

**2. Übung zur Vorlesung**  
Methoden moderner Röntgenphysik II:  
Streuung und Abbildung  
SS 2015

G. Grübel, M. Martins, E. Weckert

05.05.2015

Übung: M.A. Schroer

**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 Bragg-Reflexe mit  $h, k, l \leq 4$  im reziproken Raum.
- d) Bestimmen sie die Intensitäten dieser Reflexe. Betrachten sie hierfür

$$I(\vec{Q}) = F(\vec{Q})F^*(\vec{Q}).$$

- e) Welche weiteren Beiträge muss man berücksichtigen, um ein Diffraktogramm zu analysieren?

**2. Röntgenkleinwinkelstreuung (small angle X-ray scattering SAXS)**

Die allgemeine Streuintensität in einem SAXS-Experimente für verdünnte Proben ist gegeben durch

$$I(Q) \propto d T(d) P(Q),$$

wobei  $d$  die Probendicke,  $T(d)$  die (Dicken-abhängige)Transmission, und  $P(Q)$  der Partikelformfaktor sind.

- a) Zeigen sie, dass es eine optimale materialabhängige Probendicke  $d_{\text{opt}}$  für SAXS - Experimente gibt.
- b) Bestimmen sie die optimale Glaskapillardicke für eine wässrige Lösung bei Experimenten mit  $8$  keV bzw. bei  $30$  keV Röntgenstreuung.  
(Hilfreiche Information unter: [http://henke.lbl.gov/optical\\_constants/](http://henke.lbl.gov/optical_constants/))
- c) Berechnen sie den Formfaktor  $P(Q)$  einer Kugel.
- d) Ein experimentelles Setup benutzt einen  $5$ mm großen Beamstop, um den transmittierten direkten Strahl von  $12$  keV zu blockieren. Der direkte Strahl trafe die Mitte der CCD Kamera ((Durchmesser  $165$ mm)), die sich in einem Abstand von  $4.0$  m befindet. Welcher  $Q$ -Bereich ist für sie zugänglich?
- e) Welche Näherung für den Formfaktor kennen sie?

**2 Tutorial to the lecture**  
Methoden moderner Röntgenphysik II:  
Streuung und Abbildung  
SS 2015  
G. Grübel, M. Martins, E. Weckert

05.05.2015  
Tutorial: M.A. Schroer

**1. Diamond structure:**

The diamond lattice can be described by 2 face centered cubic (fcc) lattices that are shifted by  $1/4$  along the cube diagonal relative to each other. The cubic unit cell has a side length of 0.356679 nm.

- a) Calculate the unit cell structure factor  $F(\vec{Q})$  of the diamond analogous to that of the fcc structure from the lecture.
- b) Check if there are selection rules.
- c) Calculate the positions of the Bragg reflections with  $h, k, l \leq 4$  in the reciprocal lattice.
- d) Determine the intensities of the reflections. Use

$$I(\vec{Q}) = F(\vec{Q})F^*(\vec{Q}).$$

- e) What are additional contributions that have to be taken into account to analyse a diffractogram?

**2. Small angle X-ray scattering (SAXS)**

The general scattering intensity in a SAXS experiment on diluted samples is given by

$$I(Q) \propto d T(d) P(Q),$$

wherein  $d$  is the sample thickness,  $T(d)$  the (density dependent) transmission, and  $P(Q)$  the particle form factor.

- a) Show that there is an optimum material dependent sample thickness  $d_{\text{opt}}$  for SAXS measurements.
- b) Determine the optimum glass capillary thickness for aqueous suspension in experiments with 8 keV and 30 keV x-ray energy .  
(Helpful information: [http://henke.lbl.gov/optical\\_constants/](http://henke.lbl.gov/optical_constants/))
- c) Calculate the form factor  $P(Q)$  of a sphere.
- d) An experimental setup uses a 5mm large beam stop, to block the direct x-ray beam of 12 keV. The direct beam hits the center of the CCD camera (diameter 165mm), placed at a distance of 4.0 m. What  $Q$ -region is accessible?
- e) What approximations of the form factor exist?