

### 3.7 Brillouini - Zonen

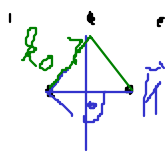
H  
30/1

Einheitszellen des reziproken Gitters?

Besonders wichtig:

**Def.** Die kleinste - Seite - Zelle des reziproken Gitters heißt 1. Brillouini - Zone

Zonengrenzen: Mittelsenkrechte auf der Verbindungsline zweier reziproker Gitterpunkte  
Auf diesen liegen die Spitzen aller Vektorpaare  $k, k_0$  die Streubedingungen erfüllen.



Für jede Welle, deren  $k_0$  Vektor die Zonengrenze erreicht, gibt es eine "Bragg-reflektierte" Welle mit  $k_0$ , so dass Streuvektoren  $k - k_0 = \text{rez. Gittervektor}$  ist.

Weitere B. Zonen die  $n$ -te B. Zone erreicht man durch überschreiten von  $n-1$  Zonengrenzen.

Volumen aller B.Z. sind gleich.

(Mittelsenkrechte zu den wä. entfernten Punkte)

### 3.8 Der Strukturfaktor

$$S = \sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{\alpha}} \quad (\text{Kap 3.2})$$

$f_{\alpha}$  Atomstrukturfaktor

Summation über alle Atome  $\alpha$  in der Elem. Zelle

$\alpha$ : Lage der Atoms  $\alpha$  in der Elem. Zelle.

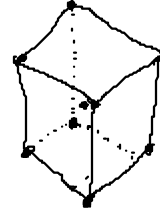
$S$  bestimmt die Intensität des  $(hkl)$  Reflex  
(sogar Auslöschung möglich)

## Bsp 1) bcc - Gitter

a) identische Struktur:  $r_\alpha = (0\ 0\ 0)$  und  $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$

Streubedingung  $\vec{k} = \vec{G}_{hkl}$

$$S = f_\alpha \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha} + f_\alpha e^{-i\pi(h+k+l)}$$



$$= f_\alpha (1 + e^{-i\pi(h+k+l)})$$

falls  $h+k+l$  gerade  $S = 2 f_\alpha$

ungerade  $S = 0$

b) nicht identische Atome

$$S = f_{\alpha 1} + f_{\alpha 2} (e^{-i\pi(h+k+l)}) \quad \text{teilweise Auslöschung}$$

## 2) fcc - Gitter

identische Atome  $h\ k\ l$  alle gerade oder alle ungerade

## Anwendung

zu 1)

Ordnungs - Unordnungsübergang in Fe Co Legierung

hohe Temp: Fe, Co statistisch verteilt

tiefe Temp: Fe, Co geordnet (CsCl - Struktur)

## 3.9 Atomstreudefaktor

$$f_\alpha = \int_{\text{Atom}} \rho_\alpha(\vec{r}') e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} d\vec{r}'$$

$\rho$  Streudeichte - hängt stark von der Art der Strahlung ab.

(Rechnung in PDF)

Für kugelsymmetrische  $\rho_a(\vec{r}') = \rho_a(r')$

$$f_a = 4\pi \int \rho_a(r') r'^2 \frac{\sin Gr'}{Gr'} dr'$$

Für konstruktive Interferenz des Gitterfaktors  
d. h.  $\vec{k} = \vec{G}$   
 $f_a$  ist maximal für Vorwärtsstreuung  $\theta = 0$ ,  $G = 0$

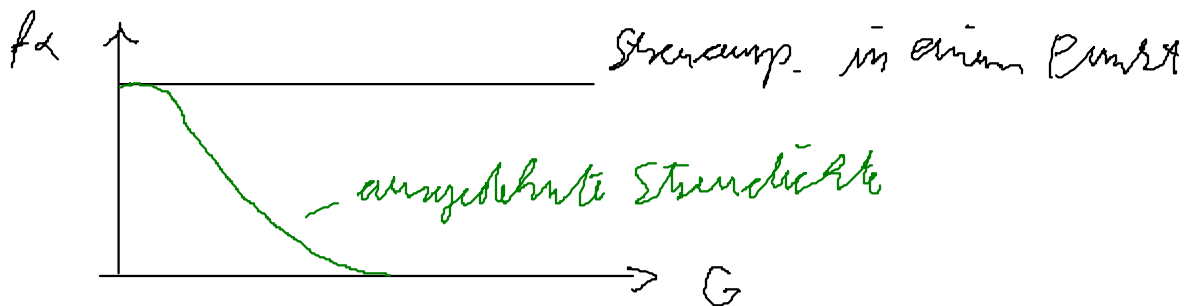
$$f_a = 4\pi \int \rho_a(r') r'^2 dr'$$

= über Atomvolumen integrierte Streudichte

Falls gesamte Streudichte bei  $r' = 0$  konzentriert

$$\frac{\sin Gr'}{Gr'} = 1 \quad \text{für alle } G!$$

$\Rightarrow f_a$  ist Verhältnis der Streuamplitude für  
tatsächliche  $\rho_a(r')$  Verteilung zur  
Streudichte in einem Punkt (FT der Streudichte)  
siehe Formfaktor



## Zusammenfassung Kap 3.3 - 3.9

Gestalt, Symmetrie und Abmessung der Elementarzelle

erhält man aus der Lage der Reflexe (Gitterfaktor)

Intensität der Reflexe durch Inhalt der Elementarzelle

festgelegt. (Strukturfaktor, Lage der Atome  
innerhalb der Elem. Zelle)

Bisher: starre Gitter vorausgesetzt.

Aber: Gitterschwingungen, Auslenkung der Atome  
( $b_5 \sim 0,1a$ )

Gibt es Reflexe bei höheren Temp.?

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

Füge Auslenkung des Atoms  $\alpha$  in der  $i$ -ten Zelle hinzu

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}_i(x) = \vec{R}_i + \vec{r}_{\alpha 0} + \vec{r}' + \vec{u}_{\alpha i}(x)$$

Kristall mit 1 atomigen Basis ( $\vec{r}_\alpha = 0$ ,  $\vec{u}_{\alpha i} \rightarrow \vec{u}_i$ )

Streuamplitude

$$A_B \sim \sum_{\text{alle } R_i} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{R}_i} f_\alpha e^{-i \vec{k} \cdot \vec{u}_i(x)}$$

Annahme Jedes Atom schwingt unabhängig von den anderen um die Gleichgewichtslage  
("Einstein-Modell")

Streuamplitude im thermischen Mittel für

$$\text{Streureflex } \vec{G} = \vec{k}$$

$$\langle A_B \rangle = A_0 \langle e^{-i \vec{G} \cdot \vec{u}} \rangle$$

(Auslenkung)

$$A_0 = \sum_{\text{alle } R_i} e^{-i \vec{G} \cdot \vec{R}_i} f_\alpha \quad \text{sorgt dafür, dass die}$$

Reflexe scharf bleiben. Nur die Amplitude nimmt ab.

Entwickle  $e^{-i \vec{G} \cdot \vec{u}}$ :

$$e^{-i \vec{G} \cdot \vec{u}} = 1 - i \underbrace{\langle \vec{G} \cdot \vec{u} \rangle}_{=0 \text{ da } \vec{u} \text{ unabhängig von } \vec{G}} - \frac{1}{2} \langle (\vec{u} \cdot \vec{G})^2 \rangle - \dots$$

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

$\uparrow$   
 $\frac{1}{3}$  wg 3 Raumrichtungen

gleiche Entwicklung hat

$$e^{-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2}$$

$$\Rightarrow \langle A_B \rangle = A_0 e^{-\frac{1}{6} \langle u^2 \rangle G^2}$$

Debye - Hückel Faktor  $W$

$\Rightarrow$  Streuintensität

$$\langle I \rangle = I_0 e^{-2W}$$

**Bem 1.** Für klas. harm. Oszillatoren ist

$$\text{die mittlere pot. Energie } \langle U \rangle = \frac{1}{2} c \langle u^2 \rangle$$

$$= \frac{3}{2} k_B T$$

$c = \text{"Federkonstante"}$

$$\Rightarrow \langle I \rangle \sim \exp(-aT)$$

**2.** Temperaturabhängigkeit von  $\langle I \rangle$  größer

für große Streufaktoren  $\vec{G} = \vec{K}$