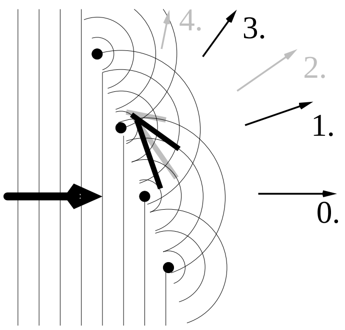
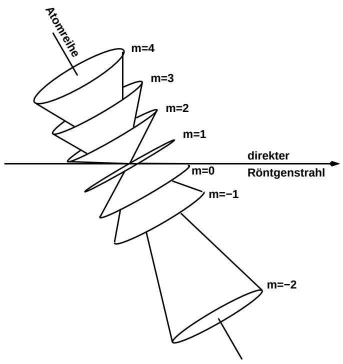
2.5 Beugung

Die Beugung an einem Atom, einem Paar von Atomen oder einer Atomreihe sind bekannt. An jedem Atom wird eine neue Wellenfront erzeugt. Dabei werden in einer Momentaufnahme mehrere Fronten beobachtet. Diese Wellenfronten interferrieren miteinander und je nachdem ob die Fronten gleichzeitig, oder von späteren Wellenfronten erzeugt wurden, wird die Ordnung der Intensität unterschieden.





Der geometrische Ort aller von einem Punkt auslaufenden Richtungen , die einen festen Winkel mit einer Geraden bilden ist ein Kegelmantel. Der Öffnungswinkel der Kegel wird durch die Ordnung der Reflexion bestimmt. Die Atomreihe, die die Richtung der Kegelachse bestimmt, muß man sich im Schnitt'punkt' zwischen Kegelachse und direktem Strahl denken. Die Kegel werden Lauekegel genannt.

2.5.1 Braggsches Gesetz

Die Atome jeder Netzebene beugen Röntgenstrahlen scheinbar so, als würden die Wellen optisch reflektiert werden. Das Braggsche Gesetz beschreibt die phasengleiche Reflexion von einer Schar von Netzebenen.

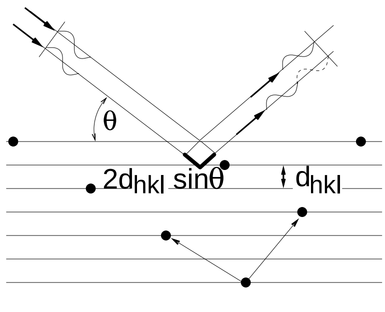


Abbildung 2.9: Geometrische Darstellung des Braggschen Gesetzes

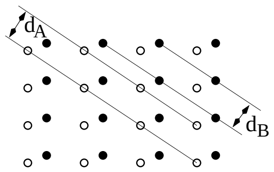
Die Phasenbedingung verlangt, daß die Wegdifferenz zwischen zwei benachbarten Ebenen ein vielfaches der Wellenlänge ist.

$$n\lambda = 2d \sin \Theta \tag{2.4}$$

(d=Netzebeneabstand, λ=Wellenlänge, Θ= Beugungswinkel) Merke jedoch: Die Position der Röntgenbeugung hängt nur von der Zellgeometrie ab, die Amplitude der verschiedenen Beugungsmaxima jedoch wird von der Sorte und der Lage der Atome in der Elementarzelle beeinflußt.

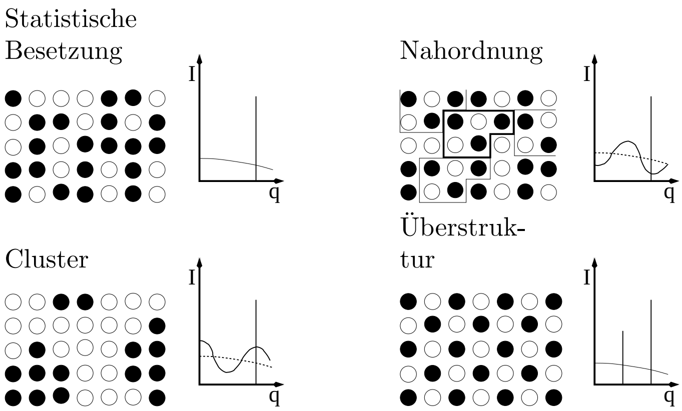
2.5.2 Intensität gebeugter Strahlen

- **Atomfaktor** ($\approx$ Anzahl Elektronen des Atoms)
- **Strukturfaktor** Fast jede Kristallstruktur besitzt eine Basis aus mehreren Atomen, wodurch mehrere Reflexe mit gleicher Richtung aber unterschiedlicher Phasenbeziehung entstehen.



- **Absorptionsfaktor** Strahlen durchlaufen eine endliche Dicke des Materials, was zu Absorption führt.
- **Temperaturfaktor** Wenn $T \neq 0$ führt jedes Atom Schwingungen um seine Ruhelage (r_0) aus. Dies führt zu einer Reflexverbreiterung
- **Polarisationsfaktor** Die Strahlung ist nicht polarisiert, wohl aber der gebeugte Strahl. Hierdurch kommt es zu Intensitätsverlust
- **Lorentzfaktor** Strahlen sind nicht streng monochromatisch und divergent. Dies beeinflußt die Linienform der Reflexe.

Die folgende Auflistung gibt einen erweiterten Überblick über strukturelle Eigenschaften, die die Intensitäten von Röntgenreflexen verändern. Während sich Nahordnung und Clusterbildung im Vergleich zu der statistischen Besetzung in einer Veränderung der Untergrundstreuung auswirken, kommt es im Fall von Überstrukturen zu weiteren Reflexen.



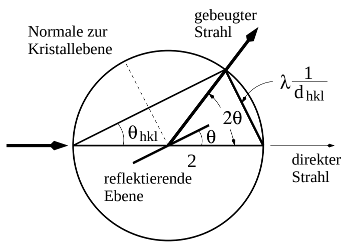
2.6 Das reziproke Gitter

Das Braggsche Gesetz deutet sehr anschaulich die Beugung an einem Gitter. Es ist aber nicht einfach, gleichzeitig alle Netzebenenabstände in ihren verschiedenen Orientierungen zu überblicken. Das Braggsche Gesetz läßt sich aber auf eine bemerkenswerte Weise umformen, daß man diesen Überblick ganz leicht bekommt. Hierbei spielt das sogenannte reziproke Gitter eine bedeutene Rolle. Es wurde als Hilfskonstrukt eingeführt, um die Komplexität des realen Gitters zu veranschaulichen. Hierfür wird die Braggsche Gleichung 2.4 umgestellt.

$$n\lambda = 2d \sin \Theta$$

$$\sin \Theta = \frac{n\lambda}{2d} \quad \text{oder für } n = 1 \quad \sin \Theta = \frac{\lambda}{2d}$$

Diese Gleichung ist in der nebenstehenden Abbildung geometrisch interpretiert. Hierbei wird in einem Kreis mit $r = 1$ unter einem Winkel von Θ ein Schenkel abgetragen (Richtung der Netzebene). Die Länge der Sehne gegenüber dem Winkel ist $2 \sin \Theta$. Anhand dieser Darstellung wird der Primärstrahl, die Richtung des gebeugten Strahles und die Normale der beugenden Netzebenenschar dargestellt. Die Normale hat die Richtung der Kreissehne und hat die Länge $\lambda \frac{1}{d}$.



Diesem in Länge und Richtung durch hkl vorgegebenen Vektor läßt sich eine fundamentale Bedeutung beimessen. Das reziproke Gitter ist ein von A. Bravais eingeführtes Hilfsmittel. Abbildung 2.10 zeigt ein zweidimensionales Gitter mit einer Schar von parallelen Netzebenen. Auf einer beliebigen Gerade bildet

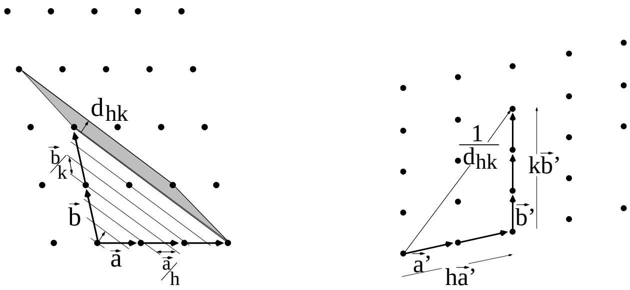


Abbildung 2.10: 2-dim Gitter mit Schar von parallelen Netzebenen (links) und das dazugehörige reziproke Gitter (rechts).

die Linie L_{hk} zwischen zwei benachbarten Punkten die Basis für eine primitive Zelle des Gitters. Die Höhe des Gitters ist durch den Abstand der Netzebenen d_{hk} gegeben. Der Flächeninhalt aller möglichen primitiven Zellen eines Gitters ist gleich und beträgt

$$F = \mathrm{L}_{hk} d_{hk}$$

umformen

$$\frac{1}{d_{hk}} = \frac{\mathrm{L}_{hk}}{F}$$

Der Kehrwert von d_{hk} ist immer proportional zur Länge L_{hk}; beide stehen senkrecht aufeinander. Da jede Länge L_{hk} in ein beliebiges Gitter einzuzeichnen ist, liefert dieser Zusammenhang auch den für das Gitter gesuchten Abstand d_{hk}. Wäre L_{hk} orthogonal gedreht, so würde es in Betrag und Richtung in die Größe $\frac{1}{d_{hk}}$ übergehen, vorausgesetzt man betrachtet den Flächeninhalt als Einheit. Offensichtlich lassen sich alle $\frac{1}{d_{hk}}$-Werte auffinden, indem man lediglich das Originalgitter im zweidimensionalen um 90° dreht. Jede Länge L_{hk} ist dann in die Größe d_{hk} transformiert. Zeichnet man durch einen festgelegten Nullpunkt die Normalen zu jeder Netzebenenschar und trägt auf ihr eine Strecke ab, deren Länge dem Netzebenenabstand umgekehrt proportional ist, erhält man ein System von Punkten, wie es in Abbildung 2.10 (rechts)gezeigt ist. Im Originalgitter war die Strecke L_{hk} durch ihre Achsenabschnitte festgelegt. Im reziproken Gitter haben die Komponenten bezogen auf die Kante a' und b' der reziproken Zelle die gleichen ganzen Zahlen, wie die Indizes h und k im Originalgitter. Der Index h im Originalgitter teilt den Einheitsvektor $\vec{a}$ in zwei gleiche Teile ($\vec{a}/h$ ist der Gitterabstand in Richtung von a), im reziproken Gitter werden zwei Einheitsvektoren in Richtung a' benötigt.

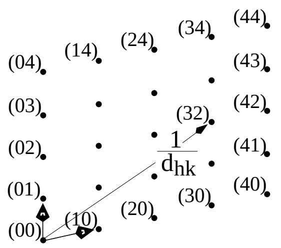
ZUM NACHDENKEN:

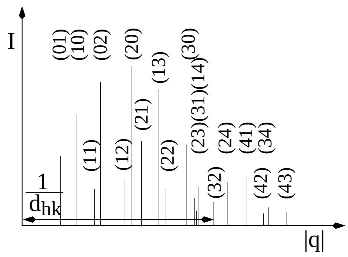
- Wie lautet das Braggsche Gesetz?
- Worin liegt die Bedeutung des reziproken Gitters?

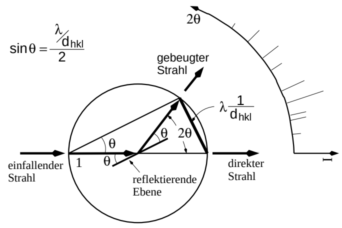
Die grundlegende Eigenschaft des reziproken Gitters besteht darin, daß zu jedem Abstandsvektor d zwischen zwei parallelen Gittergeraden des direkten Gitters ein entsprechender, ihm paralleler Vektor des reziproken Gitters bereit gestellt wird,

- der eine Gittertranslation darstellt
- dessen Komponenten bezogen auf die Kanten a' und b' der reziproken Zelle die gleichen ganzen Zahlen sind, wie die Indizes h und k im Originalgitter
- dessen Betrag gleich dem Kehrwert der Länge des Abstandsvektors ist.

Die Schlüsselbeziehung liegt darin, daß jeder periodische Gitterabstand in einem Gitter eine parallele Translation in dem anderen entspricht und die Beträge von Gittertranslation und Abstand reziprok zueinander sind. Dieser Zusammenhang gestattet es, sich die Eigenschaften und die Gesamtheit der Geradenscharen eines Gitters an Hand aller Punktpositionen seines reziproken Gitters zu veranschaulichen.



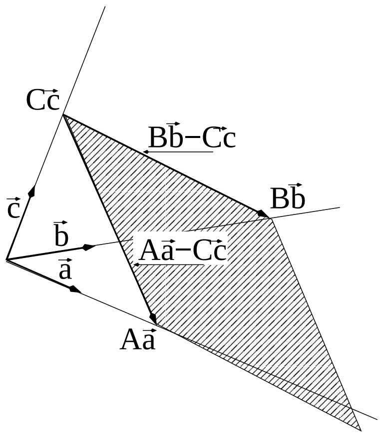




Die Reflexion an Scharen von Netzebenen können einfach erfaßt werden. Ein Diffraktogramm läßt sich anhand von reziproken Gittervektoren aufbauen. Die Länge $\frac{1}{d}$ ist der Abstand von der Reflexposition vom Ursprung. Da das reziproke Gitter an einen Ursprung geknüpft ist, ist es invariant gegenüber Verschiebungen des direkten Gitters, es ist aber sehr wohl durch eine Rotation des direkten Gitters zu beeinflussen: Es rotiert einfach mit.

2.6.1 Das reziproke Gitter in 3-dim

Im Dreidimensionalen hat das Kristallgitter drei primitive Vektoren, die das Gitter aufspannen: $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$.



Das Volumen aller primitiven Zellen in einem Gitter ist gleich groß. Nun wird eine beliebige primitive Grundfläche so ausgewählt, daß drei Eckpunkte des Parallelogramms auf Achsen fallen (allgemeiner Fall). A, B und C sind die ganzzahligen Vielfachen der Gittervektoren $\vec{a}$, $\vec{b}$ und $\vec{c}$, die die Eckpunkte beschreiben.
Zwei Seiten sind dann $B\vec{b} - C\vec{c}$ und $A\vec{a} - C\vec{c}$ und die Fläche der primitiven Zelle ist $(B\vec{b} - C\vec{c}) \times (A\vec{a} - C\vec{c})$. Der Abstand zwischen zwei Netzebenen ist $d\vec{n}$, wobei $\vec{n}$ der Normalenvektor der Ebene ist. Damit gilt für das Volumen:

$$\begin{aligned} V &= [(B\vec{b} - C\vec{c}) \times (A\vec{a} - C\vec{c})]d\vec{n} && (2.5) \\ &= [AB\vec{a} \times \vec{b} - AC\vec{a} \times \vec{c} - CB\vec{c} \times \vec{b} + \underbrace{CC\vec{c} \times \vec{c}}_{=0}]d\vec{n} && (2.6) \\ &= [AB\vec{a} \times \vec{b} + CA\vec{c} \times \vec{a} + BC\vec{b} \times \vec{c}]d\vec{n} && (2.7) \end{aligned}$$

mit $BC = h$, $CA = k$ und $AB = l$ folgt:

$$V = [h\vec{a} \times \vec{b} + k\vec{c} \times \vec{a} + l\vec{b} \times \vec{c}]d\vec{n} \tag{2.8}$$

zweckmäßig wird definiert

$$\frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V} = \vec{a}^* \qquad \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V} = \vec{b}^* \qquad \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V} = \vec{c}^* \tag{2.9}$$

mit $V = \vec{a}(\vec{b} \times \vec{c})$ und es gilt:

$$1 = [h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*]d\vec{n} \tag{2.10}$$

Da $\vec{n} \parallel [(B\vec{b} - C\vec{c}) \times (A\vec{a} - C\vec{c})]$ liegt wird aus dem Skalarprodukt ein normales Produkt $1 = [h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*]d$. Der Kehrwert eines beliebigen Netzebenenabstandes läßt sich demnach durch die Länge eines Vektors ausdrücken, der eine Linearkombination von $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$ und $\vec{c}^*$ ist. Diese Vektoren zeigen auf Punkte, die das reziproke Gitter aufspannen.

$$\boxed{\frac{1}{d} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*}$$

(2.11)

Analog gilt für die Gittervektoren des direkten Gitters in Relation zum reziproken Gitter:

$$\frac{\vec{b}^* \times \vec{c}^*}{V^*} = \vec{a} \qquad \frac{\vec{c}^* \times \vec{a}^*}{V^*} = \vec{b} \qquad \frac{\vec{a}^* \times \vec{b}^*}{V^*} = \vec{c} \tag{2.12}$$

mit $V^* = \vec{a^*}(\vec{b^*} \times \vec{c^*})$.

Jede Kristallstruktur hat zwei mit ihr verbundene Gitter:

1. Das **Kristall- oder direkte Gitter**: Ein Gitter im Ortsraum, Die Dimension ist die einer Länge. Das mikroskopische Bild gibt eine Darstellung der Kristallstruktur.

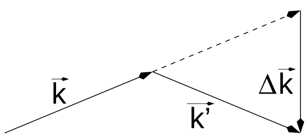
2. Das **reziproke Gitter** (oder auch Gitter im Impuls- oder Fourier-Raum): Das Gitter befindet sich im Impulsraum und hat die Dimension einer Länge^{-1}. Das Beugungsbild ist die Darstellung des reziproken Gitters.

Ewaldsche Konstruktion

Ein reziproker Gittervektor setzt sich aus der Linearkombination der jeweiligen Einheitsvektoren zusammen:

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \tag{2.13}$$

Dieser reziproke Gittervektor hat für die Beugung an einem Kristall eine besondere Bedeutung. Die Menge der reziproken Gittervektoren bestimmt nämlich die möglichen Reflexe.



Bei Streuung: $\vec{k} \to \vec{k'}$ gilt: $\vec{k'} = \vec{k} + \Delta\vec{k}$ Die Streuamplitude ist:

$$F = \int n(\vec{r}) \exp[-i\Delta\vec{k}\vec{r}] dV$$

$$\text{mit } n(\vec{r}) = \sum n_G \exp[i\vec{G}\vec{r}]$$

$$\text{folgt } F = \sum_G \int n_G \exp[i(\vec{G} - \Delta\vec{k})\vec{r}] dV$$

Die Streuamplitude ist nur dann nicht zu vernachlässigen, wenn das Argument der Exponentialfunktion verschwindet, also

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \tag{2.14}$$

Diese Bedingung ist nur schwer zu erfüllen. Die Ewaldsche Konstruktion zeigt, wo ein Reflex zu finden ist. Man denke sich den Kristall im Mittelpunkt einer Kugel, deren Radius durch die Wellenlänge des einfallenden Röntgenstrahls gegeben ist. Der einfallende Wellenvektor zeigt hierbei immer auf den Ursprung des reziproken Gitters, der damit auf der Oberfläche der Kugel an dem Punkt liegt, wo der primäre Strahl die Kugel verläßt. Der Strahl verläuft immer entlang einem Durchmesser der Kugel.

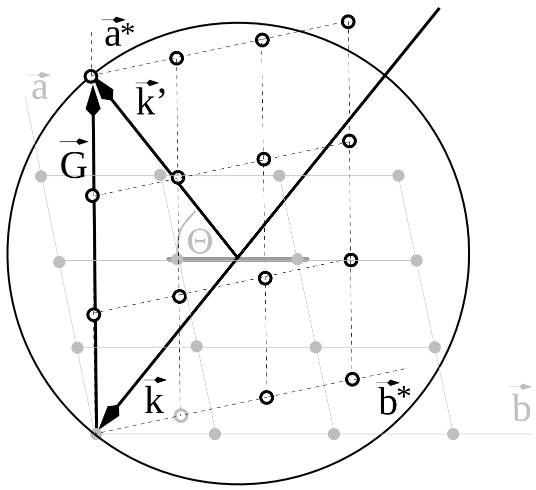
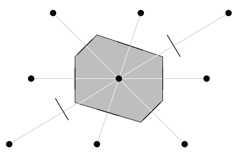


Abbildung 2.11: Zur Ewaldschen Konstruktion. Das graue Gitter ist das im Zentrum der Kugel liegende Kristallgitter, während das schwarze Gitter das reziproke Gitter repräsentiert. Der Vektor $\vec{k}$ weist in die Einfallsrichtung der Strahlung und endet an einem beliebigen Punkt des reziproken Gitters. Die Kugel hat den Radius λ. An jedem Punkt, der auf der Kugel liegt entsteht ein gebeugter Strahl.

Bei willkürlicher Orientierung liegt im Allgemeinen kein Gitterpunkt auf der Oberfläche der Kugel. Unter diesen Umständen entsteht keine Beugung der Strahlung, da die Wegdifferenz zwischen zwei parallelen Wellen vor und nach einer Beugung in die Richtung des betrachteten Durchstoßpunktes an der Oberfläche der Kugel kein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ist. Liegt jedoch ein reziproker Gitterpunkt auf der Oberfläche der Kugel, so ist fuer diesen Punkt die Braggsche Reflexionsbedingung erfüllt und es kommt zu einem Reflex.
Um die Richtungen möglicher Reflexe zu finden, stellt man sich einen vollständigen Ausschnitt des reziproken Gitters in der Nachbarschaft der Ausbreitungskugel vor. Das reziproke Gitter wird nun nach irgendeiner Vorschrift gedreht. Immer wenn irgendein reziproker Gitterpunkt auf die Kugeloberfläche tritt entsteht ein Reflex in diese Richtung (vom Mittelpunkt der Kugel aus gesehen).

Die Brillouin Zone

Eine weitere Bedeutung kommt dem reziproken Gitter durch seine Wigner Seitz Zelle zu. Diese ist eine primitive Zelle des reziproken Gitters, die wie folgt konstruiert wird.



Man zeichnet die Verbindungsgeraden von einem gegebenen Punkt im reziproken Gitter zu allen seinen Nachbarn. Danach konstruiert man die Mittelsenkrechten (in 3-dim Ebenen). Die kleinste so entstehende Fläche (in 3-dim Volumen) ist die Wigner Seitz Zelle. Mit diesen Zellen kann man den gesamten Raum ohne Lücken füllen. Die Bedeutung der Brillouin Zone ist in der Festkörperphysik von zentraler Bedeutung, man nennt sie auch erste Brillouin Zone. Durch einen reziproken Gittervektor kann jeder Wellenvektor so verschoben werden, daß er auf einen Punkt in der ersten Brillouin Zone zeigt. Hierdurch vereinfacht die Physik in eindrucksvoller Weise, da die Beschreibung von Fermiflächen, Elektronenbahnen, Energiebändern und dergleichen sich mehr auf die erste Brillouin Zone beschränken kann.

2.6.2 Die reziproken Gitter der kubischen Strukturen

Das reziproke Gitter des einfach kubischen Gitters

Die Basisvektoren des Kristallgitters sind:

$$\vec{a}_1 = a\vec{x} \qquad \vec{a}_2 = a\vec{y} \qquad \vec{a}_3 = a\vec{z}$$