

III. Reziprokes Gitter = Werkzeug, z.B. zur Beschreibung der Physik in periodischen Strukturen

- III.1 Beugung am Kristall: Bragg-Bedingung
 - III.2 Definition des reziproken Gitters
 - III.2.1 Fourier-Reihen
 - III.2.2 Konstruktion reziproker Gittervektoren \mathbf{G}
 - III.3 Brillouinzonen = Wigner-Seitz-Zellen des rez. Gitters
 - III.4 Beugungstheorie (i): Grundlagen
 - III.4.1 Kugelwellen der Streuzentren
 - III.4.2 Eigenschaften des Streusignals
 - III.4.3 Periodische Anordnung Streuzentren
 - III.5 Beugungstheorie (ii): Ergebnisse
 - III.5.1 Ewaldkonstruktion: **Beugungsvektor \mathbf{K}**
 - III.5.2 Zusammenhang mit Gitterebenen
 - III.5.3 Bragg-Gleichung
 - III.5.4 Laue-Gleichungen
 - III.5.5 Zusammenhang mit Brillouinzone
 - III.5.6 Strukturfaktor und Atomformfaktor
 - III.6 Elektronenbeugung: 2-dim. Betrachtung
- Reziprokes Gitter zur Beschreibung der Beugung von (Röntgen-)Strahlen
- Beschreibung vieler anderer Eigenschaften, insb. Anregungen

III.1 Beugung am Kristall: Bragg-Bedingung

Ziel: Bestimmung von Kristallsymmetrie und Gitterkonstanten

Röntgenbeugung am Kristall ~ Optik: Beugung am Gitter (Interferenz!)

Kristallgitter-
konstante $\approx 0,3\text{nm} \approx \lambda_{\text{Röntgen}}$

optische
Gitterkonstante $\approx \lambda_{\text{visible}} \approx 0,5 \mu\text{m}$

$\lambda_{\text{Röntgen}} \approx 0,3 \text{ nm}$: harter Rö-Bereich

$$E = h \cdot \nu \approx 4 \text{ keV}$$

erfolgreiches *Modell*: (nicht ganz exakt)

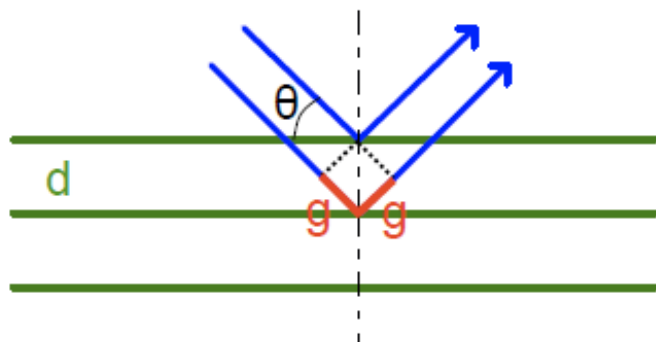
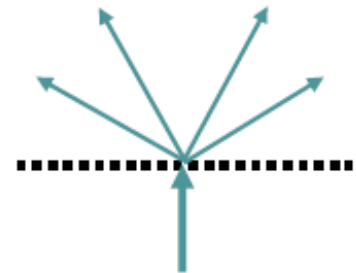
Reflexion an Kristallgitterebenen: Wegunterschied $\Delta = 2g = 2d \sin \theta$

Konstruktive Interferenz für $\Delta = n \cdot \lambda$ ($n=1,2,\dots$)

1. $(\lambda_{\text{Röntgen}})_{\text{max}} = 2d$ d =Abstand Gitterebenen

2. Interferenzschärfe ~ Anzahl N der Ebenen
~ Eindringtiefe / d

z.B. $N = 30 \mu\text{m} / 0,3 \text{ nm} = 10^5$



$$2 d \sin \theta = n \cdot \lambda \quad \text{Bragg-Gleichung}$$

Vergleich von Röntgenstrahlung, Elektronen und Neutronen

Beugung von Röntgenstrahlung
 auch Beugung von Elektronen
 und Neutronen } Wellen-
 charakter: $E = h \nu = hc / \lambda$
 $mv = p = h / \lambda$ (de Broglie)
 $E = p^2 / 2m = h^2 / (2m \lambda^2)$

Kriterien für Beugung:

	Rö-Str.	Elektronen	Neutronen
(i) passendes λ ($< 2 \cdot$ Abstand der Netzebenen) z.B. $\lambda = 0,1 \text{ nm} \rightarrow E$	12 keV	140 eV	80 meV
(ii) Art der Wechselwirkung	mit <u>Elektronen</u>		mit <u>Kernen</u>
(iii) Stärke der Wechselwirkung	mittel	stark	sehr schwach
\rightarrow Eindringtiefe	$\geq \mu\text{m}$	nm	cm

Beugung von Elektronen: langsam: 1-2 Gitterebenen, schnell: einige 10 G.-Ebenen

Beugung von Röntgenstrahlung: $\sim 10^5$ Gitterebenen

Beugung von Neutronen: „alle“ Gitterebenen

III.2 Definition des reziproken Gitters

Ziel: Beschreibung der Beugung durch **periodische Strukturen**,
bzw. allgemein: Beschreibung der Bewegung von Wellen in periodischen Strukturen

Wichtige Frage: Wechselwirkung?

Röntgenstrahlung mit Materie: WW mit Elektronendichte

allg: **Streudichte** $\rho(\mathbf{r})$ i. a. komplex: Realteil beschreibt **Streuung**
Imaginärteil beschreibt **Absorption**

im periodischen Gitter: $\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{T})$ Translationsvektor $\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$

geschickte Darstellung periodischer Funktionen: **Fourierreihe**

Vgl. Optik-
Vorlesung:

allg: jede Funktion = Integral über Fourierkomponenten
Sinus- und Cosinus Funktionen

periodische Funktion = Summe über Fourierkomponenten
Grundfrequenz + höhere Harmonische

geschickte Darstellung periodischer Funktionen: **Fourierreihe**

Verknüpft Zeit- und Frequenzabhängigkeit bzw. Orts- und Wellenvektor-Abhängigkeit

$$t \leftrightarrow \omega$$

$$x \leftrightarrow k$$

allg: jede Funktion = Integral über Fourierkomp.: Sinus- und Cosinus Funktionen

$$f(x) = \int_{k=0}^{\infty} A(k) \cdot \cos(kx) + B(k) \cdot \sin(kx)$$

periodische Funktion = Summe über Fourierkomponenten

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cdot \cos(nk_0x) + B_n \cdot \sin(nk_0x)$$

Für periodische Funktion mit Periodenlänge λ : $k_0 = 2\pi / \lambda$

k_0 = Grundfrequenz, $n k_0$ = höhere Harmonische

Amplituden der Sinus- und Cosinus Funktionen (= Fourier-Koeffizienten):

$$A_n = \frac{1}{2\pi} \int f(x) \cdot \cos(nk_0x) dx, \quad B_n = \frac{1}{2\pi} \int f(x) \cdot \sin(nk_0x) dx$$

Für gerade (bzw. ungerade) Funktionen gilt $B_n = 0$ (bzw. $A_n = 0$).

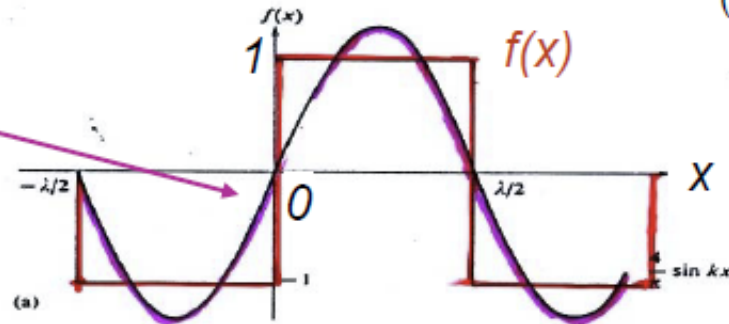
Darstellung einer periodischen, ungeraden Rechteckfunktion

(ungerade \Leftrightarrow alle $A_n = 0$)

1. Fourier-Funktion:

$$\frac{4}{\pi} \cdot \sin kx$$

d.h. $B_1 = 4/\pi$



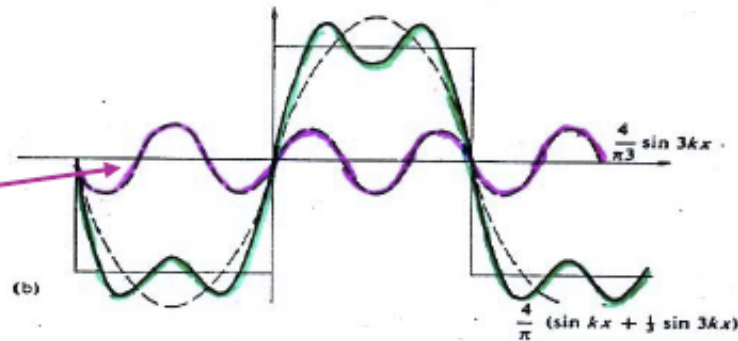
2. Fourierkoeffizient

$$B_2 = 0$$

3. Fourier-Funktion:

$$\frac{4}{3\pi} \cdot \sin 3kx$$

d.h. $B_3 = 1/3 \cdot 4/\pi$

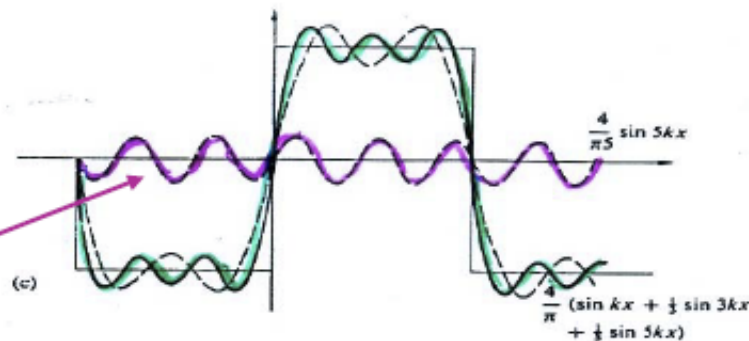


4. Fourierkoeffizient

$$B_4 = 0$$

5. Fourier-Funktion:

$$\frac{4}{5\pi} \cdot \sin 5kx$$



etc.

$$f(x) = \frac{4}{\pi} \sin(k_0 x) + \frac{4}{3\pi} \sin(3k_0 x) + \frac{4}{5\pi} \sin(5k_0 x) + \dots$$

Fourierreihen

Eindimensionale periodische Funktion: $\rho(x) = \rho(x + ma)$ $m = 1, 2, \dots$

Eindim. Fourier-Ansatz: $\rho(x) = \sum_n \rho_n \exp(i n (2\pi / a)x)$ $2\pi/a$: reziproke Länge
Vgl. $2\pi/\lambda$:
Wellenvektor $| = k$

ρ_n : Fourierkoeffizienten: niedrige n-Werte = Grundstruktur
hohe n-Werte = Feinstruktur

Test der Periodizität:

$$\rho(x + ma) = \sum_n \rho_n \exp(in(2\pi / a)x + inm2\pi) = \sum_n \rho_n \exp(in(2\pi / a)x) = \rho(x)$$

Dreidimensionale periodische Funktion: $\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{T})$

Dreidim. Fourier-Ansatz: $\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$ $\rho_{\mathbf{G}}$: Fourier-Koeffizienten

NEU: $\mathbf{G} \equiv$ Schar von Vektoren = 3- dim. Laufindex (vgl. 1-dim: $n = 1 \cdot \dots \infty$)
und Periodizitätsmaß. (vgl. 1-dim: $1/a$)
= "Raster" \equiv reziprokes Gitter $\mathbf{G} = h \mathbf{g}_1 + k \mathbf{g}_2 + l \mathbf{g}_3$

Forderungen an Vektoren \mathbf{G} : (i) $[\mathbf{G}] = (\text{Länge})^{-1}$ d.h. reziproke Länge (vgl. $1/a$)
(ii) Translationsinvarianz:

$$\exp(i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{T})) = \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \Rightarrow \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}) = 1 \Rightarrow \mathbf{G} \cdot \mathbf{T} = 2\pi m$$

III.2.2 Konstruktion reziproker Gittervektoren \mathbf{G}

Ansatz $\mathbf{G} = h \mathbf{g}_1 + k \mathbf{g}_2 + l \mathbf{g}_3$ d.h. $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$: Basis für Vektorensatz \mathbf{G}

Bedingung $\mathbf{G} \cdot \mathbf{T} = (h \mathbf{g}_1 + k \mathbf{g}_2 + l \mathbf{g}_3) \cdot (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3) = m \cdot 2\pi$

für beliebige n_i nur erfüllbar, wenn $\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{a}_1 = \mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{a}_2 = \mathbf{g}_3 \cdot \mathbf{a}_3 = 2\pi$
und $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 0$ für $i \neq j$

Allg. Bedingung für Basis $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ des reziproken Gitters: $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

Bezeichnung der Vektoren \mathbf{G} des reziproken Gitters durch hkl in Basis \mathbf{g}

Konstruktion der Basisvektoren $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ Richtung: $\mathbf{g}_i \perp \mathbf{a}_{j \neq i}$

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V}$$

$$\mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{V}$$

$$\mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{V}$$

Länge: $|\mathbf{g}_i| = 2\pi / (a_i \cos \angle(\mathbf{g}_i, \mathbf{a}_i))$
 $\angle(\mathbf{g}_i, \mathbf{a}_i) =$ Winkel zwischen \mathbf{g}_i und \mathbf{a}_i

V : Spatprodukt = Volumen der Einheitszelle

eindeutige Beziehung des reziproken zum realen Gitter

Andere, häufig verwendete
Bezeichnung: $\mathbf{a}_i^* = \mathbf{g}_i$

Bsp. für reziproke Gitter

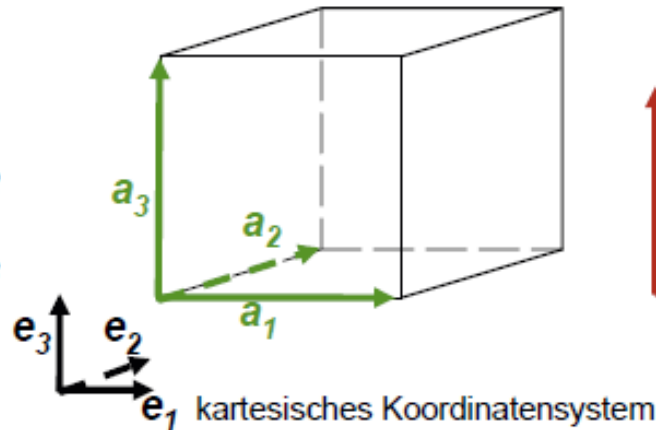
$$g_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{V}, \quad g_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{V}, \quad g_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{V}$$

reales Gitter: **kubisch primitiv**

$$a_1 = a \cdot e_1$$

$$a_2 = a \cdot e_2$$

$$a_3 = a \cdot e_3$$

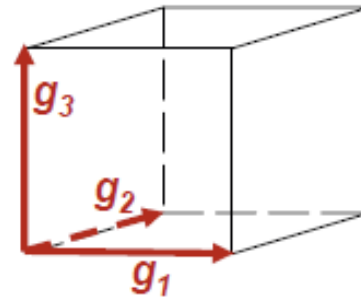


reziprokes Gitter: **kubisch primitiv**

$$g_1 = (2\pi/a) \cdot e_1$$

$$g_2 = (2\pi/a) \cdot e_2$$

$$g_3 = (2\pi/a) \cdot e_3$$



reales Gitter: **fcc**

$$a_1 = a/2 \cdot (e_2 + e_3)$$

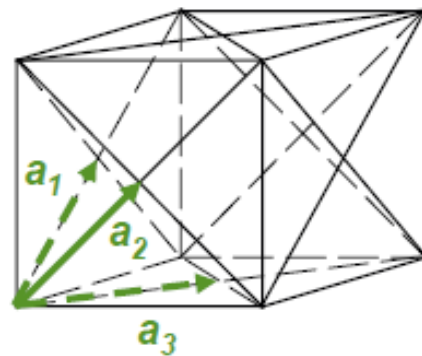
[011] Richtung

$$a_2 = a/2 \cdot (e_1 + e_3)$$

[101] Richtung

$$a_3 = a/2 \cdot (e_1 + e_2)$$

[110] Richtung



Primitive EZ verwenden !!!

reziprokes Gitter:

bcc

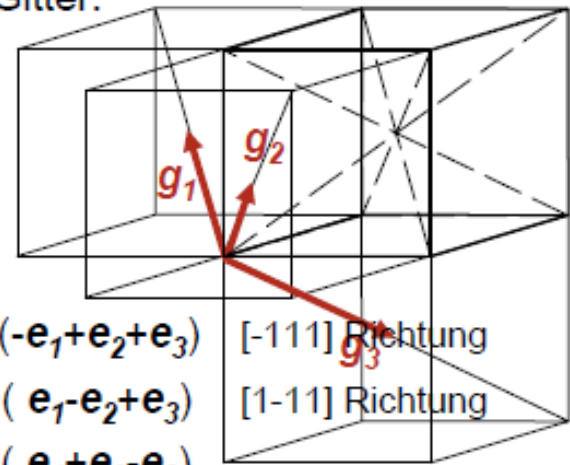
$$g_1 = (2\pi/a) \cdot (-e_1 + e_2 + e_3)$$

$$g_2 = (2\pi/a) \cdot (e_1 - e_2 + e_3)$$

$$g_3 = (2\pi/a) \cdot (e_1 + e_2 - e_3)$$

[-111] Richtung

[1-11] Richtung



III.3 Brillouinzone

Definition: Brillouinzone (BZ) = Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters

Relevanz

der BZ: - Beugung im Festkörper (Röntgen, Elektronen, Neutronen)

- Phononen im FK: phononische Dispersion
- Elektronen im FK: elektronische Bandstruktur
- Exzitonen im FK:

Merke:

Ortsraum
Längeneinheit [m]
Wigner-Seitz-Zelle

Reziproker Raum
[1/m]
Brillouinzone (BZ)
auch: Fourier-Raum oder k-Raum

Konstruktionsvorschrift Brillouin-Zone:

- (i) Bilde reziprokes Gitter mittels primitiver Basis.
- (ii) Bilde mittelsenkrechte Ebenen der reziproken Gitterpunkte.
- (iii) Kleinstes eingeschlossenes Volumen (kleinstes Polyeder) = Brillouin-Zone

Bsp. für Brillouinzone

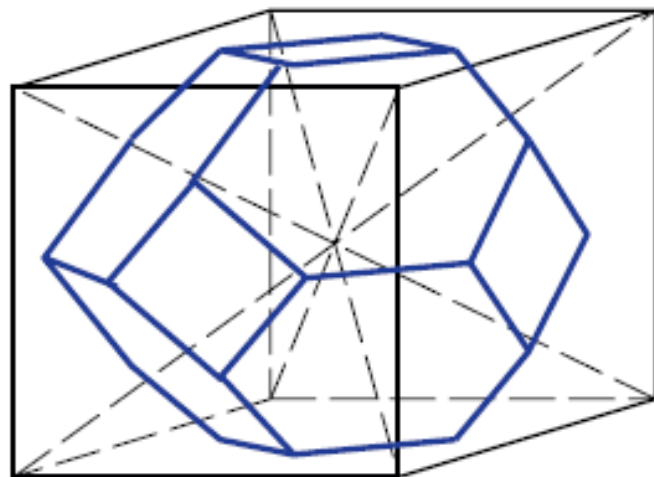
reales Gitter: **fcc**

→ reziprokes Gitter **bcc**

(siehe 2.2.2)

→ BZ= Wigner-Seitz-Zelle **bcc**

(siehe 1.2.4)



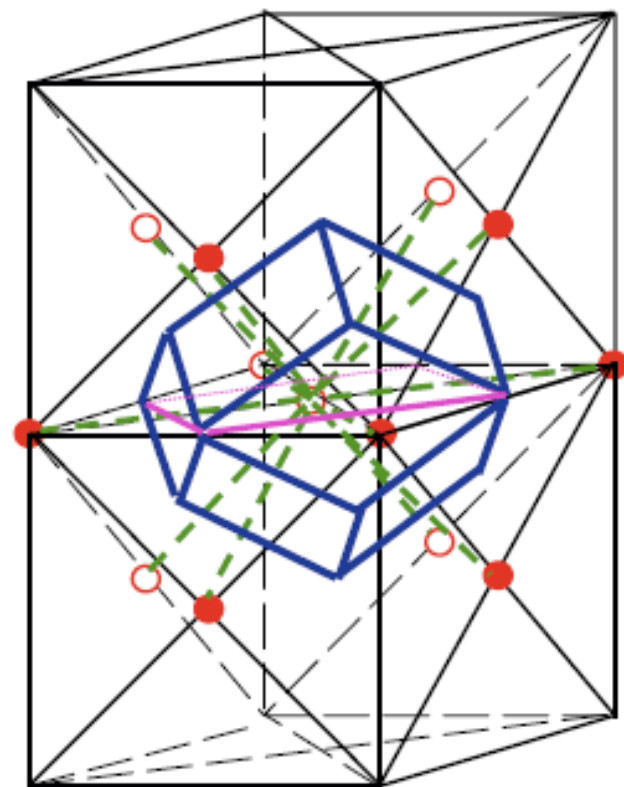
Bsp: **Au, Ag, Cu**
Diamant,
Zinkblende

reales Gitter: **bcc**

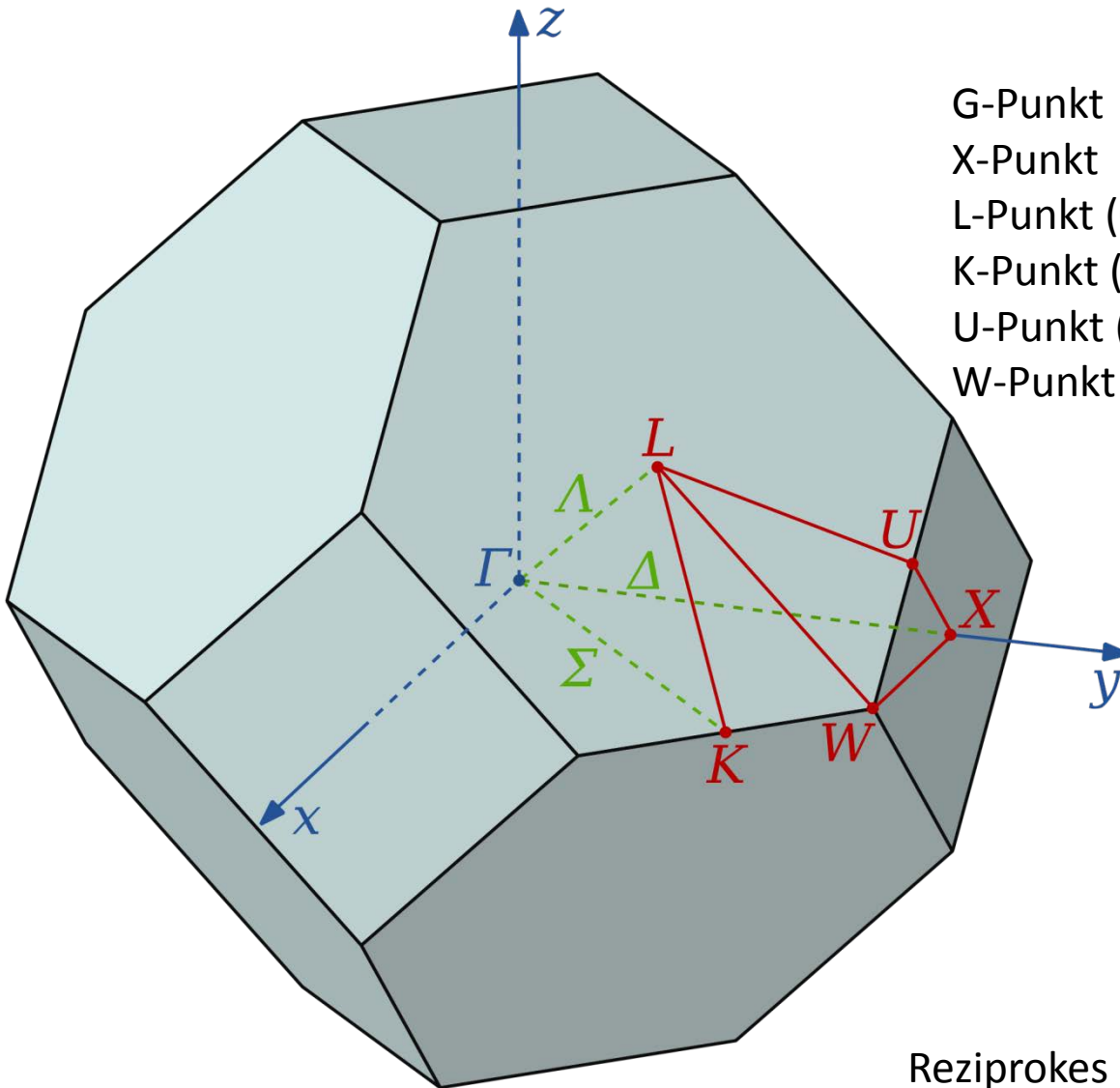
→ reziprokes Gitter **fcc**

→ BZ= Wigner-Seitz-Zelle **fcc**:

12 gleichförmige Flächen



Hochsymmetrische Richtungen in der ersten Brillouinzone (fcc)



G-Punkt (000)

X-Punkt (010)

L-Punkt (0.5,0.5,0.5)

K-Punkt (0.75,0.75,0)

U-Punkt (0.25,1,0.25)

W-Punkt (0.5,1,0)

Zentrum

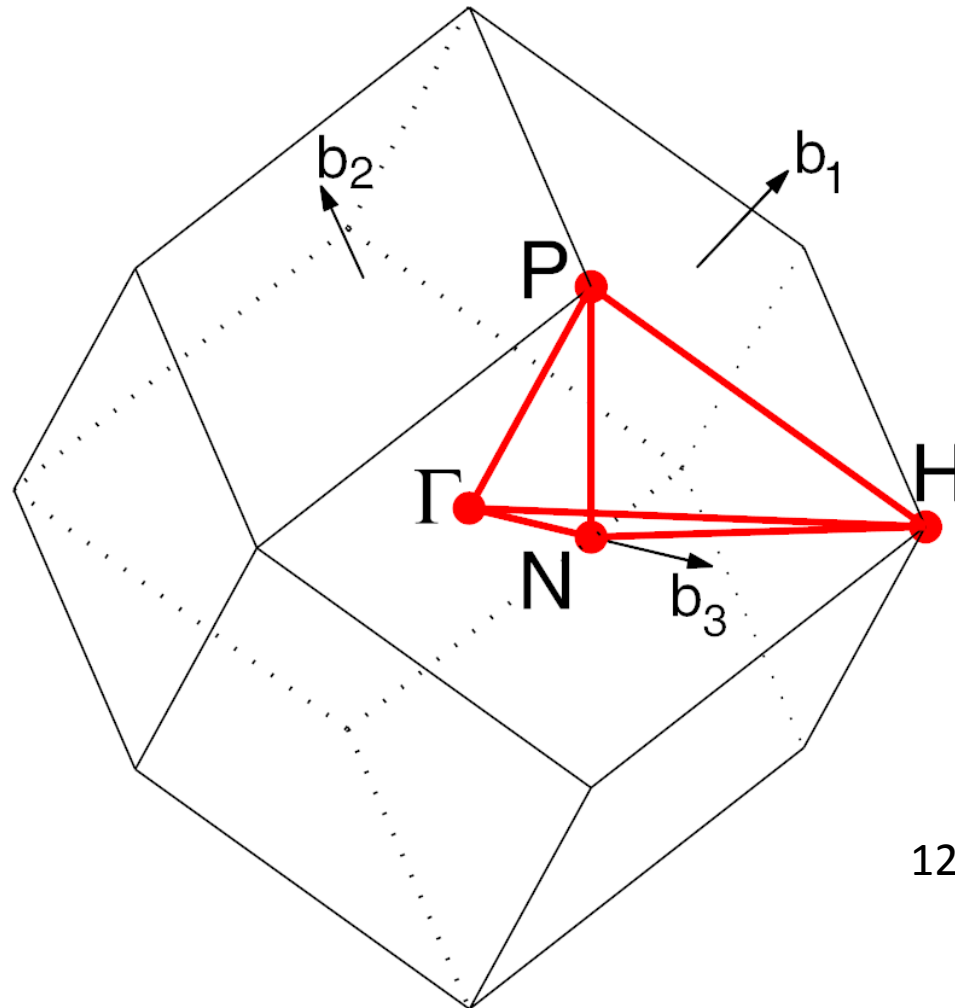
[010] Achse

{111} Achse

[110] Achse

Reziprokes Gitter ist bcc

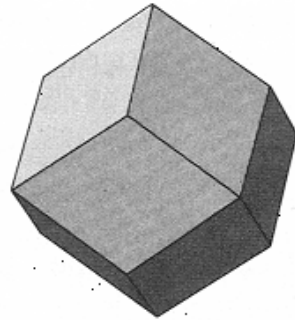
Erste Brillouin Zone bcc



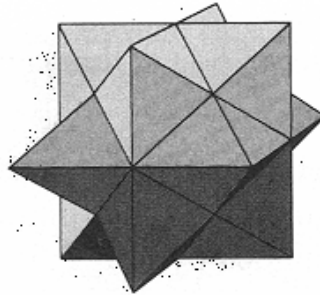
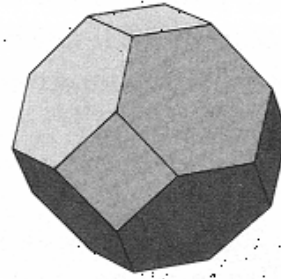
12 gleiche Flächen

BCC path: Γ -H-N- Γ -P-H|P-N

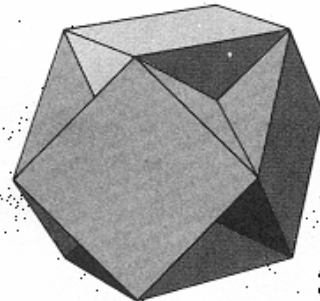
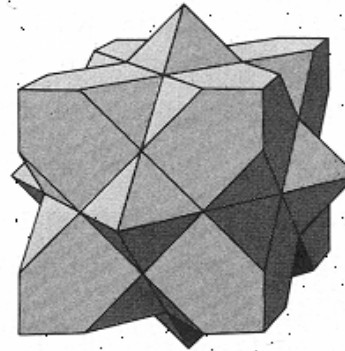
Höhere Brillouin Zonen



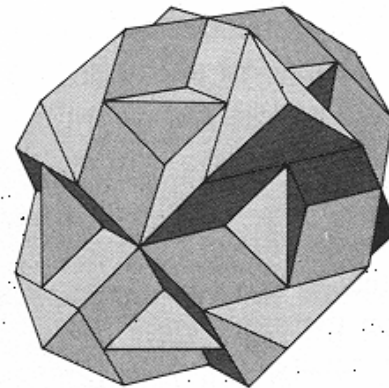
1. BZ



2. BZ



3. BZ

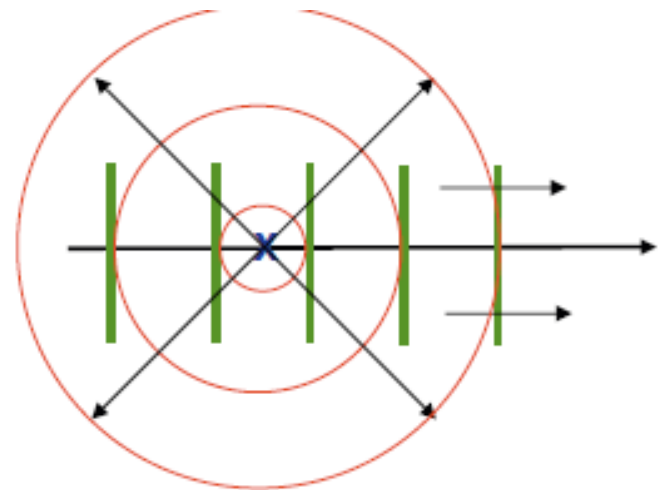


bcc

fcc

III.4 Beugungstheorie (i): Grundlagen

Einfallende Welle
+ Streuzentrum → Kugelwelle



Wir betrachten Einfachstreuung

d.h. **nur einmalige Wechselwirkung** der Strahlung mit dem Kristall
KEINE erneute WW der bereits gestreuten Strahlung mit dem Kristall

Beschreibung von **Einfachstreuung**
durch die **kinematische Beugungstheorie**
Mehrfachstreuung
durch **dynamische Beugungstheorie**

Kinematische Beugungstheorie ist gerechtfertigt falls

WW der Strahlung mit dem Kristall **schwach** ist, d.h. die Eindringtiefe hoch ist.

Beispiel: Röntgenstrahlung, Neutronen

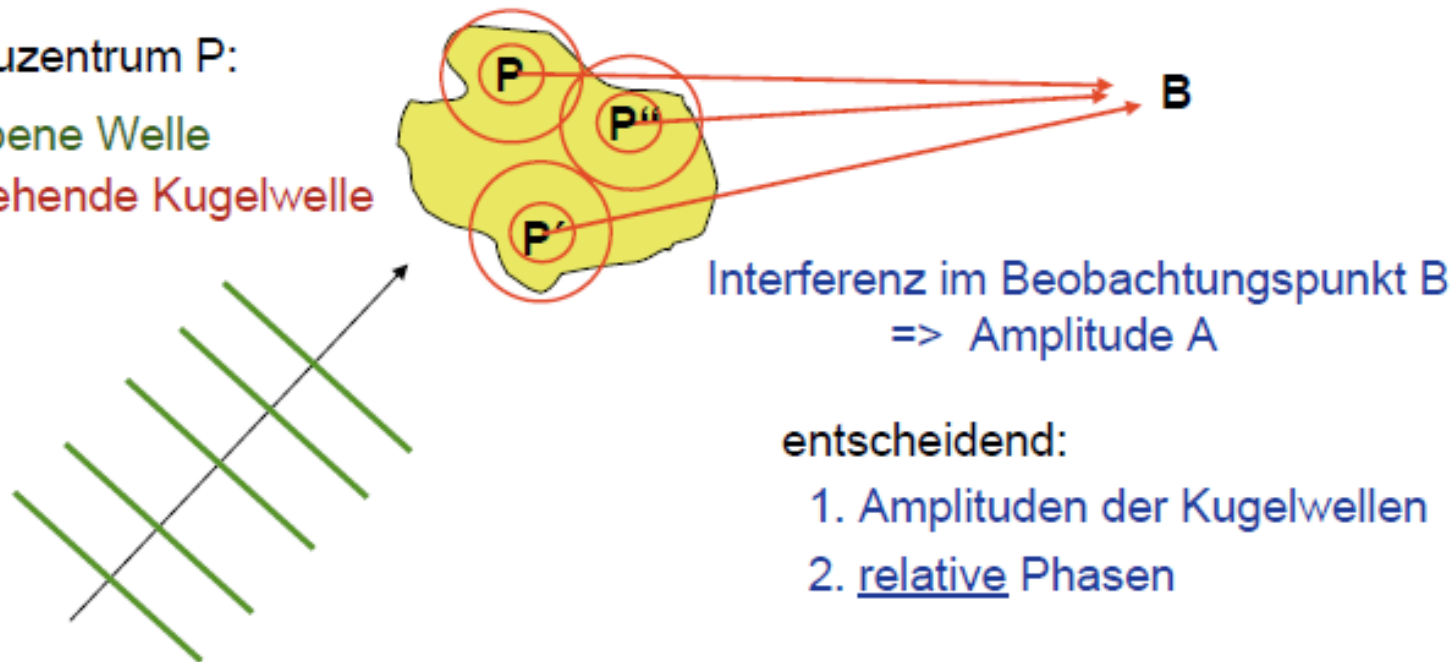
Gegenbeispiel: Elektronen (kinematische Theorie ist nur für Teilbereiche,
nicht für eine vollständige Beschreibung ausreichend.)

III.4.1 Kugelwellen der Streuzentren (i) qualitativ

in jedem Streuzentrum P:

einfallende ebene Welle

erzeugt **ausgehende Kugelwelle**



Erzeugung der Kugelwellen: **erzwungene Schwingung der Elektronen**

Streuamplitude $\rho(r)$ (lokal am Ort r) \rightarrow (i) **Amplitude** der einzelnen Kugelwelle
da komplex auch: (ii) **Phase** der einzelnen Kugelwelle

Meßgröße: **Intensität**, d.h. $| \text{Amplitude} |^2 \rightarrow$ **Informationsverlust der absoluten Phase**

Kugelwellen der Streuzentren (ii) quantitativ

Lit.: Ibach-Lüth

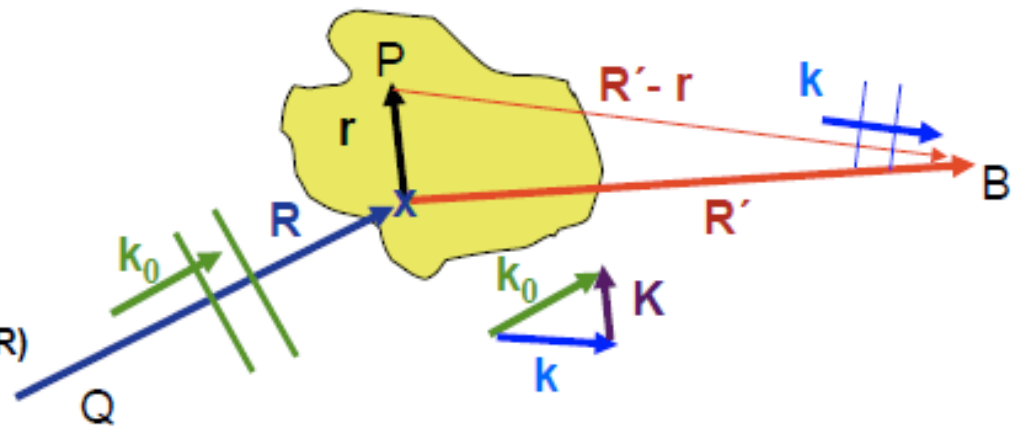
Ortsvektoren:

Rö-Quelle Q = Ursprung

Bezugspunkt \mathbf{x} im FK = \mathbf{R}

Lage Streuzentrum P = \mathbf{r} (bzgl. \mathbf{R})

Lage Beobachtungspkt B = \mathbf{R}' (bzgl. \mathbf{R})



einfallende ebene Welle

Ampl. $A_p(\mathbf{r}, t)$ am Ort P: $A_p(\mathbf{r}, t) = A_0 \exp(-i\mathbf{k}_0 \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}) + i\omega_0 t)$

\mathbf{k}_0 : Wellenvektor
 $|\mathbf{k}_0| = 2\pi / \lambda_0$

ausgehende Kugelwelle

Ampl. $A_B(\mathbf{R}', t)$ am Ort B: $A_B(\mathbf{R}', t) = A_p(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}) \frac{\exp(-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{r}))}{|\mathbf{R}' - \mathbf{r}|}$

\mathbf{k} : Wellenvektor
 $|\mathbf{k}| = 2\pi / \lambda$

Streudichte $\rho(\mathbf{r})$: Amplitude (und Phasenlage) der gestreuten Welle (relativ zur einf.)

für kontinuierlichen Streubereich und $|\mathbf{R}'| \gg |\mathbf{r}|$: Aufsummation bzw. Integration

$$A_B(t) = A_0 \frac{1}{R'} \exp(-i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R} + \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}') + i\omega_0 t) \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) d\mathbf{r}$$

Intensität:

$$I(\mathbf{K}) \propto |A_B|^2 \propto \left| \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2$$

$\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$: Streuvektor
 \sim Streuwinkel

Zusammenfassung Reziprokes Gitter

Translationsinvarianz der Streudichte: $\rho(r) = \rho(r + T)$

Dreidim. Fourier-Ansatz: $\rho(r) = \sum_G \rho_G \exp(iG \cdot r)$ ρ_G : Fourier-Koeffizienten
 $G = h g_1 + k g_2 + l g_3$

Translationsinvarianz: Forderung $G \cdot T = 2\pi m$

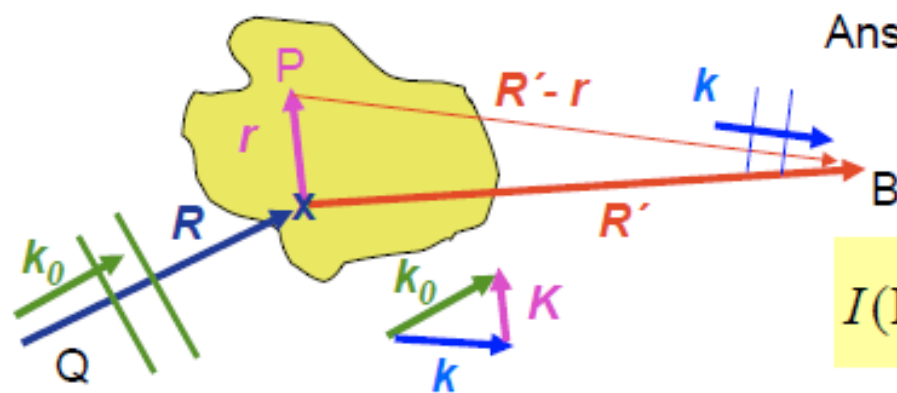
\Rightarrow Allg. Bedingung für **Basis** g_1, g_2, g_3 des **reziproken Gitters**: $g_i \cdot a_j = 2\pi \delta_{ij}$

\Rightarrow Konstruktionsvorschrift für g_i : $g_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{V}$ etc.

Richtung: $g_i \perp a_{j \neq i}$ Länge: $|g_i| = 2\pi / (a_i \cos \angle(g_i, a_i))$ ($\angle(g_i, a_i)$ = Winkel zwischen g_i und a_i)

Grundlagen der (kinematischen) Beugungstheorie

Kugelwellen, ausgehend von den Streuzentren P



Ansatz für Amplitude $A_B(R', t)$ am Ort B
 Integration über den Streubereich
 Betragsquadrat \Rightarrow Intensität

$$I(\mathbf{K}) \propto |A_B|^2 \propto \left| \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2$$

$$\boxed{\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}} \quad \mathbf{k}: \text{Wellenvektor} \quad |\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda, \quad |\mathbf{k}_0| = 2\pi/\lambda_0$$

Zusammenfassung: kinematische Beugungstheorie

Lit.: Ibach-Lüth

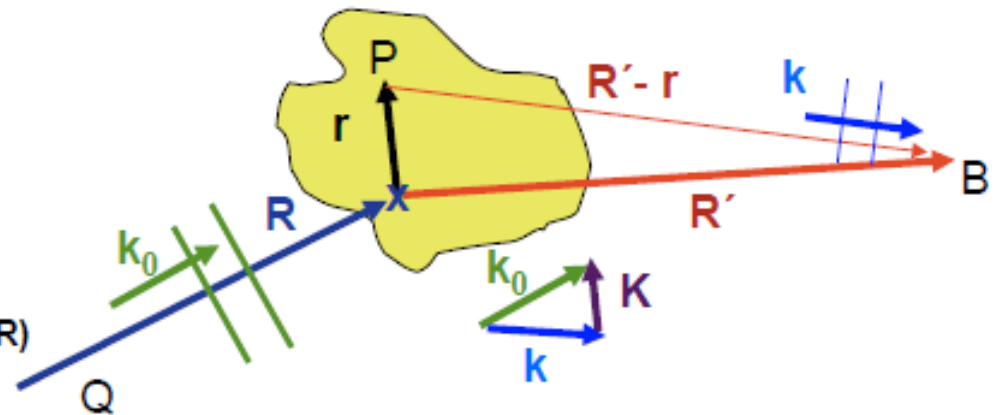
Ortsvektoren:

Rö-Quelle $Q = \text{Ursprung}$

Bezugspkt x im FK = R

Lage Streuzentrum $P = r$ (bzgl. R)

Lage Beobachtungspkt $B = R'$ (bzgl. R)



Intensität: $I(\mathbf{K}) \propto |A_B|^2 \propto \left| \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2$ $\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$: Streuvektor

proportional zum Betragsquadrat der Fouriertransformierten der Streuamplitude $\rho(\mathbf{r})$

Periodische Strukturen: $\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{T})$ Fourier-Ansatz $\rho(\mathbf{r}) = \sum_G \rho_G \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$

$$I(\mathbf{K}) \propto \left| \sum_G \rho_G \int \exp(i(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{K} \cdot \mathbf{r})) d\mathbf{r} \right|^2 \Rightarrow I(\mathbf{K}) \neq 0 \text{ nur für } \mathbf{K} = \mathbf{G}$$

also nur bei bestimmten Streuwinkeln

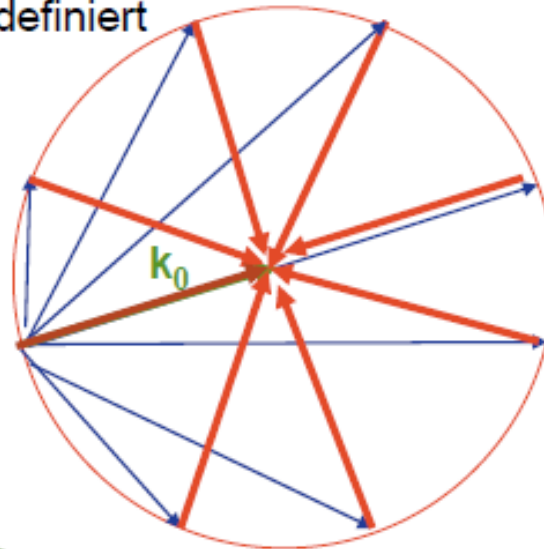
Deutung: **Streubeiträge der Elementarzellen müssen konstruktiv interferieren**
Scharfe, schmale Braggreflexe, für gut geordnete, periodische Strukturen

Ewaldkugel

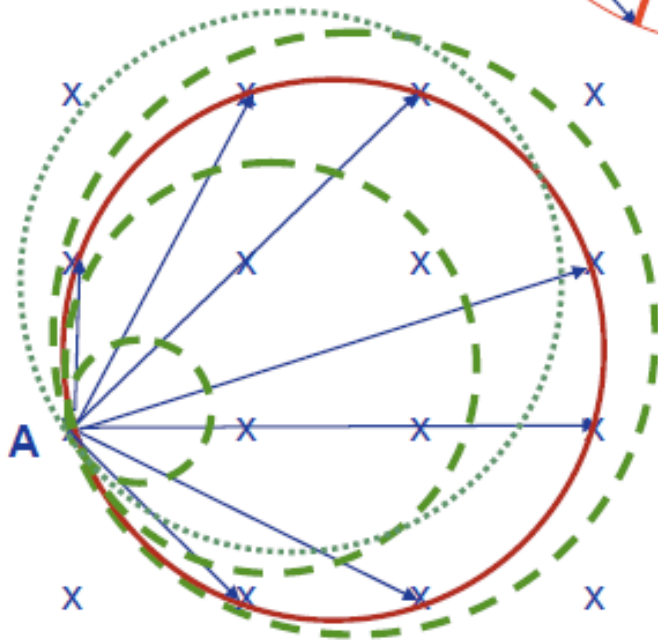
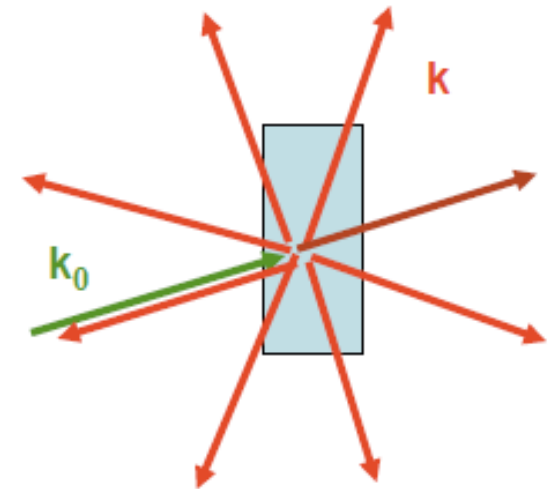
Konsequenzen für Experiment

- (i) Die Ewald-Konstruktion definiert anhand der **K**-Vektoren die **k**-Vektoren, d.h. die Richtungen der gestreuten Strahlung

Rez. Raum:



Experiment im Ortsraum:



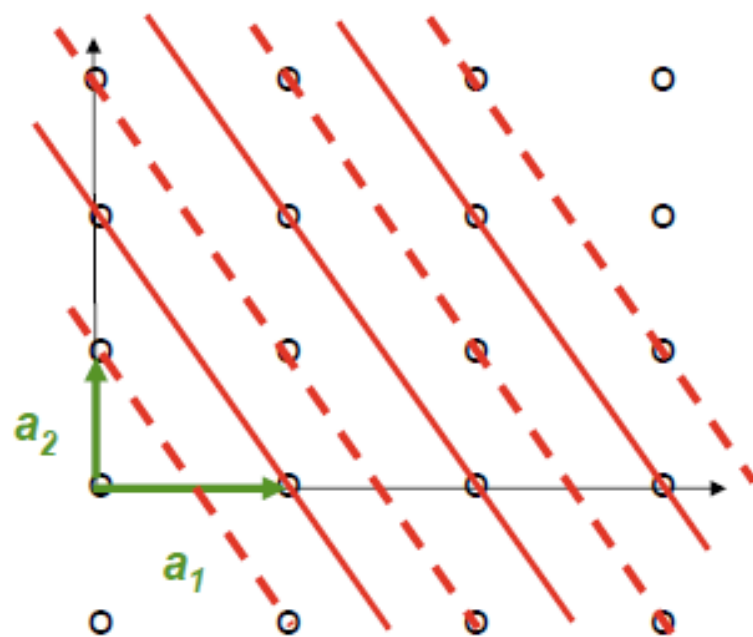
- (ii) Beugungsbedingung wird nur für bestimmte **k₀**-Vektoren (d.h. bestimmte Wellenlängen und Einfallsrichtungen) erreicht.

im Allgemeinfall: keine Beugungspaks

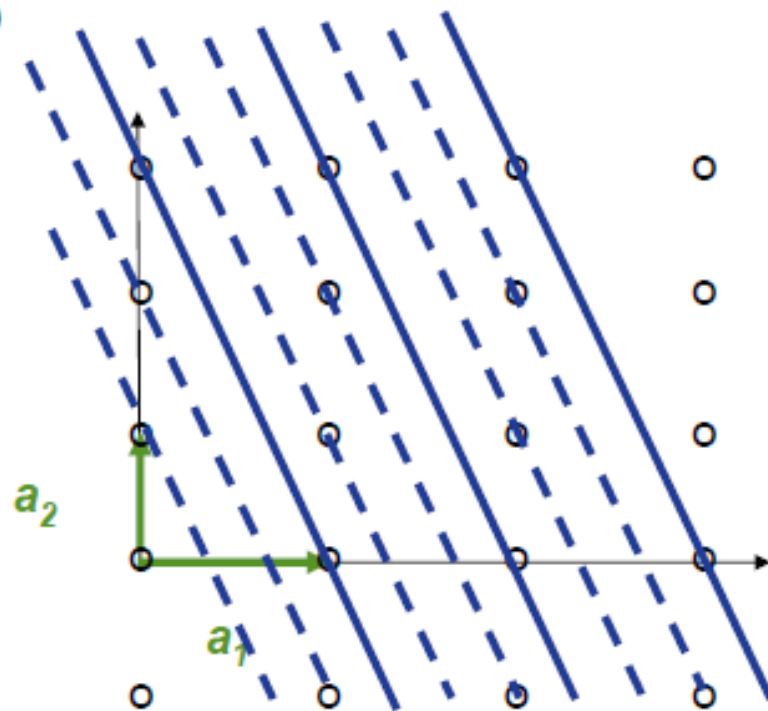
- Abhilfen: 1. Variation des Einfallswinkels
2. Variation der Rö-Wellenlänge (Synchrotronstrahlung)
3. λ -Kontinuum (Bremsstrahlung)

III.5.2 Zusammenhang reziproker Gittervektoren mit Gitterebenen

Gitterebenen im Ortsraum (Bsp: 2-dim)



Schnittpunkte 1 2
 Reziprokwerte 1 $\frac{1}{2}$ $\rightarrow \times 2$
 Miller-Indizes 2 1
 Äquivalenzebenen: $\times 2$



Schnittpunkte 1 3
 Reziprokwerte 1 $\frac{1}{3}$ $\rightarrow \times 3$
 Miller-Indizes 3 1
 Äquivalenzebenen: $\times 3$

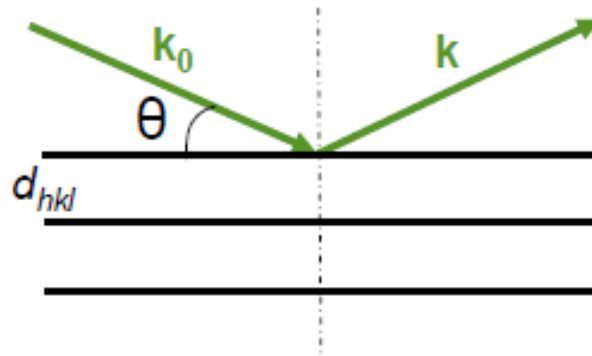
Abstand d benachbarter Netzebenen hkl : $d_{hkl} = 2\pi / |\mathbf{G}_{hkl}|$

Und: \mathbf{G}_{hkl} steht senkrecht zur Ebene hkl .

(Beweis: überlegen)

III.5.3 Bragg-Gleichung

Herleitung durch
Anwendung der Grundlagen-Streutheorie

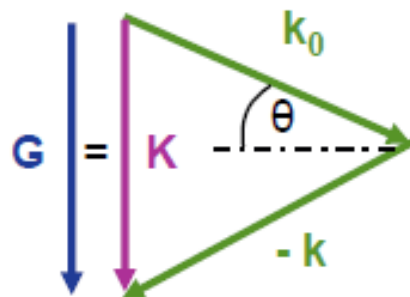


Abstand der Netzebenen hkl: $d_{hkl} = 2\pi / |\mathbf{G}_{hkl}|$

Streubedingung: $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k} \equiv \mathbf{K} = \mathbf{G}$

außerdem: $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$ (elastische Streuung)

K-Diagramm:



$$\left. \begin{aligned} |\mathbf{G}_{hkl}| &= |\mathbf{K}| = 2 |\mathbf{k}_0| \sin \theta \\ &= 2 \cdot 2\pi / \lambda \cdot \sin \theta \end{aligned} \right\}$$

$$\lambda = 2 d_{hkl} \cdot \sin \theta$$

$$|\mathbf{G}_{hkl}| = 2\pi / d_{hkl}$$

**Bragg-
Gleichung**

Ergebnis: Bragg-Gleichung jetzt hergeleitet aus Grundlagen-Streutheorie ohne *Voraussetzung* der Reflexion an Netzebenen.

III.5.4 Laue-Gleichungen

äquivalente Beschreibung der Beugungsbedingung $\mathbf{K} = \mathbf{G}$ (mit $\mathbf{K} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$)



Falls Streuvektor $\mathbf{K} = \mathbf{G}$,

$$\text{gilt } \mathbf{K} = h \mathbf{g}_1 + k \mathbf{g}_2 + l \mathbf{g}_3$$

mit \mathbf{g}_i Basis des reziproken Gitters

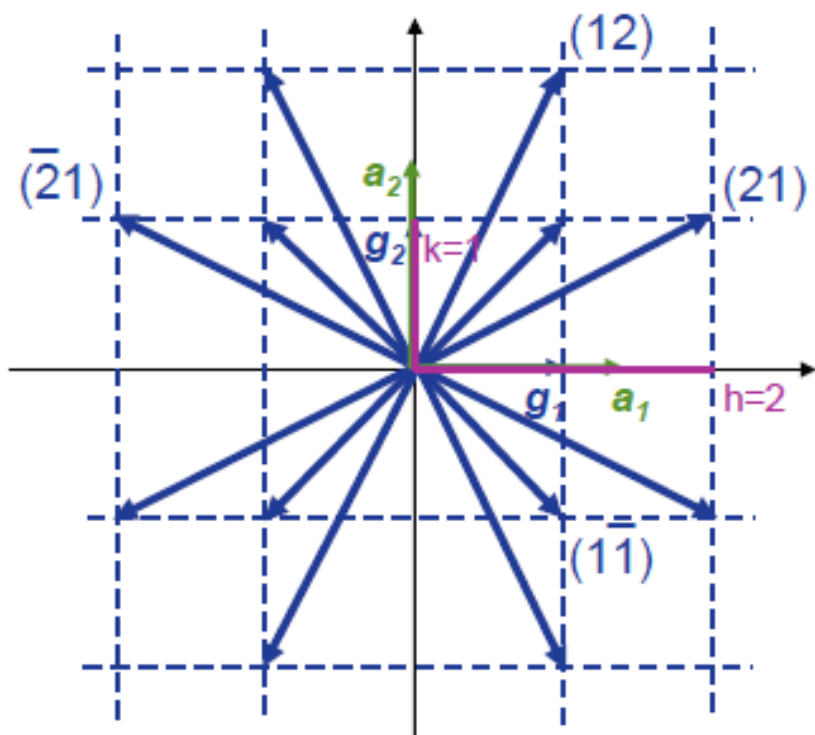
Außerdem gilt $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{K} = 2\pi h$$

$$\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{K} = 2\pi k$$

$$\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{K} = 2\pi l$$

Laue-Gleichungen



Projektion des Beugungsvektors \mathbf{K} auf die Basisvektoren des Realraumgitters = ganz-zahliges Vielfaches von 2π

Raster: rez. Gitter $\mathbf{G} = \mathbf{K}$

Aber Vorsicht:

\mathbf{K} ist Beugungsvektor (rez. Raum)

\mathbf{a}_i sind Basisvektoren im Realraum

Nomenklatur der Beugungsmaxima:

3-dim: (h, k, l) 2-dim: (h, k)

vgl. optisches Gitter: $\pm 1, \pm 2, \dots$

III.5.6 Strukturfaktor und Atomformfaktor

Ziel: **Intensitäten I_{hkl}** der Beugungspeaks hkl (bisher: nur *Lagen* der Peaks)

$$I(\mathbf{K} = \mathbf{G}) \propto \left| \rho_{\mathbf{G}} \int d\mathbf{r} \right|^2 \propto |\rho_{\mathbf{G}}|^2 V^2 \quad \text{d.h.} \quad I_{hkl} \propto |\rho_{hkl}|^2 V^2$$

→ Bestimmung der **Fourier-Koeffizienten ρ_{hkl}** bzw. $\rho_{\mathbf{G}}$ der Streuamplitude $\rho(\mathbf{r})$

Fourier-Ansatz:
$$\rho_{hkl} = \frac{1}{V_{\text{Zelle}}} \int \rho(\mathbf{r}) \cdot \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

Rücktransformation
der Fourierreihe.

(Siehe II.2.1):

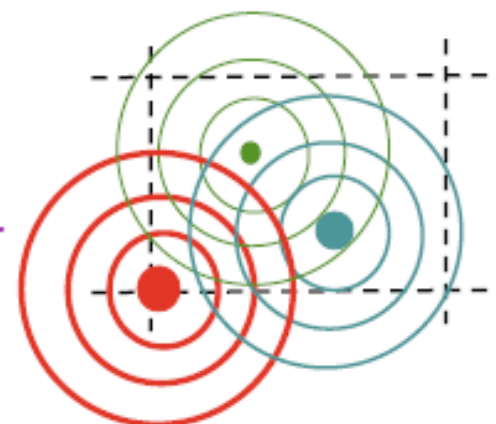
$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

Erreicht wurde: Abtrennung des Beitrags des Gitters (**Gitterfaktor**),
der nur für $\mathbf{K} = \mathbf{G}$ ungleich 0 ist.

vgl. optisches Gitter: Interferenzbedingung
& Beugung am Einzelspalt

entscheidende Faktoren:

- (i) Streuamplitude der einzelnen Atome → **Atomformfaktor**
- (ii) Interferenz der Kugelwellen
der Atome innerhalb jeder Zelle → **Strukturfaktor**



III.5.6.1 Berechnung der Fourierkoeffizienten

Konzept:

Aufspaltung des Ortsvektors \mathbf{r}

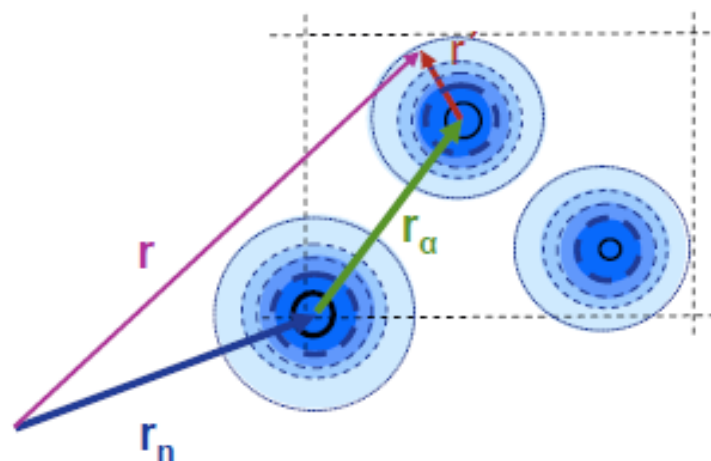
$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_n + \mathbf{r}_\alpha + \mathbf{r}'$$

\mathbf{r}_n : zum Ursprung der El-Zelle diskret

\mathbf{r}_α : vom Ursprung der El-Zelle zum Zentrum des Atoms α diskret

\mathbf{r}' : vom Zentrum des Atoms α zum Ort \mathbf{r} kontinuierl.

Rö-Streuung an Elektronen zentriert um Atomkerne



Fourier-Koeffizienten:
$$\rho_{hkl} = \frac{1}{V_z \text{ Zelle}} \int \rho(\mathbf{r}) \cdot \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

(Siehe II.2.1)

$$= \frac{1}{V_z} \sum_{\alpha} \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_\alpha) \int_{\text{Atom}} \rho_{\alpha}(\mathbf{r}') \cdot \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

Strukturfaktor F_{hkl} & Atomformfaktor f_{α}

$\exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_n) = \exp(-i(h\mathbf{g}_1 + k\mathbf{g}_2 + l\mathbf{g}_3) \cdot (n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3)) = 1$ wegen $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$

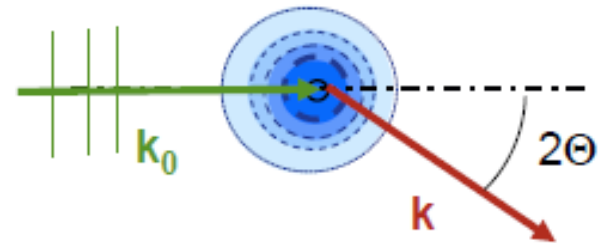
Streubeitrag der Elektronendichte eines Atoms

> Atomformfaktor f_{α}

- i) Streueffizienz der differentiellen Bereiche δr der Elektronenhülle (Kugelschalen)
- ii) Interferenz der Streusignalbeiträge δI (abhängig von \mathbf{k}_0 und \mathbf{k} , d.h. von hkl)

bei kugelsymmetrischer Ladungsverteilung:

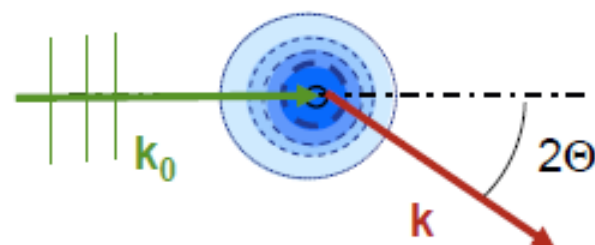
Kugelkoordinaten, Integration über ϑ und φ ausführen



$$\begin{aligned}
 f_a &= \int_{\text{Atom}} \rho_{\alpha}(\mathbf{r}') \cdot \exp(-i\mathbf{G}_{\text{hkl}} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
 &= - \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{r=0}^{\infty} \rho_{\alpha}(r') \cdot \exp(-i|\mathbf{G}_{\text{hkl}}| r' \cos \vartheta) r'^2 dr' d \cos \vartheta d\varphi \\
 &= 4\pi \int_{r=0}^{\infty} \rho_{\alpha}(r') \cdot \frac{\sin(|\mathbf{G}_{\text{hkl}}| r')}{|\mathbf{G}_{\text{hkl}}| r'} r'^2 dr' \quad \vartheta = \angle(\mathbf{G}_{\text{hkl}}, \mathbf{r}')
 \end{aligned}$$

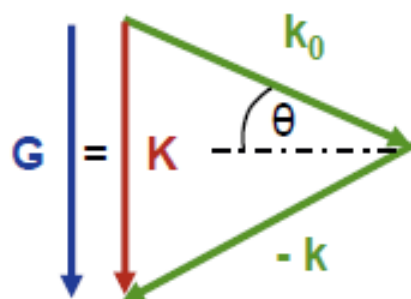
bei kugelsymmetrischer Ladungsverteilung:

$$f_a = 4\pi \int_{r=0}^{\infty} \rho_{\alpha}(r') \cdot \frac{\sin(|\mathbf{G}_{\text{hkl}}| r')}{|\mathbf{G}_{\text{hkl}}| r'} r'^2 dr'$$



Mit $|\mathbf{G}_{\text{hkl}}| = 2k_0 \sin \Theta = \frac{4\pi \sin \Theta}{\lambda}$

Folgt: $f_{\alpha} = 4\pi \int \rho_{\alpha}(r') r'^2 \frac{\sin(4\pi \cdot r' \frac{\sin \Theta}{\lambda})}{4\pi \cdot r' \frac{\sin \Theta}{\lambda}} dr'$



Streubereiche (Kugelschalen)

Interferenz, vgl. $\sin(x) / x \sim$ Beugung am Spalt

Diese Werte können für alle Atomsorten (numerisch) berechnet, oder aus sehr präzisen Röntgenbeugungsmessungen bestimmt werden und **sind tabelliert**.

Für $\Theta = 0$ (Vorwärtsstreuung):

$$f_{\alpha} = 4\pi \int \rho_{\alpha}(r') r'^2 dr' \approx \text{Elektronenzahl } Z \text{ für Röntgenstreuung.}$$

Vereinfachte Atomformfaktoren für Vorwärtsstreuung oder $\lambda \gg a_0$

$$\sigma_a(\text{barns/atom}) = \mu(\text{cm}^2/\text{g}) \times 19.95$$

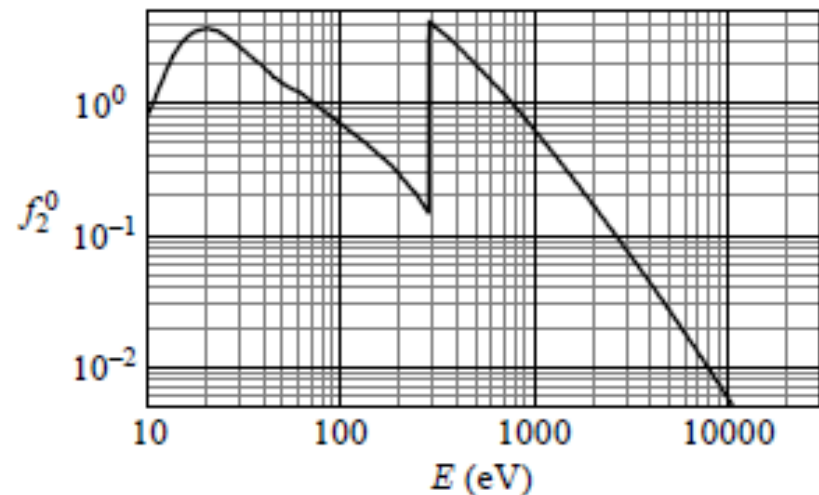
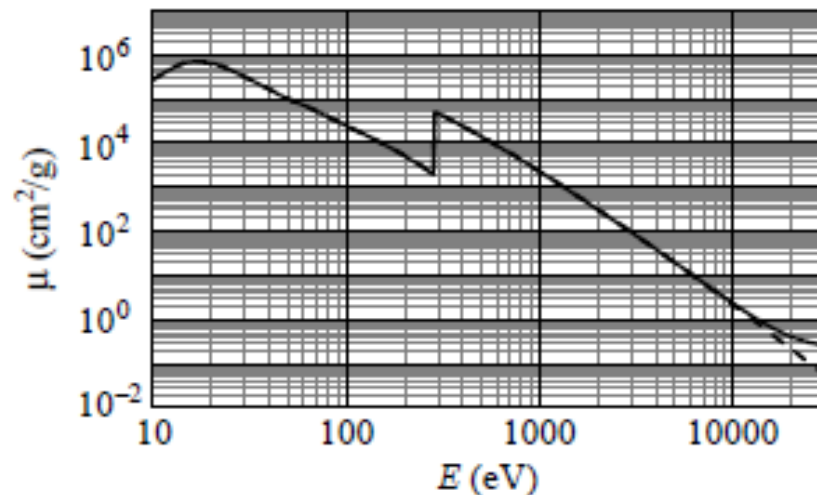
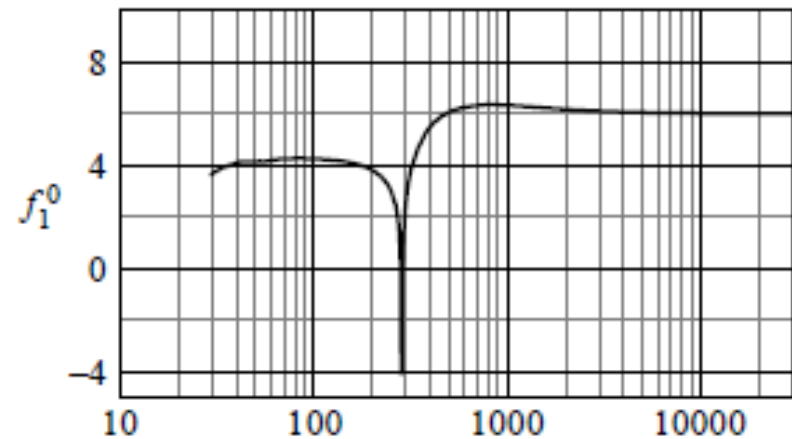
$$E(\text{keV})\mu(\text{cm}^2/\text{g}) = f_2^0 \times 3503.31$$

Carbon (C)

Z = 6

Atomic weight = 12.011

Energy (eV)	f_1^0	f_2^0	μ (cm ² /g)
30	3.692	2.664E+00	3.111E+05
70	4.249	1.039E+00	5.201E+04
100	4.253	6.960E-01	2.438E+04
300	2.703	3.923E+00	4.581E+04
700	6.316	1.174E+00	5.878E+03
1000	6.332	6.328E-01	2.217E+03
3000	6.097	7.745E-02	9.044E+01
7000	6.025	1.306E-02	6.536E+00
10000	6.013	5.892E-03	2.064E+00
30000	6.000	4.425E-04	5.168E-02



Edge Energies: K 284.2 eV

Streubeitrag einer Elementarzelle

) Interferenz der Kugelwellen der Atome innerhalb der Elementarzelle

Strukturfaktor $F_{hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_{\alpha})$ mit Atomformfaktor f_{α} :

i) für primitives Gitter: $F_{hkl} = f$, weil nur 1 Atom pro Elementarzelle, und $\mathbf{r}_{\alpha} = (0,0,0)$

ii) kubisch zentriertes Gitter: $\mathbf{r}_{\alpha} = u_{\alpha}\mathbf{a}_1 + v_{\alpha}\mathbf{a}_2 + w_{\alpha}\mathbf{a}_3$ mit $0 < u,v,w < 1$

$$\rightarrow F_{hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \exp(-2\pi i(hu_{\alpha} + kv_{\alpha} + lw_{\alpha}))$$

Bsp: **bcc-Gitter** Atompositionen $\mathbf{r}_1 = (0, 0, 0)$ $\mathbf{r}_2 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
Atomformfaktoren $f_1 = f_2 = f$

$$\rightarrow F_{hkl} = f(1 + \exp(-i\pi(h+k+l)))$$

$F_{hkl} = 0$ für $h+k+l$ ungerade (z.B. 100, 111)
destruktive Interferenz => **Auslöschung**
sog. „**verbotener Braggreflex**“

$F_{hkl} = 2f$ für $h+k+l$ gerade (z.B. 110)
konstruktive Interferenz

Strukturfaktor für zentrierte Gitter

Auslöschungen

$$F_{hkl} = f(1 + \exp(-i\pi(h+k+l)))$$

$$F_{hkl} = 2f \text{ für } h+k+l \text{ gerade (z.B. 110)}$$

$$F_{hkl} = 0 \text{ für } h+k+l \text{ ungerade (z.B. 100, 111) Auslöschung, „verbotener Braggreflex“}$$

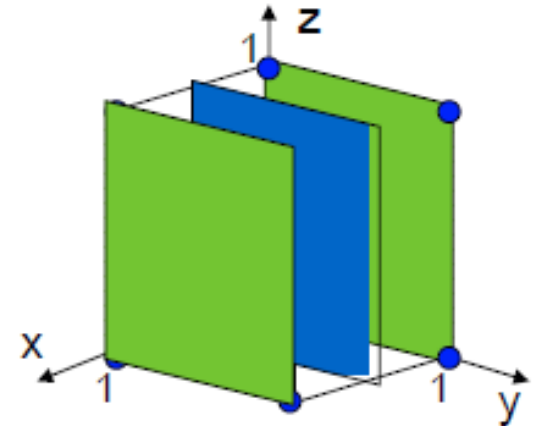
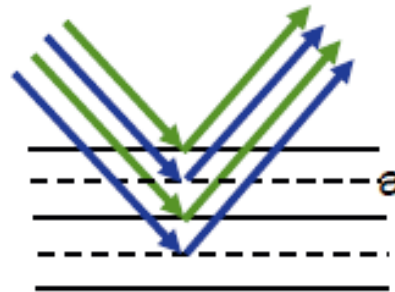
bcc Gitter (100)-Reflex

Gangunterschied:

$$\text{Hauptebene} - \text{Hauptebene} = \lambda$$

$$\text{Hauptebene} - \text{Zwischenebene} = \lambda/2$$

$$\rightarrow \text{destruktive Interferenz } I_{(100)} = 0$$

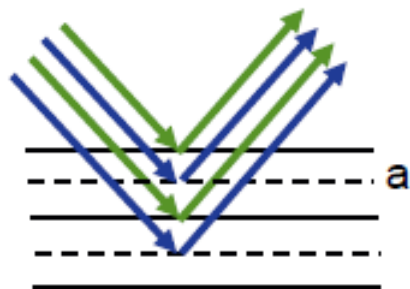


- Nur bei mehreren Atomen pro Einheitszelle (Zentrierung, mehratomige Basis, allg.: durch bestimmte Symmetrieoperationen)
- Lassen sich im Falle der Zentrierungen durch Wahl der primitiven Einheitszelle „vermeiden“.

Bsp: bcc: alle Reflexe mit $h+k+l$ ungerade ausgelöscht.
durch Wahl der primitiven Einheitszelle
=> halbes Realraumvolumen
=> verdoppeltes Volumen im reziproken Raum
=> „weniger“ hkl Gitterpunkte
genau die verbotenen Reflexe fallen weg.

Beispiele für Peakintensitäten

(i) bcc-Gitter



(100)-Reflex → destruktive Interferenz $I_{(100)} = 0$

(200)-Reflex → konstruktive Interferenz $I_{(200)} = (2f)^2$

(ii) Vergleich mit CsCl-Struktur:



(100)-Reflex: destruktive Interferenz

der „Cs“-Ebenen mit den „Cl“-Ebenen

ABER: unterschiedliche Formfaktoren f_a ($f_a \sim Z$)

$$F_{hkl} = (f_{Cs} \cdot 1 + f_{Cl} \cdot \exp(-i \pi (h + k + l)))$$

→ Intensität $I_{(100)} = (f_{Cs} - f_{Cl})^2 \neq 0$

$$I_{(200)} = (f_{Cs} + f_{Cl})^2$$

Zusammenfassung Kapitel II

- Definition des **reziproken Gitter** mit **Basis g_1, g_2, g_3** : $g_i \cdot a_j = 2\pi \delta_{ij}$

Konstruktionsvorschrift: $g_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{V}$

- Brillouinzone = **Wigner-Seitz-Zellen des reziproken Gitters**
- Streuintensität = Betragsquadrat der Fouriertransformation der Streudichte**
=> „Phasenproblem der Beugungsmethoden“ (keine einfache Rücktransformation, da Phaseninformation fehlt)

$$I(\mathbf{K}) \propto |A_B|^2 \propto \left| \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \quad \mathbf{K} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}: \text{Streuvektor}$$

Zerlegung von $I(\mathbf{K})$ in Gitter-, Struktur- und Atomformfaktor:

Gitterfaktor

$$I(\mathbf{K}) \propto \begin{cases} |F_{hkl}|^2 & \text{falls } \mathbf{K} = \mathbf{G}_{hkl} \\ 0 & \mathbf{K} \neq \mathbf{G}_{hkl} \end{cases}$$

Konzept der Ewaldkonstruktion

Bragg-Gleichung

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \Theta$$

Laue Gleichungen

$$a_1 \cdot \mathbf{K} = 2\pi h \quad a_2, a_3 \text{ analog}$$

Strukturfaktor

$$F_{hkl} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_{\alpha})$$

Atomformfaktor

$$f_{\alpha} = 4\pi \int_{Atom} \rho_{\alpha}(r') r'^2 \frac{\sin\left(\frac{4\pi}{\lambda} \sin \Theta \cdot r'\right)}{\frac{4\pi}{\lambda} \sin \Theta \cdot r'} dr'$$

Kap. IV Strukturbestimmung: Zielsetzungen

Messziele:

- Symmetrie des Kristallgitters
- Gitterkonstante(n)
- Atompositionen in der Basis
- Kristallorientierung
- Elektronendichteverteilung

Forschungsziele:

- Aufklärung unbekannter Strukturen
- Details der Strukturen (z.B. Bindungstypen, -längen, -winkel)
- Zusammensetzung von Mischverbindungen
- Schichtfolgen in periodischer Stapelung
- Stapel- und Gitterfehler
- Änderung der Struktur (Phasenübergänge, Verspannung, Relaxation) unter bestimmten (äußeren) Einflüssen (Temperatur, Druck, etc.)
- Adsorption von Atomen / Molekülen an Oberflächen
etc.

IV. Strukturbestimmung

IV.1 Experimentelle Sonden Röntgenstrahlung, Elektronen, Neutronen

IV.1.1 Labor-Röntgenquellen

IV.1.2 Synchrotronstrahlungsquellen

IV.2 Laue-Verfahren Röntgenstrahlung: λ - Kontinuum

IV.2.1 Prinzip Einkristall

IV.2.2 Realisierung und Ergebnisse

IV.3 Pulververfahren (Debye-Scherrer) Röntgenstrahlung: festes λ

IV.3.1 Prinzip & Neutronen viele Kristallite

IV.3.2 Realisierung und Ergebnisse

IV.4 Drehkristallverfahren Röntgenstrahlung festes λ

IV.4.1 Prinzip & Neutronen Einkristall

IV.4.2 Realisierung

IV.4.3 Anwendungen

IV.5 (= III.6) Elektronenbeugung Elektronen

IV.5.1 Spezifische Oberflächensymmetrie

IV.5.2 LEED-Ergebnisse

IV.1 Experimentelle Sonden

bereits bekannt:

- Röntgenstrahlung
- Elektronen
- Neutronen

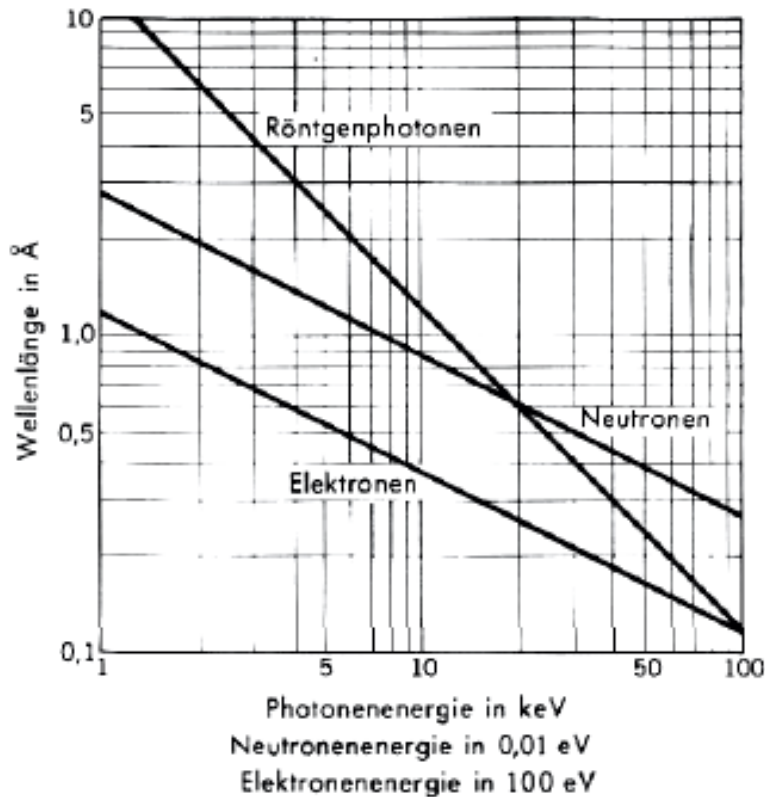
Quellen

Röntgenröhre, Synchrotron

Elektronenemitter + Beschleunigungsstrecke

Kernreaktor oder Spallationsquelle

+ Moderator (= Bremsmedium)



relevante Bereiche für
Wellenlänge λ und Energie E :

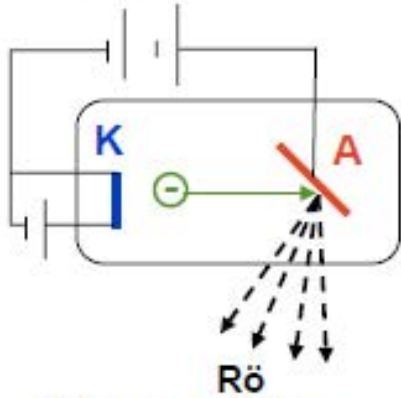
Röntgenstrahlung: $\lambda (\text{Å}) = 12,4 / E (\text{keV})$

Elektronen: $\lambda (\text{Å}) = 12 / (E (\text{eV}))^{1/2}$

Neutronen: $\lambda (\text{Å}) = 0,28 / (E (\text{eV}))^{1/2}$

IV.1.1 Labor-Röntgenquellen

Aufbau:



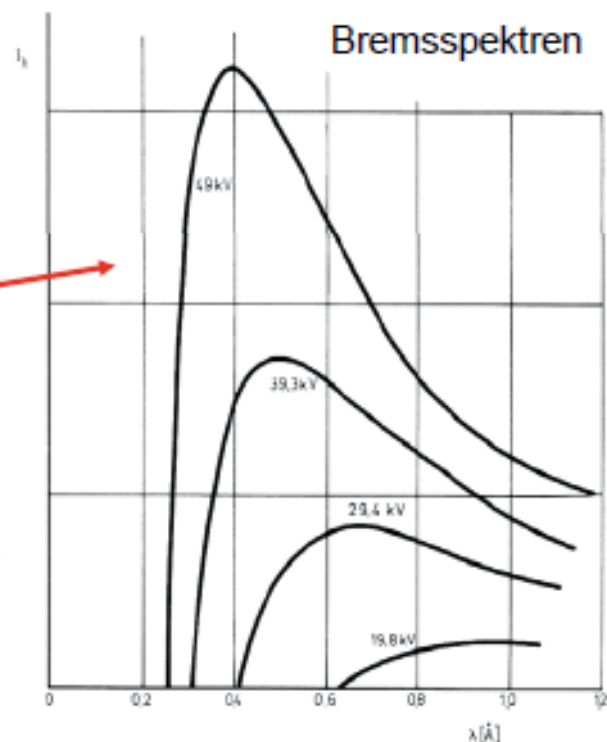
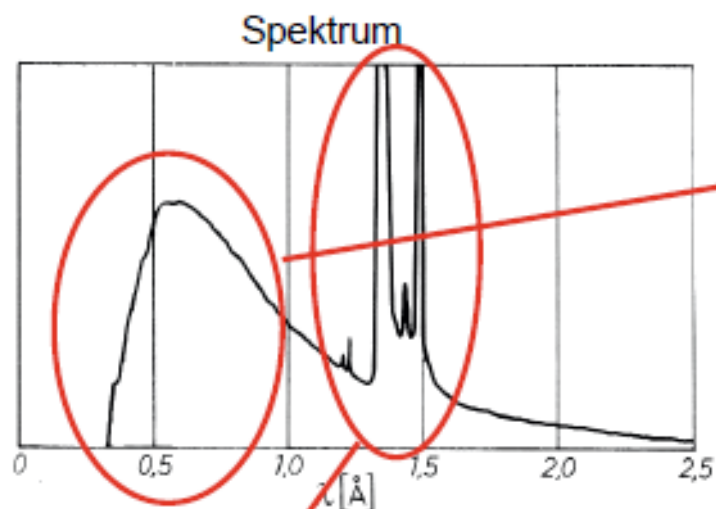
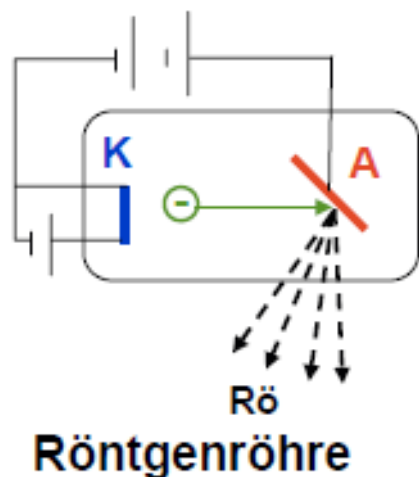
Röntgenröhre



Preis ≥ € 50.000

IV.1.1 Labor-Röntgenquellen

Aufbau:



Strahlungsspektrum:

- i) **diskrete Wellenlängen** z.B. für **Drehkristall- und Pulververfahren**
charakteristische Linien

Cu $K\alpha_1$ $2p_{3/2} \rightarrow 1s$ $E = 8,0477 \text{ keV}$ $\lambda = 0,15406 \text{ nm}$ $\Delta \lambda / \lambda = 3 \cdot 10^{-4}$

- ii) **Kontinuumsstrahlung** z.B. für **Laue-Verfahren**

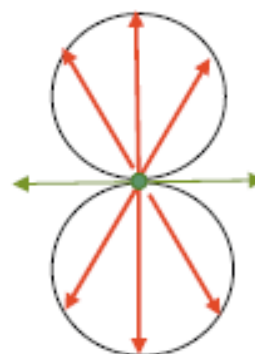
Bremsstrahlung

max. Photonenenergie: $e \cdot U = h \nu_{\text{max}} = hc / \lambda_{\text{min}}$

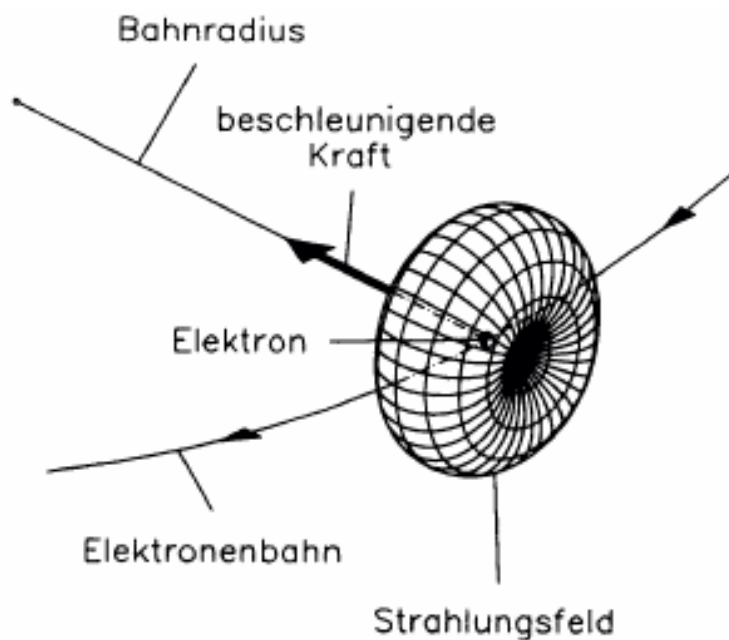
→ min. Wellenlänge: $\lambda_{\text{min}} = hc / (eU)$ Bsp: 0,03 nm bei 40 keV

IV.1.2 Synchrotronstrahlungsquellen

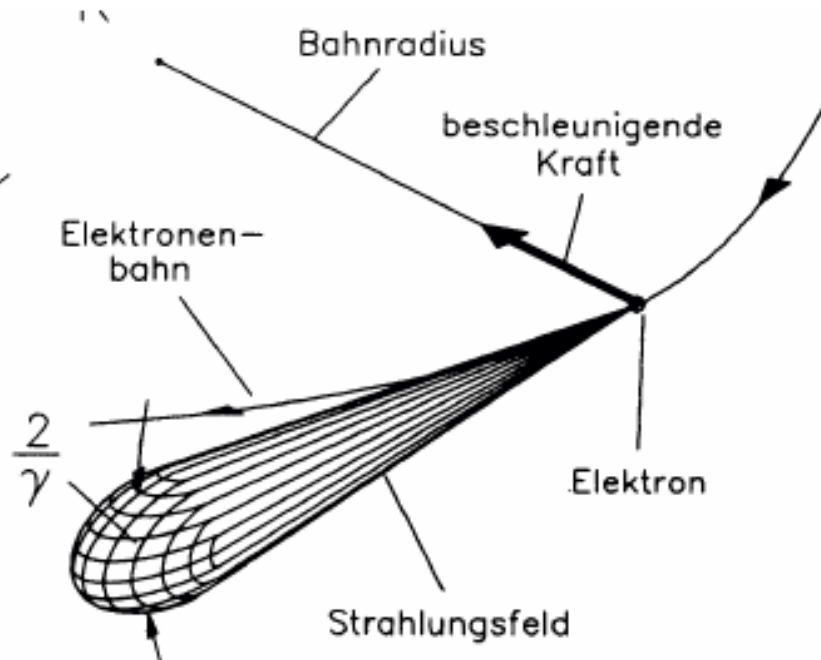
Prinzip: **Abstrahlung** elektromagnetischer Wellen durch **beschleunigte Ladung** (vgl. oszillierender Dipol)



hier: **Querbeschleunigung** der Ladungen bei **relativistischer Geschwindigkeit**



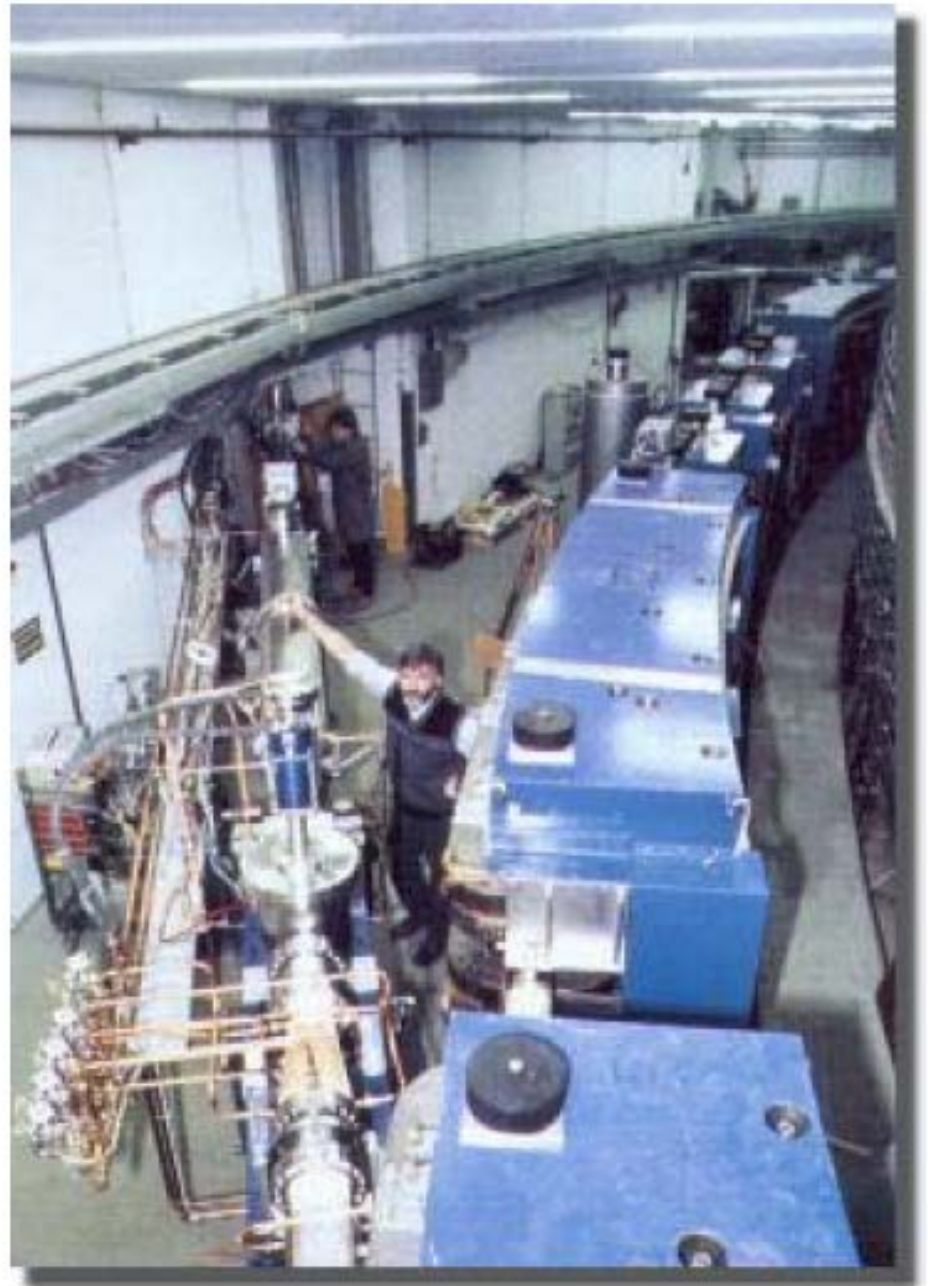
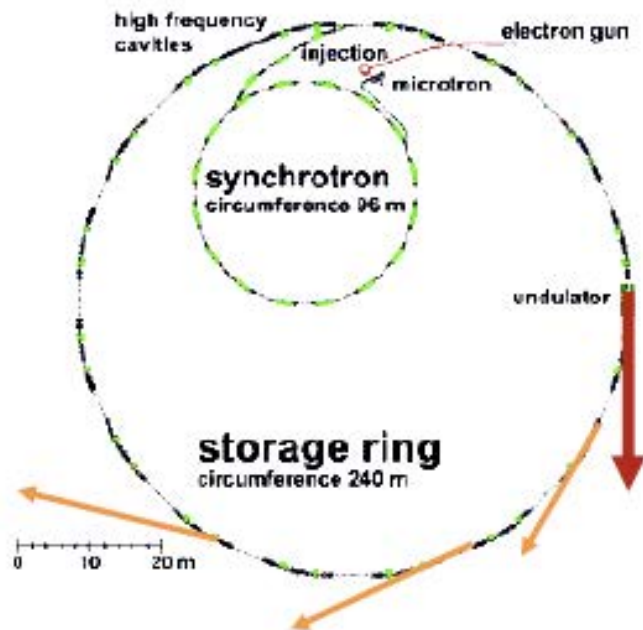
Schwerpunktsystem des Elektrons



Laborsystem

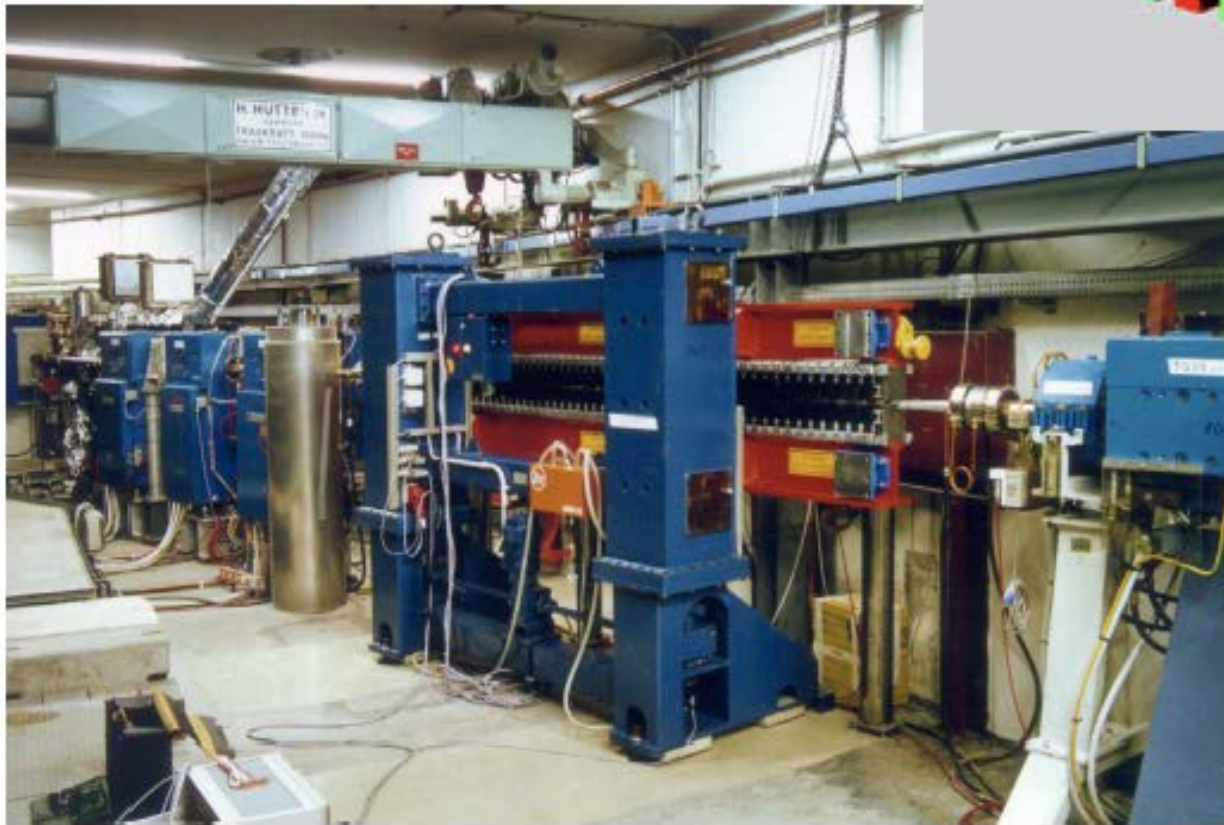
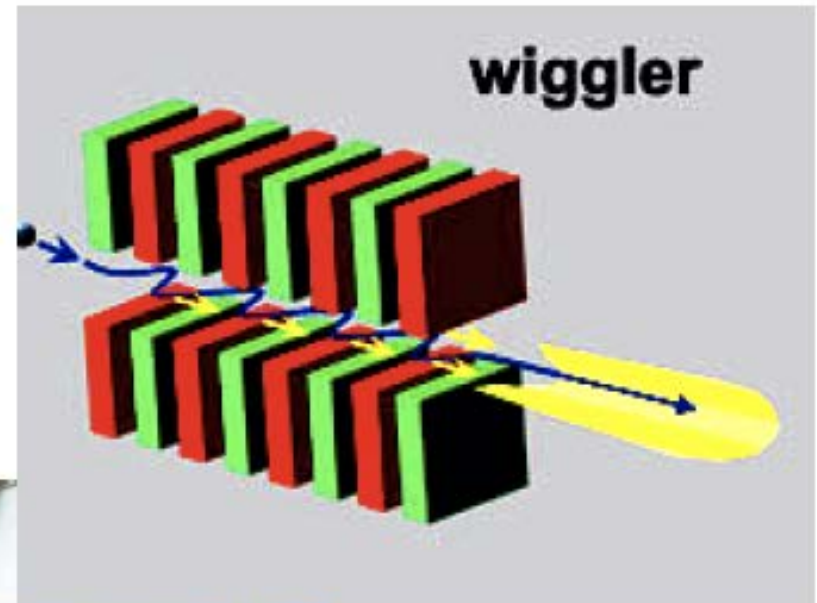
Synchrotronstrahlung

Abstrahlung im Ablenkmagnet



Synchrotronstrahlung

durch alternierende Magnete:
Überlagerung der Abstrahlprozesse



**Info über
Synchrotronstrahlung
im Internet**

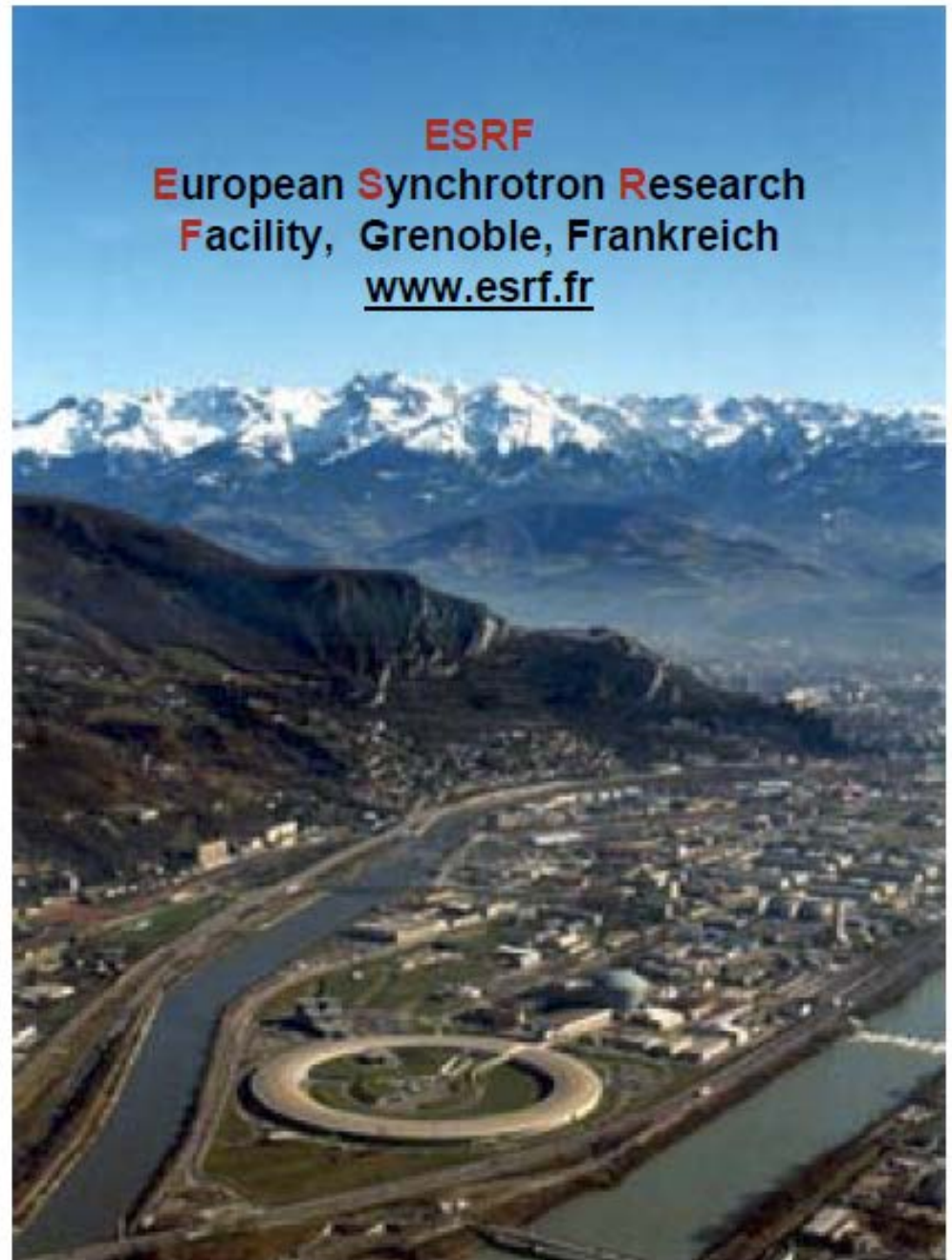
DESY

Deutsches Elektronensynchrotron
HASYLAB: Hamburger
Synchrotronstrahlungslabor
www-hasylab.desy.de

BESSY

Berliner Elektronenspeicherring –
Gesellschaft für Synchrotronstrahlung
www.bessy.de/guided_tour/

Preis ≥ € 1.000.000.000

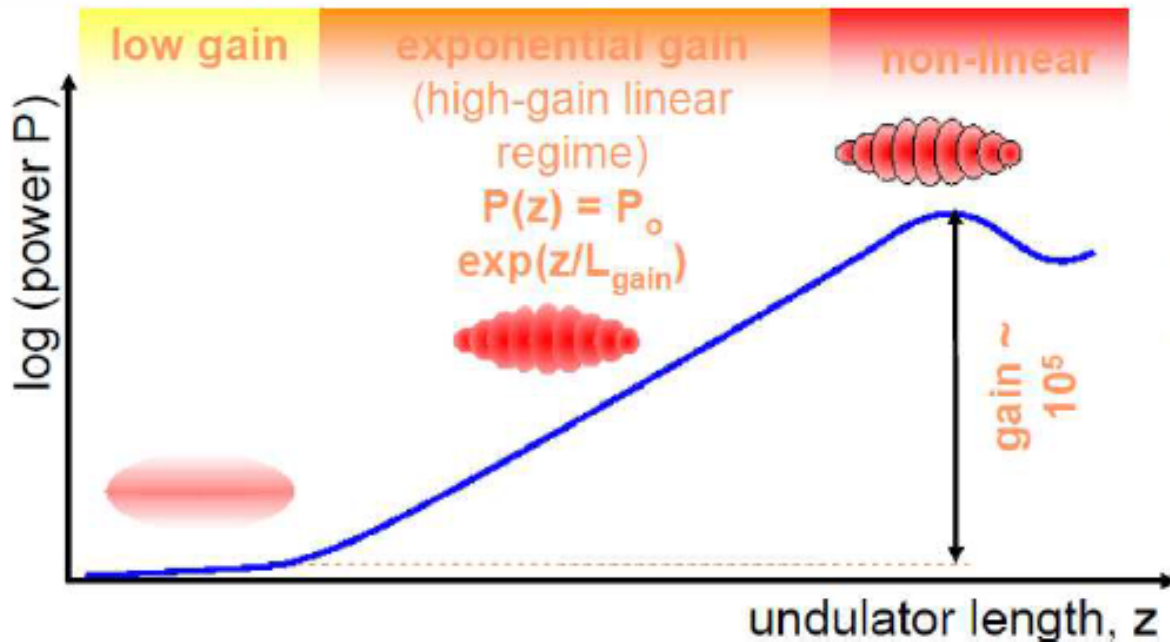
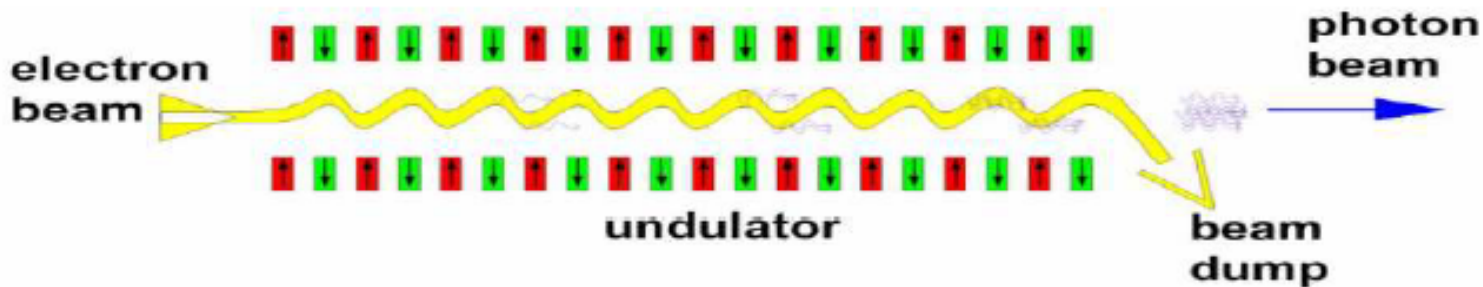


Höchstbrillante Röntgenquelle : Der Freie Elektronenlaser

SASE Prinzip

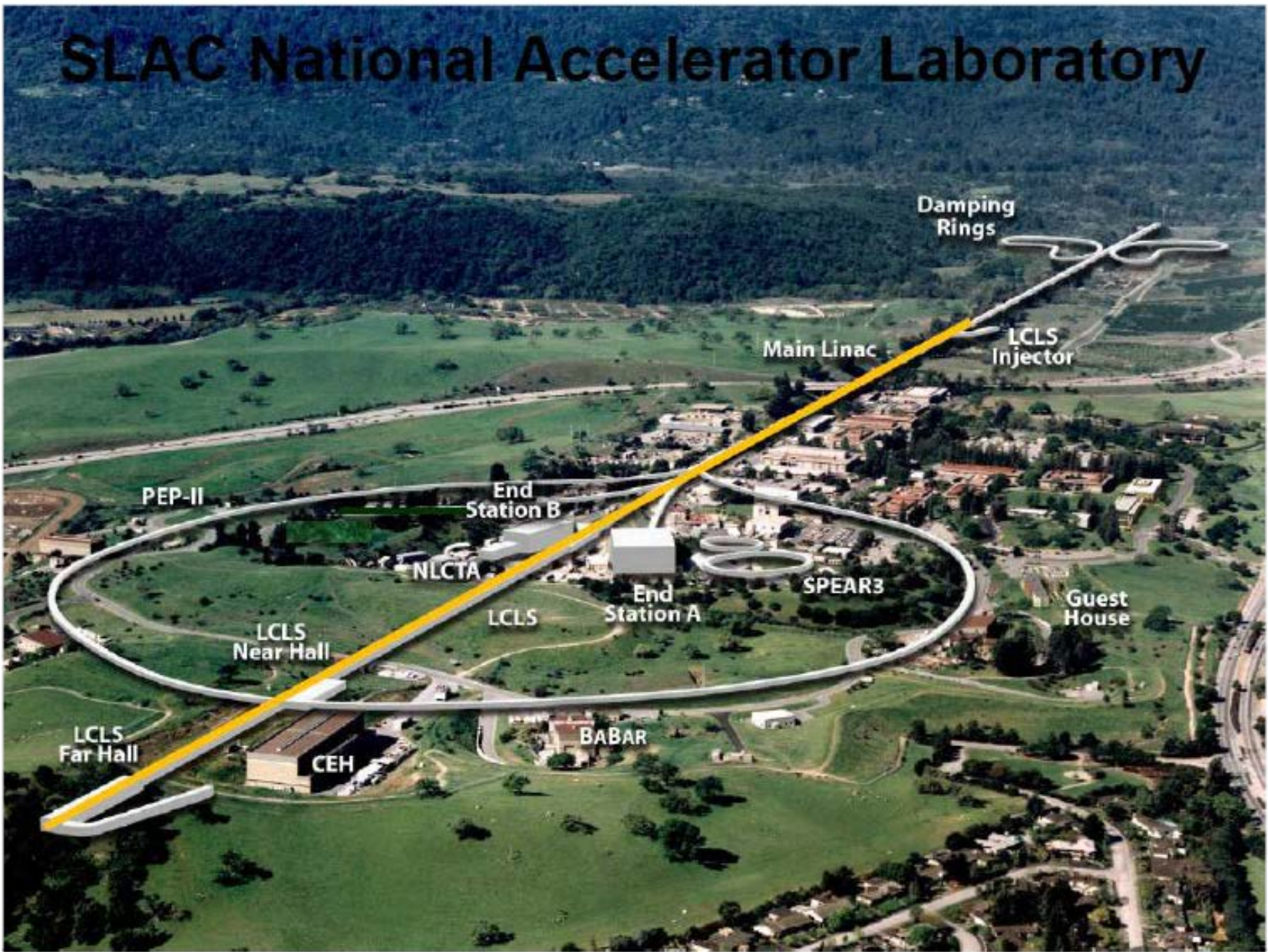
SASE = Self Amplification of Spontaneous Emission

Saldin, Schneidmiller, Yurkov

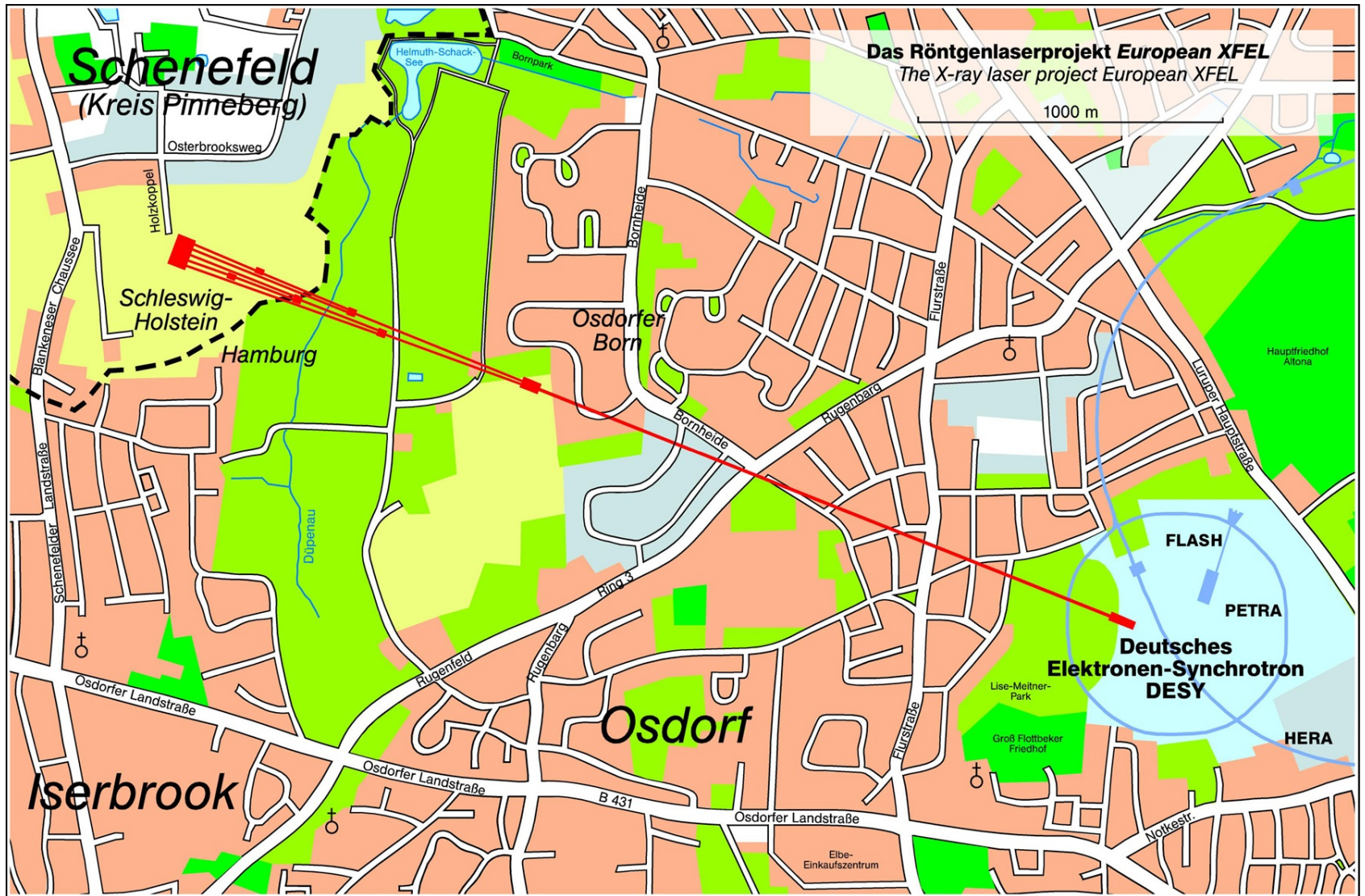


- Bunch wechselwirkt mit eigenem Photonfeld
 - Mikrobunche entstehen
 - Elektronen strahlen kohärent $\sim N_e^2$ mit $N_e \approx 10^6$
- Verstärkung bis zu N_e !

SLAC National Accelerator Laboratory



European XFEL Hamburg

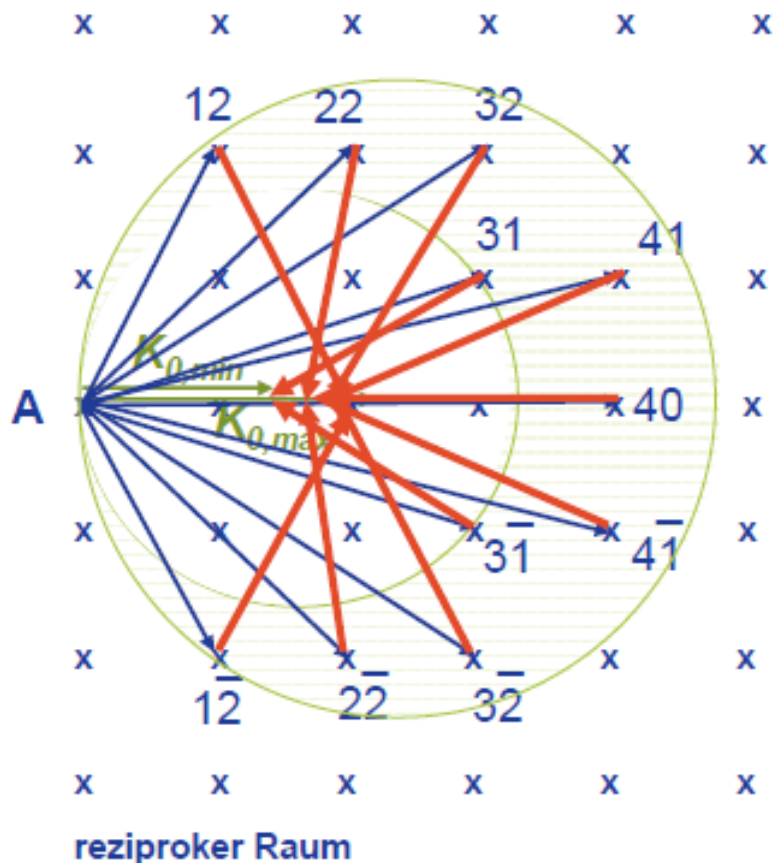


IV.2 Laue-Verfahren

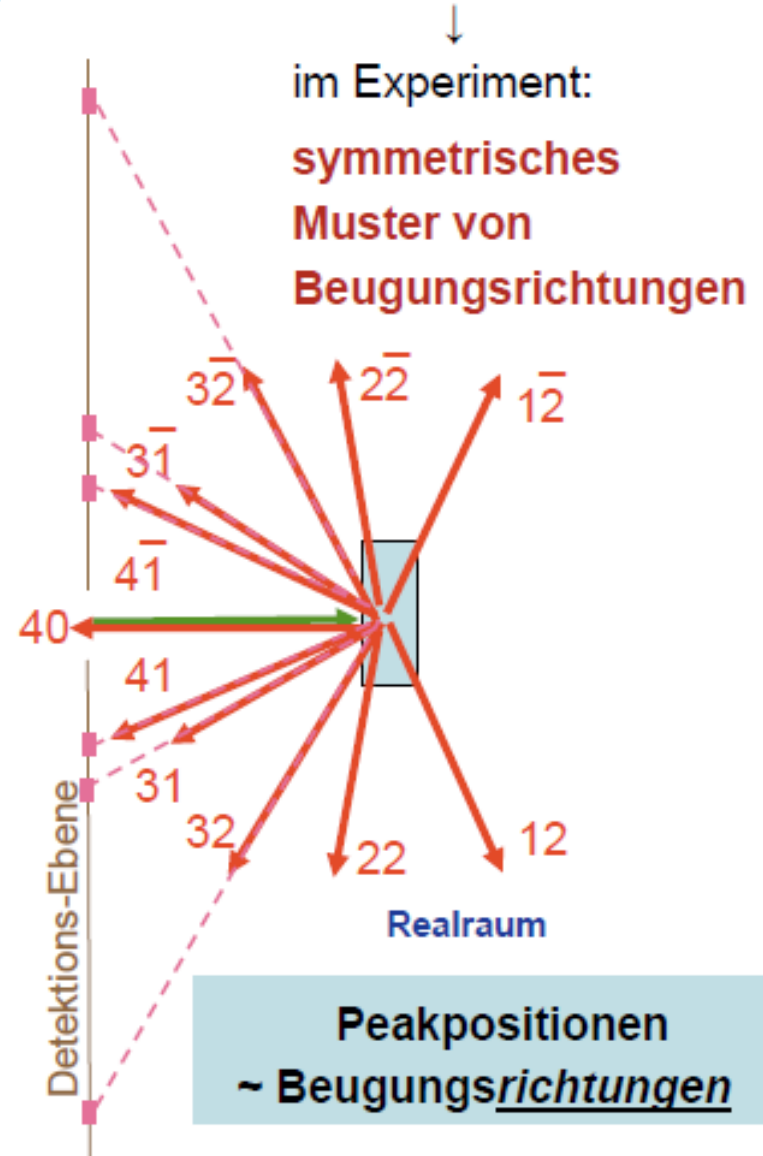
IV.2.1 Prinzip

λ -Kontinuum = k_0 -Kontinuum

→ Kontinuum von Ewald-Kugeln
mit $|k_{0,\min}| < |k_{\text{Ewald}}| < |k_{0,\max}|$



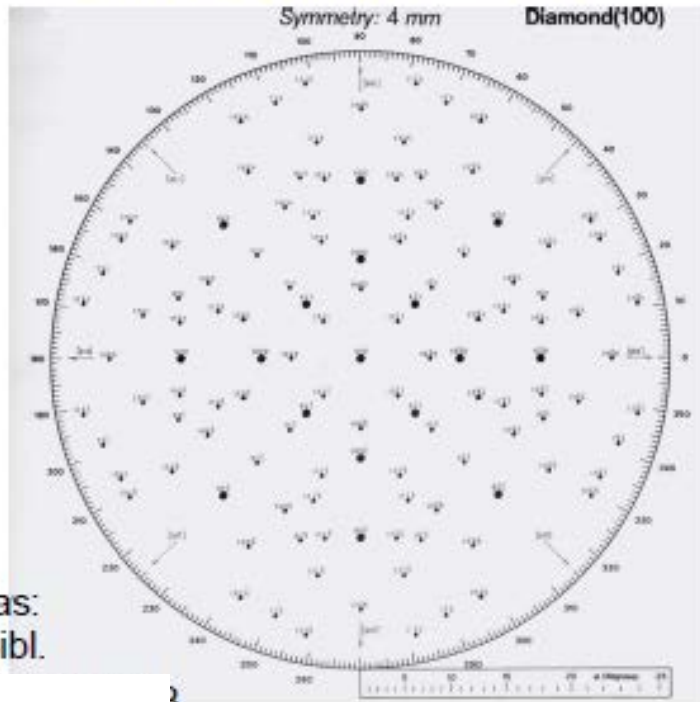
→ „Fächer“ von G-Vektoren mit $K = G$



IV.2.2 Laue-Verfahren: Realisierung und Ergebnisse

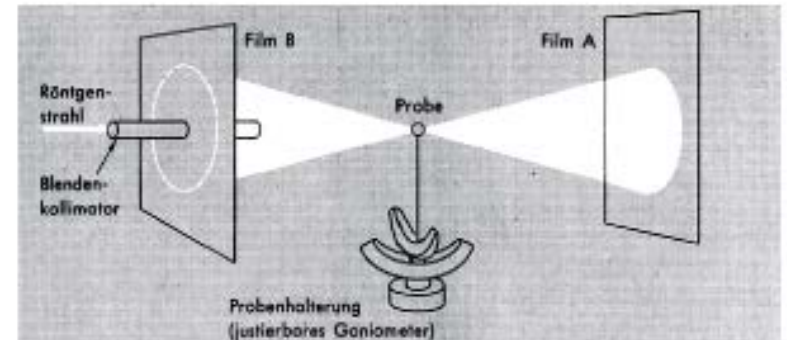
Röntgenquelle:
bei Beschleunigungsspannung $U = 30 \text{ kV}$: Bereich $\lambda \geq 0,035 \text{ nm}$

theoretische Vorhersage
Diamantstruktur (100)
für Winkelbereich 0° bis 25°

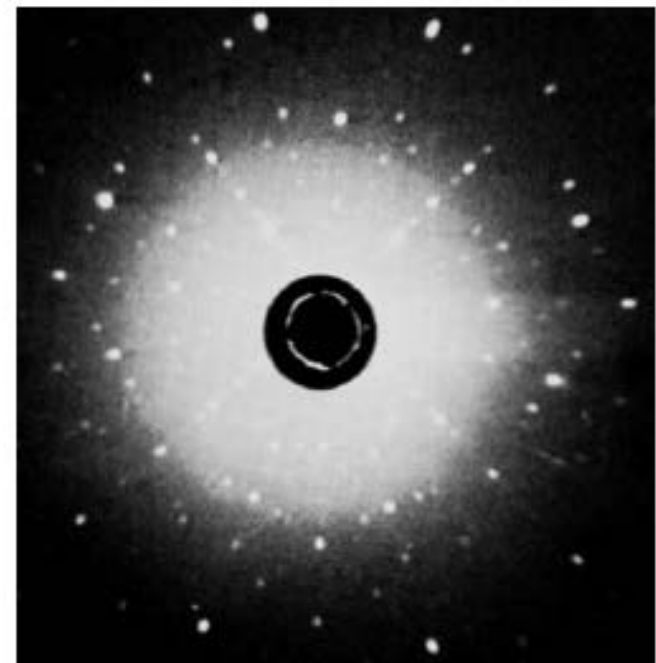


Laue-Atlas:
Physik-Bibl.

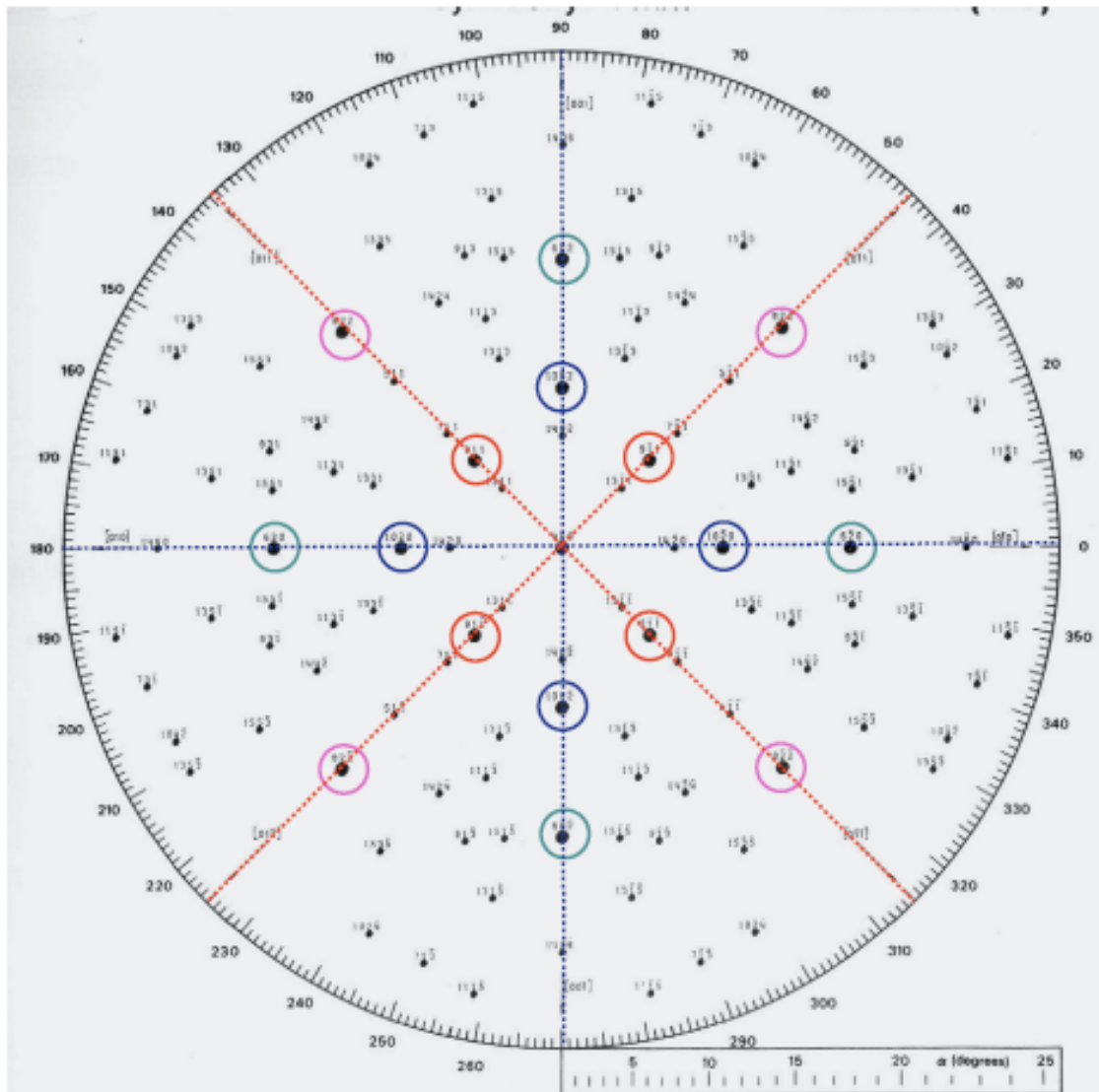
Geometrie für Laue-Aufnahme:



Exp. Ergebnis für Si (100):
4-zählige Symmetrie

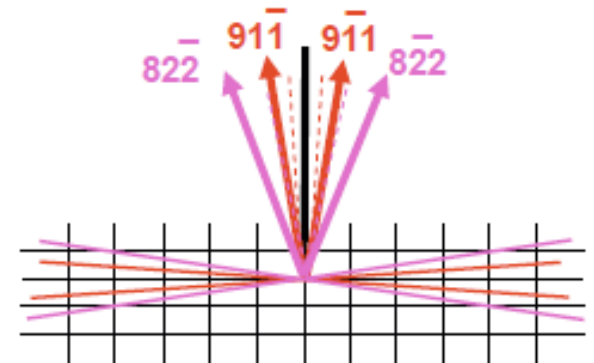
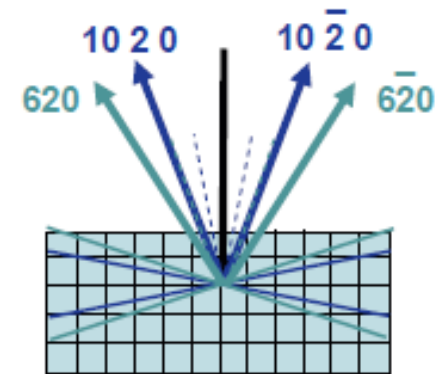
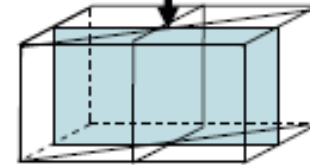


Deutung der Laue-Beugungspeaks



Proben-
Geometrie

001
Oberfläche



Unterschiedliche Probenoberflächen → charakteristische Symmetrien

(100)

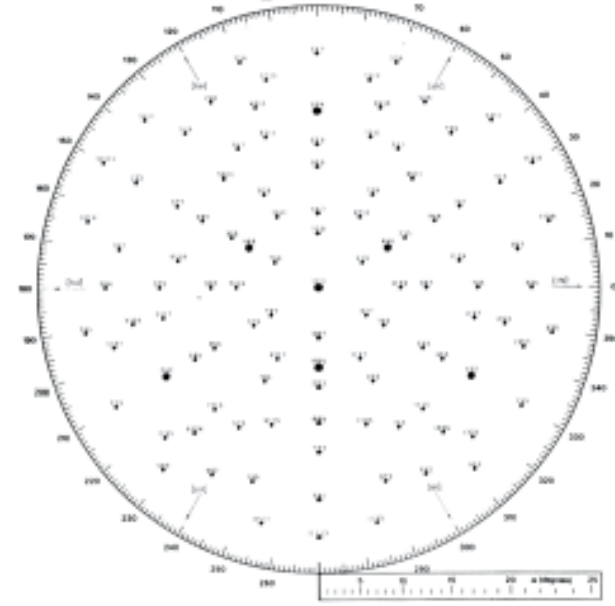
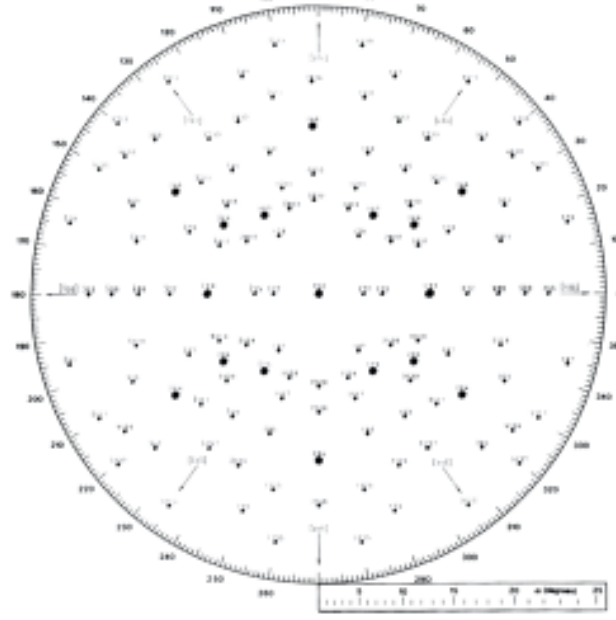
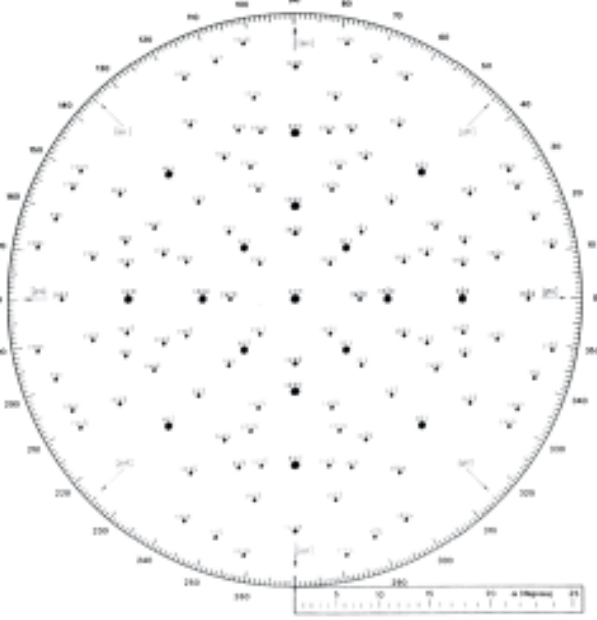
(011)

(111)

Symmetry: 4 mm Diamond(100)

Symmetry: 2 mm Diamond(011)

Symmetry: 3 m Diamond(111)



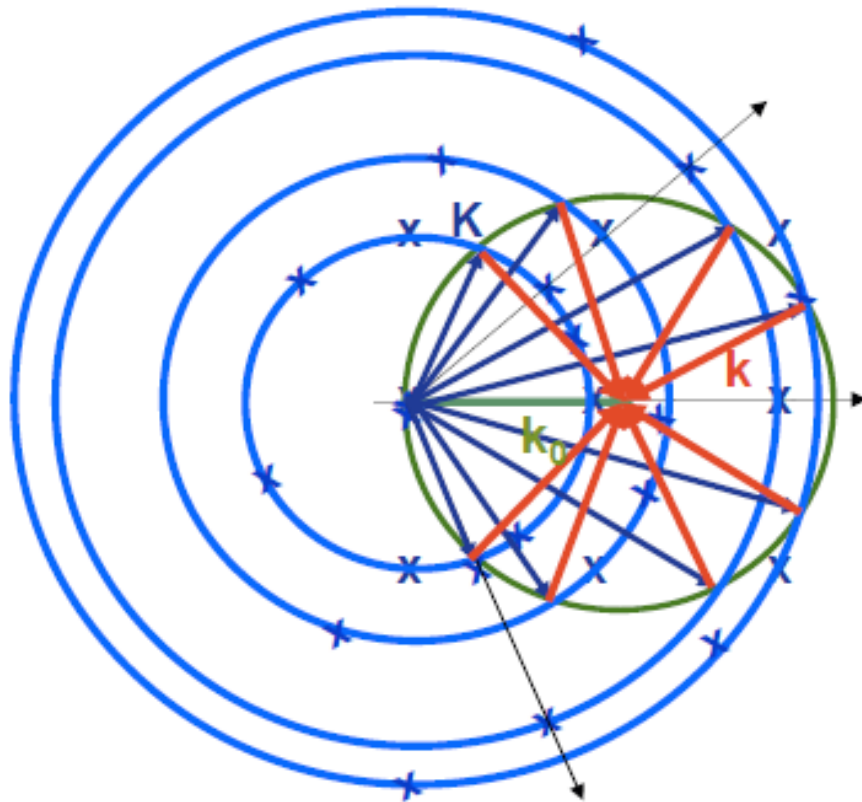
4-zählig

2-zählig

3-zählig

IV.3.1 Pulververfahren (Debye-Scherrer-Verfahren) Prinzip

In 2 Dimensionen



monochromatische Strahlung
+ 1 Kristallit \rightarrow i.a. keine Beugungspeaks

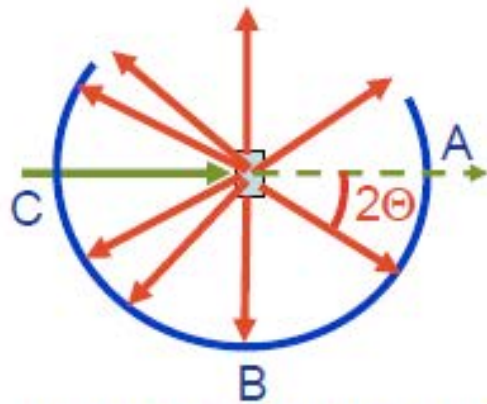
sehr viele,
statistisch orientierte Kristallite

↓
im reziproken Raum:
konzentrische Ringe (2-dim)
bzw. konzentrische Kugeln (3-dim)

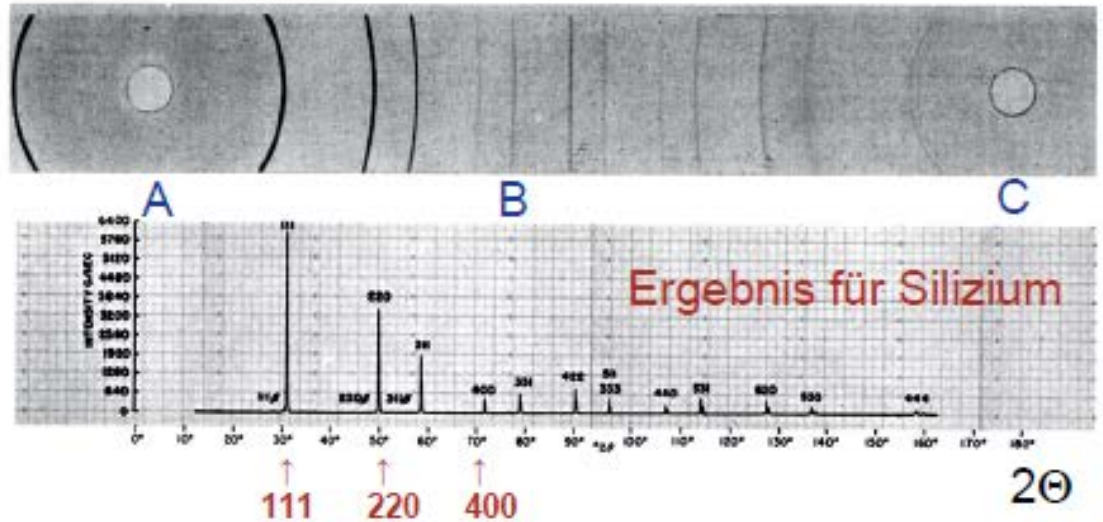
Streubedingung $\mathbf{K} = \mathbf{G}$ erfüllt
für k -Werte auf Kegeln um \mathbf{k}_0

in Detektionsebene $\perp \mathbf{k}_0$:
Beugungsintensität = konzentrische Ringe

IV.3.2 Pulververfahren: Realisierung



mögliche Film-Anordnung:
Filmstreifen als Teilkreis



Messung:

Intensität als Funktion des
Beugungswinkels 2θ ,
oder von $|\mathbf{K}| = 4\pi \sin(\theta) / \lambda$,

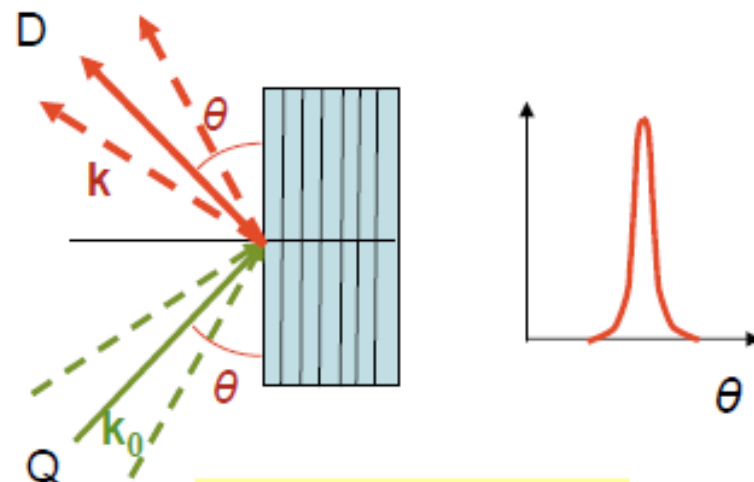
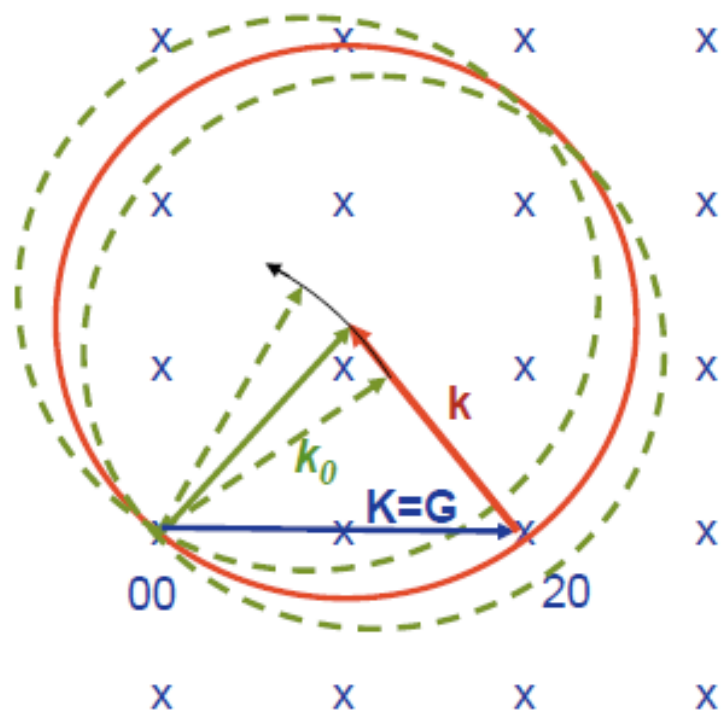
Indizierung der Reflexe mit hkl



IV.4 Drehkristallverfahren

IV.4.1 Prinzip

Probe: **Einkristall**
einfallende Welle: **monochromatisch**
Variable: **Einfallswinkel θ**

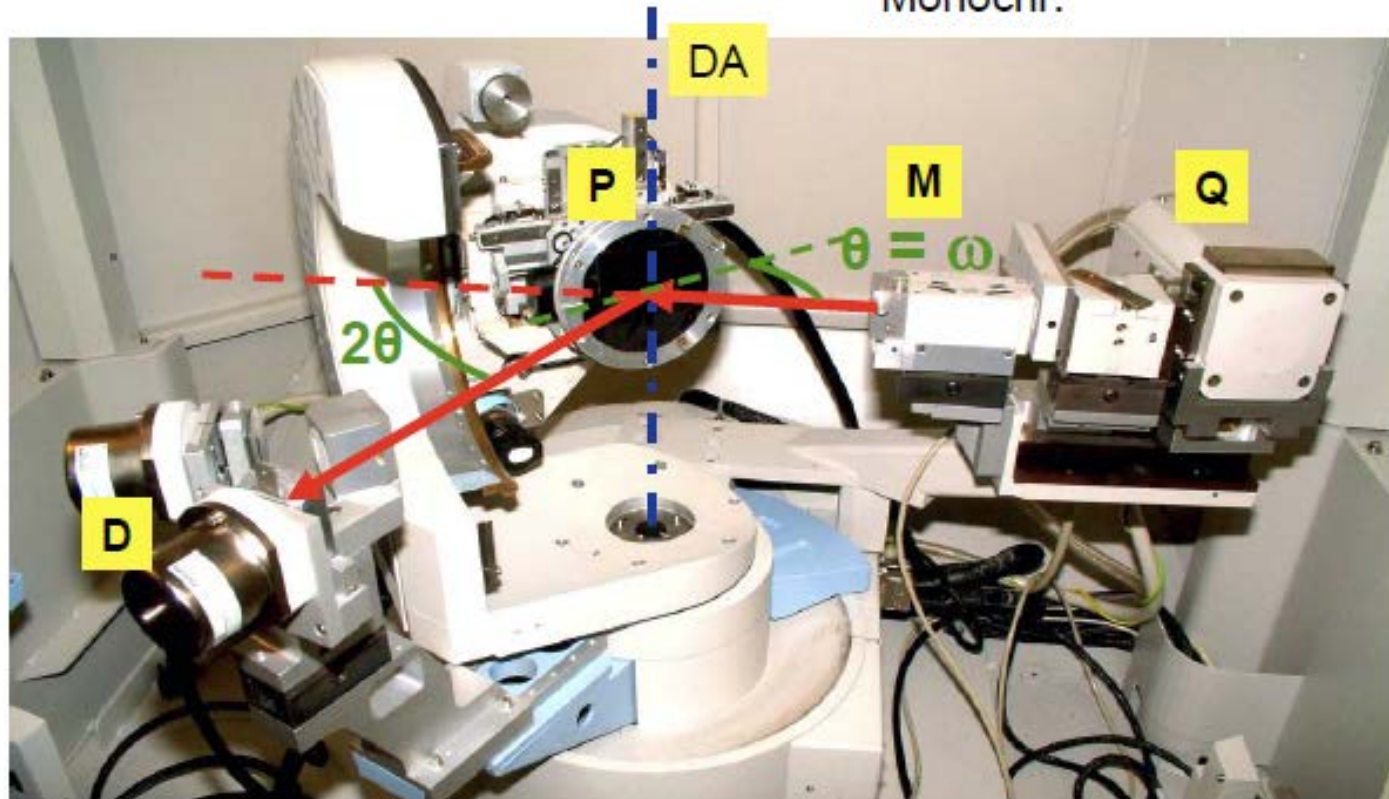
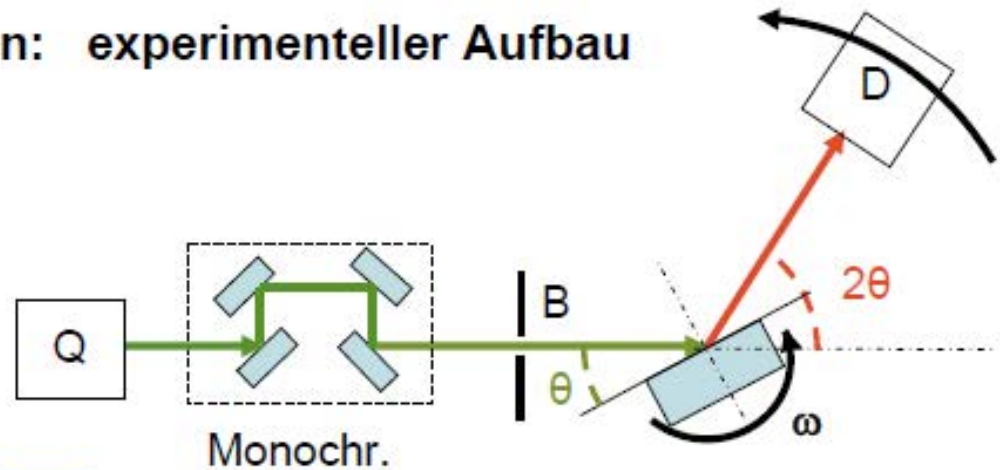


Beugungspeak falls
 $2 d \sin \theta = n \lambda$
(Bragg-Bedingung)

beachte:
Probe muss relativ zur Quelle Q
gedreht werden (um θ)
und
Detektor D muss relativ zur Probe
gedreht werden (auch um θ)
=>
so genannter θ - 2θ Scan.
(= ω - 2θ Scan, siehe gleich)

IV.4.2 Drehkristallverfahren: experimenteller Aufbau

- Quelle fest
- Variation Einfallswinkel θ durch Probendrehung
- Synchrone Drehung des Detektors 2θ zur Einfallsrichtung



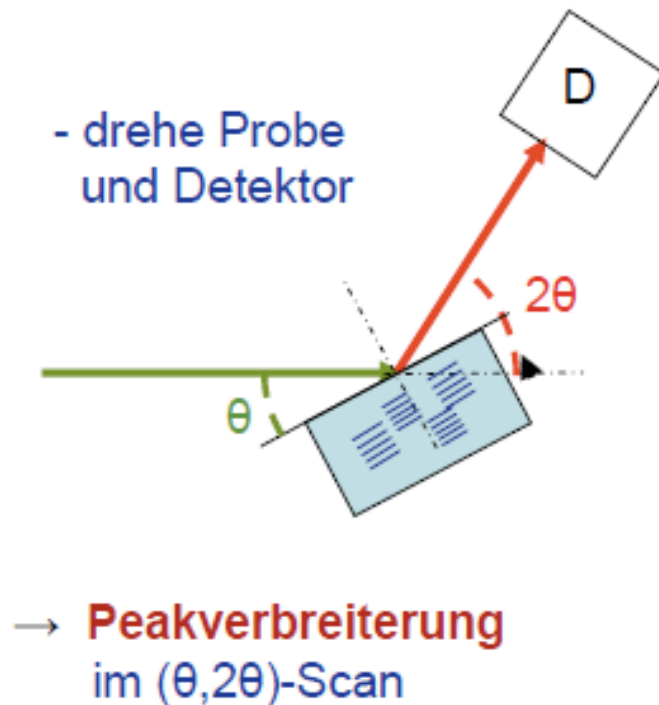
Q: Röntgenquelle
M: Monochromator
P: Probe
D: Detektor
DA: Drehachse
 $\omega (\equiv \theta)$

Preis \geq € 100.000

IV.4.3 Anwendungen des Drehkristallverfahrens

IV.4.3.1 Kristallqualität

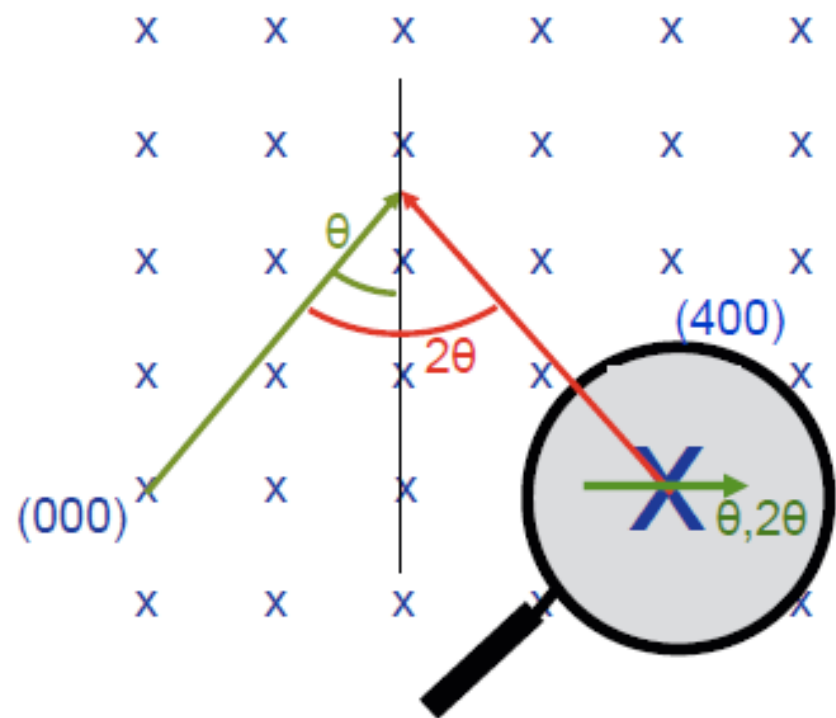
Messung der Variation der Gitterkonstante:



Begründung: Bragg-Gleichung

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \Theta$$

Darstellung im rezipr. Gitter:



IV.4.3 Anwendungen des Drehkristallverfahrens

IV.4.3.1 Kristallqualität:

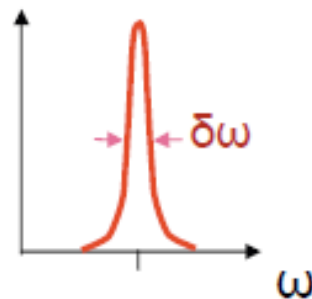
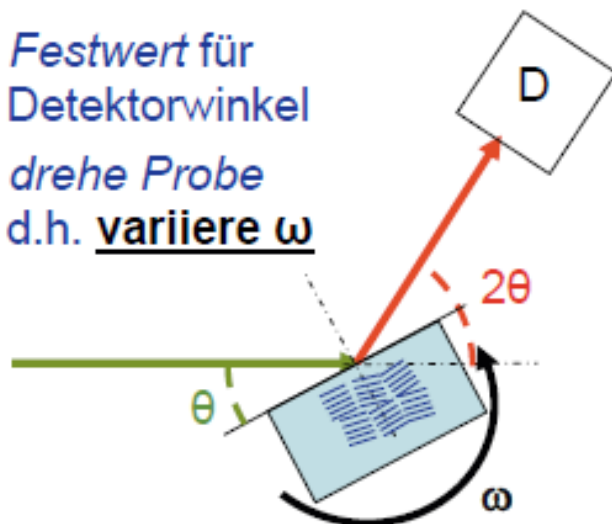
Messung der Peakbreite

Messung der Mosaizität: → Analyse mittels „Rocking-Kurve“ = ω -scan, d.h. nur die Probe wird gedreht.

bei „perfektem“ Kristall: → äußerst schmale Beugungspeaks
z.B. Si(422)-Peak: $\delta\theta < 0.2^\circ$, Breite durch Diffraktometerauflösung bestimmt

Rocking-Kurve:

- Festwert für Detektorwinkel
- drehe Probe d.h. variieren ω



→ sukzessive Peakbeiträge der einzelnen „Mosaiksteine“
Peakverbreiterung im ω -scan

Darstellung im rezipr. Gitter:



Nur Drehung des Kristalls
⇒ K, k_0, k bleiben konstant, rez. Gitter wird gedreht

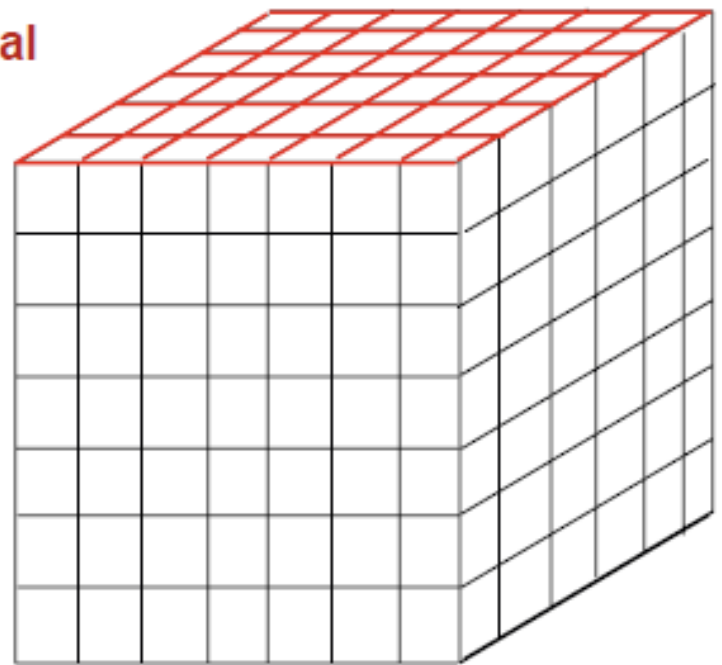
III.6 Elektronenbeugung: 2-dim. Betrachtung

Elektronen: intensive Wechselwirkung
mit Elektronenhüllen im FK → sehr geringe Eindringtiefe
(wenige Atomlagen)

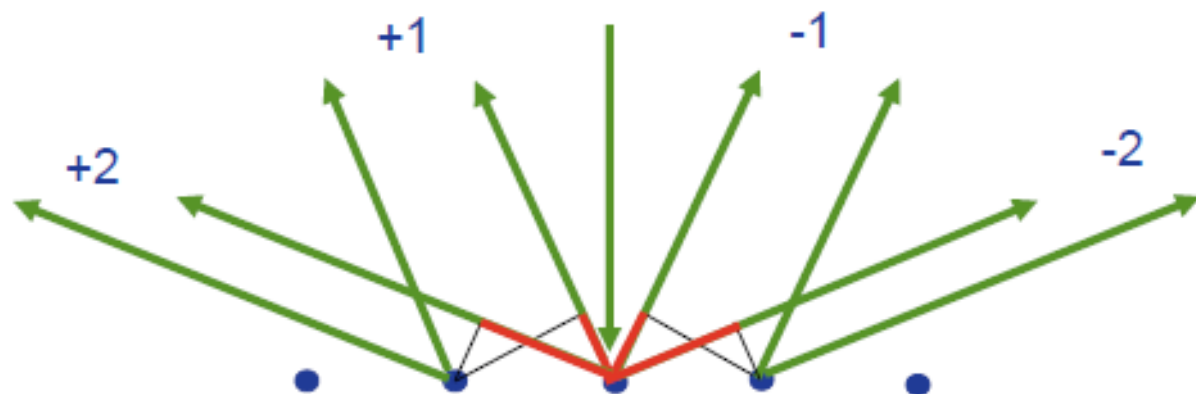
Näherung: Eindringtiefe = 1 Atomlage,
d.h. **FK ist quasi zweidimensional
für Elektronenbeugung**

Analogie zum optischen Gitter:
keine Schichtung,
d.h. keine Tiefen-Interferenzbedingung

ABER: in der Ebene Interferenzbedingung
sowohl in **x-** als in **y-Richtung**



III.6.1 Interferenzbedingung



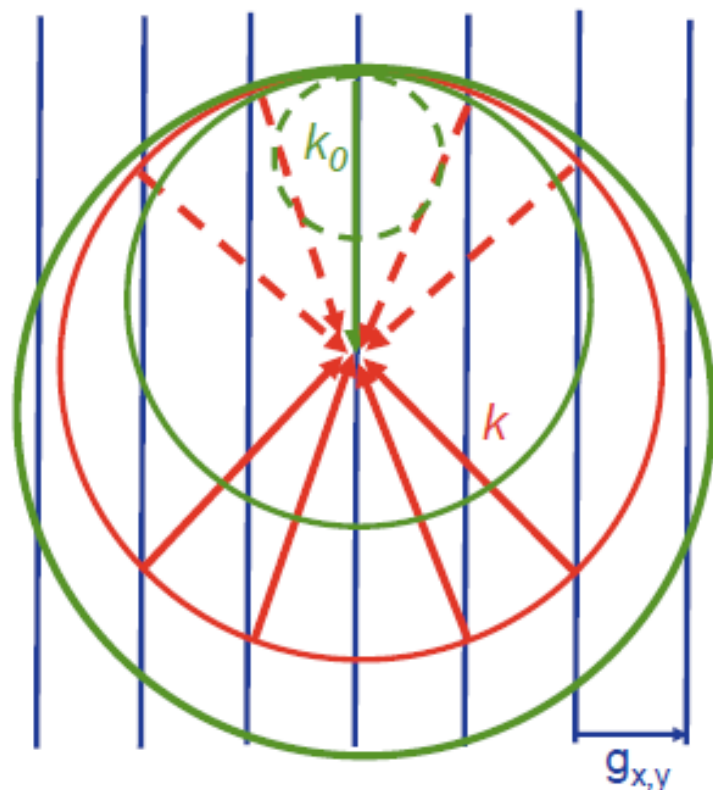
konstruktive Interferenz: Gangunterschied = $n \cdot \lambda$

- Gilt sowohl in x- als auch in y-Richtung: hk - Peaks: 10, 20, 11, 11 etc.
- Interferenzmaxima für jeden k_0 -Wert, d.h. für jede Elektronen-Wellenlänge (im Gegensatz zu 3-dim.: Interferenzmaxima nur für bestimmte k_0 -Werte (2.5.1))
- Zusammenhang mit Streutheorie? (Bedingung $\mathbf{K} = \mathbf{G}$)

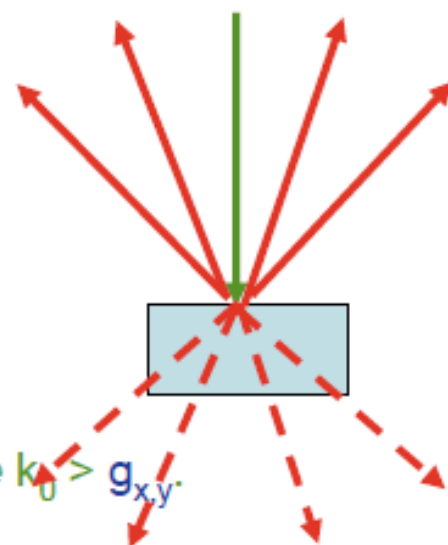
III.6.2 Ewald-Konstruktion

Reziprokes Gitter für Oberflächenschicht:

- Periodizität im Ortsraum in x - und in y -Richtung
→ **Fouriersumme** im reziproken Raum **diskrete** G_x - und G_y - Werte (h, k ganzzahlig)
- keine Periodizität in z -Richtung
→ **Fourierintegral** im reziproken Raum **kontinuierliche** G_z -Werte (l kontinuierlich)

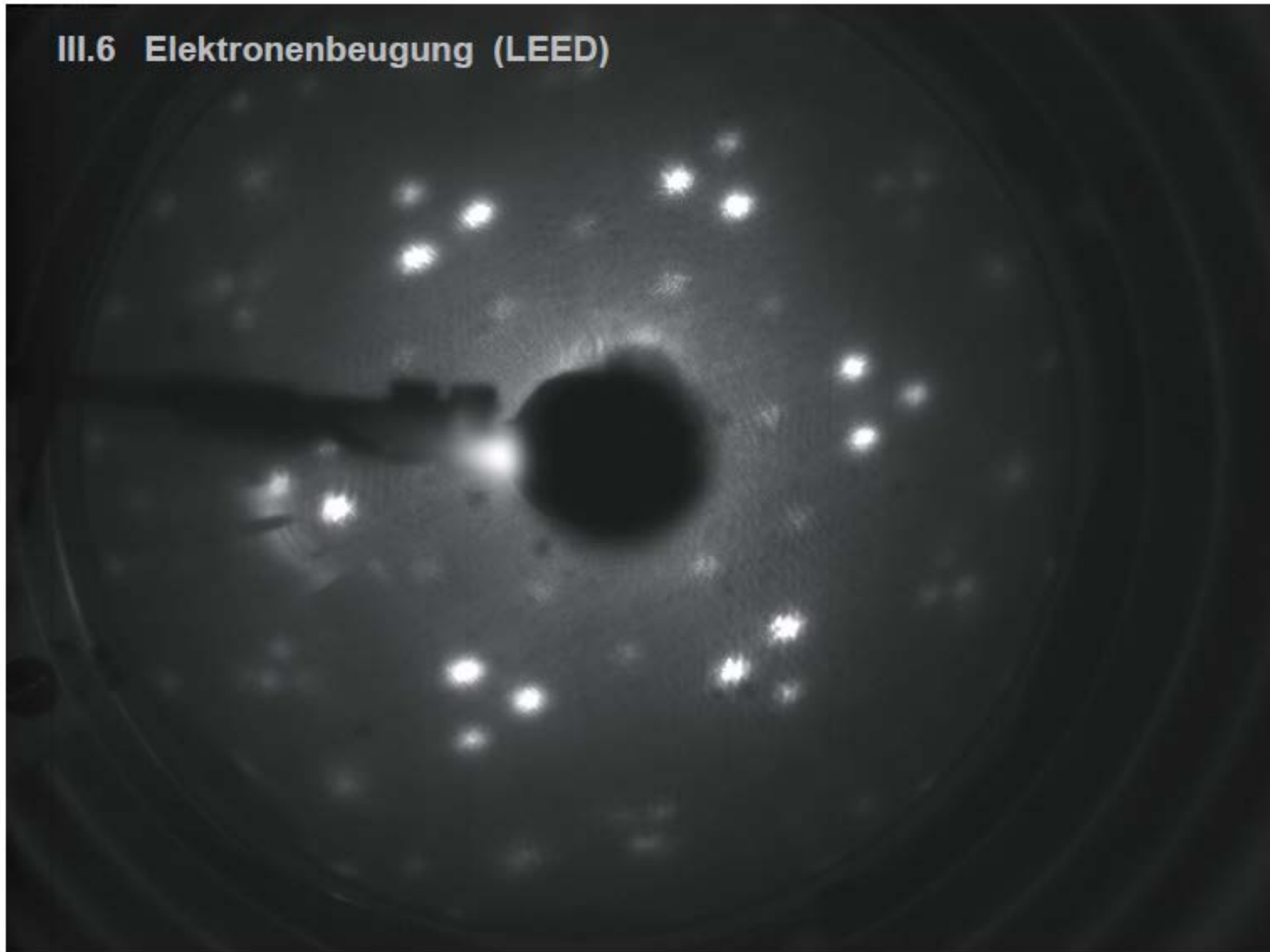


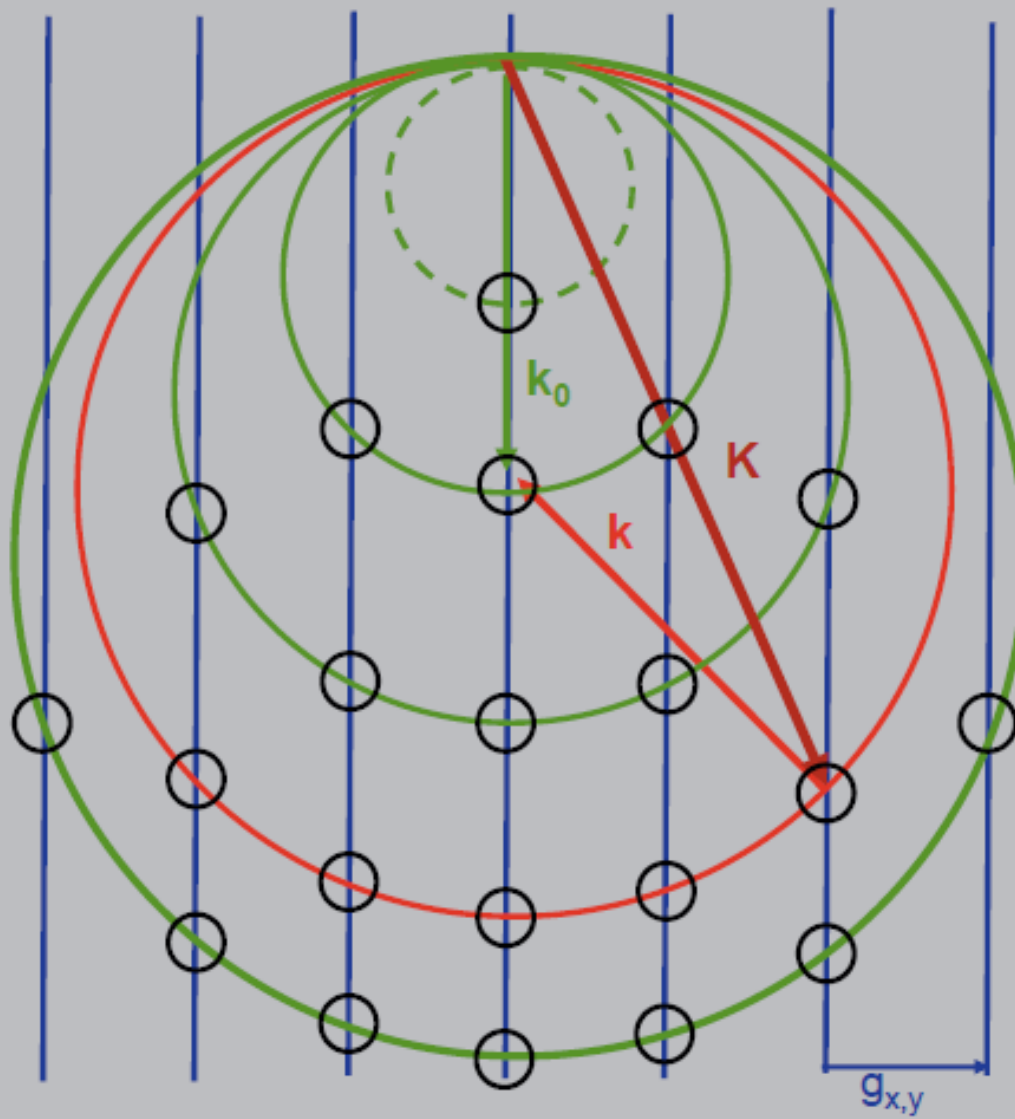
reziprokes Gitter der Oberfläche:
Stäbe in z -Richtung



Maxima für alle $k_0 > g_{x,y}$

III.6 Elektronenbeugung (LEED)





Zusammenfassung: Elektronenbeugung (LEED)

Elektronen-Energie: 10 eV ... 200 eV → **Low Energy Electron Diffraction**
intensive Wechselwirkung → Information über Oberfläche (OF)

warum Analyse
der OF-Struktur?

- (i) **spezifische OF-Symmetrie** (Rekonstruktion der OF)
d.h. OF-Struktur anders als Volumen

Ursache: bestmögliche Absättigung chemischer Bindungen

- (ii) **Adsorption von Fremdatomen oder Molekülen an der OF**
bilden eine „Überstruktur“

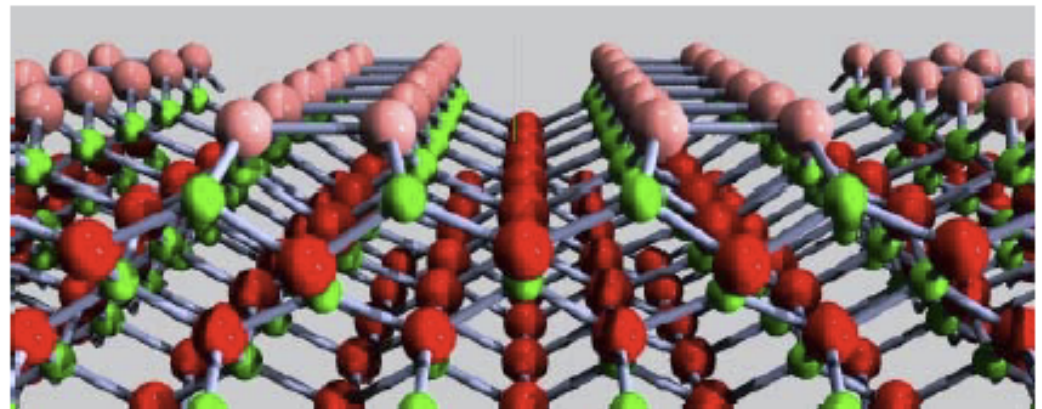
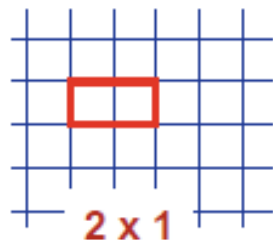
Zu (i): Spezifische Oberflächensymmetrie

Oberfläche

=> Gebrochene Bindungen

=> Atome verschieben sich,
um Bindungen abzusättigen.

Periodizität (Einheitszelle der
Oberfläche) ist
größer als
im Volumen



PRB 68 035339 (2003)