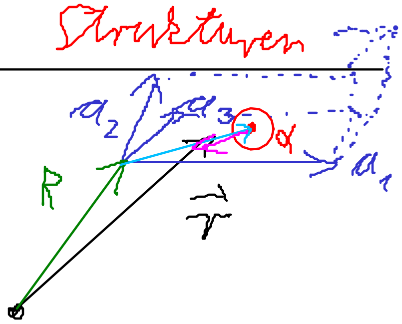
3.2 Streuung an periodischen Strukturen



Gitterpunkt als Ursprung

Abstand zu bel. Punkt im Kristall

$$\vec r = \vec R + \vec r_\alpha + \vec r\,'$$

$\vec R$ Gittervektor

$\vec r_\alpha$ Vektor zum Mittelpunkt des Atoms α in der Elementarzelle

$\vec r\,'$ von dort aus zum gewählten Punkt

$$A_B(\vec K) \sim \int_{\text{Kristall}} \rho(\vec R + \vec r_\alpha + \vec r\,')\, e^{-k(\vec R + \vec r_\alpha + \vec r\,')}\, dr$$

$$= \sum_{\text{alle } R} \sum_\alpha \int_{\text{Atom } \alpha} \rho(r_\alpha + r')\, e^{-ik(\vec R + \vec r_\alpha + \vec r\,')}\, d\vec r$$

wg. Periodizität

$$\rho(\vec R + \vec r_\alpha + r') = \rho(\vec r_\alpha + \vec r\,')$$

$$A_B \sim \sum_{\text{alle } R} e^{-ik\vec R} \sum_\alpha \underbrace{\left(\int_{\text{Atom } \alpha} \rho_\alpha(\vec r\,')\, e^{-i\vec k \vec r\,'}\, dr' \right)}_{\text{Atomstreufaktor } f_\alpha} e^{-ik\vec r_\alpha}$$

dabei geschrieben:

$$\rho_\alpha(\vec r\,') = \rho(\vec r_\alpha + \vec r\,')$$

da Integration nur über den Bereich des Atoms α

ρ hängt nur ab von Art des Atoms und Strahlungsart und natürlich von $\vec r\,'$

$$A_B(\vec K) \sim \left(\sum_{\text{alle } R} e^{-i\vec k \vec R} \right) \left(\sum_\alpha f_\alpha\, e^{-i\vec k \vec r_\alpha} \right)$$

scheinbar wichtig, er hat's unterstrichen ...

$A_B(\vec{K}) \sim$ Gitterfaktor $\cdot$ Strukturfaktor

Damit konstr. Interferenz möglich ist, müssen beide Faktoren $\neq 0$ sein.

Zunächst (Kap 3.3 – 3.7) Gitterfaktoren behandeln

3.3 Beugungsbedingung nach Laue

Mit $\vec{R} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$ folgt Gitterfaktor

$$\sum_{\text{alle } \vec{R}} e^{-i \vec{K}\vec{R}} = \left(\sum_{m_1} e^{-i \vec{K} m_1 \vec{a}_1}\right)\left(\sum_{m_2} e^{-i m_2 \vec{K}\vec{a}_2}\right) \cdot \left(\sum_{m_3} e^{-i m_3 \vec{K}\vec{a}_3}\right)$$

wg Einfachheit: Kristall sei Parallelepiped mit M^3 Einheitszellen

$$\sum_{m=0}^{M-1} e^{-i m_1 \vec{K}\vec{a}_1} = \frac{1 - e^{-i M \vec{K}\vec{a}_1}}{1 - e^{-i \vec{K}\vec{a}_1}}$$

$$\left(\sum_{m=0}^{M-1} x^m = \frac{1}{1-x} - \frac{x^m}{1-x} \quad \text{geom. Reihe} \right)$$

$\Rightarrow$ Intensität

$$I \sim \frac{\sin^2 \frac{1}{2} M \vec{K}\vec{a}_1}{\sin^2 \frac{1}{2} \vec{K}\vec{a}_1}$$

$\hat{=}$ Intensität des Optischen Gitters

Intensitätmaxima, wenn der Nenner $= 0$ wird.

d.h. wenn $\vec{a}_1 \vec{K}$ vielfaches von 2π

$$a_1 K = 2\pi h \qquad a_2 K = 2\pi k \qquad a_3 K = 2\pi l$$

Dies sind die Laue-Gleichungen (h, k, l ganzzahlig)

Anzahl der Nullstellen des Zählers wächst mit M. (wie opt. Gitter)

Für makroskop. Kristall $(M \to \infty)$ erhält man nur dort konstruktive Interferenz („Reflexe") wo Laue-Gl. erfüllt sind.

Für welche $\vec{K}$ sind die Laue-Gl. erfüllt?

3.4 das reziproke Gitter

Def Die Menge aller Wellenvektoren $\vec{G}$ die ebene Wellen mit der Periodizität eines gegebenen Gitters bilden heißt „reziprokes Gitter" zu diesem Gitter.

D.h. es gilt $e^{i\vec{G}(\vec{r}+R)} = e^{i\vec{G}\vec{r}}$

$\Rightarrow$ und damit gilt $e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1$ für bel. Gittervektoren $\vec{R}$

Die Basis des rez. Gitters (math. Basis)

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

g_1, g_2, g_3 zunächst unbestimmt

wg. $e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1 \Leftrightarrow \vec{G}\vec{R} = 2\pi m$ $(m \in \mathbb{Z})$

gilt insbesondere für $\vec{R} = n_1\vec{a}_1$

$$(h g_1 + k g_2 + l g_3)\, n_1 a_1 = 2\pi m$$

für bel. n_1 nur zu erfüllen wenn

$$\vec{g}_1\vec{a}_1 = 2\pi \qquad \vec{g}_2\vec{a}_1 = 0 \qquad \vec{g}_3\vec{a}_1 = 0$$

entsprechend für $\vec{R} = n_2\vec{a}_2$, $\vec{R} = n_3\vec{a}_3$

$$\Rightarrow \quad \vec{a}_i \, \vec{g}_j = 2\pi \, \delta_{ij} \qquad i, j = 1, 2, 3$$

Was kann man über g_j aussagen?

z.B. g_1 a) $g_1 \perp \vec{a}_2$
$\perp \vec{a}_3$ $\Rightarrow g_1 \sim \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$

b) Normierung $\vec{g}_1 \vec{a}_1 = 2\pi$ wird erfüllt

$$g_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

analog g_2, g_3

$$g_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}$$

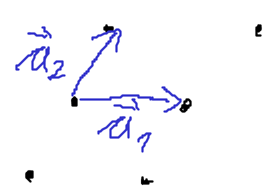
$$g_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}$$

Ergebnis: 3 lin. unabh. Vektoren (Einheit m^{-1}) die nur von den fundamentalen Gittervektoren des gegebenen Gitters abhängen.

Def g_j $(j = 1, 2, 3)$ heißen fundamentale Gittervektoren des reziproken Gitters.

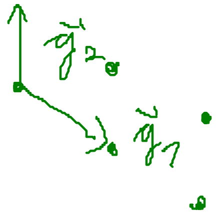
jeder Vektor
$\vec{G} = h \vec{g}_1 + k \vec{g}_2 + l \vec{g}_3$ ist ein reziproker Gittervektor

<u>Bsp</u> 2-dim. Gitter



$\vec{g}_1 \perp \vec{a}_2$, $\vec{g}_2 \perp \vec{a}_1$

$|g_1| = \frac{2\pi}{|a_1|}$; $g_2 = \frac{2\pi}{|\vec{a}_2|}$



← reziproke Gitter

wenn $\vec a_3 \perp$ Zeichenebene

dann $\vec g_3 \perp$ "

Bem zu jedem Gitter ist das reziproke Gitter eindeutig bestimmt.

Das reziproke Gitter vom reziproken Gitter ist das ursprüngliche (direkte) Gitter.

Bsp Das reziproke Gitter des bcc-Gitters ist das fcc-Gitter

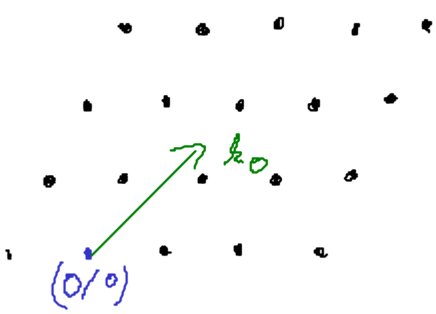
Das reziproke Gitter hat die gleiche **Punktgruppe** des direkten Gitters

Streubedingung der **Laue-Gleichungen** lautet jetzt einfach

$$\vec K = \vec G$$

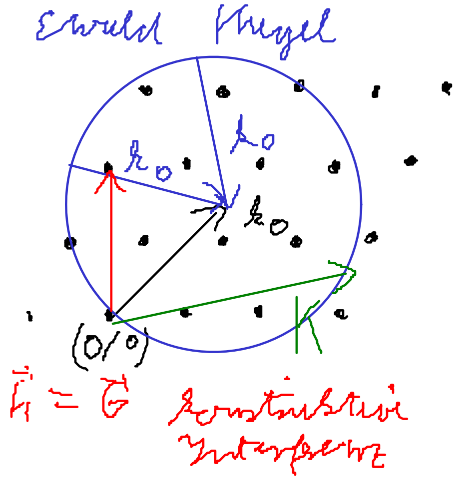
Notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung für konstruktive Interferenz, da auch der Strukturfaktor $\neq 0$ sein muss.

3.5 geometrische Deutung der Streubedingung im reziproken Gitter



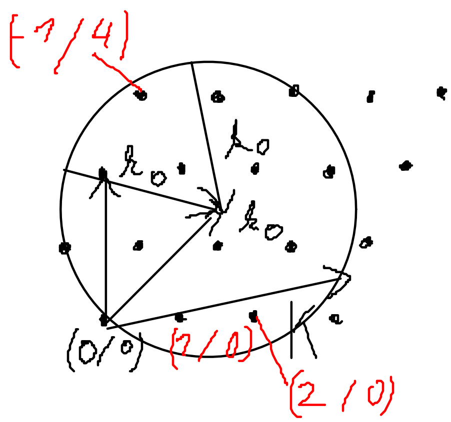
Ewald-Konstruktion

1) Wähle rez. Gitterpunkt als Ursprung (beliebig) und trage k_0 hiervon ab



2) Elastische Streuung
Ein gestreute Welle liegt Anfangspunkt von k, auf Kugel um Spitze von k_0 mit Radius
$|k| = |k_0| = \frac{2\pi}{\lambda}$

3) Für Punkte, die auf rez. Gitterpunkt fallen, ist die Streubedingung erfüllt.



4) Beugungsreflex wird entsprechend dem Punkt des reziproken Gitters indiziert

i. a. bei festem k_0 (bzgl. Betrag und Richtung) gibt es keine Reflexe

Möglichkeiten

a) kontinuierliches Spektrum

b) kontinuierliche Verteilung der k_0-Richtungen bzgl. der Kristallachsen
- Drehkristallmethode
- Pulver (Debye-Scherrer-Methode)

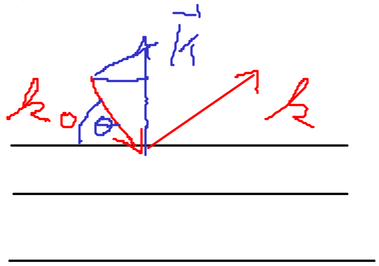
3.6 Braggsche Deutung der Streubedingung

Satz: Ein Vektor $\vec{G}_{hkl} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$ steht senkrecht auf den Netzebenen (hkl)

Beweis: Übung

Satz: Der Abstand benachbarter Netzebenen (hkl) ist $\frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$ (hkl teilerfremd)

Damit kann man die Streubedingung umformen



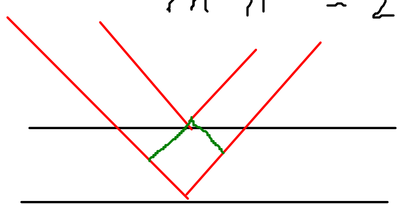
$$\sin\theta = \frac{\frac{1}{2}|K|}{|k_0|} \quad \text{mit } |k_0| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$|K| = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta$$

$\Rightarrow \quad \lambda = 2\, d_{hkl} \sin\theta$ für benachbarte Netzebenen (hkl) teilerfremd

Für bel. parallele Netzebenen $n \cdot G_{hkl}$

$$n\lambda = 2\, d_{hkl} \sin\theta \qquad \text{Bragg-Gesetz}$$



konstruktive Interferenz wenn Gangunterschied

$2\Delta = 2 d_{hkl} \sin\theta$ ein Vielfaches von λ ist.