4. Übung zur Festkörperphysik WS 2016/17

Ausgabe: 11.11.2016
Abgabe: bis 18.11.2016 12:00 Uhr
Briefkästen: 247-249

Prof. Dr. D. Suter

Aufgabe 1: Strukturfaktoren — 3 Punkte

Bestimmen Sie die Strukturfaktoren für die beiden folgenden kubischen Kristalle. Geben Sie weiterhin die Auswahlregeln für die auftretenden Reflexe an.

1. monoatomare fcc-Struktur
2. Diamantstruktur und Zinkblendenstruktur (fcc mit Basisatomen bei (0,0,0) und $\frac{1}{4}(1,1,1)$). Die Zinkblendenstruktur besitzt im Gegensatz zur Diamantstruktur zwei verschiedene Basisatome.

Aufgabe 2: Hybridorbital — 4 Punkte

Ein Hybridorbital ist ein Orbital, das aus einer Linearkombination der Wellenfunktionen der zu Grunde liegenden Atomorbitale bestimmt werden kann. Dieser Vorgang wird als Hybridisierung bezeichnet und in drei Fälle unterteilt. In dieser Aufgabe soll die sp^2-Hybridisierung untersucht werden.
Bestimmen Sie die Koeffizienten der Linearkombination für diesen Fall um die Eigenfunktion einer sp^2-Hybridisierung zu erhalten.
Beachten Sie, dass für die Kombination die Orthogonalität und Normalität gelten soll. Weiterhin soll die Beitrag der Hybridorbitale bezüglich |s> für alle drei Orbitale gleich sein und ein Hybridorbital in z-Richtung zeigen.

Aufgabe 3: Atomformfaktor in 2D — 3 Punkte

Aus der Vorlesung ist die allgemeine Form des Atomformfaktors bekannt

$$f_i = \int_{Vi} n(\vec{r}) exp\,(\mathrm{i}\phi)\,\mathrm{d}V_i \ ,$$

mit Ladungsverteilung $n(\vec{r})$ und Phase ϕ.

a) Leiten Sie daraus den Formfaktor in 2D ab und bestimmen Sie die Phase.

b) Berechnen Sie den Atomformfaktor jeweils für ein kreisförmiges 'Atom' (Radius R) und ein 'quadratisches 'Atom' (Kantenlänge $2a$).

c) Spezifizieren Sie den Formfaktor rechteckiger 'Atome' für den [1,0] und [1,1] Reflex einer einfach quadratischen Gitterstruktur (Gitterkonstante A)

Hinweis: für die Besselfunktionen $J_n(x)$ erster Ordnung gelten folgende Gleichungen:
$\int_0^a xJ_0(x)\mathrm{d}x = aJ_1(a)$ und $\int_0^{2\pi} \exp\left(\mathrm{i}a\cos(x)\right)\mathrm{d}x = 2\pi J_0(a)$