Aufgabenblatt 3
Donnerstag $15^{15} - 16^{45}$

Sascha Reinhardt

7. November 1999

1 Aufgabe 3.1

Die primitiven Translationsvektoren des bcc-Gitters:

$$\mathbf{a_1} = \frac{1}{2}a(-\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \tag{1}$$

$$\mathbf{a_2} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \tag{2}$$

$$\mathbf{a_3} = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{z}}) \tag{3}$$

Die primitiven Translationsvektoren des fcc-Gitters:

$$\mathbf{c_1} = \frac{1}{2}c(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \tag{4}$$

$$\mathbf{c_2} = \frac{1}{2}c(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{z}}) \tag{5}$$

$$\mathbf{c_3} = \frac{1}{2}c(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}) \tag{6}$$

1.1 bcc-Gitter

1.1.1 Volumen

Das Volumen der primitiven Einheitszelle eines bcc-Gitters:

$$V_{bcc} = |\mathbf{a_1} \cdot \mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}| \tag{7}$$

$$= \left| \frac{1}{8}a^3 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right| \tag{8}$$

$$V_{bcc} = \frac{1}{2}a^3 \tag{9}$$

1.1.2 Reziprokes Gitter

Die Achsenvektoren des reziproken Gitters:

$$\mathbf{b_1} = 2\pi \frac{\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}}{V_{bcc}} \tag{10}$$

$$\mathbf{b_2} = 2\pi \frac{\mathbf{a_3} \times \mathbf{a_1}}{V_{bcc}} \tag{11}$$

$$\mathbf{b_3} = 2\pi \frac{\mathbf{a_1} \times \mathbf{a_2}}{V_{bcc}} \tag{12}$$

Man erhält nach einsetzen der Vektoren:

$$\mathbf{b_1} = \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \tag{13}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{b_2} &= \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{z}}) && (14)\\
\mathbf{b_3} &= \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}) && (15)
\end{aligned}$$

Durch Vergleich dieser Vektoren mit den Vektoren in den Gleichungen 4, 5 und 6 sieht man sofort, daß das kubisch-flächenzentrierte Gitter das reziproke Gitter des kubisch-raumzentrierten Gitters ist.

Das Volumen des reziproken Gitters ist dann:

$$\begin{aligned}
V_{bccrg} &= |\mathbf{b_1} \cdot \mathbf{b_2} \times \mathbf{b_3}| && (16)\\
&= \frac{16\pi^3}{a^3} && (17)
\end{aligned}$$

1.2 fcc-Gitter

1.2.1 Volumen

Das Volumen der primitiven Einheitszelle eines fcc-Gitters:

$$\begin{aligned}
V_{fcc} &= |\mathbf{c_1} \cdot \mathbf{c_2} \times \mathbf{c_3}| && (18)\\
&= \left| \frac{1}{8}a^3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right| && (19)\\
V_{fcc} &= \frac{1}{4}a^3 && (20)
\end{aligned}$$

1.2.2 Reziprokes Gitter

Die Achsenvektoren des reziproken Gitters:

$$\begin{aligned}
\mathbf{d_1} &= 2\pi\frac{\mathbf{c_2} \times \mathbf{c_3}}{V_{fcc}} && (21)\\
\mathbf{d_2} &= 2\pi\frac{\mathbf{c_3} \times \mathbf{c_1}}{V_{fcc}} && (22)\\
\mathbf{d_3} &= 2\pi\frac{\mathbf{c_1} \times \mathbf{c_2}}{V_{fcc}} && (23)
\end{aligned}$$

Man erhält nach einsetzen der Vektoren:

$$\begin{aligned}
\mathbf{d_1} &= \frac{2\pi}{c}(-\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) && (24)\\
\mathbf{d_2} &= \frac{2\pi}{c}(\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) && (25)\\
\mathbf{d_3} &= \frac{2\pi}{c}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{z}}) && (26)
\end{aligned}$$

Durch Vergleich dieser Vektoren mit den Vektoren in den Gleichungen 1, 2 und 3 sieht man sofort, daß das kubisch-raumzentrierte Gitter das reziproke Gitter des kubisch-flächenzentrierten Gitters ist.

Das Volumen des reziproken Gitters ist dann:

$$\begin{aligned} V_{fccrg} &= |\mathbf{d_1} \cdot \mathbf{d_2} \times \mathbf{d_3}| && (27) \\ &= \frac{32\pi^3}{c^3} && (28) \end{aligned}$$

2 Aufgabe 3.2

Die Reflexe haben folgende Ordnung

Reflex	Ordnung
(100)	2
(110)	1
(111)	2

Der Strukturfaktor bei einem bcc-Gitters ist gegeben durch

$$S(hkl) = f\left(1 + e^{-i\pi(h+k+l)}\right)$$

Der Strukturfaktor kann 0 oder 2f sein.

$$\begin{aligned} S(hkl) &= 0 \text{ , wenn h+k+l=ungerade} && (29) \\ S(hkl) &= 2f \text{ , wenn h+k+l=gerade} && (30) \\ & && (31) \end{aligned}$$

Es gibt also keine Reflexe 1. Ordung bei den Gitter (100) und (111), da diese sich auslöschen. Sie werden daher ausgelöscht, da im bcc-Gitter im Gegensatz des sc-Gitters noch eine Ebene dazwischen geschoben ist, die nicht eine Phasendifferenz von 2π hat, sondern eine Phasendifferenz von π. Bei den Reflexen 2.Ordnung wird das vermieden, da man eine Phasendifferenz von 4π an den Flächen des sc-Gitters und eine Phasendifferenz von 2π an der dazwischengeschobenen Fläche erhält, die durch die bcc-Struktur erzeugt wird. Man erhält also ein Reflex.

Die Abstände der einzelnen Ebenen erhält man durch:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|G|}$$

$$|G| = \sqrt{(h\mathbf{b_1})^2 + (k\mathbf{b_2})^2 + (l\mathbf{b_3})^2}$$

Die Translationsvektoren des reziproken Gitters für einen sc-Gitter wurden in der Vorlesung berechnet:

$$\begin{aligned} \mathbf{b_1} &= \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{x}} && (32) \\ \mathbf{b_2} &= \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{y}} && (33) \\ \mathbf{b_3} &= \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{z}} && (34) \end{aligned}$$

Abstand d_{hkl} für die einzelnen Ebenen:

Ebene	d_{hkl}
(100)	$\frac{a}{\sqrt{1}}$
(110)	$\frac{a}{\sqrt{2}}$
(111)	$\frac{a}{\sqrt{3}}$

Bestimmung der Gitterkonstanten a:

$$\rho = 7,16\frac{g}{cm^3} \tag{35}$$

$$M = 2 \cdot 52u \tag{36}$$

$$a = \left(\frac{M}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{37}$$

$$a = 2,89\mathring{A} \tag{38}$$

Die Bragg-Bedingung lautet:

$$2d\sin\frac{\delta_{hkl}}{2} = n\lambda$$

λ ist also:

$$\lambda = \frac{2d\sin\frac{\delta_{hkl}}{2}}{n}$$

Bei einsetzen der Werte erhält man die Werte

Ebene	$\lambda_{hkl}[\mathring{A}]$
(100)	0,38
(110)	0,38
(111)	0,38

Die Wellenlänge des Röntgenstrahls beträgt:

$$\lambda = 0,38\mathring{A}$$

3 Aufgabe 3.3

Der Abstand zwischen zwei Natriumatomen beträgt

$$a = 5,63\mathring{A}.$$

Der Gleichgewichtsabstand zwischen dem Ionenpaar Na^+Cl^- ist also

$$r_g = \frac{a}{2} = 2,82\mathring{A}.$$

Der Ansatz ist gegeben durch

$$E(r) = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{\beta}{r^n}. \tag{39}$$

Im Gleichgewichtsabstand hat $E(r_g)$ ein Minimum:

$$\begin{aligned} \frac{dE(r)}{dr_g} &= \frac{1}{4}\frac{\alpha e^2}{\pi\varepsilon_0 r_g^2} - \frac{n\beta}{r_g^{n+1}} && (40) \\ &= 0 && (41) \end{aligned}$$

Gleichung 39 wird nach β aufgelöst und in Gleichung 40 eingesetzt. Man erhält:

$$\begin{aligned} \beta &= \left(E(r_g) + \frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_g^2}\right) r_g^n && (42) \\ \Rightarrow 0 &= -\frac{1}{4}\frac{-\alpha e^2 + 4nE(r_g)\pi\varepsilon_0 r_g + n\alpha e^2}{\pi\varepsilon_0 r_g^2} && (43) \end{aligned}$$

Auflösen nach n:

$$n = \frac{\alpha e^2}{4E(r_g)\pi\varepsilon_0 r_g + \alpha e^2} \tag{44}$$

Einsetzen der Werte:

$$\begin{aligned} \alpha &= 1,748 && (45) \\ E(r_g) &= -8,15eV && (46) \\ & && (47) \\ n &= 11,3 && (48) \end{aligned}$$