehr guter Näherung in der Form

$$E(r) = -N\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n}\right)$$

dargestellt werden. Dabei ist r der Abstand nächster Nachbarn, N die Anzahl Ionenpaare Na-Cl und A resp. B sind Konstanten, wobei A auch Madelung-Konstante genannt wird und die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung zwischen den einfach geladenen Ionen repräsentiert. Der zweite Term hingegen stellt das kurzreichweitige Abstossungspotential dar, welches rein quantenmechanischer Natur ist.

a) Leiten Sie aus der Kompressibiltät κ (resp. dem inversen Kompressionsmodul $K = 24.42$ GPa) , der Madelung-Konstanten $A = 1.75$ und dem Abstand nächster ungleicher Nachbarn $r_0 = 2.82$ Å von NaCl den Exponenten n ab. Vergleichen Sie diesen mit dem Lennard-Jones-Ansatz.
   Hinweise: Die Kompressibilität ist definert als $\kappa = -1/V(\mathrm{d}V/\mathrm{d}p)$ mit V dem Volumen des Kristalls und p einem äusseren, iostropen Druck. Im thermodynamischen Gleichgewicht kann folgende Relation verwendet werden: $\mathrm{d}E = -p\mathrm{d}V$, wobei E die Energie des Systems darstellt. Benutzen Sie die Gleichgewichtsbedingung $\mathrm{d}E/\mathrm{d}r = 0 \Leftrightarrow r = r_0$.
   Das Lennard-Jones-6-12-Potential finden Sie in der Literatur (z.B. Ashcroft-Mermin). Es ist gegeben durch: $\phi(r) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$.

b) Berechnen Sie (mit dem n aus Teilaufgabe a) die Bindungsenergie pro Ionenpaar und vergleichen Sie diese mit gängigen Werten in der Literatur.