



Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 4**

Vorlesungsstunde: 12.11.2020

- **Reale Kristalle**
 - strukturelle Fehlordnung nach Ursache/Position
 - **intrinsische Defekte:** *Leerstellen, Zwischengitteratome*
 - **extrinsische Defekte:** *Versetzungen, Korngrenzen, Ausscheidungen*
 - strukturelle Fehlordnung nach Dimensionalität
 - **Punkt-** (0D), **Linien-** (1D), **Flächendefekte** (2D)
 - bei endlichen Temperaturen enthalten reale Kristalle immer **Kristalldefekte** !
z.B. Leerstellenkonzentration aus **Minimierung der freien Energie $F = U - TS$**

- **Beispiel: Leerstellenkonzentration**

- freie Energie $F = U - TS$ ist im thermischen Gleichgewicht minimal
- entfernen von n Atomen aus Gitter mit N Gitterplätzen:
 - Zunahme der inneren Energie: $\Delta U = n \epsilon$ (ϵ = fehlende Bindungsenergie/Fehlstelle)
 - Zunahme der Entropie: $\Delta S = n \sigma_{\text{th}} + k_B \ln \frac{N!}{(N-n)!n!}$
- **neues Minimum von F** für $\frac{n}{N} = e^{\sigma_{\text{th}}/k_B} e^{-\epsilon/k_B T}$ → endlicher Anteil n/N von Leerstellen

- **Farbzentren**
 - Leerstellen in Ionenkristallen → Problem mit Ladungsneutralität (muss gewährt sein)
 - am besten untersucht: „**F-Zentrum**“ = einzelnes Elektron in Halogenlücke
 - Elektron in Quantentrog: charakteristische Anregungswellenlänge $\lambda_{\max} \propto \alpha R_{\text{NN}}^2$
 - charakteristisches Absorptionsverhalten → **Farbeindruck**

- **Liniendefekte**
 - Burgers-Vektor **b** senkrecht zur Versetzungslinie → **Stufenversetzung**
 - parallel zur Versetzungslinie → **Schraubenversetzung**

- **Flächendefekte**
 - Korngrenzen
 - Stapelfehler

- **chem. Fehlordnung**
 - **substitutionelle** oder **interstitielle Fremdatome**
 - Abweichungen von Stöchiometrie, **Anti-Site-Defekte**

- **nicht-kristalline FK**
 - radiale Verteilungsfunktion im *Kristall*: $\rho(r) = \rho_{\text{Kristall}} = N(r)\delta(r - r_j) = \begin{cases} 0 & \text{für } r \neq r_j \\ \infty & \text{für } r = r_j \end{cases}$
 - im *amorphen FK*: $\rho(r) = 4\pi r^2 n_0 \equiv \rho_{\text{Zufall}} \propto r^2$
 - reale Situation*: $\rho(r) = \begin{cases} \rho_{\text{Kristall}} & \text{für } r \ll r_c \\ \rho_{\text{Zufall}} & \text{für } r \gg r_c \end{cases}$

- **Flüssigkristalle**

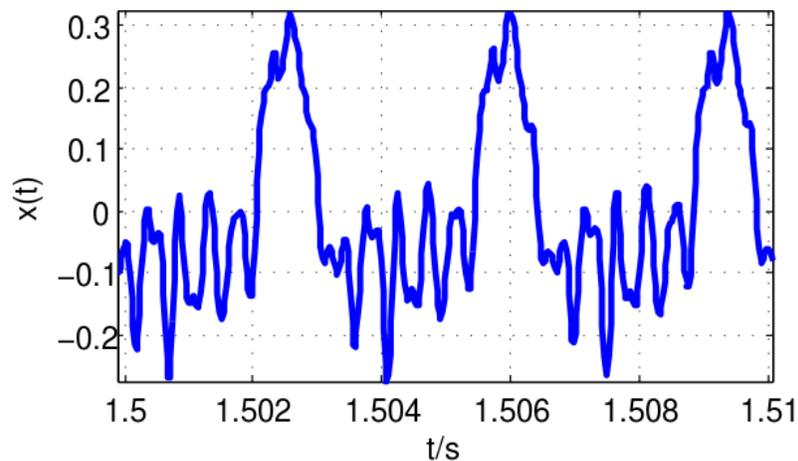
- **Abbildung von FK-Oberflächen**
 - Elektronenmikroskopie
 - Rastersondenmikroskopie

2 Strukturanalyse

- Laue, Knipping, Friedrich: **kristalliner Festkörper = regelmäßige Anordnung von Atomen**
 - Nachweis über die Beugung von Röntgenstrahlen
- Heutiges Wissen:
 - Beugung von elektromagnetischen Wellen (Röntgenstrahlung) oder Materiewellen (z.B. Elektronen, Neutronen) an Kristallgitter, falls **Wellenlänge \approx Atomabstand**
 - analog zu Optik: Beugung von Licht an Beugungsgitter
- Direkte Abbildungsverfahren (TEM, STM)
 - Information über **Realstruktur** (lokal): Defekte, Oberflächen, Grenzflächen
- Beugungsmethoden
 - Information über **Idealstruktur** (global): periodischer Aufbau, Gitterkonstante, Kristallsymmetrie
- Hier: **Beugung von Wellen an periodischen Strukturen** (Analogie zu Optik, Kristall = 3D-Beugungsgitter)
- Wichtige neue Grundbegriffe:
 - reziprokes Gitter, Brillouin-Zonen**

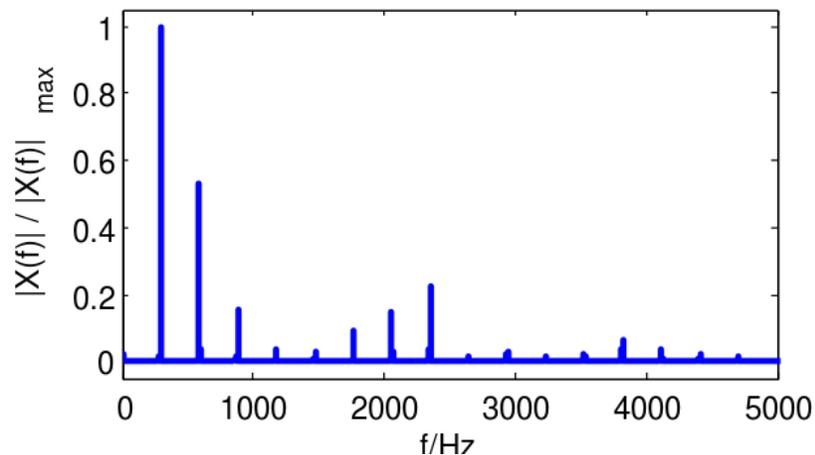
2.1 Das reziproke Gitter

- zur Beschreibung von Beugungseffekten ist die Einführung von **reziprokem Gitter** zweckmäßig
- **Kristallgitter** und **reziprokes Gitter** sind über **Fourier-Transformation** (FT) miteinander verbunden
- analog: Zeit- und Frequenzraum



Streudichte $\rho(\mathbf{r})$, $[\mathbf{r}] = \text{Meter}$

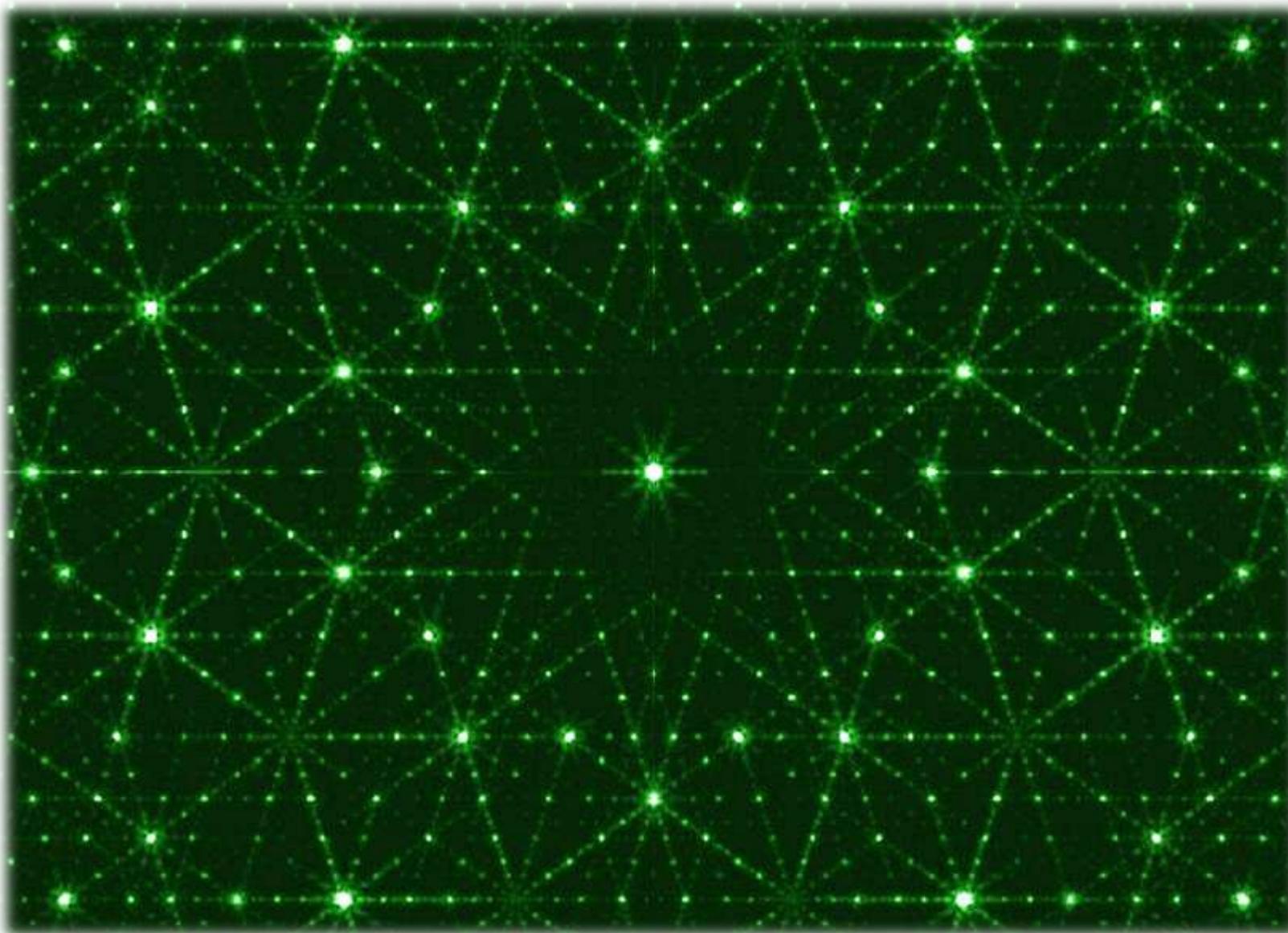
Normiertes Amplitudenspektrum



Streuamplitude $\Psi(\mathbf{k})$, $[\mathbf{k}] = 1/\text{Meter}$

Beugungsmuster

2.1 Das reziproke Gitter



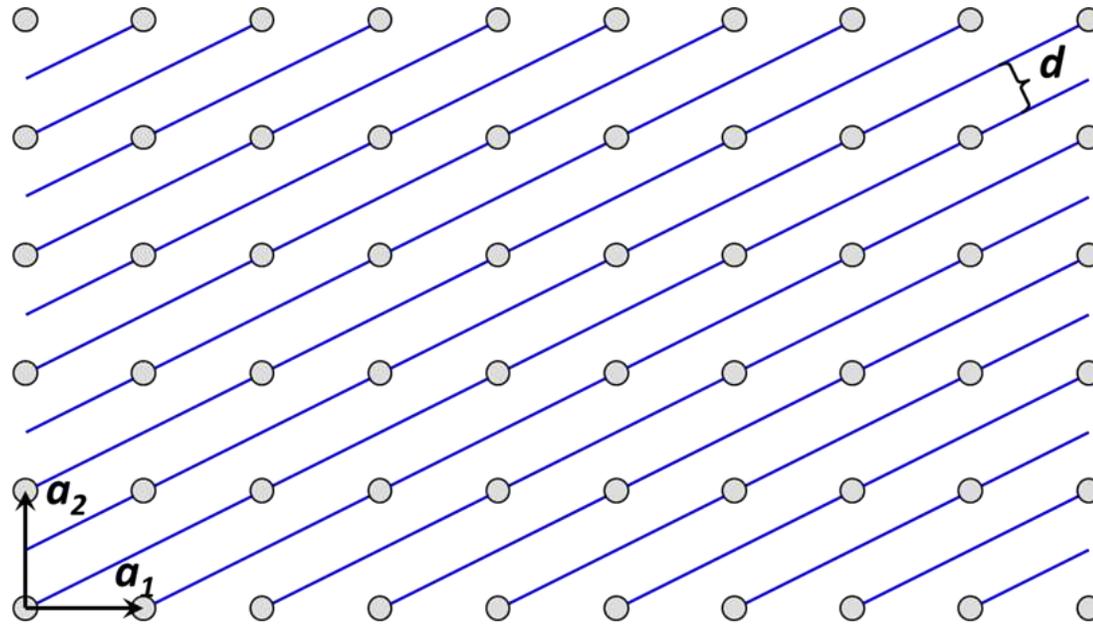
Beugungsmuster der Penrose-Pflasterung

<http://www.math.uni-bielefeld.de/baake/frettlow/gallery/>

2.1.1 Definition des reziproken Gitters

- Raumgitter (direktes Gitter):

- **Wellenfronten** von ebenen Wellen mit $\Psi_{\mathbf{k}} = \Psi_{k0} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \text{const.}$ können als **Gitterebenen** aufgefasst werden
- zu jeder Netzebenenschar gehört charakteristischer Wellenvektor \mathbf{k}



Äquivalente Definitionen (1):

1. Der Satz aller Wellenvektoren $\mathbf{k} \in \mathbf{G}$, die ebene Wellen mit der Periodizität des Raumgitters ergeben, bildet das zum Raumgitter **reziproke Gitter**. Wir bezeichnen \mathbf{G} als **reziproken Gittervektor**

2.1.1 Definition des reziproken Gitters

Äquivalente Definitionen (2):

- für Wellen $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \Psi_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ mit der Periodizität des Raumgitters muss gelten:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \Psi_0 e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = \Psi_0 (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

- es muss also $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$ gelten
- wir bezeichnen alle Wellenvektoren $\mathbf{k} = \mathbf{G}$, für die $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$ gilt, als **reziproke Gittervektoren**

damit erhalten wir die **äquivalente Definition (2)**:

2. Sei $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ ein Raumgitter. Das hierzu **reziproke Gitter** besteht aus allen Vektoren \mathbf{G} , für die gilt:

$$e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$$

2.1.2 Fourier-Analyse

- falls die Funktion $f(\mathbf{r})$ die Periodizität des Raumgitters besitzt, gilt

$$f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

- Entwicklung in Fourier-Reihe:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad \Rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \mathbf{1}$$

- da in \mathbf{R} ein Vektor des Raumgitters ist, muss $\mathbf{k} = \mathbf{G}$ gelten



In der Fourier-Zerlegung einer Funktion mit Periodizität des Raumgitters können nur Wellenvektoren $\mathbf{k} = \mathbf{G}$ vorkommen, die zum reziproken Gitter dieses Raumgitters gehören

- für die Fourier-Koeffizienten gilt:

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V_c} \int_{\text{Zelle}} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3r \quad (\text{Integration über primitive Gitterzelle})$$

2.1.3 Die reziproken Gittervektoren

- Raumgitter: $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ $n_1, n_2, n_3 = \text{ganzzahlig}$
- Reziprokes Gitter: $\mathbf{G} = h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3$ $h, k, \ell = ??$
- es gilt: $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$ bzw. $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi \cdot m$ $m = \text{ganzzahlig}$
- Bedingung ist erfüllt durch folgende elementaren Vektoren:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2$$

$$\text{da } \mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases}$$

$$\text{mit } \mathbf{a} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{a}) = 0$$

$$\Rightarrow \mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = (h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3) \cdot (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3) = 2\pi \cdot m = 2\pi \underbrace{(hn_1 + kn_2 + \ell n_3)}_{= \text{ganze Zahl}}$$

- Folgerungen:
 - $h, k, \ell = \text{ganzzahlig}$
 - reziprokes Gitter ist ebenfalls ein Bravais-Gitter

2.1.3 Die reziproken Gittervektoren

- Definition des reziproken Gitters:

Das zum Raumgitter $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ reziproke Gitter wird durch die

$$\text{reziproken Gittervektoren } \mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + \ell\mathbf{b}_3$$

aufgespannt, wobei $h, k, \ell = \text{ganzzahlig}$ und

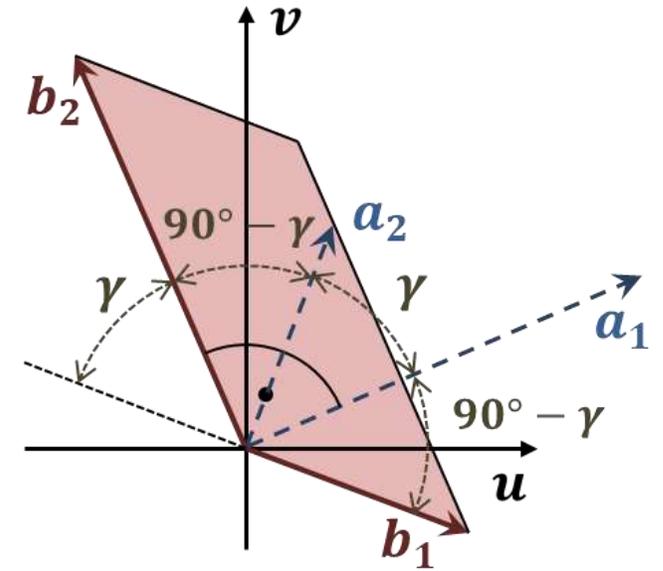
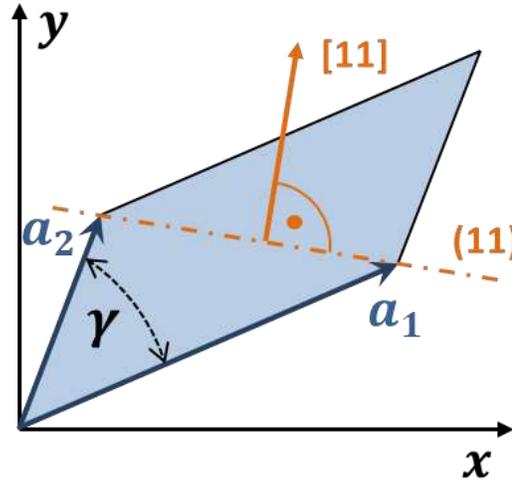
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3, \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2$$

die elementaren reziproken Gittervektoren sind

- Wichtige Fakten (teilweise ohne Beweis):
 - a) Das reziproke Gitter ist wiederum ein Bravais-Gitter
 - b) Das reziproke Gitter des reziproken Gitters ist das direkte Raumgitter (FT)
 - c) Ist $V_c = a_1 \cdot (a_2 \times a_3)$ das Volumen der primitiven Gitterzelle des Raumgitters, so ist $(2\pi)^3/V_c$ das Volumen der primitiven Zelle des reziproken Gitters

2.1.3 Die reziproken Gittervektoren

- Fläche der primitive Gitterzelle (2D)



es gilt: $\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi$, $\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = 0 \Rightarrow \mathbf{b}_1 \perp \mathbf{a}_2$, mit $|\mathbf{b}_1||\mathbf{a}_1|\cos(90^\circ - \gamma) = |\mathbf{b}_1||\mathbf{a}_1|\sin \gamma = 2\pi$
 $\Rightarrow |\mathbf{b}_1| = \frac{2\pi}{|\mathbf{a}_1| \sin \gamma}$

$\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{a}_2 = 2\pi$, $\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{a}_1 = 0 \Rightarrow \mathbf{b}_2 \perp \mathbf{a}_1$, mit $|\mathbf{b}_2||\mathbf{a}_2|\cos(90^\circ - \gamma) = |\mathbf{b}_2||\mathbf{a}_2|\sin \gamma = 2\pi$
 $\Rightarrow |\mathbf{b}_2| = \frac{2\pi}{|\mathbf{a}_2| \sin \gamma}$

Flächen: $V_c = |\mathbf{a}_1||\mathbf{a}_2| \sin \gamma$

$$V_c^{\text{rez}} = |\mathbf{b}_1||\mathbf{b}_2| \sin \gamma = \frac{(2\pi)^2}{|\mathbf{a}_1||\mathbf{a}_2|\sin \gamma} = \frac{(2\pi)^2}{V_c}$$

2.1.3 Die reziproken Gittervektoren

- Matrixdarstellung für die Gittervektoren $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ und reziproken Gittervektoren $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$:

$$A = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \begin{pmatrix} b_{1x} & b_{2x} & b_{3x} \\ b_{1y} & b_{2y} & b_{3y} \\ b_{1z} & b_{2z} & b_{3z} \end{pmatrix}$$

← kartesische Komponenten
der Vektoren

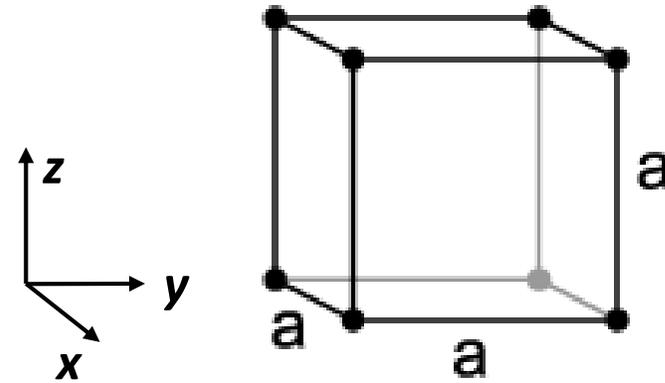
wegen $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$ gilt:

$$A^T B = 2\pi \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad B = 2\pi (A^T)^{-1}$$

← zu A transponierte Matrix

2.1.3 Die reziproken Gittervektoren

- Beispiel: kubisch primitives Gitter:

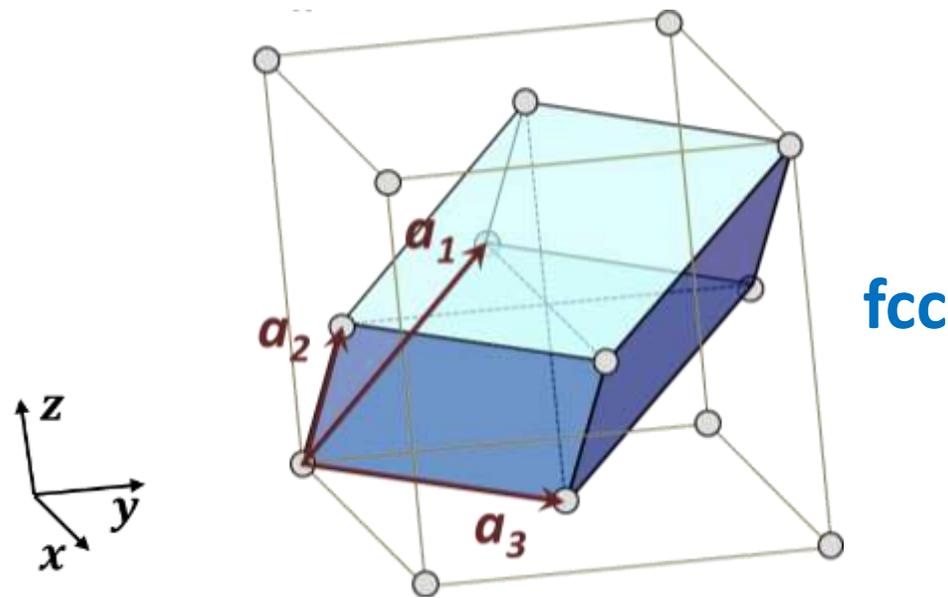


$$A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

reziprokes Gitter des kubischen primitiven Gitters ist wiederum ein kubisch primitives Gitter mit Gitterkonstante $2\pi/a$

2.1.3 Die reziproken Gittervektoren

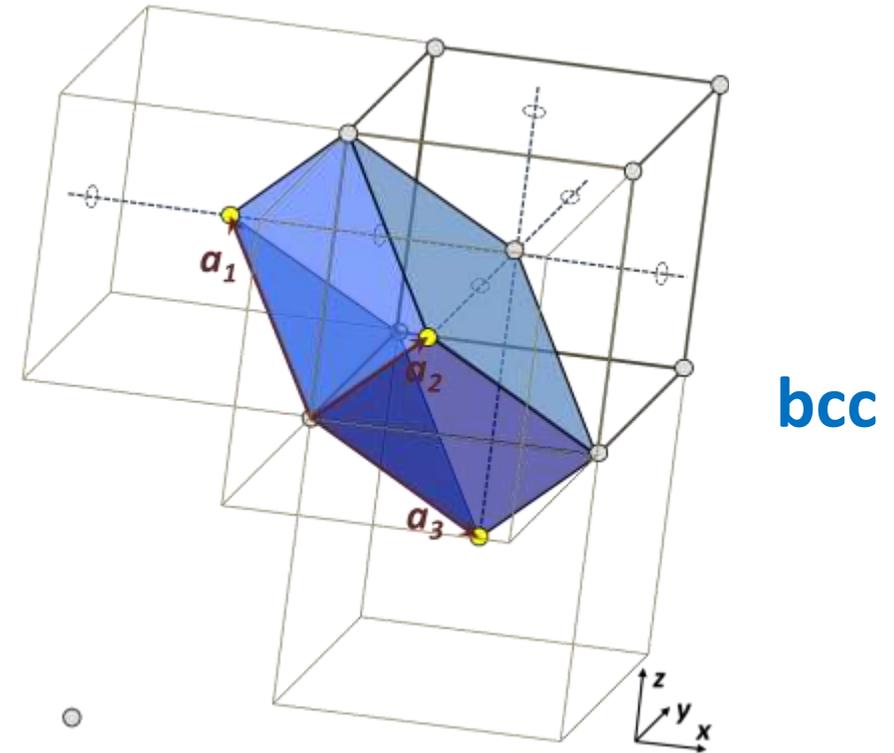
- Beispiel: kubisch flächenzentriertes und raumzentriertes Gitter:



fcc

$$A = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

reziprokes Gitter des fcc-Gitters ist ein kubisch raumzentriertes (bcc) Gitter



bcc

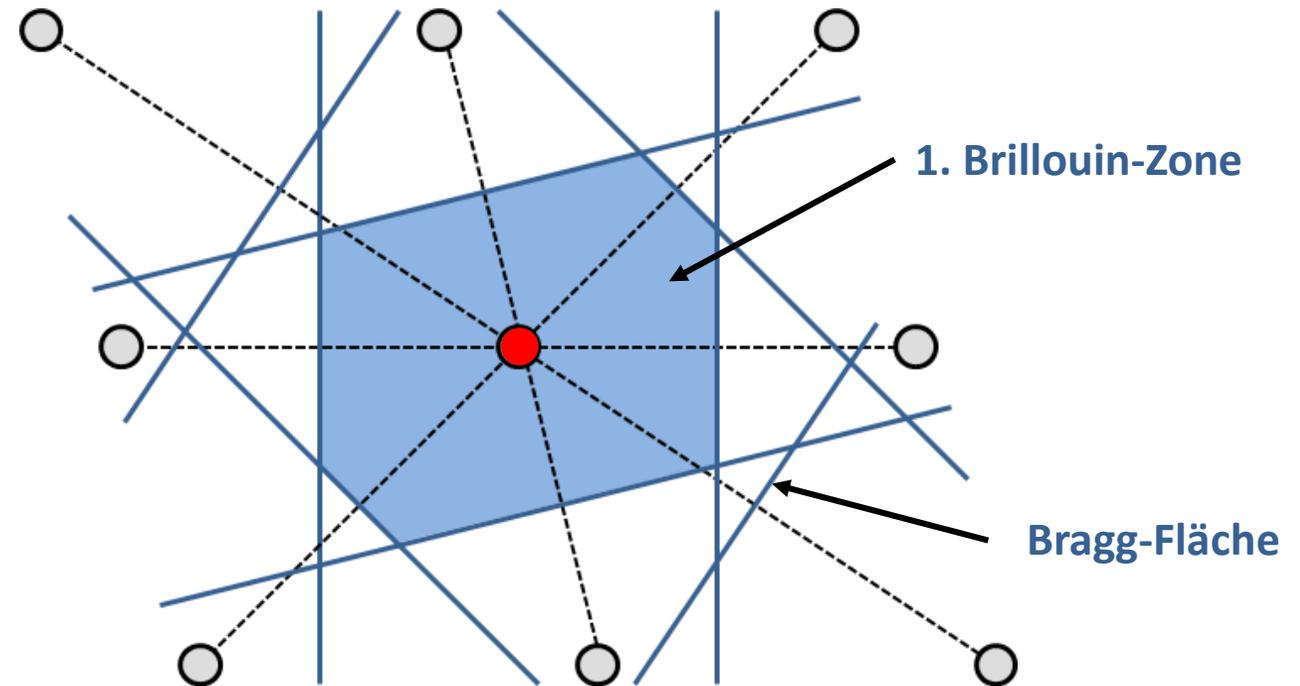
$$A = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

reziprokes Gitter des bcc-Gitter ist ein kubisch flächenzentriertes (fcc) Gitter

2.1.4 Die 1. Brillouin Zone

Die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters heißt **1. Brillouin-Zone**

- gleiche Konstruktionsvorschrift wie für Wigner-Seitz-Zelle
 - i. ziehe Verbindungslinien von ausgewähltem Gitterpunkt des **reziproken Gitters** zu seinen Nachbarn
 - ii. zeichne Geraden (3D: Ebenen) durch die Mittelpunkte der Verbindungslinien senkrecht zu den Verbindungslinien
 - iii. die kleinste umschlossene Fläche (3D: Volumen) ist die **1. Brillouin-Zone des reziproken Gitters**

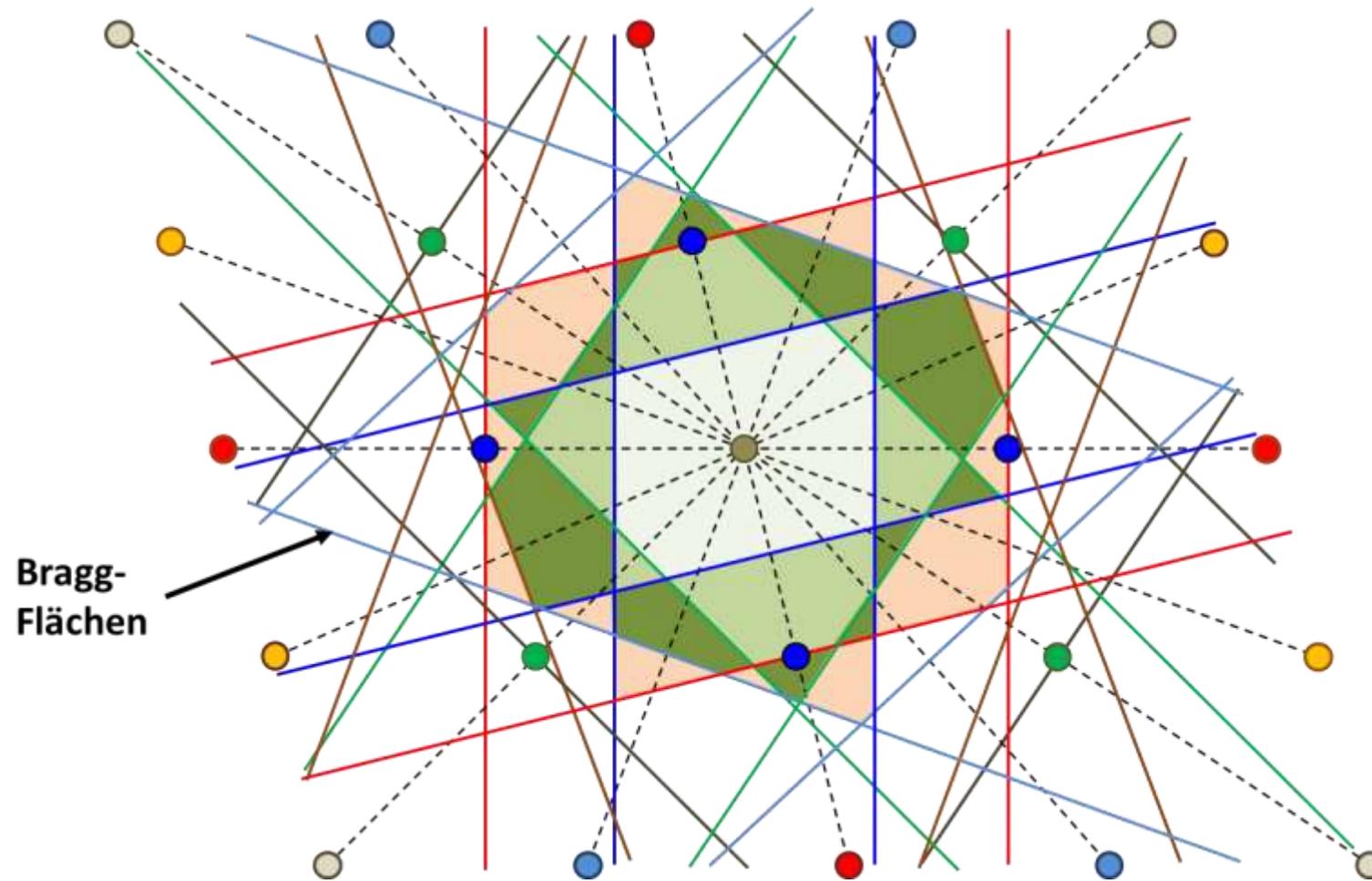


Die Ebenen, die senkrecht auf Verbindungslinien zu den Nachbarpunkten eines Punkts des reziproken Gitters stehen und die Verbindungslinien in Mitte schneiden, heißen **Bragg-Flächen**

2.1.4 Die 1. Brillouin Zone

- Brillouin-Zonen höherer Ordnung

- 1. Brillouin-Zone:** Bereich, der ohne Überschreiten einer Bragg-Fläche erreicht wird
- n -te Brillouin-Zone:** Bereich, der durch Überschreiten von $(n - 1)$ Bragg-Flächen erreicht wird

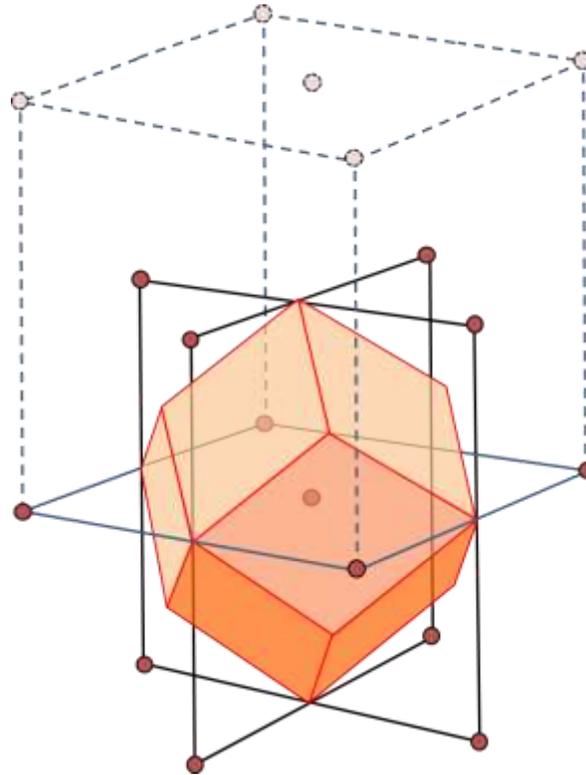


Léon Brillouin (1889-1969)

2.1.4 Die 1. Brillouin Zone

- Beispiele

1. Brillouin-Zone des bcc-Gitters

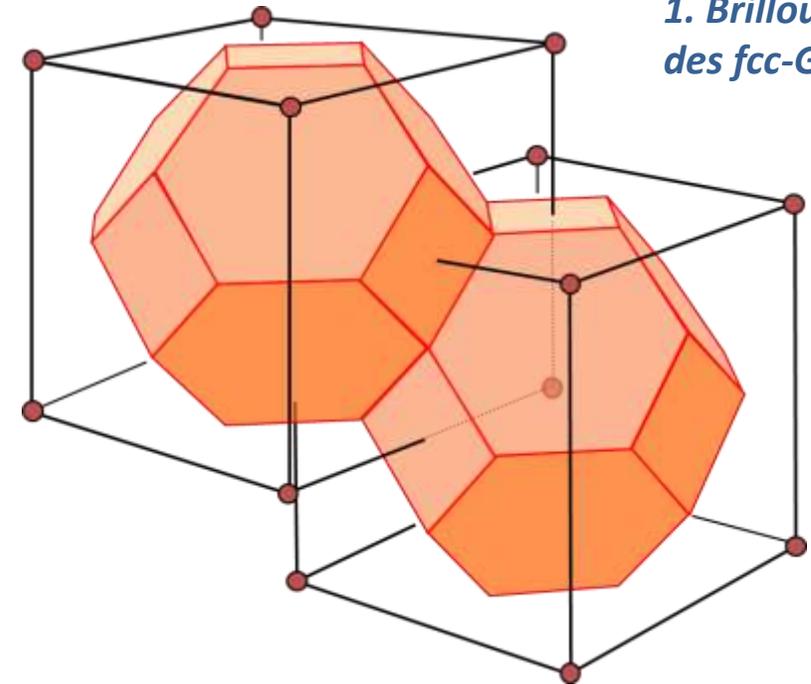


reziprokes Gitter des bcc-Gitters ist fcc-Gitter

→ 1.BZ des bcc-Gitters entspricht der Wigner-Seitz-Zelle eines fcc-Gitters

1. Brillouin-Zone des bcc-Gitters ist ein **rhombisches Dodekaeder** (Wigner-Seitz-Zelle eines fcc-Gitters)

1. Brillouin-Zone des fcc-Gitters



reziprokes Gitter des fcc-Gitters ist bcc-Gitter

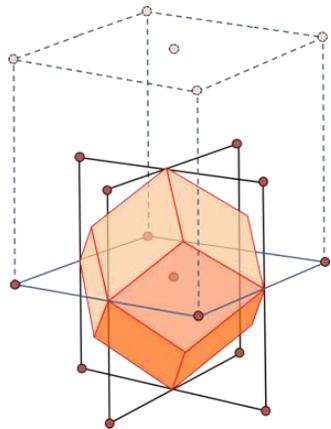
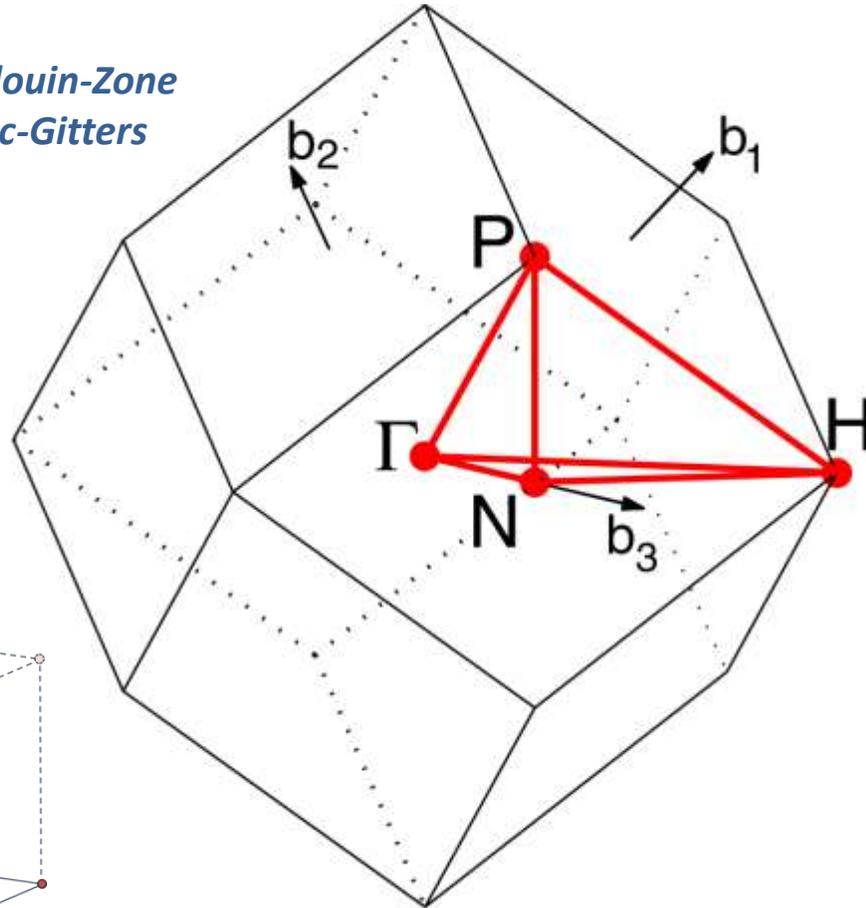
→ 1.BZ des fcc-Gitters entspricht der Wigner-Seitz-Zelle eines bcc-Gitters

1. Brillouin-Zone des fcc-Gitters ist ein **abgestumpfter Oktaeder** mit 8 Sechsecken und 6 Quadraten (Wigner-Seitz-Zelle eines bcc-Gitters)

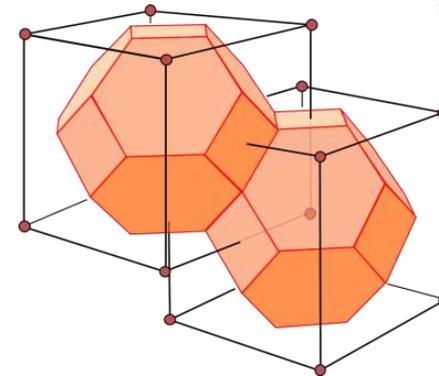
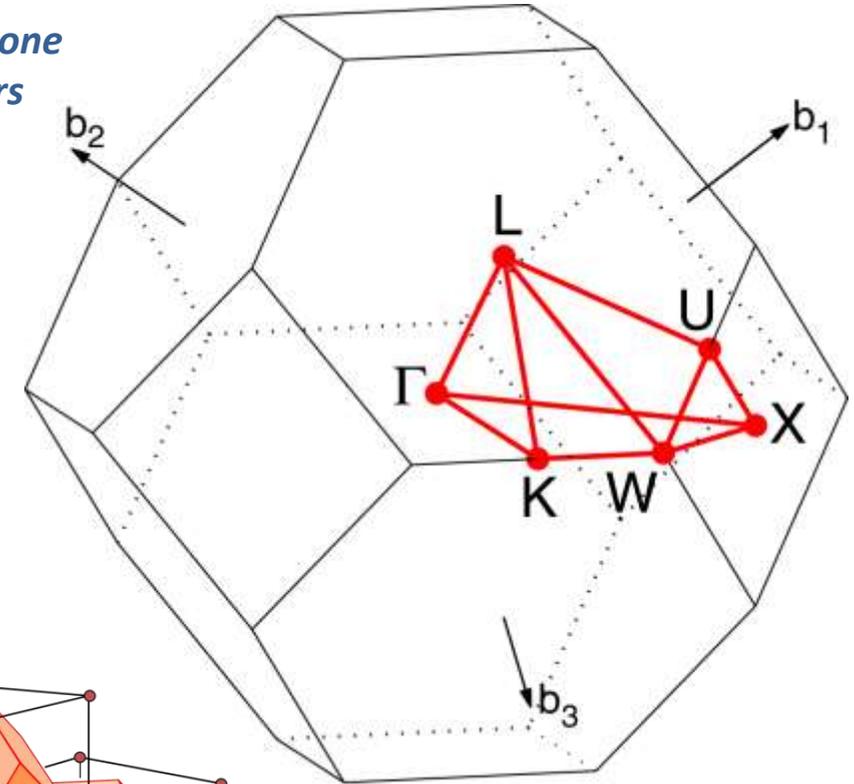
2.1.4 Die 1. Brillouin Zone

- Spezielle Punkte in der 1. Brillouin-Zone (fcc- und bcc-Gitter)

1. Brillouin-Zone
des bcc-Gitters



1. Brillouin-Zone
des fcc-Gitters



2.1.5 Gitterebenen und Millersche Indizes

- Diskussion des Zusammenhangs zwischen den Vektoren \mathbf{G} des reziproken Gitters und den Gitterebenen (hkl) des direkten Raumgitters

- **wir wissen:** Netzebenen von Raumgitter lassen sich durch Millersche Indizes hkl charakterisieren
- **Behauptung:**

Zu jeder Ebenenschar gibt es reziproke Gittervektoren \mathbf{G} und umgekehrt gibt es zu jedem reziproken Gittervektor \mathbf{G} eine Ebenenschar, so dass \mathbf{G} senkrecht auf den Ebenen steht.

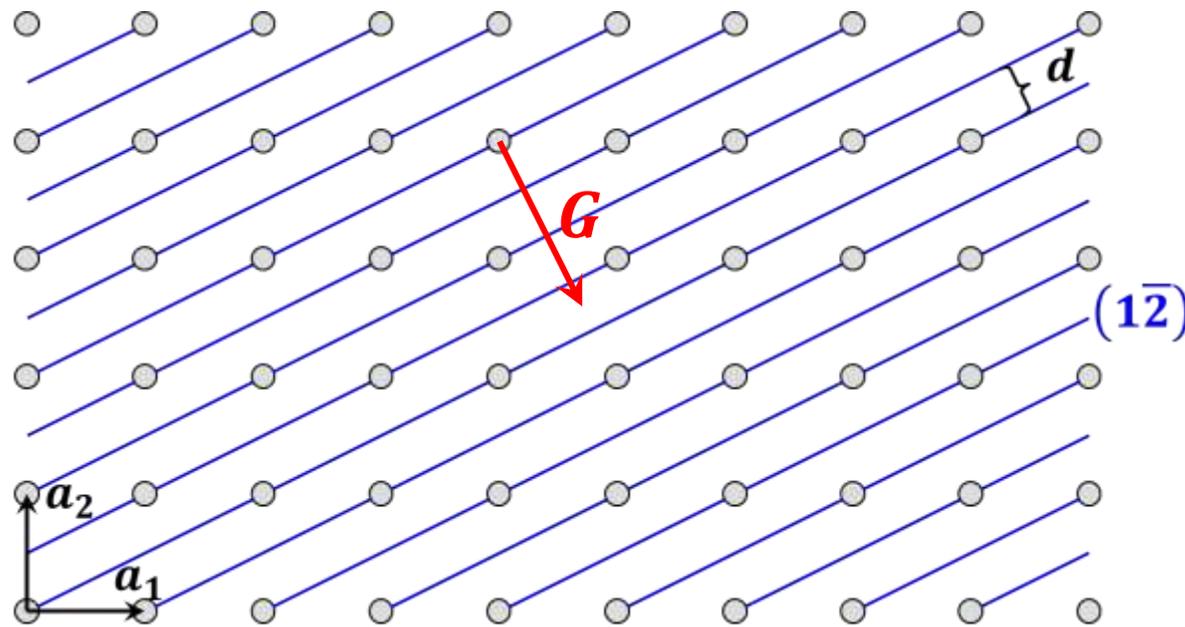
Für den kürzesten reziproken Gittervektor \mathbf{G}_{\min} gilt:

$$\mathbf{G}_{\min} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + \ell\mathbf{b}_3 \quad \text{und} \quad |\mathbf{G}_{\min}| = 2\pi/d \quad d = \text{Abstand der Ebenen in Ebenenschar}$$

- **Beweis:** durch Veranschaulichung

2.1.5 Gitterebenen und Millersche Indizes

– **Beweis:** durch Veranschaulichung



ebene Wellen haben in Ebenen senkrecht zu Wellenfront den gleichen Wert

Wellenfronten von ebenen Wellen mit

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \Psi_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = \text{const} = 1$$

können als Gitterebenen aufgefasst werden

→ da \mathbf{R} ein Element des direkten Raumgitters ist, folgt aus $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = \text{const} = 1$: $\mathbf{k} = \mathbf{G}$

→ da \mathbf{k} senkrecht auf Wellenfront/Ebenenschar steht, steht auch \mathbf{G} senkrecht auf Ebenenschar

2.1.5 Gitterebenen und Millersche Indizes

– Warum gibt es G_{\min} ?

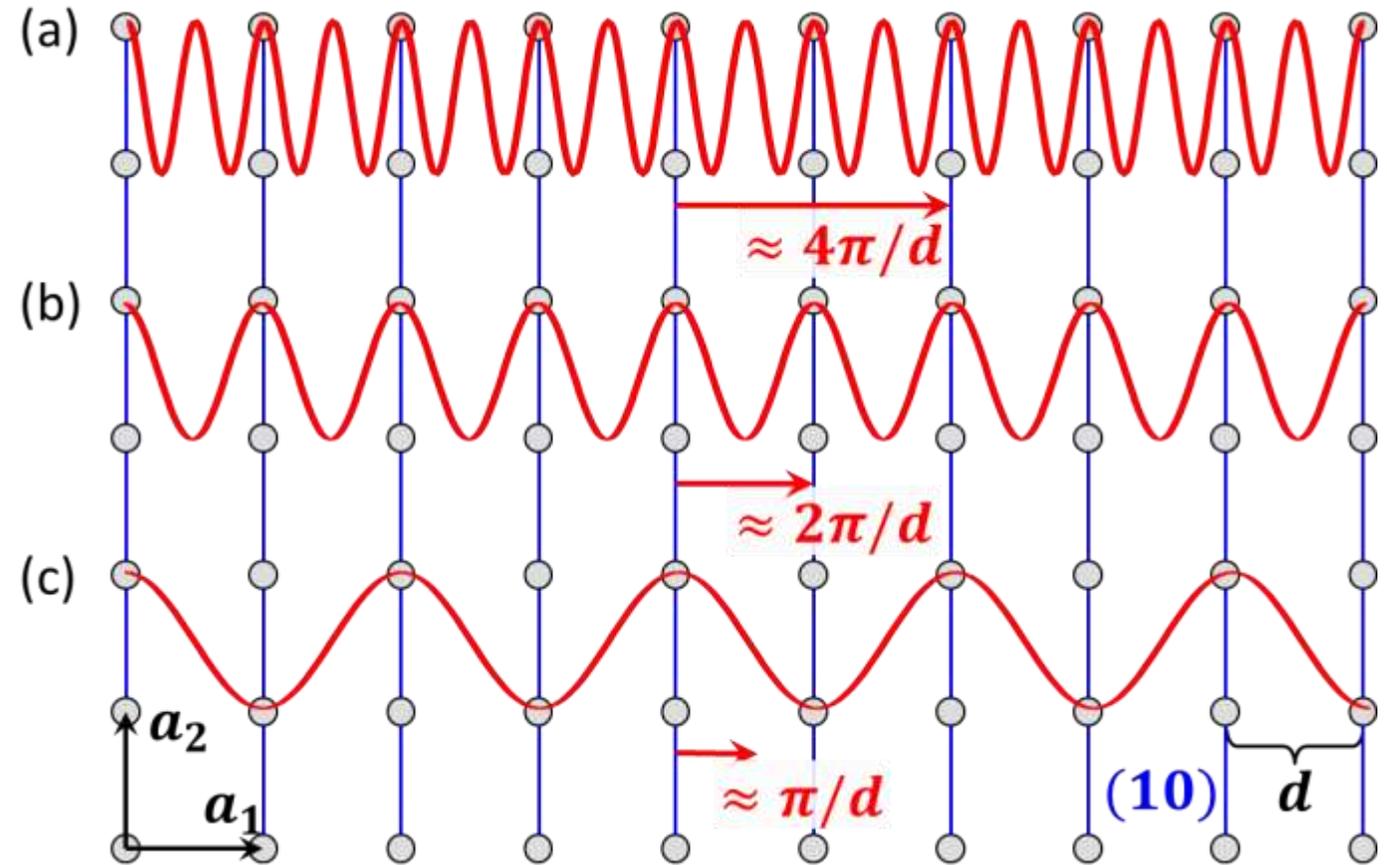
es gilt: $k = 2\pi/\lambda$

→ kleinere Wellenzahlen entsprechen
größeren Wellenlängen

Wellenlänge muss kleiner als $\lambda_{\max} = d$ sein,
damit $\Psi_k = \text{const}$ auf allen Gitterebenen

reziproke Gittervektoren müssen größer sein als

$$G_{\min} = |\mathbf{G}_{\min}| = \frac{2\pi}{\lambda_{\max}} = \frac{2\pi}{d}$$



2.1.6 Gegenüberstellung von direktem und reziprokem Raum

direkter Raum	reziproker Raum
primitive Gittervektoren des Bravais-Gitters: $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	primitive Gittervektoren des reziproken Gitters: $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$
Ebenenschar: (hkl)	Punkt im reziproken Gitter: $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + \ell\mathbf{b}_3$
Normale auf Ebenenschar	Richtung von \mathbf{G}
Abstand der Netzebenen: $d = 2\pi/ \mathbf{G}_{\min} $	Länge von \mathbf{G}_{\min} : $ \mathbf{G}_{\min} = 2\pi/d$
äquivalente Bezeichnung: <i>Ortsraum</i> $[R] = \text{cm}$	äquivalente Bezeichnung: <i>k-Raum</i> $[k] = 1/\text{cm}$

2.2 Beugung von Wellen an periodischen Strukturen

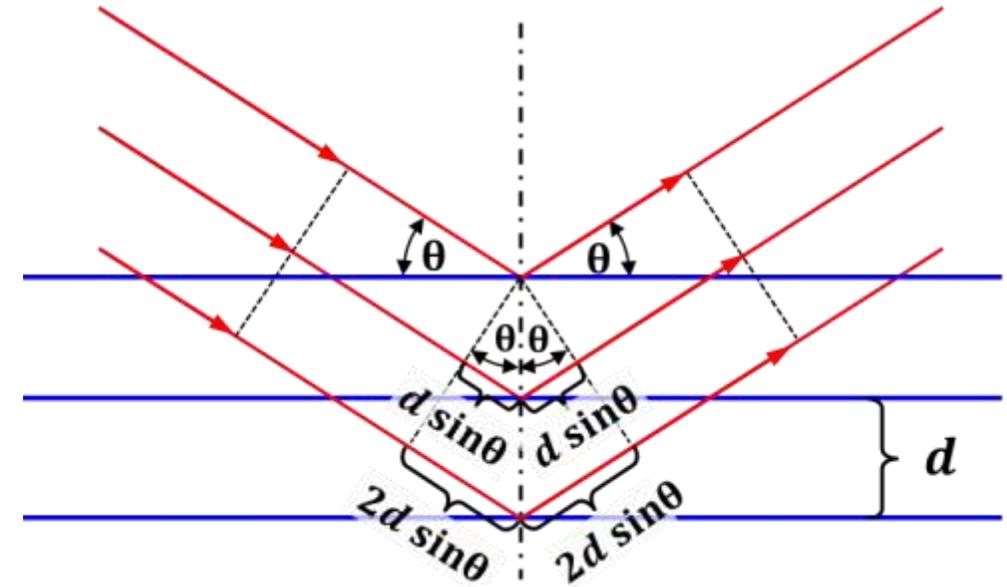
- **Beobachtung von von Laue, Friedrich, Knipping (1912):**
 - Beugung von Röntgenlicht an Kristall ergibt charakteristisches Beugungsmuster
 - Vermutung: Kristall stellt 3D-Beugungsgitter für Röntgenlicht mit $\lambda \sim$ Gitterkonstante dar
- **Grundannahmen:**
 - i. $\lambda \simeq a$ (Gitterkonstante)
 - ii. nur elastische Streuung

2.2.1 Bragg-Bedingung

- **Braggsche Erklärung für Beugungsreflexe**
 - Kristall = Satz von **Netzebenen** mit Abstand d
 - Netzebene = halbdurchlässiger Spiegel
 - konstruktive Interferenz, falls
Gangunterschied = $n \cdot \lambda$ $n = \text{ganzzahlig}$

- **Bragg-Bedingung:**

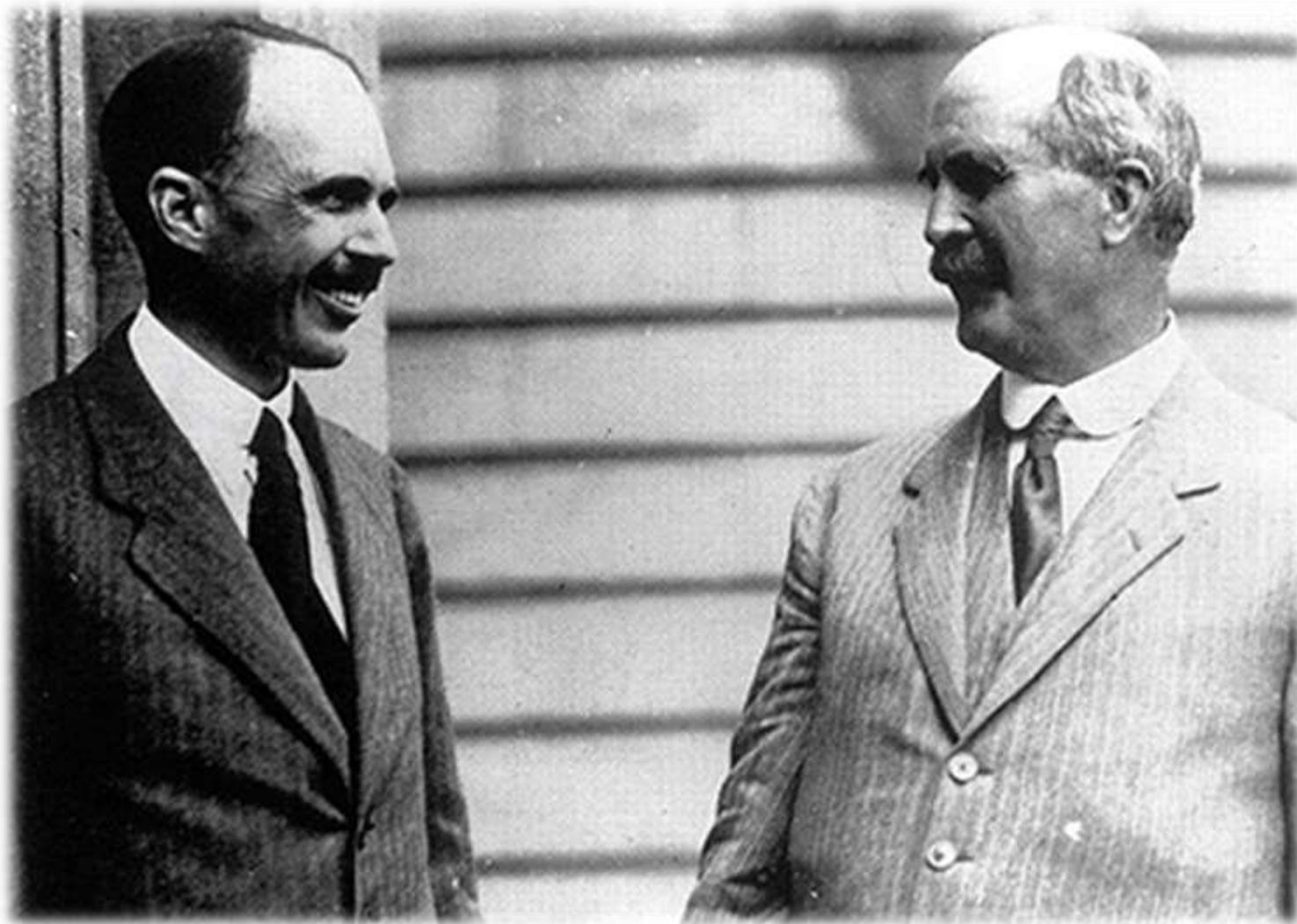
$$2d \sin \theta = n \cdot \lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



- **Beachte:**

- $n = \text{Ordnung des Reflexes}$
- an jeder Netzebene wird nur $10^{-3} - 10^{-5}$ der Intensität gestreut \rightarrow **Vielstrahlinterferenz**
- $d \simeq \text{\AA}$, $\sin \theta \leq 1 \Rightarrow \lambda \leq 2d$
- Bragg-Bedingung ist Konsequenz der Periodizität des Raumgitters
- Basis wird völlig außer Acht gelassen \rightarrow bestimmt Intensität der Beugungsreflexe (später)
- viele Möglichkeiten, Raumgitter in Ebenenscharen aufzuteilen \rightarrow viele Reflexe/Streuwinkel

2.2.1 Bragg-Bedingung



William Henry Bragg (1862–1942)

William Lawrence Bragg (1890–1971)

Nobelpreis für Physik (1915)

„für ihre Verdienste um die Erforschung der Kristallstrukturen mittels Röntgenstrahlen“

2.2.2 von Laue Bedingung

- Diskussion der Streuung von ebener Welle an 3D-Punktgitter

- Gitterpunkte = Quellen von Kugelwellen → Verwendung des Prinzips Huygensscher Wellen
- **Frage:** für welche Richtungen interferieren Kugelwellen konstruktiv?
- **Annahme:** elastische Streuung $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$

- Bedingung für Gangunterschied: $|\mathbf{r}| \cos \varphi' - |\mathbf{r}| \cos \varphi = n \cdot \lambda$

mit Einheitsvektoren

$$\hat{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} = \frac{\mathbf{k}}{2\pi/\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi} \mathbf{k} \quad \hat{\mathbf{k}}' = \frac{\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} = \frac{\mathbf{k}'}{2\pi/\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi} \mathbf{k}'$$

erhalten wir

$$|\mathbf{r}| \cos \varphi = \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{k}} \quad |\mathbf{r}| \cos \varphi' = \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{k}}'$$

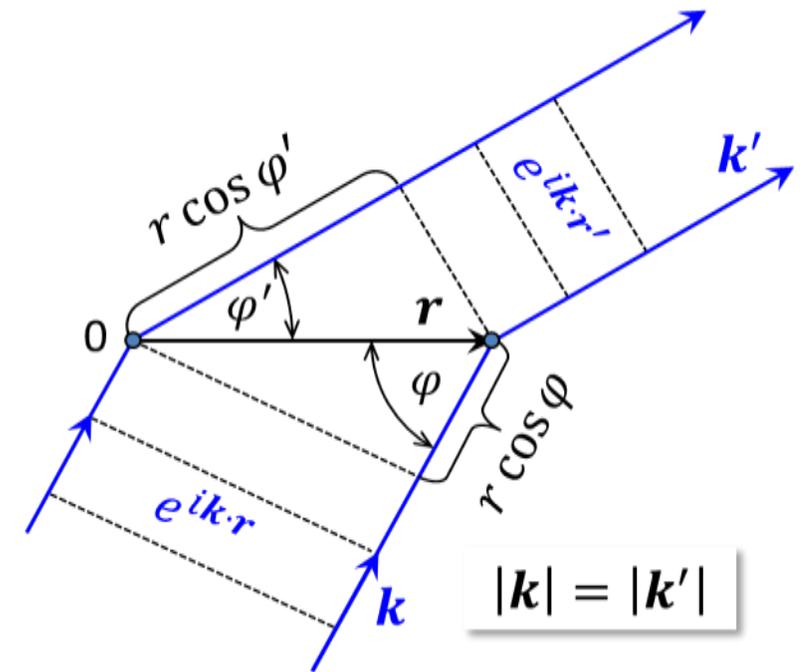
Einsetzen in Ausdruck für Gangunterschied liefert

$$(\hat{\mathbf{k}}' - \hat{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{r} = n \cdot \lambda \quad \text{bzw.} \quad (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r} = 2\pi \cdot n$$

dies ist äquivalent zu

$$\exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] = 1$$

da $\mathbf{r} = \mathbf{R}$, muss $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$ sein



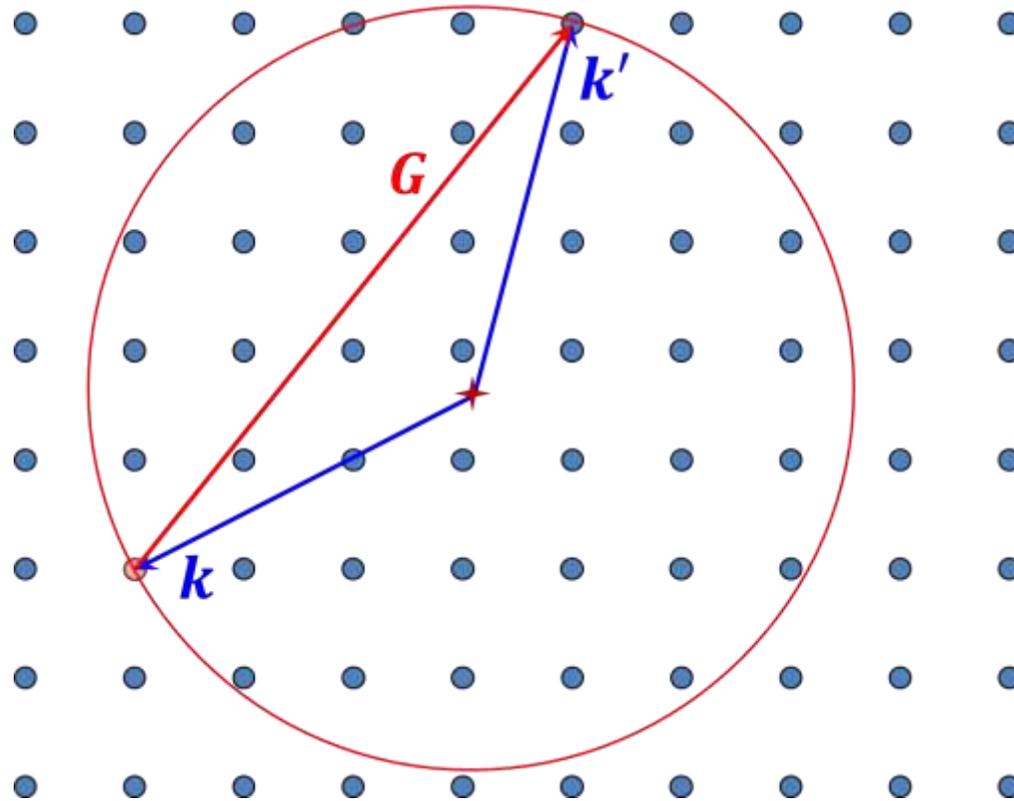
von Laue-Bedingung: $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$

der Satz \mathbf{G} der reziproken Gittervektoren bestimmt die möglichen Beugungsreflexe

Streuvektor $\Delta\mathbf{k}$ muss reziproker Gittervektor sein

2.2.2 von Laue Bedingung

- Grafische Veranschaulichung der von Laue-Bedingung mit Ewald-Konstruktion
 - elastische Streuung: $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$



elastische Streuung:
 $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$

von Laue -Bedingung:
 $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$

– \mathbf{k} von Gitterpunkt abtragen \rightarrow mögliche $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$ liegen auf **Kreis** um Anfangspunkt von \mathbf{k} mit Radius $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$

2.2.3 Bragg- vs. von Laue-Bedingung

$$2d \sin \theta = n \cdot \lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$$

– aus $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ folgt $|\mathbf{G}| = 2k \sin \theta$

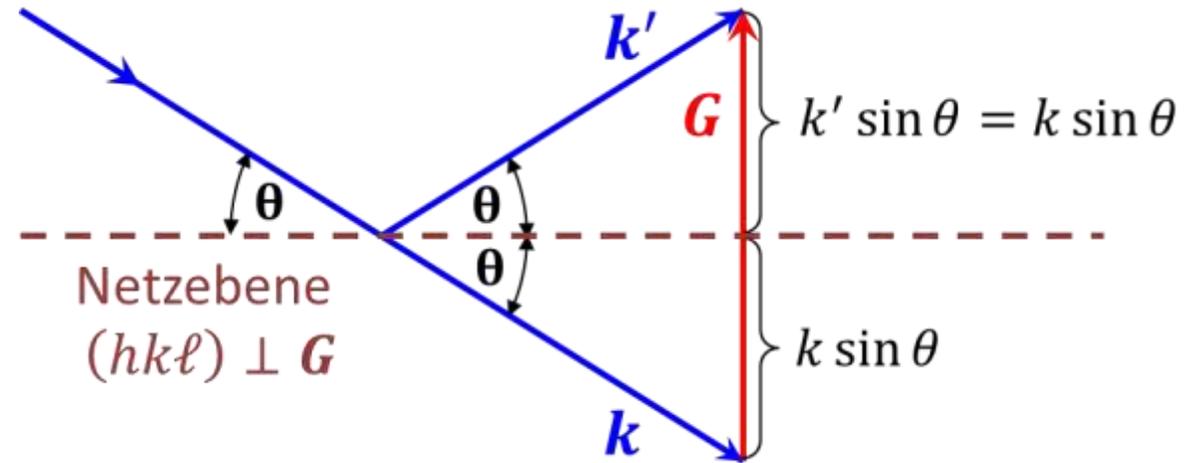
– es existiert \mathbf{G}_{\min} , so dass

$$|\mathbf{G}| = n \cdot |\mathbf{G}_{\min}| = n \cdot \frac{2\pi}{d}$$

– einsetzen ergibt

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

– mit $k = 2\pi/\lambda$ ergibt sich die Bragg-Bedingung



2.2.3 Geometrische Veranschaulichung der von Laue Bedingung

von Laue Bedingung: $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$ bzw. $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$

– Quadrieren ergibt

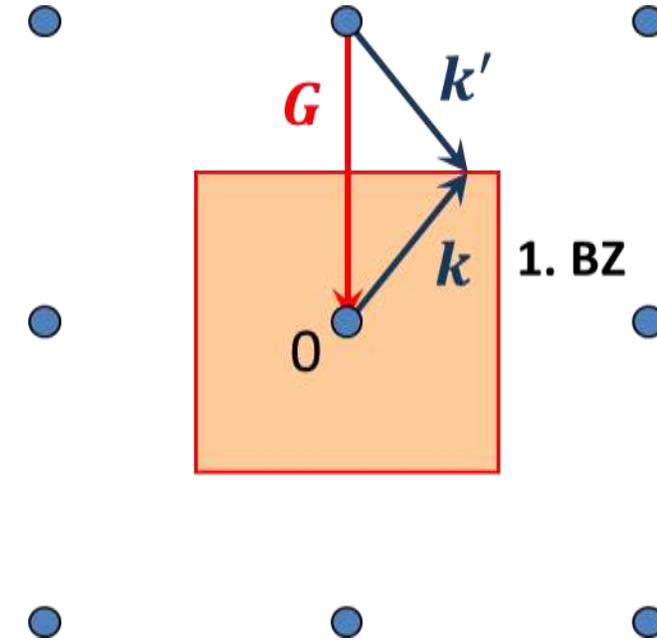
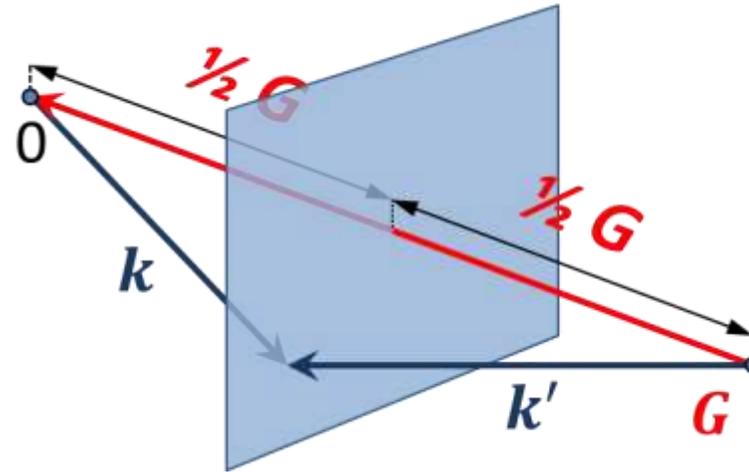
$$(\mathbf{k}')^2 = \mathbf{k}^2 + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + \mathbf{G}^2$$

– mit $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ folgt

$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + \mathbf{G}^2 = 0$$

– da auch $-\mathbf{G}$ ein reziproker Gittervektor ist, falls dies \mathbf{G} ist, folgt

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{G}} = \frac{G}{2}$$



Projektion von \mathbf{k} auf \mathbf{G} muss $G/2$ betragen:

- ist erfüllt für Mittelebenen zwischen 0 und allen Gitterpunkten \mathbf{G} → Bezeichnung **Bragg-Flächen**
- Mittelebenen bilden Rand der Brillouin-Zonen
- **jeder Wellenvektor vom Zentrum zum Rand einer Brillouin-Zone erfüllt die von Laue Bedingung**

• **reziprokes Gitter:**

- Raumgitter: $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$
- reziprokes Gitter (RG): $\mathbf{G} = h \mathbf{b}_1 + k \mathbf{b}_2 + \ell \mathbf{b}_3$
 $h, k, \ell = \text{ganzzahlig}$



$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n$$

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3$$

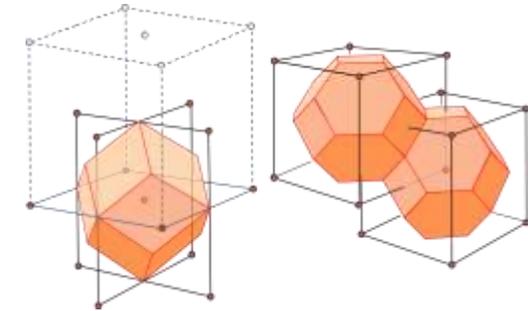
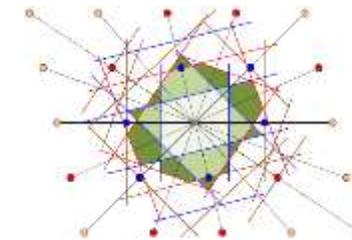
$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2$$

- $|\mathbf{G}_{\min}| = 2\pi/d$ $d = \text{Netzebenenabstand}$
- fcc-Raumgitter: RG = bcc-Gitter, bcc-Raumgitter: RG = fcc-Gitter

• **1. Brillouin-Zone:**

- die Wigner-Seitz-Zelle (WSZ) des reziproken Gitter heißt **1. Brillouin-Zone (1.BZ)**



- fcc-Raumgitter: RG = bcc-Gitter → 1. BZ = WSZ von bcc-Gitter
- bcc-Raumgitter: RG = fcc-Gitter → 1. BZ = WSZ von fcc-Gitter

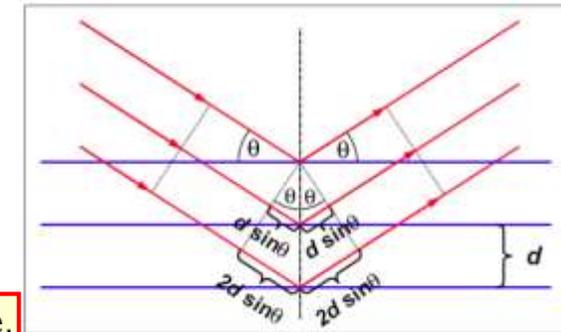
• **Beugung von Wellen an periodischen Strukturen:**

- Bragg-Bedingung: $2d \sin \theta = n \lambda$ $n = 1, 2, 3, \dots$

- von Laue-Bedingung: $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \Delta \mathbf{k} = \mathbf{G},$ $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{G}} = G/2$

↑ **Streuvektor $\Delta \mathbf{k}$**

Der Satz \mathbf{G} der reziproken Gittervektoren bestimmt die möglichen Beugungsreflexe.



- Bragg-Bedingung kann aus von Laue-Bedingung abgeleitet werden