

# **Crystal Diffraction**

Günter Krois  
Markus Kurz

## Inhalt

1.	Einleitung .....	3
2.	Doppelspalt Experiment .....	3
2.1.	Das Experiment .....	3
2.2.	Der Detektor .....	3
2.3.	Welle – Teilchen Terminologie.....	4
3.	Beugung am Kristallgitter .....	4
3.1.	Anwendung .....	5
4.	Fourier Analyse .....	5
4.1.	Einführung - Entwicklung einer 1D-Funktion in eine Fourier - Reihe .....	5
4.2.	Entwicklung einer 2D/3D Funktion in eine Fourier- Reihe .....	8
5.	Reziprokes Gitter.....	9
5.1.	Allgemein .....	9
5.2.	Definition .....	9
5.3.	Das reziproke Gitter ist ein Bravaisgitter .....	9
5.4.	Volumen der primitiven Zelle des reziproken Gitters.....	10
6.	Beugungsbedingung .....	11
6.1.	Laue .....	12
6.2.	Auf dem Weg zur Brillouin Zone .....	13
7.	Erste Brillouin Zone .....	14
7.1.	Allgemein .....	14
7.2.	Gitterebenen .....	15
8.	Zusammenfassung .....	16
9.	Quellen .....	16

## 1. Einleitung

Ein kurzer Überblick über diese Präsentation:

Wir wollen hier auf das Kapitel der „Beugung am Kristallgitter“ eingehen.

Dazu werden wir mit einem berühmten und uns allen eigentlich hinlänglich bekannten Experiment der Quantenmechanik beginnen – dem Doppelspaltexperiment. Wir wollen hier aber auf ein paar besondere Details eingehen, um uns ein wichtiges quantenmechanisches Prinzip näher zu bringen.

Damit kommen wir dann zur Beugung am Kristallgitter. Wir werden das Phänomen der Beugung zuerst über den Ansatz von Bragg besprechen.

Dann werden wir kurz auf die Fourierreihenentwicklung eingehen um das Konstrukt des reziproken Gitters und der Brillouin Zonen erklären zu können, die wir für die Beugung an Kristallstrukturen brauchen.

## 2. Doppelspalt Experiment

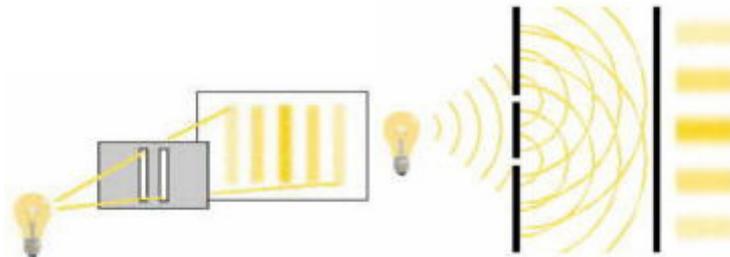


Abb. 2.1.1: Doppelspaltexperiment

### 2.1. Das Experiment

Eine kurze Erklärung des experimentellen Aufbaus des Doppelspaltexperiments (Abb. 2.1.1):

Von links nach rechts besteht der Aufbau aus einer Lichtquelle, einem Blende mit den 2 Spalten und zuletzt einem Detektorschirm, bei dem es sich meistens um eine Photoplatte handelt.

Schalten wir unsere Lichtquelle ein, läuft eine Kugelwelle auf die beiden Spalten zu, nach dem Huygenschen Prinzip (jeder Punkt einer Wellenfront kann als Ausgangspunkt einer neuen Welle gesehen werden) werden die zwei Spalte zu Ausgangspunkten zweier neuer Kugelwellen die auf den Detektorschirm zulaufen und dort interferieren.

Wir erkennen ein Interferenzmuster auf der Photoplatte:

Helle Flecken wenn der Phasenunterschied der beiden Wellen ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge des Lichts ist, dunkle Flecken wo der Phasenunterschied ein halbzahliges Vielfaches der Wellenlänge des Lichts ist.

### 2.2. Der Detektor

Nun wollen wir uns einmal näher ansehen wie es eigentlich zustande kommt, dass die Stellen auf denen Licht auf die Photoplatte trifft sichtbar werden.

An der Oberfläche dieses fotografischen Schirms befinden sich Moleküle die von einem Photon, wenn es genug Energie besitzt in 2 Teile zerbrochen werden.

Diese zwei Teile reagieren beim Entwickeln chemisch mit der Entwicklerflüssigkeit, die ganz gebliebenen Moleküle nicht. - So entsteht also das Bild.

Würde man die Photoplatte z.B.: mit Infrarotstrahlung belichten, würde man auf dem Foto nichts erkennen, da die Photonen der Infrarotstrahlung zu wenig Energie haben um das Molekül am Film zu teilen.

Was aber soll uns das Ganze sagen? Nun, das Licht der Quelle hat sich bis zur Photoplatte als Welle ausgebreitet – ganz eindeutig sonst könnten wir ja kein Interferenzmuster erkennen – der Energieaustausch mit dem Molekül auf der Photoplatte hat jedoch als Teilchen, als Photon stattgefunden.

Hier erkennen wir ein wichtiges quantenmechanisches Prinzip (nach de Broglie):

**Alles breitet sich aus wie eine Welle, aber tauscht Energie aus wie ein Teilchen.**

Alles ? Ja, alles. Schließlich gilt der Welle-Teilchen Dualismus für alles, nach de Broglie kann man jedem Teilchen eine Wellenlänge zuordnen, nur das diese für makroskopische Teilchen verschwindend klein im Vergleich zu den Abmessungen des Teilchens wird. So kann man das Doppelspaltexperiment auch mit Elektronen, Protonen, Atomkernen und mittlerweile auch mit C60-Fullerenen (fußballförmige C-Moleküle) durchführen!

Einige der wichtigsten Wellen sind hier mit ihren zugehörigen Teilchen aufgelistet:

### 2.3. Welle – Teilchen Terminologie

Licht	→	Photonen
Schall	→	Phononen
Elektronenwellen	→	Elektronen
Neutronenwellen	→	Neutronen
Positronenwellen	→	Positronen
Heliumwellen	→	Helium Atome
Plasmawellen	→	Plasmonen

Dieses quantenmechanische Prinzip gilt auch für Elektronen in einem Festkörper, denn auch in einem Kristallgitter breiten sich die Elektronen aus wie eine Welle und interagieren wie Teilchen – d.h. tauschen Energien aus wie Teilchen.

Dies aber ist die hauptsächliche Ursache für die elektrischen Eigenschaften eines Stoffes – die Interaktion mit den Gitterteilchen bzw. die Beugung von Elektronen in einem Gitter.

## 3. Beugung am Kristallgitter

Die Beugung von Strahlung an einem Kristallgitter ist eine recht komplexe Angelegenheit, denn während das Prinzip dem des Doppelspaltexperiments entspricht, werden die Wellen hier nicht nur an 2 Spalten gebeugt sondern an jedem einzelnen Gitterpunkt. Dass ein solches Kristallgitter zu allem Überduss auch noch 3 Dimensionen hat, erschwert nicht nur die Vorstellung dieses Problems, sondern verkompliziert leider auch die Mathematik dahinter.

Wir wollen es uns einmal einfach machen und vorgehen wie Bragg, in 2 Dimensionen und mit nur 2 interferierenden Strahlen.

Wir gehen von folgender Grafik aus (Abb. 2.3.1):

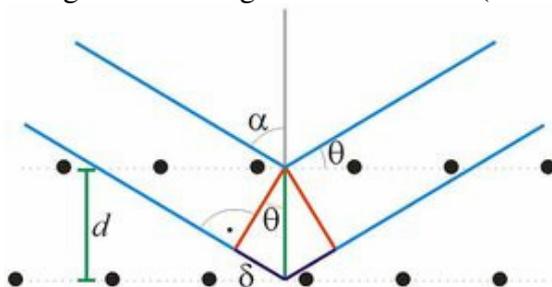


Abb. 2.3.1: Beugung am Kristallgitter

Die blauen Linien entsprechen der einfallenden bzw. der gebeugten Strahlung – also Wellen bzw. Wellenzügen.

Die schwarzen Punkte stellen die einzelnen Gitterpunkte eines Kristalls dar.

Der Winkel „Theta“ zwischen einfallendem Strahl und Gitterebene heißt Braggwinkel.  $d$  bezeichnet den Gitterebenenabstand.

Der untere Strahl legt nun die dunkelblaue Strecke „ $2d$ “ mehr zurück als der obere Strahl, dadurch ergibt sich zwischen den reflektierten Strahlen ein Phasenunterschied und die beiden Strahlen interferieren. Es gilt die Bragg Gleichung (Gl. 2.3.1):

$$n\lambda = 2d \sin(\theta)$$

**Gl. 2.3.1: Bragg-Gleichung**

D.h. eine Reflexion kann nur dann beobachtet werden, wenn die beiden reflektierten Strahlen konstruktiv interferieren, also der Gangunterschied gleich einem ganzzahligen Vielfachen der Wellenlänge ist.

Die Bragg-Gleichung verknüpft:

- \* der Abstand  $d$  zwischen parallelen Gitterebenen,
- \* die Wellenlänge  $\lambda$  der Röntgenstrahlung sowie
- \* der Winkel  $\theta$  zwischen Röntgenstrahl und Gitterebene

### 3.1. Anwendung

Der praktische Hintergrund hierzu ist die Bestimmung der Kristallstruktur verschiedener Werkstoffe.

Dazu wird meistens Röntgenstrahlung verwendet, da diese sehr tief in den Kristall eintritt. Das oben beschriebene Prinzip der Beugung gilt aber nicht nur für elektromagnetische Strahlung. Auch Elektronenwellen, Schallwellen, Heliumwellen,.. werden am Kristallgitter gebeugt.

Auch die einzelnen Kristallanalysen werden mit den unterschiedlichsten Strahlungen durchgeführt – ja nachdem welche Eigenschaften des Kristalls man bevorzugt messen möchte.

## 4. Fourier Analyse

Mit dem Ansatz von Bragg lässt sich die Beugung am Kristallgitter also recht anschaulich darstellen und erklären. Mit der Anschaulichkeit wird es im 3 dimensional etwas problematisch. Schließlich ist in einem Kristallgitter jeder Gitterpunkt der von der einfallenden Strahlung getroffen wird Ausgangspunkt einer Kugelwelle, die mit jeder anderen Kugelwelle jedes anderen Gitterpunktes interferiert.

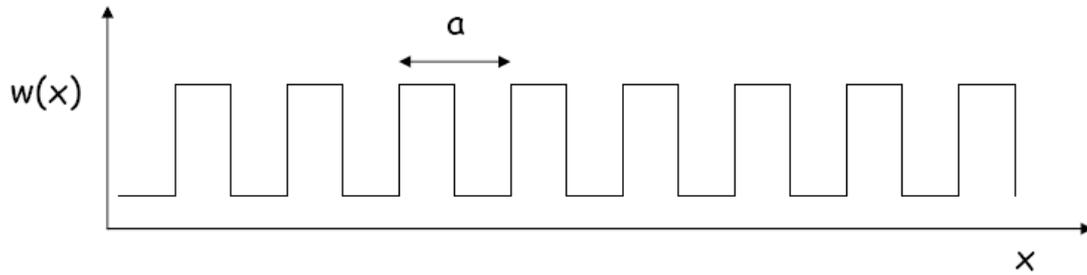
Dies wird ein recht unansehnlicher Haufen von interferierenden Wellen. Um uns das ganze zumindest mathematisch etwas einfacher zu machen werden wir nun das reziproke Gitter einführen.

Dazu benötigen wir allerdings zuerst das Konzept der Fourierreihenentwicklung.

### 4.1. Einführung - Entwicklung einer 1D-Funktion in eine Fourier - Reihe

Bei der Fourier Reihenentwicklung geht man von dem Prinzip aus, dass man jede periodische Funktion in eine Reihe von Kosinus und Sinus Termen entwickeln kann.

Betrachten wir zum Beispiel eine Rechteckschwingung (Abb.4.1.1)



**Abb.4.1.1: Rechteckschwingung**

so kann man diese in eine Fourier Reihe der Art (Gl. 4.1.1):

$$w(x) = w_0 + \sum_{p=1}^{\infty} c_p \cos(2\pi px/a) + s_p \sin(2\pi px/a) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} w_p \exp(i2\pi px/a)$$

**Gl. 4.1.1: Fourierreihe**

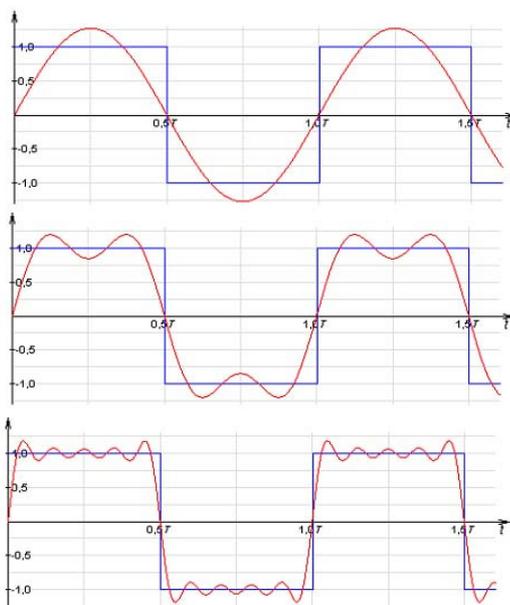
entwickeln. Man kann also die Rechteckschwingung als eine Linearkombination von Kosinus und Sinusschwingungen anschreiben.

Die Rechteckschwingung ist hier die Funktion  $w(x)$ ,  $w_0$  bezeichnet den Gleichanteil der Schwingung, die Summanden sind die einzelnen Kosinus und Sinusanteile der Rechteckschwingung, wobei der Summenindex auch als Index für die Oberschwingungen gesehen werden kann:

Betrachten wir nur das erste Folgenglied ( $p=1$ ) ist die Frequenz (siehe Gl. 4.1.1) gleich  $2\pi/a$  – dies stellt die Grundschwingung im Fourierraum dar.

Je höher  $p$  wird, desto höher wird die Frequenz. Die gesamte Fourierreihe einer Rechteckschwingung hat unendlich viele Terme, da die Ecken der Schwingung nur durch unendlich viele Kosinus und Sinusterme dargestellt werden können.

In (Abb. 4.1.2) sehen wir nochmals die Rechteckschwingung und darüber die Annäherungen der Fourierreihe für 1, 4 und 10 Summanden der Reihe.



**Abb. 4.1.2: Fouriertransformierte einer Rechteckschwingung  $p=1$ ,  $p=4$ ,  $p=10$**

Die Fouriertransformation einer Sinusschwingung besteht hingegen nur aus einem einzigen (Sinus)term. Einziger Unterschied zwischen Transformierter und nicht Transformierter: Wenn die Ausgangs-Sinuskurve die Wellenlänge  $\lambda$  besitzt die fouriertransformierte Sinusschwingung die Wellenlänge  $2\pi/\lambda$ . Diese Größe  $-2\pi/\lambda$  – wird auch Wellenzahl ( $k$ ) genannt. Sehen wir uns einmal die Fourierkoeffizienten näher an. (Abb. 4.1.3) zeigt uns die Amplituden der Fourierkoeffizienten  $c_p$  und  $s_p$  über  $k$  aufgetragen:

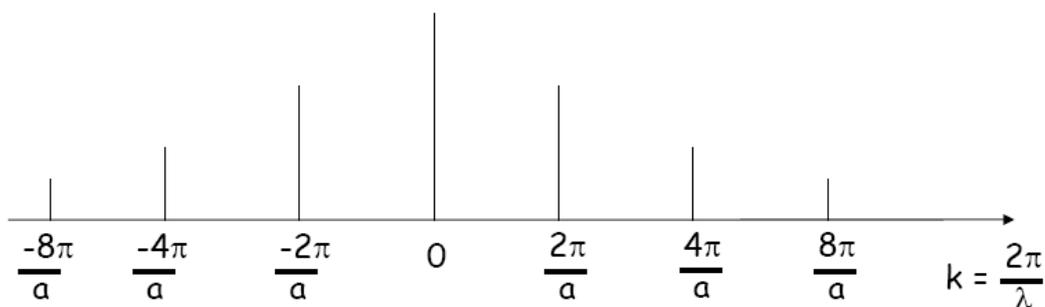


Abb. 4.1.3: Amplituden von Fourierkoeffizienten

In dieser Darstellung sehen wir mit welcher Gewichtung welche Frequenz in der Fourierreihe auftritt, der Peak bei 0 bezeichnet den Gleichanteil,  $2\pi/a$  ist die Grundschwingung mit der Wellenlänge  $\lambda$  (da  $k=2\pi/\lambda$ ), die weiteren sind Oberschwingungen mit der jeweils doppelten Frequenz. Für die Rechteckschwingung ergeben sich unendlich viele solcher Peaks da man unendlich viele Frequenzen braucht um die Ecken darzustellen. Für eine Sinusschwingung ergäbe sich nur ein Peak – der bei derselben Frequenz wie die Ausgangsschwingung.

Nun wollen wir uns noch kurz ansehen wie die Fouriertransformierte einer oder mehrerer Delta Distributionen aussieht.

Im Prinzip gelangen wir zu einer Delta Distribution wenn wir die Rechtecke unserer Rechteckschwingung immer schmaler machen. Es zeigt sich das man dann für die Fouriertransformierte immer höhere Anteile von allen Frequenzen braucht. Im Grenzfall der Deltadistribution sieht das ganze dann aus wie in (Abb. 4.1.4)

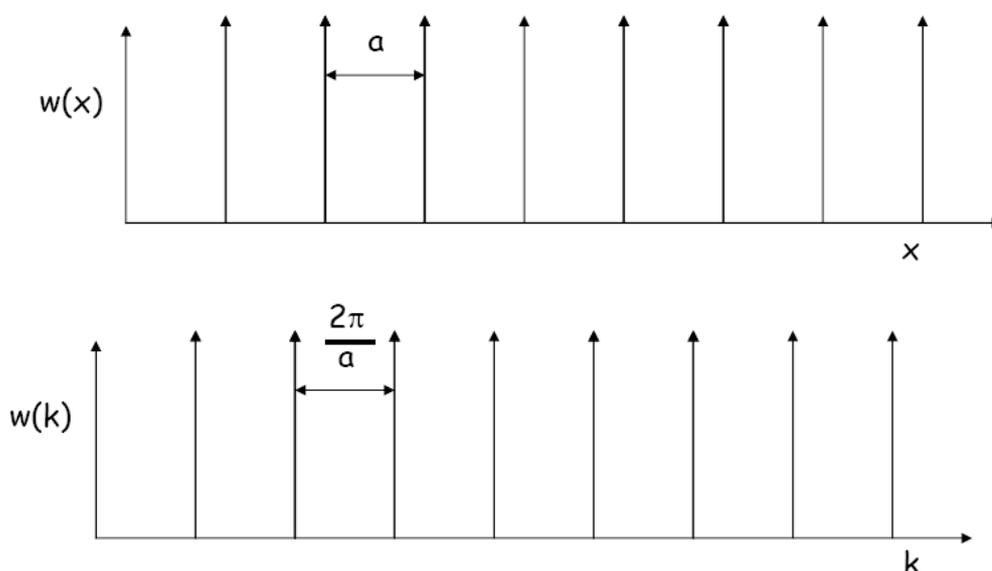


Abb. 4.1.4: Fouriertransformation von Delta-Distributionen

Die Fouriertransformierte einer Delta-Distribution ist also eine Delta-Distribution. Man kann nur ein Gitter als eine Ansammlung von Delta-Distributionen sehen, da immer nur an einem Gitterpunkt ein Funktionswert auftritt, wir können also unser Gitter Fouriertransformieren, dazu benötigen wir allerdings noch die Fourierreihenentwicklung in 3 Dimensionen.

## 4.2. Entwicklung einer 2D/3D Funktion in eine Fourier-Reihe

Das Prinzip der Fourierreihenentwicklung ändert sich nicht wenn man mehrere Dimensionen betrachtet, es wird nur die Mathematik dahinter etwas aufwendiger und die Vorstellung etwas schwieriger.

Die Reihenentwicklung für eine 2D Funktion sehen wir in

$$w(x, y) = w_0 + \sum_{q=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} c_p \cos(2\pi px/a + 2\pi qy/a) + s_p \sin(2\pi px/a + 2\pi qy/a)$$

$$= \sum_{q=-\infty}^{\infty} \sum_{p=-\infty}^{\infty} w_{pq} \exp(i2\pi(px + qy)/a) = \sum_{k_x, k_y} w_{k_x, k_y} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

### Gl. 4.2.1: Fourierentwicklung in 2D

Fourierreihenentwicklung in 2D bedeutet also nur, dass wir 2 Reihenentwicklungen gleichzeitig machen, eine in x Richtung und eine in y Richtung.

Im letzten Schritt verwenden wir die Vektorschreibweise und können die Fourierentwicklung sehr kompakt darstellen.

Zusätzlich hat diese Schreibweise den Vorteil, dass man aus dem Absolutbetrag des k-Vektors, die Wellenlänge der transformierten Funktion ablesen kann (Gl. 4.2.2).

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

### Gl. 4.2.2

Ein weiterer Vorteil der Vektorschreibweise ist, dass man sehr leicht auf 3 Dimensionen übergehen kann. (Gl. 4.2.3)

$$w(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

### Gl. 4.2.3: Fourierreihenentwicklung in 3D

Hier bestehen die Vektoren  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{r}$  und aus 3 Komponenten (x, y und z Richtung).

Mit dieser 3 dimensionalen Fourierreihenentwicklung können wir nun schließlich das reziproke Gitter einführen, da wir ein Gitter, wie oben erwähnt als 3 dimensionale Ansammlung von Delta-Funktionen betrachten können – jeder Gitterpunkt stellt eine Deltafunktion dar.

Wenn wir nun so ein Gitter aus Deltafunktionen fouriertransformieren erhalten wir das reziproke Gitter.

## 5. Reziprokes Gitter

### 5.1. Allgemein

Reziproke Gitter werden in den meisten Fällen in analytischen Untersuchungen periodischer Strukturen verwendet. Wie kommt man auf die Idee reziproker Gitter?

- Die Theorie der Beugung an Kristallen
- Die abstrakte Untersuchung von Funktionen deren Periodizität die eines Bravaisgitters ist

### 5.2. Definition

Betrachten wir dazu ein Bravaisgitter das von einer Menge aus  $\mathbf{R}$  Punkten gebildet wird und dazu noch eine ebene Welle der Form  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . Wenn  $\mathbf{k}$  gewisse Werte annimmt, dann hat die Welle eine Periodizität wie die eines Bravaisgitters, für andere Werte von  $\mathbf{k}$  nicht.

Wenn wir nun aus allen möglichen Wellenvektoren jene herausnehmen welche die Periodizität eines gegebenen Bravaisgitters haben, so haben wir das reziproke Gitter dieses Bravaisgitters gefunden.

Wir wollen die Menge der Wellenvektoren die diese Bedingung erfüllen  $\mathbf{K}$  nennen.

In Formeln gesprochen bedeutet das:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$$

Lässt sich  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$  kürzen können wir das reziproke Gitter definieren als die Menge von Wellenfunktionen welche die Bedingung  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}=1$  für alle  $\mathbf{R}$  des Bravaisgitters erfüllen.

Zu beachten ist dass reziproke Gitter immer in Bezug auf ein spezielles Bravaisgitter definiert sind, das dem reziproken Gitter zugrunde liegende Bravaisgitter bezeichnet man als direktes Gitter.

Es wäre möglich für alle Werte aus der Menge  $\mathbf{R}$  Vektoren aus  $\mathbf{K}$  zu definieren, so dass immer gilt  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}=1$ . Die Menge  $\mathbf{K}$  wird aber nur dann als reziprokes Gitter bezeichnet, wenn die Menge  $\mathbf{R}$  ein Bravaisgitter bildet.

### 5.3. Das reziproke Gitter ist ein Bravaisgitter

Das das reziproke Gitter selbst ein Bravaisgitter ist, folgt aus der Definition des Bravaisgitters.

Definiert man zwei unterschiedliche Wellenvektoren erfüllen auch deren Summe bzw. deren Differenz die Bedingung für ein Bravaisgitter ( $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}=1$ ).

Der Unterschied zwischen einem normalen Gitter und einem reziproken Gitter besteht darin, dass die Längen invers proportional sind. Das heißt, ein kurzer Abstand im normalen Gitter bedeutet einen langen Abstand im reziproken Gitter.

Weiters ist z.B. das reziproke eines bcc Gitters ist ein fcc Gitter und umgekehrt.

Spannen wir nun ein reziprokes Gitter mit einem Satz primitiver Vektoren  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  eines direkten Gitters auf.

Das Gitter lässt sich per Definition wie folgt aufspannen (Gl. 5.3.1):

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

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

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

#### Gl. 5.3.1: prim. Vektoren des reziproke Gitters

wobei  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  die Achsenvektoren des reziproken Gitters sind.

Wenn  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  die primitiven Vektoren des Kristallgitters sind, dann sind  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  die primitiven Vektoren des reziproken Gitters.

Jeder Vektor  $\mathbf{b}_i$  des reziproken Gitters aus Gl. 5.3.1 ist orthogonal zu jeweils zwei Achsenvektoren des direkten Gitters.

Da die oben angeführten Gleichungen ein Satz primitiver Vektoren des reziproken Gitters sind, muss gelten:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

$\delta_{ij} = 1$  wenn  $i=j$  und 0 sonst

Mit dieser Bedingung können wir nun einen reziproken Gittervektor  $\mathbf{G}$  als eine Linearkombination der  $\mathbf{b}_i$  definieren, wobei  $v_1, v_2, v_3$  ganzzahlig sind.

$$\mathbf{G} = v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3$$

Definiert man nun noch ganzzahlige Koeffizienten  $n_i$ , dann gilt für einen beliebigen Vektor  $\mathbf{R}$  des direkten Gitters:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Daraus lässt sich folgern:

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi (v_1 n_1 + v_2 n_2 + v_3 n_3)$$

Das bedeutet dass  $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$  ist, wenn  $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}$  gleich dem Produkt aus  $2\pi$  und einer ganzen Zahl ist.

Dies ist die Bedingung die wir vorher definiert haben, dass unser Gitter ein Bravaisgitter ist. Deshalb ist das reziproke Gitter ein Bravaisgitter und die Vektoren  $\mathbf{b}_i$  können als Satz primitiver Vektoren gewählt werden.

Weiters bedeutet dies, dass die Vektoren des reziproken Gitters Wellenvektoren einer ebenen Welle sind, die an allen Plätzen des Bravaisgitters den Wert 1 annehmen.

### 5.4. Volumen der primitiven Zelle des reziproken Gitters

Ist  $V$  das Volumen einer primitiven Zelle des diskreten Gitters, so hat die primitive Zelle des reziproken Gitters das Volumen  $(2\pi)^3/V$ .

## 6. Beugungsbedingung

Zur Erklärung der Beugungsbedingung betrachten wir einen Röntgenstrahl der an einer Kristallprobe gestreut wird (Abb. 5.4.1):

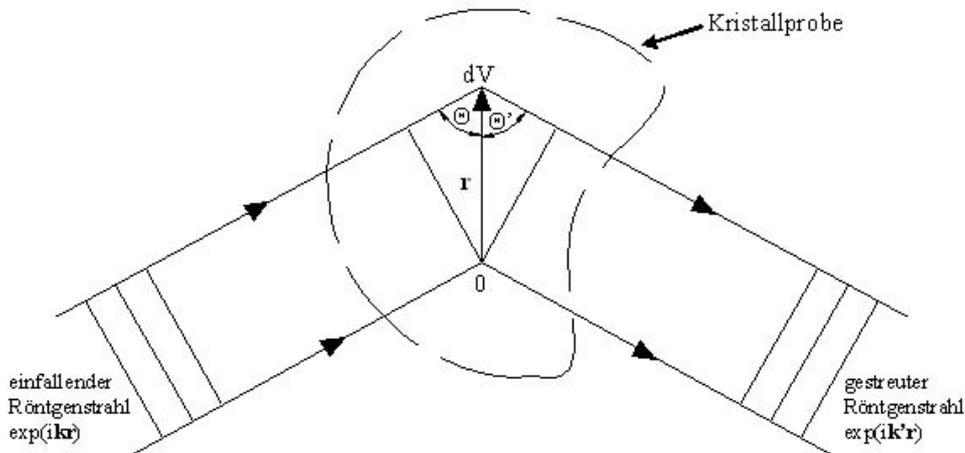


Abb. 5.4.1: Beugungsbedingung

Der durch den Nullpunkt gehende Strahl hat per definitionem die Phase 0.  
Der Phasenunterschied des zweiten Strahls ergibt sich durch:

$$\frac{2\pi}{\lambda}(r\cos(\theta') + r\cos(\theta))$$

### Gl. 5.4.1: Phasenunterschied

da dies nichts anderes ist als die Definition des Vektorproduktes ( $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}=|\mathbf{a}||\mathbf{b}|\cos(\alpha)$ ), erhält man einen Phasenfaktor von:

$$\exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r})$$

### Gl. 5.4.2: Phasenfaktor

mit dem einfallenden Wellenvektor  $\mathbf{k}$  und dem gestreuten Wellenvektor  $\mathbf{k}'$ .

weitere gilt:  $\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}'$

$\Delta\mathbf{k}$  wird Streuvektor genannt und bezeichnet die durch Streuung verursachte Änderung des Wellenvektors der Röntgenstrahlung.

Wie hängt das nun mit unserer Beugungsbedingung zusammen?

Über den Ansatz von Laue!

## 6.1. Laue

Um nun die Bedingung für konstruktive Interferenz nach Laue herauszufinden, betrachten wir nur zuerst einmal nur zwei Streuzentren die um einen Vektor  $\mathbf{d}$  auseinander liegen (Abb. 6.1.1). Ein Röntgenstrahl mit der Wellenlänge  $\lambda$  und der Richtung  $\mathbf{n}$  falle aus großer Entfernung auf diese zwei Punkte, er wird gestreut, der gestreute Strahl besitzt noch immer die Wellenlänge  $\lambda$  (elastische Streuung) hat aber nun die Richtung  $\mathbf{n}'$ . Der Wellenvektor des einfallenden Röntgenstrahls ergibt sich zu:  $\mathbf{k}=2\pi\mathbf{n}/\lambda$ , der des gestreuten Strahls zu:  $\mathbf{k}=2\pi\mathbf{n}'/\lambda$

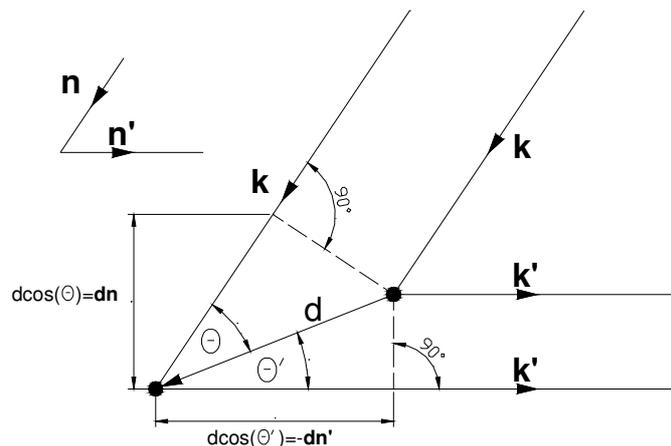


Abb. 6.1.1: Beugung nach Laue

Konstruktive Interferenz ergibt sich wenn der Wegunterschied der beiden Strahlen ein ganzzahliges vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  ist.

Somit:

$$d \cos(\Theta') + d \cos(\Theta) = \vec{d} \cdot (\vec{n} - \vec{n}')$$

$$\vec{d} \cdot (\vec{n} - \vec{n}') = m\lambda$$

multipliziert man beide Seiten mit  $2\pi/\lambda$  erhält man:

$$\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2m\pi$$

Wenn wir nun nicht nur ganz allgemein zwei Streuzentren betrachten sondern ein reziprokes Gitter, in dem die Gitterpunkte die Streuzentren sind, so wird der Abstandsvektor  $\mathbf{d}$  zum Gittervektor  $\mathbf{R}$  des Bravaisgitters.

Damit:

$$\vec{R} \cdot \Delta\vec{k} = 2m\pi$$

führen wir nun eine Skalarmultiplikation von links mit  $\mathbf{d}$  aus:

$$\vec{R} \cdot \vec{R} \cdot \Delta\vec{k} = \vec{R} 2m\pi$$

$$|\vec{R}|^2 \cdot \Delta\vec{k} = \vec{R} 2m\pi$$

$$\Delta\vec{k} = \frac{2m\pi}{R} \frac{\vec{R}}{R}$$

$2\pi/R$  ist aber genau die Definition des Betrages des reziproken Gittervektors, die Richtung bleibt die Selbe wie im direkten Gitter, für den einfachsten Fall setzen wir  $m=1$  und damit haben wir eine neue Beugungsbedingung gefunden:

$$\Delta\vec{k} = \vec{G}_1$$

Gl. 6.1.1: Beugungsbedingung

<sup>1</sup> Anmerkung: Es ist sowohl  $\mathbf{G}$  als auch  $-\mathbf{G}$  ein reziproker Gittervektor, deshalb ist es irrelevant ob man  $\Delta\mathbf{k}$  als  $\mathbf{k}-\mathbf{k}$  oder  $\mathbf{k}-\mathbf{k}'$  definiert.

## 6.2. Auf dem Weg zur Brillouin Zone

Man kann die Beugungsbedingung noch umformen:

Wir sind ja von elastischer Streuung ausgegangen, hier bleibt die Photonenenergie konstant, da  $E = \frac{hc}{\lambda}$  bleibt auch die Wellenlänge konstant, somit aber auch der Betrag des Wellenvektors der Röntgenstrahlung.

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = k'$$

$$k = |\vec{k} - \Delta\vec{k}|$$

Damit gilt, unter Verwendung der Beugungsbedingung (Gl. 6.1.1):

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

quadriert man diese Bedingung erhält man:

$$k^2 = k^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{G} + G^2$$

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2$$

nun teilen wir noch durch 4:

$$\frac{\vec{k} \cdot \vec{G}}{2} = \left(\frac{G}{2}\right)^2$$

Abb. 6.2.1: Beugungsbedingung

In dieser Form der Beugungsbedingung steckt einer der Zugänge zu den Brillouin Zonen. Grafisch erklärt bedeutet Gl. 6.1.1: Man nehme 2 Punkte des reziproken Gitters und zeichne die so genannte Mittelsenkrechte (gestrichelte Linie in Abb. 6.2.2) zwischen ihnen ein und dann einen Wellenvektor  $\mathbf{k}$  der die Mittelsenkrechte in einem beliebigen Punkt schneidet.

Eine Möglichkeit diese Grafik zu zeichnen ist in Abb. 6.2.2 dargestellt.

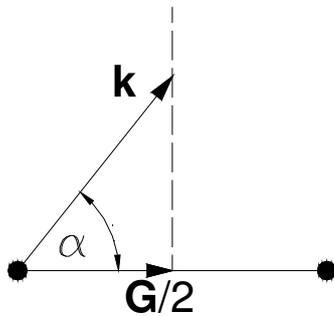


Abb. 6.2.2: Grafische Erklärung der Beugungsbedingung

Schlüsseln wir nun mit Hilfe von Abb. 6.2.2 Gl. 6.1.1 auf:

Das Vektorprodukt  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}/2$  ist definiert als:

$$\frac{\vec{k} \cdot \vec{G}}{2} = \frac{G}{2} k \cos(\alpha)$$

wobei  $k \cos(\alpha)$  die Projektion des Vektors  $\mathbf{k}$  in Richtung  $\mathbf{G}$  ist. Da aber sowohl  $\mathbf{G}/2$  als auch  $\mathbf{k}$  die Mittelsenkrechte schneiden, sind die Projektionen von  $\mathbf{k}$  auf  $\mathbf{G}$  und  $\mathbf{G}/2$  gleich lang, ihr Produkt hat also die Länge:

$$\left(\frac{G}{2}\right)^2$$

dies ist die rechte Seite von Gl. 6.1.1.

Das bedeutet also das alle Wellenvektoren die auf die Mittelsenkrechte auftreffen die Beugungsbedingung nach Laue erfüllen. Zeichnet man nun vom Ausgangspunkt zu jedem Gitterpunkt die Mittelsenkrechte ein erhält man die so genannte Brillouinkonstruktion (Abb. 6.2.3).

Das kleinste Volumen der Konstruktion nennt man 1. Brillouinzone (Abb. 6.2.4). Die Brillouinkonstruktion ist deshalb so wichtig weil sie (wir haben es oben für eine „Seite“ einer Brillouinzone gezeigt) alle Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  aufweist, die eine konstruktive Interferenz erzeugen.

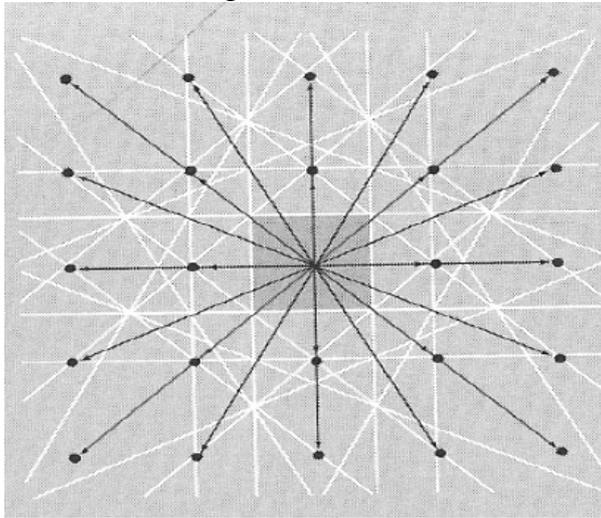
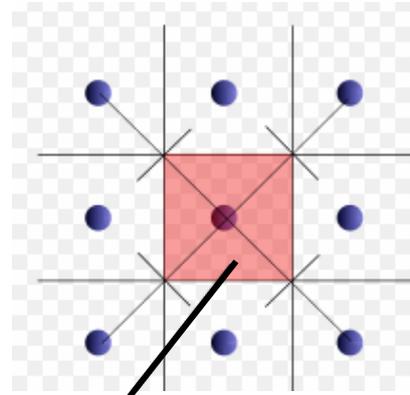


Abb. 6.2.3a: Brillouinkonstruktion



1. Brillouinzone

Abb. 6.2.4b: 1. Brillouinzone

## 7. Erste Brillouin Zone

### 7.1. Allgemein

Die primitive Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters wird als so genannte erste Brillouin-Zone bezeichnet. Wie der Name schon sagt existieren auch noch Brillouin-Zonen höherer Art. Dabei handelt es sich aber um primitive Zellen eines anderen Typs und diese werden von uns nicht behandelt. In der Theorie der elektronischen Niveaus in einem periodischen Potential treten Brillouin-Zonen höherer Art auf.

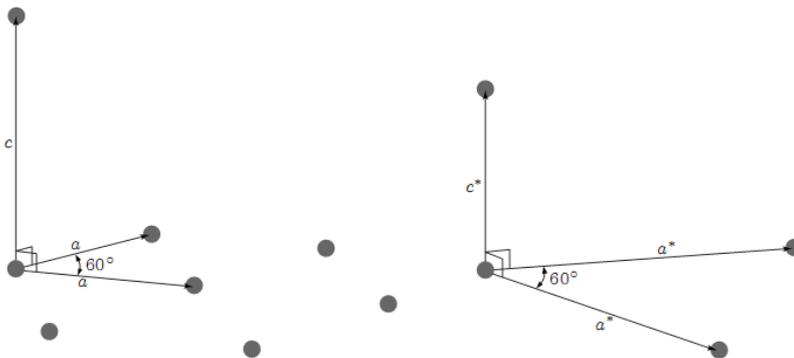


Abb. 7.1.1: Links: Primitive Vektoren für das einfache hexagonale Bravaisgitter

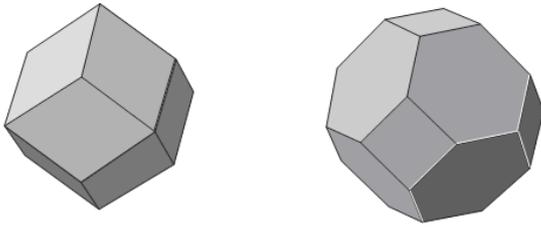
Rechts: Primitive Vektoren für das Reziproke des von den primitiven Vektoren in links erzeugten Gitters

Obwohl sich der Begriff Wigner-Seitz-Zelle und erste Brillouin-Zone auf dieselbe geometrische Konstruktion beziehen, verwendet man in der Praxis die Bezeichnung Brillouin-Zone ausschließlich nur dann, wenn es sich um Zellen im  $\mathbf{k}$ -Raum handelt.

Bezieht man sich insbesondere auf die erste Brillouin-Zone eines speziellen Bravaisgitters im direkten Raum, so spricht man immer von der Wigner-Seitz-Zelle des zugehörigen reziproken Gitters.

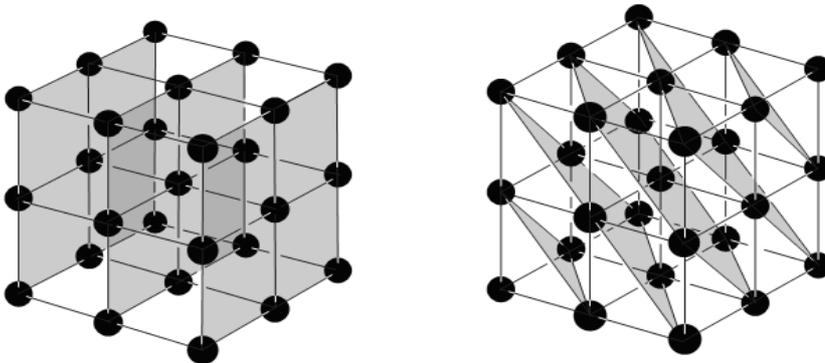
Da das reziproke des kubisch-raumzentrierten Gitters kubisch-flächenzentriert ist, erhält

man deshalb als erste Brillouin-Zone des bcc-Gitters die Wigner-Seitz-Zelle des fcc-Gitters. Umgekehrt ist die erste Brillouin-Zone des fcc-Gitters genau die bcc-Wigner-Seitz-Zelle. (siehe Abbildung *Abb. 7.1.2*)



**Abb. 7.1.2:** Links: die erste Brillouin-Zone des kubisch-raumzentrierten Gitters  
Rechts Die erste Brillouin Zone des kubisch-flächenzentrierten Gitters

## 7.2. Gitterebenen



**Abb. 7.2.1:** Links: einige Gitterebenen eines einfach-kubischen Bravaisgitters  
Rechts: verschiedene Möglichkeiten das Gitter als eine Schar von Gitterebenen darzustellen

Zwischen den Vektoren des reziproken Gitters und den Ebenen von Punkten des direkten Gitters besteht eine enge Beziehung. Diese Beziehung spielt in der Theorie der Beugung an Kristallen eine wesentliche Rolle.

Eine Gitterebene ist in einem gegebenen Bravaisgitter definiert als beliebige Ebene, die mindestens drei nicht-kollineare Gitterpunkte des Bravaisgitters enthält. (Gitterpunkte liegen nicht auf einer Linie)

Dadurch, dass das Bravaisgitter eine Translationssymmetrie enthält, gibt es sogar unendlich viele solcher Gitterpunkte, die ein zweidimensionales Bravaisgitter in der Ebene bilden.

Eine Menge von parallelen Gitterebenen mit konstantem Abstand wird als Schar von Gitterebenen bezeichnet. Diese Menge enthält sämtliche Punkte des dreidimensionalen Bravaisgitters. Jede Gitterebene ist Element einer solchen Gitterebenen-schar.

Dadurch dass ein Bravaisgitter in eine Schar von Gitterebenen zerlegt werden kann, und das auf verschiedene Weisen, ist man nicht in der Lage eindeutig zu sein. Durch das reziproke Gitter ist es aber sehr einfach sämtliche mögliche Gitterebenen-scharen zu klassifizieren. Dies geschieht folgendermaßen:

Zu jeder Gitterebenen-schar mit Abstand  $d$  gibt es Vektoren des reziproken Gitters, die senkrecht auf den Ebenen stehen und deren kürzester Betrag den Wert  $2\pi/d$  haben.

Umgekehrt gehört jedem Vektor  $\mathbf{K}$  des reziproken Gitters eine Schar von dazu senkrechten Gitterebenen mit Abstand  $d$ , wobei  $2\pi/d$  der Betrag des kürzesten, zu  $\mathbf{K}$  parallelen Vektors des reziproken Gitters ist.

## 8. Zusammenfassung

- Alles breitet sich aus wie eine Welle, aber tauscht Energie aus wie ein Teilchen
- Nicht nur Licht wird am Kristall gebeugt sondern auch Schall und Teilchen.
- Der gebeugte Strahl kann nur dann gesehen werden wenn er die Bragg-Bedingung ( $n\lambda = 2d \sin(\theta)$ ) erfüllt, d.h. konstruktiv Interferenz auftritt.
- Eine Fourierreihe ist eine Zerlegung einer beliebigen periodischen Funktion in Sinus und Kosinusterme.
- 
- Jede Kristallstruktur hat also zwei mit ihr verbundene Gitter, das direkte Gitter und das reziproke Gitter. Ein Beugungsbild eines Kristalls ist die Darstellung des reziproken Gitters. Ein mikroskopisches Bild ist die Darstellung des direkten Gitters.

## 9. Quellen

Vorlesungsunterlagen - <http://lamp.tu-graz.ac.at/~hadley/ss1/>

Wikipedia – [www.wikipedia.org](http://www.wikipedia.org)

Fourierapplet - [http://www.getsoft.net/\\_fouriertest/ger](http://www.getsoft.net/_fouriertest/ger)

Kittel, Einführung in die Festkörperphysik, ISBN-10: 3486577239

Ashcroft, Festkörperphysik, ISBN-10: 3486582739