

Übungsaufgaben zur Vorlesung

Physik der Kondensierten Materie I

WS 2020/2021

2 Strukturanalyse

2.4 Strukturanalyse – Laue- und Debye-Scherrer-Verfahren

Betrachten Sie die beiden Laue-Aufnahmen in den Abbildungen 1(a) und (b).

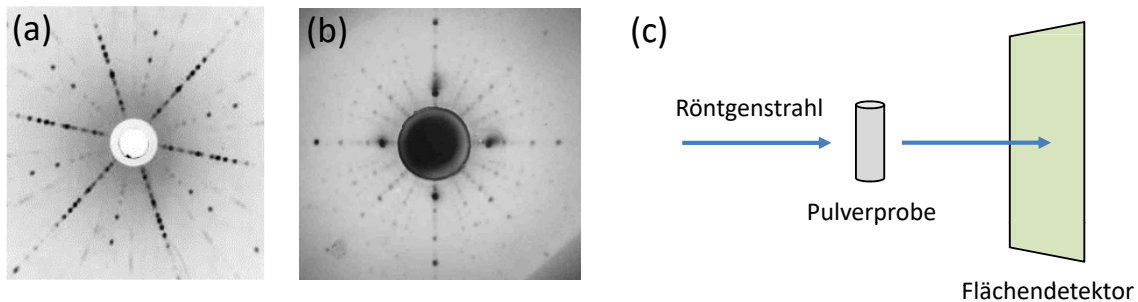


Abbildung 1: (a), (b) Laue-Aufnahmen von zwei Kristallen mit unterschiedlicher Kristallstruktur. (c) Schematische Darstellung der experimentellen Anordnung in einem Debye-Scherrer-Experiment.

- Wie muss das Röntgen-Spektrum für eine Laue- bzw. eine Debye-Scherrer-Aufnahme beschaffen sein?
- Um welche Kristallstrukturen handelt es sich? Sind eindeutige Aussagen über die Kristallstruktur möglich? Welche Größe muss man neben der Lage der Punkte auswerten, um den Typ des Bravais-Gitters oder die Atompositionen zu bestimmen?
- Skizzieren Sie das Debye-Scherrer-Beugungsbild, das man mit einem ebenen Flächendetektor aufnimmt, der senkrecht zum Röntgen-Strahl steht wie in Abbildung 1(c) gezeigt ist.
- Berechnen Sie die relativen Durchmesser von mindestens vier Debye-Scherrer-Ringen für ein Pulver aus einfach kubischen Kristallen und erläutern Sie, von welchen Netzebenen die Ringe kommen.

2.5 Strukturfaktor von CsCl und CsI

CsCl und CsI haben beide eine einfach kubische Struktur. Bei der Röntgenbeugung von CsCl und CsI stellen Sie fest, dass bei CsI der (100) Reflex ausgelöscht ist, während er bei CsCl klar vorhanden ist. Wie kann man dieses experimentelle Ergebnis erklären?

2.6 Strukturfaktor von Diamant

Die Kristallstruktur der Diamantstruktur ist fcc mit einer zweiatomigen Basis. Die konventionelle Zelle der Diamantstruktur enthält insgesamt 8 Atome.

- Bestimmen Sie den Strukturfaktor S_{hkl} der so gewählten Basis.
- Berechnen Sie die Millerschen Indizes, für die eine Auslöschung von Reflexen auftritt.
- Zeigen Sie ferner, dass die erlaubten Beugungsreflexe entweder die Bedingung (i) $h + k + \ell = 4n$ mit $n \in \mathbb{Z}$ erfüllen, wobei alle Indizes *gerade* sind, oder aber die Bedingung (ii) erfüllen, dass alle Indizes *ungerade* sind.
- Was ändert sich, wenn wir von einer Diamant zu einer Zinkblende-Struktur übergehen?

2.7 Ein Debye-Scherrer Experiment

In einem Debye-Scherrer Pulverdiffraktionsexperiment haben wir mit monochromatischer Röntgen-Strahlung drei Proben A, B und C untersucht. Wir wissen schon, dass die drei untersuchten Materialien eine fcc-, bcc- und Diamantstruktur besitzen, wir wissen aber noch nicht, welche Probe welche Struktur hat. Unsere Debye-Scherrer-Aufnahmen der drei Proben zeigen bei folgenden Winkeln Diffraktionsringe:

Probe A	Probe B	Probe C
42.2°	28.8°	42.8°
49.2°	41.0°	73.2°
72.0°	50.8°	89.0°
87.3°	59.6°	115.0°

- Identifizieren Sie die Kristallstrukturen der Proben A, B und C. Nehmen Sie dazu an, dass die beobachteten Röntgenreflexe Beugungsreflexen 1. Ordnung entsprechen.
- Die Wellenlänge der Röntgenstrahlung sei $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$ (Cu- K_α -Strahlung). Welche Gitterkonstante a hat die konventionelle kubische Zelle?