

V 41

Debye-Scherrer-Aufnahmen

Kira Deltenre
kira.deltenre@tu-dortmund.de

Lea Platzbecker
lea.platzbecker@tu-dortmund.de

Durchführung: 08.01.2018 Abgabe: 23.01.2018 Korrektur

26.02.2018

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1	Zielsetzung	3
2	Theorie	3
2.1	Kristallstrukturen	3
2.2	Kennzeichnung von Netzebenen mithilfe von Millerindizes	4
2.3	Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen	4
3	Durchführung	7
4	Auswertung	8
5	Diskussion	14
6	Quellen	14
7	Anhang	14

1 Zielsetzung

Ziel des Versuches ist es, Debye-Scherrer-Aufnahmen von zwei Substanzen zu erhalten, sodass die Größe und die Struktur der Elementarzelle, sowie die Anordnung der Basisatome bestimmt werden kann.

2 Theorie

Materie, welche in fester Form vorliegt, ist in aller Regel kristallin. Das bedeutet, dass sie periodisch aufgebaut ist. Häufig ist die Materie jedoch nicht aus einem einzelnen sogenannten Einkristall aufgebaut, sondern ist polykristallin, besteht also aus vielen Kristallen, deren Ausrichtungen statistisch verteilt sind. Diese Vielkristalle weisen dann isotropes Verhalten auf, obwohl Einkristalle starke Richtungsabhängigkeiten besitzen.

2.1 Kristallstrukturen

Kristalle können durch die ihnen zugrunde liegenden Punktgitter und ein- oder mehratomigen Basen charakterisiert werden. Die fundamentalen Translationsvektoren \vec{a} , \vec{b} , und \vec{c} spannen das gesamte Gitter auf:

$$\vec{t} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \text{ mit } n_i \in \mathbb{Z}. \quad (1)$$

Die kleinste Einheit eines Kristalls stellt die Elementarzelle dar. Sie kann beispielsweise der Parallelepipet von \vec{a} , \vec{b} , und \vec{c} sein. Von einer primitiven Einheitszelle wird gesprochen, wenn sie nur ein einzelnes Atom enthält. Es lassen sich in drei Raumdimensionen 14 Gittertypen (Bravaisgitter) ausmachen, welche in sieben Gittersysteme unterteilbar sind.

Kubische Kristallstrukturen

Kubische Kristallstrukturen kommen in der Natur sehr häufig vor und sollen auch in diesem Versuch betrachtet werden. Zu den kubischen Gittern zählt das primitiv-kubische (sc) mit einem Atom pro Einheitszelle, das kubisch-raumzentrierte (bcc) mit den zwei Basisatomen

$$(0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad (2)$$

welche im Abstand $\frac{\sqrt{3}a}{2}$ mit Kantenlänge a zu einander stehen, und das kubisch-flächenzentrierte (fcc) Gitter, welches vier Basisatome im Abstand $\frac{\sqrt{2}}{2}$ aufweist:

$$(0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right). \quad (3)$$

Diese Grundformen können zur Diamant-, Zinkblenden-, Steinsalz-, Cäsiumchlorid- oder Fluoritstruktur zusammengesetzt werden. Die Diamantstruktur ist dadurch charakterisiert, dass zwei kubisch-flächenzentrierte Gitter um ein Viertel der Raumdiagonalen gegeneinander verschoben sind. Diese Struktur wird bei Elementen mit sp^3 -Hybrid-Orbitalen

wie C, Si und Ge gefunden. Die Zinkblendenstruktur weist die selben Plätze der Basisatome auf wie im Diamant, allerdings werden die Untergitter von verschiedenen Atomarten (z. B. Zn und S) besetzt. Die Steinsalzstruktur enthält ebenfalls zwei verschiedene Atomsorten (z. B. Na und Cl), hier sind die Untergitter jedoch um eine halbe Raumdiagonale verschoben. Bei der Cäsiumchloridstruktur handelt es sich um zwei sc-Gitter, welche um eine halbe Raumdiagonale verschoben sind und von verschiedenen Atomsorten (z. B.) besetzt werden. Verbindungen des Typs AB_2 können in der Fluritstruktur vorliegen. Es handelt sich dabei um 3 fcc-Gitter: Eines ist um $\frac{1}{4}$ zum ersten Gitter, das andere um $\frac{3}{4}$ verschoben.

Hexagonale Struktur

In einem hexagonalen Kristall sind die Atome auf einem Bienenwabengitter angeordnet. Die Elementarzelle ist ein rechtwinkliges Prisma mit rautenförmiger Grundfläche, wobei ein Winkel 120° beträgt. In einer hexagonal dichtesten Kugelpackung ist neben den Eckpunkten auch ein Atom bei $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$ zu finden. Die Längen der Gittervektoren \vec{a} und \vec{b} sind identisch. Das Verhältnis zum dritten Vektor \vec{c} beträgt:

$$\frac{a}{c} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633. \quad (4)$$

2.2 Kennzeichnung von Netzebenen mithilfe von Millerindizes

Eine Netzebene ist eine Ebene, in der die Schwerpunkte von Atomen liegen. Zu einer Netzebene lassen sich weitere parallele Netzebenen finden. Sie besitzen alle den gleichen Abstand zueinander. Die Gesamtheit all dieser Ebenen ist die Netzebenenchar. Soll ihre Position im Vergleich zu den kristallachsenparallelen Koordinatenachsen angegeben werden, kann dies mittels Millerindizes geschehen. Für die Ermittlung der Millerindizes (hkl) werden die reziproken Achsenschnitte der dem Koordinatenursprung am nächstliegende Netzebene genommen. Anschließend werden diese Werte mit einer natürlichen Zahl so multipliziert, dass sich ausschließlich ganze Zahlen ergeben. Negative Achsenabschnitte werden durch einen Querstrich angezeigt (z. B. $(\bar{h}kl)$). Wenn die Ebene eine Achse gar nicht schneidet, beträgt der zugehörige Millerindex 0. Aus den Millerindizes einer Ebenenschar kann der Abstand der einzelnen Netzebenen zueinander ermittelt werden:

$$d = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}. \quad (5)$$

Für ein kubisches Gitter vereinfacht sich die Formel zu:

$$d_{\text{kub}} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \quad (6)$$

2.3 Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen

Röntgenstrahlung kann als elektromagnetische Wellen beschrieben werden. Es kommt zu Wechselwirkungen mit den geladen Elektronen und den Atomkernen der Kristallatome. Dies kann als klassischer Streuprozess gewertet werden: Die Teilchen werden zu

Schwingungen angeregt und strahlen dann selbst elektromagnetische Wellen ab. Da die Kristallstruktur streng periodisch ist, sind die gestreuten Wellen interferenzfähig. Da es an bestimmten Stellen zu Auslöschung an anderen Stellen zu Verstärkung kommt, lässt sich so die Struktur der Kristalle bestimmen. Die Elektronen bzw. Atomkerne, welche sich wie Hertzsche Dipole verhalten, strahlen durch unterschiedliche Massen m und Ladungen q Röntgenlicht unterschiedlicher Intensitäten I_e ab:

$$I_e(r, \theta) = I_0 \left(\frac{\mu_0 q^2}{4\pi m} \right)^2 \frac{1}{r^2} \frac{1 + \cos^2(2\theta)}{2}. \quad (7)$$

Die Streuung an den Atomkernen ist wegen ihrer großen Masse, die reziprok in die Intensität eingeht, vernachlässigbar. In Kristallen werden nicht nur einzelne, sondern alle Elektronen der Atomhülle zu Schwingungen angeregt. Da nicht alle Elektronen in Phase schwingen, kann nicht $q = Ze_0$ (mit der Ordnungszahl Z) angenommen werden. Stattdessen wird ein Atomformfaktor angegeben, welcher diese Korrektur berücksichtigt:

$$f^2 = \frac{I_a}{I_e}, \quad (8)$$

wobei I_a die Streuung aller Elektronen und I_e die Streuung eines Elektrons beschreibt. Für Winkel $\theta \neq 0$ ist die Berechnung im allgemeinen sehr aufwendig. Prinzipiell gilt für elastische Streuung

$$|\vec{k}_0| = |\vec{k}| = \frac{1}{\lambda}. \quad (9)$$

Für den Gangunterschied bedeutet dies:

$$\Delta s = s_1 + s_2 = \vec{r} + \left(\frac{\vec{k}}{k} - \frac{\vec{k}_0}{k} \right). \quad (10)$$

Damit folgt für den Phasenunterschied:

$$\Delta\phi = 2\pi \frac{\Delta s}{\lambda} = 2\pi \vec{r}(\vec{k} - \vec{k}_0). \quad (11)$$

Der Formfaktor f lässt sich dann mit der Ladungsverteilung $\rho(\vec{r})$ folgendermaßen bestimmen:

$$f = \int_{\text{Hülle}} \exp(-i\Delta\phi) \rho(\vec{r}) d^3r = \int_{\text{Hülle}} \exp(-2\pi i \vec{r}(\vec{k} - \vec{k}_0)) \rho(\vec{r}) d^3r \quad (12)$$

mit der Normierung $f = \int_{\text{Hülle}} \rho(\vec{r}) d^3r = Ze_0$. Der Formfaktor kann somit als Fouriertransformierte der Ladungsverteilung aufgefasst werden. In einem zweiten Schritt müssen die verschiedenen Atome einer Einheitszelle betrachtet werden. Die gestreuten Wellen können wiederum untereinander interferieren. Es ergibt sich mit den Positionen \vec{r}_j der Basisatome in der Einheitszelle die Phasendifferenz:

$$\Delta\phi = 2\pi \vec{r}_j(\vec{k} - \vec{k}_0). \quad (13)$$

Nun müssen die Atomformfaktoren f_j beachtet werden:

$$A = \sum_j f_j \exp(2\pi \vec{r}_j \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)) I_e. \quad (14)$$

Als Strukturamplitude ergibt sich

$$S = \sum_j f_j \exp(2\pi(x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c}) \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)) I_e \quad (15)$$

unter Verwendung von $\vec{r}_j = x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c}$. Um die Richtungsabhängigkeit zu erhalten, wird Röntgenlicht betrachtet, welches an benachbarten Netzebenen gestreut wird. Die Braggbedingung

$$n\lambda = 2d \sin(\theta) \quad (16)$$

gibt an, unter welchem Winkel ein gestreuter Röntgenstrahl beobachtet werden kann. In Wellenvektoren lautet die Braggbedingung:

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g}, \quad (17)$$

wobei \vec{g} ein reziproker Gittervektor ist. Die reziproken Gittervektoren sind durch eine Basis darstellbar:

$$\vec{A} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}, \quad \vec{B} = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V}, \quad \vec{C} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V} \quad (18)$$

mit dem Volumen der Einheitszelle im Ortsraum $V = \vec{a}(\vec{b} \times \vec{c})$. Der Gittervektor der Netzebenenschar (hkl) hat die Form

$$\vec{g} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}. \quad (19)$$

Damit kann die Streuamplitude geschrieben werden als

$$S(hkl) = \sum_j f_j \exp 2\pi(x_j h + y_j k + z_j l). \quad (20)$$

Um anhand von Debye-Scherrer-Aufnahmen die verschiedenen Gittertypen zu unterscheiden, müssen die Streuamplituden der Gitter berechnet werden. Besonders nützlich für die Auswertung sind die Auswahlregeln (siehe Tabelle 1).

Tabelle 1: Auswahlregeln für verschiedene Gittertypen ggf. mit Stärke der Reflexe (stark/schwach).

Gittertyp	Braggreflexe
sc	keine Einschränkung
fcc	alle h, k, l gerade oder ungerade
bcc	$h + k + l$ gerade
Diamant	alle h, k, l gerade und $h + k + l = 4n$ oder alle h, k, l ungerade und $h + k + l = 4n \pm 1$
Steinsalz	alle h, k, l gerade (stark) oder ungerade (schwach)
Fluorit	alle h, k, l gerade (stark) oder ungerade (schwach)
Cäsiumchlorid	$h + k + l$ gerade (stark) oder ungerade (schwach)

3 Durchführung

Um die Beugungsreflexe an den Kristallstrukturen bzw. Gitterebenen zu messen, wird eine Probe in eine Kamera eingebracht und mit Röntgenstrahlung belichtet. Der schematische Versuchsaufbau ist in Abbildung 1 zu sehen. Es wird auf ein dünnes Glaszylinderröhrchen, welches mit einem Film Vaseline überzogen ist, die Probe aufgebracht. Diese wird in das Kameragehäuse eingeführt und justiert. Anschließend wird bei Rotlicht der Filmstreifen zugeschnitten und in das Kameragehäuse gelegt und mit einem Schraubchen befestigt. Das Kollimatorrohr zur Bündelung der Röntgenstrahlung wird auf der einen Seite durch das Loch im Filmstreifen gesteckt und auf der anderen Seite wird ein Absorberrohr festgeschraubt. Das Gehäuse wird anschließend verschlossen und zur Röntgenröhre transportiert und in die vorgesehene Apparatur geschoben und so angebracht, dass das Röntgenlicht durch das Kollimatorrohr treten kann. Anschließend wird die Röntgenröhre angestellt und die entsprechende Belichtungszeit eingestellt. Die Röntgenröhre wird mit einer Spannung von 40 kV und einem Strom von 20 mA betrieben. Während der Belichtung wird der Probenzylinder kontinuierlich gedreht, um so möglichst viele Kristallrichtungen aufzunehmen und eine höhere Statistik zu haben. Der Film wird anschließend im Fotolabor unter Rotlicht dem Gehäuse entnommen und entwickelt.

Es werden zwei verschiedene Proben gemessen. Eine davon ist Metall 8, welches zwei Stunden belichtet werden muss und bei der anderen handelt es sich um Salz 1, welches vier Stunden Belichtungszeit benötigt.

Die Filmentwicklung läuft in folgenden Schritten ab. Zunächst kommt der Film für 15 min in ein Entwicklerbad, danach für 1 min in ein Unterbrecherbad (Essigsäure) und am Schluss für 10 min in den Fixierer, dazwischen wird der Film jeweils für 1 min mit Wasser abgespült. Nach dem Fixierbad wird der Film noch einmal für 5-10 min in Wasser geschwenkt und dann getrocknet. Anschließend werden die Ringe auf dem Filmstreifen mithilfe eines Geodreiecks ausgemessen und ausgewertet.

¹ Versuchsanleitung zu V41 - Debye-Scherrer-Aufnahmen, 2018

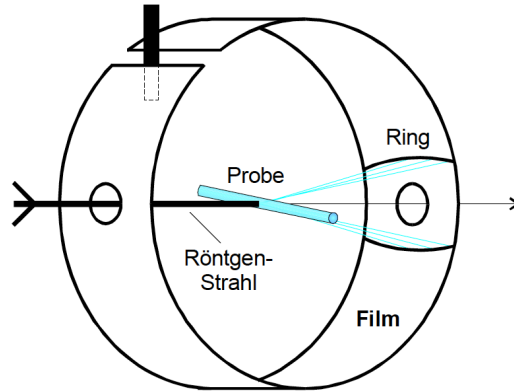


Abbildung 1: Skizze des Versuchsaufbaus. ¹

4 Auswertung

Der Zusammenhang zwischen den Beugungswinkeln und den gemessenen Radien R lässt sich über die Formeln 6 und 16 herleiten. Es ergibt sich für die Winkel folgende Formel

$$\theta = \frac{R}{2}. \quad (21)$$

Die Netzebenenabstände der Beugungsreflexe werden durch die Gleichung

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \quad (22)$$

ermittelt. In der Tabelle 2 sind die gemessenen Radien und zugehörigen Winkel sowie die berechneten absoluten und auf den ersten Abstand normierten Netzebenenabstände der Metallprobe zu finden.

Tabelle 2: Gemessene Radien und Winkel sowie berechnete Netzebenenabstände der Metallprobe.

Radius r in cm	Winkel θ	Netzebenenabstand d in 10^{-10} m	norm. Abstand d_1/d_i
4,1	0,36	2,20	1,00
5,9	0,51	1,57	1,41
7,4	0,65	1,28	1,72
8,7	0,76	1,12	1,97
10,1	0,88	1,00	2,20
11,5	1,00	0,91	2,41
13,1	1,14	0,85	2,60
15,4	1,34	0,79	2,78

Um die vorliegende Struktur zu ermitteln, wird ausgenutzt, dass

$$\frac{d_1}{d_i} = \frac{m_i}{m_1} \quad (23)$$

gilt, wobei $m_i = \sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2}$. In den Tabellen 3 - 5 findet ein entsprechender Vergleich statt. Da die Unterschiede zu den Werten der bcc-Struktur am geringsten ausfallen, handelt es sich um einen bcc-Kristall. Die Gitterkonstante a wird anschließend mit dem

Tabelle 3: Vergleich der Metallprobe mit dem fcc-Gitter.

hkl	m	m_i/m_1	d_1/d_i
111	1,73	1,00	1,00
200	2,00	1,15	1,41
220	2,83	1,63	1,72
311	3,32	1,91	1,97
222	3,46	2,00	2,20
400	4,00	2,31	2,41
331	4,36	2,52	2,60
420	4,47	2,58	2,78

Tabelle 4: Vergleich der Metallprobe mit dem bcc-Gitter.

hkl	m	m_i/m_1	d_1/d_i
110	1,41	1,00	1,00
200	2,00	1,41	1,41
211	2,45	1,73	1,72
220	2,83	2,00	1,97
310	3,16	2,24	2,20
222	3,46	2,45	2,41
321	3,74	2,65	2,60
400	4,00	2,83	2,78

Zusammenhang

$$a = dm \quad (24)$$

berechnet. In der Tabelle 6 sind die ermittelten Gitterkonstanten a und die Werte für $\cos^2(\theta)$ zu sehen. Über eine Ausgleichsrechnung der Form

$$a(\cos^2(\theta)) = b \cos^2(\theta) + c \quad (25)$$

kann die korrigierte Gitterkonstante ermittelt werden. Die zugehörige grafische Darstellung ist in der Abbildung 2 zu sehen. Die mit Gnuplot 5.0 berechneten Fitparameter lauten:

$$b = (-0,06 \pm 0,01) \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (26)$$

$$c = (3,183 \pm 0,008) \cdot 10^{-10} \text{ m}. \quad (27)$$

Tabelle 5: Vergleich der Metallprobe mit dem Diamant-Gitter.

hkl	m	m_i/m_1	d_1/d_i
111	1,73	1,00	1,00
220	2,83	1,63	1,41
311	3,32	1,91	1,72
400	4,00	2,31	1,97
331	4,36	2,52	2,20
422	4,90	2,83	2,41
333	5,20	3,00	2,60
440	5,66	3,27	2,78

Tabelle 6: Netzebenenabstände d , Werte für $\cos^2(\theta)$ und berechnete Gitterkonstanten a .

d in 10^{-10}m	$\cos^2(\theta)$	a in 10^{-10}m	
111	1,73	1,00	1,00
220	2,83	1,63	1,41
311	3,32	1,91	1,72
400	4,00	2,31	1,97
331	4,36	2,52	2,20
422	4,90	2,83	2,41
333	5,20	3,00	2,60
440	5,66	3,27	2,78

Die Gitterkonstante und die zugrundeliegende bcc-Struktur deuten auf Molybdän ($a_{\text{Lit.}} = 3,15 \cdot 10^{-10} \text{ m}$) hin. Die berechnete Gitterkonstante weist eine Abweichung von 1,0 % auf.

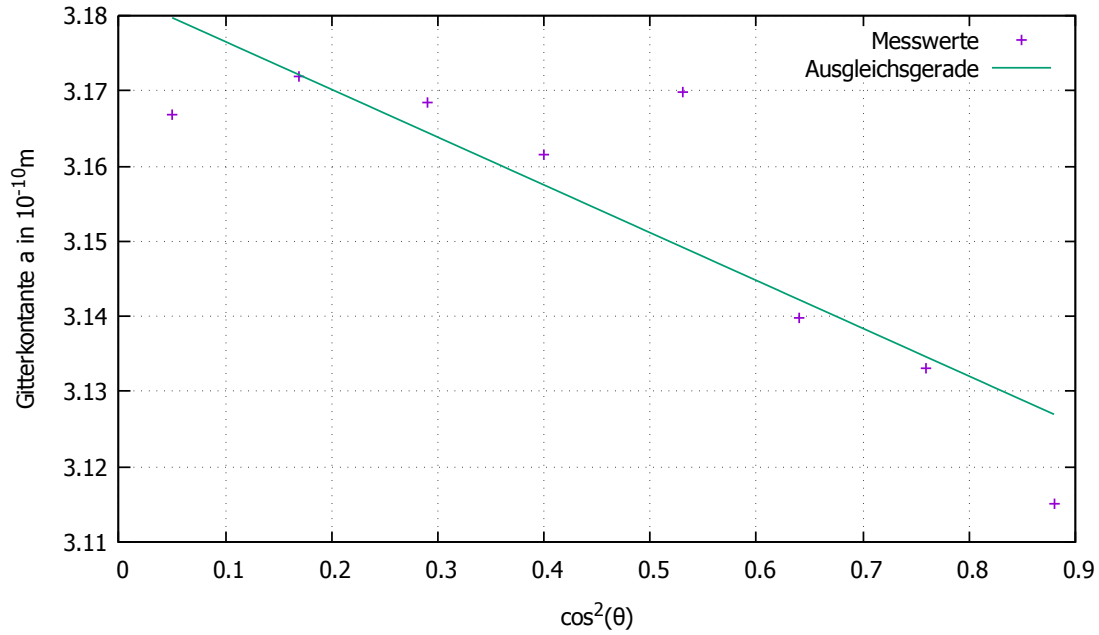


Abbildung 2: Berechnete Gitterkonstanten in Abhängigkeit von $\cos^2(\theta)$ für die Metallprobe.

Die gemessenen Winkel, berechneten Gitterkonstante und zugeordneten Millerindizes der Salzprobe sind in der Tabelle 7 zu sehen. Ein systematisches Ausprobieren der Steinsalz- bzw. Fluoritstruktur und der Cäsiumchloridstruktur ist im Anhang (Abbildungen 4 und 5) zu finden. Da die Auswahlregeln der Steinsalz- und Fluoritstruktur eine Unterscheidung anhand der Aufnahmen nicht zulassen, gilt die Steinsalz-Tabelle auch für die Fluoritstruktur. Eine grafische Darstellung ist in der Abbildung 3 zu finden. Die mit GnuPlot 5.0 berechneten Fitparameter lauten:

$$b = (-0,08 \pm 0,01) \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (28)$$

$$c = (4,146 \pm 0,008) \cdot 10^{-10} \text{ m} . \quad (29)$$

Die angegebene Gitterkonstante und die zugrundeliegende Cäsiumchloridstruktur lassen auf Cäsiumchlorid ($a_{\text{Lit.}} = 4,13 \cdot 10^{-10} \text{ m}$) schließen. Die ermittelte Gitterkonstante weicht um 0,4 % vom Literaturwert ab.

²N. W. Ashcroft und D. N. Mermin: Festkörperphysik

³N. W. Ashcroft und D. N. Mermin: Festkörperphysik

Tabelle 7: Gemessene Winkel, berechnete Gitterkonstante a und zugeordnete Millerindizes, sowie die Netzebenenabstände d der Salzprobe.

Radius in m	θ in $^\circ$	$\cos^2(\theta)$	a in 10^{-10}m	Millerindizes	d in 10^{-10}m
0,031	15,5	0,929	4,083	(110)	2,887
0,038	19,0	0,894	4,103	(111)	2,369
0,045	22,5	0,854	4,032	(200)	2,016
0,050	25,0	0,821	4,081	(210)	1,825
0,055	27,5	0,787	4,091	(211)	1,670
0,065	32,5	0,711	4,062	(220)	1,436
0,069	34,5	0,679	4,086	(300)	1,362
0,073	36,5	0,646	4,101	(310)	1,297
0,081	40,5	0,578	4,115	(222)	1,188
0,089	44,5	0,509	4,120	(321)	1,101
0,101	50,5	0,405	4,122	(410)	1,000
0,105	52,5	0,371	4,124	(411)	0,972
0,109	54,5	0,337	4,128	(331)	0,947
0,114	57,0	0,297	4,114	(420)	0,920
0,118	59,0	0,265	4,124	(421)	0,900
0,122	61,0	0,235	4,137	(332)	0,882
0,132	66,0	0,165	4,135	(422)	0,844
0,138	69,0	0,128	4,130	(500)	0,826
0,145	72,5	0,090	4,125	(510)	0,809

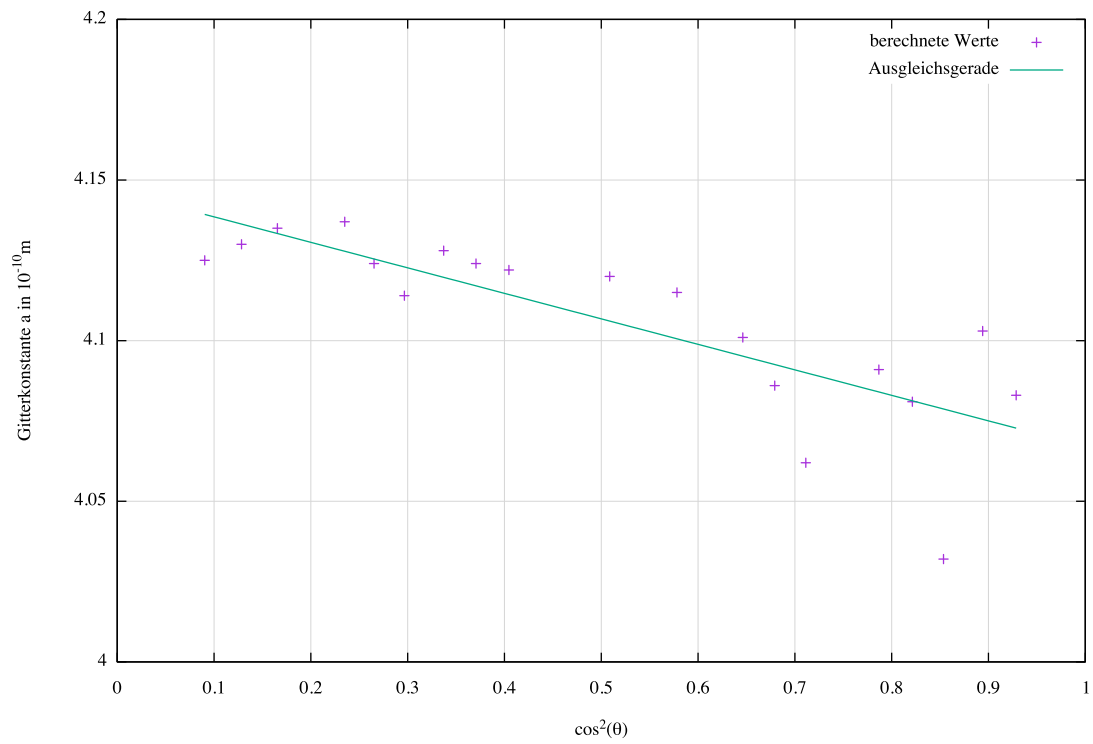


Abbildung 3: Berechnete Gitterkonstanten in Abhängigkeit von $\cos^2(\theta)$ für die Salzprobe.

5 Diskussion

Verschiedene Fehlerquellen führen zum einen zu einer erschwerten Auswertung und zum anderen zu Abweichungen der Ergebnisse von den Literaturwerten. Beim Transport der Kamerabox von der Dunkelkammer zur Röntgenröhre kommt es kurzzeitig zu Lichteinfall in die Kamerabox. Es ist unklar, ob die Belichtungszeit und die Entwicklungszeit richtig gewählt wurden. Besonders bei dem Filmstreifen der Salzprobe ist die Auswertung dadurch sehr erschwert, dass der Film sehr dunkel geworden ist. Das Ablesen der Braggreflexe wird von Hand mit einem Geodreieck durchgeführt und ist dadurch fehleranfällig. Zum einen kann das Geodreieck ungenau abgelesen und angelegt werden und zudem waren die Reflexe teilweise nur äußerst schlecht zu erkennen.

Trotz der fehlerbehafteten Messungen sind die Ergebnisse der Auswertung sehr genau. Für das Metall lässt sich eine Zuordnung der Gitterkonstanten zu der von Molybdän mit einer Genauigkeit von 1,0 % treffen. Die berechnete Gitterkonstante des Salzes stimmt mit der Gitterkonstanten von Cäsiumchlorid mit einer Genauigkeit von 0,4 % überein.

6 Quellen

1. Tu Dortmund, Versuchsanleitung V41- Debye-Scherrer-Aufnahmen. Zuletzt aufgerufen: 22.01.2018, 22:00 Uhr: <http://129.217.224.2/HOME/PAGE/PHYSIKER/MASTER/SKRIPT/V41.pdf>
2. N. W. Ashcroft und D. N. Mermin: Festkörperphysik, Oldenbourg Verlag München Wien, 3. Auflage, 2007

7 Anhang

Abbildung 4: Auswertung Steinsalzstruktur.

Cäsiumchlorid		wa1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9	a10	a11	a12	a13	a14	a15	a16	a17	a18	a19	
Millerindizes																					
1	0	0	2.887	2.369	2.016	1.825	1.670	1.436	1.362	1.297	1.188	1.101	1.000	0.972	0.947	0.920	0.900	0.882	0.844	0.826	0.809
1	1	0	4.083	3.350	2.851	2.581	2.362	2.031	1.926	1.834	1.680	1.557	1.414	1.375	1.339	1.301	1.273	1.247	1.194	1.168	1.144
1	1	1	5.000	4.103	3.492	3.161	2.893	2.487	2.359	2.246	2.058	1.907	1.732	1.684	1.640	1.593	1.559	1.528	1.482	1.431	1.401
2	0	0	5.774	4.738	4.032	3.650	3.340	2.872	2.724	2.594	2.376	2.202	1.999	1.944	1.894	1.840	1.800	1.764	1.688	1.652	1.618
2	2	1	8.661	7.107	6.048	5.475	5.010	4.308	4.086	3.891	3.564	3.303	2.999	2.916	2.841	2.760	2.700	2.646	2.532	2.478	2.427
2	1	0	6.456	5.297	4.508	4.081	3.734	3.211	3.046	2.900	2.656	2.462	2.235	2.173	2.118	2.057	2.012	1.972	1.887	1.847	1.809
2	1	1	7.072	5.803	4.938	4.470	4.091	3.517	3.336	3.177	2.910	2.697	2.449	2.381	2.320	2.254	2.205	2.160	2.067	2.023	1.982
2	2	0	8.166	6.701	5.702	5.162	4.723	4.062	3.852	3.668	3.360	3.114	2.828	2.749	2.679	2.602	2.546	2.495	2.387	2.336	2.288
3	0	0	8.661	7.107	6.048	5.475	5.010	4.308	4.086	3.891	3.564	3.303	2.999	2.916	2.841	2.760	2.700	2.646	2.532	2.478	2.427
3	1	0	9.129	7.491	6.375	5.771	5.281	4.541	4.307	4.101	3.757	3.482	3.161	3.074	2.995	2.909	2.846	2.789	2.669	2.612	2.558
3	1	1	9.575	7.857	6.686	6.053	5.539	4.763	4.517	4.302	3.940	3.652	3.316	3.224	3.141	3.051	2.985	2.925	2.799	2.740	2.683
2	2	2	10.001	8.206	6.984	6.322	5.785	4.974	4.718	4.493	4.115	3.814	3.463	3.367	3.281	3.187	3.118	3.055	2.924	2.861	2.802
3	2	0	10.409	8.542	7.269	6.580	6.021	5.178	4.911	4.676	4.283	3.970	3.604	3.505	3.414	3.317	3.245	3.180	3.043	2.978	2.917
3	2	1	10.802	8.864	7.543	6.829	6.249	5.373	5.096	4.853	4.445	4.120	3.741	3.637	3.543	3.442	3.367	3.300	3.158	3.091	3.027
3	3	0	12.249	10.051	8.553	7.743	7.085	6.092	5.778	5.503	5.040	4.671	4.241	4.124	4.018	3.903	3.818	3.742	3.581	3.504	3.432
4	0	0	11.548	9.476	8.064	7.300	6.680	5.744	5.448	5.188	4.752	4.404	3.999	3.888	3.788	3.680	3.600	3.528	3.376	3.304	3.236
4	1	0	11.903	9.768	8.312	7.525	6.886	5.921	5.616	5.348	4.898	4.540	4.122	4.008	3.905	3.793	3.711	3.637	3.480	3.406	3.336
4	1	1	12.249	10.051	8.553	7.743	7.085	6.092	5.778	5.503	5.040	4.671	4.241	4.124	4.018	3.903	3.818	3.742	3.581	3.504	3.432
3	3	1	12.584	10.326	8.788	7.955	7.279	6.259	5.937	5.653	5.178	4.799	4.358	4.237	4.128	4.010	3.923	3.845	3.679	3.600	3.526
4	2	0	12.911	10.594	9.016	8.162	7.468	6.422	6.091	5.800	5.313	4.924	4.471	4.347	4.235	4.114	4.025	3.944	3.774	3.694	3.618
4	2	1	13.230	10.856	9.238	8.363	7.653	6.581	6.241	5.944	5.444	5.045	4.581	4.454	4.340	4.216	4.124	4.042	3.868	3.785	3.707
3	3	2	13.541	11.112	9.456	8.560	7.833	6.735	6.388	6.083	5.572	5.164	4.689	4.559	4.442	4.315	4.221	4.137	3.959	3.874	3.795
4	2	2	14.143	11.606	9.876	8.941	8.181	7.035	6.672	6.354	5.820	5.394	4.898	4.762	4.639	4.507	4.409	4.321	4.135	4.047	3.963
3	3	3	15.001	12.310	10.475	9.483	8.678	7.462	7.077	6.739	6.173	5.721	5.195	5.051	4.921	4.780	4.677	4.583	4.386	4.292	4.204
4	4	0	16.331	13.401	11.404	10.324	9.447	8.123	7.705	7.337	6.720	6.228	5.655	5.498	5.357	5.204	5.091	4.989	4.774	4.673	4.576
4	4	2	17.322	14.214	12.096	10.950	10.020	8.616	8.172	7.782	7.128	6.606	5.998	5.832	5.682	5.520	5.400	5.292	5.064	4.956	4.854
5	0	0	14.435	11.845	10.080	9.125	8.350	7.180	6.810	6.485	5.940	5.505	4.999	4.860	4.735	4.600	4.500	4.410	4.220	4.130	4.045
5	1	0	14.721	12.080	10.280	9.306	8.515	7.322	6.945	6.613	6.058	5.614	5.097	4.956	4.829	4.691	4.589	4.497	4.304	4.212	4.125
5	1	1	15.001	12.310	10.475	9.483	8.678	7.462	7.077	6.739	6.173	5.721	5.195	5.051	4.921	4.780	4.677	4.583	4.386	4.292	4.204
3	2	4	15.547	12.757	10.856	9.828	8.993	7.733	7.335	6.985	6.398	5.929	5.384	5.234	5.100	4.954	4.847	4.750	4.545	4.448	4.357
5	2	1	15.813	12.976	11.042	9.996	9.147	7.865	7.460	7.104	6.507	6.030	5.476	5.324	5.187	5.039	4.930	4.831	4.623	4.524	4.431

Abbildung 5: Auswertung Cäsiumchloridstruktur.