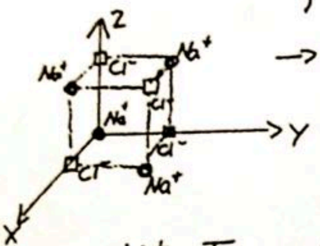
~~11~~ 6

$$\Rightarrow S(hkl) = \sum_j f_j \exp\left(-2\pi i\,(u_j h + v_j k + w_j l)\right)$$



$\rightarrow$ 2 ineinander verschachtelte fcc-Gitter

$\hookrightarrow$ 8 Ionen benötigt für vollständige Angabe der prim. Elementarzelle

Na^+-Ionen (u_j, v_j, w_j)	Cl^--Ionen (u_j, v_j, w_j)
$j=1: (0, 0, 0)$	$j=5: (1/2, 1/2, 1/2)$
$j=2: (1/2, 1/2, 0)$	$j=6: (1/2, 0, 0)$
$j=3: (1/2, 0, 1/2)$	$j=7: (0, 1/2, 0)$
$j=4: (0, 1/2, 1/2)$	$j=8: (0, 0, 1/2)$

$$\Rightarrow S_{NaCl} = f_{Na}\left(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(l+k)}\right) + f_{Cl}\left(e^{-i\pi(h+k+l)} + e^{-i\pi h} + e^{-i\pi k} + e^{-i\pi l}\right)$$

$$\Rightarrow S_{NaCl} = \begin{cases} 0 & \text{für gemischt gerade und ungerade} \\ 4(f_{Na} + f_{Cl}) & \text{für alle gerade} \\ 4(f_{Na} - f_{Cl}) & \text{für alle ungerade} \end{cases}$$

Identische atomare Streufaktoren f bei gleicher Elektronendichte

führt zur Auslöschung im Falle "alle ungerade"

Näherungsweise für K+ und Cl- (also KCl), beide Ar Edelgaskonfiguration

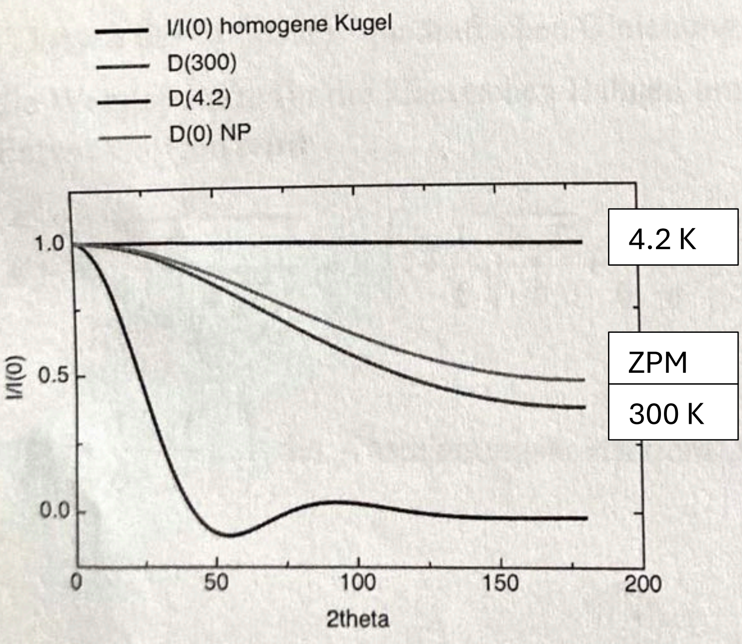
8

3-2 Wieder ist mit $\lambda = 2\pi / k_0$

$\Delta k = 2k_0 \sin\Theta = 4\pi \sin\Theta / R$. Der Debye-Waller-Faktor ist

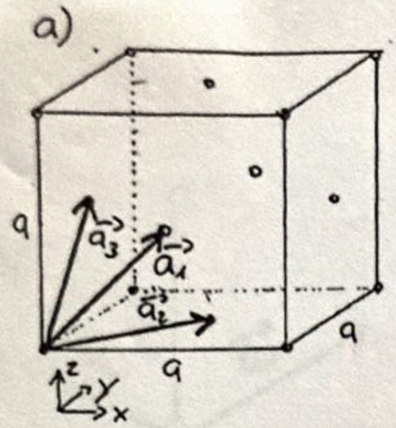
$I(T)/I(0) = \exp\left(\frac{-\Delta k^2 k_B T}{m\omega^2}\right)$. Der Effekt der Nullpunktsschwingung ist

$I(T)/I(0) = \exp\left(\frac{-\Delta k^2 \hbar}{2m\omega}\right)$ mit $m_{Li} = 0.00694$ kg / N_A.



10 2) <u>Reziproke Gitter</u>

a)



fcc - Gitter:

$$\vec{a_1} = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix};\ \vec{a_2} = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix};\ \vec{a_3} = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$$

$$V_E = \vec{a_1}\cdot(\vec{a_2}\times\vec{a_3})$$
$$= \frac{a^3}{8}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix} = \frac{a^3}{8}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\-1\\1\end{pmatrix}$$
$$= a^3/8\cdot(1+1) = a^3/4$$

Reziproke Gittervektoren: $\vec{b_i} = \frac{2\pi}{V_E}\cdot(\vec{a}_{i+1}\times\vec{a}_{i+2})$

$i \in \{1,2,3\}$ cycl.

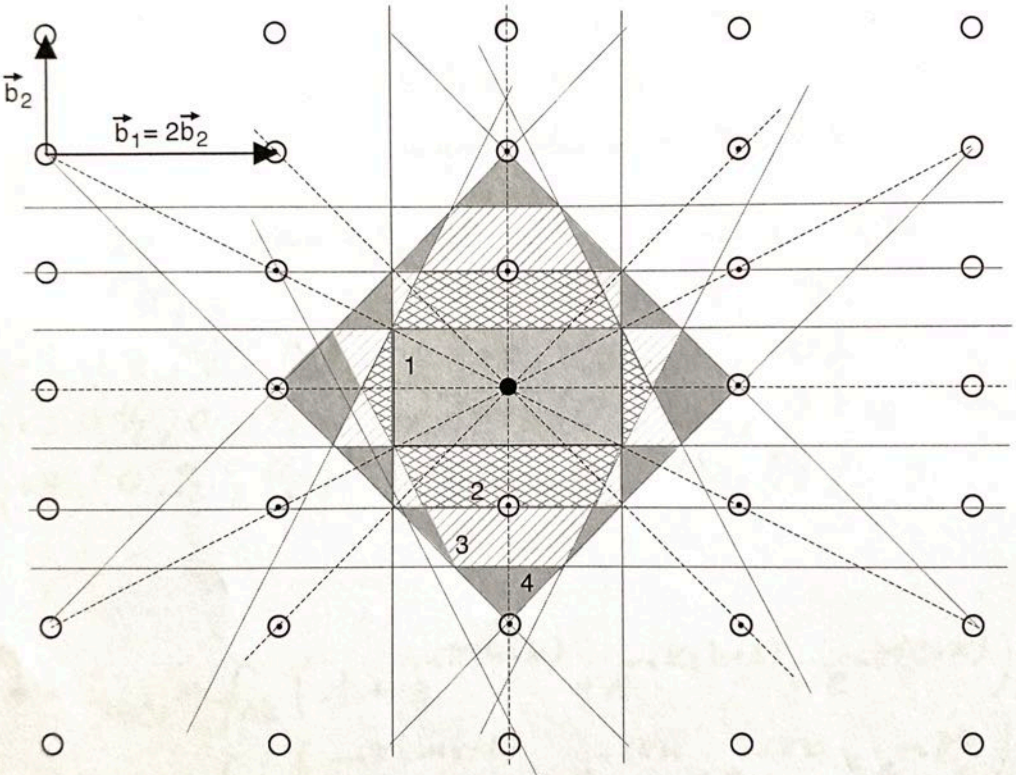
$$\Rightarrow \vec{b_1} = \frac{8\pi}{a^3}\cdot\vec{a_2}\times\vec{a_3} = 8\pi\cdot\frac{1}{4a}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix} = \underline{\underline{\frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\-1\\1\end{pmatrix}}}$$

$$\Rightarrow \vec{b_2} = \frac{8\pi}{a^3}\cdot(\vec{a_3}\times\vec{a_1}) = \frac{8\pi}{4a}\cdot\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix} = \underline{\underline{\frac{2\pi}{a}\cdot\begin{pmatrix}1\\1\\-1\end{pmatrix}}}$$

$$\Rightarrow \vec{b_3} = \frac{8\pi}{a^3}\cdot(\vec{a_1}\times\vec{a_2}) = \frac{2\pi}{a}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix} = \underline{\underline{\frac{2\pi}{a}\cdot\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix}}}$$

bcc - Gitter

12



Verbindungslinien zu Nachbarn ⊙

Mittelsenkrechten zu Verbindungslinien