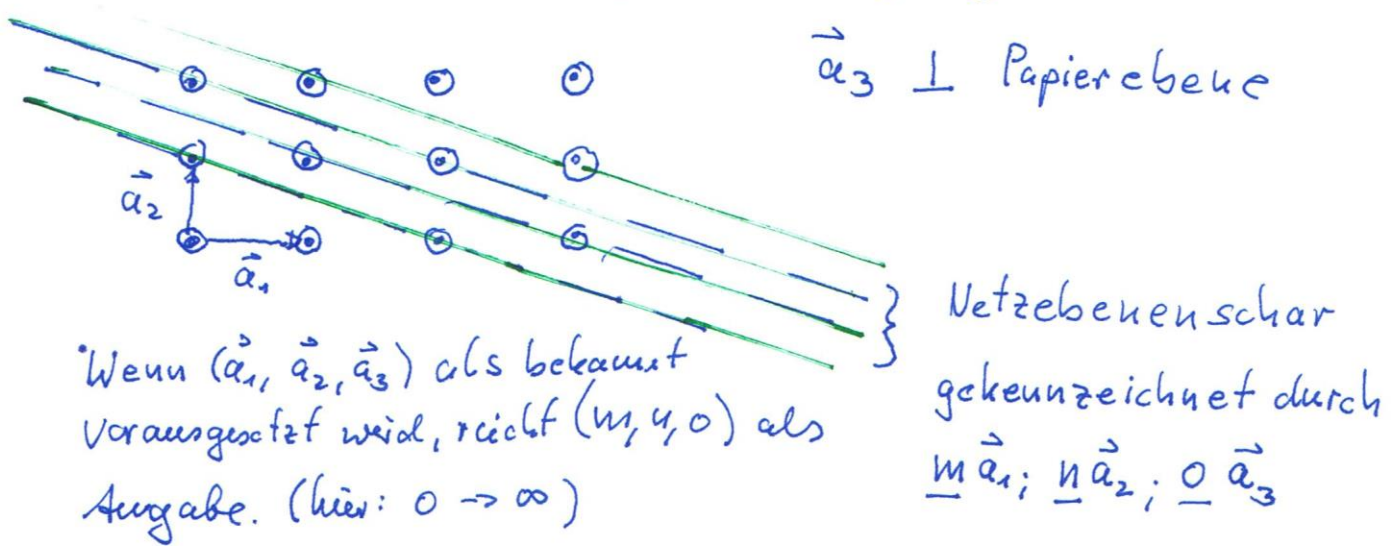


Bragg - Reflektion

13

(anschauliche Deutung der Bedingung $\vec{k} = \vec{G}$)



Reziproke Werte: $h' := \frac{1}{m}; k' := \frac{1}{n}; l' := \frac{1}{o}$

hier: $h' = \frac{1}{2}; k' = \frac{1}{1}; l' = \frac{1}{\infty}$

Multipliziere h', k', l' mit ganzer Zahl p so, daß teilerfremdes Zahlentupel (h, k, l) entsteht.

hier: $h' = \frac{1}{2}, k' = \frac{1}{1}, l' = 0 \quad | \cdot p=2$

$h = 1, k = 2, l = 0$

Miller'sche Indizes $\rightarrow (h, k, l) = (1, 2, 0)$

Netzebene wird aufgespannt durch die beiden Vektoren:

$$m \vec{a}_1 - n \vec{a}_2 = \frac{\vec{a}_1}{h'} - \frac{\vec{a}_2}{k'}$$

$$o \vec{a}_3 - n \vec{a}_2 = \frac{\vec{a}_3}{l'} - \frac{\vec{a}_2}{k'}$$

Bilde Vektor senkrecht zur Netzebene:

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{\vec{a}_1}{h'} - \frac{\vec{a}_2}{k'} \right) \times \left(\frac{\vec{a}_3}{l'} - \frac{\vec{a}_2}{k'} \right) = \\
 & = -\frac{1}{h'k'} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) - \frac{1}{k'l'} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) - \frac{1}{h'l'} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \\
 & \times \frac{-2\pi h'k'l'}{[\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3]} = \underbrace{2\pi h' \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{[\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3]}}_{h' \vec{g}_1} + \underbrace{2\pi k' \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{[\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3]}}_{k' \vec{g}_2} + \underbrace{2\pi l' \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{[\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3]}}_{l' \vec{g}_3} \\
 & = \frac{1}{\rho} \vec{G}_{hkl} \quad (\vec{G}_{hkl} \perp \text{Netzebene}(hkl))
 \end{aligned}$$

Wie groß ist der Abstand zweier Netzebenen?

1. Abstand v. Ursprung d.(hkl) - Netzebene

$$\begin{aligned}
 d'_{hkl} &= \frac{a_1}{h'} \cos \alpha \quad \alpha = \angle \vec{a}_1, \vec{G}_{hkl} \\
 &= \frac{a_1}{h'} \cdot \frac{\vec{a}_1}{a_1} \cdot \frac{\vec{G}_{hkl}}{G_{hkl}} \\
 &= \frac{1}{h' G_{hkl}} \cdot 2\pi h = \frac{2\pi}{G_{hkl}} \cdot \rho
 \end{aligned}$$

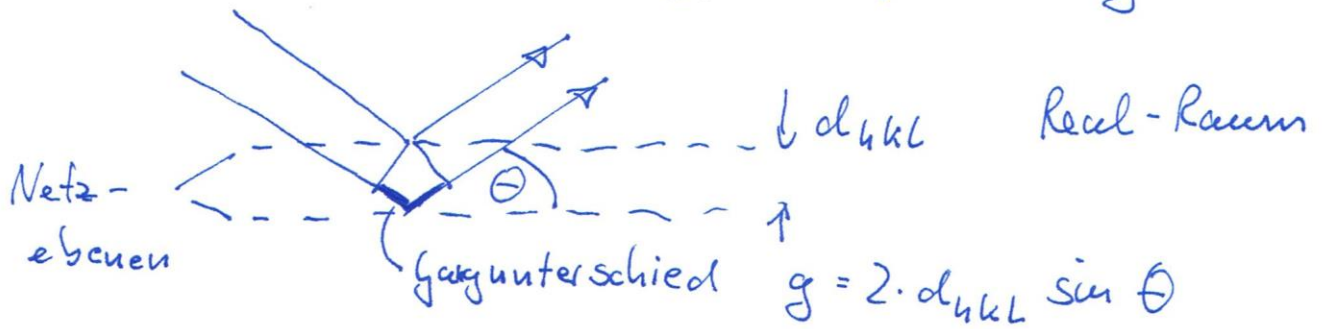
2. Abstand von 2 Netzebenen

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{G_{hkl}} \quad \left(= \frac{2\pi}{G_{hkl}} [\rho - (\rho-1)] \right)$$

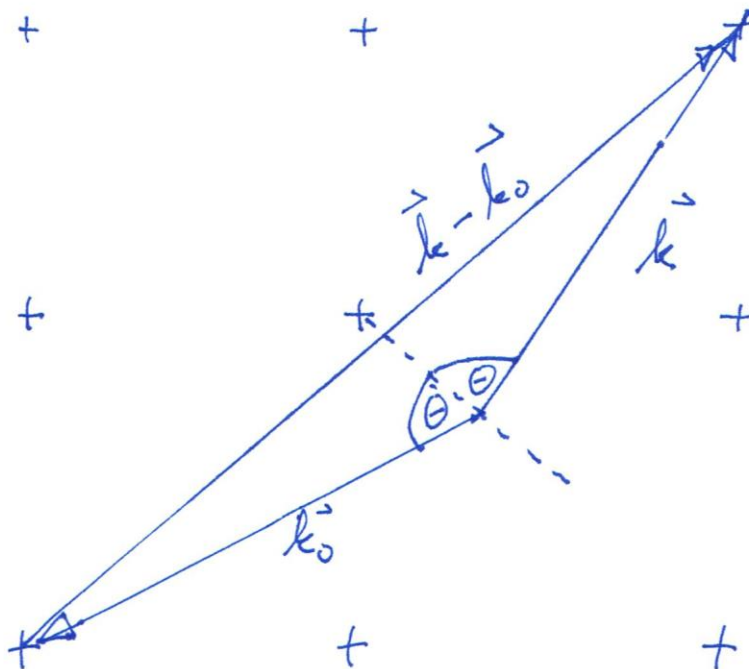
$$\Rightarrow G_{hkl} = \frac{2\pi}{d_{hkl}} = \frac{1}{|\vec{k}|} = |\vec{k} - \vec{k}'| = 2k \sin \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

$$\frac{2\pi}{d_{hkl}} = 2k_0 \sin \Theta \Leftrightarrow \lambda_0 = 2d_{hkl} \sin \Theta \quad (3.21)$$

Bragg'sche Gleichung

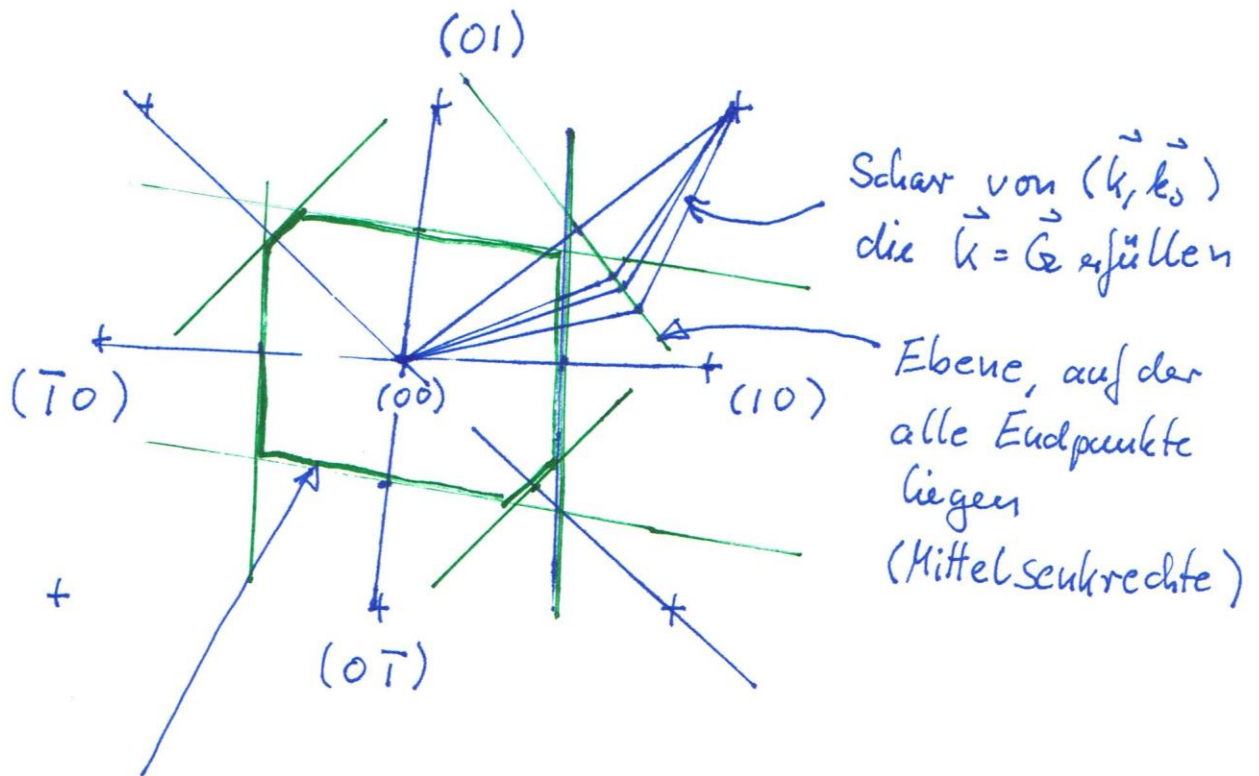


reziprok. Raum



3.4 Brillouin Zonen

16



Zonengrenze: kleinstes von den Mittelsenkrechten
aufgespanntes Vieleck
(in 3D: Polyeder)

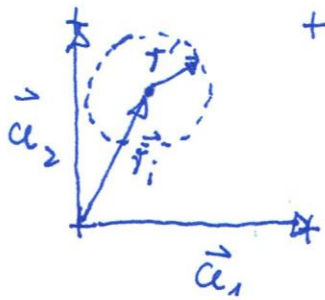
heißt: 1. Brillouin Zone

Welle mit einem $\vec{k}$ -Vektor vom Ursprung
zur Zonengrenze wird immer Bragg-reflektiert.

→ Stehende Welle im Inneren des Kristalls.

3.5 Intensität d. Beugungsreflexe

3.17



+ Streudichte $\varrho(\vec{r})$ mehrerer Atome (i) in der Einheitszelle

$$\varrho_i(\vec{r}) = \varrho(\vec{r}_i + \vec{r}') =: \varrho_i(\vec{r}')$$

$$\vec{r} = \vec{r}_i + \vec{r}'$$

Gesamte Streudichte:

$$\varrho(\vec{r}) = \sum_i \varrho_i(\vec{r}')$$

Berechnung d. Fourier-Koeffizienten ϱ_{hkl} :

$$\varrho_{hkl} = \frac{1}{V_{EZ}} \int \varrho(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\vec{r}} d^3r \quad (3.21)$$

Volumen d. Einheitszelle

$$= \frac{1}{V_{EZ}} \sum_i e^{-i\vec{G}\vec{r}_i} \underbrace{\int \varrho_i(\vec{r}') e^{-i\vec{G}\vec{r}'} d^3r'}_{f_i}$$

f_i
Atomformfaktor

$$\varrho_{hkl} = \frac{1}{V_{EZ}} \sum_i f_i e^{-i\vec{G}\vec{r}_i} \quad (3.22)$$

Berechnung des Atomformfaktors:

$$f_i = \int \varrho_i(\vec{r}') e^{-i\vec{G}\vec{r}'} d^3r' =$$

$$f_i = \int \rho_i(r') e^{-iGr' \cos \vartheta} r'^2 \sin \vartheta dr' d\vartheta d\varphi$$

$$= 4\pi \int \rho_i(r') r'^2 \frac{\sin\left(\frac{4\pi r'}{\lambda} \sin \theta\right)}{\frac{4\pi r'}{\lambda} \sin \theta} dr'$$

$$\left[\frac{4\pi r'}{\lambda} \sin \theta = Gr'; \quad G = 2k_0 \sin \theta \right]$$

$$\theta = 0 \Rightarrow \text{Vorwärtsstreuung } \frac{\sin(Gr')}{Gr'} \rightarrow 1$$

$$\Rightarrow f_i(\theta=0) = 4\pi \int \rho_i(r') r'^2 dr' \propto Z$$

↑
Anzahl d. Elektronen

$$\text{für } \theta \neq 0 \text{ gilt: } f_i = f_i\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right)$$

$$(3.22) : S_{hkl} = \frac{1}{V_{EZ}} \underbrace{\sum_i f_i e^{-i\vec{G}_{hkl} \vec{r}_i}}_{S_{hkl}}$$

Strukturfaktor:

$$S_{hkl} = \sum_i f_i e^{-i\vec{G}_{hkl} \vec{r}_i} \quad (3.23)$$

Der Strukturfaktor beschreibt Interferenzen zwischen Streuwellen von mehr. Atomen in d. EZ.

Beispiele:

a) Primitives Gitter (1 Atom in EZ)

$$\vec{r}_i = 0 \quad \rightarrow \quad S_{hkl} = f$$

b) Zentriertes Gitter

$$\vec{r}_i = u_i \vec{a}_1 + v_i \vec{a}_2 + w_i \vec{a}_3 \quad u_i, v_i, w_i < 1$$

$$\vec{r}_1 = (0,0,0); \quad \vec{r}_2 = \left(\frac{1}{2}\vec{a}_1, \frac{1}{2}\vec{a}_2, \frac{1}{2}\vec{a}_3\right) \quad (\text{bcc-Gitter})$$

$$S_{hkl} = \sum_j f_j e^{-2\pi i(hu_j + kv_j + lw_j)} \quad (3.24)$$

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$S_{hkl} = f_1 + f_2 e^{-2\pi i\left(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l\right)}$$

$$= f_1 + f_2 e^{-i\pi(h+k+l)}$$

$$\begin{aligned} f_1 = f_2 \Rightarrow & \quad = f_1(1 + e^{-i\pi(h+k+l)}) = \begin{cases} 0 & h+k+l \text{ ungerade} \\ 2f & h+k+l \text{ gerade} \end{cases} \\ (\text{gleiche Atome}) & \end{aligned}$$

Auslöschung einiger Reflexe, z.B. (100), (111), usw.