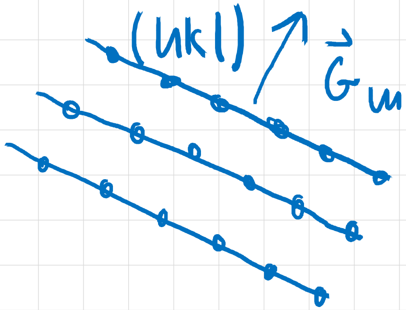
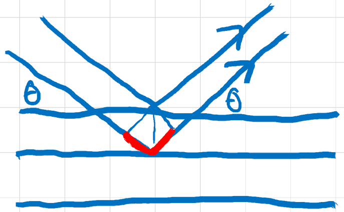
- Netzebenschar

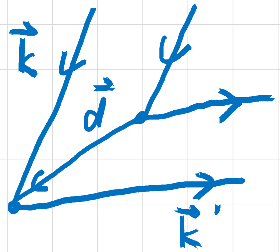



$\vec G_{min} = h\vec b_1 + k\vec b_2 + l\vec b_3$

| | | |
|---|---|---|
| Ebenen | (hkl) | {hkl} |
| Richtungen | [$u_1 u_2 u_3$] | $\langle u_1 u_2 u_3 \rangle$ |

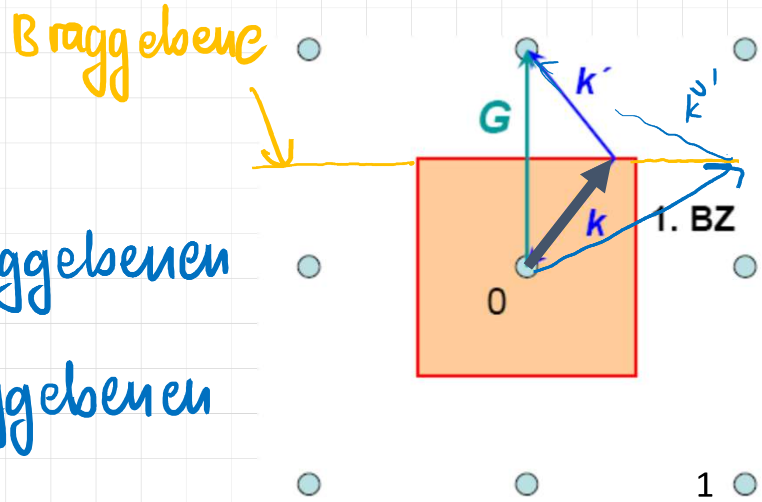
- Bragg Bedingung $\quad m\lambda = 2d \sin\theta$




- Laue Bedingung $\quad \vec R\,(\vec k - \vec k') = 2\pi m \,;\; m \in \mathbb{Z} \quad \Rightarrow \quad \vec k - \vec k' = \vec G$

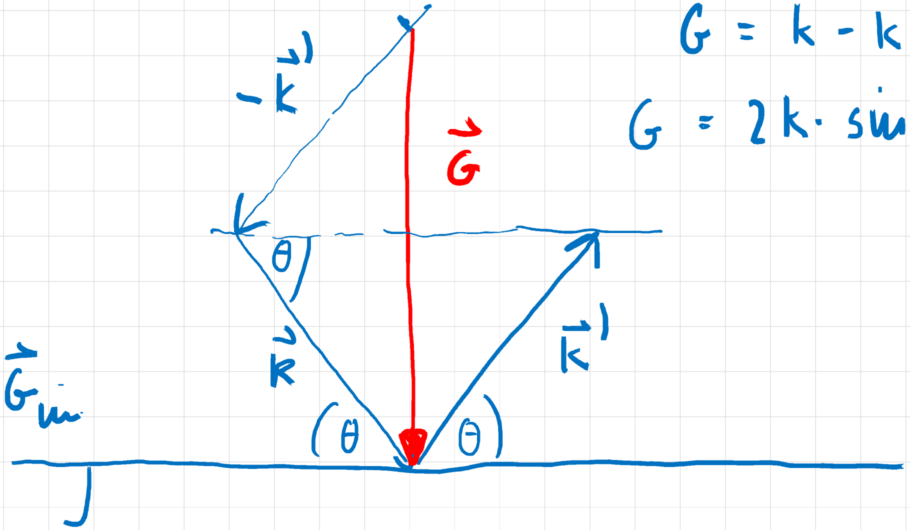
- Veranschaulichung $\quad \vec k \cdot \vec G_e = \frac{G}{2} \quad \Rightarrow$




Bedingung definiert Ebenen im rez Raum: Braggebenen

1. BZ ist inneres Volumen um Gitterpunkt ohne Braggebenen

• Herleitung der Bragg-Bedingung aus der Laue-Bedingung




$\vec{G} = \vec{k} - \vec{k}'$

$G = 2k \cdot \sin\theta$

Streuvektor $\vec{G}$ ganzzahliges Vielfaches des kürzesten rez. Gittervektors $\vec{G}_{min} \parallel \vec{G}$, d.h. $\vec{G} = n\,\vec{G}_{min}$

Also

$$n\,G_{min} = 2k \sin\theta \iff$$ Netzebenenschar $\perp \vec{G}$

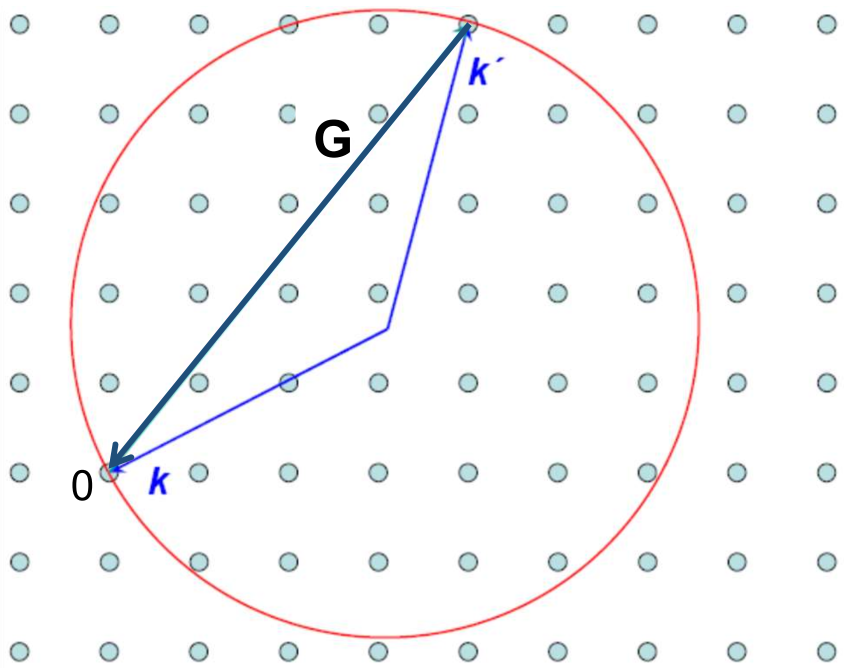
$$n\,\frac{2\pi}{d} = 2k \sin\theta \iff$$

$$n\,\frac{2\pi}{d} = 2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \sin\theta \iff$$

$$n\lambda = 2d \sin\theta$$ was die Bragg Bedingung ist

$n \cdot G_{min} = nh\,\vec{b}_1 + nk\,\vec{b}_2 + nl\,\vec{b}_3 \;\hat{=}\;$ n.te Beugungsordnung an (111) oder (nnn)-Reflex

- Die <u>Ewald-Konstruktion</u> ist eine besonders anschauliche Darstellung der Laue Bedingung
  - $\vec{k}$ endet am Ursprung
  - schlage Kreis vom Radius k um Anfangspunkt von $\vec{k}$.
  - schneidet Kreis neben Ursprung einen weiteren Gitterpunkt, so gibt es für diesen Streuvektor einen Beugungsreflex mit $\vec{k}'$



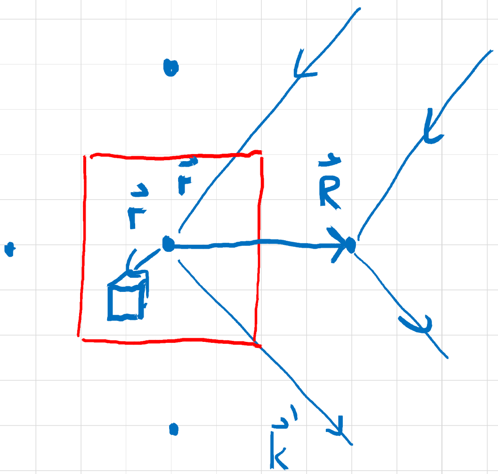

Verbindet $\vec{G}$ diesen Punkt mit Ursprung 0, so ist

$$\vec{G} = \vec{k} - \vec{k}'$$

## 3.3 Strukturfaktor und Atomformfaktor

Bisher
- Annahme punktförmiger Streuer an Gitterpunkten
- nur Richtungen möglicher Streureflexe, keine Intensität
  - Basis
  - Temp
  - Streuvermögen

• Betrachte einzelne Elementarzelle für Analyse




Streuamplitude in Richtung $\vec{k}'$ wird bestimmt durch Superposition der Teilwellen von Streuvolumina $dV$ mit Elektronendichten $\rho(\vec{r})$, Phasen $\varphi(\vec{r})$ und Phasenfaktoren $e^{i\varphi(\vec{r})}$

$$S_{\vec{G}} = \int_{V_{\text{Zelle}}} \rho(\vec{r})\, e^{i\varphi(\vec{r})}\, dV$$

Phase von Welle gestreut an $\vec{R}$ in Richtung von $\vec{G}$:

$$(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R} = 2\pi m \quad \Leftrightarrow \quad -\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi m = \varphi(\vec{R})$$

$$m \in \mathbb{Z}$$

Phase von Teilwelle gestreut in dV bei $\vec{r}$ mit Elektronendichte $\rho(\vec{r})$

$$-\vec{G} \cdot \vec{r} = \varphi(\vec{r})$$

Also ist die Streuamplitude

Strukturfaktor $$S_{\vec{G}} = \int_{V_{Zelle}} \rho(\vec{r}) \cdot e^{-i\vec{G}\vec{r}} \, dV$$

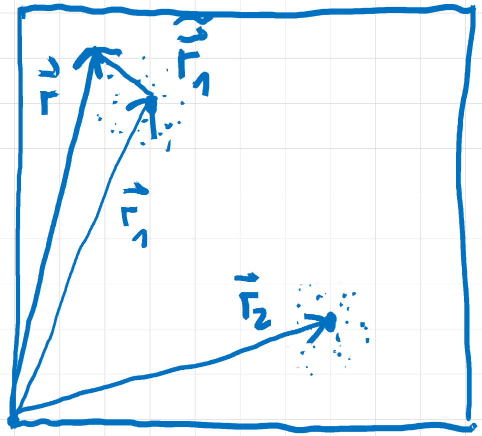
$S_{\vec{G}}$ ist die Fouriertransformierte der Elektronendichte einer Elementarzelle

Die messbare Streuintensität eines Kristalls

$$I_{\vec{G}} \sim |S_{\vec{G}}|^2$$

- Wir wählen nun folgende Zerlegung:

und schreiben die Elektronendichte in einer Elementarzelle als




$$\rho(\vec{r}) = \sum_j \rho_j(\vec{r}-\vec{r}_j) = \sum_j \rho_j(\tilde{\vec{r}}_j)$$

Damit wird

$$S_{\vec{G}} = \int_{V_{zell}} \sum_j \rho_j(\tilde{\vec{r}}_j) \cdot e^{-i\vec{G}(\vec{r}_j + \tilde{\vec{r}}_j)} \, dV$$

$$= \sum_j e^{-i\vec{G}\vec{r}_j} \underbrace{\int_{\text{Atomvolumen } j} \rho_j(\tilde{\vec{r}}_j)\, e^{-i\vec{G}\tilde{\vec{r}}_j}\, dV}$$

Index $j$ nicht mehr nötig an Variable $\tilde{\vec{r}}_j$

Fouriertransformierte der Elektronendichte des $j$-ten Basisatoms $\rho_j(\vec{r})$ = Atomformfaktor $f_j$

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

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

$$f_1 = f_2 \qquad \vec{r}_1 = 0 \qquad \vec{r}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix} \qquad \vec{G} = \begin{pmatrix}nh\\nk\\nl\end{pmatrix} \cdot \frac{2\pi}{a}$$

$$\vec{S}_G = f_1 \left[ e^{-iG0} + e^{-i\pi(nh+nk+nl)} \right.$$

$$= \begin{cases} 2f_1 & \text{wenn } nh+nk+nl \text{ gerade} \\ 0 & \text{wenn } nh+nk+nl \text{ ungerade} \end{cases}$$

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.