

Abb. 2.17: Die de Broglie Wellenlänge von Photonen, Elektronen, Neutronen und Heliumatomen als Funktion der Teilchenenergie angegeben in Einheiten von 100 keV für Photonen, 1 keV für Elektronen und 1 eV für Neutronen und Heliumatome. Der hinterlegte Bereich markiert den thermischen Energiebereich für Neutronen zwischen 20 und 30 meV.

Die Wigner-Seitz Zelle des reziproken Gitters heißt erste Brillouin-Zone.

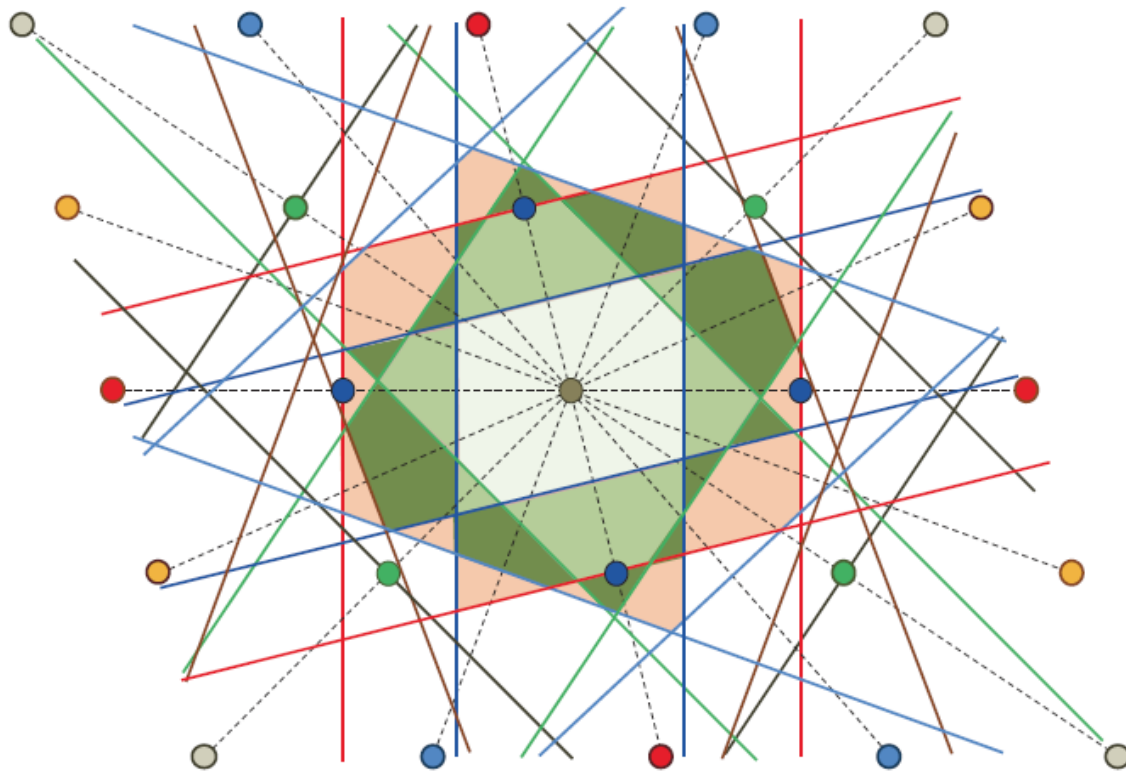


Abb. 2.3: Zur Konstruktion der ersten Brillouin-Zone sowie Brillouin-Zonen höherer Ordnung für ein zweidimensionales Gitter. Gezeigt sind die erste bis vierte Brillouin-Zone (siehe Text zur Konstruktionsvorschrift).

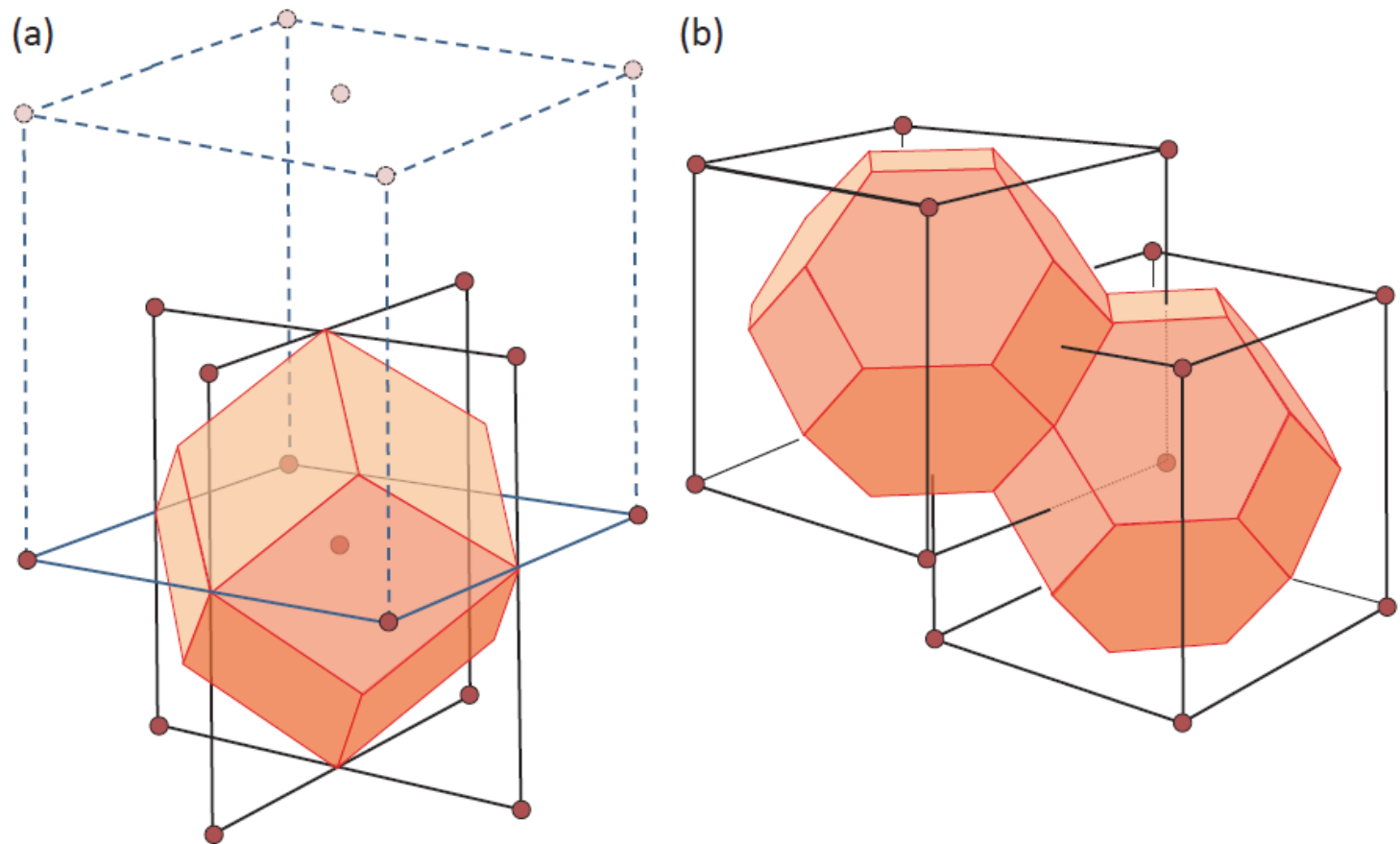


Abb. 2.4: (a) Die erste Brillouin-Zone des kubisch raumzentrierten (bcc) Gitters ist ein rhombisches Dodekaeder. Die Zone ist im reziproken Raum gezeichnet und das reziproke Gitter ist ein fcc-Gitter. (b) Die erste Brillouin-Zone eines kubisch flächenzentrierten (fcc) Gitters ist ein abgestumpfter Oktaeder mit 8 Sechsecken und 6 Quadraten. Die Gitterzellen sind im reziproken Raum gezeichnet und das reziproke Gitter ist ein bcc-Gitter.

Zu jeder Ebenenschar gibt es reziproke Gittervektoren \mathbf{G} und umgekehrt gibt es zu jedem reziproken Gittervektor eine Ebenenschar, so dass \mathbf{G} senkrecht auf den Ebenen steht und für den kürzesten reziproken Gittervektor \mathbf{G}_{\min} gilt:

$$|\mathbf{G}_{\min}| = \frac{2\pi}{d}, \quad (2.1.23)$$

wobei d der Abstand der Ebenen in der zu \mathbf{G} senkrechten Ebenenschar ist.

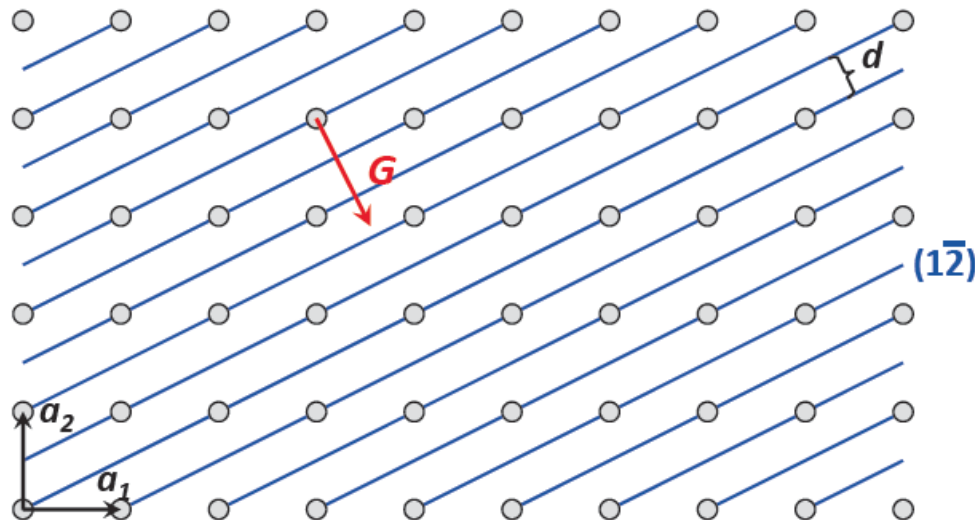
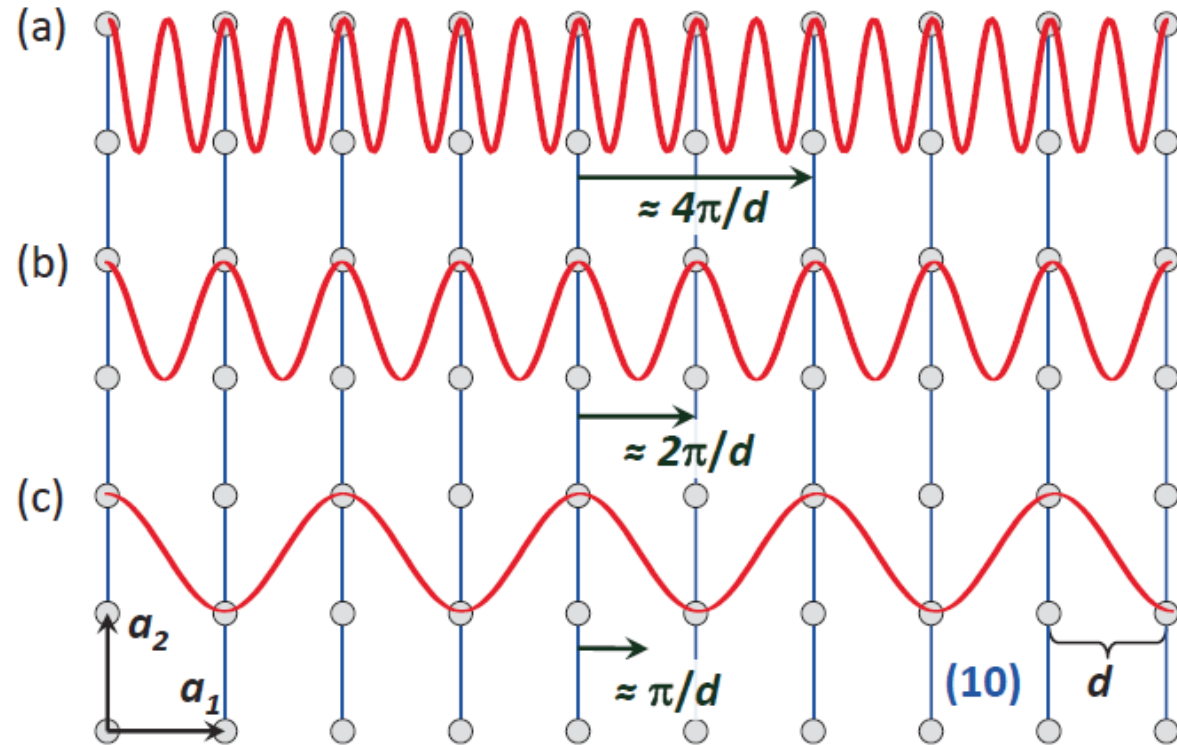


Abb. 2.5: Zum Zusammenhang zwischen Gitterebenen und Millerschen Indizes in einem zweidimensionalen Bravais-Gitter mit den primitiven Gittervektoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 . Gezeigt sind die $(1\bar{2})$ Ebenen. Der zugehörige reziproke Gittervektor steht senkrecht auf dieser Ebenenschar.

Existenz eines minimalen reziproken Gittervektors

Abb. 2.6: Zur Verdeutlichung der Existenz eines minimalen reziproken Gittervektors $\mathbf{G}_{\min} = 2\pi/d$. In (a) ist $\lambda = d/2$ und die ebene Welle hat den gleichen Wert auf allen Gitterpunkten. Dies trifft auch für (b) zu, wo $\lambda = \lambda_{\max} = d$. In (c) ist $\lambda = 2d$. Hier kann die ebene Welle nicht mehr auf allen Gitterpunkten den gleichen Wert haben.



$$|\mathbf{G}_{\min}| = \frac{2\pi}{\lambda_{\max}} = \frac{2\pi}{d}$$

direkter Raum

primitive Gittervektoren des Bravais-Gitters:
 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$

Ebenenschar: (hkl)

Normale auf Ebenenschar

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

äquivalente Bezeichnung: *Ortsraum*
 $[R] = \text{cm}$

reziproker Raum

primitive Gittervektoren des reziproken Gitters:
 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$

Punkt im reziproken Gitter:
 $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + \ell\mathbf{b}_3$

Richtung von \mathbf{G}

Länge von \mathbf{G}_{\min} : $|\mathbf{G}_{\min}| = 2\pi/d$

äquivalente Bezeichnung: *k-Raum*
 $[k] = 1/\text{cm}$

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

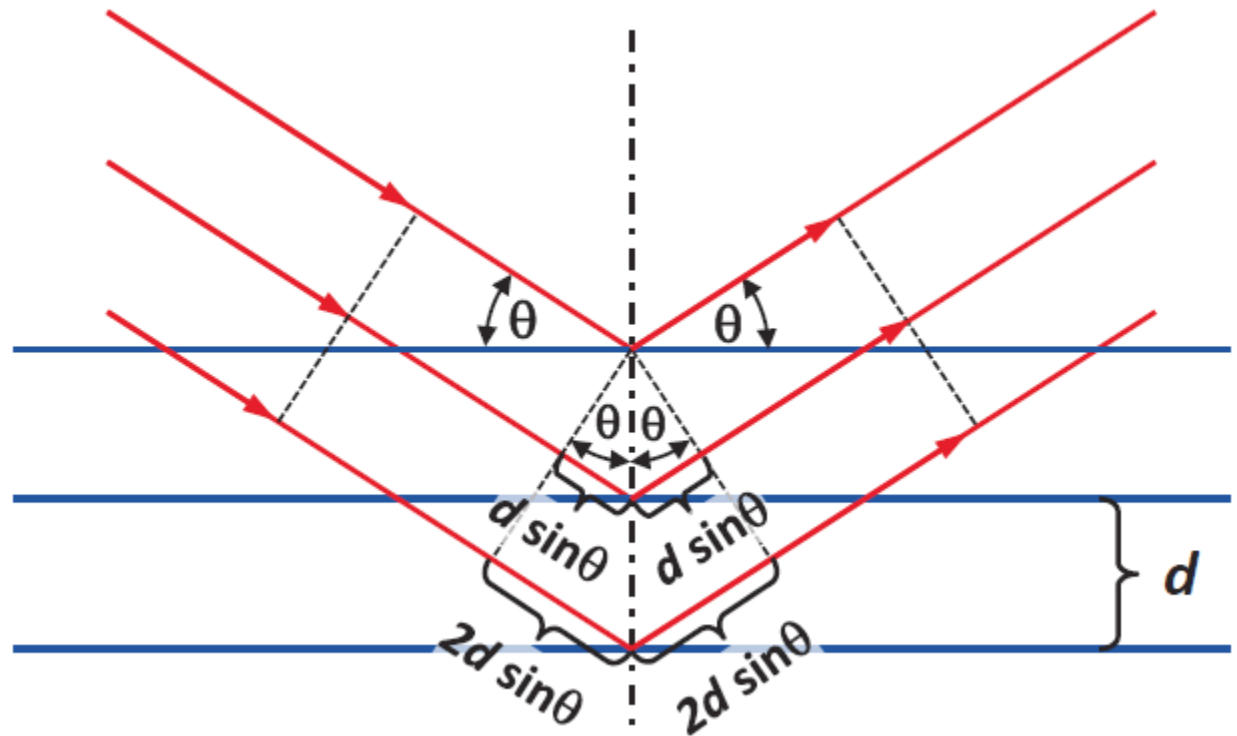
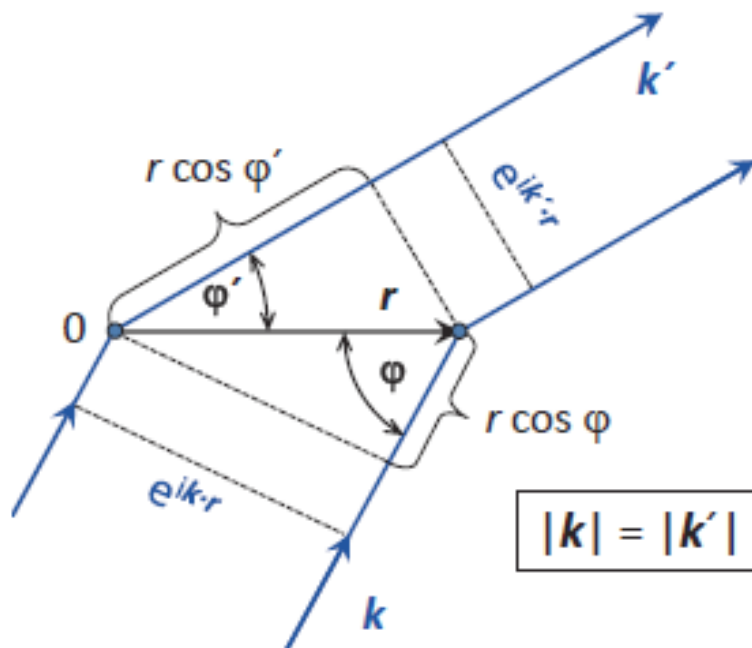


Abb. 2.7: Zur Ableitung der Bragg-Bedingung.

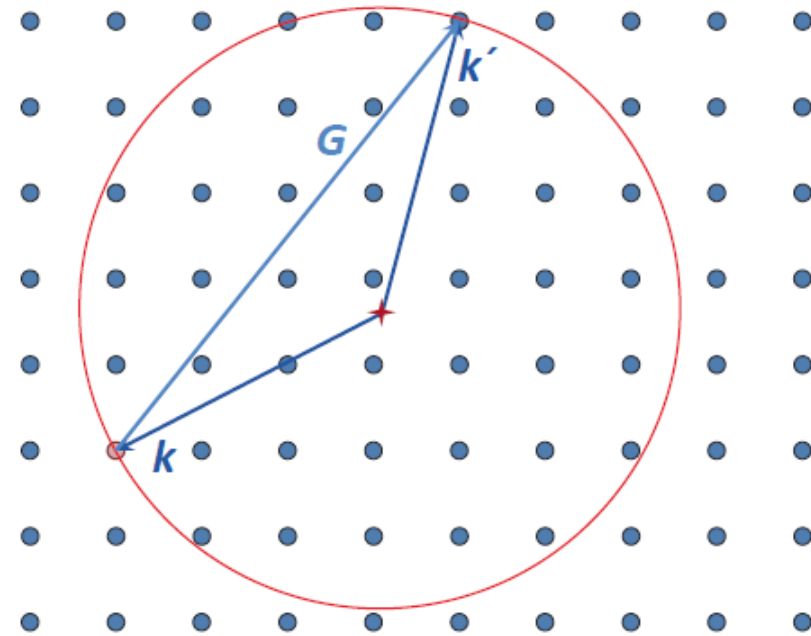
Der Satz \mathbf{G} der reziproken Gittervektoren bestimmt die möglichen Beugungsreflexe.



$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$$

Abb. 2.8: Zur Ableitung der von Laue Bedingung für konstruktive Interferenz bei der Streuung am dreidimensionalen Punktgitter.

Abb. 2.9: Darstellung der elastischen Streuung am Punktgitter anhand der Ewald-Kugel (Kreis im zwei-dimensionalen reziproken Raum). \mathbf{k} und \mathbf{k}' sind die Wellenvektoren der einlaufenden und der gestreuten Welle, $\mathbf{G} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ ist ein Vektor des reziproken Gitters.



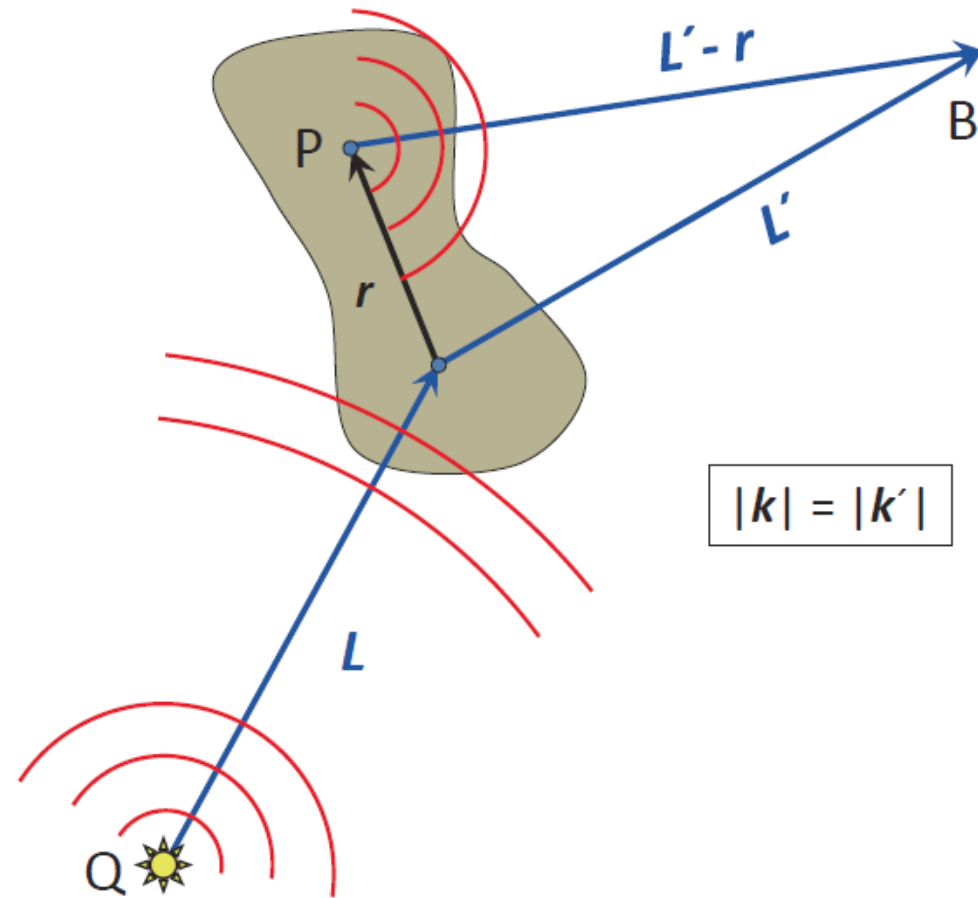


Abb. 2.12: Schematische Darstellung der Streuung: Die Quelle Q ist genügend weit von der zu untersuchenden Probe entfernt, so dass die bei der Probe ankommenden Kugelwellen als ebene Wellen approximiert werden können. Das gleiche gilt für den Beobachtungspunkt B .

Bei der Strukturanalyse mittels Beugungsmethoden kann die Form und die Abmessungen der Einheitszelle aus der Lage der Röntgenreflexe bestimmt werden. Der Inhalt der Einheitszelle, also die Basis, muss dagegen aus den Intensitäten der Reflexe bestimmt werden.

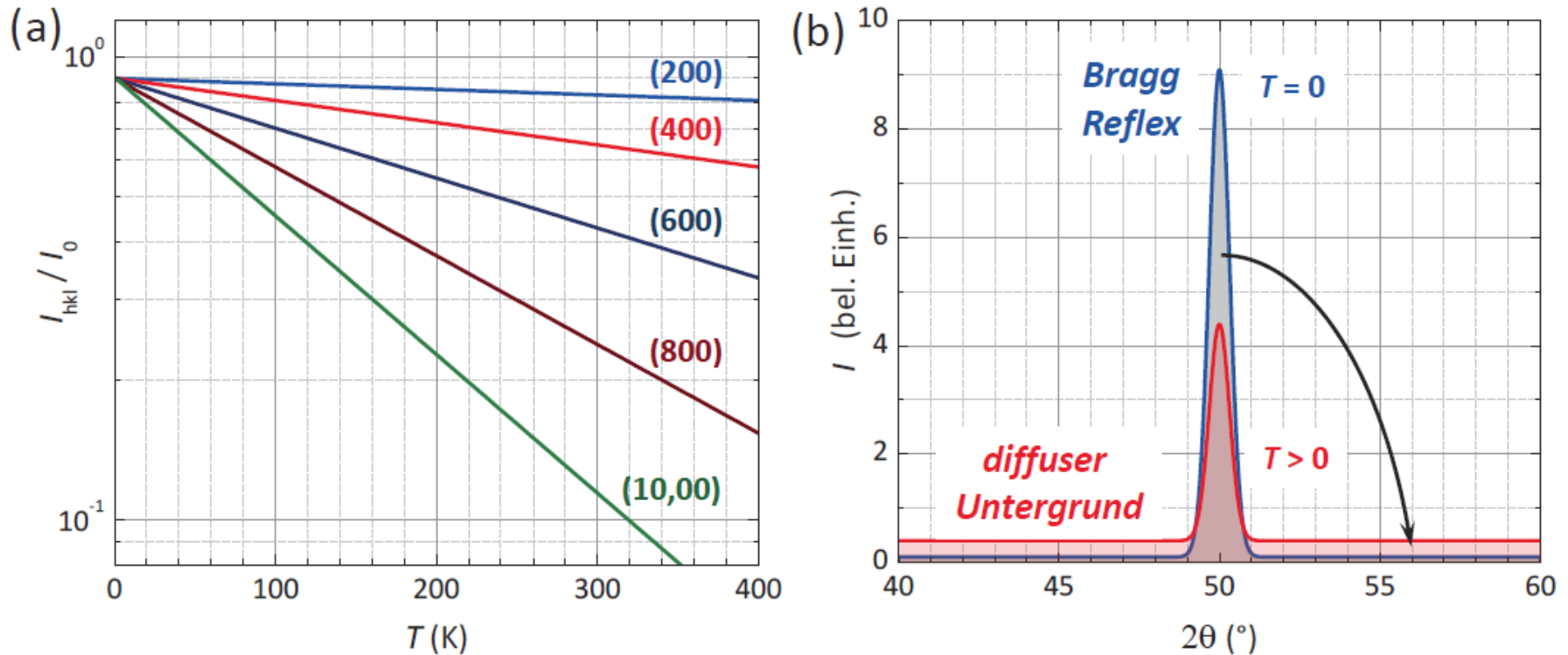


Abb. 2.15: (a) Abnahme der elastischen Streuintensität mit zunehmender Temperatur und zunehmendem $h + k + \ell$. Die Kurven wurden nach (2.2.64) für $M\omega^2/G^2 = 2 \times 10^{-19} \text{ J}$ berechnet. In (b) ist die Umverteilung der elastischen Streuintensität aus dem Bragg-Reflex in einen inelastischen Untergrund bei Erhöhung der Temperatur veranschaulicht.

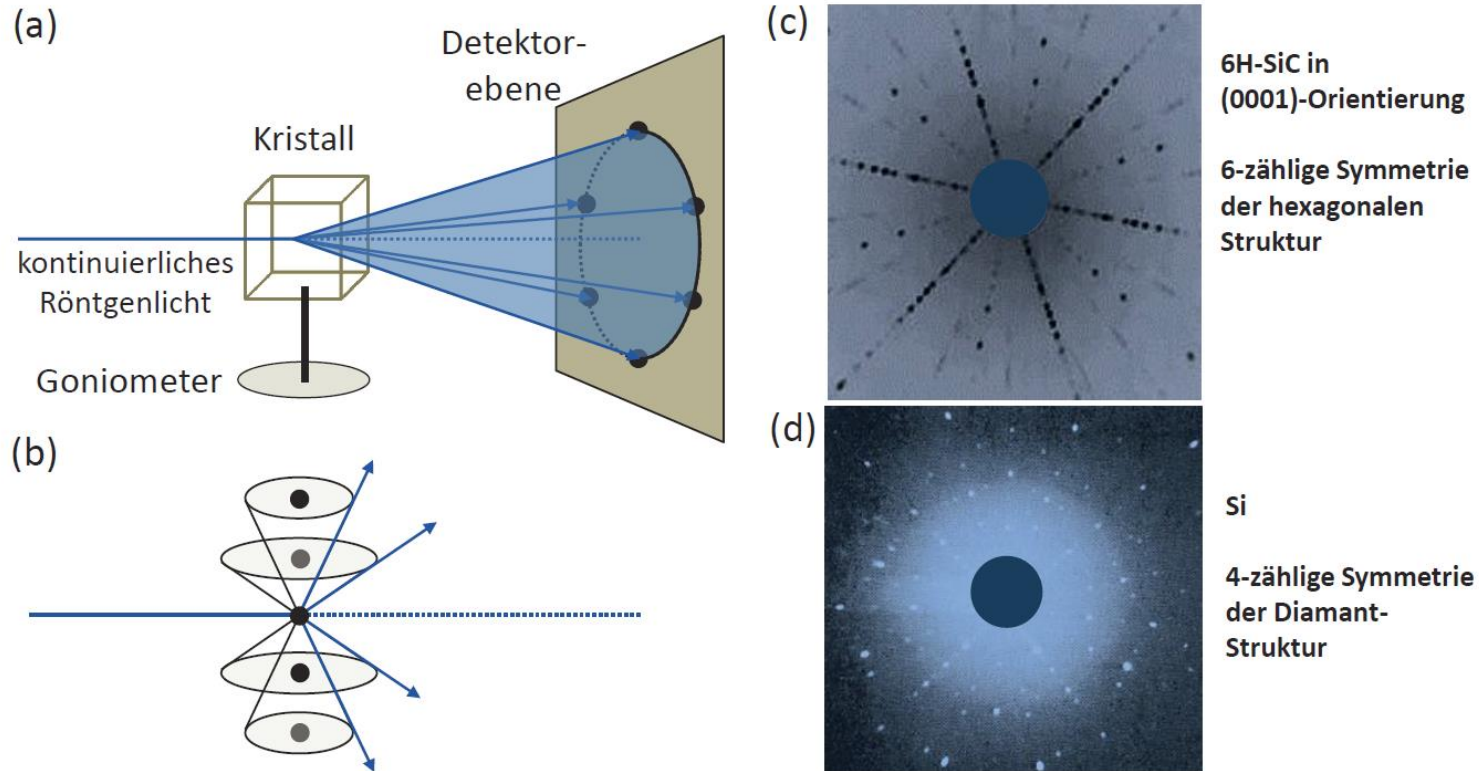


Abb. 2.19: (a) Schematische Darstellung des Laue-Verfahrens. (b) Zur Veranschaulichung der Entstehung des Punktgitters bei Laue-Verfahren. (c) Laue-Aufnahme von 6H-SiC in (0001)-Orientierung. Man erkennt die 6-zählige Symmetrie der hexagonalen Struktur. (d) Laue-Aufnahme eines Si-Kristalls (4-zählige Symmetrie des Diamantgitters).

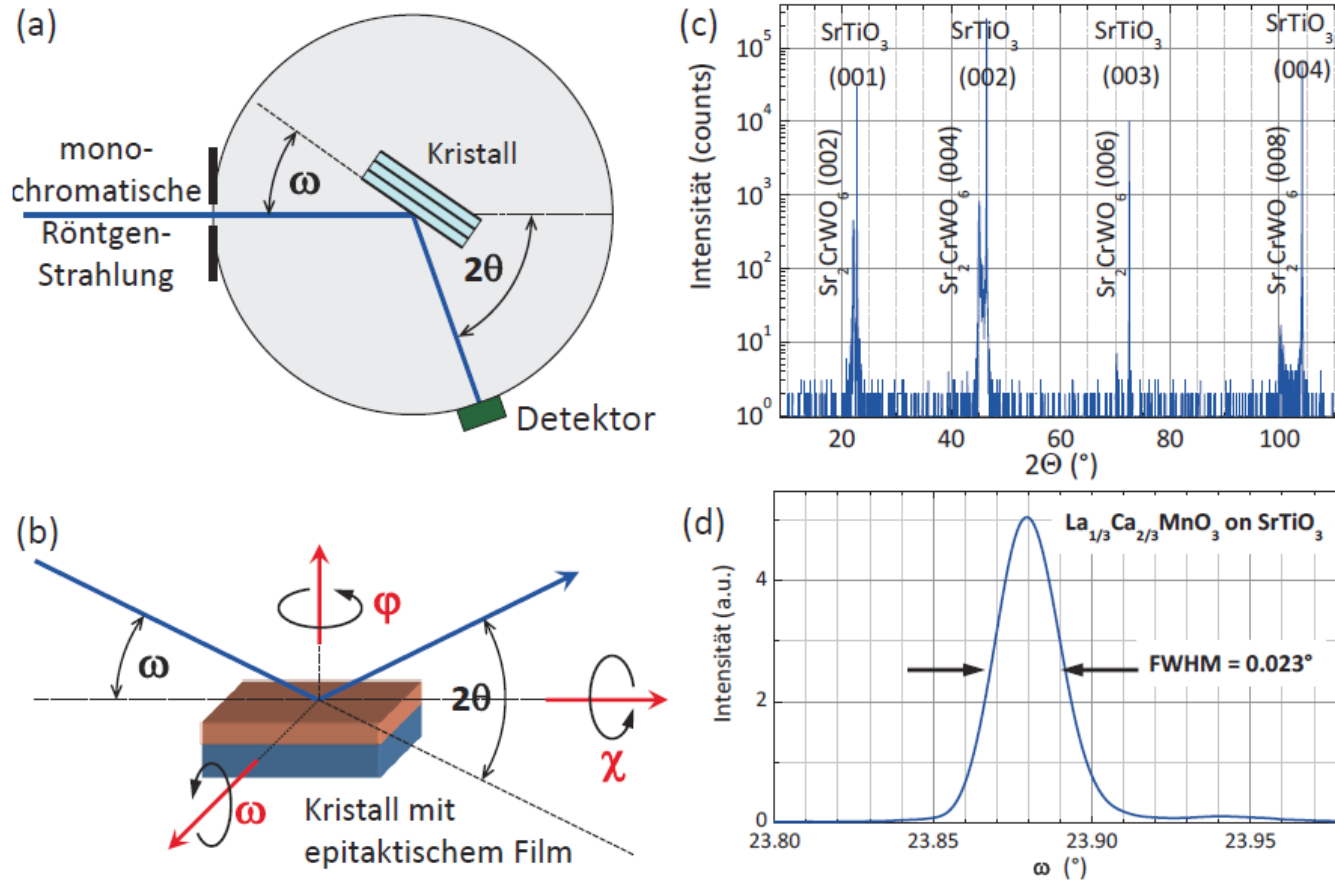


Abb. 2.20: (a) Schematische Darstellung des Drehkristall-Verfahrens. (b) Drehachsen bei einem Vierkreis-Diffraktometer. (c) Röntgenspektrum eines (001) orientierten Sr_2CrWO_6 -Films auf einem (001) SrTiO_3 -Einkristall. Im Spektrum sind wegen der Orientierung von Film und Substrat nur (00 ℓ)-Reflexe enthalten. Die c -Achse von Sr_2CrWO_6 ist etwa doppelt so groß wie diejenige von SrTiO_3 , weshalb die Röntgen-Reflexe sehr nahe beieinander liegen. Für Sr_2CrWO_6 sind die (00 ℓ) mit ungeradzahligem ℓ ausgelöscht. (d) Rocking-Kurve des (002) Reflexes eines epitaktischen $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$ Films, der auf einem einkristallinen SrTiO_3 Substrat aufgewachsen wurde.

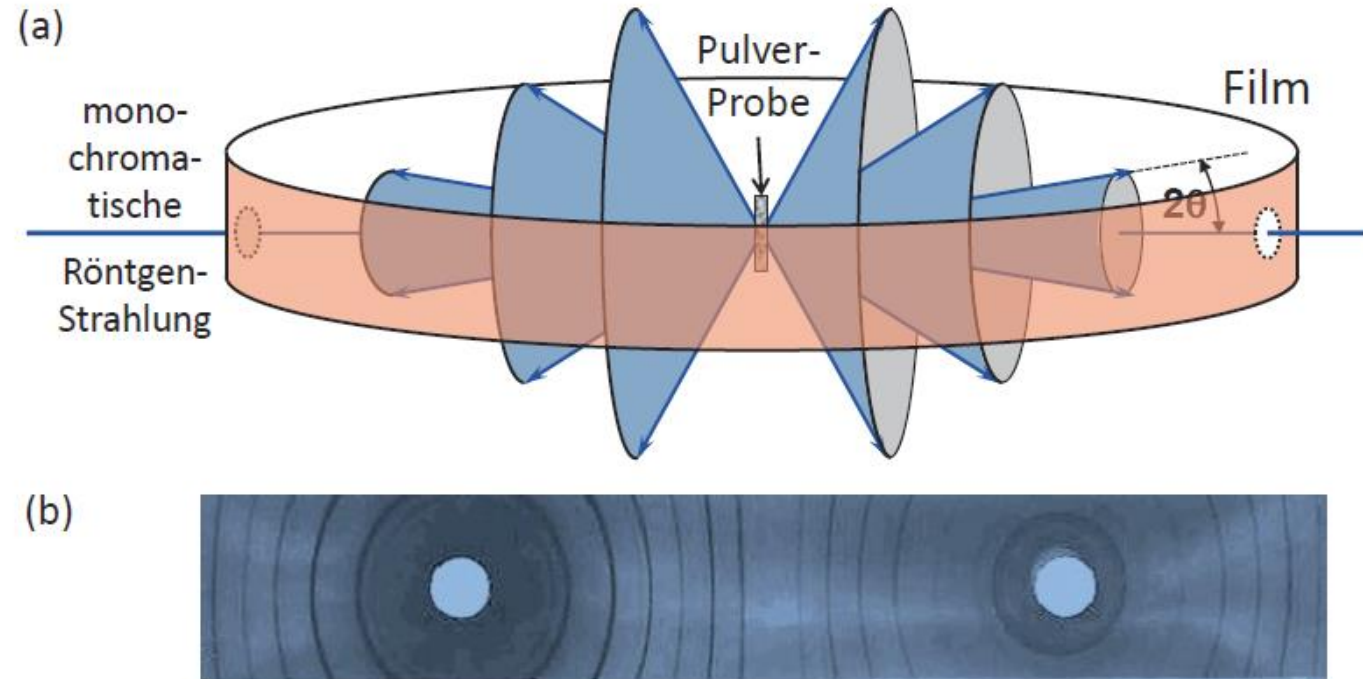


Abb. 2.21: (a) Schematische Darstellung des Debye-Scherrer-Verfahrens. (b) Typische Debye-Scherrer-Aufnahme.

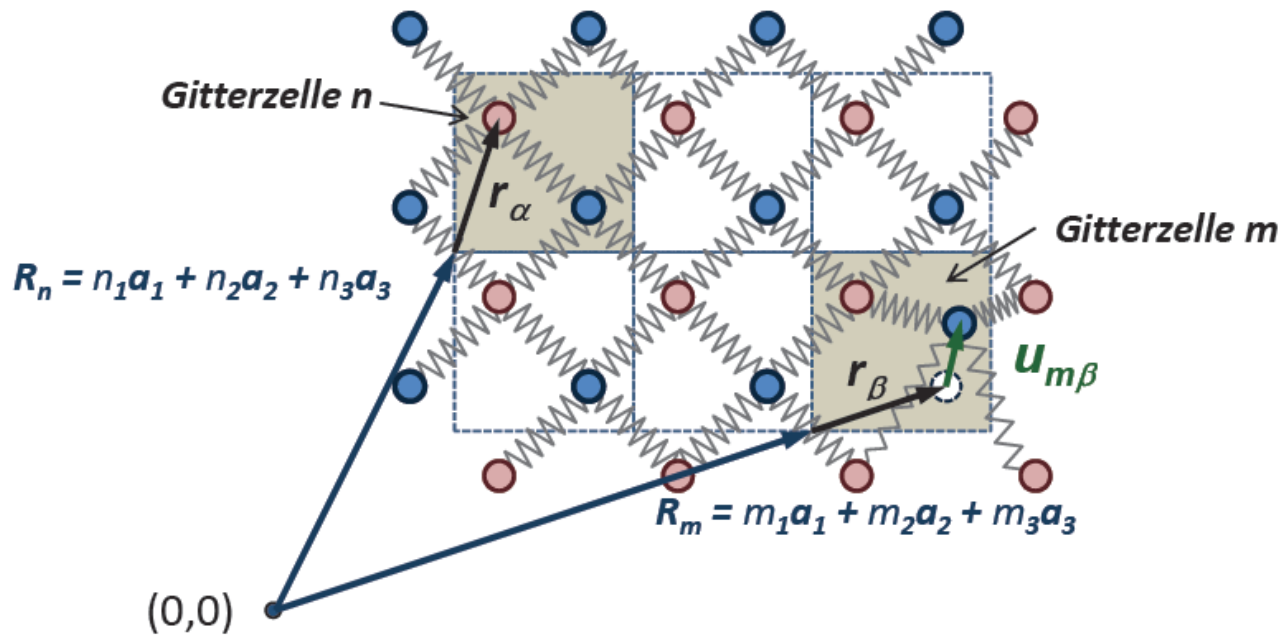
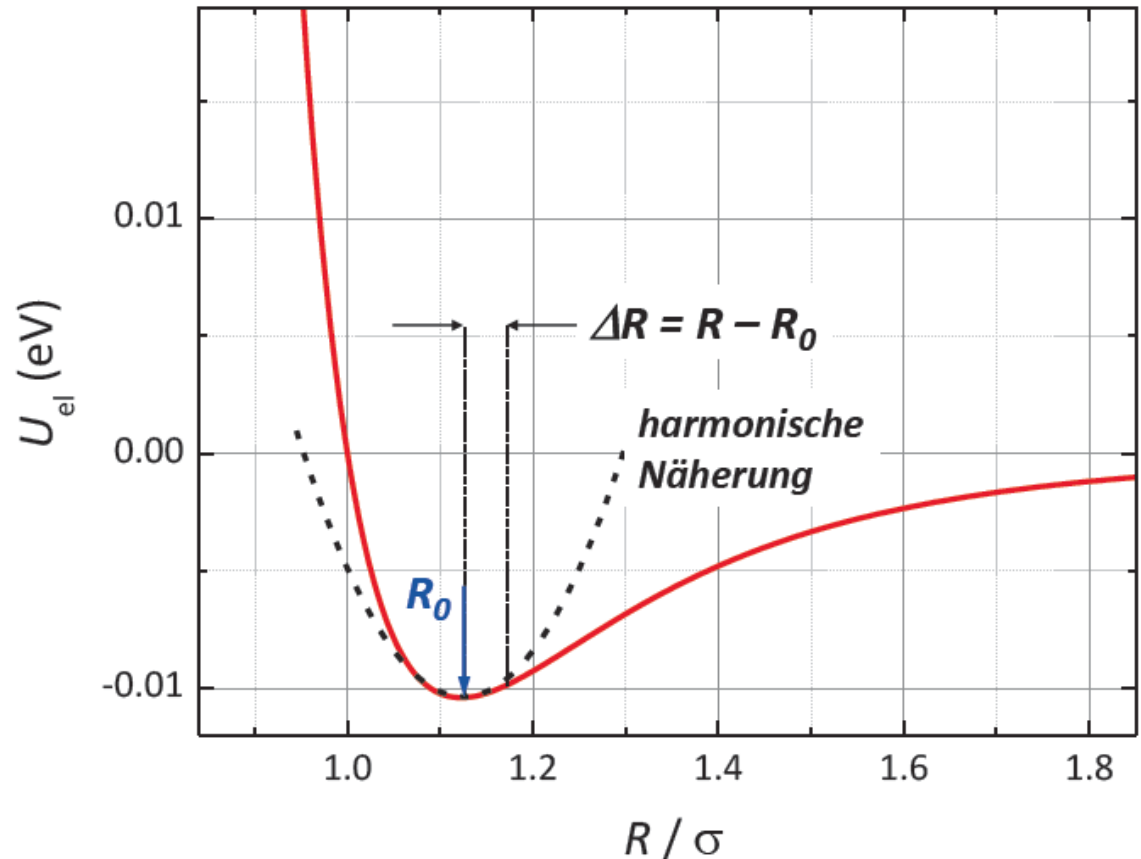


Abb. 5.3: Zweidimensionales Gitter mit zweiatomiger Basis. Die Auslenkung des Atoms β in der Gitterzelle m um $\mathbf{u}_{m\beta}$ resultiert über das Federnetzwerk in einer Kraft $\mathbf{F}_{n\alpha}$ auf das Atom α in der Gitterzelle n . Die Größe der Kraft wird durch die Kopplungskonstanten $C_{n\alpha}^{m\beta}$ bestimmt. Zur Berechnung der effektiven Gesamtkraft auf das Atom α in der Zelle n muss über alle Kraftkomponenten durch die Auslenkungen der Atome in allen anderen Gitterzellen aufsummiert werden.

Abb. 5.1: Zur adiabatischen und harmonischen Näherung. Gezeigt ist die Potenzialkurve für eine Van-der-Waals-Wechselwirkung von zwei Atomen (durchgezogene Linie) und die harmonische Näherung (gestrichelte Linie).



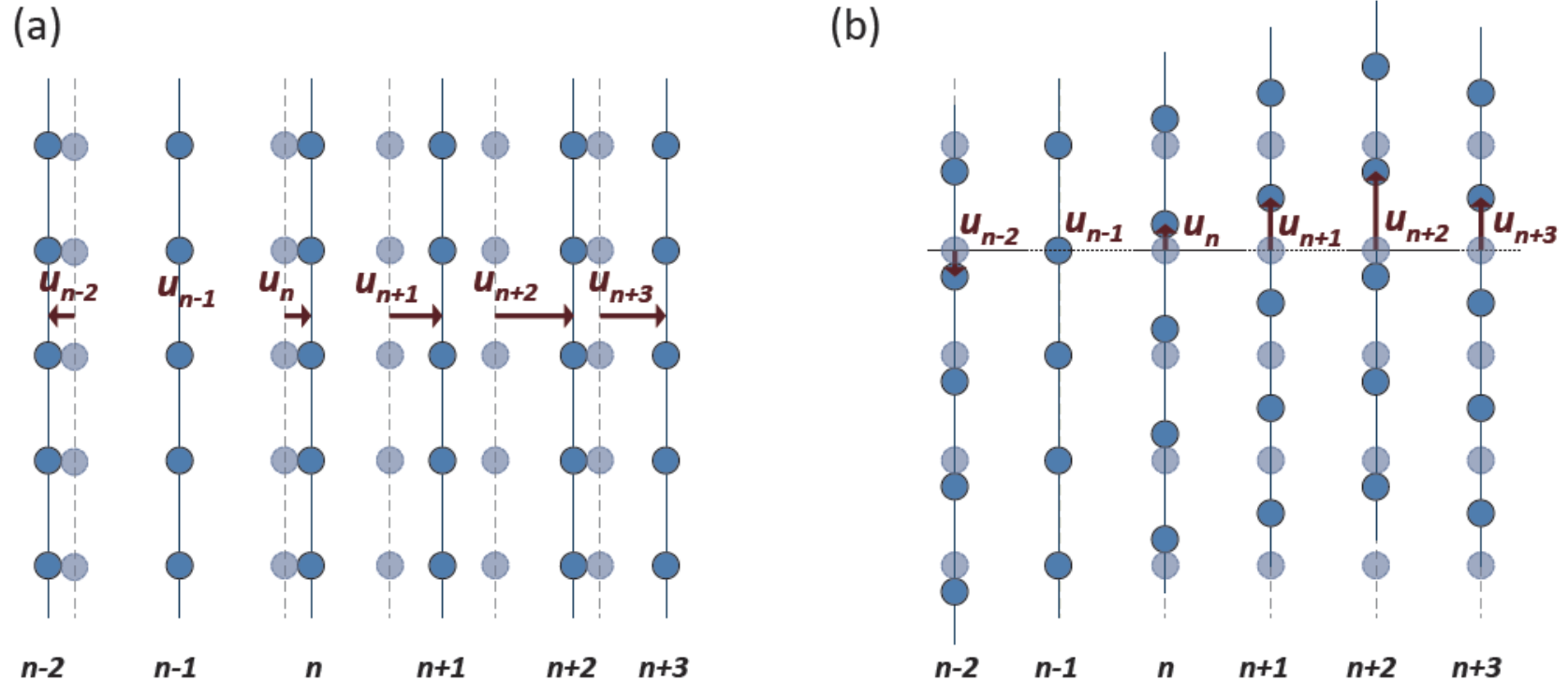


Abb. 5.4: Schematische Darstellung der Auslenkung der Netzebenen bei einer longitudinalen (a) und transversalen Gitterschwingung (b). Die gestrichelten Linien geben die Gleichgewichtslage, die Pfeile die Auslenkung an.

Abb. 5.5: Dispersionsrelation der Gitterschwingungen für ein Kristallgitter mit einatomiger Basis.

