

Lauve Bedingung ( $\Rightarrow$ ) Bragg Bedingung

Ewald Konstruktion

Struktur faktor  $S_{\vec{G}} = \int_{V_{\text{zelle}}} p(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} dV$

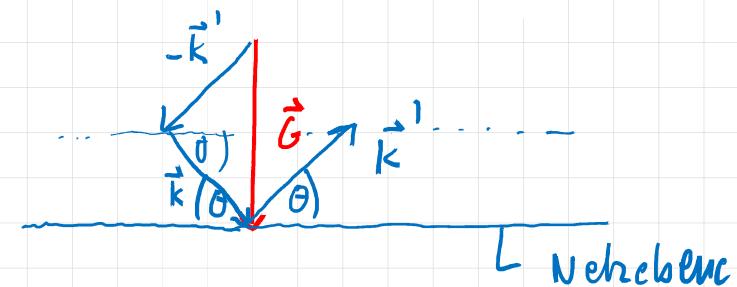
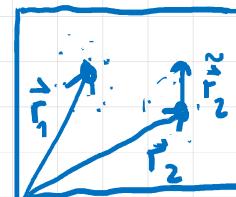
$$S_{\vec{G}} = \sum_j e^{-i\vec{G}\vec{r}_j} f_j$$

Atom form faktor  $f_j = \int_{\text{Atomvol}} g_j(\vec{r}_j) e^{-i\vec{G}\vec{r}_j} dV$

$$\psi_1 = f_1 e^{i(\vec{k}\vec{r} - wt + \varphi_1)}$$

$$\psi_2 = f_2 e^{i(\vec{k}\vec{r} - wt + \varphi_2)}$$

$$I \sim |S_G|^2$$



$$\psi_1 + \psi_2 = e^{i(\vec{k}\vec{r} - wt)} \left( f_1 e^{-i\vec{G}\vec{r}_1} + f_2 e^{-i\vec{G}\vec{r}_2} \right)$$

• Beispiel: Strukturfaktor des bcc Gitters, beschrieben als sc Gitter mit 2-Atom Basis

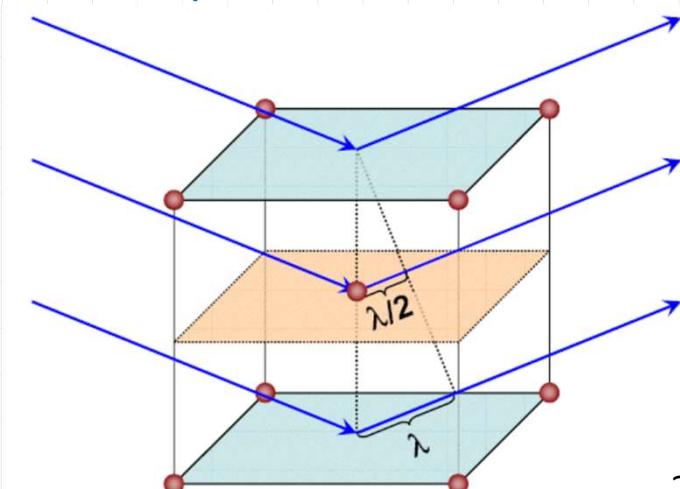
$$f_1 = f_2 ; \vec{r}_1 = 0 ; \vec{r}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} ; \vec{G} = \begin{pmatrix} uh \\ hk \\ ul \end{pmatrix} \cdot \frac{2\pi}{a} \quad | \quad \vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} ; \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

Also  $S_{\vec{G}} = f_1 [ e^{-i\vec{G} \cdot 0} + e^{-i\pi (uh + hk + ul)} ]$

$$= \begin{cases} 2f_1 & \text{wenn } uh + hk + ul \text{ gerade} \\ 0 & \text{wenn } uh + hk + ul \text{ ungerade} \end{cases}$$

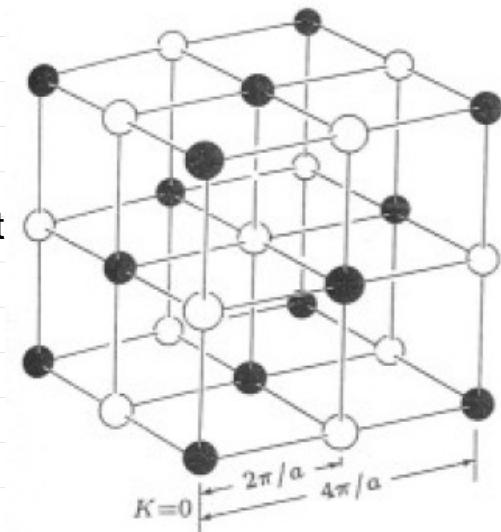
gerade  
ungerade

In erster Beugungsordnung verschwinden alle Reflexe mit ungerader Summe der Miller Indizes: (111), (100), etc.  
In zweiter Beugungsordnung ( $n=2$ ) sind diese Reflexe in maximaler Intensität vorhanden.



Häufig bezeichnet man die  $n$ -te Beugungsordnung an der Ebene  $(hkl)$  als  $(nh nk nl)$  Reflex, also z. B. (222) Reflex = zweite Beugungsordnung an (111).

Alle weißen Reflexe werden durch den Strukturfaktor gelöscht; übrig bleibt das fcc-Gitter, dass reziprok zum bcc-Gitter ist



• Bemerkung zum Atomformfaktor  $f_j = \int_{V_{\text{atom}}} \rho_j(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} dV$

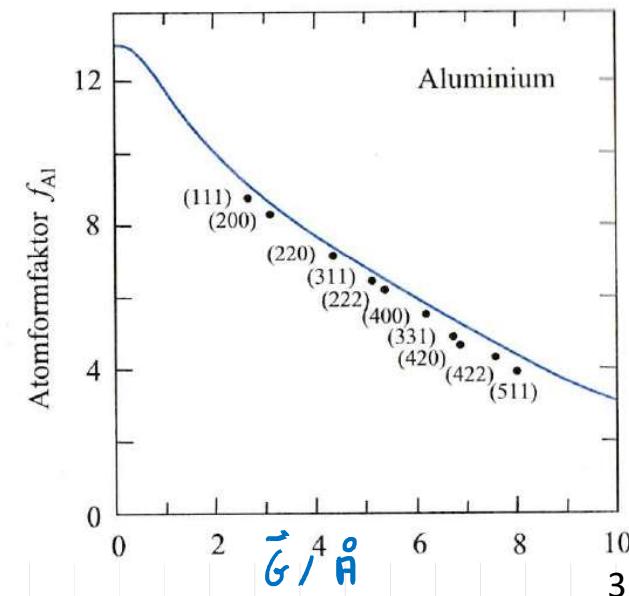
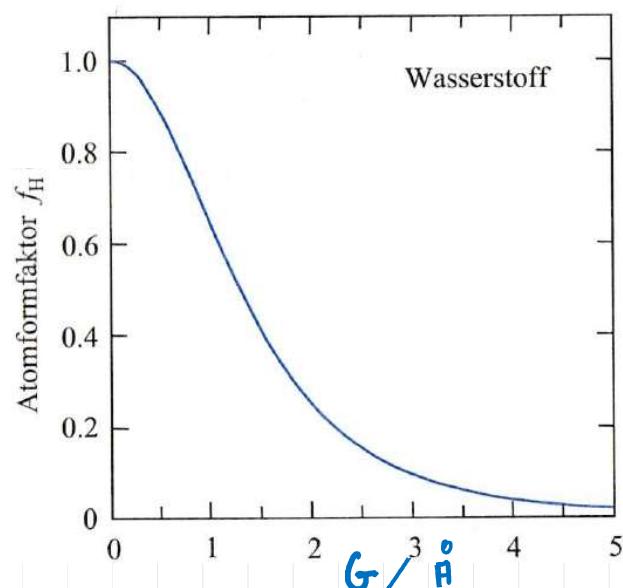
Wären sämtliche  $e^-$  am Ort  $\vec{r} = 0$

konzentriert dann

$$\rho(\vec{r}) = Z S(\vec{r} - 0) \text{ und}$$

$$f_j = Z$$

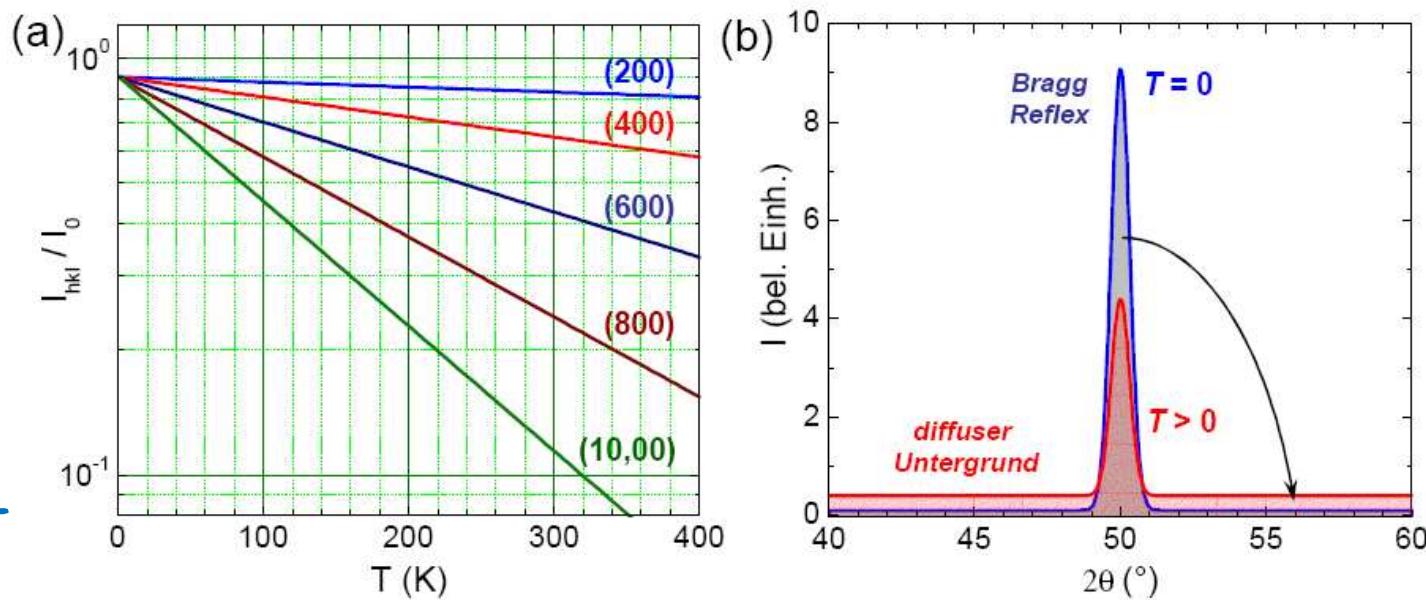
Räumliche Ausdehnung der  $e^-$  setzt  $f_j$  herab, umso mehr, je größer  $\vec{G}$ .



- Der Debye Waller Faktor beschreibt das Verhalten der Streuintensität als Funktion der Temperatur:

$$I(T) = D(T) \cdot I_0$$

$$D(T) = e^{-k_B T / n \omega^2} \cdot G^2$$



### 3.4 Experimentelle Röntgenbeugungsverfahren

Mit der Ewald Konstruktion ist anschaulich klar, dass für festes  $\vec{k}$  und feste Kristallorientierung die Beugungsbedingung i. A. nicht erfüllt werden kann (ein Punkt des reziproken Raums liegt auf der Ewald-Kugel). Also Variation von  $\vec{k}$  oder Kristallorientierung im Experiment.

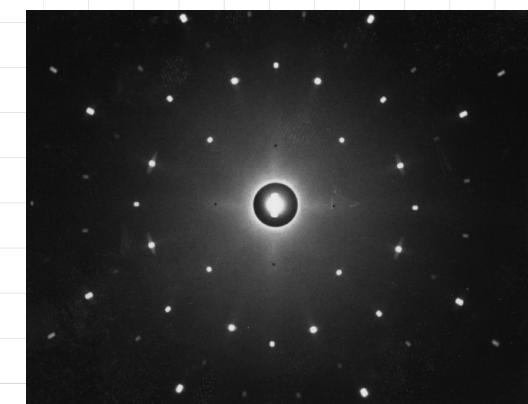
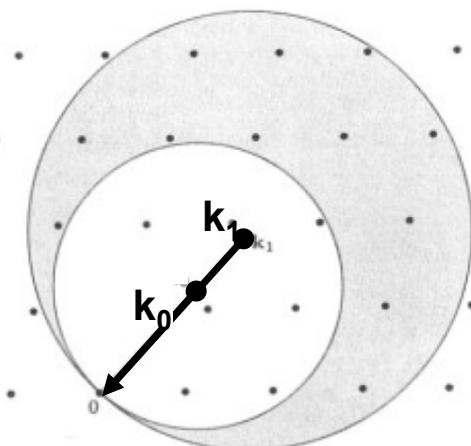
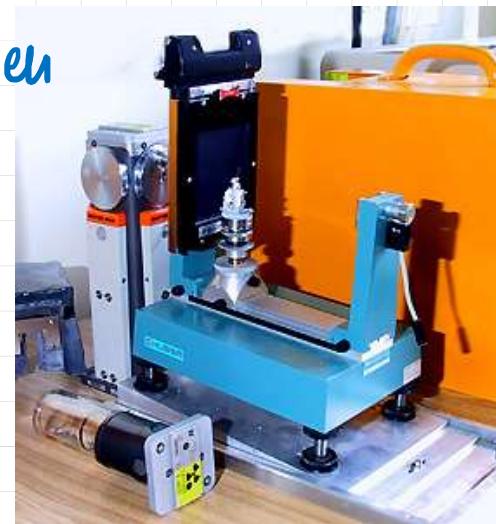
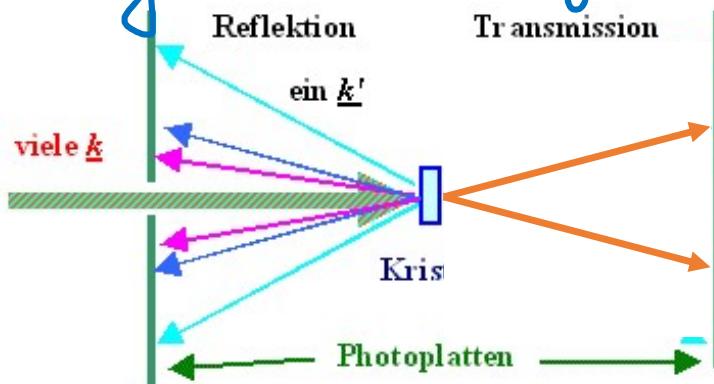
### 3.4 Experimentelle Beugungsverfahren

Damit  $\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$ , muss bei experimentellen Verfahren  $\vec{k}$  oder Kristallorientierung variiert werden.

Laue Verfahren: polychromatischer Röntgenstrahl mit  $[\lambda_1, \lambda_0]$  und  $k$ -Intervall  $[k_0, k_1]$

Einstrahlung längs Symmetrieachse  $\Rightarrow$  Beugung zeigt Symmetrie des rec. Gitters.

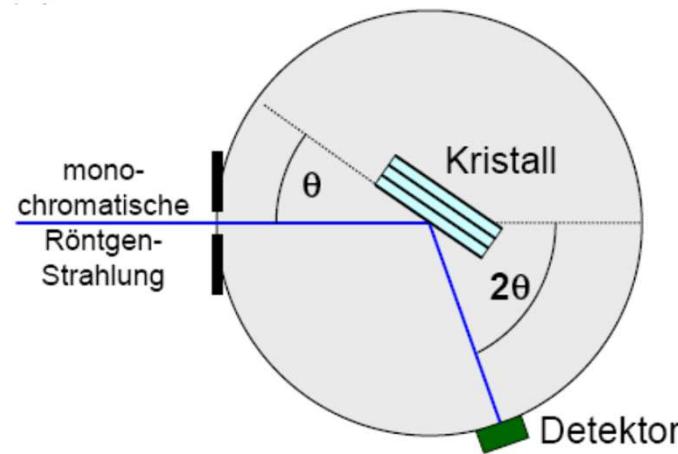
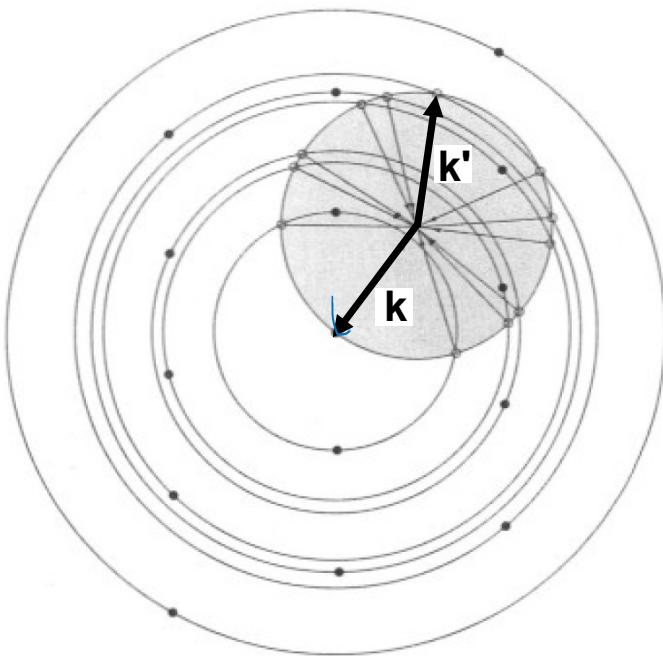
Anwendung: Orientierung von Kristallen



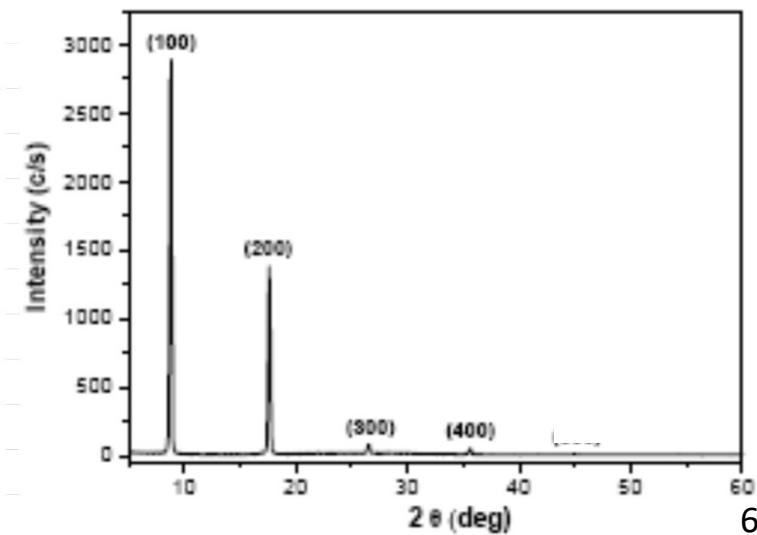
Laue Diagramm von Si in [001] 5

Drehkristallverfahren:  $\vec{k}$  fester Richtung und mit festem Wert (monochromatisch).

Kristall, und damit der reciproke Raum, wird gedreht. Also beschreiben die Punkte des reciproken Raumes Kreise, die die Ewald Kugel für  $|\tilde{G}| \leq 2k$  schneiden. Es gibt für diese  $\tilde{G}$  also Reflexe bei bestimmten Winkeln. Praktisch wird man suchen nach Reflexen  $\parallel$  zur Probenoberfläche in der  $\theta - 2\theta$  Geometrie durchgeführt.



Perylenschicht auf amorphem Substrat



Anwendungsbeispiel : Texturanalyse einer dünnen Ag - Schicht auf amorphem Substrat

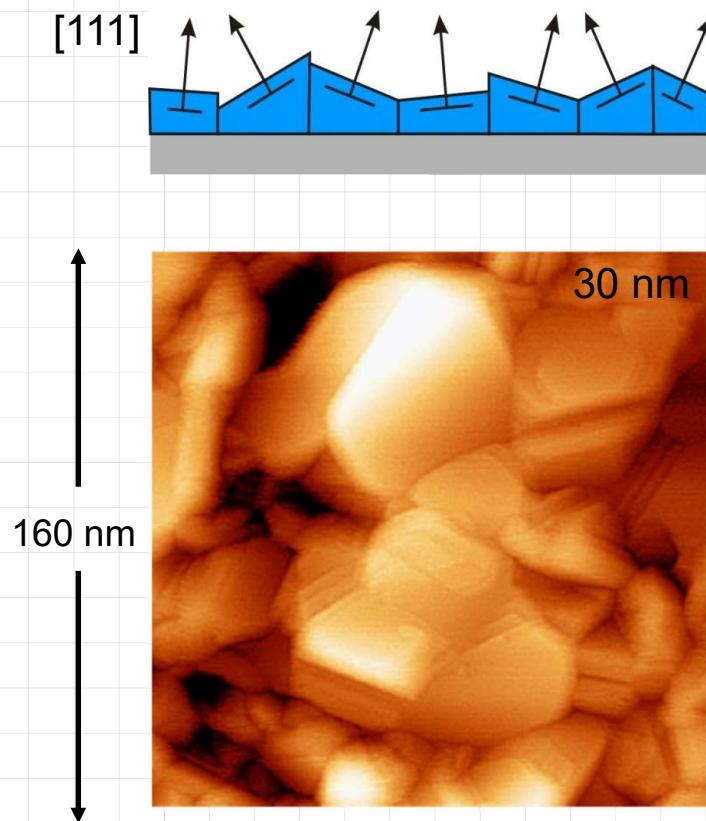
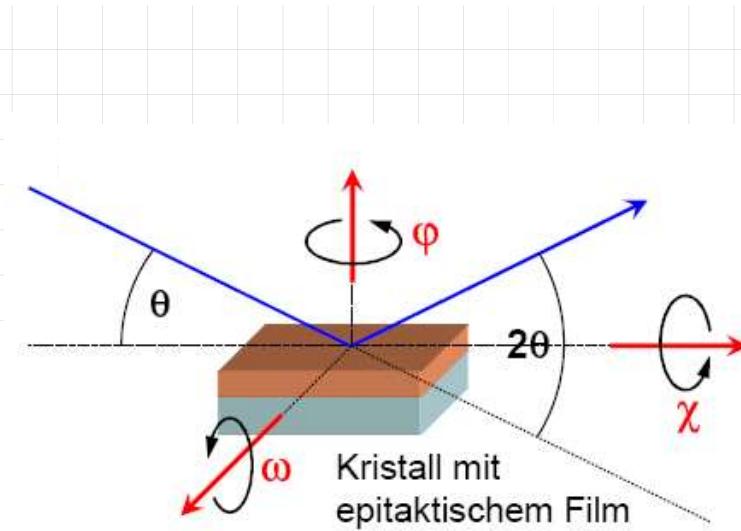
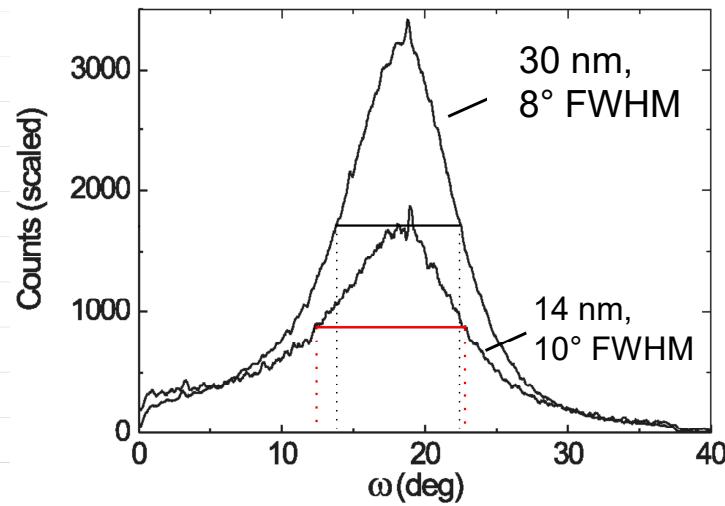


Abb. 3.14

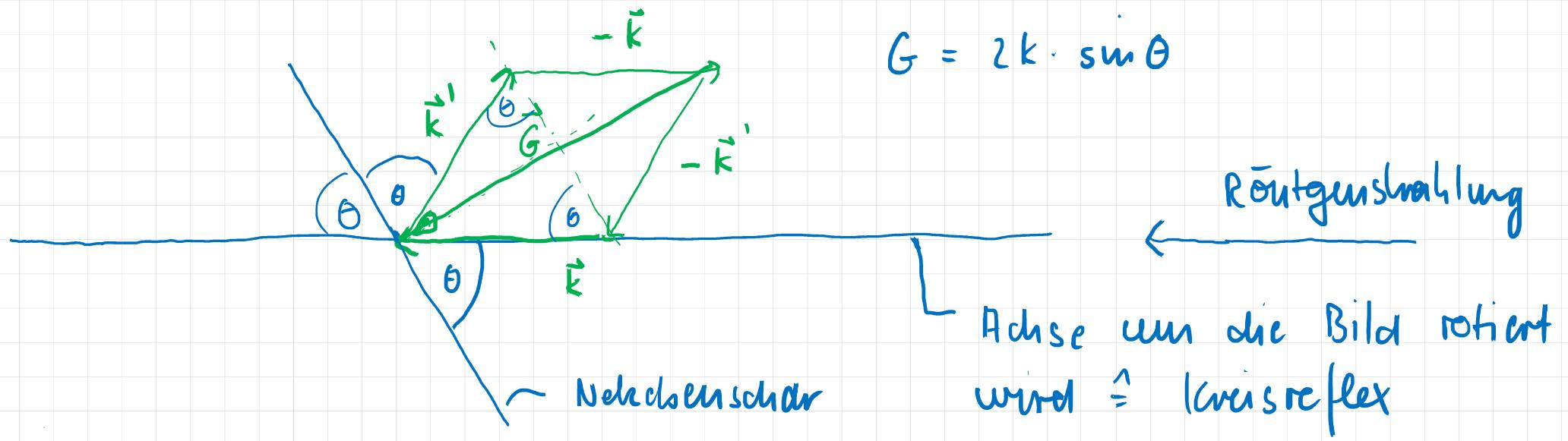


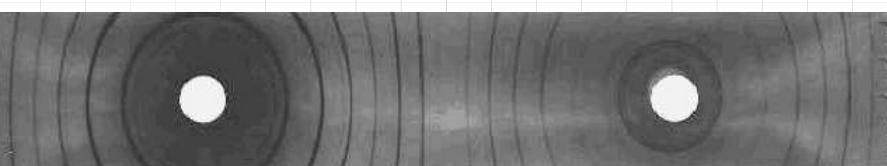
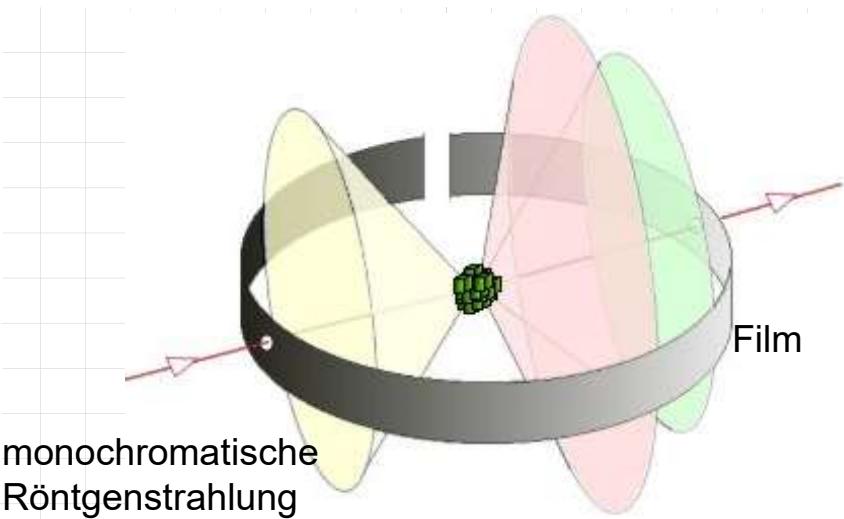
Rocking-Kurve Ag-Schicht auf amorphem Si, (111)-Reflex



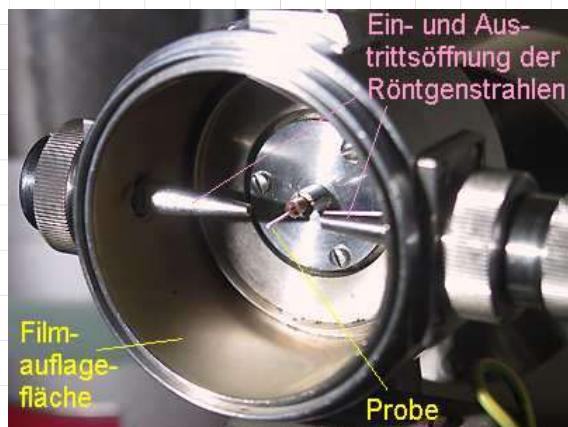
## Pulver - oder Debye - Scherer Verfahren:

Man untersucht ein Pulver aus Kristalliten, so dass gleichzeitig alle Orientierungen des reciproken Gitters vorhanden sind. Der Beugungsreflex zur Netzebene ( $hkl$ ) ist ein Kreis, der durch die Rotation von  $\vec{k}$  um die  $\vec{k}$ -Achse beschrieben wird. Vorteil des Verfahrens: man benötigt keinen makroskopischen Einkristall (oft nicht einfach herstellbar).

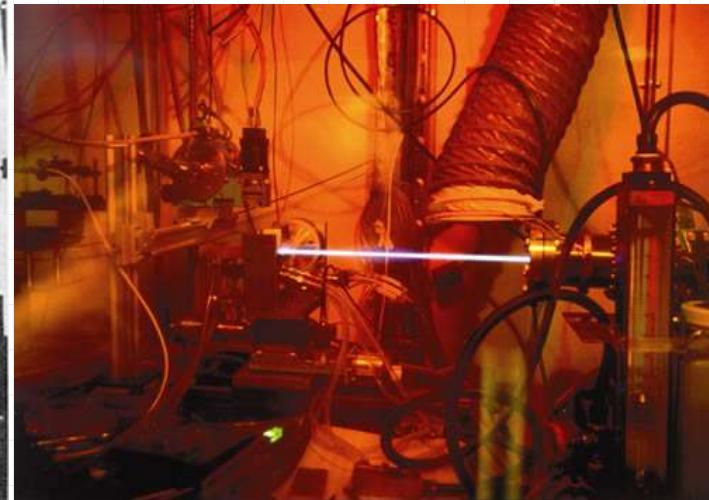
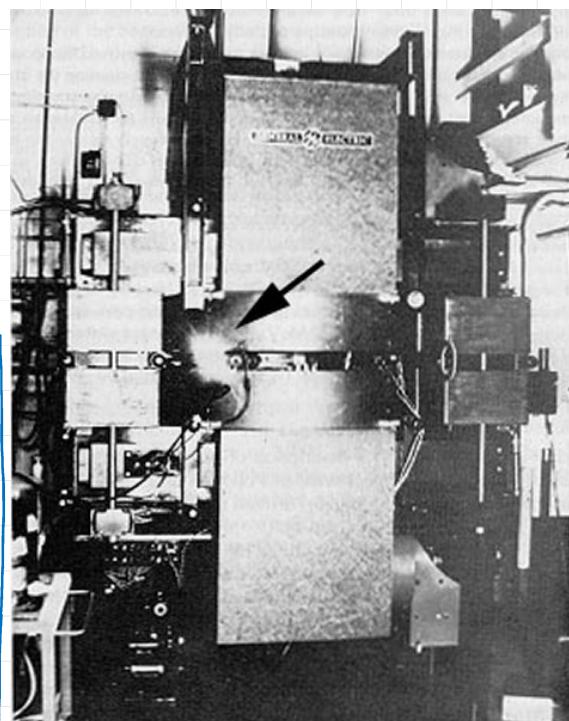




Typisches Foto aus einer Debye-Scherrer Kamera



Die Röntgenbeugung hat einen großen Aufschwung durch den Bau von Synchrotronstrahlungsquellen erfahren. Sie liefern Strahlung mit mehr als  $10^{10}$  größerer Brillianz, verglichen mit Laborgeräten.



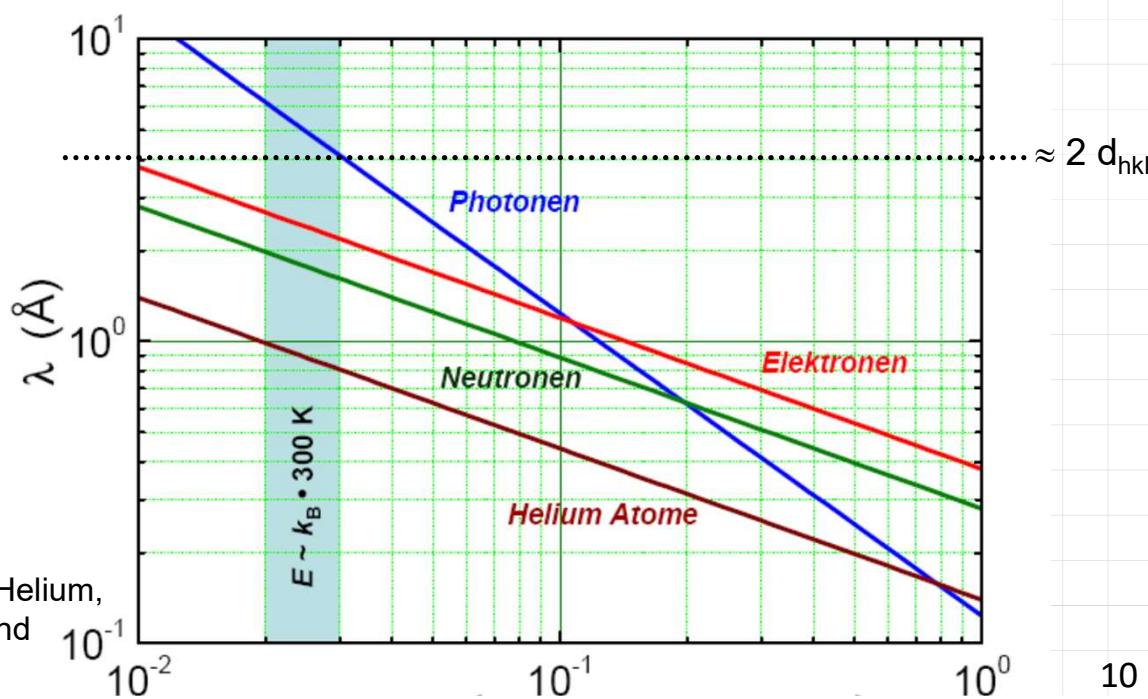
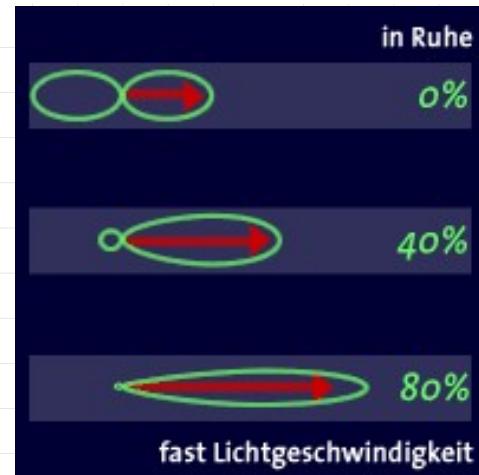
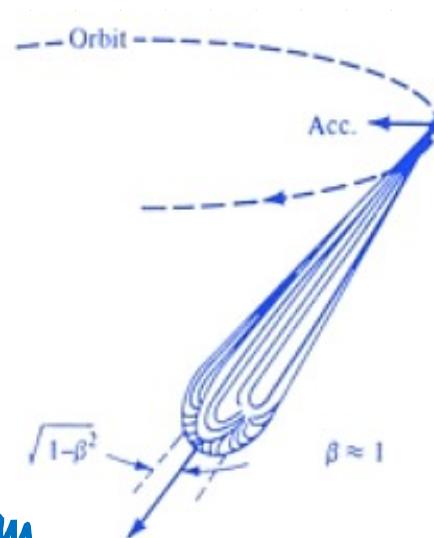
Das 1946 gebaute General-Electric Synchrotron, an dem die Synchrotronstrahlung entdeckt wurde

Die Abschwellcharakteristik eines im Kreis rotierenden  $e^-$  in seinem Ruhesystem ist die Dipolcharakteristik. Im Laborsystem tritt eine scharfe Fokussierung in Vorwärtsrichtung auf, bedingt durch die Lorentztransformation vom Ruhesystem ins Laborsystem.

Neben Photonen können auch Teilchen mit Ruhemasse  $\neq 0$  an Kristallen gebremst werden. Die de Broglie Wellenlänge ist

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad \text{nicht rel.}$$

x-Achse: Energie der Partikel  
in Einheiten von eV für Neutronen und Helium,  
in Einheiten von 1 keV für Elektronen und  
in Einheiten von 100 keV für Photonen



Neutronen thermischer Energie ( $\approx 0,01 \text{ eV}$ ) besitzen die richtige Wellenlänge und noch ausreichend starke WW und Materie-Streuung beruht auf

- WW der Neutronen mit Atomkern
- WW Neutronenspin mit Elektronenspin  $\rightarrow$  magnetische Information

Helium - Atomstahl thermischer Energie sind absolut oberflächenempfindlich und wechselwirken mit der totalen Elektronendichte bereits  $\approx$  vor der Oberfläche

Elektronen wechselwirken stark mit Materie und können nur für dünne Proben oder Oberflächen eingesetzt werden.

- hochenergetische  $e^-$  ( $\approx 100 \text{ keV}$ ) Beugungsbilder im TEM
- niederenegertische  $e^-$  ( $\approx 100 \text{ eV}$ ) Beugung an Oberflächen

Beugung von  $e^-$  an Oberflächen wurde 1926 von Davisson & Germer entdeckt (Nobelpreis 1937).

$e^-$  mit  $\approx 100 \text{ eV}$  wechselwirken näherrungsweise nur mit der obersten Kristalllage  $\rightarrow$  Oberflächenkristallographie

Methode heißt LEED von low energy electron diffraction

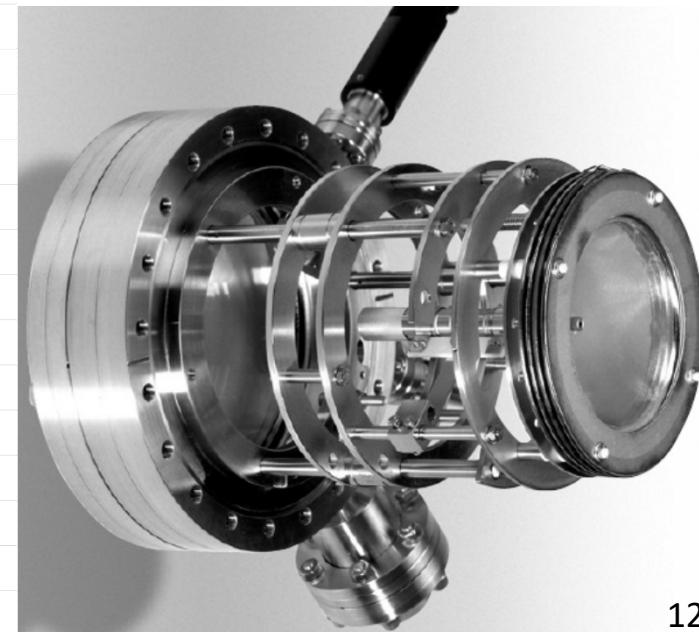
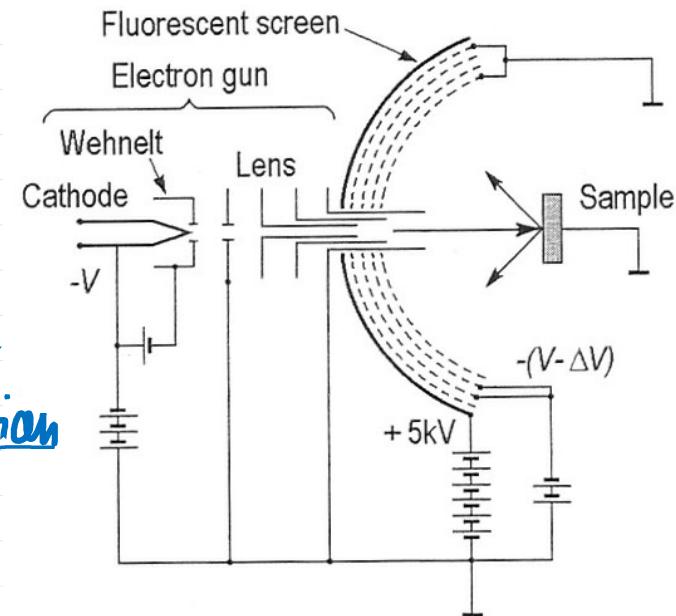
Da  $e^-$  nur mit Oberflächenlage in WW  $\Rightarrow$   
Lame Gleichung für 2D-Gitter.

$$\vec{R}_{||} = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 \quad \vec{e}_{\perp} = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|}$$

$$\vec{G}_{||} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{A_2} (\vec{a}_2 \times \vec{e}_{\perp})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{A_2} (\vec{e}_{\perp} \times \vec{a}_1) \text{ prüfen!}$$



$\vec{G}_{\parallel}$  und  $\vec{R}_{\parallel}$  liegen in einer Ebene. Wir können schreiben

$$\vec{k} = \vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_{\perp} \quad \vec{k}' = \vec{k}'_{\parallel} + \vec{k}'_{\perp}$$

Die Laue Bedingung

$$\vec{R}_{\parallel} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m \quad m \in \mathbb{Z}$$

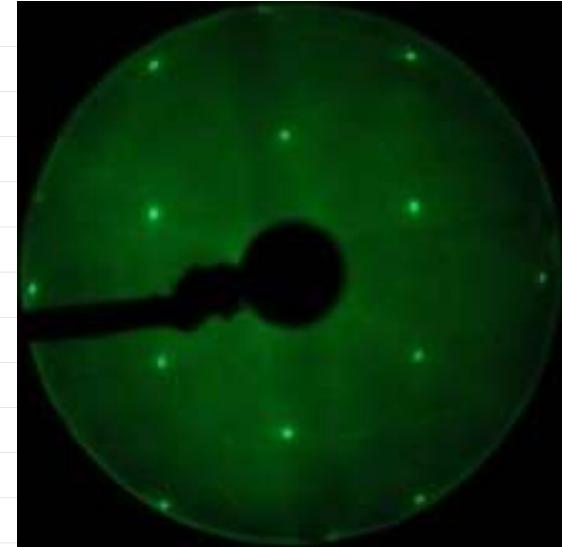
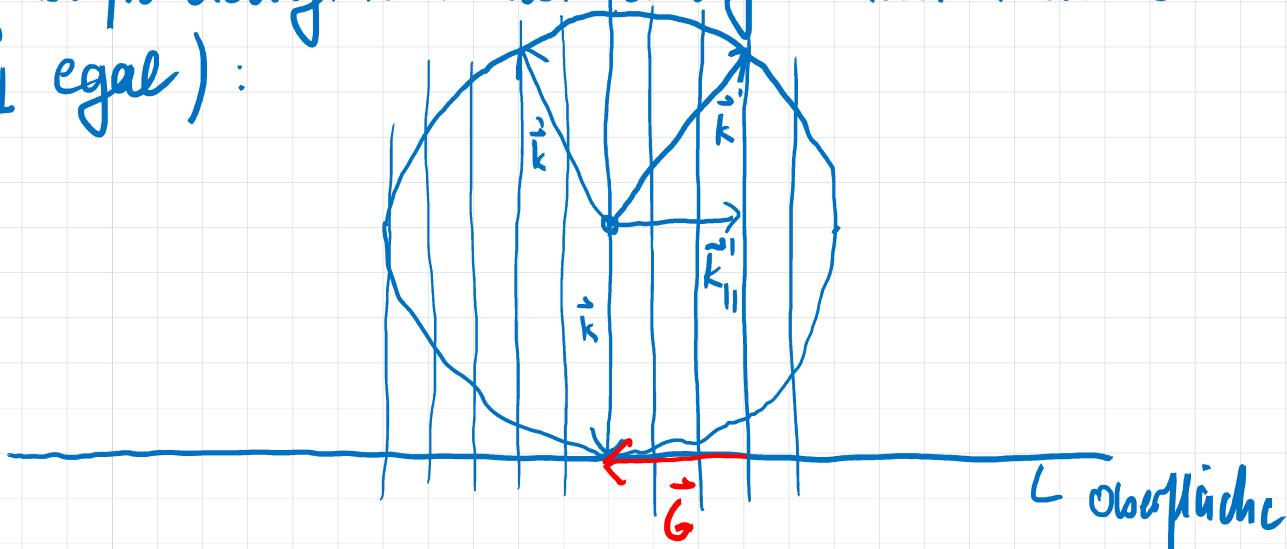
$$(\Rightarrow) \vec{R}_{\parallel} \cdot (\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}) + \underbrace{\vec{R}_{\parallel} \cdot (\vec{k}_{\perp} - \vec{k}'_{\perp})}_{= 0 \text{ da } \perp \text{ zueinander}} = 2\pi m$$

$\vec{k}_{\perp}, \vec{k}'_{\perp}$  beliebig

$$\vec{R}_{\parallel} \cdot (\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}) = 2\pi m$$

$$e^{i \vec{R}_{\parallel} \cdot (\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel})} = 1 \quad (\Rightarrow) \vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel} = \vec{G}_{\parallel}$$

Die entsprechende Ewald - Konstruktion zur Beugung an 2D - Oberflächengittern hat Stangen statt Punkte ( $\vec{k}_\perp$  und  $\vec{k}'_\perp$  egal):



Pt(111): direkte Abbildung des reziproken Oberflächengitters

Da üblicherweise  $\vec{k}_{||} = 0$

$$\vec{G}_{||} = \vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||} \quad \text{zu} \quad \vec{G}_{||} = -\vec{k}'_{||}$$

da auch  $-\vec{G}_{||}$  ein Gittervektor

$$\boxed{\vec{G}_{||} = \vec{k}'_{||}}$$

Das LEED - Bild ist also die direkte Abbildung des 2D reziproken Gitters!