

## Übungsblatt 10

### 10.1 Strukturbestimmung (20 Punkte)

(a) Berechnen Sie für einen Streuvorgang, wie er in Aufg. 9.2 bearbeitet wurde (Ergebnis:  $\lambda = 0,771 \text{ \AA}$ ), die Geschwindigkeit, die Energie und die der Energie äquivalente Temperatur der Streuteilchen für die drei Methoden Röntgenstreuung (Photonen), Elektronenstreuung und Neutronenstreuung.

(b) Beantworten Sie in Stichworten, für welche Untersuchungen die die oben genannten Methoden besonders geeignet sind. Wo liegen ihre Vor- und Nachteile?

### 10.2 Kochsalz versus Kaliumchlorid: Der Röntgenstrukturfaktor (30 Punkte)

In Abbildung 1 sehen Sie eine kubische Elementarzelle eines Kochsalzkristalls ( $\text{NaCl}$ ). Die Kantenlänge dieses Würfels ist  $a$ . Bei den Koordinaten  $(0, 0, 0)$ ,  $(a/2, a/2, 0)$ ,  $(a/2, 0, a/2)$  und  $(0, a/2, a/2)$  befinden sich  $\text{Na}^+$  - Ionen. Die Chloridionen sitzen an den Orten  $(a/2, a/2, a/2)$ ,  $(0, 0, a/2)$ ,  $(0, a/2, 0)$  und  $(a/2, 0, 0)$ .

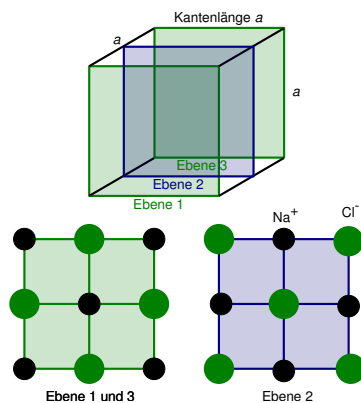


Abbildung 1: Kubische Elementarzelle von  $\text{NaCl}$

(a) Berechnen Sie den Strukturfaktor! Benutzen Sie eine Indizierung bezüglich der anfangs erwähnten kubischen Elementarzelle. Beachten Sie, dass die Atomformfaktoren  $f_{\text{Cl}^-}$  und  $f_{\text{Na}^+}$  nicht gleich sind.

(b) Im Fall von Kaliumchlorid, das in derselben Struktur kristallisiert wie Natriumchlorid, sind die Formfaktoren  $f_{\text{Cl}^-}$  und  $f_{\text{K}^+}$  in sehr guter Näherung gleich (Zusatzfrage: Warum ist das so?). Existiert unter dieser Annahme der  $(111)$ -Reflex? Begründen Sie Ihre Antwort rechnerisch!

### 10.3 Lineare Kette mit zweiatomigen Molekülen (30 Punkte)

Untersuchen sie die Normalschwingungen einer linearen Kette, in der die Kraftkonstanten der Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn abwechselnd  $C_1$  und  $C_2 = 1,5 \cdot C_1$  betragen. Die Massen seien gleich und der Abstand zum übernächsten Nachbarn beträgt  $a$ . Die Bewegung der Atome soll nur parallel zur Kette erfolgen. In der Abbildung sehen Sie eine Prinzip-Skizze. Die Kreise stehen für die Atome und die Nummern darin sollen nur zur Identifikation der einzelnen

Atome dienen, z.B. als Index (Durchnummerierung).

(a) Stellen Sie die Bewegungsgleichungen für benachbarte Teilchen auf mit dem Ansatz für die Auslenkung  $u$

$$u_2 = u_0 e^{ika}, \quad u_1 = u_{-1} e^{iqa}, \quad u_{-1} = u_1 e^{-iqa} \quad \text{und} \quad u = U e^{\pm i\omega t} \Rightarrow \ddot{u} = -\omega^2 u.$$

Weil Weihnachten vor der Tür steht hier die Lösung:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{C_1 + C_2}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{(C_1 + C_2)^2 - 2C_1 C_2 + 2C_1 C_2 \cos(qa)}$$

(b) Fertigen Sie eine Skizze der Dispersionsrelation an.

(c) Bestimmen Sie  $\omega_{\pm}(q)$  für  $q = 0$  und  $q = \pi/a$

(d) Was geschieht im Fall  $C_1 = C_2$ ? Vergleichen Sie mit dem in der Vorlesung oder der Literatur behandelten Ergebnis für die einatomige lineare Kette.

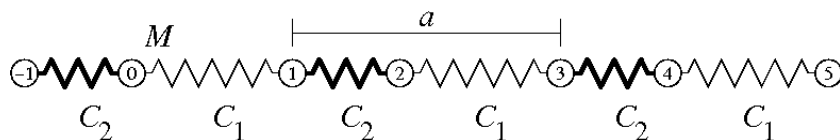


Abbildung 2: Lineare Kette mit zweiatomigen Molekülen.

#### 10.4 Dispersion eines dreidimensionalen Kristalls (20 Punkte)

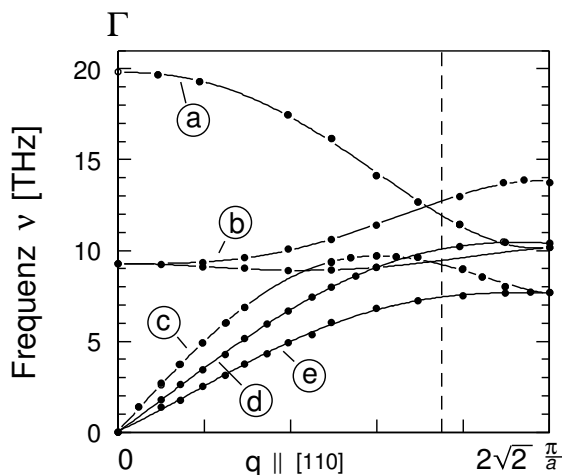
In der Abbildung sind die Phonon-Dispersionskurven eines fcc-Kristalls in  $[110]$ -Richtung gezeigt. Die Grenze der Brillouinzone liegt bei  $q = 2\sqrt{2} \cdot \pi/a$

(a) Vervollständigen Sie die Tabelle:

a	
b	
c	
d	<i>transversal akustisch</i>
e	

(b) Um welche der nachfolgend aufgeführten Substanzen handelt es sich bei dem Kristall? Begründen Sie kurz Ihre Wahl.

- Gold (Au)
- Calciumfluorid ( $\text{CaF}_2$ )
- Lithiumfluorid (LiF)



(c) Berechnen Sie aus dem Diagramm die longitudinale Schallgeschwindigkeit für  $q \ll \pi/a$  in  $[110]$  Richtung für die angegebene Substanz. Die kubische Gitterkonstante ist  $a = 4.026 \text{ \AA}$ .