

Röntgenbeugung:

Streuintensität: $I_{\text{nt}} \propto |F(hkl)|^2$

$$F(h, k, l) = \sum_j f_j e^{2\pi i (hx_j/a + ky_j/b + lz_j/c)}$$

bisher: Atome (x_j, y_j, z_j)

aber: besser kontinuierl. e^- -Dichteverteilung $\rho(xyz)$

$$F(hkl) = \int_0^a \int_0^b \int_0^c \rho(xyz) e^{2\pi i (hx/a + ky/b + lz/c)} dx dy dz$$

Gesamtkristall: Dim A, B, C

$$F(hkl) \propto \int_0^A \int_0^B \int_0^C \rho(xyz) e^{2\pi i (hx/a + ky/b + lz/c)} dx dy dz$$

$$F(hkl) \propto \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(xyz) e^{2\pi i (hx/a + ky/b + lz/c)} dx dy dz$$

$F(hkl) \longleftrightarrow \rho(xyz) : FT$

$$\rho(xyz) = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F(hkl) e^{-2\pi i (hx/a + ky/b + lz/c)}$$

$$I_{\text{nt}}(hkl) \propto |F(hkl)|^2$$

$$F(hkl) = A(hkl) + iB(hkl) = |F(hkl)| e^{i\phi}$$

$$\begin{aligned} I_{\text{nt}} \propto |F(hkl)|^2 &= [A(hkl) + iB(hkl)][A(hkl) - iB(hkl)] \\ &= [A(hkl)]^2 + [B(hkl)]^2 \end{aligned}$$

A, B werden nicht unabhängig bestimmt

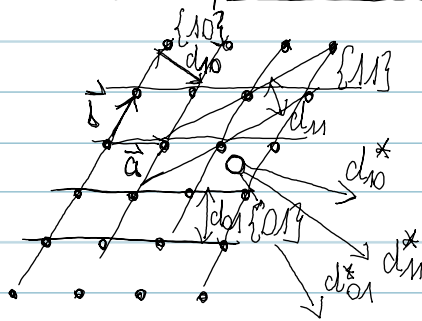
↳ "Phasenproblem"

Strukturmodell:
$$F(hkl) = \sum_j F_j e^{2\pi i (hx_j/a + ky_j/b + lz_j/c)}$$

Variation: min Δ zwischen Simulation + Experiment

↳ "Strukturverfeinerung"

2.6 Reziprokes Gitter



$$d_{hkl}^* \propto \frac{1}{d_{hkl}}$$

$$d_{hkl}^* = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$$\text{allg. } d_{hkl}^* = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

Jede Netzebenenschar wird durch einen Punkt beschrieben

↳ Gitter: Reziprokes Gitter

Gitterkonst.: $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$

Def.:

$$\begin{array}{lll} \vec{a} \vec{a}^* = 2\pi & \vec{a} \vec{b}^* = 0 & \vec{a} \vec{c}^* = 0 \\ \vec{b} \vec{a}^* = 0 & \vec{b} \vec{b}^* = 2\pi & \vec{b} \vec{c}^* = 0 \\ \vec{c} \vec{a}^* = 0 & \vec{c} \vec{b}^* = 0 & \vec{c} \vec{c}^* = 2\pi \end{array}$$

rez. Gittervektor:
$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

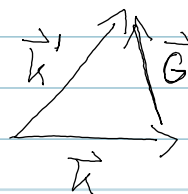
Röntgenbeugung: Rez. Raum (k-Raum)

$$\text{Wellenvektor } \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{s}$$

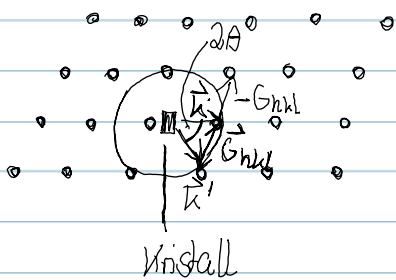
↑
Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung

elastisch: $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$

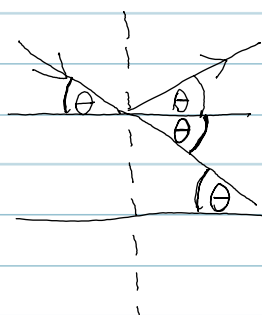
Richtungsänderung $\vec{k}' \neq \vec{k}$



$$\boxed{\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}_{hkl}}$$



rez. Gitter



$$\vec{k} + \vec{G}_{hkl} = \vec{k}'$$

$$(\vec{k} + \vec{G}_{hkl})^2 = (\vec{k}')^2 = k'^2 = k^2$$

$$k^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{G}_{hkl} + G_{hkl}^2 = k^2$$

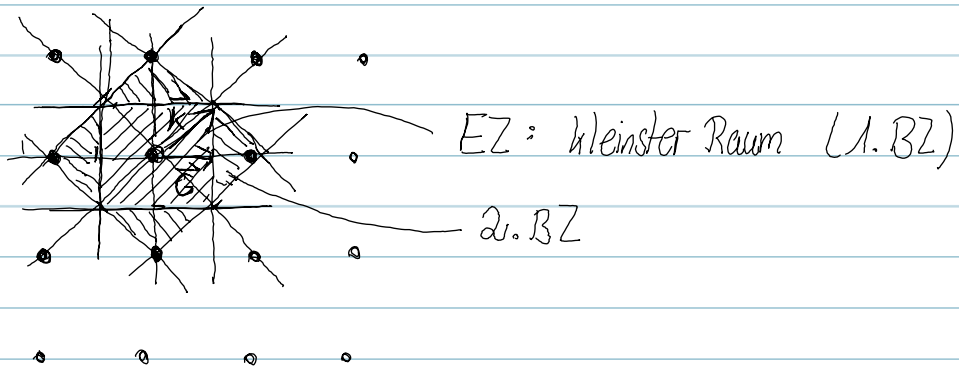
$$2\vec{k} \cdot \vec{G}_{hkl} = G_{hkl}^2 \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} -\vec{G}_{hkl} = \vec{G}_{hkl}$$

$$2k G_{hkl} \sin \theta = G_{hkl}^2$$

$$2 \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta = G_{hkl} = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

EZ (Physik): Wigner-Seitz-Zelle



2.8 Defektreiche und nicht-kristalline FK

- Punktdefekte: Reflexe + diff. Streuung
gemittelte Info über EZ

↳ Defekte können nicht sichtbar gemacht werden (EM)

- Partikel: Für sehr kleine Partikel Verbreiterung von Linien (< 50 nm)

Scherrer-Gleichung:
$$t = \frac{0,94 \lambda \rightarrow \text{Wellenlänge}}{B \cdot \cos \theta}$$

↑ Partikelgröße ↙ Halbwertsbreite