

Reziprokes Gitter

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{V_2} \quad (\text{Zykel. Vertauschung})$$

reziprok (= Fourier Transform vom Gitter)

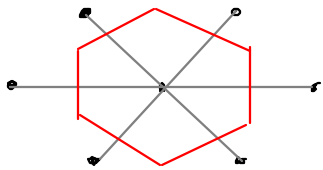
$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (\vec{k} \text{ im reziproken Raum})$$

Theorem: Jedem Vektor \vec{b} des reziproken Gitters entspricht eine Schaar (Menge) von Kristallebenen im realen Gitter, die \perp zu \vec{b} ist mit Abstand $d = \frac{2\pi}{|\vec{b}|}$

Brillouin-Zone

Elementarzelle des reziproken Gitters

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



(Mittelsenrichterebenen auf Abstand nächster Nachbarn)

Das reziproke Gitter kann lückenlos mit 1. BZ aufgefüllt werden

• Weitere BZ: Mittelsenrichterebenen auf Verbindung weiter entfernter Gitterpunkte

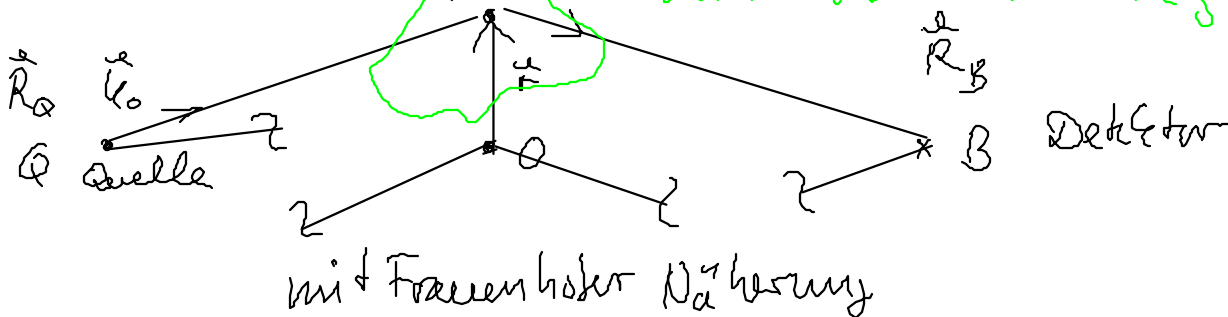
Theorem: n. BZ: alle BZ haben das gleiche Volumen

Bedeutung: Darstellung der Dispersionsrelation $E(\vec{k})$ im reziproken Raum (z.B. für Phononen, Elektronen)

Allgemeines zur Beugung

Beugung an periodischer Struktur

Kristall mit Schichtdicke $g(z)$



• Analogie zur Optik: Beugung am Gitter $n \approx$ Gitterkonst.

Röntgenlicht, Elektronen, Neutronen

• Voraussetzungen:

① 1-fach Streuung

② Fraunhofer-Näherung: einlaufende und gestreute Welle \approx ebene Well.

③ Elastische Streuung: $|\vec{k}'| = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

• momentane Amplitude der am Ort P einlaufenden Welle vorher \vec{k} . $A^P = A_0 e^{i(\vec{k}_0 \cdot (\vec{r} - \vec{r}_Q) - \omega_0 t)}$ \vec{r}_Q Ort der Quelle

Amplitude und Phasenlage werden durch Streuung verändert

$\rho(\vec{r})$ komplex (z.B. Röntgen $\rho(\vec{r}) \approx$ Elektronendichte)

• Amplitude am Ort B des Detektors \vec{r}_B , nachher \vec{k}'
 $A^B = A^P \rho(\vec{r}) \frac{\exp[i(\vec{k}' \cdot (\vec{r}_B - \vec{r}) - \omega t)]}{|\vec{r}_B - \vec{r}|} \approx \frac{A_0}{|\vec{r}_B|} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r}_B + \vec{k} \cdot \vec{r}_Q)} \rho(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_0 - \vec{r}) - i\omega_0(t + t')}$

$\approx |\vec{r}_B|$ weil $|\vec{r}_B| \gg |\vec{r}|$ konst. für feste Anordnung
 spezif. für $P \Rightarrow$ Summation über Probe
 Es wird über Zeit gemittelt

$A^B \approx \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{k}' \cdot (\vec{r}_B - \vec{r})} d^3r$ Fouriertransform von $\rho(\vec{r})$
 Volumen des Probe

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

Phasenproblem: im Allg. nur $|A_B|^2 = I$ Intensität messbar

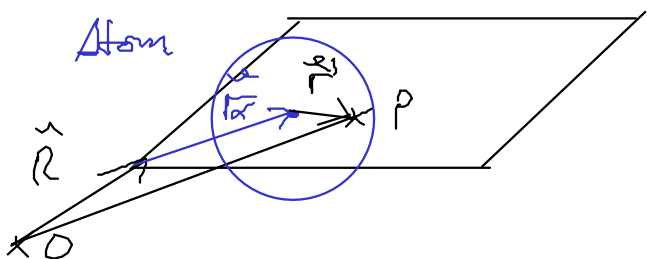
\Rightarrow Phaseninformation fehlt, Umkehrung der FT nicht möglich

Ausweg: ① Annahme eines bestimmten $\rho(\vec{r})$, Berechnung von I

Vergleich \Rightarrow andere Annahme von $\rho(\vec{r})$ usw. (kinematische Theorie)

② dynamische Theorie: Mehrfachstreuung berücksichtigen

Beugung an periodischen Strukturen



\vec{r} Vektor zum Punkt P von O

\vec{R} Gittervektor

\vec{r}_0 zum Mittelpunkt des Atoms

\vec{r}' zum Punkt P von Atommittelpunkt

$$\vec{r} = \vec{r} + \vec{r}_\alpha + \vec{r}^1$$

$$A^B = \int_{V_{\text{Probe}}} \rho(\vec{r}) e^{-i(\vec{k} + \vec{r}_\alpha + \vec{r}^1) \cdot \vec{r}} d^3r$$

für Atomstrukturfaktor

$$= \underbrace{\sum_{\text{alle } \vec{r}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}}_{\text{Gitterfaktor}} \underbrace{\sum_{\alpha} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\alpha}}_{\text{Strukturfaktor}} \underbrace{\int_{\text{Volumen Atoma}} \rho(\vec{r}^1) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}^1} d^3r^1}_{\text{Atomstrukturfaktor}}$$

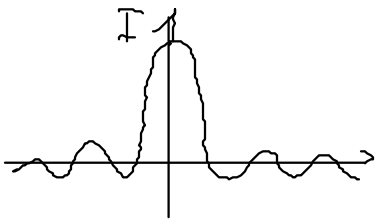
Theorem dass Reflexe beobachtet werden können, müssen sowohl Gitter- als auch Strukturfaktor $\neq 0$ sein

Gitterfaktor

$$\vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi M \quad M \in \mathbb{Z} \Rightarrow \sum e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \neq 0$$

$$1D: \vec{R} = n_1 \vec{a}_1 \quad \sum_{n_1=0}^{M-1} e^{-i\vec{k} \cdot n_1 \vec{a}_1} = \frac{1 - e^{iM\vec{k} \cdot \vec{a}_1}}{1 - e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1}} \quad \text{geometr. Reihe}$$

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

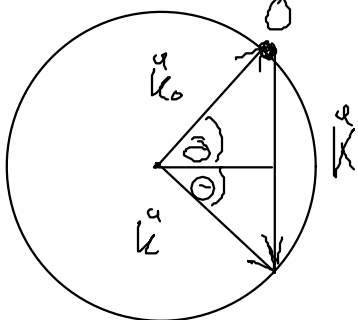


Laue-Gleichung $\vec{a}_1 \cdot \vec{k} = 2\pi h \quad \vec{a}_2 \cdot \vec{k} = 2\pi k \quad \vec{a}_3 \cdot \vec{k} = 2\pi l$

Die Gleichungen sind erfüllt, wenn $\vec{k} = \vec{0}$

Ewald-Konstruktion

elastische Beugung $|\vec{k}_0| = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$



\vec{k}_0, \vec{k}_0 in Kugel eintragen

$\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}_0$ eintragen

ist \vec{k} ein reziproker Gittervektor, d.h. liegt ein Punkt des rezipr. Gitters gerade auf Oberfl. der Kugel, beim Ende von \vec{k} , gibt es einen Reflex

• im Allgemeinen gibt es keinen Reflex

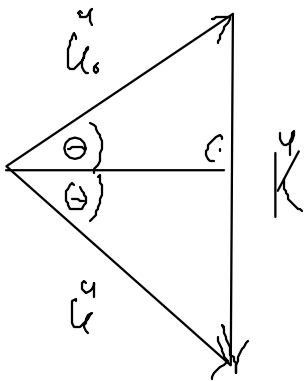
• Kugelradius $|\vec{k}|$

Möglichkeiten Reflex zu erhalten

- ① Variation des Kugelradius: Bereich der Wellenlänge $n_1 \lambda < n < n_2 \lambda$
- ② Drehung der Probe
- ③ Pulverprobe (Überlagerung der rezipr. Gitter)

Bragg'sche Beugungsbedingung

Abstand der Netzebenen: $d = \frac{2\pi}{|\vec{B}|}$



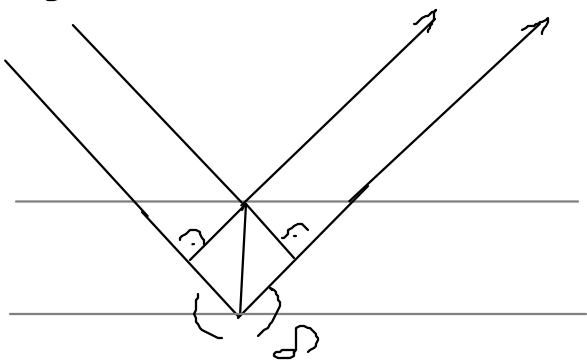
$$\sin \theta = \frac{1}{2} \frac{|\vec{k}' - \vec{k}|}{n}$$

Streukondition: $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{B}$ $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$

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

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

Beugung an Netzebenen



Annahme: $n_1, n_2, 1$ Teilerfremd
 im Allg: $|\vec{B}| = n |\vec{B}'|$

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