

## Wiederholung

$$\vec{b}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{V_2}$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

im rez. Raum definiert

Theorem

Jedem Vektor  $\vec{b}$  im reziproken Raum entspricht eine Menge von Ebenen im realen (direkten) Raum, die  $\perp$  zu  $\vec{b}$  sind.

Ihr Abstand ist  $d = \frac{2\pi}{|\vec{b}|}$

2.6 Brillouin - Zone

Elementarzelle des reziproken Gitters

Def. Die Wigner - Seitz - Zelle des rez. Gitters heißt 1. Brill. Zone (B.Z.)

(Wigner - Seitz - Zelle: mittelschweren)

(Volumen, das am nächsten an einem Gitterpunkt liegt)

Das reziproke Gitter kann mit der 1. Brill. Z. lückenlos auffüllen kann.

(Weitere BZ: Mittelschweren auf Verbindungslinie weit entfernte Gitterpunkte)

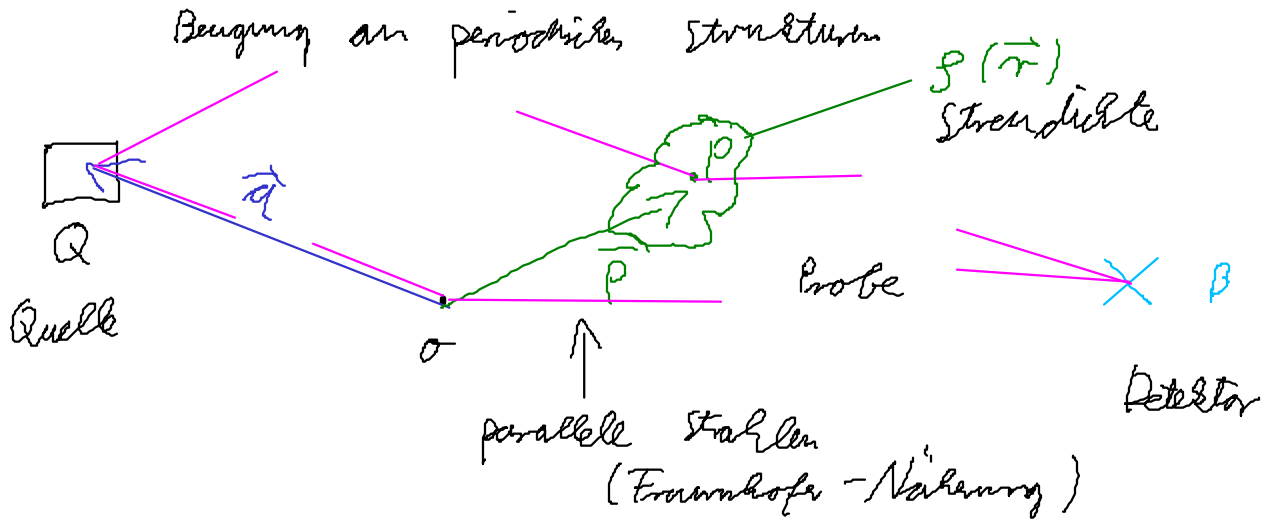
Theorem n-te BZ: alle BZ haben das gleiche Volumen

Bedeutung für Dispersionsrelation  $E(\vec{k})$

im reziproken Raum (Phononen, Elektronen)

### 3 Strukturbestimmung und reziprokes Gitter

#### Prolog / Allgemeines zur Beugung



Analogie zu Optik, Beugung am Gitter

Wellenlänge  $\lambda \approx$  Gitterkonstante

$\Rightarrow$  Röntgenlicht, Elektronen, Neutronen

Voraussetzungen / Annahmen

1. Einfachstrahlung (Mehrfachstrahlung später)
2. Fraunhofer-Näherung (einlaufende + auslaufende ebene Wellen)
3. nur elastische Streuung

$\Rightarrow$  momentane Amplitude der bei  $P$  einlaufenden Welle

vor Streuung  $\vec{k}_0$   $A^P = A_0 e^{i(\vec{k}_0(\vec{r} - \vec{R}_Q) - \omega_0 t')}$

$\vec{R}_Q$  Ort der Quelle

$\vec{r}$  Ort der Probe

Amplitude und Phasenlage werden durch Streuung

verändert:  $f(\vec{r})$  komplex

Bsp. für Röntgenstrahlung:  $f(\vec{r}) \propto$  Elektronendichte

Amplitude am Ort  $B$  des Detektors  $\vec{R}_B$ , nach  $\vec{k}$

$\downarrow$  nach Streuung

$$A^B = A^P \int(\vec{r}) \frac{e^{i(\vec{k}(\vec{R}_B - \vec{r}) - \omega t_0))}}{|R_B - \vec{r}|}$$

von oben

$$\underbrace{|\vec{R}_B - \vec{r}|}_{\vec{R}_B \gg \vec{r}}$$

$$\sim \frac{A_0}{|\vec{R}_B|} e^{i(-\vec{k}_0 \vec{R}_0 + \vec{k} \vec{R}_B)} \cdot \underbrace{f(\vec{r})}_{\text{spez. für Probe}} \cdot \underbrace{e^{i\vec{r}(\vec{k}_0 - \vec{k})}}_{\Rightarrow \text{Summation über Probenvolumen}} \cdot \underbrace{e^{-i\omega_0(t' - t'')}}_{\text{zeitl. Mittelung}}$$

konstant für feste Anordnung

$$\Rightarrow A^B \sim \int f(\vec{r}) e^{-i\vec{r}(\vec{k} - \vec{k}_0)} d\vec{r}$$

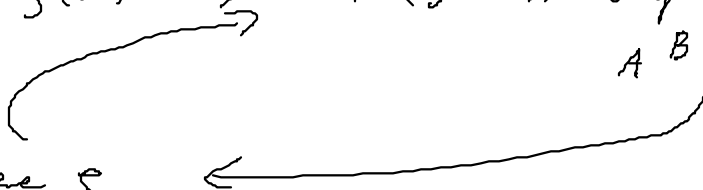
↑  
Volumen der Probe

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{k} \text{ Streuvektor}$$

∝ Fourier-Transform von  $f(\vec{r})$

Problem: i.A wird nur  $|A^B|^2$  gemessen  $\Rightarrow$  die Phaseninformation geht verloren

$\Rightarrow$  keine Umkehrung der FT möglich

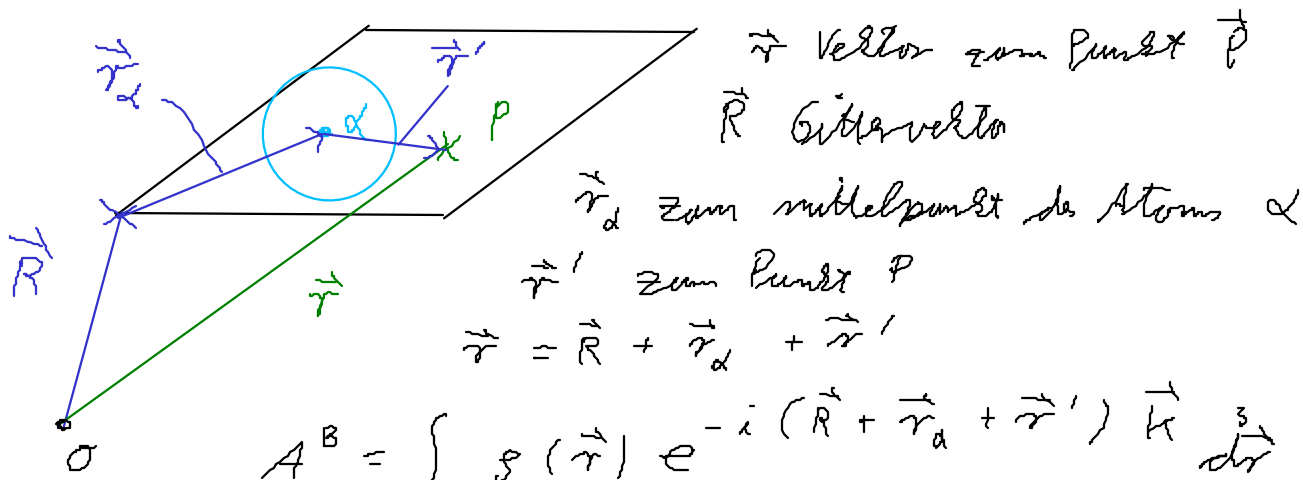
Lösung 1: erfinde  $f(\vec{r}) \Rightarrow$  FT( $f(\vec{r})$ ) vergleiche mit  $A^B$   


Lösung 2: Mehrfachstrahlung auch berücksichtigen  $\Rightarrow$  dynamische Theorie

### 3.2 Beugung an periodischen Strukturen

$$f(\vec{r}) \text{ periodisch} \Rightarrow \int_V f(\vec{r}) d\vec{r}$$

ergibt oft das gleiche (= unnötige Arbeit)



$$A^B = \int \rho(\vec{r}) e^{-i(\vec{R} + \vec{r}_d + \vec{r}') \cdot \vec{k}} d^3\vec{r}$$

$$= \underbrace{\sum_{\text{alle } E \in \mathbb{Z}}}_{\text{Gitterfaktor}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \underbrace{\sum_{\text{alle Atome}}}_{\text{Strukturfaktor}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_d} \int_{V \text{ des Atoms } \alpha} \rho_\alpha(\vec{r}') e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} d^3\vec{r}'$$

$f_\alpha$  Atomstrukturfaktor

Theorem

damit Reflexe beobachtet werden können, müssen sowohl Gitter- als auch Strukturfaktor  $\neq 0$  sein

1. Gitterfaktoren

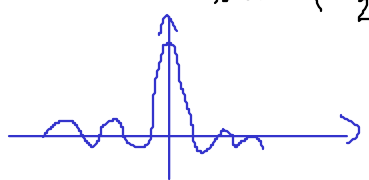
$$\sum e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad \vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi M \quad , \quad M \in \mathbb{Z}$$

Bsp. 1. Dim.  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1$

$$\sum_{n_1=0}^{M-1} e^{-i\vec{k} \cdot n_1 \vec{a}_1} = \frac{1 - e^{iM\vec{k} \cdot \vec{a}_1}}{1 - e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1}} \quad \text{geom. Summe}$$

$$I \propto \left| \frac{\sin^{-2} \left( \frac{1}{2} M \vec{k} \cdot \vec{a}_1 \right)}{\sin^{-2} \left( \frac{1}{2} \vec{k} \cdot \vec{a}_1 \right)} \right| \quad \text{ist maximal für } \vec{k} \cdot \vec{a}_1 = 2\pi h \quad (h \in \mathbb{Z})$$

Beschränkung auf Hauptmaximum



# Lame - Gleichung

$$\vec{a}_1 \vec{k} = 2\pi h \quad \vec{a}_2 \vec{k} = 2\pi k \quad \vec{a}_3 \vec{k} = 2\pi l$$

diese Gleichungen sind genau dann erfüllt, wenn  
 $\vec{k} = \vec{B}$

## Ewald Konstruktion

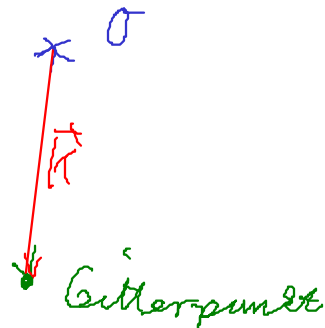
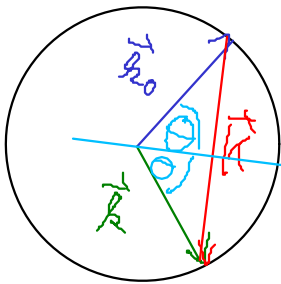
last. Streuung  $|\vec{k}_\alpha| = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

1.  $\vec{k}_0$  und  $\vec{k}$  in Kugel eintragen

2.  $\vec{k}$  einzeichnen

3. ist  $\vec{k}$  ein rez. Gittervektor

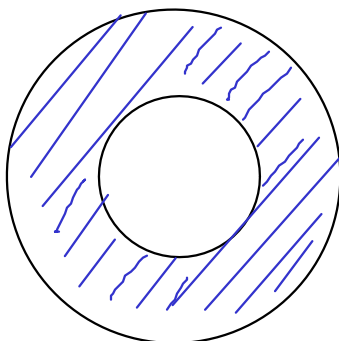
d. h. liegt ein Punkt des rez. Gitters auf der Oberfläche der Kugel beim Ende von  $\vec{k}$ ,  
so gibt es einen Reflex



$\Rightarrow$  i. A. kein Reflex für einen best. Einfall + Ausfallswinkel

1. Möglichkeit: Radius der Kugel

$\Rightarrow$  Wellenlängenbereich  $\lambda_1 < \lambda < \lambda_2$



Lame - Verfahren

## 2. Möglichkeit

Probe drehen

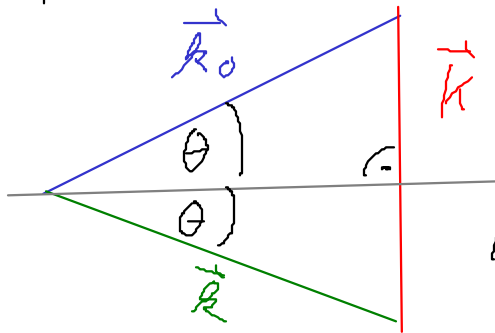
## 3. Pulverprobe

viele gekleinete Kristalle

### Bragg - Beugungsbedingung

---

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} \quad \text{Netzebenenabstand}$$



Streubedingung  $\vec{k} = \vec{B}$

$$|\vec{k}| = |\vec{B}|$$

$$|\vec{B}| = \frac{2\pi}{d} = |\vec{k}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$$

$$\sin \theta = \frac{\frac{1}{2} |\vec{k}|}{\frac{2\pi}{\lambda}}$$

$$\Rightarrow \lambda = 2d \sin \theta$$

Annahme von Bragg:  $hkl$  Teilerfernd

i. A. kann auch  $|\vec{B}| = n |\vec{B}'|$  sein

$\Rightarrow$

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

Bragg - Bedingung