

3.4.3 Zusammenfassung Kapitel 3.4

Die Bragg Bedingung spezifiziert, wo im Raum ein Reflex überhaupt auftreten *kann*; sie sagt nichts über die Intensität der dort möglichen Strahlung aus.

Die Intensität der Bragg-Reflexe werden durch die *Atome* des Kristalls bestimmt, d.h. der Basis des (für Bragg-Bedingung) betrachteten Gitters.

Eine allgemeine Betrachtung der von einem Körper in eine beliebige Richtung *elastisch* gestreuten Amplitude bei einem gegebenen einfallenden Wellenvektor \underline{k} liefert in mehreren elementaren Schritten eine einfache Formel für die Intensität der Reflexe bei Beugung einer ebenen monochromatischen Welle (charakterisiert durch \underline{k}) an einem Kristall.

1. Die in eine beliebige Richtung laufende an einem Volumenelement bei \underline{r} gestreute ebene Welle mit Wellenvektor \underline{k} Und $|\underline{k}| = |\underline{k}|$ unterscheidet sich (abgesehen von der Richtung) nur in Betrag und Phase von \underline{k} ; wir haben in der Wellengleichung einen Phasenfaktor $\exp [i \cdot \varphi(\underline{r})]$.

2. Die lokale *Streuamplitude* $F'_{loc}(\underline{r})$ wird weiterhin proportional zur Elektronendichte $\rho(\underline{r})$ am Aufpunkt \underline{r} sein; wir haben also

$$F'_{loc}(\underline{r}) = \text{const.} \cdot \rho(\underline{r}) \cdot \exp [i \cdot \varphi(\underline{r})] = \text{const.} \cdot F_{loc}(\underline{r})$$

3. Die Phase φ lässt sich aus der Geometrie des Aufpunktes bei \underline{r} einfach bestimmen; sie ist

$$\varphi(\underline{r}) = \underline{r} \cdot (\underline{k} - \underline{k})$$

4. Die gesamte *Streuamplitude* F erhält man durch Integration über alle Volumenelemente; im Integranden erscheint $\rho(\underline{r}) \cdot \exp i \underline{r} \cdot (\underline{k} - \underline{k})$.

5. Für Kristalle gilt immer die Bragg-Bedingung; der Integrand ist deshalb immer = Null außer für $\underline{k} - \underline{k} = \underline{G}$; wir haben

$$F = \int_V \rho(\underline{r}) \cdot \exp (i \cdot \underline{r} \cdot \underline{G}) \cdot dV$$

6. Die Integration über den gesamten Kristall ist identisch zur Integration über eine Elementarzelle mal Zahl der EZ, da jede EZ exakt denselben Beitrag liefert.. Wir betrachten also nur noch das Integral über die EZ; es heißt *Strukturamplitude* F_s .

7. Die Integration in der EZ wird näherungsweise ersetzt durch j Integrationen um die Umgebung (= Kugel in erster Näherung mit Volumen V') jedes der j Atome in Basis bei \underline{r}_j und eine Aufsummierung aller Teilintegrale. Wir erhalten

$$F_s = \sum_j \exp [i \cdot \underline{r}_j \cdot \underline{G}] \cdot \int_{V'} \rho(\underline{r}_j) \cdot \exp [i \cdot \underline{r}_j \cdot \underline{G}] \cdot dV'$$

8. Die Teilintegrale können für alle sinnvollen Kombinationen der **92** Atome und reziproker Gittervektoren durchgeführt und tabelliert werden; diese Werte heißen *Atomformfaktoren* f_j .

9. Damit ist die *Strukturamplitude* für eine gegebenen Kristall relativ leicht berechenbar. Das Gitter definiert die reziproken Gittervektoren die zu betrachten sind; die Atome in der Basis die Atomformfaktoren, und die Geometrie der Basis gibt die Ortsvektoren der Atome und erlaubt damit die Summation. Die Strukturamplitude ergibt sich zu

$$F_s = \sum_j f_j \cdot \exp [i \cdot \underline{r}_j \cdot \underline{G}]$$

Die Berechnung der Strukturfaktoren einfacher Kristalle ist jetzt einfach. Dabei stößt man auf eine letzte mögliche Verallgemeinerung; die *Auslöschungsregeln*

Die Intensität bestimmter Reflexe ist immer = Null; welche Reflexe das sind bestimmt die vom Bravais Gittertyp abhängige Auslöschungsregel. Wir haben z.B.

bcc **Keine** Intensität $h + k + l =$ ungerade Zahl
Gitter: falls: $+ l$ n_{ug}

fcc **Nur** Intensität falls: $h, k, l =$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{alle gerade} \\ \text{oder} \\ \text{alle} \\ \text{ungerade} \end{array} \right.$
Gitter: