

2. Übung zur Vorlesung

Methoden moderner Röntgenphysik II: Streuung und Abbildung

SS 2016

G. Grübel, M. Martins, E. Weckert

26.04.2016

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.

- Berechnen Sie den Strukturfaktor $F(\vec{Q})$ des Diamantgitters analog zu dem der fcc Struktur aus der Vorlesung.
- Überprüfen Sie, ob es Auslöschungsregeln gibt.
- Berechnen Sie die Positionen der Bragg-Reflexe mit $h, k, l \leq 4$ im reziproken Raum.
- Bestimmen sie die Intensitäten dieser Reflexe. Betrachten sie hierfür

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

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

2. Tutorial to the lecture
Methoden moderner Röntgenphysik II:
Streuung und Abbildung
SS 2016
G. Grübel, M. Martins, E. Weckert

26.04.2016
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 $F(\bar{Q})$ 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

$$I(\bar{Q}) = F(\bar{Q})F(\bar{Q}).$$

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