

Strukturfaktor  $F(hk\ell)$

$$F(hk\ell) = \sum_j f_j \exp(2\pi i (h \frac{x_j}{a} + k \frac{y_j}{b} + \ell \frac{z_j}{c}))$$

bisher: Kristall besteht aus Atomen  $(x_j, y_j, z_j)$

aber: EZ besitzt eine  $e^-$ -Dichteverteilung  $\rho(x, y, z)$

$$F(hk\ell) = \int_0^a \int_0^b \int_0^c \rho(x, y, z) \exp[2\pi i (h \frac{x}{a} + k \frac{y}{b} + \ell \frac{z}{c})] dx dy dz$$

gesamter Kristall: Dim.  $A, B, C$

$$F(hk\ell) \propto \int_0^A \int_0^B \int_0^C \rho(x, y, z) \dots$$

$$F(hk\ell) \propto \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, y, z) \exp[2\pi i (h \frac{x}{a} + k \frac{y}{b} + \ell \frac{z}{c})] dx dy dz$$

$\hookrightarrow F(hk\ell) \leftrightarrow \rho(x, y, z)$ : Fouriertransformation

$$\rho(x, y, z) = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} F(hk\ell) \exp[-2\pi i (h \frac{x}{a} + k \frac{y}{b} + \ell \frac{z}{c})]$$

$$P(r) \propto |F(hk\ell)|^2$$

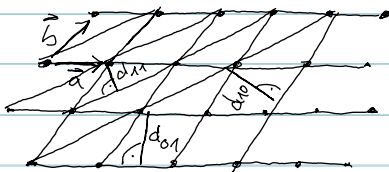
exp.:  $I \propto |F(hk\ell)|^2$

$$F(hk\ell) = A(hk\ell) + iB(hk\ell)$$

$$I \propto |F(hk\ell)|^2 = [A(hk\ell) + iB(hk\ell)][A(hk\ell) - iB(hk\ell)] = [A(hk\ell)]^2 + [B(hk\ell)]^2$$

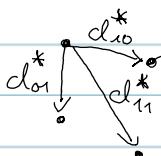
$\rightarrow$  Phasenproblem

## 2.6 Reziprokes Gitter



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

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



Ursprung: Position beliebig

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

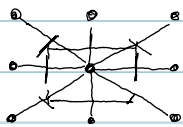
jede Netzebenenschar verursacht Punkt  
neue Gitterpunkte = reziprokes Gitter

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

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

Def:

$\vec{a}\vec{a}^* = 2\pi$	$\vec{a}\vec{b}^* = 0$	$\vec{a}\vec{c}^* = 0$
$\vec{b}\vec{a}^* = 0$	$\vec{b}\vec{b}^* = 2\pi$	$\vec{b}\vec{c}^* = 0$
$\vec{c}\vec{a}^* = 0$	$\vec{c}\vec{b}^* = 0$	$\vec{c}\vec{c}^* = 2\pi$



Wigner-Seitz-Zelle  
(1. Brillouin-Zone)

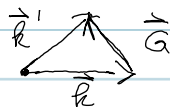
Röntgenbeugung: Reziproker Raum (k-Raum, Vektorraum)

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

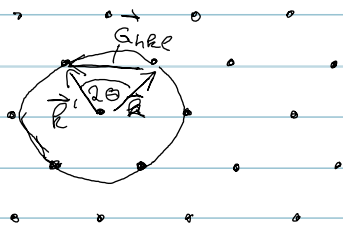
$\vec{i}$ : Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung

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

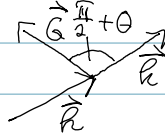
$\Leftrightarrow \boxed{\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}}$



Beugungsbed.: Ewald'sche Darstellung



Reziprokes Gitter



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

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

$\boxed{2\vec{k}\vec{G}_{hkl} + G_{hkl}^2 = 0}$

$G_{hkl} = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \quad (\rightarrow \text{siehe ÜB 4})$


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

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

Bragg'sches Gesetz



## 2.8. Defektreiche und nicht-kristalline Festkörper

- Kristall besitzt Punktdefekte: Reflexe + diffuse Streuung  
↳ Strukturanalyse: Durchschnitts-EZ  
aber keine Information über Position der Defekte  
( $\Rightarrow$  EM)
- Amorphe Festkörper: nur diffuse Streuung  
↳ Streuintensität  $\leftrightarrow$  Radialverteilung  
$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} I(k) \sin kr \, dk$$
  
Bsp.: amorphes  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{MoS}_3$
- Partikelgröße: ~~Verblei~~ Verbreiterung der Reflexe für sehr kleine Partikel (<50nm)  
Scherren: Partikelgröße (besser Kristallitgröße!)   
$$t = \frac{0,94\lambda}{B \cos \theta}$$
  
t: Partikelgröße  
B: FWHM (in  $2\theta$ )  
 $\theta_B$ : Braggwinkel