

Übungsblatt 9

9.1 Reziprokes Gitter in zwei Dimensionen (40 Punkte)

Durch folgende primitive Translationen wird ein zweidimensionales Punktgitter definiert:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} .$$

Skizzieren Sie einen Ausschnitt aus diesem Gitter. Dieser Ausschnitt sollte etwa fünf Gitterpunkte in jede Raumrichtung umfassen.

- Welche Symmetrien weist dieses Gitter auf?
- Zeichnen Sie eine Wigner-Seitz-Zelle in das Gitter ein.
- Berechnen Sie die primitiven Translationen des reziproken Gitters und skizzieren Sie einen Ausschnitt des reziproken Gitters. Auch hier ist es zeichnerisch praktisch, fünf Gitterpunkte des reziproken Gitters in jede Raumrichtung zu zeichnen.
- Konstruieren Sie die erste Brillouinzone!

9.2 Röntgenbeugung: Bragg-Reflexion (30 Punkte)

Das Alkalimetall Kalium liegt bei Normalbedingungen kristallin mit bcc-Struktur vor und hat eine Massendichte von $0,856 \text{ g/cm}^3$. Eine Debye-Scherrer-Aufnahme liefert für den innersten Beugungsring einen Öffnungswinkel von $2 \cdot 2\theta = 23,72$ Grad. Dieser Reflex ist ein Reflex erster Ordnung. Berechnen Sie die Wellenlänge der benutzten Röntgenstrahlung! Bestimmen Sie hierzu zunächst die kubische Gitterkonstante von Kalium unter der Annahme die Kaliumatome seien harte Kugeln, die möglichst dicht gepackt den Kristall bilden. Wir indizieren bezüglich der kubischen Elementarzelle. Der kürzeste reziproke Gittervektor, der bei einer bcc-Struktur zu einem Beugungsreflex führt, ist dann der Vektor \vec{G}_{110} . Der (100)-Reflex tritt nicht auf.

9.3 Ewald-Konstruktion im Zweidimensionalen (30 Punkte)

In Abbildung 1 sehen Sie einen Ausschnitt aus einem zweidimensionalen reziproken Gitter. Ein einfallender Röntgenstrahl mit Wellenvektor \vec{k}_0 trifft auf den ebenfalls zweidimensionalen Kristall im Realraum. Im Reziproken Raum sieht dann die Situation beispielsweise¹ aus wie in Abbildung 1 dargestellt. Führen Sie die Ewald-Konstruktion durch. Welcher Reflex ist möglich? Benennen Sie diesen bezüglich der beiden angegebenen Translationsvektoren \vec{b}_1 und \vec{b}_2 !

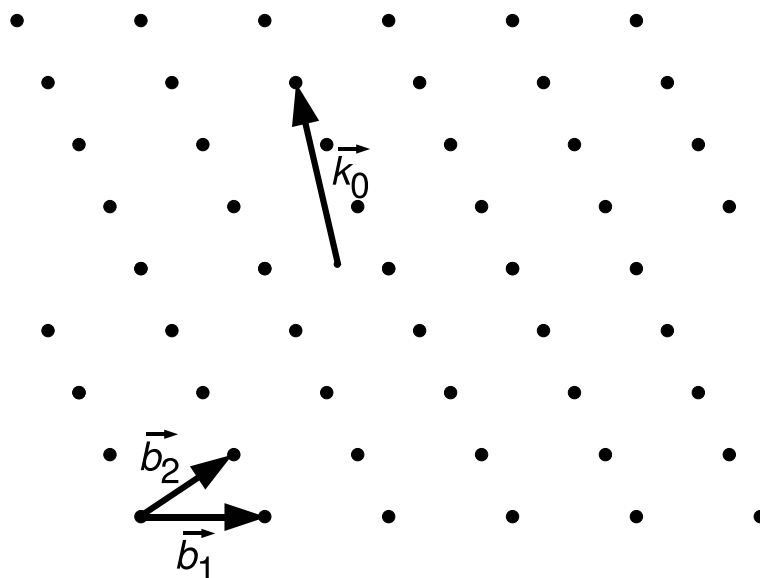


Abbildung 1: Reziprokes Gitter, aufgespannt von den Vektoren \vec{b}_1 und \vec{b}_2 .

¹Der reziproke Gitterpunkt, an dem die Pfeilspitze des einlaufenden Röntgenstrahls endet ist willkürlich gewählt. Auf die Streuung und deren mathematische Beschreibung hat das keinen Einfluss.