

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 ω_{\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 der Frequenz ω_{\max} und der oberen Grenzfrequenz ω_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 $q \rightarrow \pi/a_0$.