Heiko Dumlich 27. November 2006

5 Übungsblatt Festkörperphysik

5.1 (Strukturfaktor im Diamantgitter)

Für das Diamantgitter haben wir die Basis:

$$(000)\,, \left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right), \left(0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}0\frac{1}{2}\right)$$

$$\left(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}\right)$$

Wir können da alle Teilchen äquivalent sind vorraussetzen, dass der Atomfaktor identisch ist, also $f_1 = f_2 = \ldots = f_7 = f_8 = f$ gilt. Für den Strukturfaktor folgt somit:

$$S_{\vec{G}} = f \sum_{j=1}^{8} \exp\left[-i2\pi\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right],$$

wobei wir den Basisvektor $\vec{r}_j = x_j\vec{a}_1 + y_j\vec{a}_2 + z_j\vec{a}_3$ und den reziproken Gittervektor $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ verwenden. Somit folgt also für den Strukturfaktor:

$$\begin{aligned} S_{\vec{G}} &= f\left[1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)}\right] \\ &+ f\left[e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+3k+3l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l)}\right]. \end{aligned}$$

Es ist zu zeigen, dass Bragg-Reflexe nur für Netzebenen auftreten, die die Gleichung $h + k + l = 4n$ mit $n \in \mathbb{Z}$ erfüllen, wobei h, k, l zudem alle gerade sein müssen oder Bragg-Reflexe treten auf, wenn h, k, l alle ungerade sind. Es ergibt sich nun, wenn wir zuerst den Fall betrachten bei dem h, k, l alle gerade sind:

$$S_{\vec{G}} = f\left[1 + 1 + 1 + 1 \pm 1 \pm 1 \pm 1 \pm 1\right] = 4 \pm 1 \pm 1 \pm 1 \pm 1,$$

hierbei muss man beachten, dass wir je nachdem wie wir h, k, l wählen, bzw. deren Summe, wir ein Ergebnis gleich 0 oder ein von 0 verschiedenes Ergebnis erhalten können. Es gilt $\exp\left(-i\pi\left(2n+1\right)\right) = -1$ und $\exp\left(-i\pi\left(2n\right)\right) = 1$ mit $n \in \mathbb{Z}$. Da wir $2n$ erhalten wollen, um ein Ergebnis ungleich 0 zu erhalten, müssen wir mindestens $4n$ in der Summe von $h + k + l$ besitzen, da sonst bereits der Exponent $\frac{1}{2}\left(h + k + l\right)$, ungerade werden könnte, da mit z.B. $h + k + l = 2n$ wir für den Exponenten n erhalten würden und n in diesem Falle gerade und ungerade sein könnte. Uns reicht jedoch einen der Exponenten gerade zu bekommen, da somit der Strukturfaktor nicht mehr völlig verschwindet, selbst wenn die restlichen 3 fraglichen Exponenten ungerade sind und somit -1 liefern. Somit erhalten wir also mit $h+k+l = 4n$ Bragg-Reflexe. Betrachten wir den Fall $h+k+l \geq 4n$, hierfür liefern nur bestimmte Werte wieder Bragg-Reflexe, da z.B. $h+k+l = 5n$ uns einen Exponenten $\frac{5n}{2}$ liefert, der ein imaginäres Ergebnis liefert, für $6n$ erhalten wir wieder ein $3n$, dies liefert wieder eine -1 und erst bei $8n$ erhalten wir mit $4n$ wieder eine 1. Also kann man sagen, dass $h+k+l = 4n$ gelten muss, da nur jede $4n$ Bragg-Reflexe erhalten werden können. (Für $8m = 4n$ mit $n = 2m$, womit $4n$ also $8m$ enthält.) Bleibt zu zeigen, dass Bragg-Reflexe auch auftreten, wenn h, k, l alle ungerade sind, es gilt:

$$S_{\vec{G}} = f\left[1 + 1 + 1 + 1 \pm i \pm i \pm i \pm i\right] = 4 \pm i \pm i \pm i \pm i \neq 0,$$

Da die Summe von zwei ungeraden wieder einen geraden Wert liefert, erhalten wir die Einsen am Anfang des Terms, wir erhalten zwar ein komplexes Ergebnis, aber wenn wir den Realteil betrachten, ist dieser dennoch nicht Null und somit besitzen wir Bragg-Reflexe.

5.2 (Reziprokes Gitter einer Oberfläche)

(a)

Wir betrachten ein zwei dimensionales Gitter. Die fehlende dritte Dimension des Gitters können wir uns so vorstellen, dass wir Stäbe aus diesem 2d Gitter besitzen würden. Das heisst, dass wenn man das Gitter aus der Vogelperspektive betrachtet man ein 2d Gitter sieht, jedoch die Seitenansicht offenbart, dass es sich um Stäbe handelt und nicht um Punkte. Da wir also eine dritte Dimension hinzugefügt haben und die Stäbe in diese zeigen, wählen wir einen Vektor $\vec{n}$, der in diese Richtung zeigen soll und somit senkrecht auf den 2d Gittervektoren $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ steht. Die Begründung wäre, dass wir im Falle eines 3d Gitters einfach unendlich Nahe Gitterpunkte in dieser dritten Dimensionhätten, die senkrecht auf den anderen beiden stehen würde und somit auch Stäbe entstehen würden. Wir können dann das reziproke Gitter über die Bedingung der Translationsinvarianz bestimmen:

$$n\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = n\left(\vec{r}\right),$$

wobei wir dies durch:

$$n\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp\left(i\vec{G} \cdot \left(\vec{r} + \vec{T}\right)\right) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp\left(i\vec{G} \cdot \vec{r}\right) \exp\left(i\vec{G} \cdot \vec{T}\right),$$

ausdrücken können, somit also:

$$\exp\left(i\vec{G} \cdot \vec{T}\right) = 1 \, \forall \vec{T}$$

gelten muss. Da wir ein zweidimensionales Gitter betrachten gilt:

$$\vec{T} = v_1\vec{a}_1 + v_2\vec{a}_2 \quad \text{und} \quad \vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2,$$

mit der Bedingung:

$$\vec{G} \cdot \vec{T} = 2\pi n,$$

um die oben geforderte Gleichung $\exp\left(i\vec{G} \cdot \vec{T}\right) = 1\,\forall \vec{T}$ zu erfüllen. Dies liefert:

$$\left(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2\right) \cdot (v_1\vec{a}_1 + v_2\vec{a}_2) = 2\pi n,$$

Es gilt also:

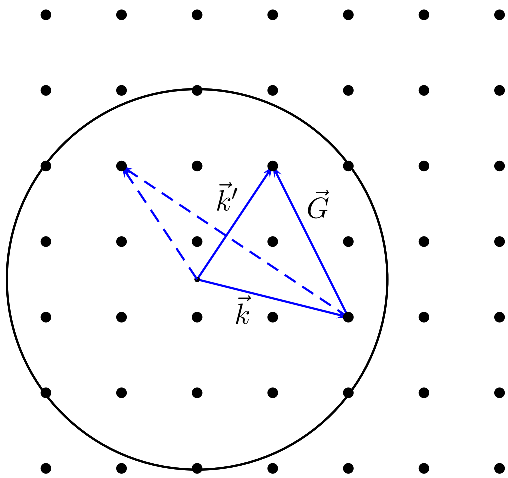
$$\begin{aligned} \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 &= 2\pi \qquad & \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 &= 0 \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 &= 0 \qquad & \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 &= 2\pi, \end{aligned}$$

somit folgt für die reziproken Gittervektoren:

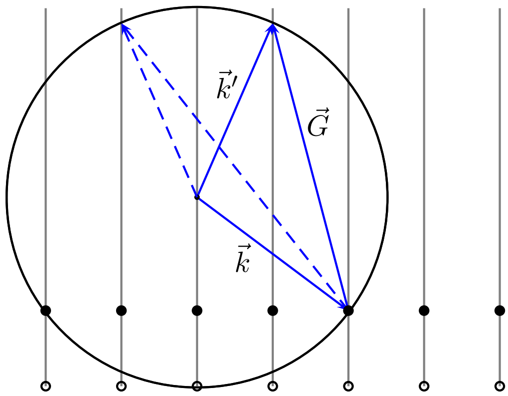
$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{n}}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{n})} \quad \text{und} \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{n}}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{n})}.$$

(b)

Die Konstruktion der Ewald-Kugel liefert für das 2d Gitter Beugung überall dort, wo die Ewaldsche Kugel einen Stab des reziproken Gitters schneidet. Beugung tritt also auch ohne dass der reziproke Gitterpunkt auf der Kugel liegt auf. Im dreidimensionalen Fall galt die Bedingung: $\Delta\vec{k} = \vec{G}$, mit $\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$. Für den zwei dimensionalen Fall gilt dies nun nur noch für die Projektionen $\vec{G}_{\|} = \vec{k}'_{\|} - \vec{k}_{\|}$. Da aber auch ein Schnitt mit einem Stab eine Begung liefert, ist trotz vorgegebener Richtung des eintreffenden Strahles keine eindeutige Bestimmung des gebeugten Strahles möglich, da mehrere gebeugte Strahlen gefunden werden können. Wie man an der Skizze erkennen kann, wobei ein Strahl gestrichelt und einer voll gezeichnet wurde.



Vogelperspektive



Seitenansicht

(c)

Dies kann man in Aufgabenteil (b) erkennen, da wenn die Kugel einen bestimmten Radius besitzt mehrere Strahlen möglichen werden, da durch den Schnitt der Kugel mit den Stäben und die nicht-Notwendigkeit des Schnittes der Kugel mit einem Gitterpunkt, eine größere Anzahl an möglichen Beugungsmöglichkeiten besteht.

5.3 (Debye-Scherrer-Methode)

(a)

Es folgt für die Strukturen:

$$\begin{aligned} &A \quad \text{ist} \quad \text{fcc Struktur} \\ &B \quad \text{ist} \quad \text{bcc Struktur} \\ &C \quad \text{ist} \quad \text{Diamant Struktur} \end{aligned}$$

Dies folgt aus folgendem Ansatz:

Es gilt die Bragg Bedingung:

$$2d\sin\theta = \lambda,$$

Nun ist zu beachten, das nach der Skizze der Winkel durch 2 zu teilen ist, damit er der Bragg Bedingung entspricht. Also gilt:

$$2d\sin\frac{\phi}{2} = \lambda,$$

Wir wissen, dass für d die folgende Relation gilt:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}},$$

Es folgt dann, wenn wir dies in die Bragg Bedingung einsetzen und quadrieren:

$$\frac{(2a)^2}{h^2+k^2+l^2}\sin^2\frac{\phi}{2} = \lambda^2,$$

nun liefert umstellen:

$$\frac{h^2+k^2+l^2}{\sin^2\frac{\phi}{2}} = \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2.$$

Nun betrachten wir die Strukturfaktoren der verschiedenen Strukturen, es folgt:

$$\begin{aligned}
S_{bcc} &= f\left[1+e^{-i\pi(h+k+l)}\right]\\
S_{fcc} &= f\left[1+e^{-i\pi(h+k)}+e^{-i\pi(h+l)}+e^{-i\pi(k+l)}\right]\\
S_{diamant} &= f\left[1+e^{-i\pi(h+k)}+e^{-i\pi(k+l)}+e^{-i\pi(h+l)}\right]\\
&+ f\left[e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}+e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)}+e^{-i\frac{\pi}{2}(h+3k+3l)}+e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l)}\right]
\end{aligned}$$

Nun gilt, dass für die bcc Struktur nur Bragg-Reflexe für $h+k+l = 2n$, $n \in \mathbb{Z}$ entstehen, die Summe also ein gerades Ergebnis liefert. Für die fcc Struktur, müssen alle ungerade oder gerade sein und für die Diamantstruktur muss $h+k+l = 4n$ erfüllt sein für h,k,l alle gerade oder h,k,l müssen alle ungerade sein. Somit haben wir die Bedingungen gefunden, für die Reflexe auftreten. Nun können wir die Winkel aus der Tabelle einsetzen und ausrechnen, wobei für die ersten Reflexe durch die Bedingungen folgt mit $\kappa = h^2+k^2+l^2$:

$$\begin{aligned}
\kappa_{bcc} &= 2,4,6,8\\
\kappa_{fcc} &= 3,4,8,11\\
\kappa_{diamant} &= 3,8,11,16
\end{aligned}$$

Für *bcc* folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{2}{\sin^2\frac{28.8^\circ}{2}} &= 32.3 \\
\frac{4}{\sin^2\frac{41^\circ}{2}} &= 32.6 \\
\frac{6}{\sin^2\frac{50.8^\circ}{2}} &= 32.6 \\
\frac{8}{\sin^2\frac{59.6^\circ}{2}} &= 32.4
\end{aligned}$$

Die anderen Strukturen liefern für die angegebenen Winkel keinen konstanten Wert, daher muss *bcc* die Struktur für Probe B sein.

Für fcc folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{3}{\sin^2\frac{42.2^\circ}{2}} &= 23.1 \\
\frac{4}{\sin^2\frac{49.2^\circ}{2}} &= 23.1 \\
\frac{8}{\sin^2\frac{72.0^\circ}{2}} &= 23.2 \\
\frac{11}{\sin^2\frac{87.3^\circ}{2}} &= 23.1
\end{aligned}$$

Die anderen Strukturen ergeben wiederum keinen konstanten Wert, daher muss fcc die Struktur der Probe A sein. Somit bleibt für die *Diamant* Struktur nur noch Probe C übrig. Dies ergibt sich aber auch, wenn man die Winkel einsetzt:

$$\begin{aligned}
\frac{3}{\sin^2\frac{42.8^\circ}{2}} &= 22.5 \\
\frac{8}{\sin^2\frac{73.2^\circ}{2}} &= 22.5 \\
\frac{11}{\sin^2\frac{89.0^\circ}{2}} &= 22.4 \\
\frac{16}{\sin^2\frac{115^\circ}{2}} &= 22.5
\end{aligned}$$

Somit besitzt die Probe C eine Diamantstruktur.

(b)

Nun haben wir leichtes Spiel die kubische Gitterkonstante zu bestimmen, da wir bereits in Aufgabenteil a) die Vorraussetzung dazu geschaffen haben, denn es gilt nach a):

$$\left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 = konst.,$$

wobei diese Konstante in a) für die jeweilige Struktur berechnet wurde, umstellen liefert nun:

$$a = \frac{\lambda}{2}\sqrt{c}.$$

Nun berechnen wir explizit die kubischen Gitterkonstanten, wobei wir die Konstanten aus Aufgabenteil a mit $c_{bcc} = 32.5$, $c_{fcc} = 23.1$ und $c_{diamant} = 22.5$ angeben. Die Wellenlänge λ ist mit $\lambda = 1.5 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$ gegeben. Einsetzen hiervon liefert:

$$\begin{aligned}
a_{bcc} &= \frac{1.5}{2}\sqrt{32.5} \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} = 4.28 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} = 4.28\text{Å} \\
a_{fcc} &= \frac{1.5}{2}\sqrt{23.1} \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} = 3.60 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} = 3.60\text{Å} \\
a_{diamant} &= \frac{1.5}{2}\sqrt{22.5} \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} = 3.56 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m} = 3.56\text{Å}
\end{aligned}$$

(c)

Wenn wir die Diamantstruktur durch eine Probe Zinkblende-Struktur ersetzen würden, würden durch die unterschiedlichen Atomfaktoren f_{Zn} und f_{S} neue Reflexe möglich werden. Für den neuen Strukturfaktor gilt:

$$\begin{aligned}
S_{\mathrm{ZnS}} &= f_{\mathrm{Zn}}\left[1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)}\right] \\
&+ f_{\mathrm{S}}\left[e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(h+3k+3l)} + e^{-i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l)}\right],
\end{aligned}$$

somit würden auch für h, k, l alle gerade nicht die Reflexe verschwinden. Die neuen Reflexe wären durch:

$$\kappa_{\mathrm{ZnS}} = 2, 3, 4, 6$$

charakterisiert. Nun können wir die $d's$ berechnen mit $d = \frac{a}{\sqrt{\kappa}} = \frac{3.56}{\sqrt{\kappa}}$. Setzen wir diese d's in unsere Braggbedingung ein, so folgt mit $\lambda = 1.5$:

$$2d \sin\frac{\phi}{2} = \lambda \Leftrightarrow \phi = 2 \arcsin\frac{\lambda}{2d},$$

Somit folgt:

$$
\begin{aligned}
\phi_2 &= 34.7^\circ \\
\phi_3 &= 42.8^\circ \\
\phi_4 &= 49.8^\circ \\
\phi_6 &= 62.1^\circ
\end{aligned}
$$

Wobei genähert die ZnS-Struktur mit der Gitterkonstanten der *Diamant*-Struktur berechnet wurde.

5.4 (Energie von Gitterwellen)

Wir betrachten die longitudinale Welle $u_s = u_0 \cos(ska - \omega t)$, die sich in einer monoatomaren linearen Kette von Atomen der Masse M, Abstand a und Nächster-Nachbar-Wechselwirkungskonstante f fortpflanzt.

(a)

Es ist zu zeigen, dass für die totale Energie der Welle:

$$E_{tot} = \frac{1}{2} M \sum_s \left(\frac{du_s}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} f \sum_s (u_s - u_{s+1})^2 ,$$

gilt, wobei s über alle Atome läuft. Jedes Teilchen ist mit dem direkten Nachbar über die Kraftkonstante f verbunden und die Auslenkung des Teilchens ist mit u_i gegeben, wobei i das spezifische Teilchen sein soll. Dann können wir für ein Teilchen schreiben:

$$F = f(u_s - u_{s+1}) + f(u_{s-1} - u_s) ,$$

Wenn wir jetzt alle Teilchen betrachten wollen, da die Welle alle Teilchen umfasst, müssen wir beachten, dass wir eine Kette über s Atome besitzen und somit folgt:

$$F = f \sum_s (u_s - u_{s+1}) ,$$

wobei allgemein für die Arbeit, die der potentiellen Energie (V), entspricht:

$$W = \int F \, ds$$

gilt, somit also:

$$W = V = \frac{1}{2} f \sum_s (u_s - u_{s+1})^2$$

folgt. Für die kinetische Energie (T) jedes Teilchens gilt:

$$T = \frac{1}{2} M v^2 = \frac{1}{2} M \left(\frac{du_s}{dt} \right)^2 ,$$

nun müssen wir noch über alle Teilchen summieren, da wir die gesamte Welle betrachten wollen und es folgt für die kinetische Energie:

$$T = \frac{1}{2} M \sum_s \left(\frac{du_s}{dt} \right)^2 ,$$

Da die totale Energie aus kinetischer und potentieller Energie besteht, folgt:

$$E_{tot} = T + V = \frac{1}{2} M \sum_s \left(\frac{du_s}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} f \sum_s \left(u_s - u_{s+1} \right)^2 .$$

(b)

Es ist nun zu zeigen, dass das zeitliche Mittel der totalen Energie pro Atom gegeben ist durch:

$$\frac{1}{4} M \omega^2 u_0^2 + \frac{1}{2} f \left[1 - \cos(ka) \right] u_0^2 = \frac{1}{2} M \omega^2 u_0^2 ,$$

wir setzen also $u_s = u_0 \cos(ska - \omega t)$ ein und erhalten, wobei wir zugleich $s = 0$ setzen, also das 0. Atom betrachten:

$$E_{tot} = \frac{1}{2} M u_0^2 \left(\frac{d\left(\cos(-\omega t)\right)}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} f u_0^2 \left(\cos(-\omega t) - \cos(ka - \omega t) \right)^2 ,$$

dies liefert:

$$E_{tot} = \frac{1}{2} M \omega^2 u_0^2 \sin^2(-\omega t) + \frac{1}{2} f u_0^2 \left(\cos(-\omega t) - \cos(ka - \omega t) \right)^2 ,$$

nun können wir das zeitliche Mittel betrachten:

$$\langle E_{tot} \rangle = \frac{1}{2} M \omega^2 u_0^2 \langle \sin^2(-\omega t) \rangle + \frac{1}{2} f u_0^2 \langle \left(\cos(-\omega t) - \cos(ka - \omega t) \right)^2 \rangle .$$

Der erste Term liefert einen Faktor $\frac{1}{2}$, da $\sin^2$ zwischen 0 und 1 oszilliert. Für das zeitliche Mittel der totalen Energie können wir unter der Annahme das die totale Energie in der kinetischen Energie stecken würde, d.h. also, dass der Term u_{max} maximal wird (dieser wird aber mit $\cos \to 1$ maximal), den Term:

$$\langle E_{tot} \rangle = \frac{1}{2} M \omega^2 u_0^2 \langle 1 \rangle ,$$

erhalten und somit folgt:

$$\frac{1}{2}M\omega^2u_0^2 = \frac{1}{4}M\omega^2u_0^2 + \frac{1}{2}fu_0^2\left\langle(\cos(-\omega t) - \cos(ka - \omega t))^2\right\rangle,$$

nun bleibt nur noch zu zeigen, dass:

$$\frac{1}{2}fu_0^2\left\langle(\cos(-\omega t) - \cos(ka - \omega t))^2\right\rangle = \frac{1}{2}f\left[1 - \cos(ka)\right]u_0^2,$$

gilt. Wir bilden also das zeitliche Mittel:

$$\left\langle(\cos(-\omega t) - \cos(ka - \omega t))^2\right\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T dt\ (\cos(-\omega t) - \cos(ka - \omega t))^2\,,$$

Hierbei ist $T = \frac{2\pi}{\omega}$, somit folgt:

$$\frac{\omega}{2\pi}\int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} dt\ \left(\cos^2(-\omega t) - 2\cos(-\omega t)\cos(ka - \omega t) + \cos^2(ka - \omega t)\right)\,,$$

Dies liefert:

$$\left\langle(\cos(-\omega t) - \cos(ka - \omega t))^2\right\rangle = \frac{\omega}{2\pi}\left[\frac{\pi}{\omega} + \frac{2\pi}{\omega}\cos(ka) + \frac{\pi}{\omega}\right],$$

Dies können wir umformen:

$$\frac{\omega}{2\pi}\left[\frac{\pi}{\omega} + \frac{2\pi}{\omega}\cos(ka) + \frac{\pi}{\omega}\right] = 1 + \cos(ka)\,,$$

dies wollten wir gerade zeigen, somit gilt also auch der gesamte Ausdruck:

$$\frac{1}{4}M\omega^2u_0^2 + \frac{1}{2}f\left[1 - \cos(ka)\right]u_0^2 = \frac{1}{2}M\omega^2u_0^2,$$

was zu zeigen war.