

Aufgabe 5: Direktes und reziprokes Gittern (7 Punkte)

a) Zeigen Sie, dass die Volumina von den Einheitszellen des direkten und reziproken Gitters, V und V^* , in folgender Beziehung zueinander stehen:

$$V^* = \frac{(2\pi)^3}{V}. \quad (1)$$

(2 Punkte)

b) Zeigen Sie, dass das reziproke Gitter des reziproken Gitters wieder das ursprüngliche Gitter ist. (2 Punkte)

c) Finden Sie die Gittern, die zu den folgenden dreidimensionalen Gittern reziprok sind: (i) kubisches Gitter; (ii) bcc-Gitter; (iii) fcc-Gitter; (iv) hexagonales Gitter. (3 Punkte)

Aufgabe 6: Beugung (9 Punkte)

a) Um mit Hilfe der Braggschen Bedingung

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (2)$$

die Beugungsdaten interpretieren zu können, braucht man die Röntgenstrahlung einer bestimmten Wellenlänge. Nehmen wir aber an, dass ein Experimentator nur eine Quelle hat, die ein kontinuierliches Spektrum von Wellenlängen produziert. Diskutieren Sie, wie man das gesamte Spektrum in einem Experiment ausnutzen kann. Welche Information kann man mit so einem Experiment erhalten? Welche Nachteile gibt es bei diesem Verfahren?

Alternativ kann man versuchen, die Spektralkomponente mit der gewünschten Wellenlänge selektieren. Wie kann man dies tun? (2 Punkte)

b) Beweisen Sie, dass die Braggsche Bedingung (2) aus der Laueschen Bedingung

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G} \quad (3)$$

folgt. Hierbei ist $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ die Differenz zwischen den eingehenden und ausgehenden Wellenvektoren, und \mathbf{G} ist einer der Vektoren des reziproken Gitters. (2 Punkte)

c) Der Strukturfaktor eines Gitters ist gegeben durch

$$S(\mathbf{K}) = \sum_{j=1}^M e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{d}_j} \quad (4)$$

wobei $\mathbf{d}_j, j = 1, \dots, M$ die Ortsvektoren der Basisatome einer primitiven Zelle sind. Im Folgenden betrachten wir einen Diamanten mit 8 Basisvektoren in einem kubisch primitiven Bravais-Gitter. Leiten Sie den Strukturfaktor für die Diamantstruktur her. Welche Werte kann $S(\mathbf{K})$ annehmen? (2 Punkte)

d) Beweisen Sie, dass der Abstand zwischen zwei parallelen Ebenen eines kubischen Gitters durch

$$d = a / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}, \quad (5)$$

gegeben ist, wobei a die Gitterkonstante ist, und (hkl) die Millerschen Indizes der Ebene bezeichnen.

Auf dem Beugungsbild eines kubisch primitiven Kristalls befinden sich die Linien, die den folgenden Bragg'schen Winkeln entsprechen: $\theta = 12.3, 14.1, 20.2, 24.0, 25.1, 29.3, 32.2, 33.1^\circ$. Mit Hilfe von Gleichungen (2) und (5) finden Sie die Millerschen Indizes der Ebenen, die diese Reflexionen produzieren.

Die Wellenlänge, die in diesem Versuch benutzt wurde, ist 1.542 \AA . Bestimmen Sie die Gitterkonstante. (3 Punkte)