2. Übung zur Vorlesung
Methoden moderner Röntgenphysik II:
Streuung und Abbildung
SS 2014
G. Grübel, O.H. Seeck, M. Martins, E. Weckert

Übung: M.A. Schroer

22. 04. 2014

Aufgabe 1: Diamantstruktur

Das Diamantgitter kann durch 2 flächenzentrierte kubische (fcc) Gitter beschrieben werden, die relativ zueinander um 1/4 der Würfeldiagonale verschoben sind. Die kubische Einheitszelle hat eine Seitenlänge von 0.356679 nm.

a) Berechnen sie den Strukturfaktor $F(\vec{Q})$ des Diamantgitters analog zu dem der fcc Struktur aus der Vorlesung.

b) Überprüfen sie, ob es Auslöschungsregeln gibt.

c) Berechnen sie die Positionen der Braggreflexe mit h, k, l ≤ 4 im reziproken Raum.

d) Bestimmen sie die Intensitäten dieser Reflexe. Betrachten sie hierfür $I(\vec{Q}) = F(\vec{Q}) \cdot F^{\star}(\vec{Q})$.

Zusatzaufgabe: Strukturfaktor harter Kugeln

Ein einfaches Model für Flüssigkeiten ist das harter Kugeln (*hard sphere system*). Unter bestimmten Näherungen lässt sich der zugehörige Strukturfaktor durch folgenden Ausdruck darstellen:

$$S(y) = \frac{1}{X^2(y) + Y^2(y)} \tag{1}$$

mit

$$X(y) = 1 - 12 \cdot \Phi \left[A f_1(y) + B f_2(y) \right], \tag{2}$$
$$Y(y) = -12 \cdot \Phi \left[A f_3(y) + B f_4(y) \right], \tag{3}$$

wobei gilt

$$A = \frac{1+2\Phi}{(1-\Phi)^2}, \tag{4}$$
$$B = \frac{1+0.5\Phi}{(1-\Phi)^2} \tag{5}$$

und

$$f_1(y) = \frac{y - \sin y}{y^3}, \tag{6}$$
$$f_2(y) = \frac{\cos y - 1}{y^2}, \tag{7}$$
$$f_3(y) = \frac{f_2(y)}{y} + \frac{1}{2y}, \tag{8}$$
$$f_4(y) = -y f_1(y). \tag{9}$$

Hierbei ist $y = q\sigma$, wobei σ der Kugeldurchmesser ist, und Φ der Volumenbruch, d.h. der Anteil am Gesamtvolumen, den die Kugeln einnehmen.

Plotten sie den Strukturfaktor für $\Phi = 0.01$, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 und 0.5 als Funktion von y. Wie verändern sich
a) die Position des ersten Maximums,
b) dessen Höhe,
c) $S(0)$?