

f.) Streubedingung für reziprokes Gitter

2-11

$$I_s(\vec{K}) \sim \left| \int_V \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\vec{r}} d\vec{r} \right|^2$$

$$\sim \left| \sum_{h,k,l} \int_V \rho_{hkl} e^{-i(\vec{K}-\vec{G}_{hkl})\vec{r}} d\vec{r} \right|^2$$

Für ausgedehnte Kristalle und große Eindringtiefe des Strahl
 (→ Integrationsvolumen ist groß):

$$\int_V e^{-i(\vec{K}-\vec{G}_{hkl})\vec{r}} d\vec{r} = \begin{cases} V & \text{für } \vec{G}_{hkl} = \vec{K} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$= \delta^3(\vec{G}_{hkl} - \vec{K})$

↙ Streuvektor \vec{K}

d.h. man beobachtet Intensitätsmaxima für $\vec{K} = \vec{G}_{hkl}$:

$$I_s(\vec{K} = \vec{G}_{hkl}) = I_{hkl} \sim |\rho_{hkl}|^2$$

Im nächsten Abschnitt sollen die Fourier-Koeffizienten der
 Streudichte vertikal ρ_{hkl} diskutiert werden.

Interpretation:

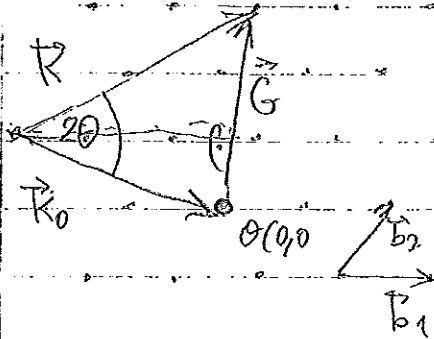
(1) Reflex für $\vec{K} = \vec{G}_{hkl}$:

(Reziproker Gittervektor \vec{G}_{hkl} steht senkrecht auf
 Netzebenen-Schicht (hkl) mit Netzebenenabstand
 d_{hkl} : $|\vec{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$ mit $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$
 für kubisches Gitter.)

Reflex I_{hkl} entspricht also Bragg-Reflex an (hkl) Ebenen.

(2) Ewald-Konstruktion und Bragg-Bedingung

Fig 2-16



Reziprokes Gitter =
jedes Gitterpt. entspricht
einem Netzebenenstück.

Elastische Streuung: $|\vec{k}_0| = |\vec{k}|$!

Streubedingg. für Intensitätsmaxima:

$$\vec{G} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{K}$$

$$\frac{1}{2} |\vec{G}| = \sin \theta \cdot |\vec{k}_0|$$

d.h. Reflexstärke am Gitterpt. \vec{G}_{hkl} (Ebene (h, k, l))

$$\text{mit } |\vec{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \stackrel{!}{=} 2 \cdot \left(\frac{2\pi}{\lambda} \cdot \sin \theta \right)$$

oder

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

= Bragg-Bedingung als Anwendung der v. Laue Streuklammern.

g.) Intensität und Strukturfaktor

Bisher: - Mögliche Reflexe alleine aufgrund der Gitterperiodizität.
- keine Aussage über die Stärke der Reflexe.

Intensität wird durch Fourier-Koeff S_{hke} von Schichtdicke bestimmt.

→ S_{hke} enthalten Informationen über Atome der Basis, in 3D-Bereiche können für mehr-atomige Basen Informationen zur Teilw. Auslöschung der Gitterreflexe führen.

Bem.: Kubische Gitter werden meist als SC mit mehratomiger Basis betrachtet

Mehratomige Basis und ihre Behandlung

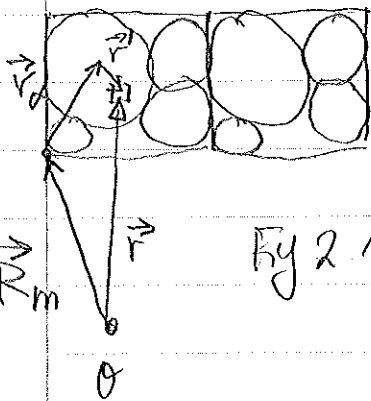


Fig 2.17

für Gitterplatz m und Atom α in Basis:

$$\vec{r} = \vec{R}_m + \vec{r}_\alpha + \vec{r}'$$

$$S_{hke} = \frac{1}{V_{EZ}} \int_{EZ} g(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} d\vec{r}$$

$$\stackrel{\text{Periodizität:}}{\vec{G} \cdot \vec{R}_m = n \cdot 2\pi} \frac{1}{V_{EZ}} \sum_{\alpha} e^{-i\vec{G}\vec{r}_\alpha} \int g_{\alpha}(\vec{r}') e^{-i\vec{G}\vec{r}'} d\vec{r}'$$

Atomstrukturfaktor für Atom α .
 $f_{\alpha}(\vec{G})$

mit $\vec{r}_\alpha = u_{\alpha} \vec{a}_1 + v_{\alpha} \vec{a}_2 + w_{\alpha} \vec{a}_3$
und $\vec{G}_{hke} = h \vec{b}_1 + k \vec{b}_2 + l \vec{b}_3$

⇒ Strukturfaktor
(Strukturamplitude)

$$S_{hke} = S_{hke} \cdot V_{EZ} = \sum_{\alpha} f_{\alpha}(\vec{G}_{hke}) e^{-2\pi i(hu_{\alpha} + kv_{\alpha} + lw_{\alpha})}$$

Bsp: Strukturfaktor für CsCl (bcc)-Gitter bzw. sc-Gitter mit 2-atomiger Basis:

$$\vec{r}_{\text{Cs}} = (0, 0, 0) \quad \vec{r}_{\text{Cl}} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$S_{hkl} = \begin{cases} f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cl}} & \text{für } h+k+l = \text{gerade} \\ f_{\text{Cs}} - f_{\text{Cl}} & \text{für } h+k+l = \text{ungerade} \end{cases}$$

Bem 1: Wären die Atomstrukturfaktoren f_{Cs} und f_{Cl} gleich, würden sich die Beiträge für ungerade $h+k+l$ eliminieren: keine Reflexe

Bem 2: bcc Gitter aus gleichen Atomen $\hat{=}$ sc mit 2-atomiger Basis

$$S_{hkl} = \begin{cases} 2f & h+k+l \text{ gerade} \\ 0 & h+k+l \text{ ungerade} \end{cases}$$

Atom-Strukturfaktoren f_{α} :

$$f_{\alpha}(\vec{K}) = \int_{\text{kr. Atom}\alpha} \rho_{\alpha}(\vec{r}) e^{-i\vec{K}\vec{r}} d\vec{r} \quad \leftarrow \text{wg. } \vec{K} = \vec{G}$$

ρ_{α} = Elektronenschichtverteilung im Atom, in guter Näherung kugelsymmetrisch.

$$\begin{aligned} \Rightarrow f_{\alpha}(\vec{K}) &= 2\pi \int_0^{R_{\alpha}} \int_0^{\pi} \rho_{\alpha}(r) e^{-iKr \cos\theta} r^2 dr d\cos\theta \\ &= 2\pi \int_0^{R_{\alpha}} r^2 \rho_{\alpha}(r) \frac{e^{+iKr} - e^{-iKr}}{Kr} dr \\ &= 4\pi \int_0^{R_{\alpha}} r^2 \rho_{\alpha}(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr \end{aligned}$$

Integration über $\cos\theta$
 R_{α} = Radius der Elektronenhülle

Bem: für $Kr \rightarrow 0$ $\frac{\sin Kr}{Kr} \rightarrow 1$ ($K \approx 0$, d.h. Vorwärtsstrahlung)
 $f_{\alpha}(\vec{K}) \rightarrow \int_0^{R_{\alpha}} 4\pi r^2 \rho_{\alpha}(r) dr = Z = \# \text{e in Hülle} \approx \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\alpha}(\vec{r}) d\vec{r}$

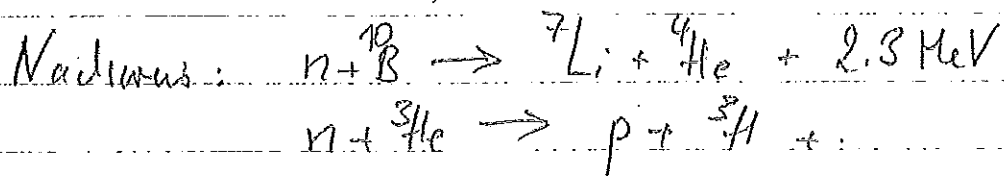
2.3.2 Neutronenstrahlung

Sensitiv auf Kerne und Magnetisierung der Atome
 (→ WW mit magnet. Moment der e^-)

- Neutron-Kern WW hat für alle Atome etwa gleiche Größe
- Neutron-Elektron (Spin Spin) WW vergleichbar zu n-Kern WW

Problem: Erzeugung einer intensiven kalten Neutronen-
 Quelle. (0,1...1 eV)
 "2 A - Neutronen" $\rightarrow v = 2000$ m/s

Selektion monochromatischer Elektronen mittels
 Flugzeit und einem Chopper. (Neutronen aus Reaktor)



→ Proportionalzählrohr mit BF_3 Gas
 od. ${}^3\text{He}$.