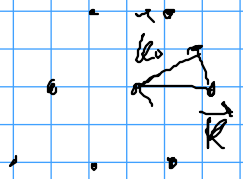


3.7 Brillouin - 2

Einheitszellen des reziproken Gitters? Besonders wichtig:

Def: Die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters heißt 1. Brillouin-Zone

Zustand: Mittelsenkrechten auf der Verbindungsline zweier reziproker Gitterpunkte. Auf dieser liegen die Spitzen aller Vektorpaare \vec{k}, \vec{k}_0 , die Streubedingung erfüllen.



Für jede Welle, deren \vec{k}_0 -Vektor die Zonengrenze erreicht, gibt es eine „Bragg-reflektierte“ Welle mit \vec{k} , sodass Streuvektor $\vec{k} - \vec{k}_0 = \text{repr. Gittervektor}$.

Weitere Brillouin Zonen: die n -te B. Zone erhält man durch Umschreiten von genau $n-1$ Zonengrenzen. Volumen aller B.Z. wird identisch.

3.8 Strukturfaktor S

$$S = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{\alpha}] \quad (\text{Kap. 3.2}) \quad f_{\alpha} \text{ Atomstreuquerschnitt}$$

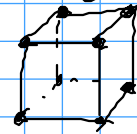
Summation über alle Atome α in der El.-Zelle

\vec{r}_{α} Lage des Atoms in der El.-Zelle

S bestimmt die Intensität des (hkl) -Reflexes (evtl. neg. Auslöschung möglich)

Beispiel 1, bcc-Gitter

a) identische Atome: $\vec{r}_{\alpha} = (000)$ und $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$



$$S = f_{\alpha} \cdot e^{-0} + f_{\alpha} \cdot \exp[-i\pi(h+k+l)]$$

$$= f_{\alpha} (1 + \exp[-i\pi(h+k+l)]) \quad \text{falls } (h+k+l) \text{ gerade } S=2f_{\alpha}$$

$$\text{ungerade } S=0$$

b) nicht identische Atome

$$S = f_{\alpha_1} + f_{\alpha_2} \exp[-i\pi(h+k+l)] \quad \text{nur Teilweise Auslöschung}$$

2. fcc-Gitter

identische Atome: h, k, l entweder alle gerade oder alle ungerade

Anwendungsbeispiel für 1: Ordnungs-Umordnungsübergang in

eines Fe-Co-Legierung

hohe Temperatur: Fe, Co statistisch verteilt

niedrige Temperatur: Fe, Co geordnet (Co-Struktur)

3.9 Streufaktor

$$f_{\alpha} = \int_{\text{Atom}} \rho_{\alpha}(\vec{r}') \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}'] d\vec{r}' \quad \rho_{\alpha}: \text{Staudichte}$$

hängt von Art der Strahlung ab

für kugelsymmetrisches $\rho_{\alpha}(\vec{r}') = \rho_{\alpha}(r')$

$$f_{\alpha} = 4\pi \int \rho_{\alpha}(r') r'^2 \frac{\sin(\vec{k} \cdot \vec{r}')}{k r'} dr' \quad \left[\text{für konst. Intensität des Gitters} \right]$$

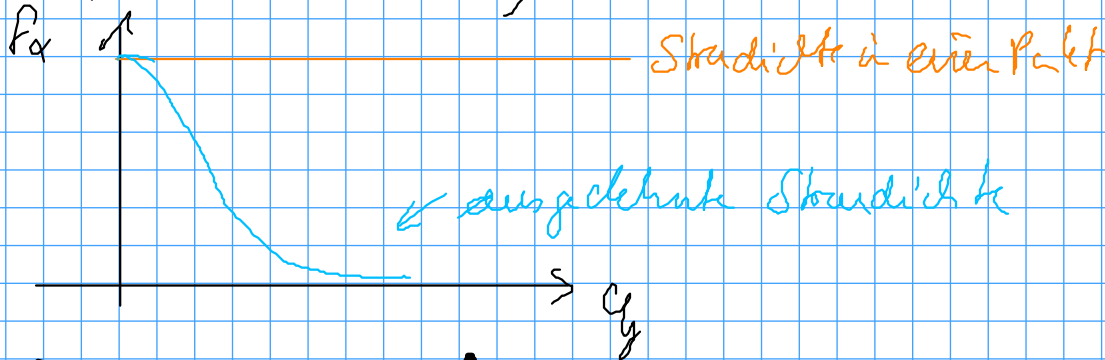
f_{α} ist maximal für Vorwärtstreuung $\theta = 0, \varphi = 0$ [d.h. $\vec{k} = \vec{0}$]

$$f_{\alpha} = 4\pi \int \rho_{\alpha}(r') r'^2 dr' = \text{über Atomvolumen integrierte Staudichte}$$

Falls geordnete Staudichte bei $r'=0$ konstant: $\frac{\sin(\vec{k} \cdot \vec{r}')}{k r'} = 1 \quad \forall \vec{k}$

$\Rightarrow f_{\alpha}$ ist Verhältnis der Streuamplituden für verschiedene $\rho_{\alpha}(r')$ -Verteilung zur Staudichte in einem Punkt

(F.T. der Staudichte) deshalb Formfaktor



Zusammenfassung Kap 3.3 - 3.5

Gestalt, Symmetrie und Abmessungen der Elementarzelle aus Lage der Reflexe (Gitterstruktur)

Intensität der Reflexe durch den Inhalt der Elementarzelle festgelegt. (Strukturfaktor: Lage der Atome innerhalb der El. Zellen) u. Atomstreuungsfaktor

3.10 Temperaturabhängigkeit der Streuintensität

Bisher: starres Gitter vorausgesetzt, aber: Gitterschwingungen Auslenkungen der Atome (bis $\approx 0,1a$)

Gibt es Reflexe bei höheren Temperaturen?

Zerlegung $\vec{r} = \vec{R} + \vec{r}_\alpha + \vec{r}'$ (beides)

Füge Atomen α des Atoms α in der i -ten Zelle hinzu

$\vec{r} \rightarrow \vec{r}_i(t) = \vec{R}_i + \vec{r}_{\alpha 0} + \vec{r}' + \vec{u}_{\alpha i}(t)$

Verfall mit 1-atomiger Basis ($\vec{r}_{\alpha 0} = 0, \vec{u}_{\alpha i} \rightarrow \vec{u}_i$):

Stramplitude: $A_B \sim \sum_{\text{alle } R_i} \exp[-i \vec{k} \cdot \vec{R}_i] f_\alpha \exp[-i \vec{k} \cdot \vec{u}_i(t)]$

Annahme: Jedes Atom schwingt unabhängig von anderen in Gleichgerichelage ("Einstein-Modell")

Stramplitude im thermischen Mittel für Streureflex $\vec{Q} = \vec{k}$

$\langle A_B \rangle = A_0 \langle \exp[-i \vec{Q} \cdot \vec{u}] \rangle$

$A_0 = \sum_{\text{alle } R_i} \exp[-i \vec{Q} \cdot \vec{R}_i] f_\alpha$ sagt dafür, dass Reflexe scharf bleiben nur Amplitude nimmt ab

Entwicklung: $\langle \exp[-i \vec{Q} \cdot \vec{u}] \rangle = 1 - i \langle \vec{Q} \cdot \vec{u} \rangle - \frac{1}{2} \langle (\vec{u} \cdot \vec{Q})^2 \rangle - \dots$

= 0 da \vec{u} unabh. von Richtung \vec{Q}

$= 1 - \frac{1}{2} \langle (\vec{u} \cdot \vec{Q})^2 \rangle = 1 - \frac{1}{6} \langle u^2 \rangle Q^2$

gleiche Entwicklung hat $\exp[-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle Q^2]$

$\langle A_B \rangle = A_0 \exp[-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle Q^2]$

Debye-Waller-Faktor W

Die Streuintensität $\langle I \rangle = I_0 \cdot \exp[-2W]$

Bem: ① Für klassische harmonische Oszillationen:

mittlere potentielle Energie $\langle U \rangle = \frac{1}{2} c \langle u^2 \rangle = \frac{3}{2} kT$

c : Federkonst. $\Rightarrow \langle I \rangle \sim \exp[-aT]$

② Temperaturabhängigkeit von $\langle I \rangle$ größer für große Streuvectoren $\vec{Q} = \vec{k}$