

3.11 Methoden der Strukturanalyse

a) Verwendete Strahlungsarten für Bergmas-
experimente notwendig $\lambda \approx a$

Röntgenstrahlung: $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$

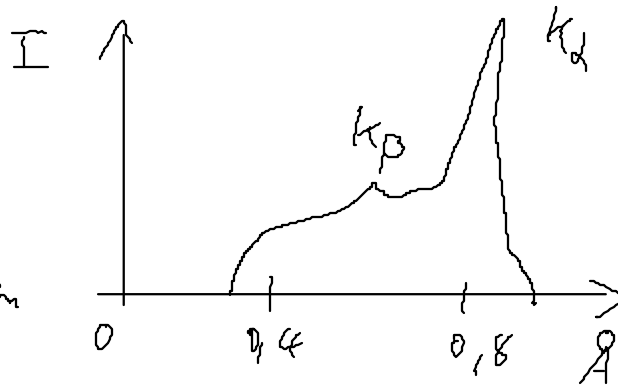
Streuung am Elektron: Formfaktor $f_e \sim Z$, also $I \sim Z^2$
leichte Elemente schwer nachweisbar
benachbarte Elemente schwer zu unterscheiden

(Streuung am Kern vernachlässigbar)

Quellen:

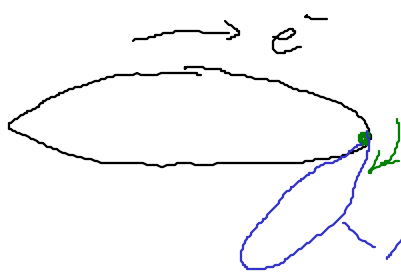
Röntgenröhre

Bsp Mo. mit
30 keV beschleunigen



Synchrotronstrahlung

z.B. DESY / BESSY
ANKA



Abstrahlung hochrelativistischer
Elektronen

hohe Intensität, kleine Divergenz für $v \rightarrow c$

Neutron $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m \lambda^2}$ (de Broglie)

ungeladen, Spin $\frac{1}{2}$

\Rightarrow WW mit Kernen (starke WW)

WW mit Elektronen in der Hülle, wenn diese
ein magn. Moment haben

aus Forschungsreaktoren

Berlin, München, Garching

Grenoble

Spaltungsquellen

Wirksamquerschnitte klein, d.h. lange
Strahlzeiten und große Proben erforderlich

Magnetische Strukturen sind mit hohen Intensitäten
von Synchrotronstrahlung nachweisbar

Elektronen $E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$

starke WW mit Elektronen und Protonen im Kern
nur geringe Eindringtiefe (5-50 Å) im Vgl.
zu Röntgenstrahlung und Neutronen
(bei vergleichbarer Wellenlänge)

⇒ Oberflächenphysik

für $\lambda = 1 \text{ Å}$

Röntgenstrahlung $\sim 10 \text{ keV}$

Neutronen $\sim 700 \text{ meV}$

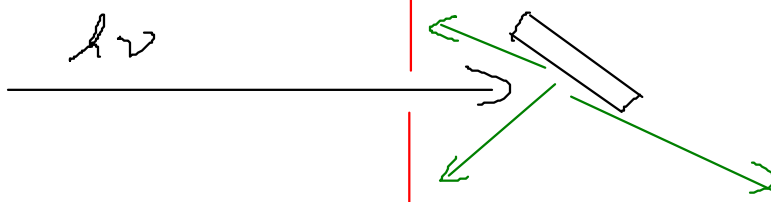
Elektronen $\sim 200 \text{ eV}$

b) Experimentelle Beugungsverfahren

Lame-Verfahren

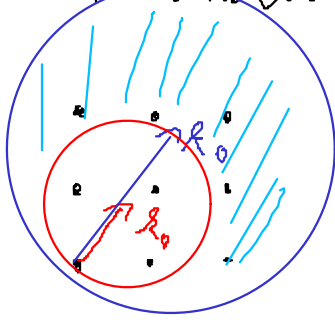
Kontinuierliches λ -Spektrum,
Einkristall

Film



Anwendung:
Orientierung von Proben

Ewald-Konstruktion



k_0 min } kontinuierliches
 k_0 max } Spektrum

alle Gitterpunkte im schraffierten Bereich: Gitterreflexe

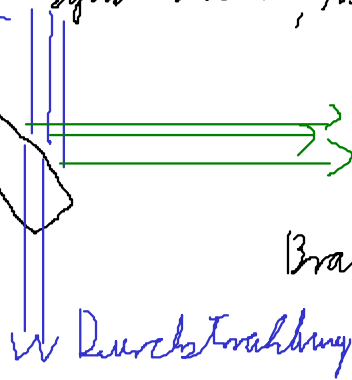
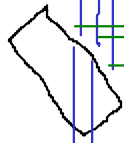
Drehkristallverfahren monochrom. Strahlung

Ein Kristall wird gedreht
monochromat. Strahlung aus:

Röntgenröhre char. Strahlung

Synchrotron, Neutronen: Kristall

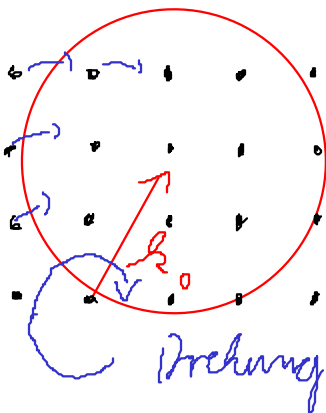
von Quelle



Zur Probe

$$\text{Bragg: } n \lambda = d \sin \theta$$

Ewald-Konstruktion



Einfallrichtung \vec{k}_0 fest

\Rightarrow Ewaldkugel ortsfest

Bei Drehung des Kristalls

treten nach und nach viele

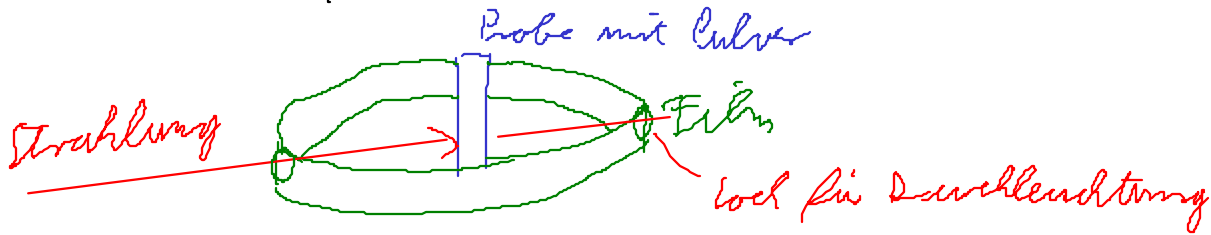
verschiedene Gitterpunkte

durch die Ewald-Kugel

\Rightarrow Beugungsreflexe unter bestimmten Drehwinkeln
bzw. für bestimmte Richtungen

Debye - Scherrer - Verfahren

monochromat. Strahlung, Pulver oder
feinkörniger Polycrystall



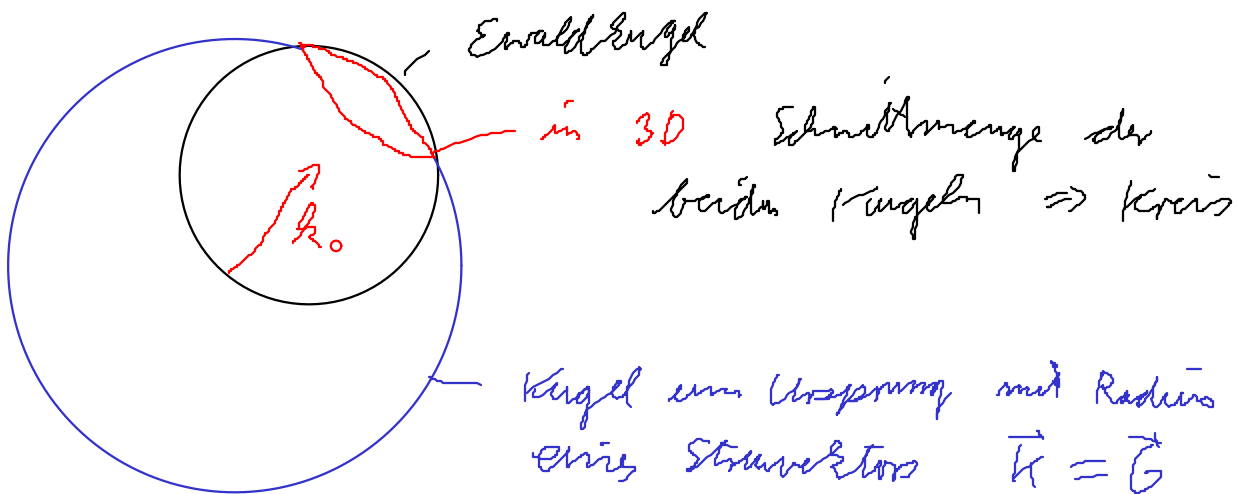
ähnlich Drehkristall, zusätzlich Drehachse
übs alle Richtungen verteilt.

Röntgenstrahl "sucht sich" für Reflex die
passend orientierten Kristalle "aus".

⇒ Beugungsmuster Linien statt Punkte

Bem. Kristallgröße immer noch so groß, dass
scharfe Reflex auftreten.

Ewald - Konstruktion



Solche Kreise erhält man für alle Reflexionen
Gittervektoren mit $|\vec{G}| < 2|\vec{k}_0|$

- meist ausreichend zur Strukturbestimmung
- große Genauigkeit $\frac{\Delta a}{a} \approx 10^{-5}$ / bequem, da keine Einkristalle erforderlich

c) direkte Abbildung von Strukturen atomarer Auflösung

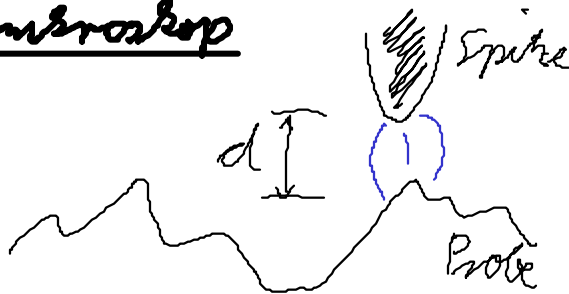
Elektronenmikroskop für 20 keV Elektronen
 $\sim 1 \text{ \AA}$

\Rightarrow benutzt werden 200 - 400 keV,
also prinzipiell atomare Auflösung in
Durchstrahlung möglich

Aber Probleme:

- Linsenfehler
- Vielfachstreuung
 \hookrightarrow aufwendige Rekonstruktion
der Interferenzmuster möglich

Tunnelmikroskop



Tunnelstrom I_T
zwischen Probe und
Spitze

$$I_T \sim \exp(-A \sqrt{\phi} d)$$

Regelung durch

Rückkopplung aus Tunnelstrom.

Mit Piezokristall wird die Spitze bewegt
und der Tunnelstrom eingestellt

atomare Strukturen der Oberflächen, genauer,
elektron. Orbitale werden abgetastet

"Rastertunnelmikroskop"

Für Isolatoren "Rasterelektronenmikroskop" auch
atomare Auflösung möglich

4 Gitterdynamik

~ jeweils $\sim 10^{22}$ Valenzelektronen und Ionen
pro cm^3

Die Bewegungen sind meist unabhängig voneinander.

Aber: Bewegung der Ionen ist sehr viel

langsamer als die der Elektronen:

Elektronenverteilung stellt sich schnell ("adiabatisch")
auf jeweilige Ionenkonfig. ein

4.1 Adiabatische Näherung

1. Das Elektronensystem befindet sich stets im
Grundzustand bezüglich der momentanen
Ionenkonfiguration

(natürlich hängt die Energie des El. Systems von
Ionenkonfig. ab)

2. Anregungen des El. Systems erfolgen im
Potential der momentanen Ionenkonfig.

\Rightarrow Teilgleichungen für Elektronen und Ionen.

Kopplung zunächst vernachlässigt
später als Korrektur

(am Do)

Aufteilung in

1. Bewegung der Ionen im gegebenen Potential

2. El. im gegebenen Potential