

**Aufgabe 2-1: Abstand zwischen den Ebenen**

Betrachten Sie eine Ebene  $hkl$  in einem Kristallgitter.

(a) Zeigen Sie, dass der reziproke Gittervektor  $G = ha^* + kb^* + lc^*$  senkrecht auf dieser Ebene steht.

(b) Beweisen Sie, dass der Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden parallelen Ebenen des Gitters gleich  $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|G|}$  ist.

(c) Zeigen Sie für ein tetragonal Gitter, dass gilt

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

**Aufgabe 2-2: Hexagonales Raumgitter**

Die Basisvektoren des hexagonalen Raumgitters können folgendermaßen geschrieben werden:

$$a = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}\right)\hat{X} + (a/2)\hat{Y}, \quad b = -\left(\frac{\sqrt{3}a}{2}\right)\hat{X} + (a/2)\hat{Y}, \quad c = c\hat{Z},$$

(a) Zeigen Sie, dass das Volumen der primitiven Zelle gleich  $\frac{\sqrt{3}a^2c}{2}$  ist.

(b) Zeigen Sie, dass

$$a^* = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\right)\hat{X} + (2\pi/a)\hat{Y}, \quad b^* = -\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\right)\hat{X} + (2\pi/a)\hat{Y}, \quad c^* = \left(\frac{2\pi}{c}\right)\hat{Z}$$

die Vektoren des reziproken Gitters sind, so dass das Gitter nach einer achsialen Drehung zu sich selbst reziprok ist.

**Aufgabe 2-3: Pulverdiagramme**

Bestimmen Sie, die Liste in der Reihenfolge zunehmender Winkel, die Werte von  $2\theta$  und  $(hkl)$  für die ersten drei Zeilen (die der niedrigsten  $2\theta$ -Werte) auf die Pulvermuster der Substrate mit den folgenden Strukturen, wobei Cu  $K\alpha$  ist der einfallenden Strahlung.

- a) Einfache kubische ( $a = 3,00 \text{ \AA}$ )
- b) Einfache tetragonal ( $a = 2,00 \text{ \AA}$ ,  $c = 3,00 \text{ \AA}$ )
- c) Einfache tetragonal ( $a = 3,00 \text{ \AA}$ ,  $c = 2,00 \text{ \AA}$ )
- d) Rhomboedrisch ( $a = 3,00 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 80^\circ$ )

**Aufgabe 2-4: Scherrer-Gleichung**

Berechnen Sie die volle Halbwertsbreite des Reflexes (B), aufgrund der kleinen Kristalleffekt, der Pulvermusterlinien von Teilchen mit einem Durchmesser von  $1000 \text{ \AA}$ ,  $750 \text{ \AA}$ ,  $500 \text{ \AA}$  und  $250 \text{ \AA}$ . Annehmen,  $\theta = 45^\circ$  und  $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$ .

für Partikel  $250 \text{ \AA}$  im Durchmesser, Berechnen Sie die B Werte für  $\theta = 10^\circ$ ,  $45^\circ$  und  $80^\circ$ .