

## ÜBUNGSAUFGABEN (V)

(Besprechung am Donnerstag, 28.11.2013)

### Aufgabe 1: (6 Punkte)

Zerlegt man die Gesamtelektronendichte  $\rho(\vec{r})$  eines Kristalls in die Elektronendichten der  $s$  Atome der Einheitszelle,  $\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1}^s \rho_j(\vec{r} - \vec{r}_j)$ , und ersetzt die Ortsvektoren  $\vec{r}_j$  durch  $\vec{r}_j = x_{1,j}\vec{a}_1 + x_{2,j}\vec{a}_2 + x_{3,j}\vec{a}_3$ , dann erhält man für die Beugung von Röntgenstrahlung an einer Netzebene ( $hkl$ ) für  $N$  Einheitszellen des Kristalls mit der Beugungsbedingung  $\Delta\vec{k} = \vec{G}$  (vgl. Vorlesung)

$$A(\Delta\vec{k}) = \int_V \rho(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k}\vec{r}} d^3x = N S_{\vec{G}} .$$

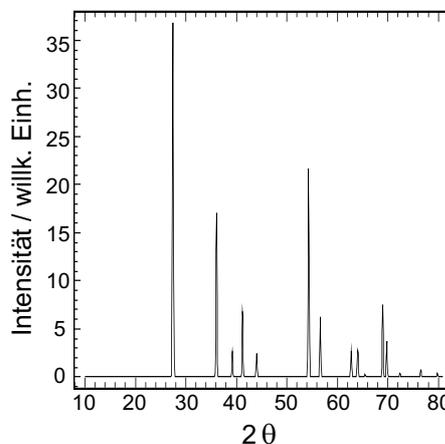
Die *Strukturfaktoren*  $S_{\vec{G}}$  sind mit den Atomformfaktoren  $f_j$  gegeben durch

$$S_{\vec{G}}(h, k, l) = \sum_{j=1}^s f_j e^{-2\pi i(hx_{1,j} + kx_{2,j} + lx_{3,j})} ; \quad f_j = \int \rho_j(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\vec{G}(\vec{r} - \vec{r}_j)} d^3x .$$

Berechnen Sie die  $S_{\vec{G}}$  mit als bekannt angenommenen  $f_j$  für das kubisch flächenzentrierte Raumgitter (einatomige Basis), die Diamantstruktur und die Kochsalzstruktur. Nennen Sie jeweils Beispiele ( $hkl$ ) oder eine Auswahlregel für verschwindende Strukturfaktoren.

### Aufgabe 2: (5 Punkte)

In einem Beugungsexperiment wird ein fein gemahlenes Pulver von Rutil ( $\text{TiO}_2$ ) mit einem kollimierten Röntgenstrahl der Wellenlänge  $\lambda = 1.54056 \text{ \AA}$  ( $\text{CuK}\alpha_1$ ) beleuchtet (Debye-Scherrer-Verfahren). Das Raumgitter von Rutil ist tetragonal mit den Gitterkonstanten  $a = b = 4.594 \text{ \AA}$  und  $c = 2.959 \text{ \AA}$ . Als Ergebnis erhält man die Intensität der Röntgenreflexe als Funktion des doppelten Bragg-Winkels  $\theta$  (siehe Grafik).<sup>1</sup>



- Berechnen Sie die Beugungswinkel der Röntgenreflexe für die Ebenenscharen ( $hkl$ ), die im Winkelbereich  $0 < 2\theta < 80^\circ$  liegen. Berücksichtigen Sie auch höhere Beugungsordnungen. (Ein Computerprogramm ist hier sehr hilfreich!)
- Ordnen Sie den beobachteten Reflexen durch Vergleich mit Ihrer Rechnung eine Ebene ( $hkl$ ) zu. Für die Indizierung bei höherer Beugungsordnung  $m$  werden die Millerschen Indizes mit  $m$  multipliziert (z.B. (420) für Beugung 2. Ordnung an (210)).
- Es stellt sich heraus, dass einige der berechneten Reflexe nicht im Spektrum erscheinen. Finden Sie dafür eine schlüssige Erklärung! (Betrachten Sie dazu die beiden möglichen Bravaisgitter von Rutil.)

<sup>1</sup>Ein Textfile mit den Daten finden Sie auf der Homepage der Übungen.

### Aufgabe 3: (5 Punkte)

Gegeben sei die abgebildete Temperaturabhängigkeit eines (800)-Reflexes einer monoatomar besetzten einfach-kubischen Kristallstruktur (Gitterkonstante:  $a = 0.4 \text{ nm}$ , Molmasse:  $m_{\text{mol}} = 63 \text{ g}$ ). Berechnen Sie aus diesen experimentellen Ergebnissen die Schwingungsfrequenz  $\omega$  der Gitterbausteine unter Verwendung des Debye-Waller-Faktors.

