

### 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                           |                 | Reziprokes Gitter zur Beschreibung der Beugung von (Röntgen-)Strahlen |
|       | III.2.1 Fourier-Reihen                                      |                 |   |
|       | III.2.2 Konstruktion reziproker Gittervektoren $\mathbf{G}$ |                 |   |
| III.3 | Brillouinzenen = Wigner-Seitz-Zellen des rez. Gitters       |                 |   |
| III.4 | Beugungstheorie (i): Grundlagen                             |                 | Beschreibung vieler anderer Eigenschaften, insb. Anregungen           |
|       | II.4.1 Kugelwellen der Streuzentren                         |                 |   |
|       | II.4.2 Eigenschaften des Streusignals                       |                 |   |
|       | II.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                       |                 |   |

# III.1 Beugung am Kristall: Bragg-Bedingung

Ziel: Bestimmung von Kristallsymmetrie und Gitterkonstanten

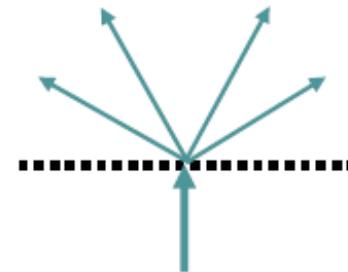
Röntgenbeugung am Kristall ~ Optik: Beugung am Gitter (Interferenz!)

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

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

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

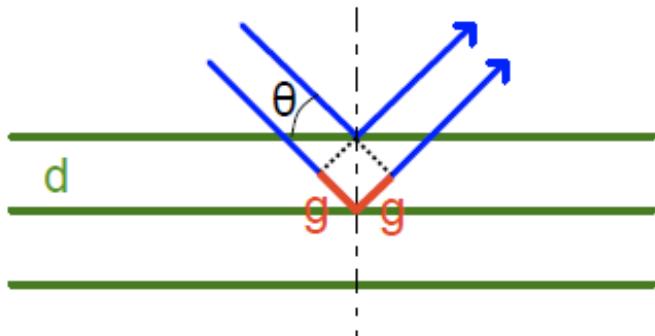
$$E = h \cdot v \approx 4\text{ keV}$$



erfolgreiches Modell: (nicht ganz exakt)

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

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



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

2. Interferenzschärfe  $\sim$  Anzahl N der Ebenen  
 $\sim$  Eindringtiefe / d

**2 d sin θ = n · λ      Bragg-Gleichung**

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

# Vergleich von Röntgenstrahlung, Elektronen und Neutronen

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

Kriterien für Beugung:

	Rö-Str.	Elektronen	Neutronen
(i) passendes $\lambda$ (< 2 · 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
→ 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**  $\rho(r)$  i. a. komplex: Realteil beschreibt **Streuung**  
Imaginärteil beschreibt **Absorption**

im periodischen Gitter:  $\rho(r) = \rho(r + T)$  Translationsvektor  $T = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$

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

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

periodische Funktion = Summe über Fourierkomponenten

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cdot \cos(nk_0 x) + B_n \cdot \sin(nk_0 x)$$

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

$k_0$  = Grundfrequenz,  $n k_0$  = höhere Harmonische

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

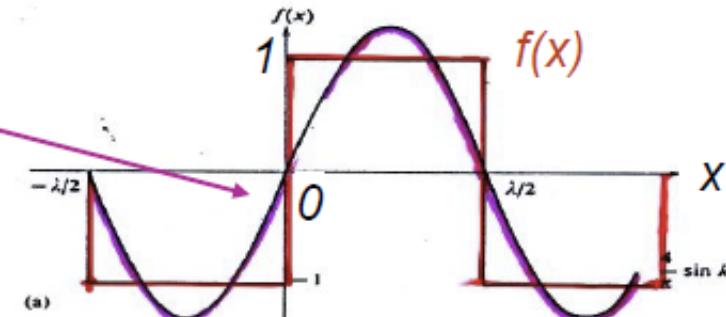
$$A_n = \frac{1}{2\pi} \int f(x) \cdot \cos(nk_0 x) dx, \quad B_n = \frac{1}{2\pi} \int f(x) \cdot \sin(nk_0 x) dx$$

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

1. Fourier-Funktion:

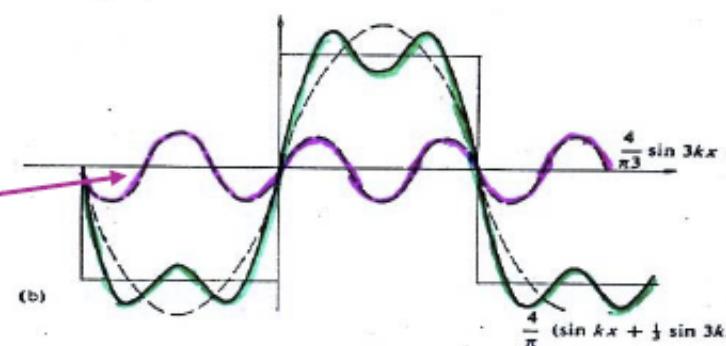
$$4/\pi \cdot \sin kx$$

$$\text{d.h. } B_1 = 4/\pi$$



2. Fourierkoeffizient

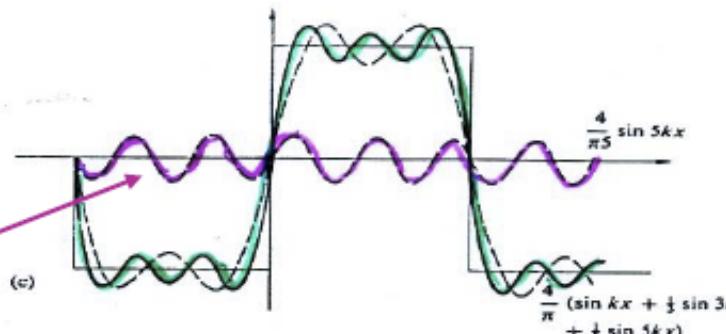
$$B_2 = 0$$



3. Fourier-Funktion:

$$4/(3\pi) \cdot \sin 3kx$$

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



4. Fourierkoeffizient

$$B_4 = 0$$

5. Fourier-Funktion:

$$4/(5\pi) \cdot \sin 5kx$$

etc.

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

Darstellung einer periodischen, ungeraden Rechteckfunktion  
(ungerade  $\Leftrightarrow$  alle  $A_n = 0$ )

# 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  $|k| = k$

$\rho_n$ : 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:  $\rho(\mathbf{r}) = \sum_G \rho_G \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$   $\rho_G$ : Fourier-Koeffizienten

**NEU:**  $\mathbf{G}$  ≡ Schar von Vektoren = 3-dim. Laufindex (vgl. 1-dim:  $n = 1 \dots \infty$ )  
und Periodizitätsmaß. (vgl. 1-dim:  $1/a$ )  
= "Raster" ≡ 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:  $\mathbf{g}_i \perp \mathbf{a}_{j \neq i}$

$$g_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V}$$

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

$\angle(\mathbf{g}_i, \mathbf{a}_i)$  = Winkel zwischen  $\mathbf{g}_i$  und  $\mathbf{a}_i$

$$g_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{V}$$

V: Spatprodukt = Volumen der Einheitszelle

eindeutige Beziehung des reziproken zum realen Gitter

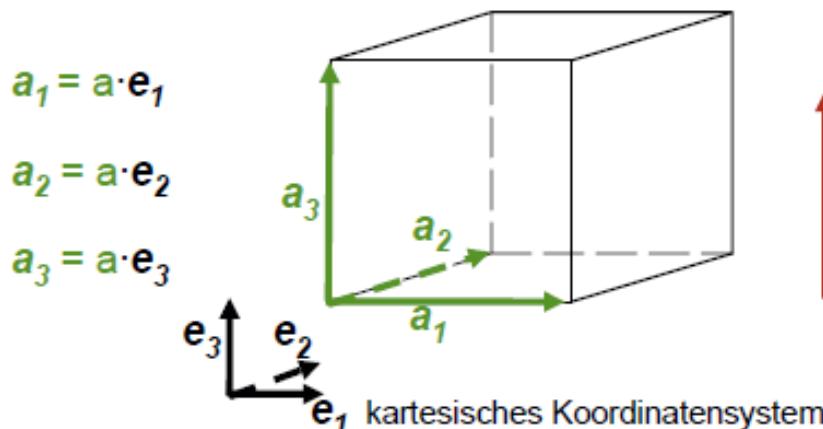
$$g_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{V}$$

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

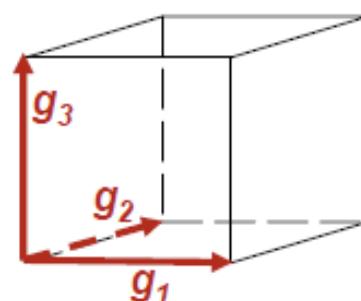
## Bsp. für reziproke Gitter

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

reales Gitter: kubisch primitiv



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

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

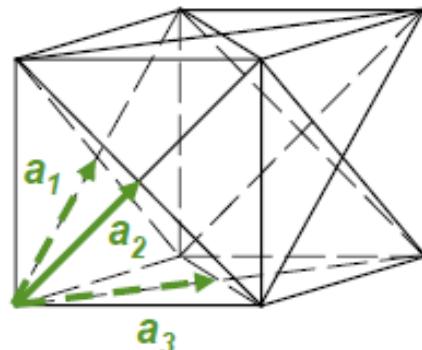
[011] Richtung

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

[101] Richtung

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

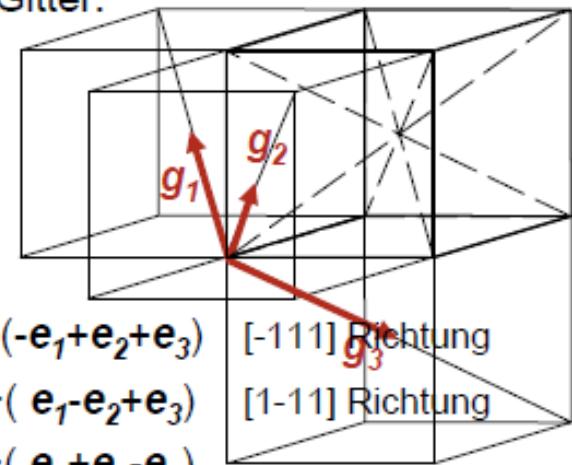
[110] Richtung



Primitive EZ verwenden !!!

reziprokes Gitter:

bcc



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

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

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

### 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	Reziproker Raum
	Längeneinheit [m]	[1/m]
	Wigner-Seitz-Zelle	Brillouinzone (BZ)
auch: Fourier-Raum oder k-Raum		

#### Konstruktionsvorschrift Brillouin-Zone:

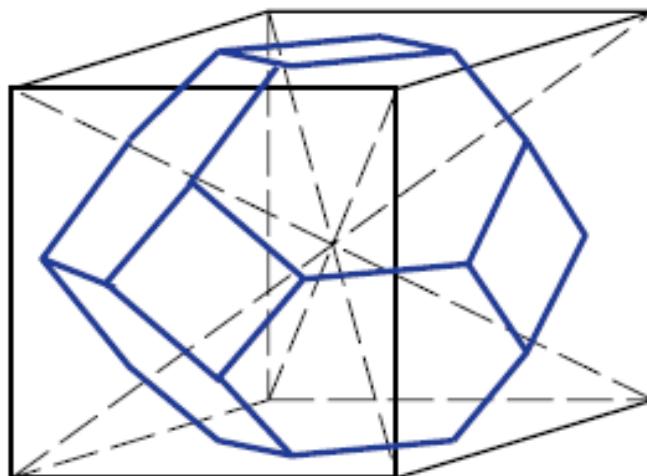
- Bilde reziprokes Gitter mittels primitiver Basis.
- Bilde mittelsenkrechte Ebenen der reziproken Gitterpunkte.
- Kleinstes eingeschlossenes Volumen (kleinstes Polyeder) = Brillouin-Zone

## Bsp. für Brillouinzone

reales Gitter: fcc

→ reziprokes Gitter bcc  
(siehe 2.2.2)

→ BZ= Wigner-Seitz-Zelle bcc:  
(siehe 1.2.4)



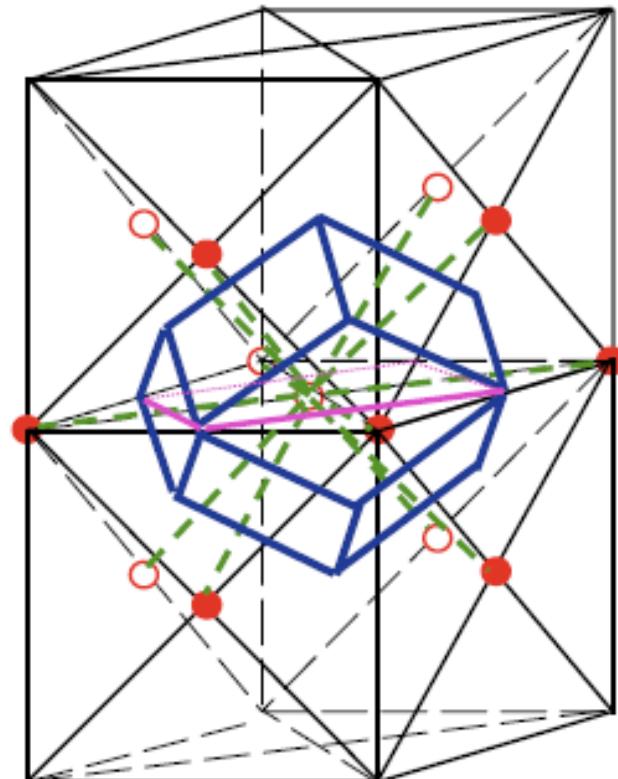
Bsp: Au, Ag, Cu  
Diamant,  
Zinkblende

reales Gitter: bcc

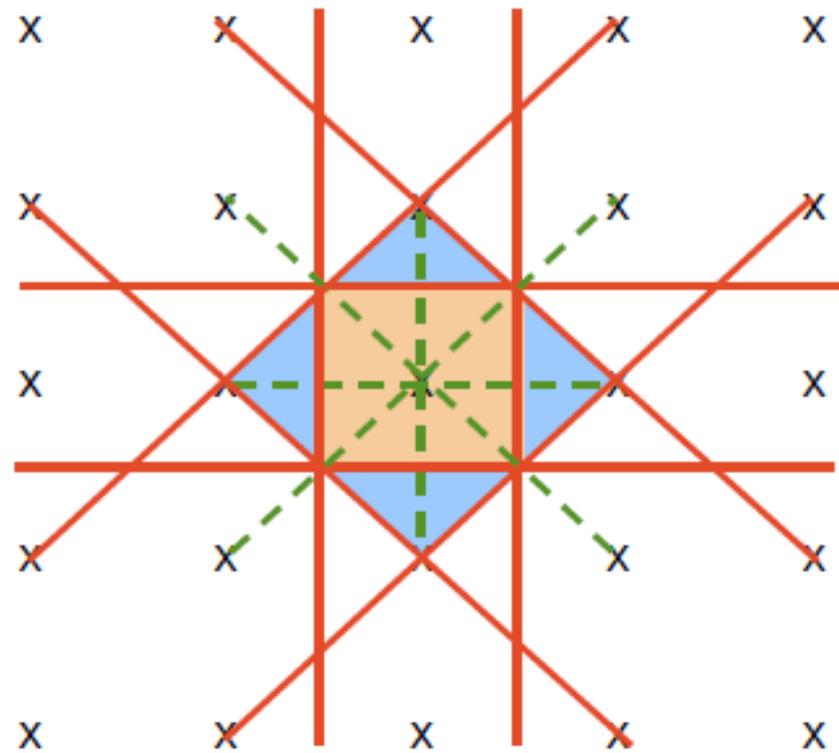
→ reziprokes Gitter fcc

→ BZ= Wigner-Seitz-Zelle fcc:

12 gleichförmige Flächen



## Höhere Brillouinzenen



Konstruktionsverfahren:

**Alle Mittelsenkrechten** zeichnen

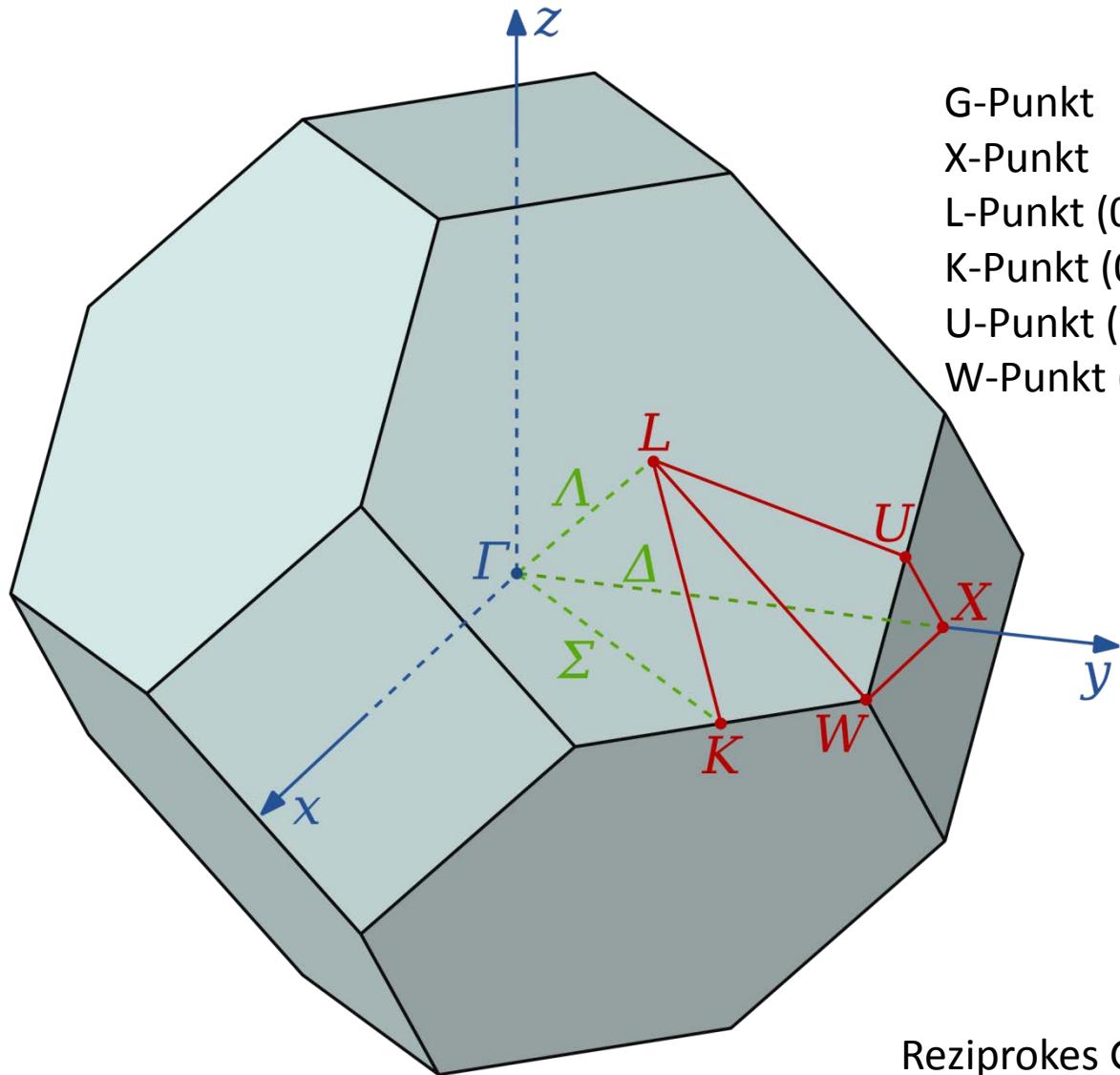
Innerster Bereich = 1. BZ

2. Bereich = 2. BZ

Kriterium:

„Wie viele Mittelsenkrechte müssen auf dem Weg vom zentralen Gitterpunkt zum Zielpunkt überquert werden?“

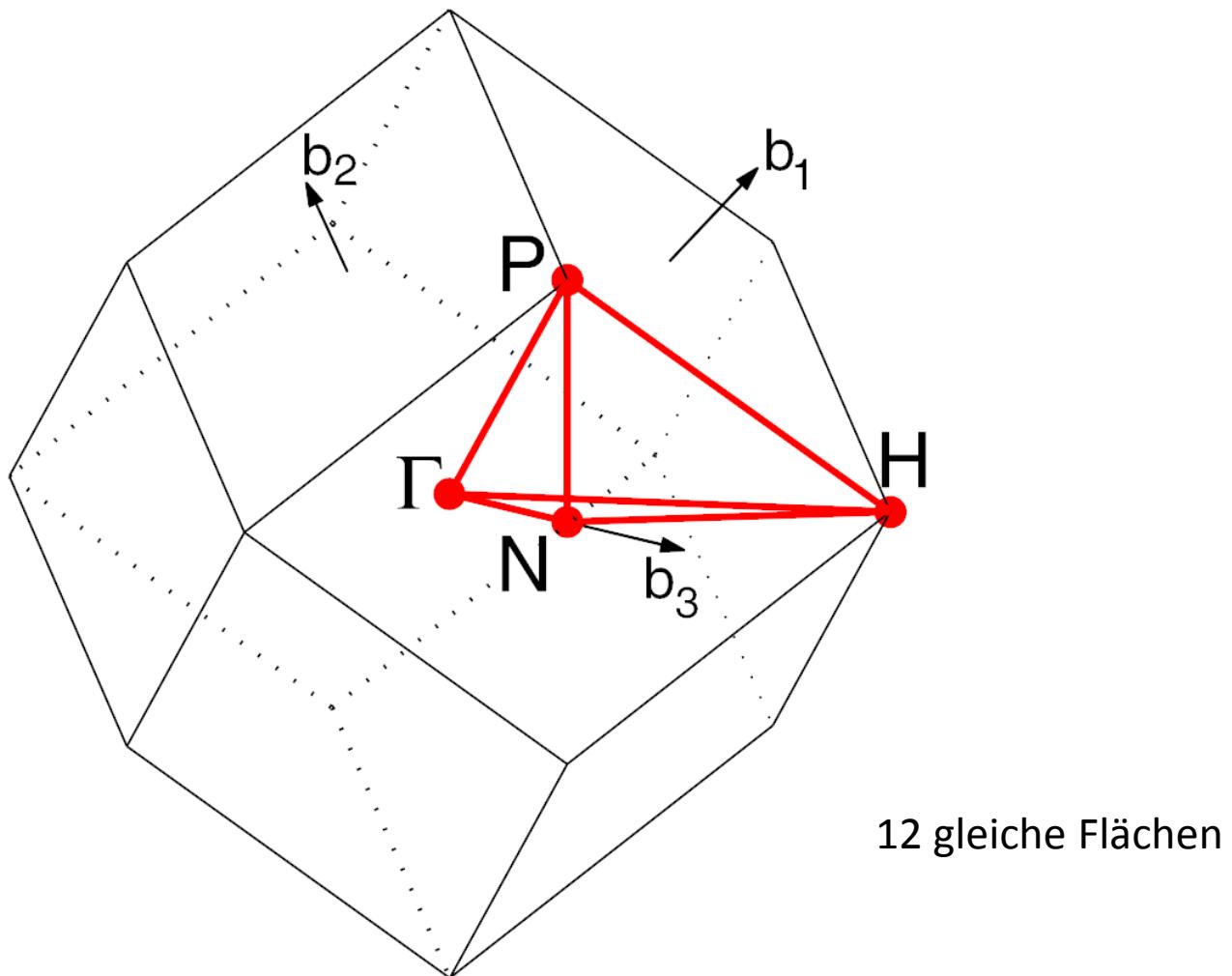
# Hochsymmetrische Richtungen in der ersten Brillouinzone (fcc)



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)

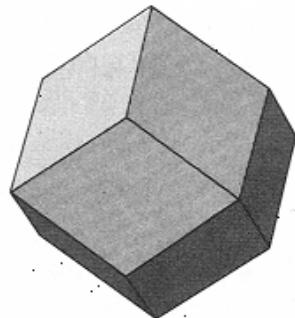
Zentrum  
[010] Achse  
{111} Achse  
[110] Achse

# Erste Brillouin Zone bcc

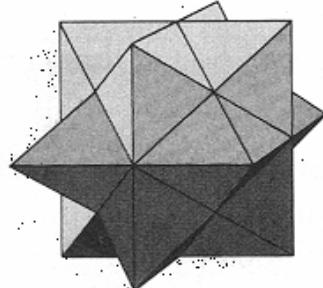
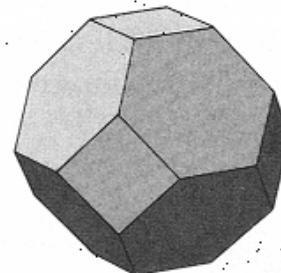


BCC path:  $\Gamma\text{-H-N-}\Gamma\text{-P-H|P-N}$

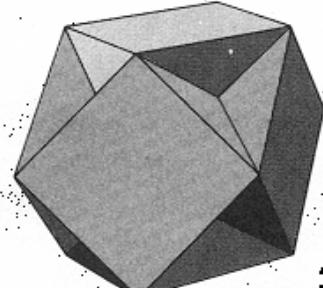
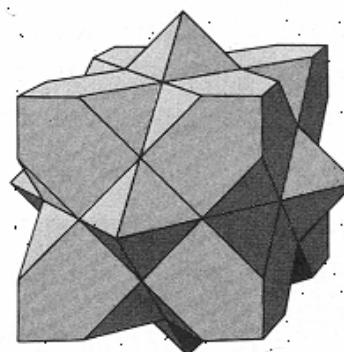
# Höhere Brillouin Zonen



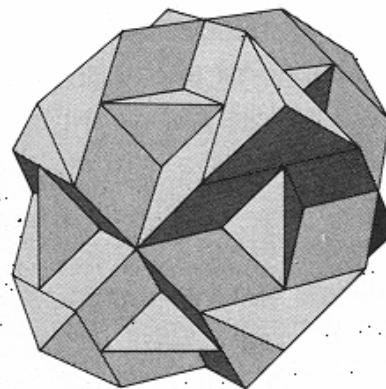
1. BZ



2. BZ



3. BZ

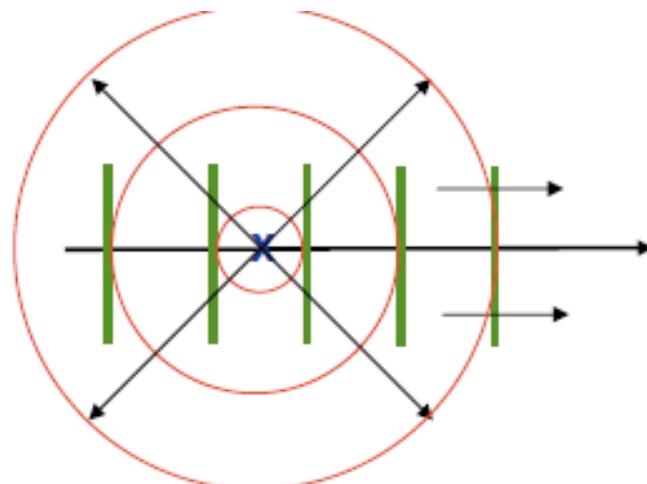


bcc

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

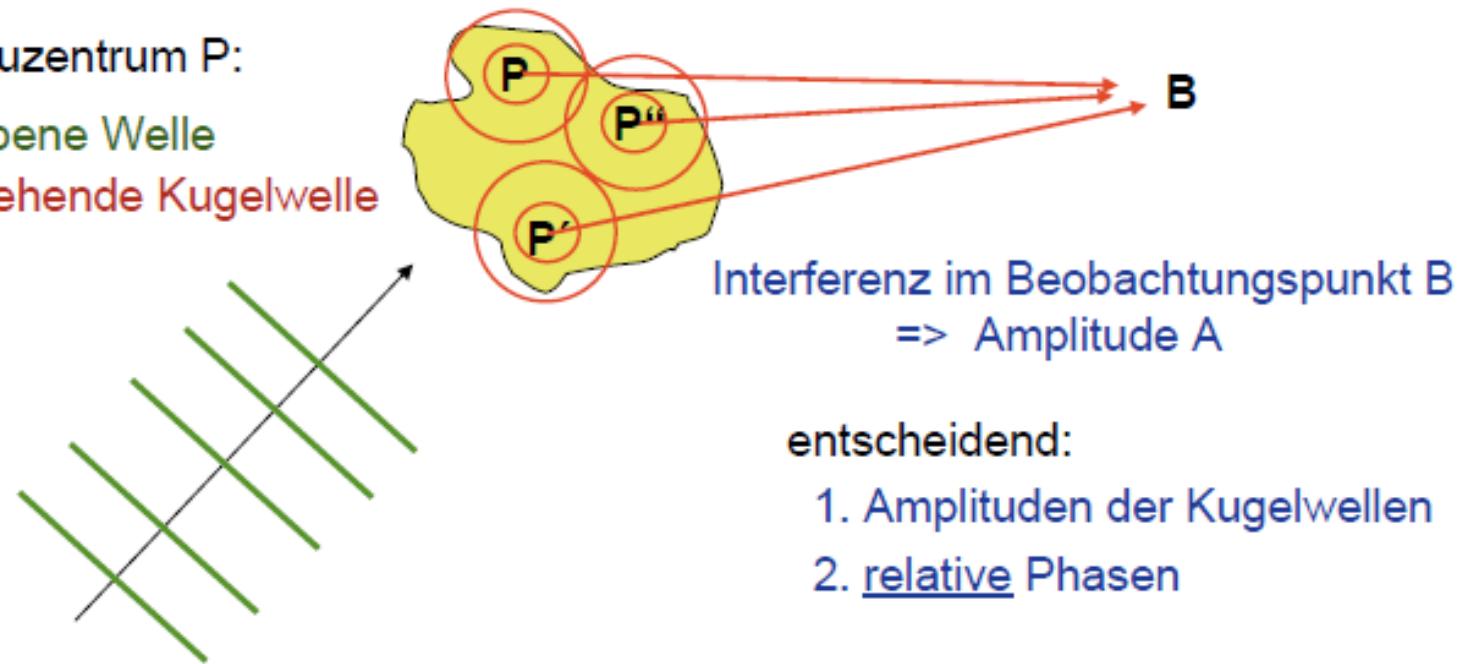
Gegenbeispiel: Elektronen ( kinematische Theorie ist nur für Teilbereiche,  
nicht für eine vollständige Beschreibung ausreichend. )

### III.4.1 Kugelwellen der Streuzentren (i) qualitativ

in jedem Streuzentrum P:

einfallende ebene Welle

erzeugt **ausgehende Kugelwelle**



entscheidend:

1. Amplituden der Kugelwellen
2. relative Phasen

Erzeugung der Kugelwellen: erzwungene Schwingung der Elektronen

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

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

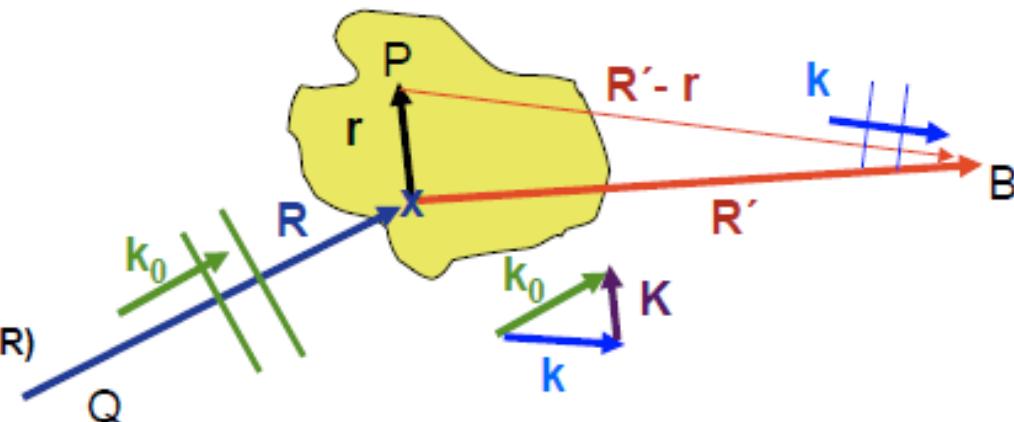
Ortsvektoren:

Rö-Quelle  $Q$  = Ursprung

Bezugspunkt  $x$  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:  $\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{T})$

Dreidim. Fourier-Ansatz:  $\rho(\mathbf{r}) = \sum_G \rho_G \exp(iG \cdot \mathbf{r})$  ρ<sub>G</sub>: Fourier-Koeffizienten  
 $\mathbf{G} = h \mathbf{g}_1 + k \mathbf{g}_2 + l \mathbf{g}_3$

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

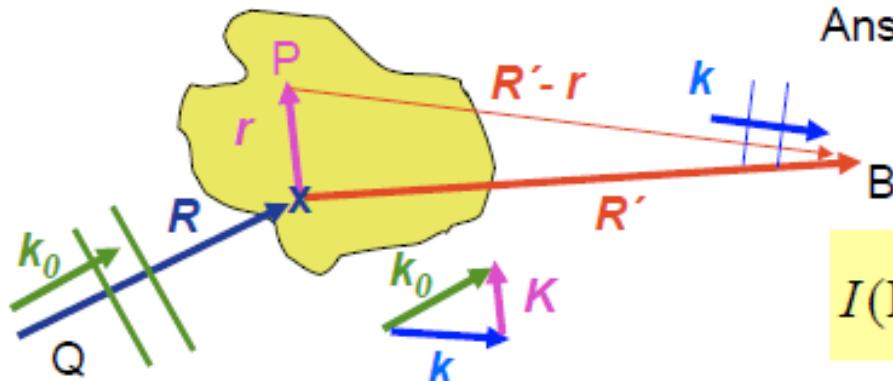
⇒ Allg. Bedingung für Basis  $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$  des reziproken Gitters:  $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

⇒ Konstruktionsvorschrift für  $\mathbf{g}_i$ :  $\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V}$  etc.

Richtung:  $\mathbf{g}_i \perp \mathbf{a}_{j \neq i}$  Länge:  $|\mathbf{g}_i| = 2\pi / (\mathbf{a}_i \cos \angle(\mathbf{g}_i, \mathbf{a}_i))$  ( $\angle(\mathbf{g}_i, \mathbf{a}_i)$  = Winkel zwischen  $\mathbf{g}_i$  und  $\mathbf{a}_i$ )

## Grundlagen der (kinematischen) Beugungstheorie

Kugelwellen, ausgehend von den Streuzentren P



Ansatz für Amplitude  $A_B(\mathbf{R}', t)$  am Ort B  
Integration über den Streubereich  
Betragssquadrat => Intensität

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

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

# Zusammenfassung: kinematische Beugungstheorie

Lit.: Ibach-Lüth

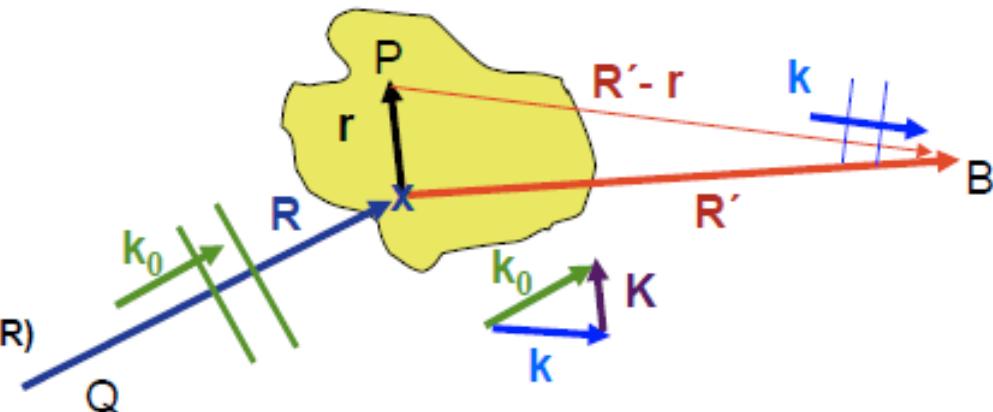
## Ortsvektoren:

Rö-Quelle  $Q$  = 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  $\rho(r)$

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

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

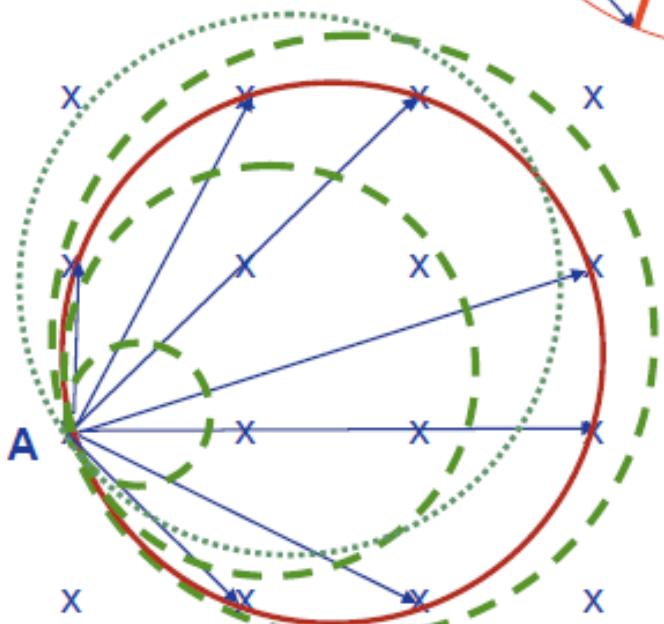
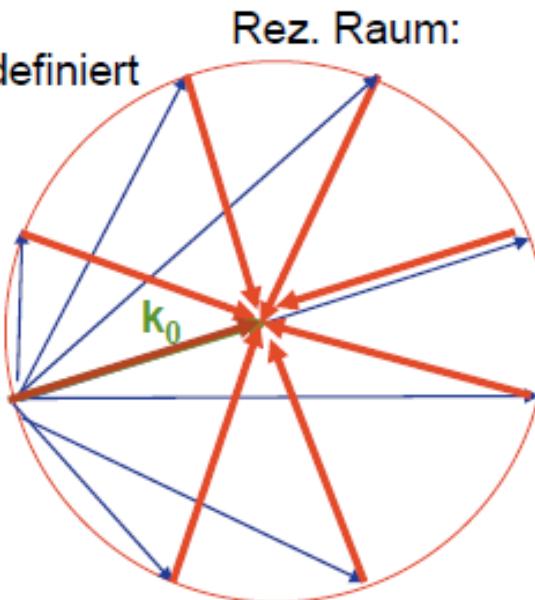
also nur bei bestimmten Streuwinkeln

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

# Ewaldkugel

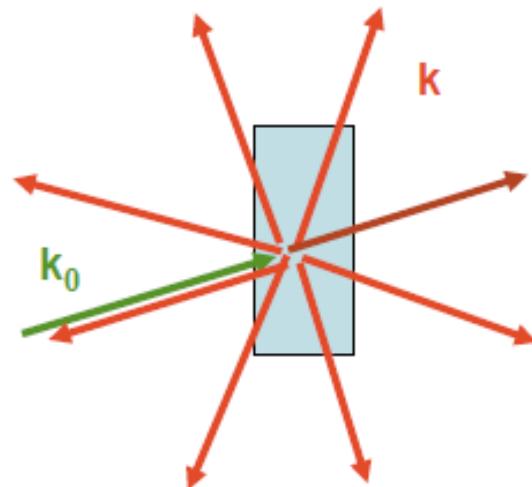
## Konsequenzen für Experiment

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



Rez. Raum:

Experiment im Ortsraum:

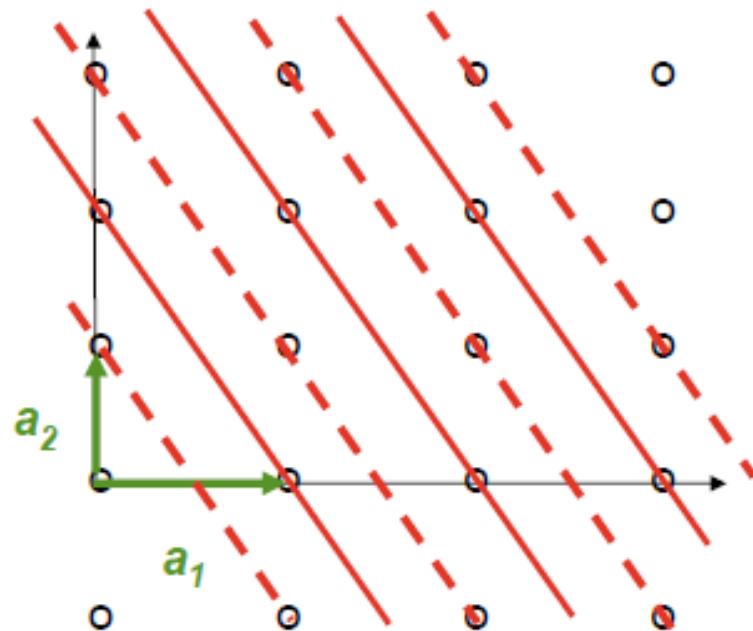


- (ii) Beugungsbedingung wird nur für bestimmte  $k_0$ -Vektoren (d.h. bestimmte Wellenlängen und Einfallsrichtungen) erreicht.  
im **Allgemeinenfall: keine Beugungsspeaks**

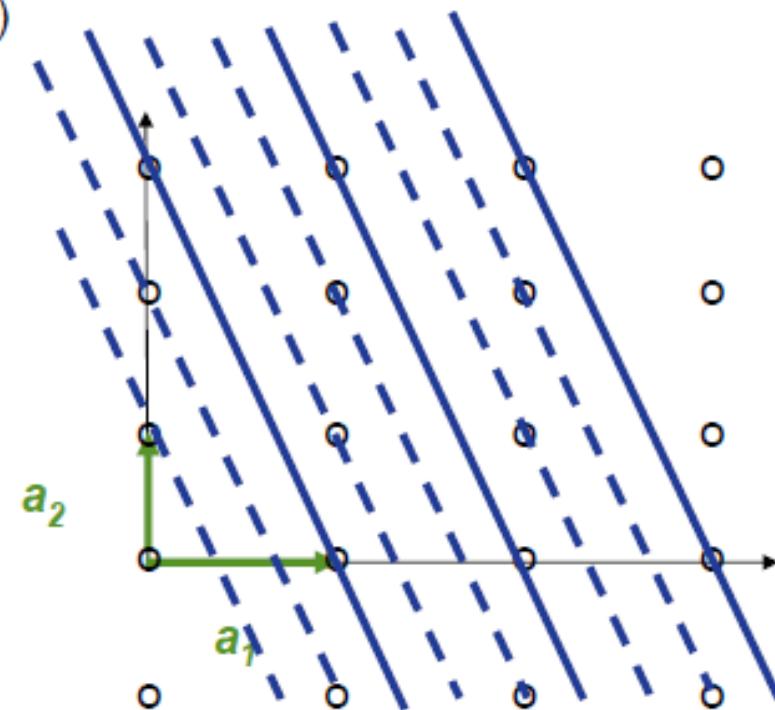
Abhilfen: 1. Variation des Einfallswinkels  
2. Variation der Rö-Wellenlänge (Synchrotronstrahlung)  
3.  $\lambda$ -Kontinuum (Bremsstrahlung)

## 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: $\times 3$		

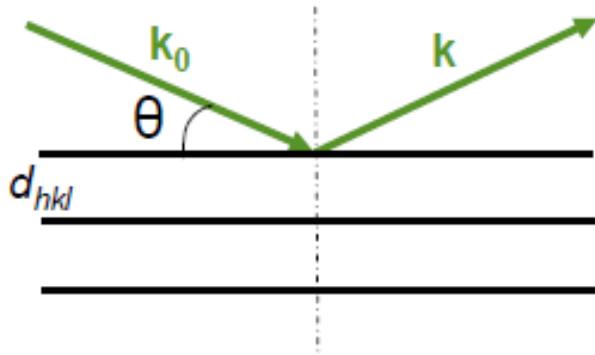
Abstand  $d$  benachbarter Netzebenen  $hkl$ :  $d_{hkl} = 2\pi / |\mathbf{G}_{hkl}|$

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

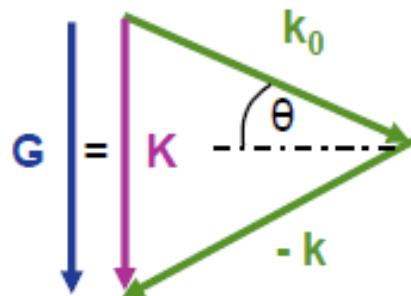
Streubedingung:  $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k} \equiv \mathbf{K} = \mathbf{G}$

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

K-Diagramm:

$$|\mathbf{G}_{hkl}| = |\mathbf{K}| = 2 |\mathbf{k}_0| \sin \theta \\ = 2 \cdot 2\pi / \lambda \cdot \sin \theta$$

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



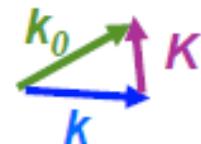
$$\lambda = 2 d_{hkl} \cdot \sin \theta$$

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

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

mit  $\mathbf{g}_i$  Basis des reziproken Gitters

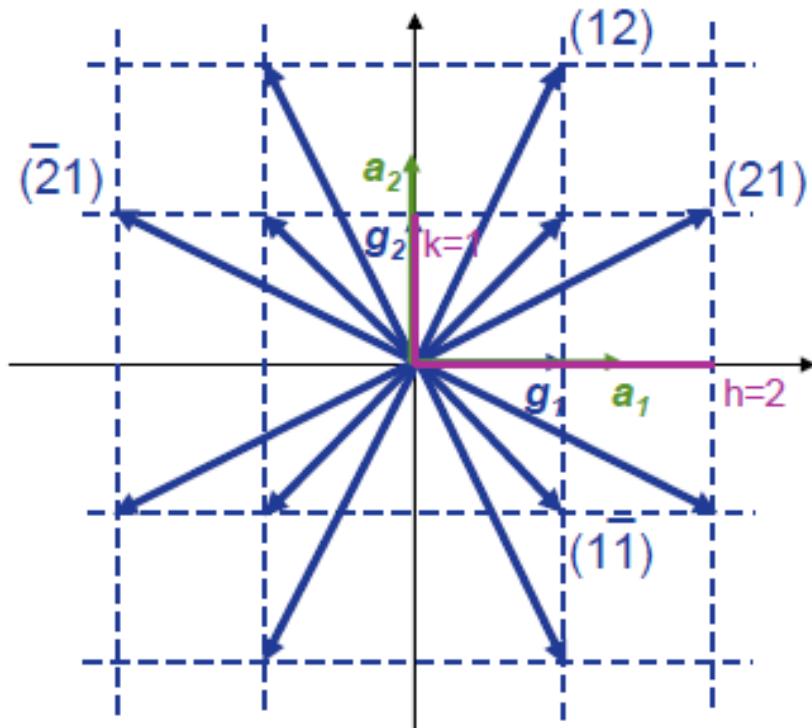
Außerdem gilt  $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

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

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

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

**Laue-Gleichungen**



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

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.5.5 Zusammenhang mit der Brillouinzone

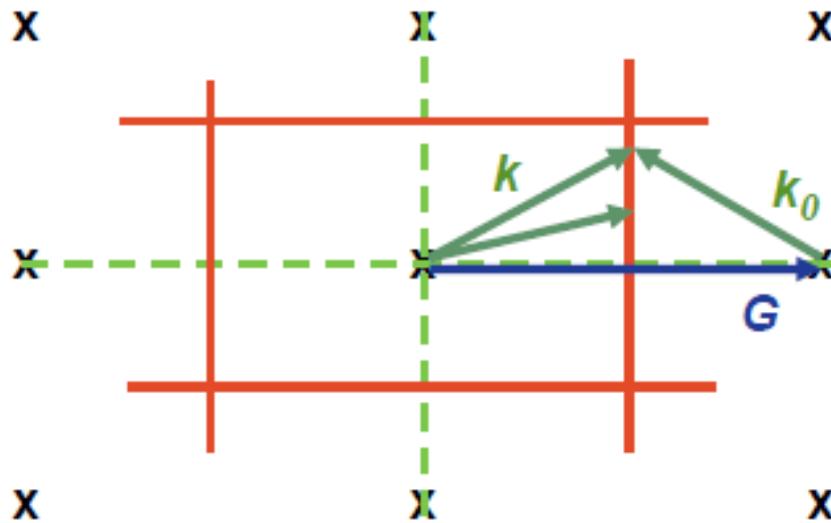
Gittervektor = Streuvektor

$$\mathbf{G} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$$

$$\Rightarrow (\mathbf{G} - \mathbf{k})^2 = \mathbf{k}_0^2 \Rightarrow \mathbf{G}^2 - 2\mathbf{G} \cdot \mathbf{k} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}\mathbf{G} \cdot \mathbf{k} = (\frac{1}{2}\mathbf{G})^2 \quad \frac{1}{2}\mathbf{G} \text{ entspricht dem Rand der Brillouinzone}$$

Alle  $\mathbf{k}$ -Vektoren, die vom Ursprung des reziproken Gitters auf dem Brillouinzonenrand enden, beschreiben einen gebeugten  $\mathbf{k}$ -Vektor.



Länge und Richtung

Geeignete Wahl von  $\mathbf{k}_0$

## III.5.6 Strukturfaktor und Atomformfaktor

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

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

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

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

Rücktransformation  
der Fourierreihe.  
(Siehe II.2.1):

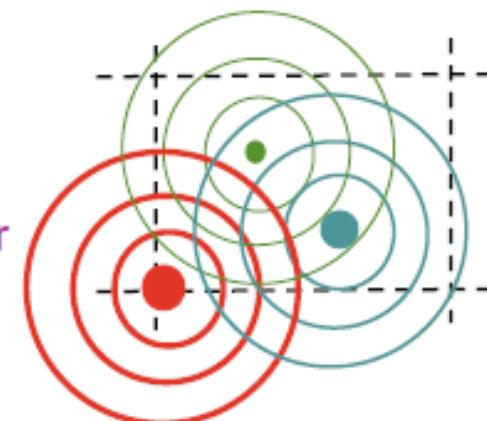
$$\rho(r) = \sum_G \rho_G \exp(iG \cdot r)$$

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  $\mathbf{r}$

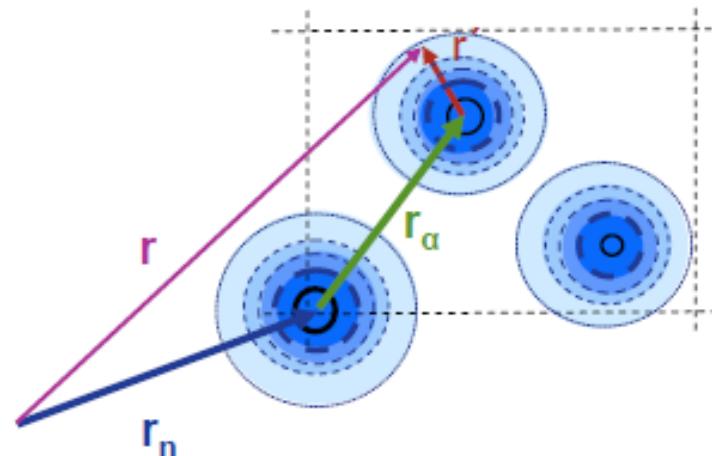
$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_n + \mathbf{r}_a + \mathbf{r}'$$

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

$\mathbf{r}_a$ : vom Ursprung der El-Zelle zum Zentrum des Atoms  $a$  diskret

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

Rö-Streuung an Elektronen  
zentriert um Atomkerne



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

(Siehe II.2.1)

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

Strukturfaktor  $F_{hkl}$  & Atomformfaktor  $f_{\alpha}$

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

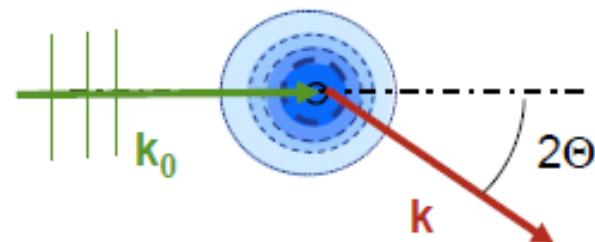
# Streubeitrag der Elektronendichte eines Atoms

## > Atomformfaktor $f_\alpha$

- i) Streueffizienz der differentiellen Bereiche  $\delta r$  der Elektronenhülle  
(Kugelschalen)
- ii) Interferenz der Streusignalbeiträge  $\delta I$  (abhängig von  $k_0$  und  $\mathbf{k}$ , d.h. von  $hkl$ )

bei kugelsymmetrischer Ladungsverteilung:

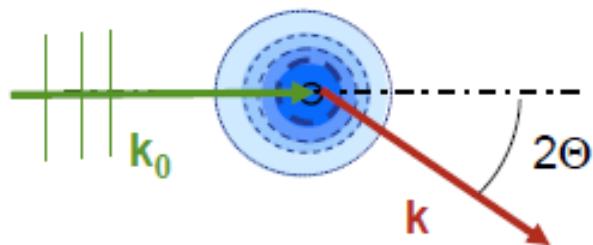
Kugelkoordinaten, Integration über  $\vartheta$  und  $\phi$  ausführen



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

bei kugelsymmetrischer Ladungsverteilung:

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

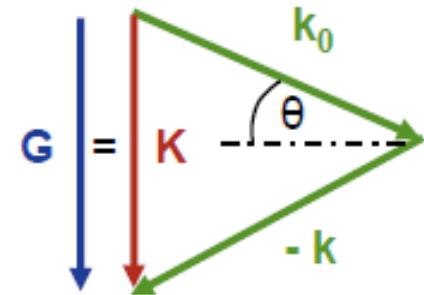


Mit  $|\mathbf{G}_{\text{hkl}}| = 2k_0 \sin \Theta = \frac{4\pi \sin \Theta}{\lambda}$

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):

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

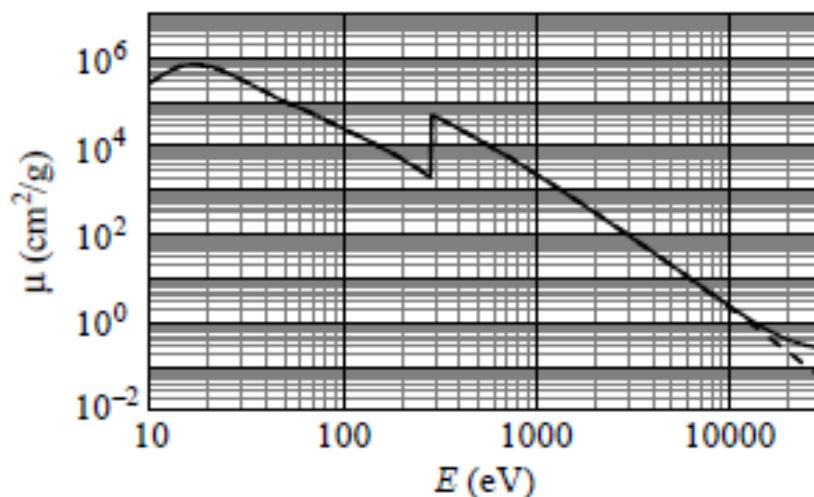
für Röntgenstreuung.

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

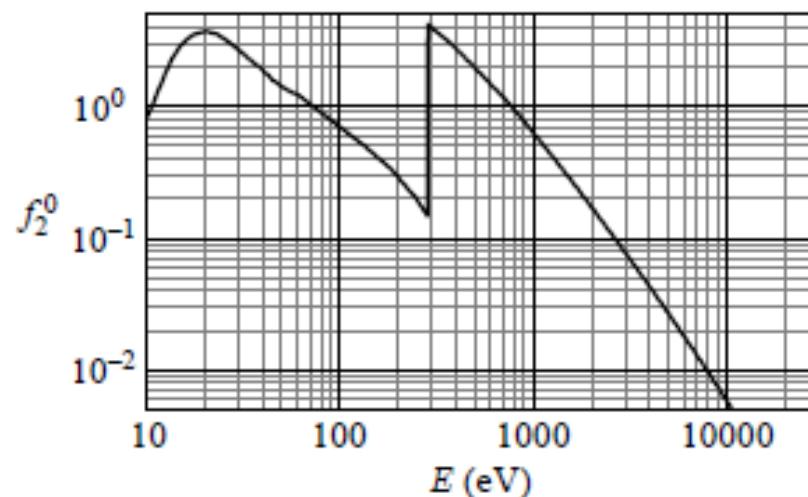
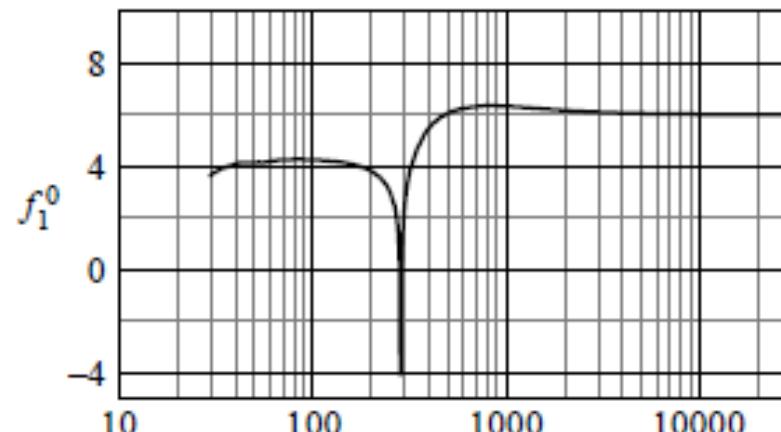
$$\sigma_a(\text{barns/atom}) = \mu(\text{cm}^2/\text{g}) \times 19.95$$

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

Energy (eV)	$f_1^0$	$f_2^0$	$\mu (\text{cm}^2/\text{g})$
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



**Carbon (C)**  
**Z = 6**  
Atomic weight = 12.011



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  $f_{\alpha}$ :

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

ii) kubisch zentriertes Gitter:  $\mathbf{r}_{\alpha} = u_a \mathbf{a}_1 + v_a \mathbf{a}_2 + w_a \mathbf{a}_3$  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)  
destructive Interferenz => Auslöschung  
sog. „verbotener Braggreflex“

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

# Strukturfaktor für zentrierte Gitter

## Auslöschen

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

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

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

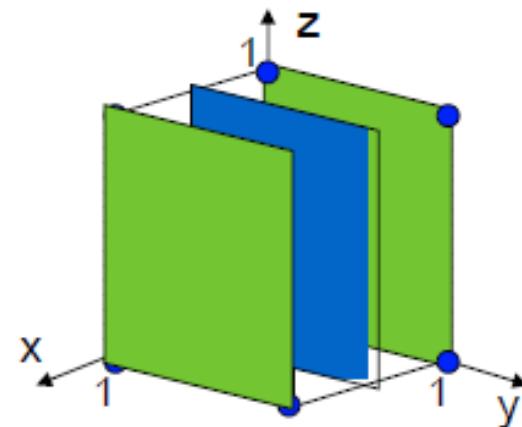
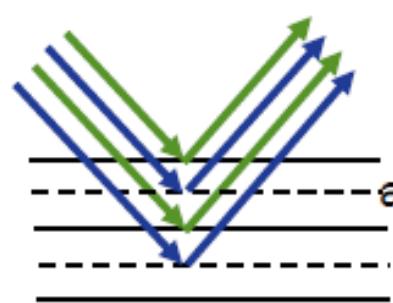
### bcc Gitter (100)-Reflex

Gangunterschied:

Hauptebene – Hauptebene =  $\lambda$

Hauptebene – Zwischenebene =  $\lambda/2$

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



- Nur bei mehreren Atomen pro Einheitszelle  
(Zentrierung, mehratomige Basis, allg.: durch bestimmte Symmetrieeoperationen)
- 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

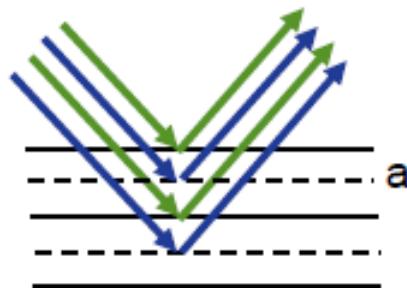
=> verdoppeltes Volumen im reziproken Raum

=> „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  $f_a$  ( $f_a \sim Z$ )

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

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

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

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

- Brillouinzenen = Wigner-Seitz-Zellen des reziproken Gitters
- **Streuintensität = Betragsquadrat der Fouriertransformation der Streudichte**  
=> „Phasenproblem der Beugungsmethoden“ (keine einfache Rücktransformation, da Phaseninformation fehlt)  
$$I(\mathbf{K}) \propto |A_B|^2 \propto \left| \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2$$
 $\mathbf{K} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ : 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

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

## Kap. IV Strukturbestimmung: Zielsetzungen

### Messziele:

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

### 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 (äußereren) Einflüssen (Temperatur, Druck, etc.)
- Adsorption von Atomen / Molekülen an Oberflächen etc.

## IV. Strukturbestimmung

IV.1 Experimentelle Sonden Rö-Strahlung, Elektronen, Neutronen

IV.1.1 Labor-Röntgenquellen

IV.1.2 Synchrotronstrahlungsquellen

IV.2 Laue-Verfahren Rö-Strahlung:  $\lambda$  - Kontinuum

IV.2.1 Prinzip Einkristall

IV.2.2 Realisierung und Ergebnisse

IV.3 Pulververfahren (Debye-Scherrer) Rö-Strahlung: festes  $\lambda$

IV.3.1 Prinzip & Neutronen viele Kristallite

IV.3.2 Realisierung und Ergebnisse

IV.4 Drehkristallverfahren Rö-Strahlung festes  $\lambda$

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

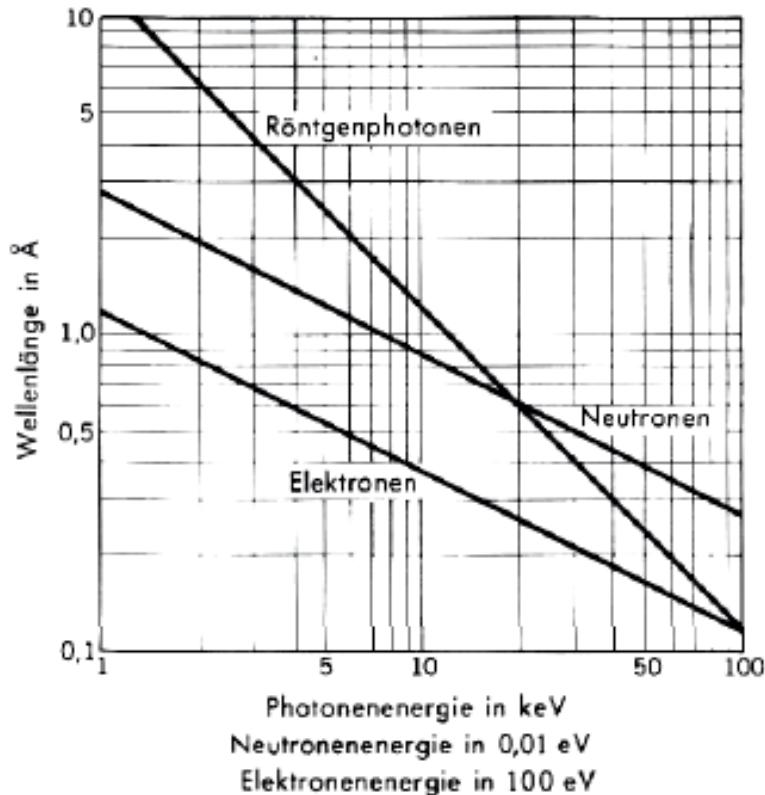
## IV.1 Experimentelle Sonden

bereits bekannt:

- Röntgenstrahlung
- Elektronen
- Neutronen

Quellen

Röntgenröhre, Synchrotron  
Elektronenemitter + Beschleunigungsstrecke  
Kernreaktor oder Spallationsquelle  
+ Moderator (= Bremsmedium)



relevante Bereiche für  
Wellenlänge  $\lambda$  und Energie  $E$ :

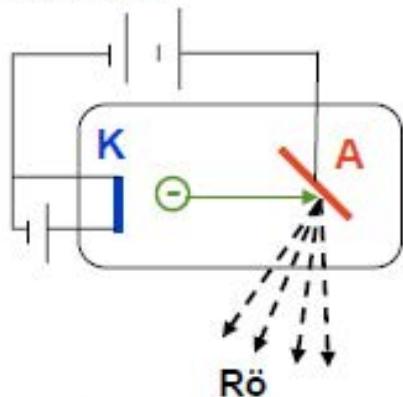
$$\text{Röntgenstrahlung: } \lambda (\text{\AA}) = 12,4 / E (\text{keV})$$

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

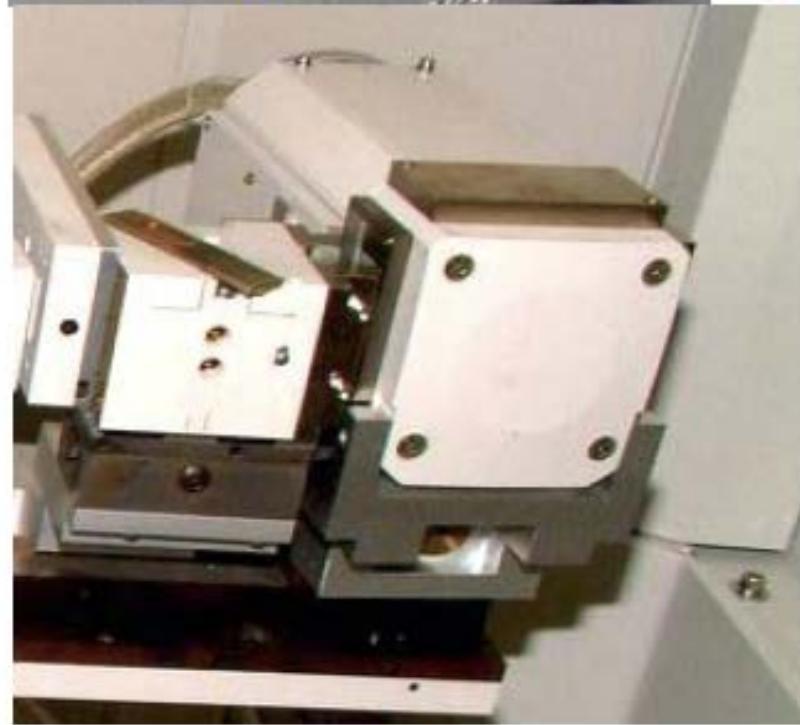
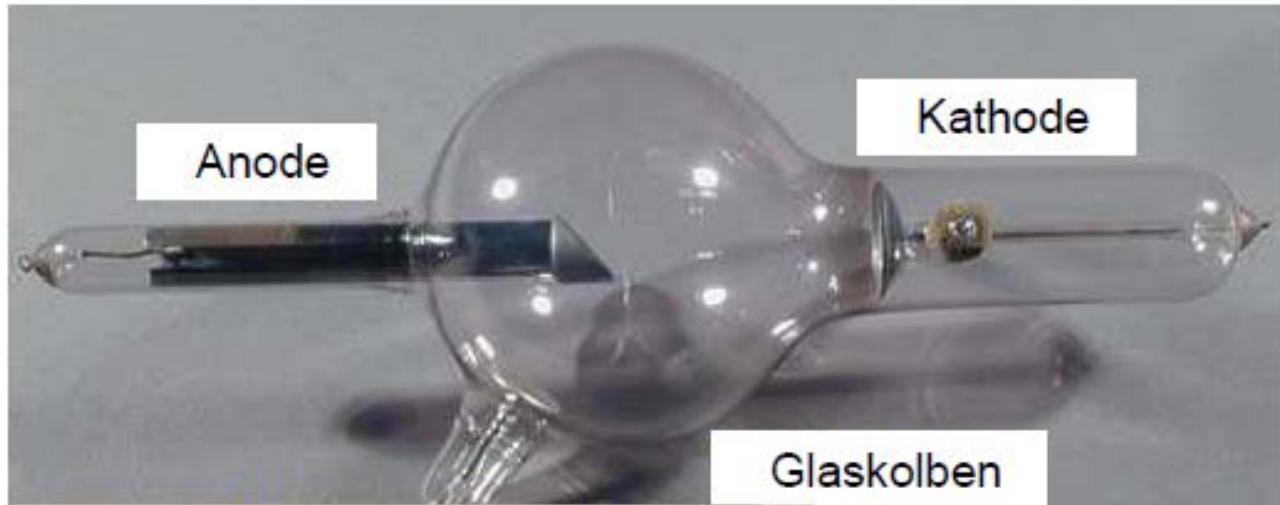
$$\text{Neutronen: } \lambda (\text{\AA}) = 0,28 / (E (\text{eV}))^{1/2}$$

## IV.1.1 Labor-Röntgenquellen

Aufbau:



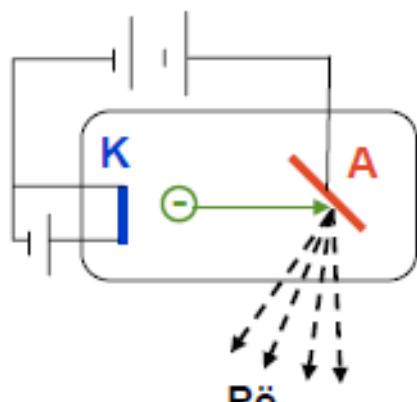
Röntgenröhre



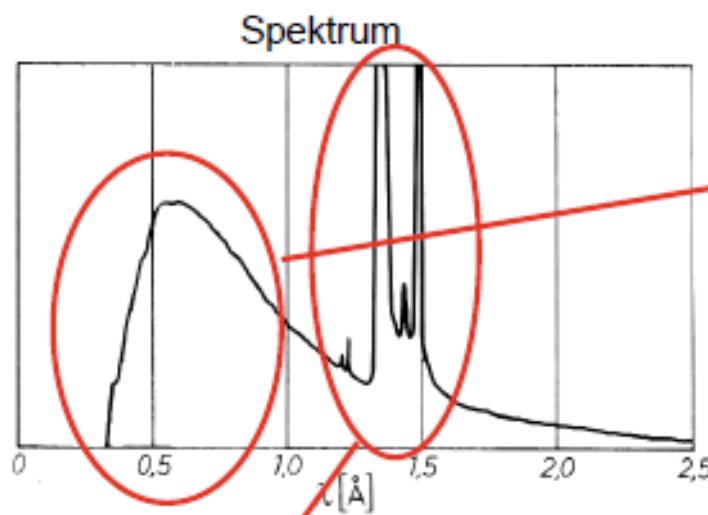
Preis  $\geq \text{€} 50.000$

## IV.1.1 Labor-Röntgenquellen

Aufbau:



Röntgenröhre



Strahlungsspektrum:

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

charakteristische Linien

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

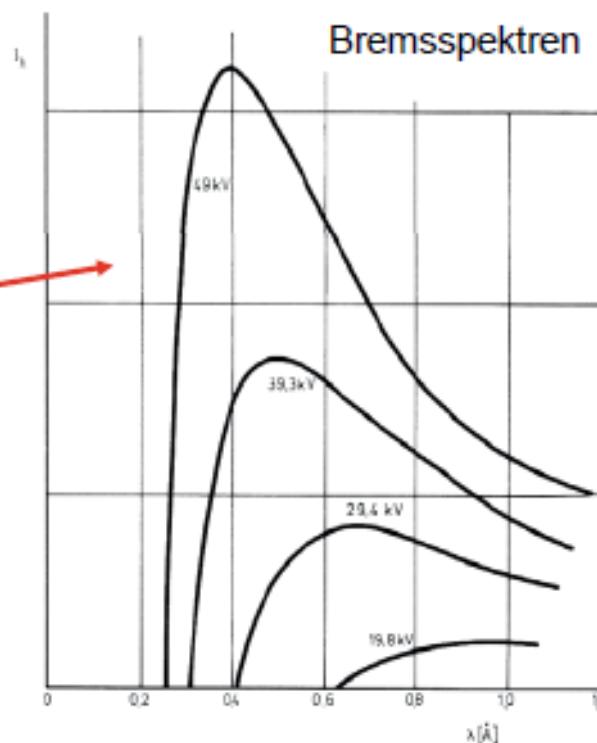
ii) Kontinuumsstrahlung

z.B. für Laue-Verfahren

Bremsstrahlung

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

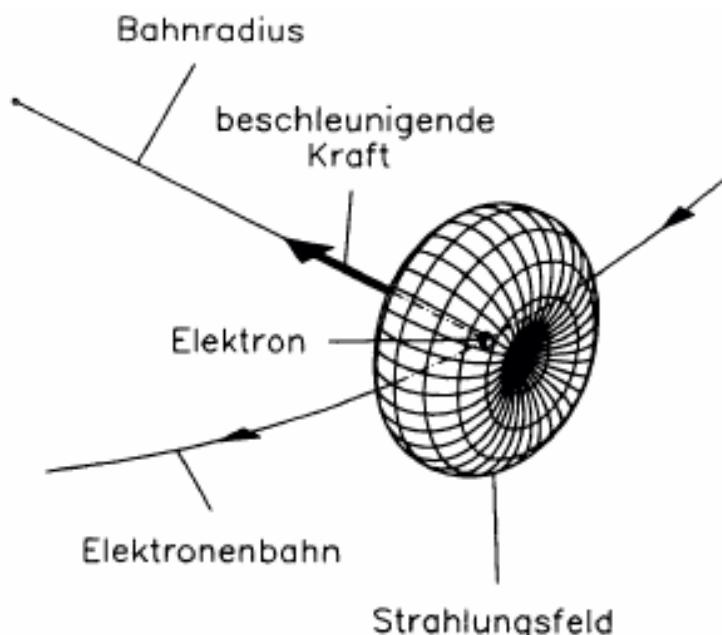
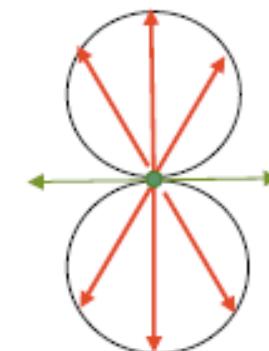
→ min. Wellenlänge:  $\lambda_{\min} = hc / (eU)$  Bsp: 0,03 nm bei 40 keV



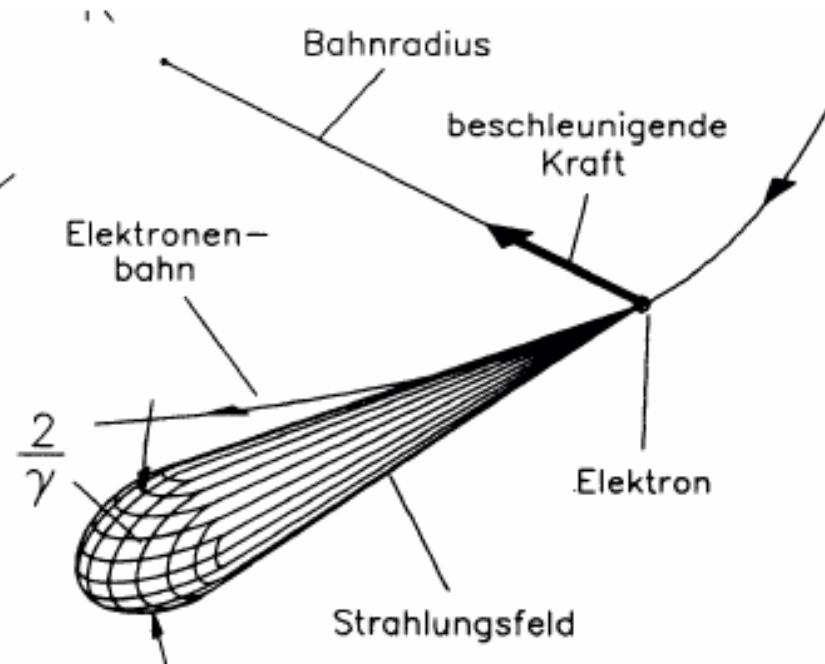
## IV.1.2 Synchrotronstrahlungsquellen

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

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



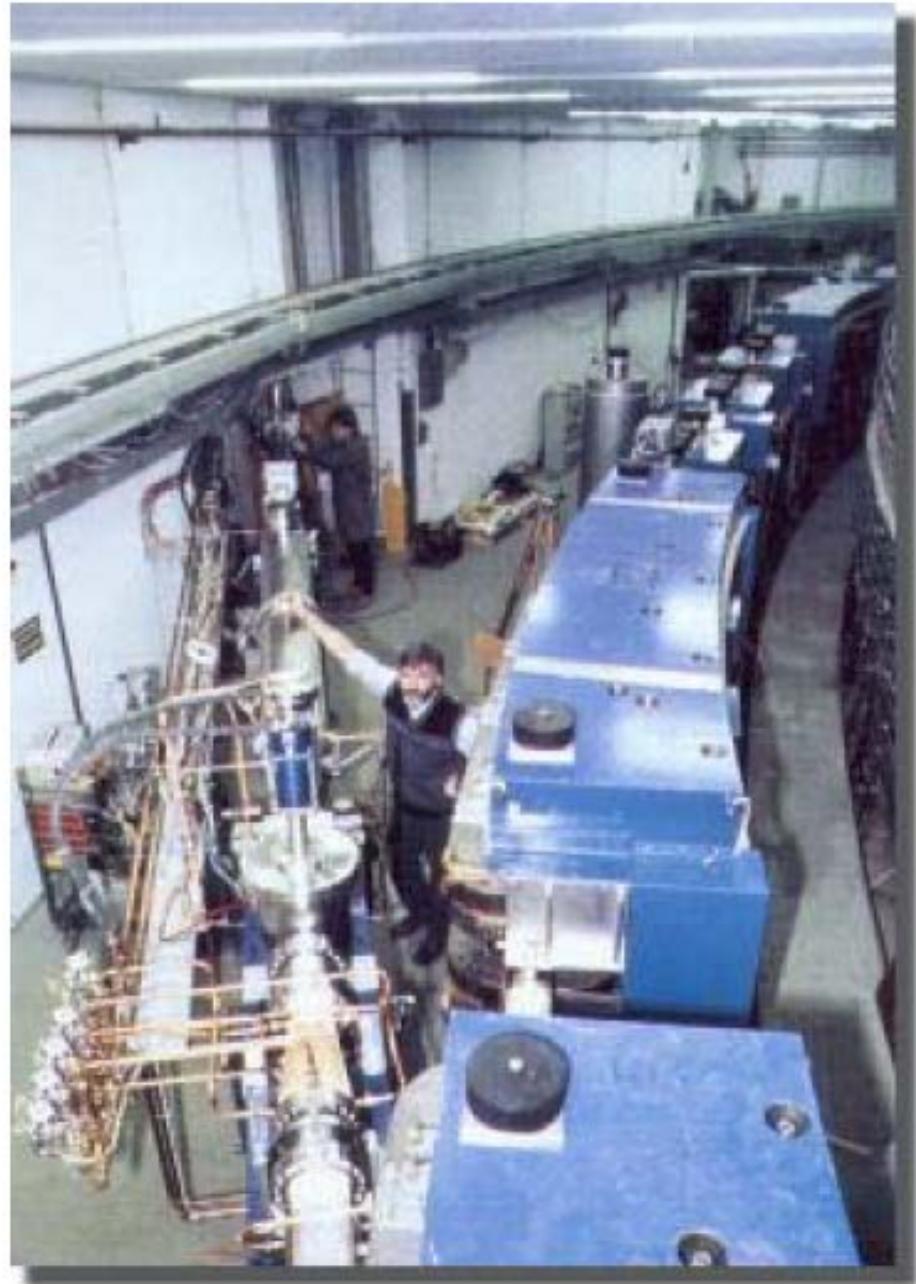
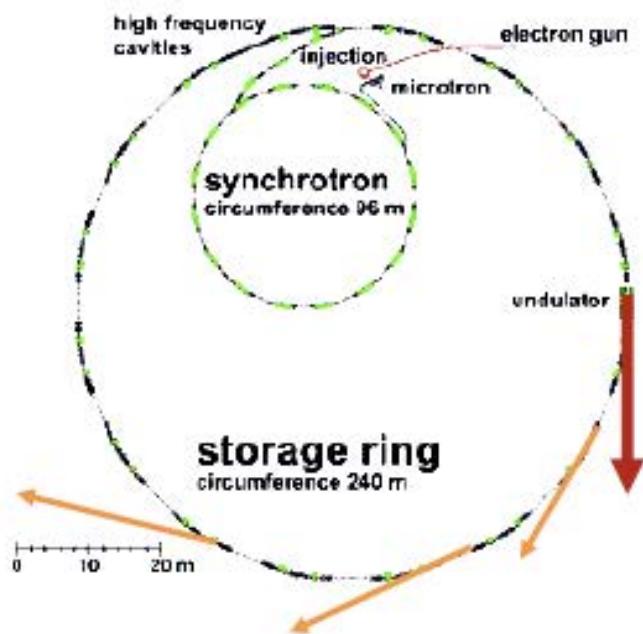
Schwerpunktsystem des Elektrons



Laborsystem

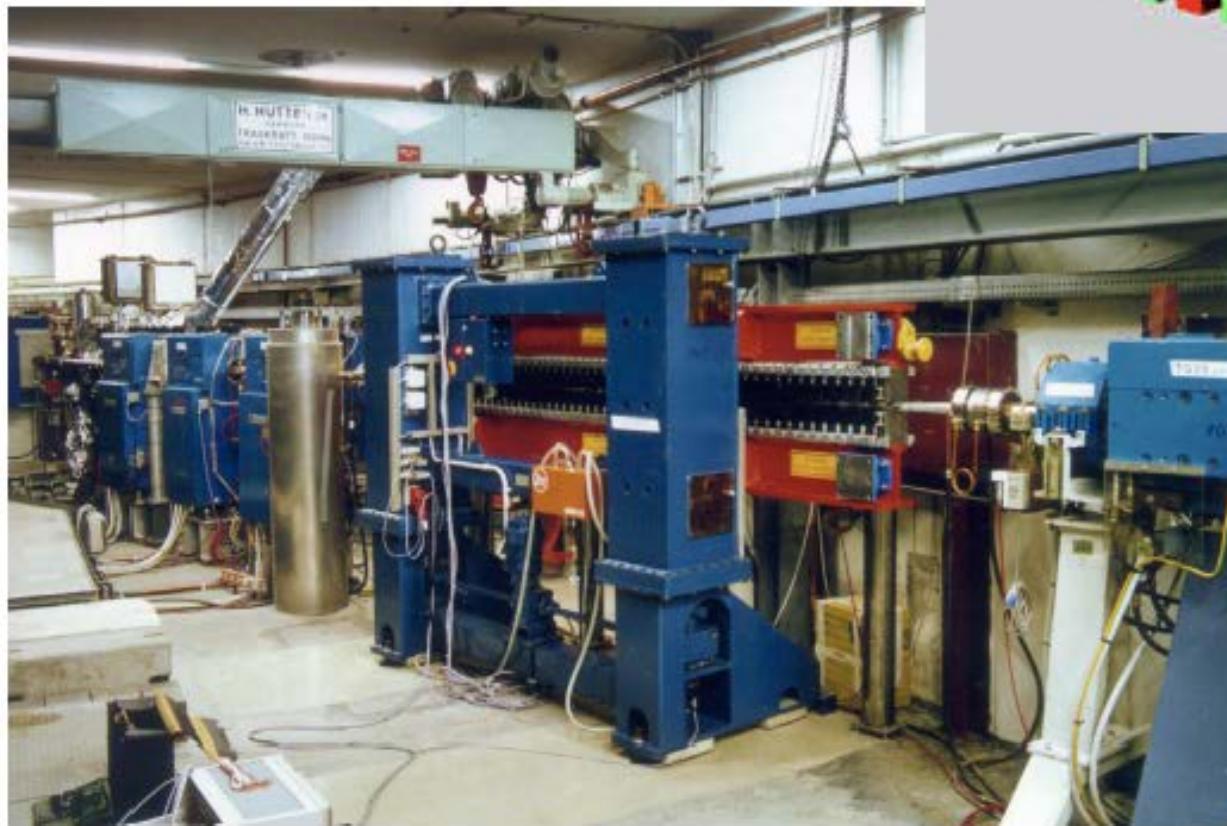
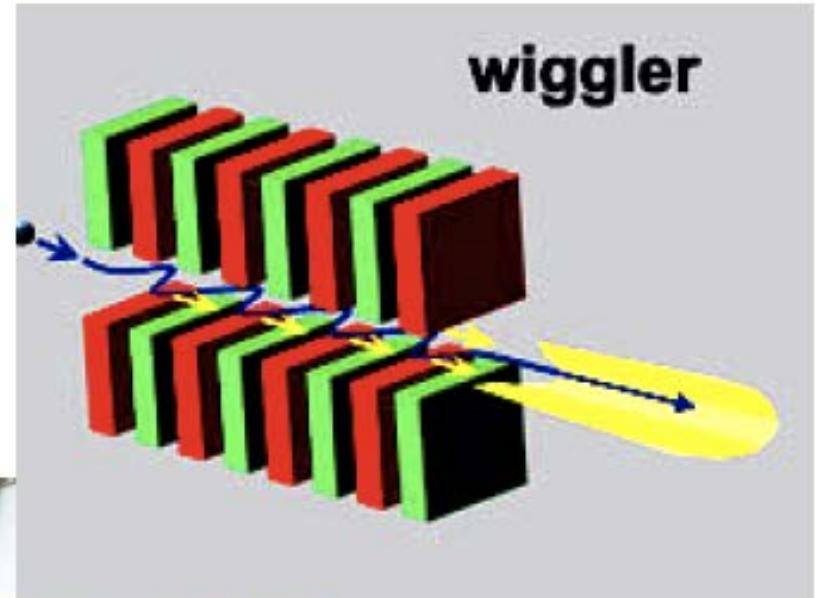
## Synchrotronstrahlung

### Abstrahlung im Ablenkmagnet



# Synchrotronstrahlung

durch alternierende Magnete:  
Überlagerung der Abstrahlprozesse



**Info über  
Synchrotronstrahlung  
im Internet**

**DESY**  
Deutsches Elektronen**synchrotron**  
**HASYLAB:** Hamburger  
Synchrotronstrahlungslabor  
[www-hasylab.desy.de](http://www-hasylab.desy.de)

**BESSY**  
Berliner Elektronen**speicherring** –  
Gesellschaft für **Synchrotronstrahlung**  
[www.bessy.de/guided\\_tour/](http://www.bessy.de/guided_tour/)

Preis ≥ € 1.000.000.000

**ESRF**  
European **Synchrotron Research Facility**, Grenoble, Frankreich  
[www.esrf.fr](http://www.esrf.fr)

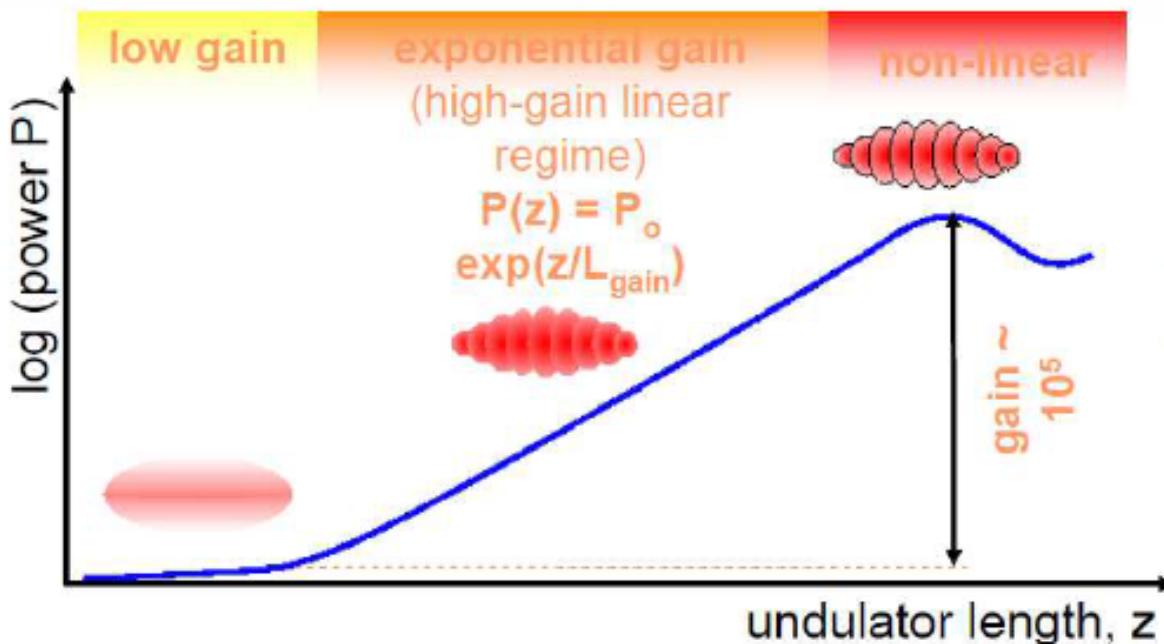
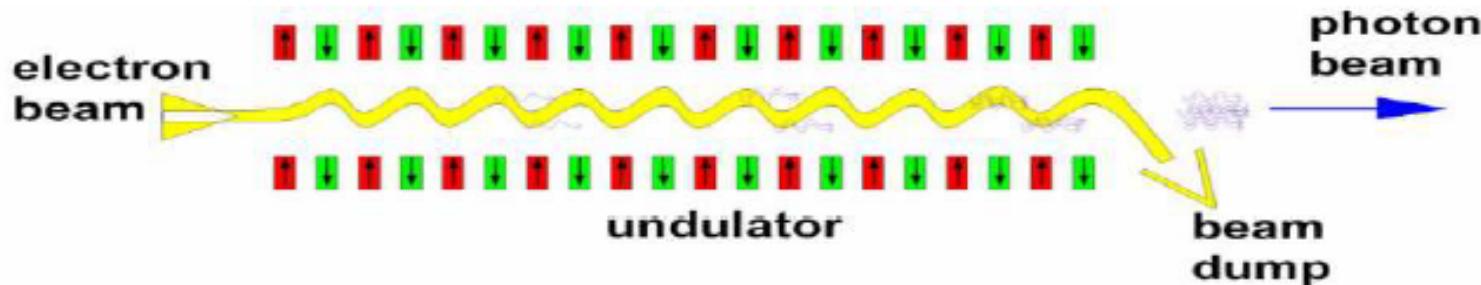


# Höchstbrillante Röntgenquelle : Der Freie Elektronenlaser

## SASE Prinzip

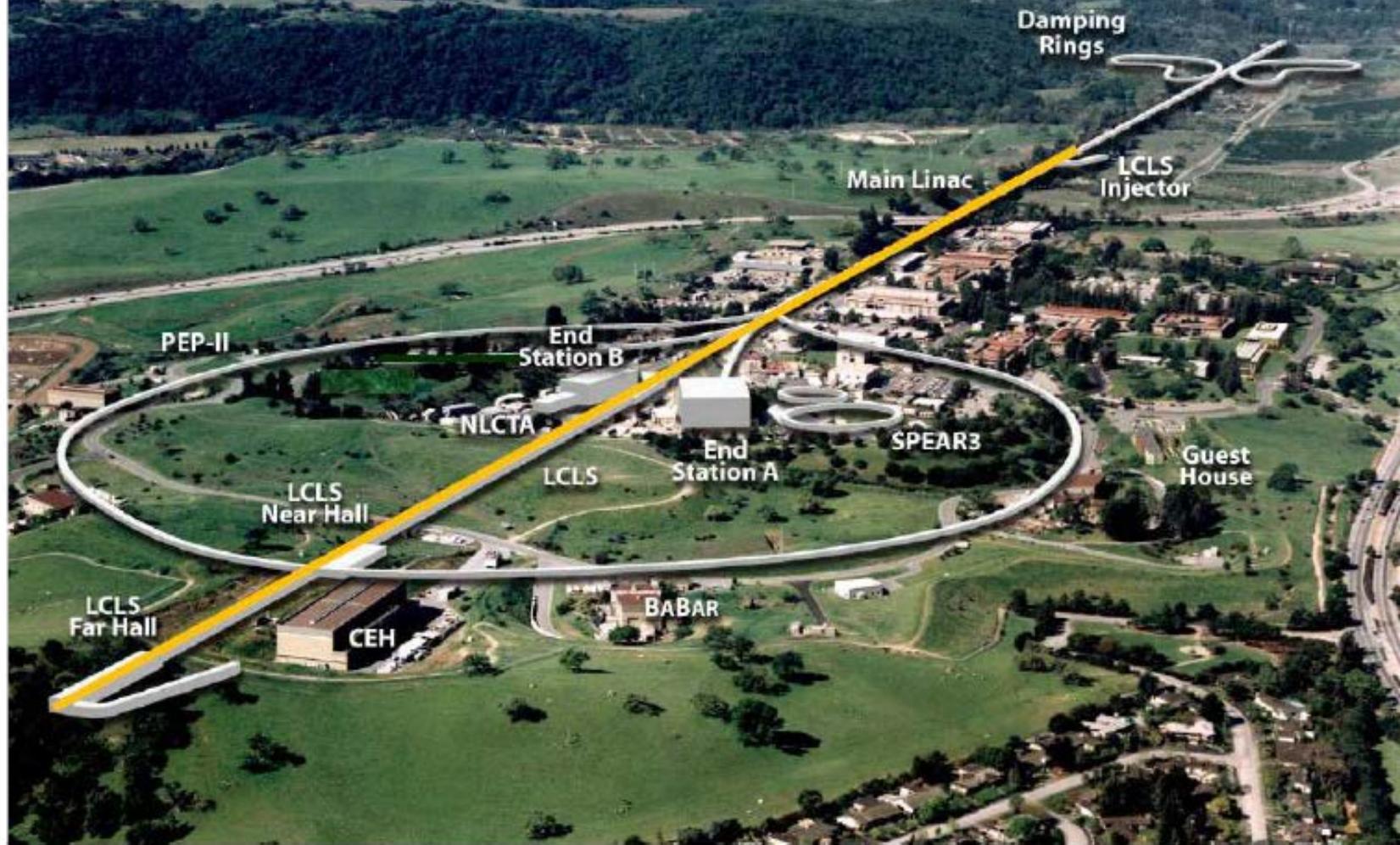
**SASE = Self Amplification of Spontaneous Emission**

Saldin, Schneidmiller, Yurkov

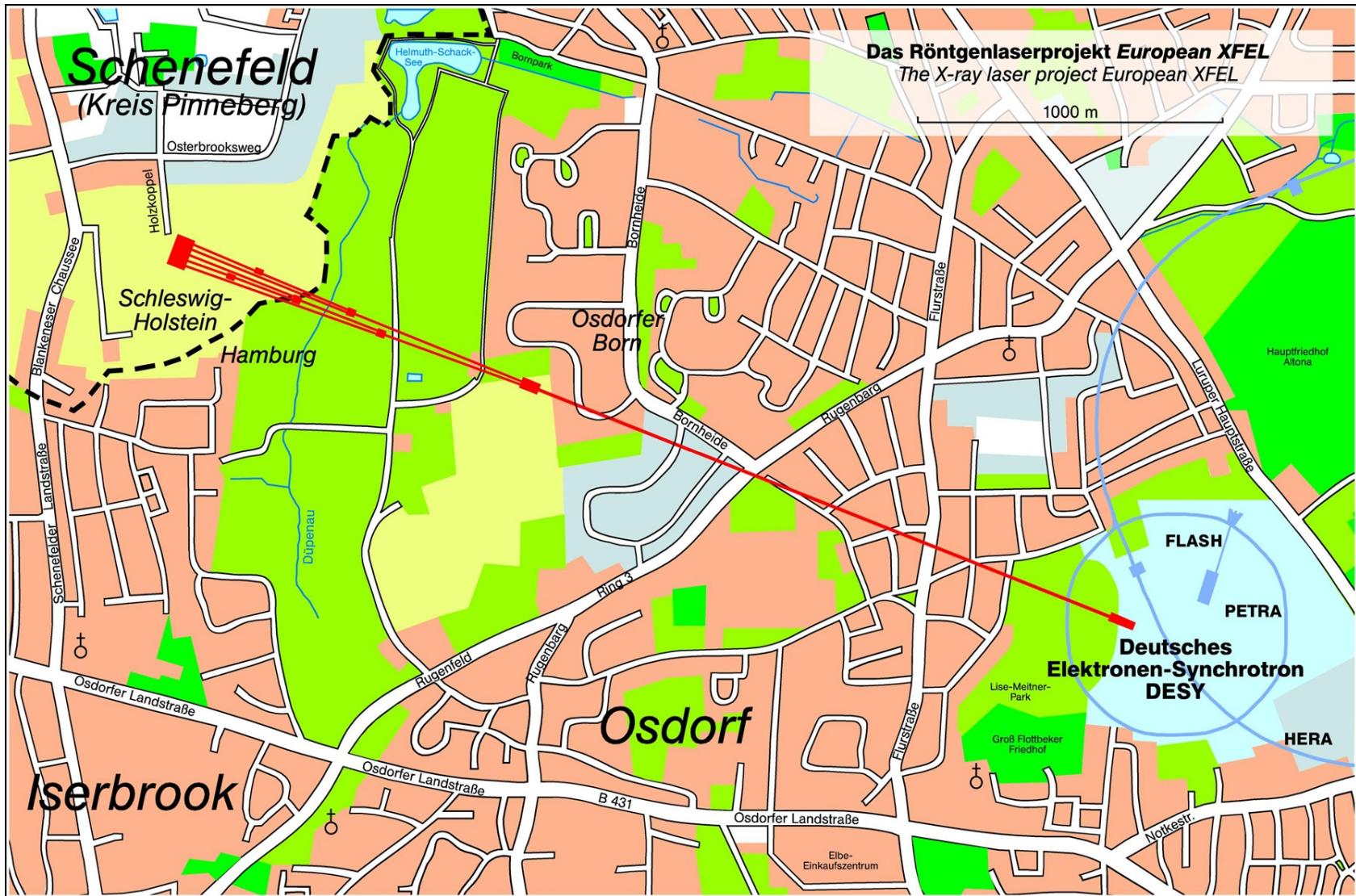


- Bunch wechselwirkt mit eigenem Photonfeld
  - Mikrobunche entstehen
  - Elektronen strahlen kohärent  $\sim N_e^{-2}$  mit  $N_e \approx 10^6$
- Verstärkung bis zu  $N_e$  !

# SLAC National Accelerator Laboratory



# European XFEL Hamburg

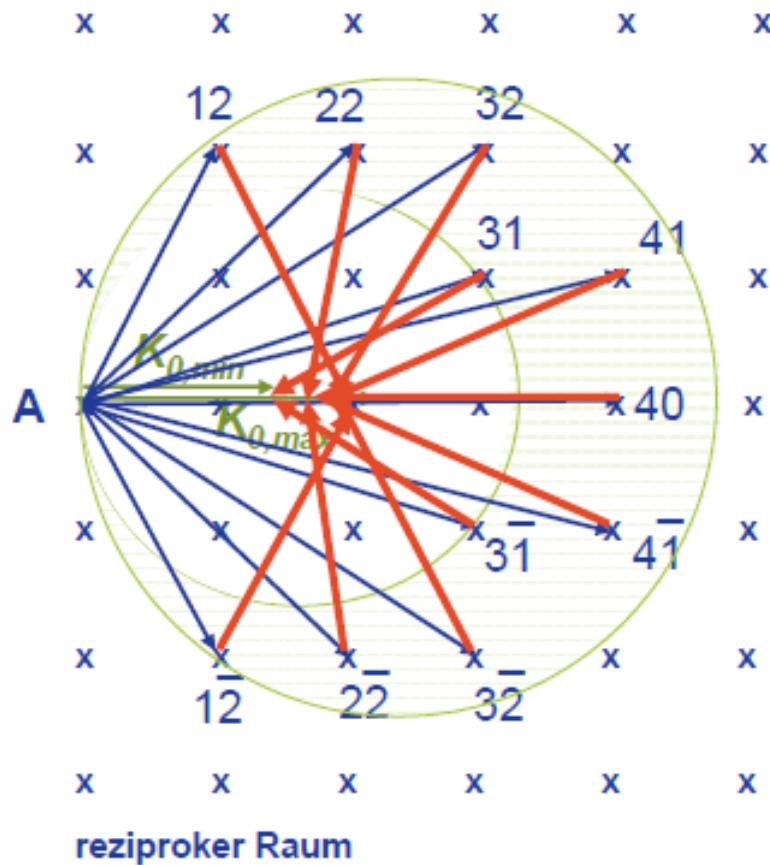


## IV.2 Laue-Verfahren

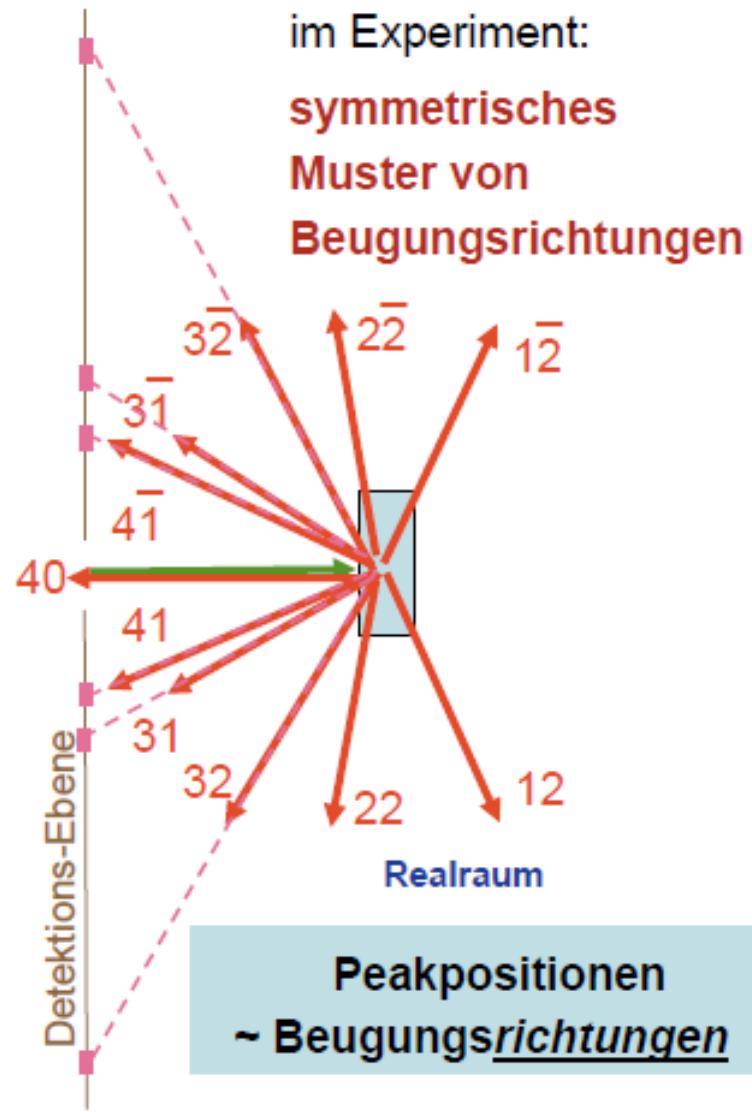
### IV.2.1 Prinzip

$\lambda$ -Kontinuum =  $k_0$ -Kontinuum

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



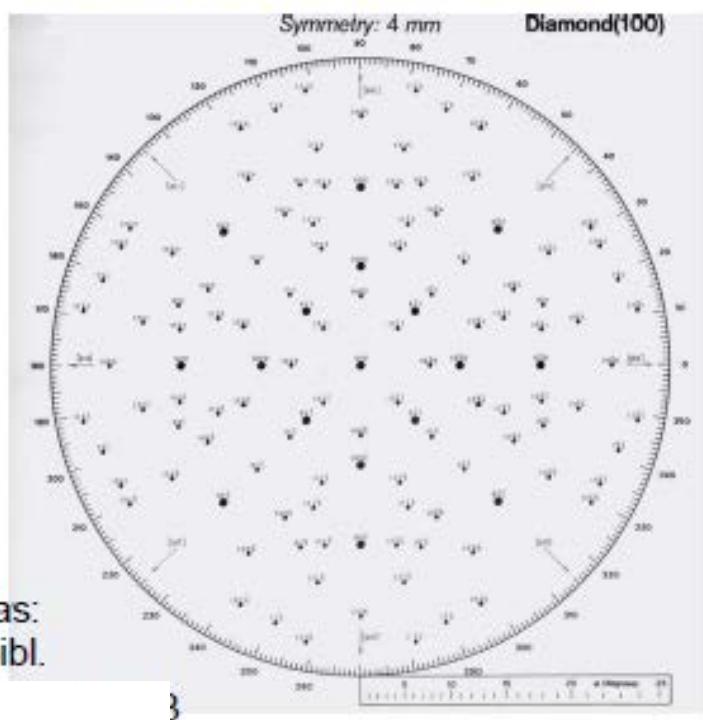
→ „Fächer“ von  $\mathbf{G}$ -Vektoren mit  $\mathbf{K} = \mathbf{G}$



## IV.2.2 Laue-Verfahren: Realisierung und Ergebnisse

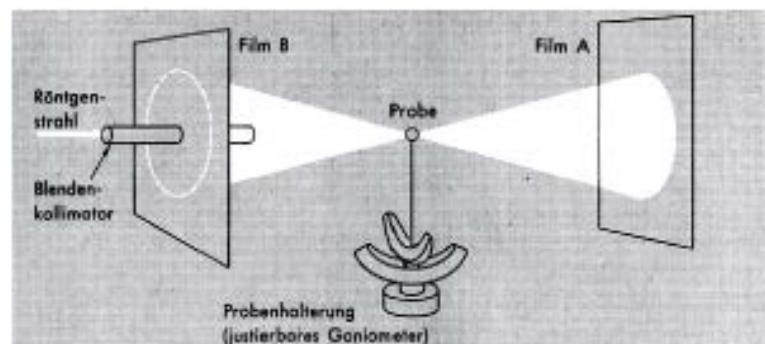
Röntgenquelle:  
bei Beschleunigungs-  
spannung  $U = 30 \text{ kV}$ : Bereich  $\lambda \geq 0,035 \text{ nm}$

theoretische Vorhersage  
Diamantstruktur (100)  
für Winkelbereich  $0^\circ$  bis  $25^\circ$

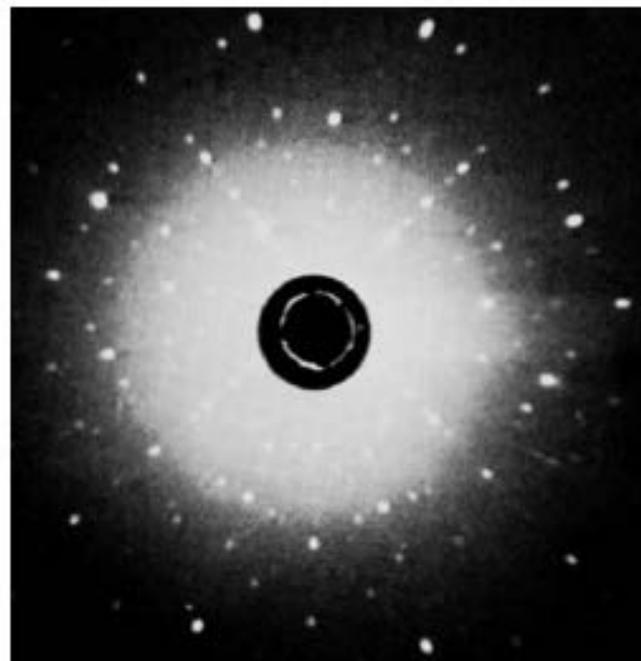


Laue-Atlas:  
Physik-Bibl.

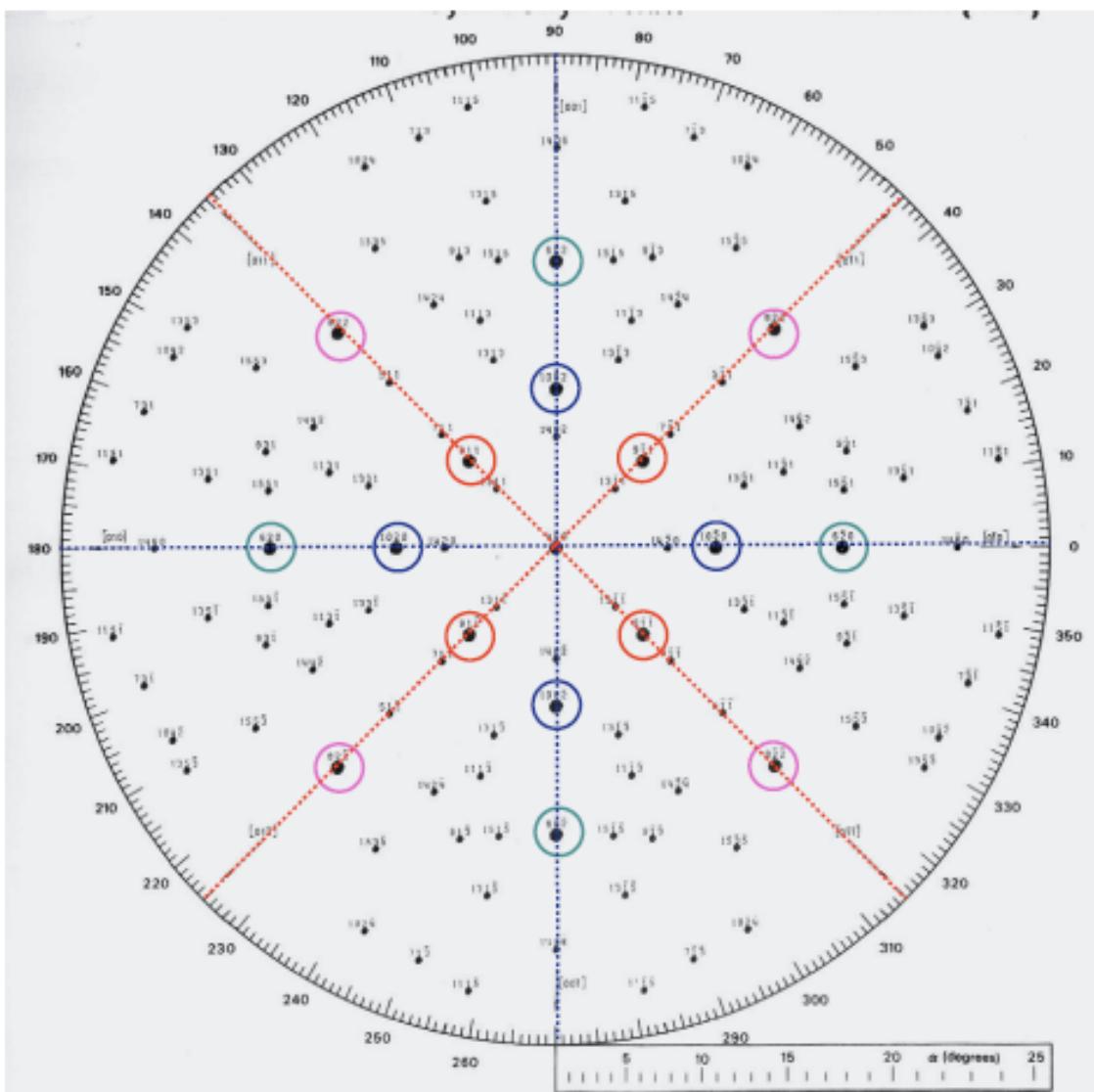
Geometrie für Laue-Aufnahme:



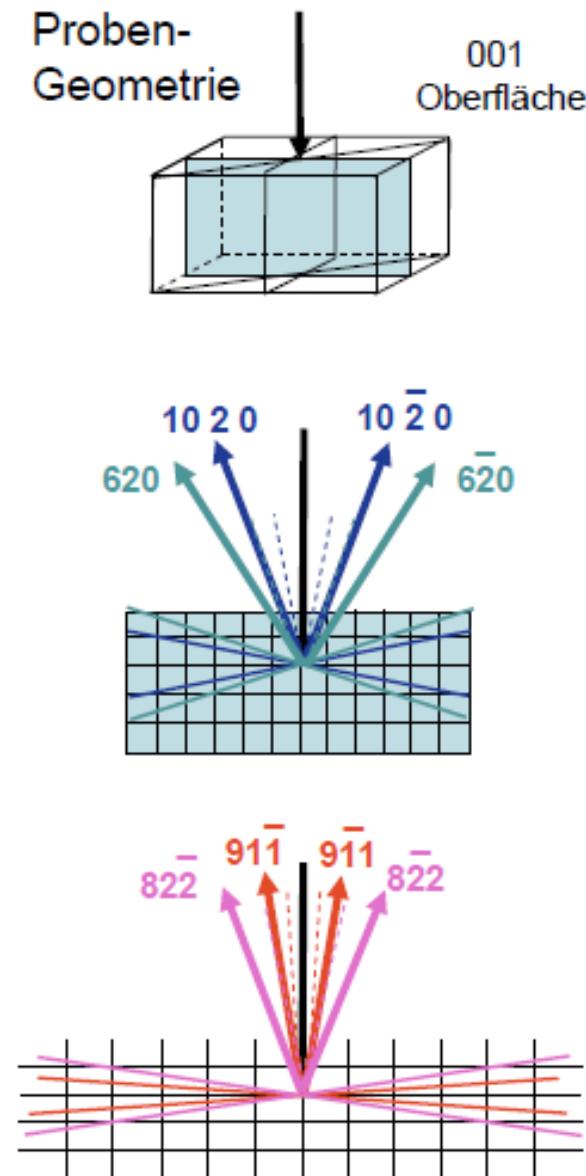
Exp. Ergebnis für Si (100):  
4-zählige Symmetrie



# Deutung der Laue-Beugungspeaks

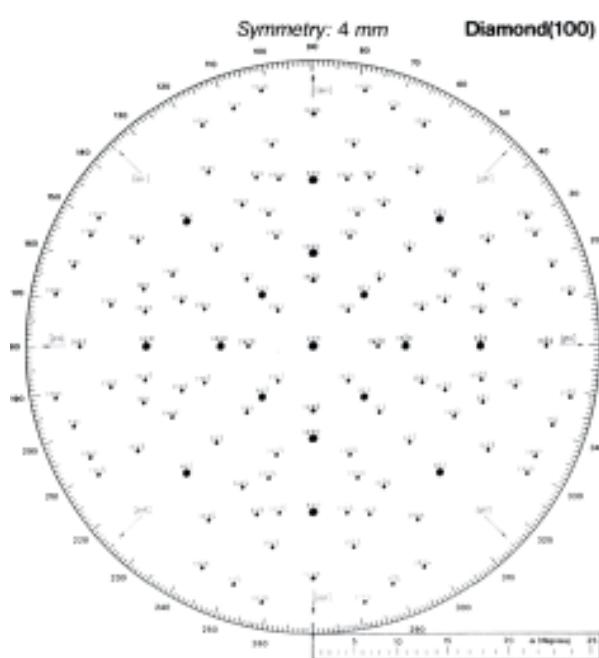


Proben-  
Geometrie  
001  
Oberfläche

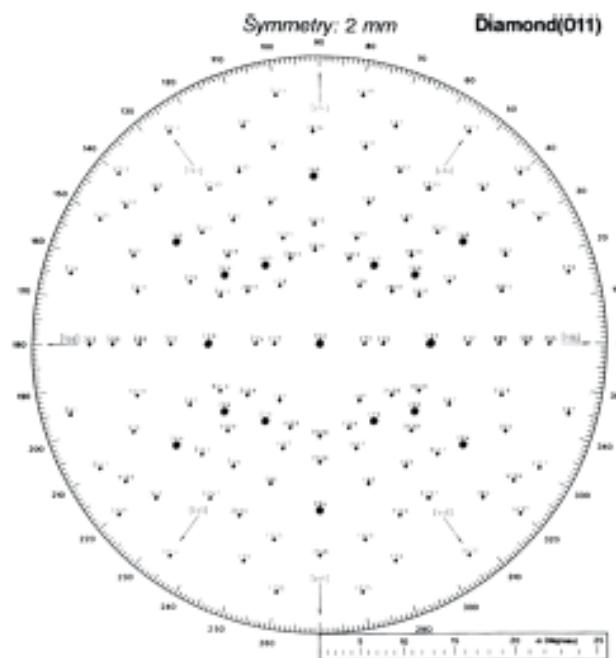


# Unterschiedliche Probenoberflächen → charakteristische Symmetrien

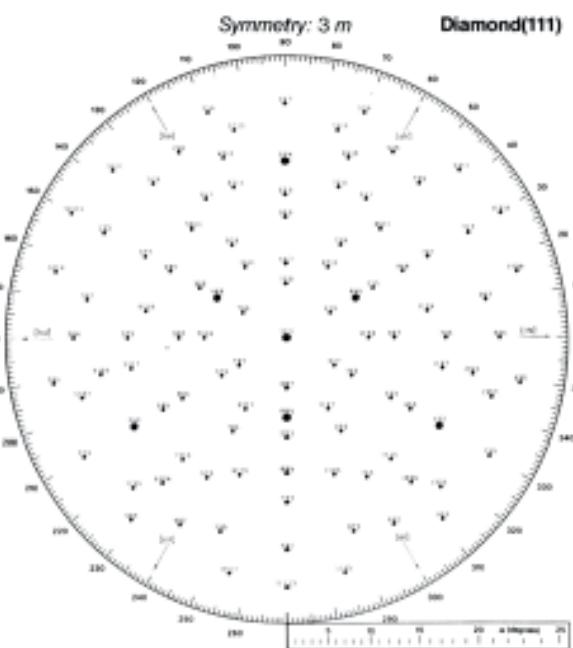
(100)



(011)



(111)



4-zählig



2-zählig

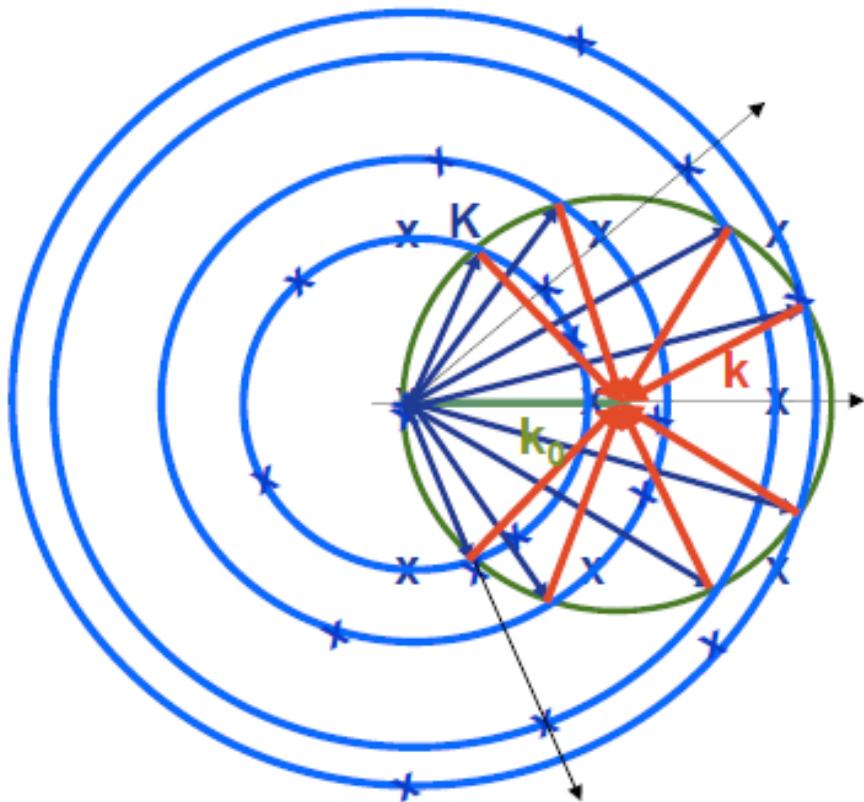


3-zählig

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

### Prinzip

In 2 Dimensionen



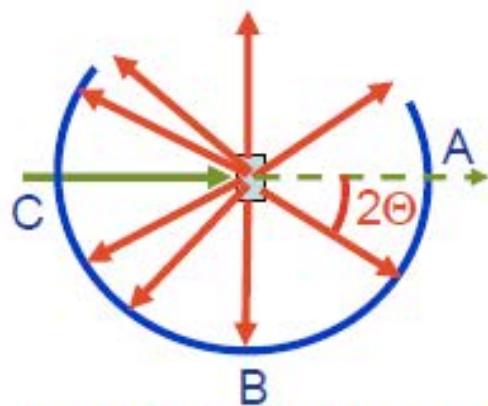
monochromatische Strahlung  
+ 1 Kristallit → i.a. keine Beugungspeaks

sehr viele,  
statistisch orientierte Kristallite  
↓  
**im reziproken Raum:**  
konzentrische Ringe (2-dim)  
bzw. **konzentrische Kugeln** (3-dim)

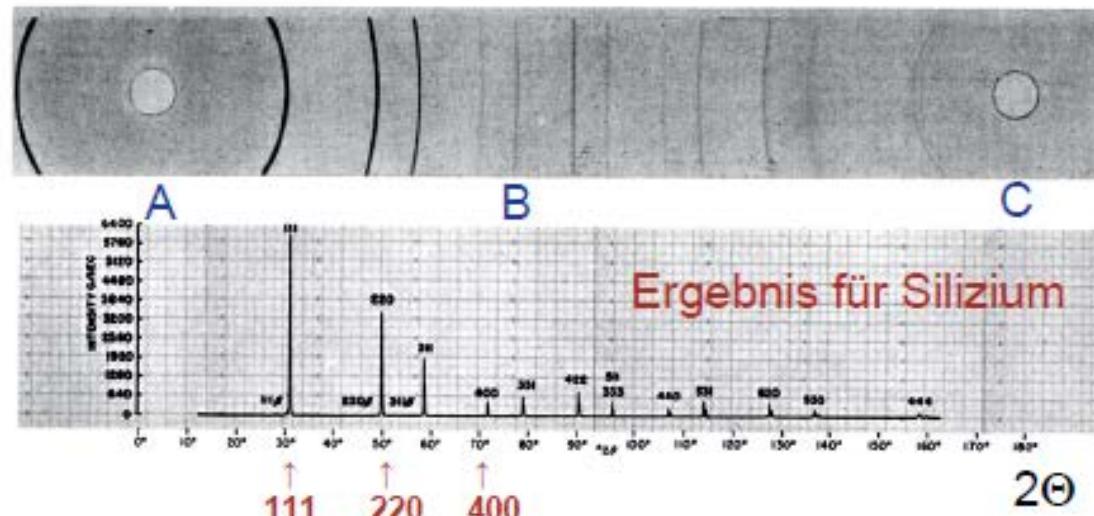
Streubedingung  $\mathbf{K} = \mathbf{G}$  erfüllt  
für  $\mathbf{k}$ -Werte auf **Kegeln** um  $\mathbf{k}_0$

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  $2\Theta$ ,  
oder von  $|K| = 4\pi \sin(\Theta) / \lambda$ ,  
  
Indizierung der Reflexe mit  $hkl$



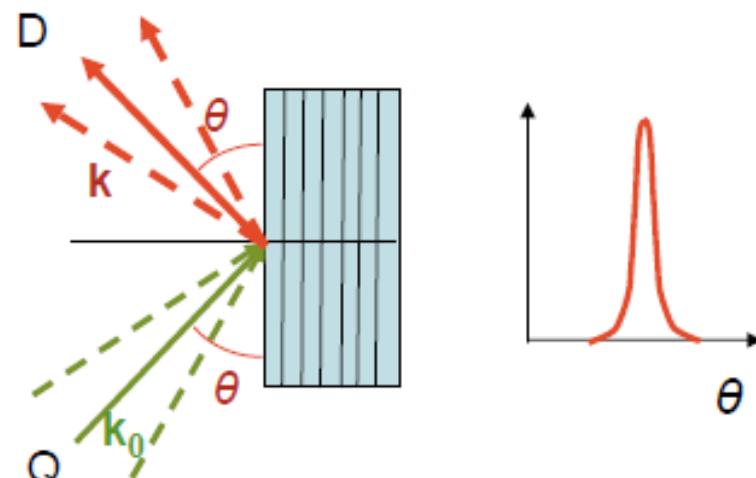
## IV.4 Drehkristallverfahren

### IV.4.1 Prinzip

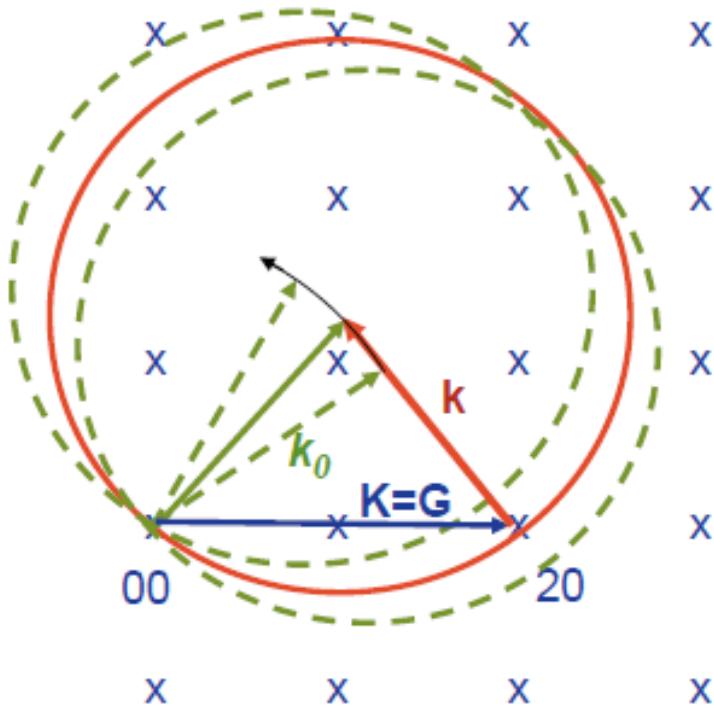
Probe: **Einkristall**

einfallende Welle: **monochromatisch**

Variable: **Einfallsinkel  $\theta$**



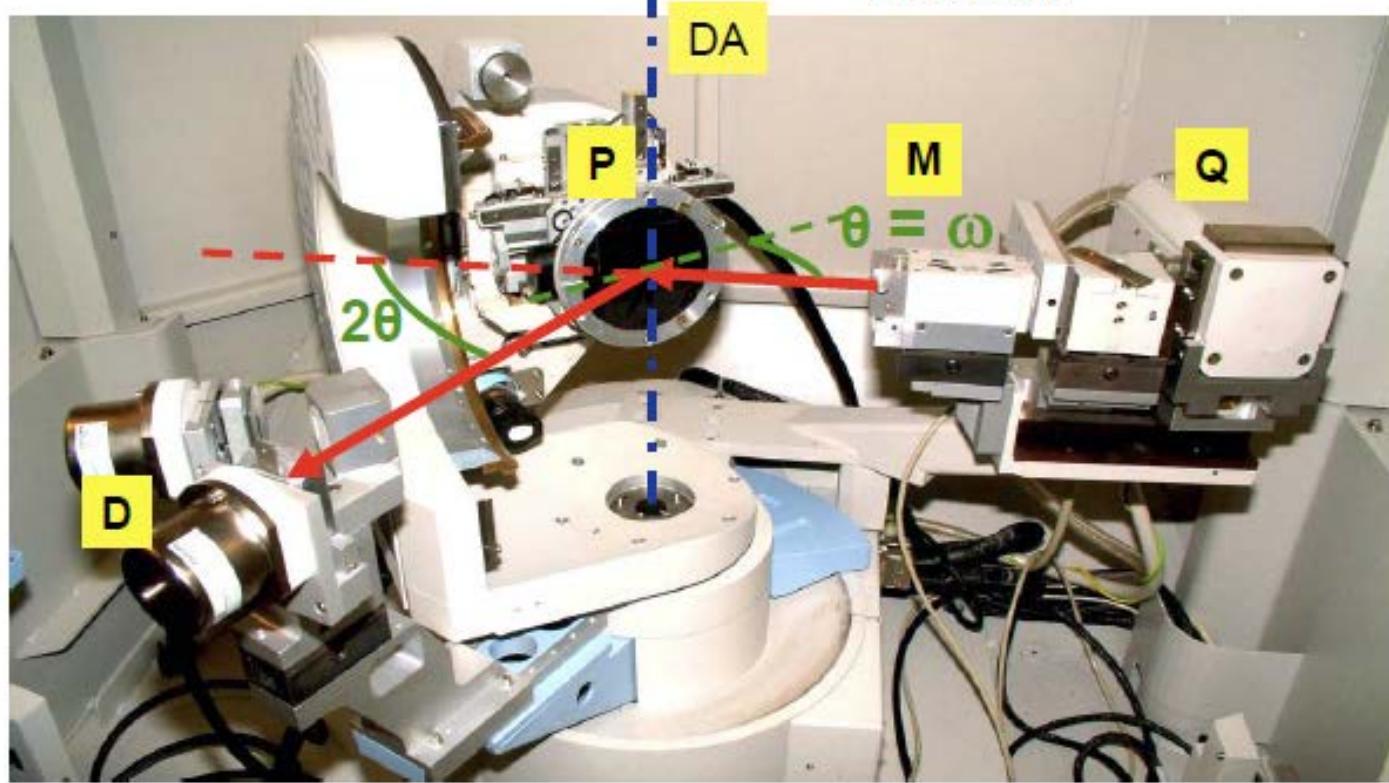
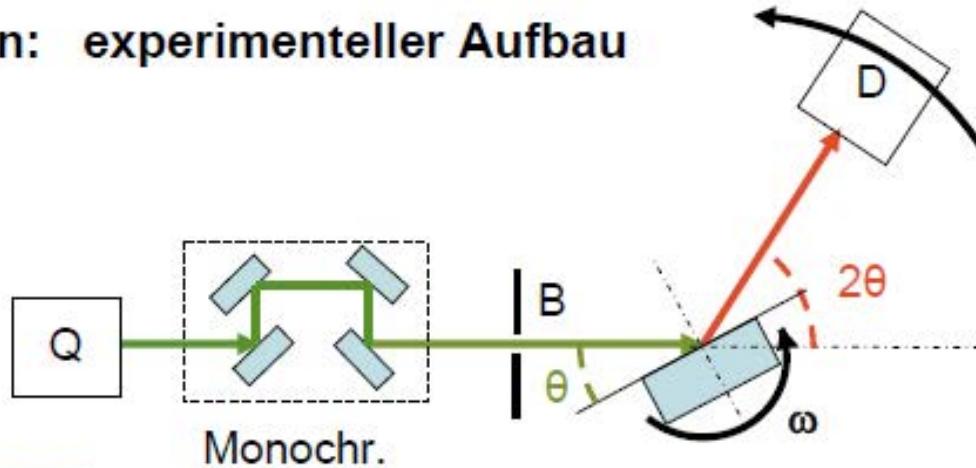
Beugungspeak falls  
 $2 d \sin \theta = n \lambda$   
(Bragg-Bedingung)



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

## IV.4.2 Drehkristallverfahren: experimenteller Aufbau

- Quelle fest
- Variation Einfallsinkel  $\theta$  durch Probendrehung
- Synchrone Drehung des Detektors  $2\theta$  zur Einfallsrichtung



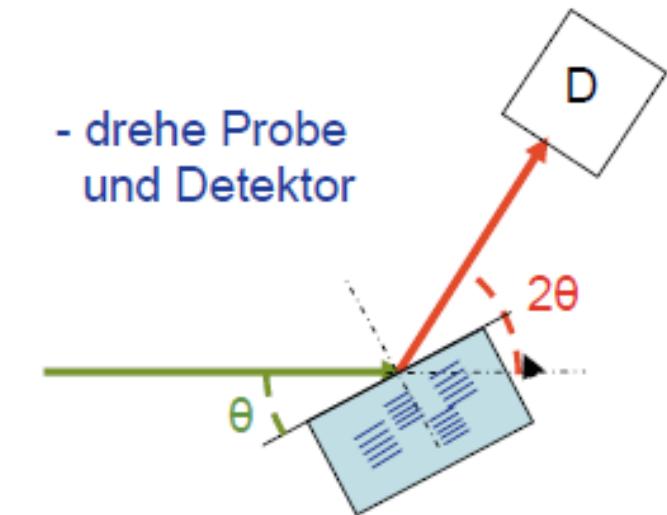
Q: Rö-Quelle  
M: Mono-  
chromator  
P: Probe  
D: Detektor  
DA: Drehachse  
 $\omega$  ( $\equiv \theta$ )

Preis  $\geq \text{€} 100.000$

## IV.4.3 Anwendungen des Drehkristallverfahrens

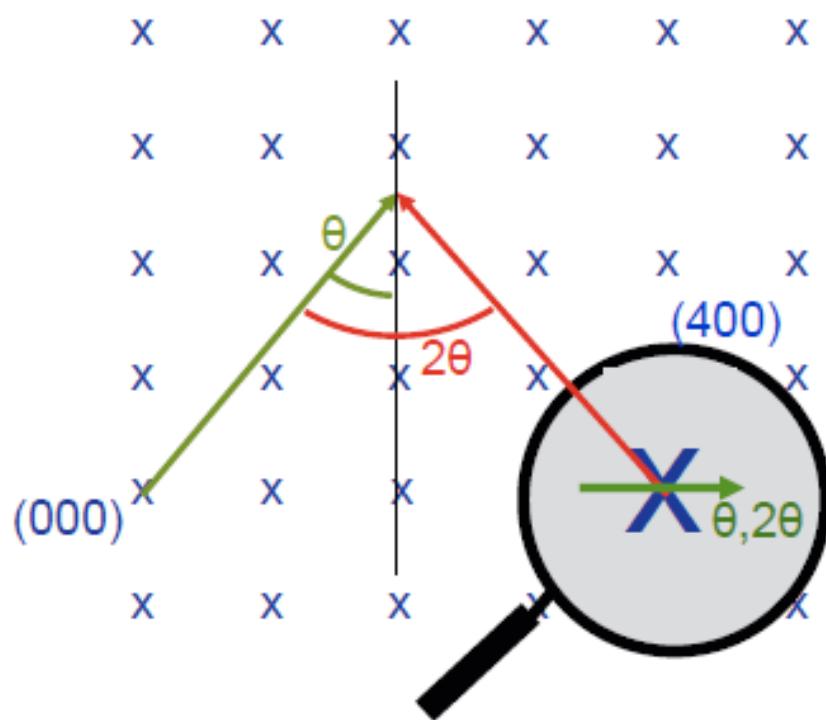
### IV.4.3.1 Kristallqualität

Messung der Variation der Gitterkonstante:



→ Peakverbreiterung  
im  $(\theta, 2\theta)$ -Scan

Darstellung im rezipr. Gitter:



Begründung: Bragg-Gleichung

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

## IV.4.3 Anwendungen des Drehkristallverfahrens

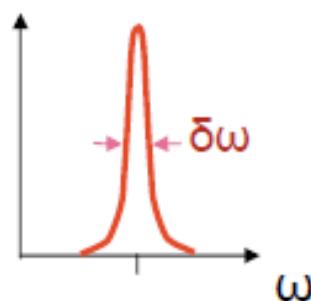
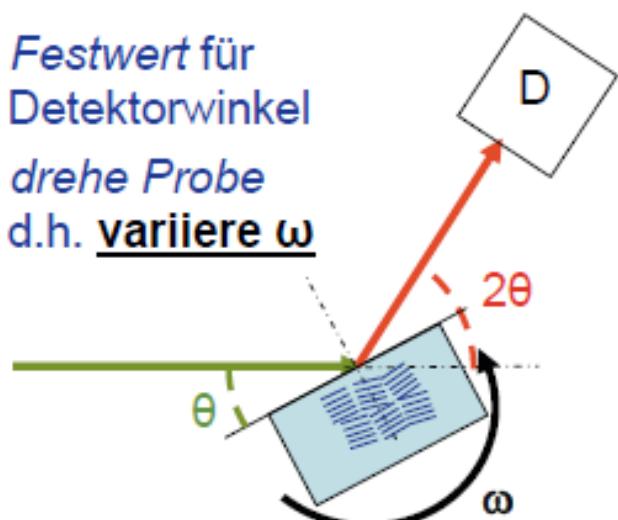
### IV.4.3.1 Kristallqualität:                    Messung der Peakbreite

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

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

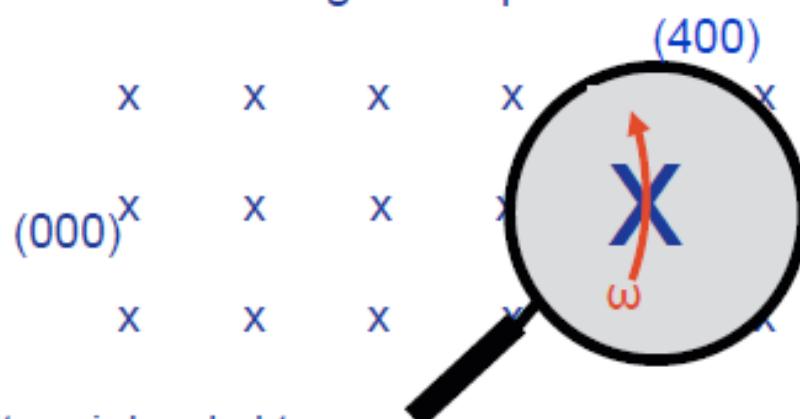
#### Rocking-Kurve:

- Festwert für Detektorwinkel
- drehe Probe d.h. variiere  $\omega$



→ sukzessive Peakbeiträge der einzelnen „Mosaiksteine“  
**Peakverbreiterung im  $\omega$ -scan**

Darstellung im rezipr. Gitter:



Nur Drehung des Kristalls

⇒  $K, k_0, k$  bleiben konstant, rez. Gitter wird gedreht

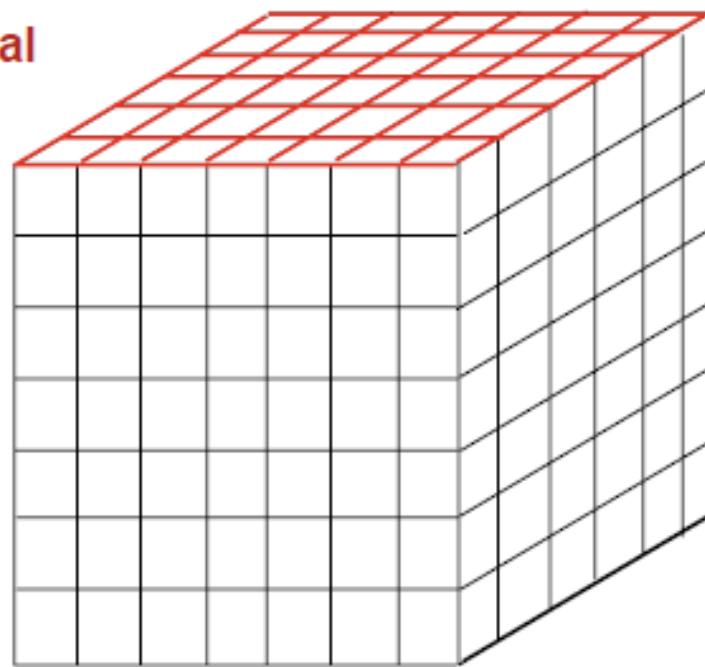
## III.6 Elektronenbeugung: 2-dim. Betrachtung

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

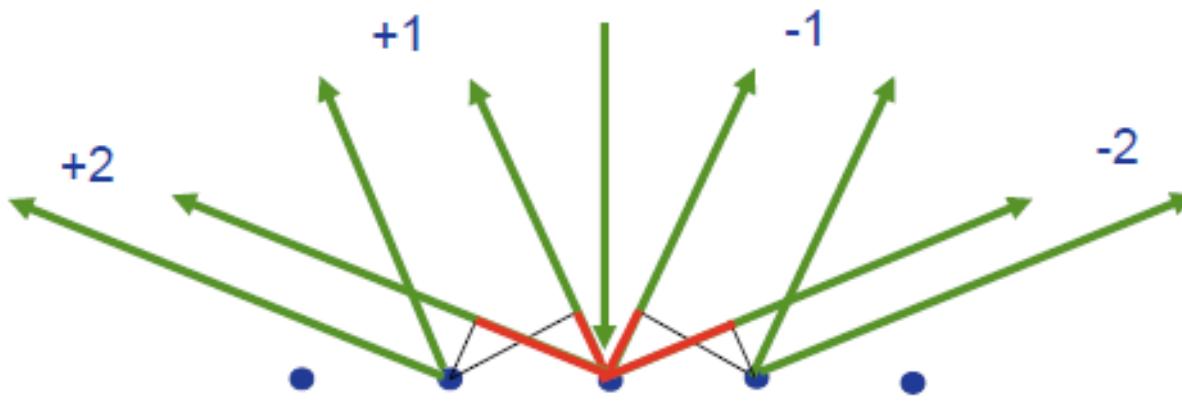
Näherung: Eindringtiefe = 1 Atomlage,  
d.h. FK ist quasi zweidimensional  
für Elektronenbeugung

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:  $\text{Gangunterschied} = n \cdot \lambda$

- Gilt sowohl in x- als auch in y-Richtung: hk - Peaks: 10,  $\bar{2}0$ , 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  $K = G$ )

### III.6.2 Ewald-Konstruktion

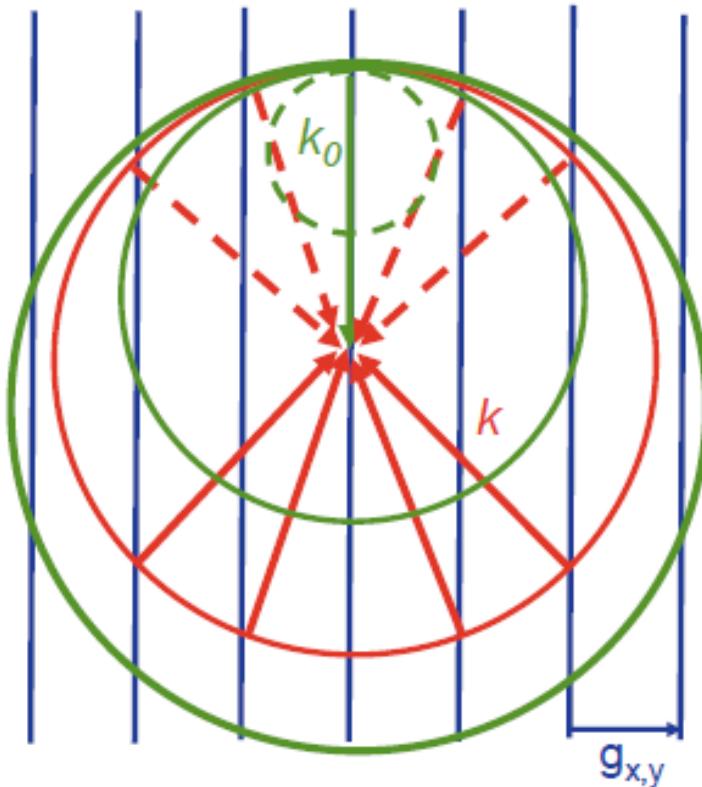
Reziprokes Gitter für Oberflächenschicht:

- Periodizität im Ortsraum in  $x$ - und in  $y$ -Richtung

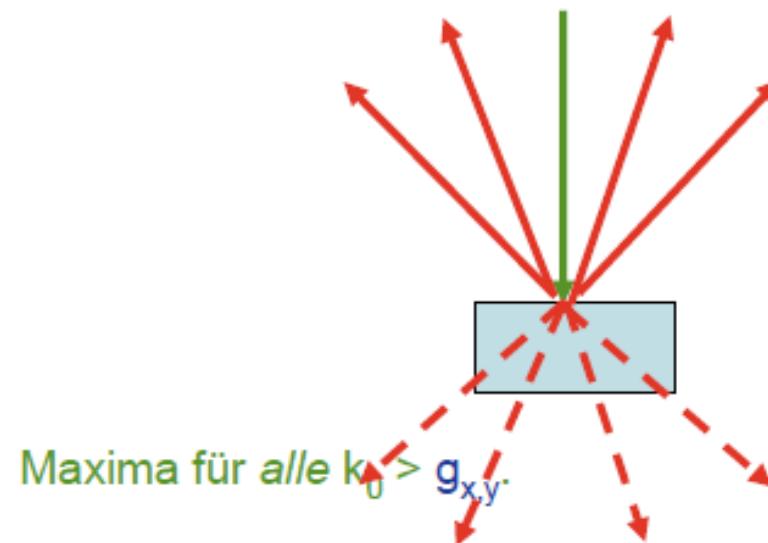
→ Fouriersumme im reziproken Raum diskrete  $G_x$ - und  $G_y$ -Werte (  $h, k$  ganzzahlig )

- keine Periodizität in  $z$ -Richtung

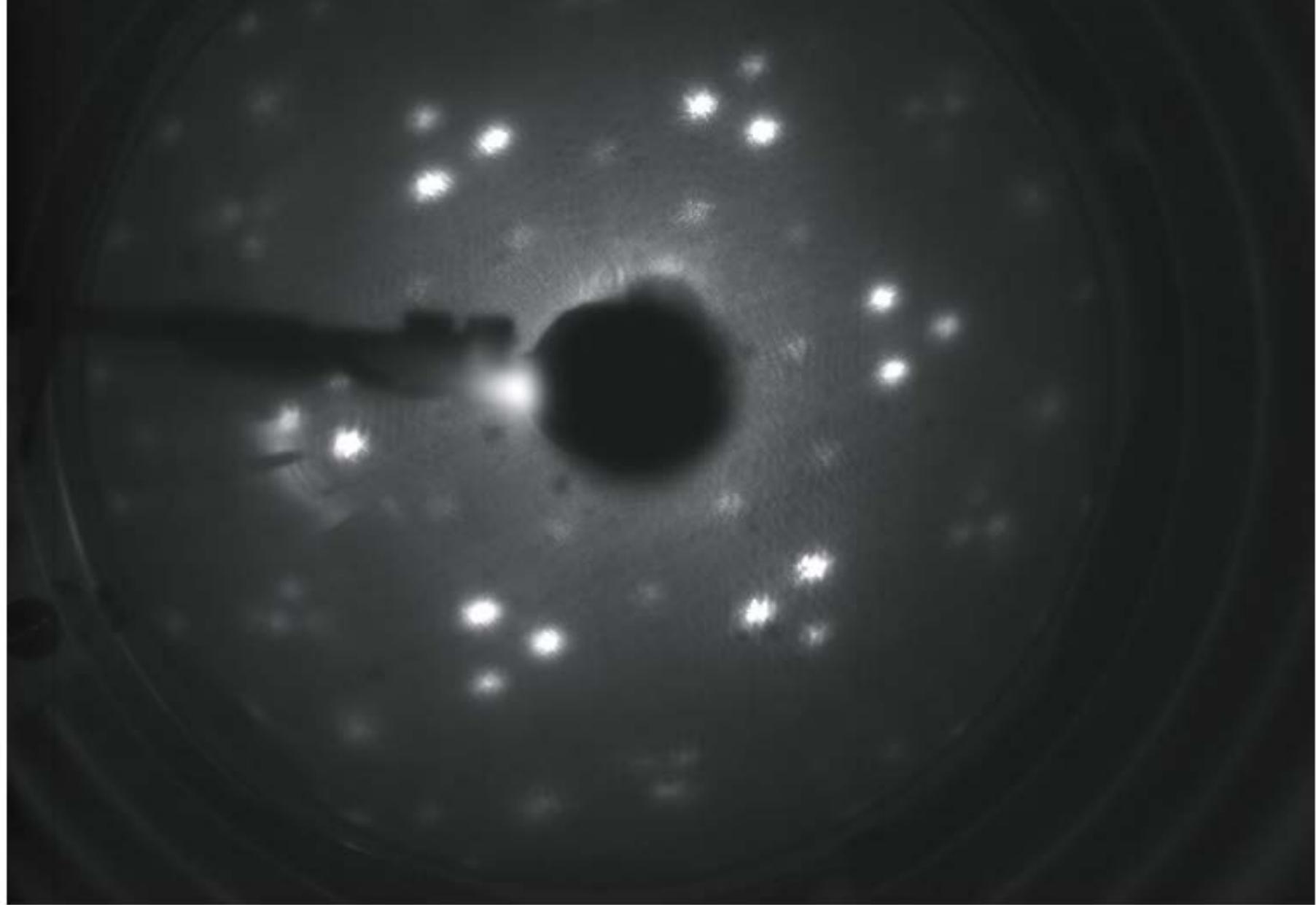
→ Fourierintegral im reziproken Raum kontinuierliche  $G_z$ -Werte (  $l$  kontinuierlich )

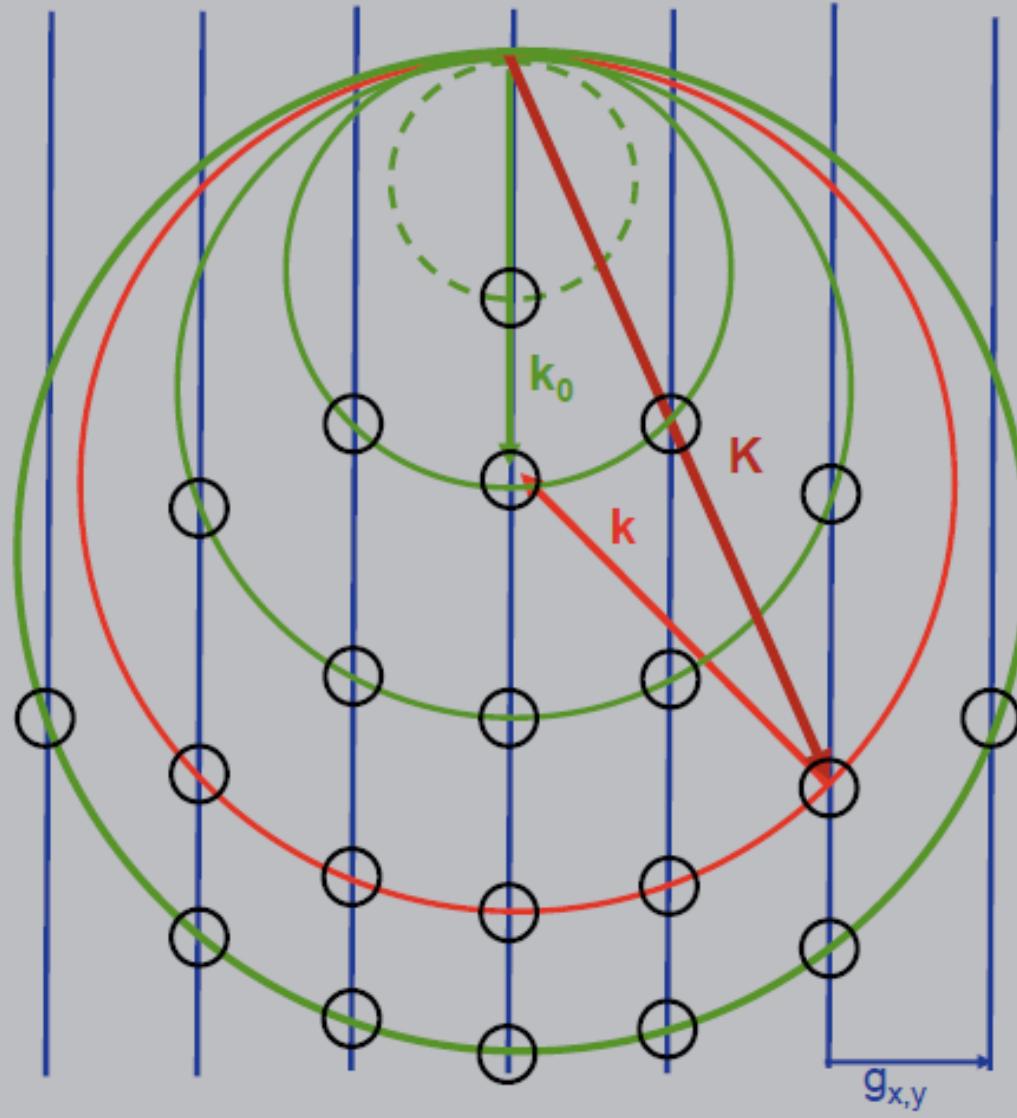


reziprokes Gitter der Oberfläche:  
Stäbe in  $z$ -Richtung



### 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“

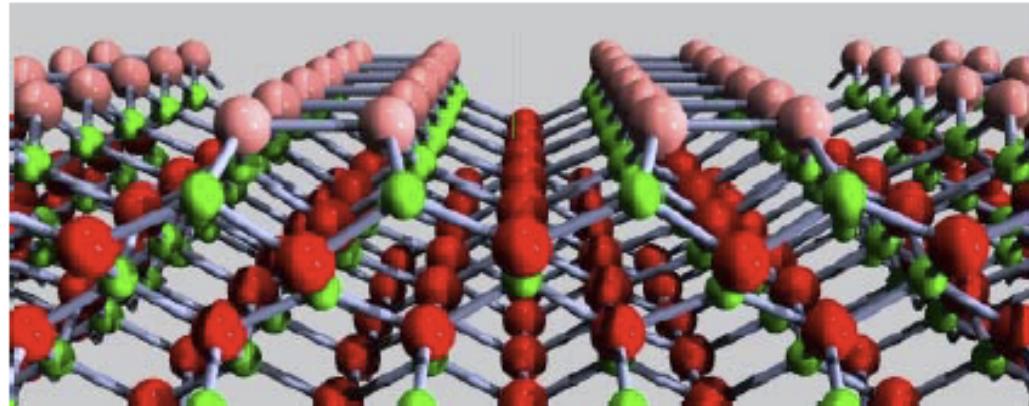
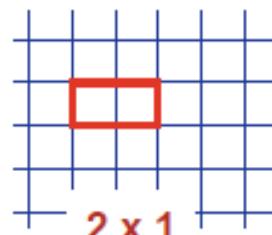
Zu (i): Spezifische Oberflächensymmetrie

Oberfläche

=> Gebrochene Bindungen

=> Atome verschieben sich,  
um Bindungen abzusättigen.

Periodizität (Einheitszelle der  
Oberfläche) ist  
größer als  
im Volumen



PRB 68 035339 (2003)