Aufgabe 5.1

a) In der primitiven Basis befindet sich insgesamt ein Atom, welches achtfach aufgeteilt ist. Durch geschicktes verschieben der Basis ist es möglich nur noch über ein Atom zu summieren, welches bei (0,0,0) liegt, man erhält somit für den Strukturfaktor $S = f$, dies bestätigt die Aussage.

b) Für die primitive Basis gilt $a = b = c = \frac{\sqrt{3}}{2} a_{\text{kub}}$, $\alpha = \beta = \gamma = \arccos(-\frac{1}{3})$, es folgt:

$$\text{primitiv:} \qquad \frac{1}{d_{hkl}^2} = 2\frac{\left(h^2 + k^2 + l^2 + kl + hk + hl\right)}{a^2} \tag{1}$$

$$\text{kubisch:} \qquad \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \tag{2}$$

$$\tag{3}$$

c) Die Bedingung für einen Reflex lautet: $2d \sin\theta = \lambda \quad \Rightarrow 2\theta = 2 \arcsin \frac{a}{20d}$:

(hkl)	2θ primitiv	(hkl)	2θ kubisch
(100)	8.11°	(110)	8.11°
(110)	14.07°	(200)	14.07°
(200)	16.26°	(211)	16.26°
$(21\bar{1})$	18.19°	(110)	18.19°
(111)	19.95°	(110)	19.95°
(210)	21.57°	(110)	21.57°

d) Berechne das reziproke Gitter nach Matrixformalismus:

$$G = \frac{4\pi}{a}\left(\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}^{-1}\right)^{\mathsf{T}} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$G' = \frac{2\pi}{a}\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1}\right)^{\mathsf{T}} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Dadurch wird deutlich, dass $h' = k + l, k' = h + l, l' = h + k$, eingesetzt in $h + k + l = m \in \mathbb{Z}$ folgt: $h' + k' + l' = 2m \in \mathbb{Z}$

e) $h' + k' + l' = 2m + 1 = 2(h + k + l)$, diese Ebene ist somit nicht zu erreichen.

Aufgabe 5.2

a) Nutze Formel für radialsymmetrische Verteilungen aus dem Skript:

$$f(G) = 4\pi \int_0^\infty \mathrm{d}r r^2 \rho(r) \frac{\sin Gr}{Gr} \tag{6}$$

$$= \frac{4\pi q_0 R_0^2}{GR_0} \sin(GR_0), \qquad q_0 = 60 \cdot 6e = 360e \tag{7}$$

b) Die Bedingung zum Auftreten von Beugungsreflexen lautet $\sin\theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} \Rightarrow 2\theta = 2 \arcsin \frac{\lambda}{2d_{hkl}}$. Für eine kubische Basis gilt: $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$. Reflexe treten nur auf, falls alle h, k, l entweder gerade oder ungerade.

c) Für die Intensität gilt: $I \propto S_G^2$. Außerdem $G = \frac{2\pi}{d}$

$$\frac{I_{111}}{I_{200}} = \left(\frac{d_{111} \sin(\frac{2\pi R_0}{d_{111}})}{d_{200} \sin(\frac{2\pi R_0}{d_{200}})}\right)^2 \approx 10^{28} \tag{8}$$

(hkl)	2θ	Reflex #
(111)	10.85°	(1)
(200)	12.53°	
(220)	17.76°	(2)
(311)	20.86°	(3)
(222)	21.79°	(4)
(400)	25.22°	
(331)	27.52°	(5)
(420)	28.25°	(6)
(422)	31.01°	(7)
(333)	32.95°	(8)

d) $f = f(G), \quad G = \frac{2\pi}{d}, \quad d = \frac{1}{2\sin\theta}\lambda \quad \Rightarrow G = 4\pi \sin\theta \frac{1}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad f = 4\pi q_0 R_0^2 \operatorname{sinc}(GR_0)$
$f = 4\pi q_0 R_0^2 \operatorname{sinc}(4\pi \sin\theta \frac{R_0}{\lambda}) \quad \Rightarrow \quad f(\theta = 0) = 4\pi q_0 R_0^2$