

2.5 Röntgenbeugung

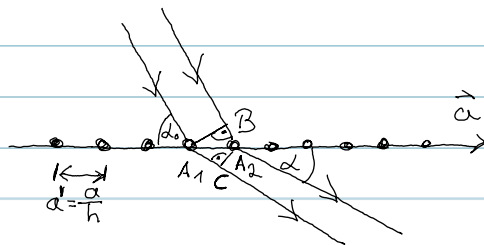
25.04.12

↳ Kristallstruktur

z.B. Einkristall → Beugungsmuster

Reflexe unterschiedlicher Intensität

Position und Intensität hängen von Abstand zu Netzebenen ab, wie?



α_0 : Einfallswinkel

α : Beugungswinkel

$$\Delta = \overline{A_1C} - \overline{A_2B}$$

$$= a'(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = n\lambda$$

für $a' = \frac{a}{h}$:

$$\frac{a}{h}(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = n\lambda$$

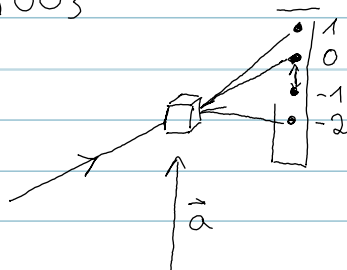
$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = n\lambda h$$

$$n=1: \quad b(\cos \beta - \cos \beta_0) = \lambda R$$

$$c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = \lambda L$$

} von Laue-Gleichungen

Bsp.: primitive kubische EZ, Beugungsmuster?
 $\{h00\}$



↳ $a \cos \alpha = \lambda h$

$R=L=0: \beta=\beta_0; \gamma=\gamma_0$

für $h=0: a \cos \alpha = 0$

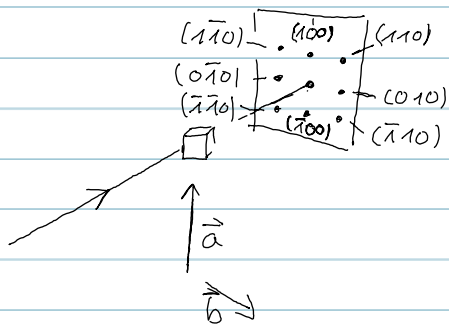
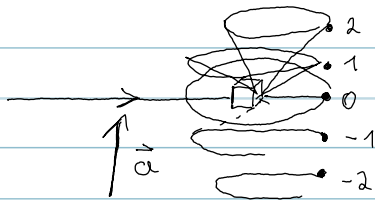
$h=1: a \cos \alpha = \lambda$

$h=2: a \cos \alpha = 2\lambda$

⋮

⋮

{hkl}



Bragg: Beugung als Reflektion

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

Θ : Einfallswinkel u. Reflektionswinkel

$n = 1, 2, 3, \dots$ (Ordnung)

z.B.: kubische EZ

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

$$\sin^2 \Theta = \frac{n^2 \lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$$

→ Ansätze von Bragg u. von Laue sind äquivalent (siehe ÜB 3.)

Streuintensität

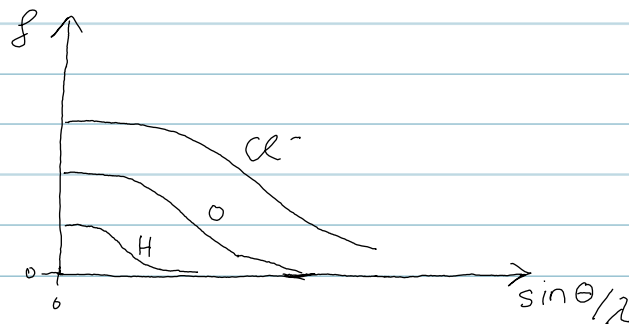
Röntgenstrahlen werden von e^- im Kristall gestreut
 Streueffizienz hängt ab von Anzahl e^- und Größe A_0

Streufaktor: $f = 4\pi \int_0^\infty \rho(r) \frac{\sin(\beta r)}{\beta r} r^2 dr$

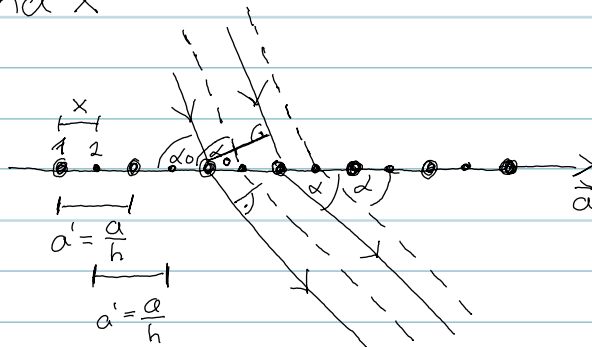
$\rho(r)$ = sphärisch symmetrische e^- -Dichte

$$\beta = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \Theta \quad (\Theta = \text{Streuwinkel})$$

$\frac{\sin(\beta r)}{\beta r}$ beschreibt Interferenz gestreuter Strahlen



Atom 1 und 2
 Abstand x



Weglängendifferenz: $\Delta_{11} = \Delta_{22} = \frac{a}{h} (\cos \alpha - \cos \alpha_0) = \lambda \quad (n=1)$
 $\Delta_{12} = x (\cos \alpha - \cos \alpha_0)$
 $= x \frac{2h}{a}$

Phasendifferenz: $\phi = 2\pi \frac{\Delta_{12}}{\lambda} = 2\pi \frac{xh}{a}$

Amplitude A : $A = f_1 \exp(i\omega t) + f_2 \exp[i(\omega t + \phi)]$

Intensität I : $I \propto A^2 = [f_1 \exp(i\omega t) + f_2 \exp(i\omega t + \phi)] [f_1 \exp$

$$\begin{aligned} \text{Intensität } I: I \propto |A|^2 &= [f_1 \exp(i\omega t) + f_2 \exp(i(\omega t + \phi))] [f_1 \exp(-i\omega t) + f_2 \exp(-i(\omega t + \phi))] \\ &= f_1^2 + f_1 f_2 \exp(i\phi) + f_1 f_2 \exp(-i\phi) + f_2^2 \\ &= f_1^2 + f_2^2 + 2f_1 f_2 \cos \phi \quad \neq f(\omega) \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow \text{Strukturfaktor } F(h) = f_1 + f_2 \exp(i\phi) = f_1 + f_2 \exp\left(2\pi i \frac{hx}{a}\right)$$

allg.: Atom j (x_j, y_j, z_j)

$$\begin{aligned} \hookrightarrow \text{Strukturfaktor } F(hkl) &= \sum_j f_j \exp\left[2\pi i \left(\frac{hx_j}{a} + \frac{ky_j}{b} + \frac{lz_j}{c}\right)\right] \\ &= \sum_j f_j \exp\left[2\pi i (hx_j' + ky_j' + lz_j')\right] \end{aligned}$$

$$\text{mit } x_j' = \frac{x_j}{a} \text{ etc.}$$

$$\text{Intensität } I \propto |F(hkl)|^2$$

Bsp.: Strukturfaktor NaCl?

Koordinaten Kationen: $(0,0,0); (1,0,0); (0,1,0); (1,1,0);$
 $(1,0,1); (0,1,1); (1,1,1); (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0);$
 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}); (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}); (1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2});$
 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1)$

Koordinaten Anionen: $(\frac{1}{2}, 0, 0); (0, \frac{1}{2}, 0); (0, 0, \frac{1}{2}); (1, \frac{1}{2}, 0);$
 $(\frac{1}{2}, 1, 0); (1, 0, \frac{1}{2}); (0, 1, \frac{1}{2}); (1, 1, \frac{1}{2});$
 $(\frac{1}{2}, 0, 1); (0, \frac{1}{2}, 1); (1, \frac{1}{2}, 1); (\frac{1}{2}, 1, 1);$
 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

$$\begin{aligned} F(hkl) &= \frac{1}{8} f_+ \left[1^0 + 1^h + 1^k + 1^l + 1^{h+k} + 1^{k+l} + 1^{h+l} + 1^{h+k+l} \right] \\ &+ \frac{1}{2} f_+ \left[(-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l} + (-1)^{2h+k+l} + (-1)^{h+2k+l} + (-1)^{h+k+2l} \right] \\ &+ \frac{1}{4} f_- \left[(-1)^h + (-1)^k + (-1)^l + (-1)^{2h+k} + (-1)^{h+2k} + (-1)^{2k+l} + (-1)^{2h+l} \right. \\ &\quad \left. + (-1)^{k+2l} + (-1)^{h+2l} + (-1)^{2h+2k+l} + (-1)^{2h+k+2l} + (-1)^{h+2k+2l} \right] \\ &+ f_- \left[(-1)^{h+k+l} \right] \end{aligned}$$

alle h, k, l gerade:

$$F(hkl) = \frac{1}{8}f_+ \cdot 8 + \frac{1}{2}f_+ \cdot 8 + \frac{1}{4}f_- \cdot 12 + f_- \cdot 1 = f_+[1+3] + f_-[3+1] \\ = 4[f_+ + f_-]$$

alle h, k, l ungerade:

$$F(hkl) = f_+[1+3] + f_-[-3-1] = 4[f_+ - f_-]$$

vgl. KCl: K^+ und Cl^- isoelektronisch

$$\hookrightarrow f_+ \approx f_-$$

$\hookrightarrow F(hkl) \approx 0$ für h, k, l ungerade