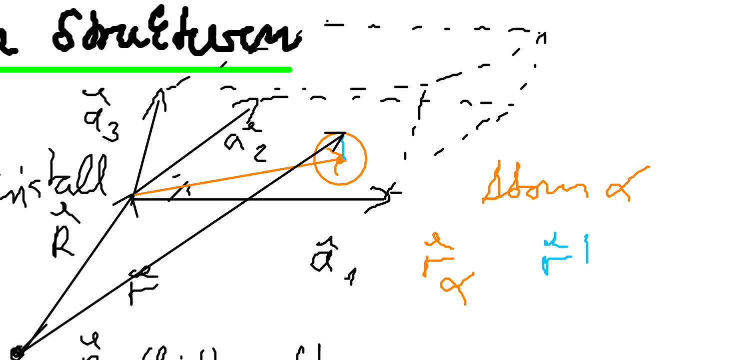
3.2 Streuung an periodischen Strukturen



Gitterpunkt als Ursprung

Abstand zu beliebigem Punkt im Kristall

$$\boxed{\vec{r} = \vec{R} + \vec{r}_\alpha + \vec{r}\,'}$$

$$A_B(\vec{K}) \sim \int_{\text{Kristall}} \rho(\vec{R}+\vec{r}_\alpha+\vec{r}\,')\, e^{-i\vec{K}(\vec{R}+\vec{r}_\alpha+\vec{r}\,')}\, d\vec{r}$$

$\vec{R}$: Gittervektor

$\vec{r}_\alpha$: Vektor zum Mittelpunkt des Atoms α

$\vec{r}\,'$: von dort zum gewählten Punkt

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

wegen $\rho(\vec{r}_\alpha+\vec{r}\,') = \rho(\vec{R}+\vec{r}_\alpha+\vec{r}\,')$

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

dabei:

$\rho_\alpha(\vec{r}\,') = \rho(\vec{r}_\alpha+\vec{r}\,')$ da Integration nur über Bereich des Atoms α

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

$$\boxed{A_B(\vec{K}) \sim \underbrace{\left(\sum_{\text{alle } \vec{R}} e^{-i\vec{K}\vec{R}}\right)}_{\text{Gitterfaktor}} \underbrace{\left(\sum_\alpha f_\alpha\, e^{-i\vec{K}\vec{r}_\alpha}\right)}_{\text{Strukturfaktor}}}$$

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

zunächst (Kap. 3.3 – 3.7) Gitterfaktor behandeln.

3.3 Beugungsbedingung nach Laue

Mit $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ folgt für den Gitterfaktor

$$\sum_{\text{alle } \vec{R}} \exp[-i\vec{K}\vec{R}] = \left(\sum_{n_1} \exp[-i\vec{K}n_1\vec{a}_1]\right)\left(\sum_{n_2} \exp[-i\vec{K}n_2\vec{a}_2]\right)\left(\sum_{n_3} \exp[-i\vec{K}n_3\vec{a}_3]\right)$$

wegen Einfachheit: Kristall sei Parallelepiped mit M^3 Einheitszellen

$$\sum_{n_1=0}^{M-1} \exp[-i\vec{K}n_1\vec{a}_1] = \frac{1-\exp[-iM\vec{K}\vec{a}_1]}{1-\exp[-i\vec{K}\vec{a}_1]} \quad \text{da } \sum_{n=0}^{M-1} x^n = \frac{1}{1-x} - \frac{x^M}{1-x}$$

$$\Rightarrow \text{Intensität} \quad \boxed{I \sim \frac{\sin^2(\frac{1}{2}M\vec{K}\vec{a}_1)}{\sin^2(\frac{1}{2}\vec{K}\vec{a}_1)}} \quad (\hat{=} \text{ Intensität des optischen Gitters})$$

- Intensitätsmaxima, wenn Nenner $= 0$, d.h. wenn $\vec{a}_i \vec{k} = n \cdot 2\pi$

$$\boxed{\vec{a}_1 \vec{k} = 2\pi h \quad , \vec{a}_2 \vec{k} = 2\pi k \quad , \vec{a}_3 \vec{k} = 2\pi l} \qquad h, k, l = \text{ganzzahlig}$$

Laue Gleichungen

- Anzahl der Nullstellen des Zählers wächst mit M (wie opt. Gitter) für makroskopisches Kristall ($M \to \infty$) nur dort konstr. Interferenz, wo Laue Gl. erfüllt sind.

Für welche $\vec{k}$ sind Laue-Gl. erfüllt? Dazu:

3.4 Reziprokes Gitter

Def: Die Menge aller Wellenvektoren $\vec{g}$, die ebene Wellen mit der Periodizität eines gegebenen Gitters bilden, heißt <u>reziprokes Gitter</u> zu diesem Gitter

D.h. es gilt: $\boxed{\exp[i\vec{g}(\vec{r} + \vec{R})] = \exp[i\vec{g}\vec{r}]}$ und damit

$\boxed{\exp[i\vec{g}\vec{R}] = 1}$ für beliebige Gittervektoren $\vec{R}$.

Basis des reziproken Gitters:

$\boxed{\vec{g} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3}$ $\qquad \vec{g}_1, \vec{g}_2, \vec{g}_3$ zunächst unbestimmt

wegen $\exp[i\vec{g}\vec{R}] = 1 \iff \vec{g}\vec{R} = 2\pi m \quad$ (m ganzzahlig)

gilt insbes. für $\quad \vec{R} = n_1 \vec{a}_1$

$\Rightarrow \quad (h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3) n_1 \vec{a}_1 = 2\pi m \quad$ für belieb. n_1 nur zu erfüllen,

wenn $\vec{g}_1 \vec{a}_1 = 2\pi \;, \vec{g}_2 \vec{a}_1 = 0 = \vec{g}_3 \vec{a}_1$

entspr. $\vec{R} = n_1 \vec{a}_2$ und $\vec{R} = n_3 \vec{a}_3$, also $\vec{a}_i \vec{g}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad i,j = 1,2,3$

Was kann man über $\vec{g}_j$ aussagen? am Beispiel $\vec{g}_1$

a) $\left.\begin{array}{l} \vec{g}_1 \perp \vec{a}_2 \\ \quad\;\; \perp \vec{a}_3 \end{array}\right\} \vec{g}_1 \sim \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$

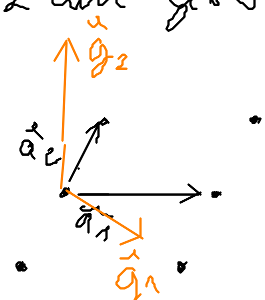
b) Normierung $\vec{g}_1 \vec{a}_1 = 2\pi$ wird erfüllt wenn

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

Ergebnis: 3 linear unabh. Vektoren (Einheit $\frac{1}{m}$), die nur von den fundamentalen Gittervektoren des gegebenen Gitters abhängen

Def: $\vec g_j$ $(j = 1, 2, 3)$ 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 (h, k, l = ganzzahlig)

Beispiel: 2-dim Gitter



$\vec g_1 \perp \vec a_2$, $\vec g_2 \perp \vec a_1$, $|\vec g_1| = \frac{2\pi}{|\vec a_1|}$, $|\vec g_2| = \frac{2\pi}{|\vec a_2|}$

wenn $\vec a_3 \perp$ Zeichenebene

dann $\vec g_3 \perp$ Zeichenebene

Bem: Zu jedem Gitter ist das reziproke Gitter eindeutig bestimmt; das reziproke Gitter des reziproken Gitters ist wieder das gegebene („direkte") Gitter

Beispiel: Rezip. Gitter des bcc-Gitters: fcc

— " — fcc-Gitters: bcc

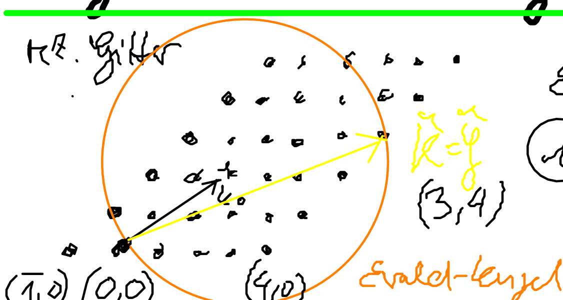
⇒ das reziproke Gitter hat die gleiche <u>Punktgruppe</u> wie das direkte Gitter

Streubedingungen (Laue-Gleichungen) lauten jetzt einfach

$$\boxed{\vec K = \vec g}$$

Notwendige aber nicht hinreichende Bedingung für konstruktive Interferenz, da auch noch 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 $\vec k_0$ hiervon ab

2. elastische Streuung: Für gestreute Welle liegt Anfangspunkt von $\vec k_0$ auf Kugel um Spitze von $\vec k_0$ mit Radius $|\vec k| = |\vec k_0| = \frac{2\pi}{\lambda}$ „Ewald-Kugel"

③ Für Punkte auf Ewald-Kugel, die auf rez. Gitterpunkte fallen ist die Streubedingung erfüllt.

④ Beugungsreflex wird entsprechend dem Punkt des rez. Gitters indiziert, hier also (3,4)

- im Allgemeinen bei festem $\vec{k}_0$ (bzgl. Betrag und Richtung) keine Reflexe

Möglichkeiten:

a) kontinuierliches λ-Spektrum (Laue-Methode)

b) kontinuierliche Verteilung der $\vec{k}_0$-Richtungen bzgl. Kristallatome

Drehkristallmethode

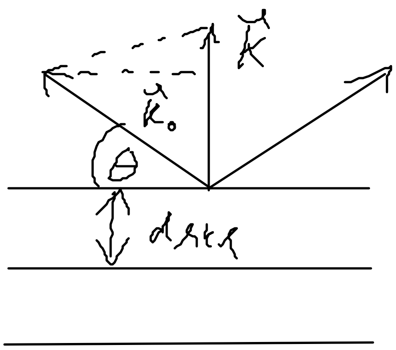
Pulver (Debye-Scherrer-Methode)

3.6 Braggsche Deutung der Streubedingung

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

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

Damit Streubedingung umformen



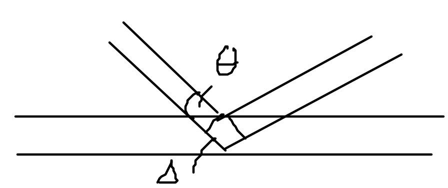
$$\sin\theta = \frac{\frac{1}{2}|\vec{K}|}{|\vec{k}_0|} \quad \text{mit} \quad |\vec{k}_0| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$|\vec{K}| = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta = |\vec{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

für Netzebenen mit (h,k,l) teilerfremd

Für beliebige Netzebenen $n\cdot\vec{G}_{hkl}$

$$\Rightarrow \boxed{n\lambda = 2 d_{hkl}\sin\theta}$$



konst. Interferenz
$2\Delta = 2 d_{hkl}\sin\theta$ Vielf. von λ