

## Vorbemerkung

Dies ist ein korrigierter Übungszettel aus dem Modul physik411.

Dieser Übungszettel wurde von einem Tutor korrigiert. *Dies bedeutet jedoch nicht, dass es sich um eine Musterlösung handelt. Weder ich, noch der Tutor implizieren, dass dieses Dokument keine Fehler enthält.*

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf <http://martin-ueding.de/de/university/physik411/> gefunden werden.

Sofern im Dokument nichts anderes angegeben ist: Dieses Werk von Martin Ueding ist lizenziert unter einer [Creative Commons Namensnennung - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz](#).

[disclaimer]


# physik411 – Übung 9

Gruppe 2 – Florian Seidler

Martin Ueding \*

2013-06-19


Lizenz: CC-BY-SA 3.0 

Aufgabe	1	2	3	4	$\Sigma$
Punkte	/ 7	/ 18	/ 14	/ 10	 / 49

## 1. Chemische Bindungen

### 1a. Art der Bindung

Bei NaCl ist die Bindung eine ionische Bindung, da sich die Orbitale nicht wirklich überlappen.

Beim Silizium sind die Elektronenwolken schon noch lokalisiert, es ist also keine ionische Bindung. Da allerdings die Elektronen nicht delokalisiert sind, sollte es sich um eine kovalente Bindung handeln. Silizium ist ein Halbleiter, der im Grundzustand isoliert und wenig freie, delokalisierte Elektronen hat. 

### 1b. (Un)gerichtete Bindung



Beim NaCl handelt es sich **wahrscheinlich** um eine ungerichtete Bindung, da die Ionen **keine wirkliche Bindung miteinander eingeben**, die Orbitale sind noch einigermaßen rund, und nicht zu einer  $\sigma$ -Bindung zusammen. Zwar überlappen sich die Orbitale ein wenig, haben aber keine wirkliche  $\sigma$ - oder  $\pi$ -Bindung.

Beim Silizium ist die Bindung zwischen zwei Atomkernen zu erkennen, es handelt sich um eine gerichtete Bindung.



### 1c. Bloch-Wellen

In der Vorlesung von 2013-06-07 wurde der Realteil des Potentials  $u_k(r)$  gezeigt. Es hatte einige stark negative Peaks zwischen den Atomen, so dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung **wahrscheinlich auch Spitzen hat. Jedoch klingen delokalisierte Elektronen, die sich nahezu frei bewegen, nach einer näherungsweise homogenen Verteilung.**



---

\*mu@uni-bonn.de

## 2. Bravais-Gitter

### 2a. Skizze

Die Skizze ist in Abbildung 1.

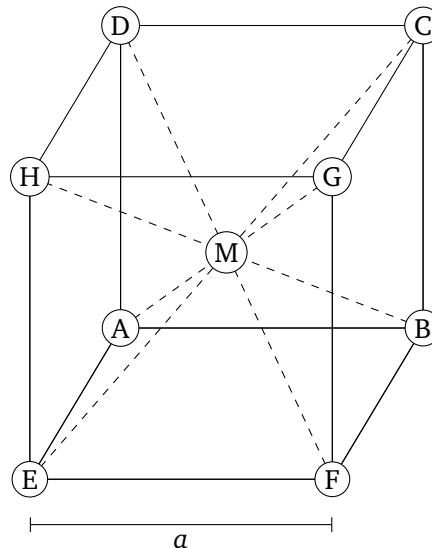


Abbildung 1: bcc Zelle. Die Punkte A bis H sind die Eckpunkte, M ist der Mittelpunkt.

### 2b. Basisvektoren des Bravaisgitters

Es handelt sich hier um einen **Würfel mit Kantenlänge  $a$** , also sind die Basisvektoren skalierte Versionen der kanonischen Basisvektoren des  $\mathbb{R}^3$ :

$$\mathbf{t}_i = a\hat{\mathbf{e}}_i$$



### 2c. Volumina der Zellen



Die konventionelle Zelle ist die, **aus der man den ganzen Kristall durch Translation aufbauen kann. Dies sollte dann das Parallelepiped sein, das von den  $\mathbf{t}_i$  aufgespannt wird. Da diese orthogonal sind und einen Würfel aufspannen, ist das Volumen  $V_{\text{konv.}} = a^3$ .**

**Die Einheitszelle ist die, bei der nur an den Eckpunkten Atome sitzen. Dies ist die quadratische Pyramide ABCDM aus Abbildung 1. Das Volumen ist ein Sechstel des ganzen Würfels, also:**



$$V_{\text{Einh.}} = \frac{a^3}{6}$$

## 2d. Gitterkonstante bestimmen

Innerhalb einer konventionellen Zelle sind von den Eckatomen jeweils nur ein Achtel, allerdings gibt es acht von ihnen. Und das mittlere Atom ist komplett drin. Also sind pro Einheitszelle gerade zwei volle Atome enthalten. Die Atomdichte  $\nu$  ist also:

$$\nu = \frac{2}{a^3}$$

Mit einer Dichte von  $\rho = 10,28 \text{ g cm}^{-3}$  und einer Molaren Masse von  $95,9 \text{ g mol}^{-1}$  sind dies

$$\nu = 107,2 \text{ mmol cm}^{-3} = 6,455 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

Somit erhalte ich für  $a$ :

$$a = 3,141 \times 10^{-10} \text{ m}$$



Die Gitterkonstante ist also im Bereich einiger Atomradii, was anschaulich gut passt.

## 2e. Welches Bravaisgitter?

Das gesamte Gitter, wenn man ignoriert, dass es von zwei verschiedenen Ionen besetzt ist, ist einfach nur kubisch.

Die Gitter von Chlor und Natrium einzeln sind kubisch flächenzentriert.



## 2f. Vektoren einzeichnen



Die Vektoren  $\mathbf{t}_n$  sind in Abbildung 2, sowie die Vektoren  $\mathbf{d}_n$  in Abbildung 3. Dabei bin ich davon ausgegangen, dass das interessantere Gitter der einzelnen Ionen gemeint ist. Das kubische Gitter des Gesamtkristalls hat sowohl als Bravaisgitter, als auch als konventionelle Zelle die gestreckten, kanonischen Basisvektoren des  $\mathbb{R}^3$ .

## 2g. Gitterkonstante von Natriumchlorid

In einer kubischen Zelle, die die Kantenlänge  $a/2$  hat, ist jeweils ein halbes Chlor- und ein halbes Natriumion enthalten. In einer ganzen konventionellen Zelle sind also acht mal so viele, also vier Ionenpaare enthalten.

Die Dichte ist  $\rho = 2,17 \text{ g cm}^{-3}$ . Die Masse pro Ionenpaar ist  $m = 9,70 \times 10^{-23} \text{ g}$ . Das eingenommene Volumen pro Ionenpaar ist  $m/\rho$ , die Größe der Zellen ist  $4m/\rho$ . Die Kubikwurzel daraus ist dann die Gitterkonstante  $a = 5,63 \times 10^{-10} \text{ m}$ .



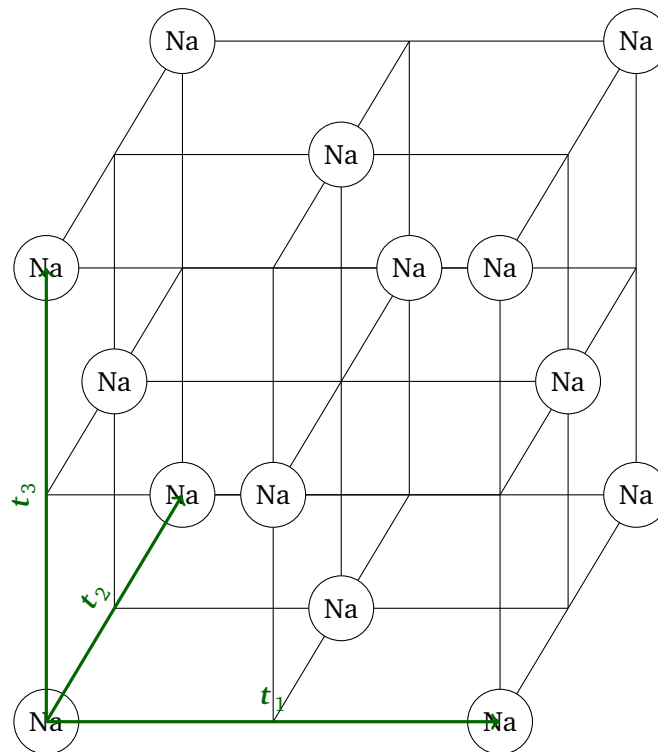


Abbildung 2: Das kubisch flächenzentrierte Gitter des Natriums. Eingezeichnet sind die Vektoren, die das Bravaisgitter aufspannen.

### 3. Reziprokes Gitter

#### 3a. Bravaisvektoren

Die Bravaisvektoren sind in Abbildung 4. Die Basisvektoren für die Einheitszelle in Abbildung 5. Das Gitter ist in Abbildung 6 dargestellt.

In kartesischen Koordinaten sind die Bravaisvektoren:

$$t_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix} a, \quad t_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ -3/2 \end{pmatrix} a$$

Und die Basisvektoren:

$$d_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} a, \quad d_2 = t_2, \quad d_3 = t_1, \quad d_4 = \begin{pmatrix} 3\sqrt{3}/2 \\ -1/5 \end{pmatrix} a$$



#### 3b. Reziprokes Gitter

Das reziproke Gitter  $g_i$  hat als definierende Eigenschaft:

$$\langle t_i, g_j \rangle = 2\pi\delta_{ij}$$

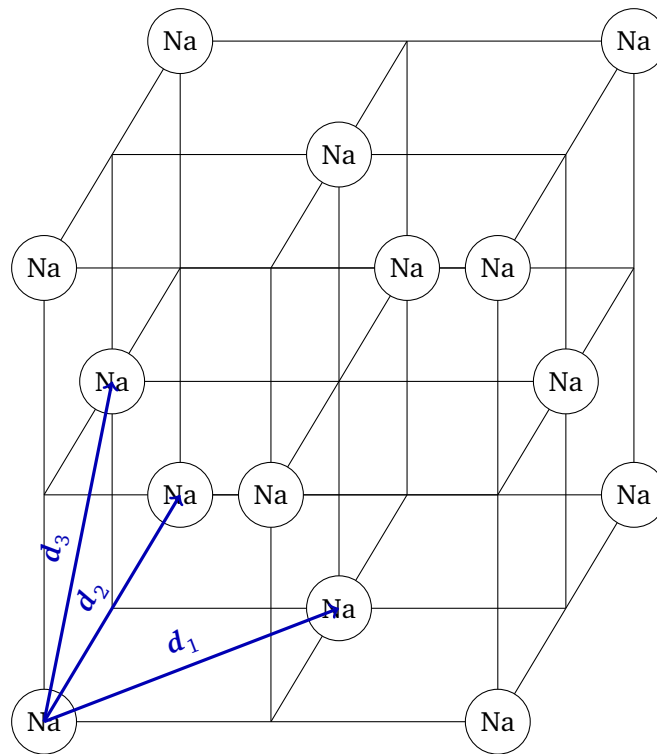


Abbildung 3: Das kubisch flächenzentrierte Gitter des Natriums. Eingezeichnet sind die Vektoren, die die Einheitszelle aufspannen.

Laut [Wikipedia, 2013c] kann ich die Bravaisvektoren in eine Matrix  $2\pi\mathbf{A}$  schreiben, transponieren, invertieren und erhalte eine Matrix  $\mathbf{B}$ , in der die Vektoren des reziproken Gitters stehen:

$$\mathbf{B} = (2\pi\mathbf{A}^T)^{-1}$$

Die Vektoren  $\mathbf{g}_i$  aus dem reziproken Gitter sind:

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

Das reziproke Gitter ist in Abbildung 7 dargestellt.



### 3c. Erste Brillouinzone

Laut [Wikipedia, 2013a] kann ich die Brillouinzone konstruieren, in dem ich mir einen Punkt aus dem Gitter aussuche und zu jedem Nachbarpunkt die Mittelsenkrechte einzeichne. Die Fläche, die sich dann ergibt, ist die erste Brillouinzone. Die Nachbarn sind in Abbildung 8 dargestellt. Die Zone ist in Abbildung 9 konstruiert.



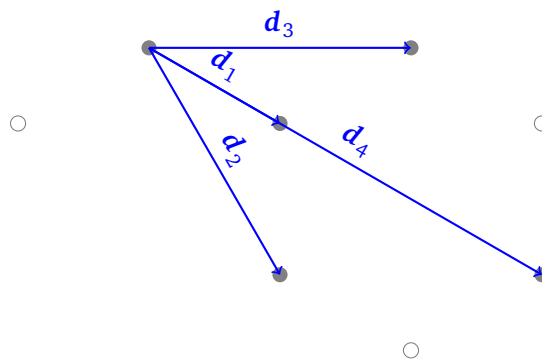


Abbildung 4: Bravaisvektoren für Graphen in blau.

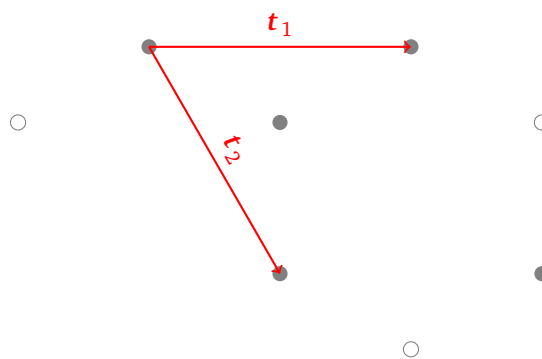


Abbildung 5: Basisvektoren für die Einheitszelle in rot.



### 3d. Millerindizes

Wenn ich [Wikipedia, 2013b] richtig verstanden habe, dann sind die Millerindizes letztlich die inversen Spurpunkte der Ebene.

Die Hyperebene zu (10) sollte dann also bei  $t_1$  den Spurpunkt 1 und bei  $t_2$  den Spurpunkt  $\infty$  haben, also parallel dazu sein. Sie sind in Abbildungen 10, 11, 12 sowie 13 eingezeichnet.



## 4. Bragg-Beugung und Röntgenstrahlung

### 4a. Reziprokes Gitter

Da hier die Gittervektoren einfach die kanonischen Einheitsvektoren sind, unterscheiden sich die Vektoren des reziproken Gitters nur durch einen Faktor. Die Vektoren sind also:

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{e}_x, \quad \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{e}_y, \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{e}_z$$



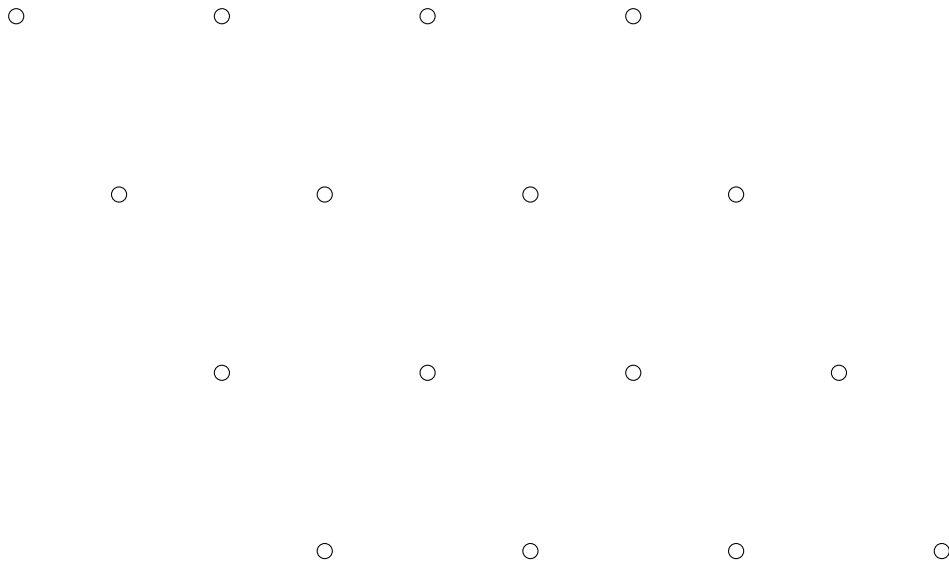


Abbildung 6: Das normale Gitter

#### 4b. Hyperebenenfamilie

Die Ebene (110) hat die Spurpunkte (1, 1, ∞). Es sind also die x-y-Ebenen. Sie sind in Abbildung 14 eingezeichnet.



#### 4c. Abstand der Gitterebenen

Der Abstand der Gitterebenen ist aus der Zeichnung auf dem Aufgabenblatt zu entnehmen, er ist das Ergebnis aus der vorherigen Aufgabe,  $a = 5,63 \times 10^{-10} \text{ m}$ .



#### 4d. Energie der $K_\alpha$ Strahlung

Bei der  $K_\alpha$  Linie wird ein Elektron aus dem  $n = 1$  Orbital geworfen, und ein anderes rückt aus  $n = 2$  nach. Mit der größeren, so nah am Kern nicht abgeschirmten Kernladung von  $Z$  ergibt sich als Energiedifferenz:

$$E_{K_\alpha} = Z E_{\text{Ryd}} \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = 428,4 \text{ eV}$$



#### 4e. Streuwinkel

Nach [Meschede, 2010, Seite 862] gilt für einen beliebigen Vektor aus dem reziproken Gitter:

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{g}$$

Der einfallende Strahl liege in x-z-Ebene, der Kristall parallel zur x-y-Ebene. Er trifft von oben auf den Kristall im Winkel  $\theta$  und verlässt den Kristall ebenfalls im Winkel  $\theta$ . Als Änderungen kommt nur



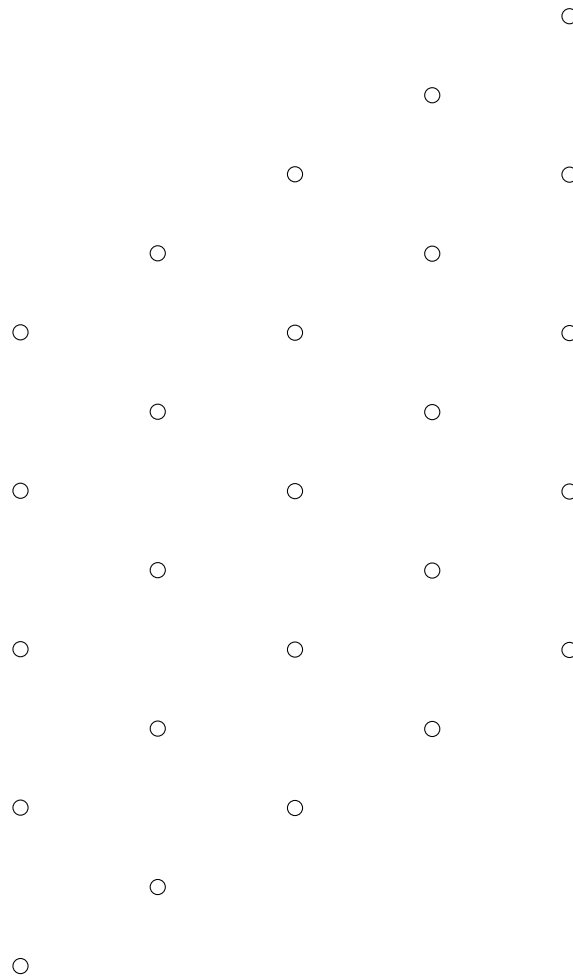


Abbildung 7: Gitterpunkte des reziproken Gitters.

die z-Komponente in Frage, so dass der Vektor aus dem reziproken Gitter ein Vielfaches von  $\mathbf{g}_3$  sein muss:

$$\Delta \mathbf{k} = \frac{2\pi}{a} n \hat{\mathbf{e}}_z$$

$$k \begin{pmatrix} \cos \theta \\ 0 \\ \sin \theta \end{pmatrix} - k \begin{pmatrix} \cos \theta \\ 0 \\ -\sin \theta \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a} n \hat{\mathbf{e}}_z$$

$$2k \sin \theta = \frac{2\pi}{a} n$$

$$\sin(\theta) = \frac{n\pi}{ak}$$

Mit  $k = 2\pi/\lambda$  erhalte ich:

$$\sin(\theta) = \frac{n\lambda}{2a}$$

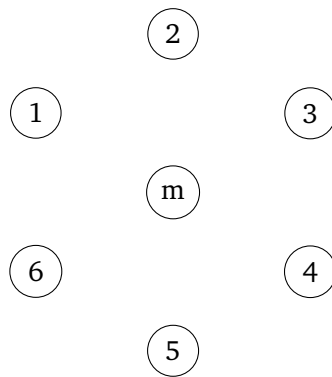


Abbildung 8: Unmittelbare Nachbarn eines Punktes im reziproken Gitter.

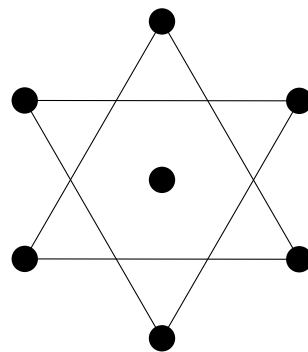


Abbildung 9: Konstruktion der ersten Brillouinzone. Die Fläche um den zentralen Punkt ist die gesuchte Zone.

Dies ist die Bragg-Bedingung. Damit stelle ich jetzt eine Tabelle für  $\theta$  in  $^\circ$  auf:

$n$	$\lambda_\alpha = 0,711 \text{ \AA}$	$\lambda_\alpha = 0,631 \text{ \AA}$
1	3,620 29	3,212 49
2	7,255 13	6,435 13
3	10,919 6	9,678 37
4	14,63	12,953 3



Die drei gegebenen Streuwinkel liegen dort gut drin. Wenn ich mit diesen  $n$  und  $\lambda$  sowie den Winkeln  $\theta$  die Gitterkonstante  $a$  ausrechne, erhalte ich:

$$a = 5,643 21 \text{ \AA}, \quad a = 5,641 7 \text{ \AA}, \quad a = 5,639 96 \text{ \AA}$$



## Literatur

[Meschede, 2010] Meschede, D. (2010). *Gerthsen Physik*. Springer, 24. edition.

[Wikipedia, 2013a] Wikipedia (2013a). Brillouin-Zone. <https://de.wikipedia.org/wiki/Brillouin-Zone>.

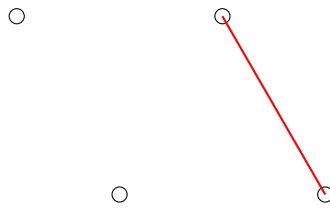


Abbildung 10: Hyperebene zum Millerindex (10).

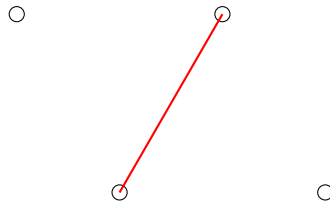


Abbildung 11: Hyperebene zum Millerindex (11).

[Wikipedia, 2013b] Wikipedia (2013b). Millersche Indizes. [https://de.wikipedia.org/wiki/Millersche\\_Indizes](https://de.wikipedia.org/wiki/Millersche_Indizes).

[Wikipedia, 2013c] Wikipedia (2013c). Reziprokes Gitter. [https://de.wikipedia.org/wiki/Reziprokes\\_Gitter](https://de.wikipedia.org/wiki/Reziprokes_Gitter).

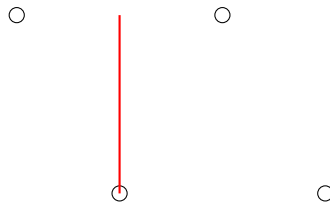


Abbildung 12: Hyperebene zum Millerindex (21).

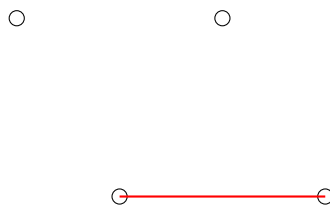


Abbildung 13: Hyperebene zum Millerindex (01).

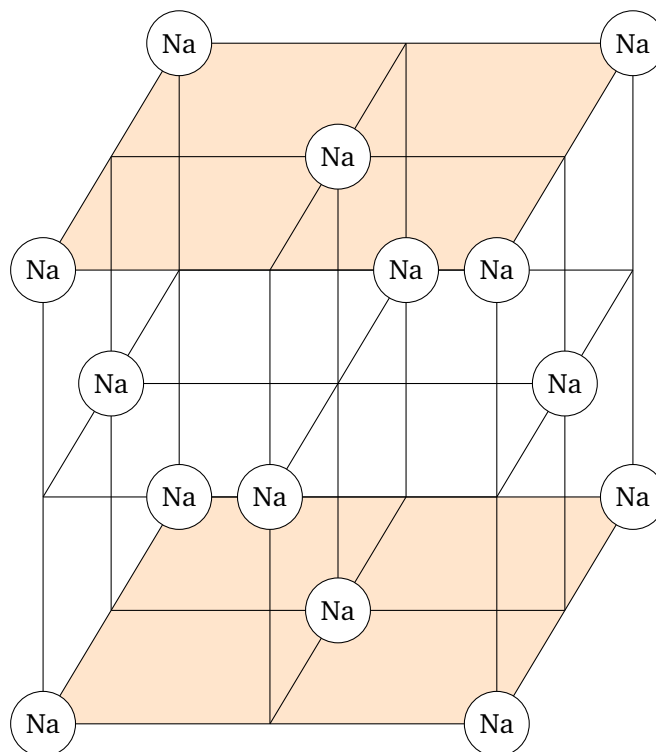


Abbildung 14: Die Hyperebenenfamilie (110).