

# Übung 7

Ausgabe: 06.01.2025      Abgabe: 13.01.2025      Besprechung: 20.01.2025

## Verständnisfragen und Vorlesungswiederholung:

(keine schriftliche Beantwortung; mündliche Diskussion in der Übung)

1. Wie ist das reziproke Gitter mit dem zugehörigen Kristallgitter verknüpft? Was passiert z.B. mit dem reziproken Gitter, wenn der Kristall gedreht wird?
2. Erläutern Sie die verschiedenen Schreibweisen der Beugungsbedingung bei der Streuung an Kristallen sowie deren grafische Umsetzung mittels der Ewald-Konstruktion.
3. Definieren Sie den Strukturfaktor bei der Beugung an Kristallen. Was ist seine Bedeutung?
4. Fassen Sie die Auswahlregeln für die drei kubischen Bravaisgitter (bcc, fcc, sc) zusammen!
5. Erläutern Sie das Debye-Scherrer-Verfahren.

## 1. Aufgabe: Strukturfaktor von Halbleitern (4 P)

Silizium ist das technisch wichtigste Halbleitermaterial. Es kristallisiert in der Diamantstruktur, welche als aus zwei kubisch-flächenzentrierten (fcc) Untergittern bestehend beschrieben werden kann, die in Richtung der Raumdiagonalen um ein Viertel der Diagonalenlänge zueinander verschoben sind. Galliumarsenid ist für optoelektronische Anwendungen von großer Bedeutung. Seine Kristallstruktur ist mit der von Si verwandt; die beiden Untergitter werden hier jeweils mit Ga- und As-Atomen besetzt (Zinkblendestruktur, s. Abb.). Elektronische Bauelemente auf der Grundlage von Si und GaAs werden häufig mit Röntgenstrahlen untersucht.

- a) Beschreiben Sie beide Gitter als kubisch-primitive Gitter mit der Gitterkonstanten  $a$  und einer Basis aus acht Atomen, und geben Sie die relativen Koordinaten  $u_i$ ,  $v_i$  und  $w_i$  aller Atome  $i$  der Basis an. (1 P)
- b) Berechnen Sie den Strukturfaktor von Si sowie die zugehörigen Auswahlregeln. (2 P)
- c) Was ergibt sich für GaAs im Vergleich zu Si? (1 P)

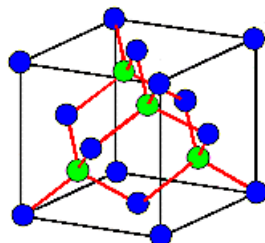


Abbildung 1: Konventionelle Einheitszelle von GaAs mit farblich markierten fcc-Untergittern

## 2. Aufgabe: Auswahlregeln für Beugungsreflexe (5 P)

Auswahlregeln für Reflexe entstehen, wenn dem reziproken Gitter eine Einheitszelle des Kristalls zugrunde gelegt wird, die größer ist als eine primitive Einheitszelle, z.B. eine konventionelle Einheitszelle. Die große Einheitszelle des Kristallgitters führt dann zu einer entsprechend kleinen Einheitszelle des reziproken Gitters, d.h. es entstehen grundsätzlich zu viele Gitterpunkte, welche mittels Auswahlregeln reduziert werden.

Vollziehen Sie dies am Beispiel eines kubisch-raumzentrierten (bcc) Gitters mit der Auswahlregel  $h + k + l = \text{gerade Zahl}$  (s. Vorlesung) nach:

- a) Betrachten Sie eine primitive Einheitszelle eines bcc-Gitters mit der Gitterkonstanten  $a$  und den Gittervektoren  $\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \\ 0 \end{pmatrix}$  und  $\vec{a}_3 = \begin{pmatrix} a/2 \\ a/2 \\ a/2 \end{pmatrix}$ .

**Berechnen** Sie die Vektoren  $\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$  des zugehörigen reziproken Gitters, und zeichnen Sie für geeignete Schnittflächen im reziproken Raum einige der resultierenden Gitterpunkte ein. Welches Gitter entsteht? Wie groß ist die Gitterkonstante? (3 P)

- b) Betrachten Sie nun eine konventionelle Einheitszelle des bcc-Gitters. Konstruieren Sie das zugehörige reziproke Gitter **grafisch** auf Grundlage einer kubisch-primitiven Einheitszelle der Kantenlänge  $a$ . Berücksichtigen Sie die Basis, indem Sie die Auswahlregeln anwenden. Welches Gitter entsteht? Wie groß ist die Gitterkonstante? (2 P)

*Anleitung: Verwenden Sie bei der grafischen Konstruktion, dass das reziproke Gitter eines kubisch-primitiven Gitters der Gitterkonstanten  $a$  wiederum ein kubisch-primitives Gitter mit der Gitterkonstanten  $2\pi/a$  ist.*

## 3. Aufgabe: Debye-Scherrer-Experiment (5 P)

Ein Alkalihalogenid-Pulver wird unter Verwendung von  $\text{Cu K}\alpha$ -Strahlung mittels des Debye-Scherrer-Verfahrens untersucht. Die Braggwinkel  $\theta_B$  der ersten fünf Reflexe liegen bei  $10,83^\circ$ ,  $15,39^\circ$ ,  $18,99^\circ$ ,  $22,07^\circ$  und  $24,84^\circ$ . Bestimmen Sie

- den Gitterparameter  $a$  sowie die Miller-Indizes der Netzebenen, welche die obigen Reflexe hervorrufen, (2 P)
- den größtmöglichen Braggwinkel und die zugehörigen Miller-Indizes. (1 P)
- Um welchen Alkalihalogenid-Kristall handelt es sich? Skizzieren Sie die Struktur! (2 P)

*Anleitung: Tragen Sie  $\sin^2 \theta_B$  gegen  $h^2 + k^2 + l^2$  der einzelnen Reflexe auf. Welche Bedeutung besitzt die Steigung der resultierenden Geraden?*

## 4. Aufgabe: Ordnungs-Unordnungs-Übergang von FeCo (4 P)

Die Legierung FeCo kann in zwei verschiedenen Modifikationen vorliegen. Während bei tiefen Temperaturen eine geordnete Legierung auftritt, existiert oberhalb einer kritischen Temperatur ein ungeordnetes Gitter (d.h. Gitterplätze werden rein statistisch besetzt, s. Abb. 2).

- Welche Gittertypen entstehen hierdurch für die ungeordnete bzw. die geordnete Legierung? (1 P)
- Geben Sie die zugehörigen Strukturfaktoren an. (2 P)
- Erklären Sie die experimentell beobachteten Reflexe (s. Abb. 3). (1 P)

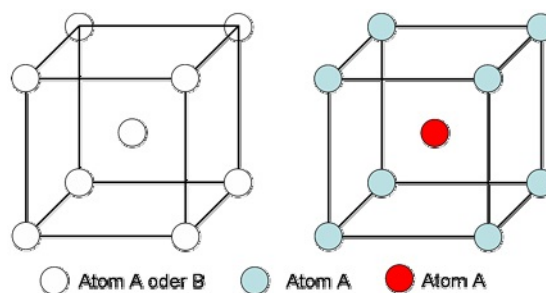


Abbildung 2: Struktur der ungeordneten (links) und geordneten (rechts) Legierung von FeCo.

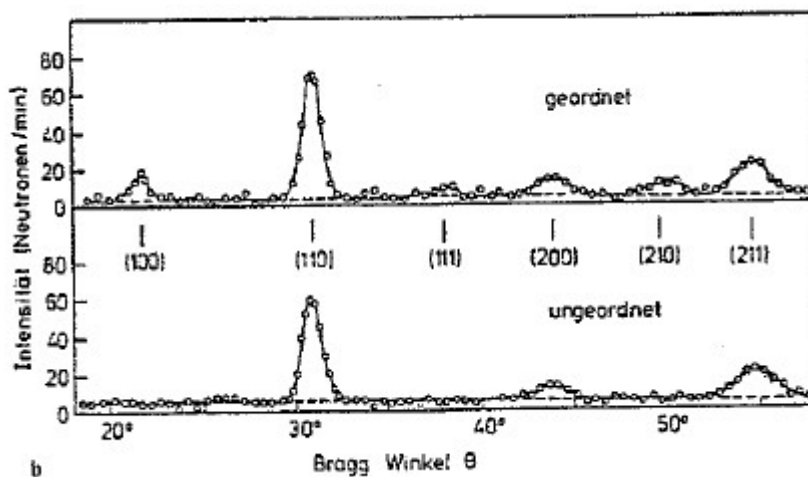


Abbildung 3: Bragg-Reflexe der beiden Modifikationen von FeCo.

## 5. Aufgabe: Atomformfaktor für radialsymmetrische Ladungsverteilung (3 P)

Bei der Röntgenstreuung an der Elektronenhülle spielt der sogenannte Atomformfaktor eine zentrale Rolle. Er ist definiert als die Fouriertransformierte der Ladungsdichte  $n(\vec{r})$  der Elektronen:

$$f(\vec{Q}) = \int d^3r \, n(\vec{r}) \, e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}}.$$

Für eine radialsymmetrische Ladungsverteilung  $n(r)$  lässt er sich schreiben als

$$f(\vec{Q}) = f(|\vec{Q}|) = 4\pi \int_0^\infty dr \, r^2 \, n(r) \frac{\sin(Qr)}{Qr}.$$

- a) Leiten Sie dieses Ergebnis unter Verwendung von Kugelkoordinaten her. (1 P)
- b) Bestimmen Sie den Formfaktor einer homogen geladenen Kugel mit der Ladungsverteilung

$$n(r) = \begin{cases} 0 & r > R \\ n_0 & r \leq R \end{cases}$$

und skizzieren Sie die Q-Abhängigkeit des Formfaktors. (2 P).