

**Aufgabe 18: Kristallstrukturuntersuchung mit dem Debye-Scherrer-Verfahren**

Zwei pulverförmige Proben mit kubischer Einheitszelle werden mit einer Debye-Scherrer-Aufnahme analysiert. Die Winkelabstände zwischen den ersten vier Beugungsringen zum einfallenden Strahl betragen für Probe A ungefähr  $42,2^\circ$ ;  $49,2^\circ$ ;  $72,0^\circ$  und  $87,3^\circ$  und für Probe B etwa  $28,8^\circ$ ;  $41,0^\circ$ ;  $50,8^\circ$  und  $59,6^\circ$ .

- a) Identifizieren Sie die Bravaisgitter von A und B!
- b) Die Wellenlänge der einfallenden Strahlung ist  $\lambda = 0,15$  nm. Bestimmen Sie die Gitterkonstante der kubischen Einheitszellen!

**Aufgabe 19: Lineare Kette 1: Zustandsdichte**

Unter der Voraussetzung, dass nur Kräfte zwischen direkt benachbarten Atomen wirken,

lautet die Dispersionsrelation einer einatomigen linearen Kette 
$$\omega = \omega_{\max} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

wobei  $\omega_{\max}$  die maximale Frequenz im Spektrum longitudinaler Phononen einer Kette mit dem Atomabstand  $a$  und der Atommasse  $M$  sei.

- a) Berechnen Sie die Zustandsdichte  $D(\omega)$  der longitudinalen Phononen. Skizzieren Sie den Verlauf der Funktion und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Zustandsdichtefunktion, die man für die Debyesche Kontinuumsnäherung erhält.
- b) Welcher Zusammenhang besteht zwischen der Frequenz  $\omega_{\max}$  und der oberen Grenzfrequenz  $\omega_D$ , welche in der Debyeschen Näherung angesetzt wird?

**Aufgabe 20: Lineare Kette 2**

- a) Leiten Sie die Dispersionsrelation  $\omega(q)$  für eine lineare Anordnung von Atomen identischer Masse  $M$  her, die abwechselnd durch zwei Arten von „Federn“ (Kopplungskonstanten  $f_1$  und  $f_2$ ) verbunden sind. Der Abstand zwischen zwei Atomen sei  $a$ . Berücksichtigen Sie nur die Wechselwirkung zwischen den nächsten Nachbarn. (Hinweis: Führen Sie zweckmäßigerweise eine Gitterkonstante  $a_0 = 2a$  ein!)
- b) Vergleichen Sie die in a) erhaltene Dispersionsrelation mit
  - i) der für identische „Federn“ zwischen den Atomen,
  - ii) der für identische „Federn“, aber unterschiedlichen Massen jeweils benachbarter Atome. Diskutieren Sie die Unterschiede im Schwingungsverhalten der Atome zueinander auf den beiden Zweigen. Betrachten Sie insbesondere die Grenzfälle  $q \rightarrow 0$  und  $q \rightarrow \pi/a_0$ .