F-Praktikum la/c Experimentelle Physik Das Laueverfahren*

Klaudia Herbst Manfred Thomann

19.11.2003

*Wir erklären, dass wir dieses Protokoll eigenhändig anhand unseres Messprotokolls und der angegebenen Literatur erstellt haben.

In diesem Versuch wurden die Laue-Punkte bei der Streuung von Röntgenlicht am NaCl-Kristall aufgenommen. Zu diesem Zweck erzeugten wir mit Hilfe eines Kollimators paralles Röntgenlicht, mit dem wir einen NaCl-Kristall im Abstand von 3 cm bestrahlten. Das Interferenzbild wird dann mit einer Photoplatte aufgenommen, die nach 45 min Bestrahlung entwickelt wird. Mit dem so gefundenen Interferenzbild lassen sich die Miller-Indizes der Laue-Punkte graphisch ermitteln.

Inhaltsverzeichnis

1	The	oretische Grundlagen	1
	1.1	Kristallstruktur	2
	1.2	Netzebenen	2
	1.3	Laue-Punkte	3
	1.4	Millersche Indizes	3
	1.5	Der reziproke Raum	4
	1.6	Gnomische Projektion	6
2	Dur	chführung	7
	2.1	Versuchsaufbau und -durchführung	7
	2.2	Indizierung der Laue-Punkte	7
3	Auswertung		
	3.1	Berechnung der Wellenlängen zu vier Laue-Punkten	8
	3.2	Gebräuchliche und primitive Einheitszelle des fcc-Gitters, Volumina des	
		fcc-Gitters	8
	3.3	Basis des fcc-Gitters	9
	3.4	Abstand der nächsten Nachbarn von NaCl	9
	3.5	Spezifische Dichte von NaCl	9
	3.6	Anzahldichte von NaCl	10
	3.7	Herleitung	10
	3.8	Berechnung des Strukturfaktors des NaCl	11
4	Pro	bleme und Verbesserungsvorschläge	11

Abbildungsverzeichnis

1	Braggreflexion	2
2	Beugungstheorie	5
3	Gnomische Projektion	6
4	NaCl-Gitter	8

Tabellenverzeichnis

1 Theoretische Grundlagen

Fällt weißes Röntgenlicht durch einen ruhenden Einkristall, treten charakteristische Beugungsstrukturen auf, die auf einer Fotoplatte festgehalten werden können. Dieses Interferenzbild (zu sehen sind Interferenzflecken) weist eine hohe Symmetrie auf, die aufgrund der Struktur des zu untersuchenden Kristalls entsteht.

Daher ist es nicht verwunderlich, dass das Laue-Verfahren der Strukturuntersuchung und der Orientierung kristalliner Feststoffe dient.

Bei der Röntgenstrahlung handelt es sich ausschließlich um Bremsstrahlung. Die Erklärung hierfür liegt im Moseleyschen Gesetz:

$$\nu_{mn} = (\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2})R_{\infty}c(Z - \sigma)^2$$

 mit

 ν_{mn} : Frequenz des emittierten Photons ; R_{∞} : Rydbergkonstante = 1,09·10⁷m⁻¹; Z: Kernladungszahl des Anodenelements, hier Wolfram Z=74; σ : Abschirmungskonstante

Für m=1 und n=2 gilt:

$$\nu_{k\alpha} = \frac{3}{4} \cdot 1,09 \cdot 10^7 m^{-1} \cdot 3 \cdot 10^8 m s^{-1} \cdot (74-1)^2$$
$$= 1,315 \cdot 10^{19} s^{-1}$$

Weiterhin gilt:

$$\lambda_{k\alpha} = \frac{c}{\nu} = 2,28 \cdot 10^{-11} m = 0,228 \text{\AA}$$

Man muß berücksichtigen, dass die Energie der Röntgenquanten nicht größer sein kann als die der Elektronen, die dadurch herausgelöst werden. Es gilt also:

$$E = eU$$
$$= h\nu_{max}$$
$$= \frac{hc}{\lambda_{min}}$$

 $\Rightarrow \lambda_{min} = \frac{hc}{eU}$

Dabei ist h = 6,626 $\cdot 10^{-34}$ Js; e = 1,6 $\cdot 10^{19}$ C; U = 35 kV = $35 \cdot 10^{3}$ V

 $\Rightarrow \lambda_{min} = 3,54 \cdot 10^{-11} m = 0,354 \text{ Å}$

Wie man also leicht erkennt, ist $\lambda_{k\alpha} < \lambda_{min}$, es entsteht also bei der gewählten Spannung von 35 kV keine charakteristische Röntgenstrahlung.



Abbildung 1: Braggreflexion

1.1 Kristallstruktur

Kristalle können als dreidimensionale periodische Anordnungen einzelner Atome beziehungsweise Atomgruppen aufgefasst werden. Die Struktur eines Kristalls wird durch ein Gitter beschrieben, dessen Gitterpunkte eine Gruppe von Atomen zugeordnet wird. Diese Atome bzw. Atomgruppen bezeichnet man als Basis. Auszeichnend für eine Basis ist die regelmäßige Wiederholung im Raum, und somit das Aufspannen eines Raumgitters. Das Gitter lässt sich durch Translationsvektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ so definieren, dass von jedem Punkt des Raumgitters die anderen Gitterpunkte durch eine Translation

$$\vec{T} = \sum_{i=1}^{3} n_i \vec{a}_i$$

erreicht werden können. Solche Strukturen werden Netzebenen genannt. Es ergibt sich die Beziehung

$$Gitter + Basis = Kristallstruktur$$

Man spricht von primitiven Elementarzellen, wenn das Raumgitter durch den Translationsvektor \vec{T} in sich selbst überführt wird. Bei einer primitiven Elementarzelle handelt es sich um die Zelle mit dem kleinstmöglichen Volumen.

$$V = \left| \vec{a_1} \cdot \vec{a_2} \times \vec{a_3} \right|$$

1.2 Netzebenen

Der an den Netzebenen[2] eintreffende Strahl weißen Röntgenlichtes wird gebeugt (Abbildung 1). Nach dem Huygenschen Prinzip entstehen Elementarwellen, welche hinter der beugenden Ebene interferieren. In den meisten Raumpunkten löschen sie sich jedoch aus.

An jenen Stellen, an denen die Braggsche Interferenzbedingung

 $2 d \cdot \sin \theta = n\lambda$; $n \in \mathbb{N}$ erfüllt ist, entstehen Maxima sehr geringer Ausdehnung, so dass sich auf der, hinter dem Kristall befindlichen Fotoplatte, geschwärzte Interferenzflecken abbilden, sogenannte Lauepunkte.

1.3 Laue-Punkte

Jeder Laue-Punkt ist einer Netzebenenschar (das sind zueinander parallele Netzebenen) zuordbar. Jedoch steht jeder Netzebenenschar nur ein extrem schmaler Wellenlängenbereich zur Erfüllung der Braggbedingung zur Verfügung.

Die Laue-Punkte sind also nahezu einer Wellenlänge zuzuschreiben. Netzebenen mit einer gemeinsamen Parallelen werden zu einer Zone zusammengefasst. Diese gemeinsamen Parallelen werden als Zonenachsen bezeichnet.

Einfallende Strahlen beschreiben, relativ zur Netzebenenschar, ebenso wie der ausfallende Strahl, eine Bewegung auf einem Kegelmantel. Da jedoch die Fotoplattenebene nicht senkrecht zur Kegelachse steht, entstehen auf der Platte Kegelschnitte in Form von Ellipsen, auf denen sich die Lauepunkte befinden.

1.4 Millersche Indizes

Um Netzebenen bestimmen zu können, ist man auf die Millerschen Indizes angewiesen, welche durch folgende Regeln erfolgreich bestimmt werden können: (1) Bestimmung der Schnittpunkte der Ebenen mit den Achsen $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

(2) Ergebnis in Einheiten der Gitterparameter angeben

(3) Multiplikation der Kehrwerte der Zahlen mit dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen

Die drei auf diese Weise entstehenden Indizes (h k l) beschreiben eine Netzebene.

1.5 Der reziproke Raum

Kristallstrukturen analysiert man durch Beugung von Photonen, Neutronen und Elektronen, wobei die Beugung von Kristallstruktur und Wellenlänge abhängig ist. Im Abschnitt Netzebenen ist auf die Braggsche Erklärung für die, von einem Kristall gebeugten Strahlen, schon hingewiesen worden.

Röntgenaufnahmen lassen sich aber leichter im reziproken Raum verstehen.

Für den Übergang in den reziproken Raum nutzt man die Eigenschaft eines Kristalles, einer Translation der Form $\vec{T} = \sum_{i=1}^{3} n_i \vec{a}_i$ invariant gegenüber zu sein, aus. Aufgrund dieser Periodizität führt man die Fourieranalyse ein.

Am wichtigsten für die Fourieranalyse ist, dass die Elektronendichte $n(\vec{r})$ eine periodische Funktion von \vec{r} mit den Perioden $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ in den Richtungen der drei Kristallachsen ist. Damit wird $n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$.

Es können also die meisten Kristalleigenschaften durch die einzelnen Fourierkomponenten der Elektronenladungsdichte ausgedrückt werden.

Betrachtet man nun zuerst eine Funktion n(x) im Eindimensionalen, mit der Periode a in x- Richtung, so entwickelt sich n(x) in eine Fourierreihe der Form:

$$n(x) = n_o \sum_{p>0} [c_p \cdot \cos(\frac{2\pi x}{a}) + s_p \cdot \sin(\frac{2\pi x}{a})]$$

mit $p \in N$ und c_p, s_p reelle Fourierkoeffizienten der Entwicklung Durch den Faktor $\frac{2\pi}{a}$ ist gewährleistet, dass n(x) die Periode a hat, mit n(x+a)=n(x). Betrachtet man nun den Faktor $\frac{2\pi p}{a}$, stellt man fest, dass gerade dieser einen Punkt im reziproken Gitter beziehungsweise im Fourierraum des Kristalls darstellt.

Im eindimensionalen Raum liegen diese Punkte auf einer Linie. Es gilt in diesem Fall für die oben genannte Gleichung folgende Beziehung:

$$n(x) = \sum_{p} n_p \cdot e^{\frac{i2\pi px}{a}}$$

Zur Erweiterung der Fourier-Analyse auf periodische Funktionen $n(\vec{r})$ im Dreidimensionalen benutzt man eine Menge von Vektoren \vec{G} , mit denen $n(\vec{r}) = \sum_{G} n_{G} \cdot e^{(i\vec{G})}$ invariant gegenüber jeder Gittertransformation \vec{T} sind. Hierbei ist \vec{G} der reziproke Gittervektor.

$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

h, k, l $\in Z$

 g_1, g_2, g_3 spannen den reziproken Raum auf und sind gegeben durch

$$\vec{g}_i = \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{V_{EZ}} \cdot 2\pi$$

Jeder dieser Vektoren steht orthogonal auf zwei der Achsenvektoren des Kristallgitters. Des weiteren besitzen die Gittervektoren die Eigenschaft $\vec{g}_i \cdot \vec{a}_j = \delta_{ij} \cdot 2\pi$. Jede Kristallstruktur hat also zwei mit ihr verbundene Gitter, das Kristallgitter und das reziproke Gitter.

Wollen wir nun die Laue-Gleichungen[3] herleiten, müssen wir die Beugungstheorie benutzen, welche besagt, dass die Menge der reziproken Gittervektoren \vec{G} die möglichen Reflexe der Röntgenstrahlung bestimmt.



Abbildung 2: Beugungstheorie

Die, im Volumenelement dV am Ort \vec{r} , gestreute Welle hat gegenüber der im Ursprung O gestreuten Welle einen Phasenfaktor von $e^{i(\vec{k}-\vec{k'})\cdot\vec{r}}$. Es gilt $\vec{k} + \Delta \vec{k} = \vec{k'}$

Aus der Streuungstheorie ergibt sich damit: $\Delta \vec{k} = \vec{G}$

Durch skalare Multiplikation dieser Gleichung mit \vec{a}_i und unter der zusätzlichen Verwendung der Beziehungen $\vec{g}_i \cdot \vec{a}_i = \delta_{ij}$ und $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$ ergeben sich die Laue-Gleichungen:

$$\vec{a}_1 \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi h$$
$$\vec{a}_2 \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi k$$
$$\vec{a}_3 \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi l$$

Mit diesen Gleichungen werden Kegelmäntel beschrieben. Ein Laue-Punkt entsteht nur dann, wenn alle drei Gleichungen erfüllt sind, er ist also der Schnittpunkt aller drei Kegelmäntel.

1.6 Gnomische Projektion



Abbildung 3: Gnomische Projektion

Die gnomische Projektion ist nichts anderes als eine, auf geometrischer Darstellung basierende, Reproduktion der beugenden Netzebenen aus dem Laue-Punkt. Genauer gesagt wird anhand eines Laue-Punktes der Durchstoßpunkt der Normalen, der beugenden Netzebene, durch die Schirmebene auf geometrischem Wege rekonstruiert. Somit ergibt sich in diesem System aus zueinander senkrechten Geraden das gnomische Netz.

Alle Punkte einer Geraden gehören dabei zu einer Zone, da zwei von drei Indizes gleich sind und somit eine gemeinsame Parallele vorliegt.

In diesem Versuch wurde der NaCl-Kristall senkrecht zur (001)-Richtung bestrahlt, aufgrunddessen sich als gnomisches Netz ein System von äquidistanten Geraden ergibt, die jedem Laue-Punkt ein Millersches Zahlentriplett zuordnet.

Diese gnomische Projektion wird mit einem gnomischen Lineal durchgeführt, welches zwei Skalen mit gemeinsamem Nullpunkt aufweist, und somit Laue-Punkte in gnomische Punkte überführt.

Auf der einen Skala wird die Entfernung $\overline{OP} = R \cdot tan(2\theta)$ aufgetragen, auf der anderen wiederrum $\overline{OG} = R \cdot cotg\theta$.

Es wird nun der Abstand des Laue-Punktes vom Nullpunkt mit Hilfe der \overline{OP} -Skala ermittelt. Man erhält damit den zugehörigen Winkel θ , dessen zugehöriger Wert auf der \overline{OG} -Skala aufgetragen wird und an dieser Stelle den zugehörigen G-Punkt darstellt. Jene Punkte ordnen sich aufgrund der kubischen Symmetrie des NaCl-Kristalls zu ei-

nem quadratischen Gitter, dessen Gitterkonstante dem Abstand Kristall-Film, sprich R, entspricht.

2 Durchführung

2.1 Versuchsaufbau und -durchführung

In unserem Versuch wurde von einem NaCl-Kristall eine Laue-Aufnahme in Transmission gemacht. Der Abstand Kristall - Film betrug dabei 3,0 cm, die Beschleunigungsspannung 35 kV, so dass, wie schon in der Einführung erwähnt, keine charakteristische Röntgenstrahlung auftritt. Von dem entstehenden Röntgenstrahl wird ein schmales Bündel ausgeblendet, dass auf den NaCl-Kristall fällt, welcher so justiert wurde, dass dies gerade senkrecht zur (001)-Fläche geschieht.

Die Belichtungsdauer betrug 45 Minuten.

Glücklicherweise gelang uns eine nahezu perfekte Aufnahme des Gitter gleich beim ersten Mal, denn für einen weiteren Versuch wäre kein Entwickler mehr vorhanden gewesen.

2.2 Indizierung der Laue-Punkte

Der in der Mitte deutlich zu erkennende Punkt entsteht durch den nicht abgelenkten Primärstrahl. Um ihn herum sind die Laue-Punkte unterschiedlicher Intensität in einer vierzähligen Symmetrie angeordnet. Die Punkte im unteren Teil der Aufnahme liegen dem Zentrum ferner, was wohl darauf hindeutet, dass Kristall und Fotoplatte nicht ganz parallel gestellt wurden. Möglicherweise wird damit eine Identifizierung der G-Punkte erschwert.



Abbildung 4: NaCl-Gitter

3 Auswertung

3.1 Berechnung der Wellenlängen zu vier Laue-Punkten

Nach der Braggschen Beugungsbedingung wird zu jedem Laue-Punkt mit dem Winkel θ eindeutig eine Wellenlänge zugeordnet. Es gilt:

$$n\lambda = 2d \cdot sin\theta$$

wobei n = 1 und d für NaCl = 5,63 Å

- (3,-2,1) : $\theta = 17,5^{\circ} \to 3,39\text{\AA}$
- $(-3,3,1): \theta = 12,5^{\circ} \rightarrow 2,44\text{\AA}$
- (-1,2,1) : $\theta = 23^{\circ} \rightarrow 4,4\text{\AA}$
- (-1, -2, 1) : $\theta = 25^{\circ} \rightarrow 4,76\text{\AA}$

3.2 Gebräuchliche und primitive Einheitszelle des fcc-Gitters, Volumina des fcc-Gitters

In Abbildung 4[1] sind die gebräuchliche und die primitive Einheitszelle des flächenzentrierten Raumgitters zu sehen. Wie man leicht erkennen kann, sind die primitiven Translationsvektoren $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}); \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}); \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})$, wobei $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ karthesische Einheitsvektoren sind. Für das Volumen gilt somit:

$$V_{EZ} = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3|$$
$$= \frac{1}{4}a^3$$
$$V_{gebr.} = a^3$$

3.3 Basis des fcc-Gitters

Da die Kristallstruktur des NaCl abwechselnd durch Na^+ - und Cl^- -Ionen aufgebaut ist, besitzt jedes Ion sechs nächste Nachbarn der entgegengesetzten Ladung. Die Basis besteht somit aus einem Cl^- -Ion bei (000) und einem Na^+ -Ion bei $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$.

3.4 Abstand der nächsten Nachbarn von NaCl

Der Abstand zum nächsten Nachbarn beträgt $\frac{a}{\sqrt{2}}$ im NaCl-Kristall.

3.5 Spezifische Dichte von NaCl

Die spezifische dichte bekommt man aus der Gleichung:

$$\rho = \frac{N_{Cl} * M_{Cl} + N_{Na} * M_{Na}}{N_A V}$$

mit:

$$V = \frac{1}{4}a^3 \qquad M_{Cl} = 35,45 \frac{g}{mol} \qquad M_{Na} = 22,99 \frac{g}{mol}$$
$$N_A = 6,022 * 10^{23} \frac{1}{mol} \qquad N_{Cl} = N_{Na} = 1 \qquad a = 5,63 \text{ Å}$$

Damit ergibt sich eine spezifische Dichte von $2,18*10^6 \frac{g}{cm^3}$.

3.6 Anzahldichte von NaCl

Die Anzahldichte von NaCl berechnet sich aus der Anzahl der Atome pro primitiver Einheitszelle geteilt durch das Volumen der Einheitszelle.

$$n = \frac{N}{V}$$
$$n_{NaCl} = \frac{2}{\frac{1}{4}a^3} = \frac{4,48 \cdot 10^{28}}{m^3}$$

Diese Zahl kann man dann noch durch die Avogadro-Konstante dividieren und erhält 74,44·10³ $\frac{mol}{m^3}$.

3.7 Herleitung

Man betrachtet eine Ebene (hkl) in einem Kristallgitter. Zu zeigen ist, dass der reziproke Gittervektor \vec{G} senkrecht auf dieser Ebene steht und der Abstand zwischen zwei aufeinander folgenden Ebene gleich $d(hkl) = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$ ist.

 $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

Wir betrachten das fcc-Gitter und stellen fest, dass gilt:

$$\vec{a}_{1} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$
$$\vec{a}_{2} = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$
$$\vec{a}_{3} = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})$$
$$\vec{g}_{1} = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$
$$\vec{g}_{2} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$
$$\vec{g}_{3} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

Wir wählen k = l = 0, h = 1, woraus die Beziehung $\vec{G} = \vec{g}_1$ folgt. Für einen beliebigen Vektor aus der (100)-Ebene, zum Beispiel \vec{a}_1 gilt dann:

$$\vec{G} \cdot \vec{a}_1 = \vec{g}_1 \cdot \vec{a}_1 \tag{1}$$

$$= \frac{2\pi}{a} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \cdot \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y})$$
(2)

$$=\pi(\hat{x}^2+\hat{y}^2)$$
 (3)

Da wir aber gesetzt haben, dass $\hat{y}^2 = \hat{x}^2 = 0$ sind, ergibt sich $\vec{G} \cdot \vec{a}_1 = 0$, was ja nichts anderes bedeutet als dass $\vec{G} \perp \vec{a}_1$ ist. Analog dazu lässt sich die Orthogonalität für alle anderen Fälle beweisen.

3.8 Berechnung des Strukturfaktors des NaCl

Wie schon erwähnt, besteht die Basis des NaCl-Kristalls aus einem Cl⁻-Ion bei (000) und einem Na⁺-Ion bei $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$.

In jedem Einheitswürfel befinden sich damit 4 Cl⁻-Ionen und 4 Na⁺-Ionen.

Cl: $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$; $(00\frac{1}{2})$; $(0\frac{1}{2}0)$; $(\frac{1}{2}00)$ Na: (000); $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$; $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$; $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ Somit besteht die Basis des fcc-Gitters, in Bezug auf die Einheitszelle, aus identischen Atomen bei (000); $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$.

Allgemein gilt für den Strukturfaktor:

$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{n} = f_j \cdot e^{-2\pi i (hn_1 + kn_2 + ln_3)}$$

Für unseren Fall ist n=4, und der Strukturfaktor lässt sich in der folgenden Form ausdrücken:

$$S_{hkl} = \sum_{j=1}^{4} = f_j \cdot e^{-2\pi i (hn_1 + kn_2 + ln_3)}$$
$$= f[1 + e^{-i\pi (n_1 + n_2)} + e^{-i\pi (n_1 + n_3)} + e^{-i\pi (n_1 + n_1)}]$$

Für gerade oder ungerade Indizes gilt : S = 4fIst jedoch nur eine der Zahlen gerade oder ungerade, so verschwindet S.

4 Probleme und Verbesserungsvorschläge

Leider funktionierte der neue Versuchsaufbau an unserem Praktikumstag noch nicht. Glücklicherweise war es uns jedoch möglich eine Messung im alten Praktikumsstil vorzunehmen. Wie schon erwähnt, hatten wir nur eine Möglichkeit eine Fotoplatte zu belichten, denn der Entwickler, der noch vorrätig war war gerade ausreichend für ein Bild.

Weitaus problematischer gestaltete sich das Bearbeiten der im Anleitungsteil gestellten Aufgaben, wirkte dieser Bericht doch ein wenig veraltet (Aufnahme einer Siliziumstruktur!), und man wußte nicht genau welche Aufgaben gelöst werden sollten.

Literatur

- [1] http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/ch13/graphics.
- [2] http://chemmac1.usc.edu/bruno/zeodat/xrd.html.
- [3] Ch. Kittel. Einführung in die Festkörperphysik. Oldenbourg, 1999.