

3. Übungsblatt

Verteilung 9. Oktober 2007
Besprechung 17./18. Oktober 2007

Thema: Streuung an einem Festkörper (Teil 2)

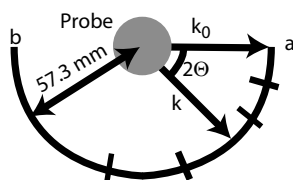
Aufgabe 1: Interferenzpunkte mit dem Laue-Verfahren

Das Laue-Verfahren wird oft dazu benutzt, einen **Einkristall** mit bekannter Kristallstruktur im Raum zu orientieren. Dabei wird ein Röntgenstrahl mit **kontinuierlichem Spektrum** auf den Kristall gerichtet und die Lage der Interferenzpunkte bestimmt (d.h. die Beugungswinkel, für die man konstruktive Interferenz bei einer bestimmten Wellenlänge beobachtet).

Schätzen Sie die maximale Anzahl von Interferenzpunkten ab, wenn die Spannung an der Röntgenröhre 60kV beträgt und der Kristall ein einfach kubisches Gitter mit einer Gitterkonstanten von 2.5 Å ist.

Aufgabe 2: Bestimmung einer Kristallstruktur mit dem Debye-Scherrer-Verfahren

Beim Debye-Scherrer-Verfahren wird eine Probe eines **pulversierten Kristalls** mit **monochromatischer Röntgenstrahlung** bestrahlt. Die Kristallrichtungen im Pulver sind statistisch verteilt. Um die Probe ist ein Film konzentrisch angebracht (siehe Skizze).



Bei Untersuchung eines Elementes findet man auf dem Filmstreifen Linien bei 39mm, 56.5mm, 70mm, 83mm, 95.5mm, 108.5mm, 122mm, 138.5mm und 165mm (von a aus gemessen). Dabei wurde Röntgenstrahlung mit einer Wellenlänge $\lambda = 0.15401$ nm verwendet (die sogenannte Cu K_α -Linie).

1. Ordnen Sie die Reflexe den Kristallebenen (hkl) zu.
2. Bestimmen Sie die Kristallstruktur.
3. Berechnen Sie die Gitterkonstante. Um welches Element handelt es sich vermutlich?

Tipp zu Punkt 1 und 2:

Nehmen Sie an, dass der Kristall eine kubische Struktur mit Gitterkonstanten d hat (entspricht der Länge der kubischen Einheitszelle). Beachten Sie dabei, dass es drei Typen von kubischen Kristallen gibt (einfach, flächen-zentriert und raum-zentriert). Ausgehend von einer kubischen Einheitszelle unterscheiden sie sich nur durch unterschiedliche Basen (ein-atomig, vier-atomig und zwei-atomig).

Die Bragg-Bedingung kann man umformen zu

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4d^2} (h^2 + k^2 + l^2), \quad (1)$$

wobei h,k,l sind die Miller-Indices sind.

Berechnen Sie θ_i und $\sin^2 \theta_i$ für $i = 1 \dots 9$.

Suchen Sie Zahlentripel (h_i, k_i, l_i) und ein Tripel (h_1, k_1, l_1) , so dass nach Gleichung (1) für alle i gilt:

$$\frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_1} = \frac{(h_i^2 + k_i^2 + l_i^2)}{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)} \quad (2)$$

Starten Sie mit $(h,k,l)=(1,0,0)$.

Beziehen Sie danach die Basis mit ein, d.h. berücksichtigen Sie den Strukturfaktor:

$$S(hkl) = \sum_{\text{Atome der EZ}} \exp(i\vec{G}_{hkl}\vec{r}_i) \cdot \gamma_{\text{Atom}}, \quad (3)$$

wobei $\vec{G}$ ein reziproker Gittervektor und $\vec{r}_i$ die Lage des i-ten Basisatoms in der Einheitszelle ist. Unterscheiden Sie dabei sc, fcc und bcc.