

# I. Grundlagen der Streumethoden in der Festkörperphysik

## I.2 Prinzipielles

-man streut praktisch alle denkbaren Teilchen

Röntgen, Licht,

Elektronen,

Neutronen,

Protonen,

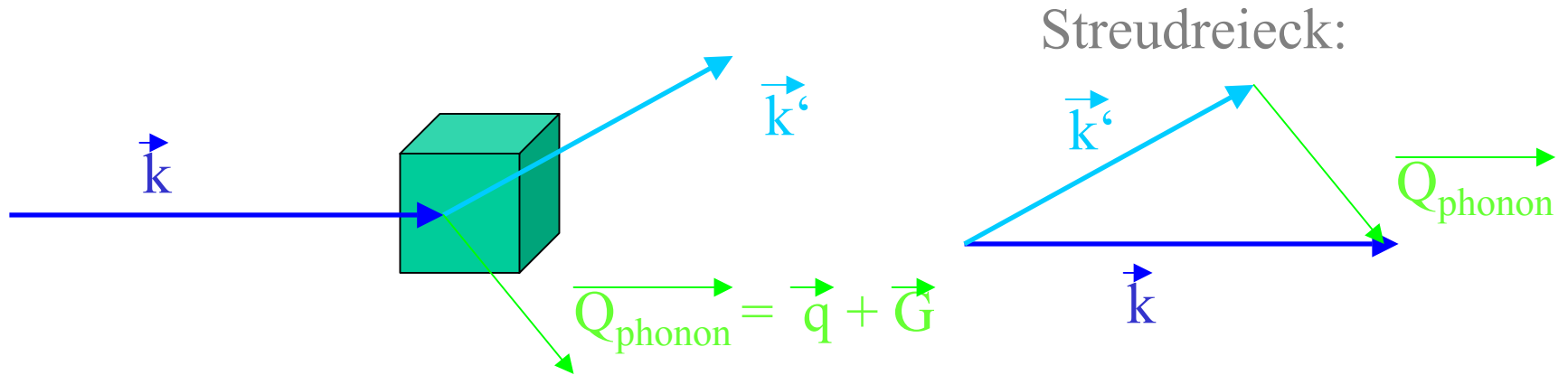
He-Kerne,

...

-unterschiedliche Wechselwirkung

→ unterschiedliche Aussage

# Wechselwirkung und Streugesetze



Impuls:  $\vec{Q} = \vec{k} - \vec{k}'$

$$E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m}$$

Energie:  $E = E' + E_{\text{Phonon}}$

$$E_{\text{Phonon}} = \hbar \cdot \omega = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot (k^2 - k'^2)$$

Spin : Gesamt - Spin vorher und nachher

# Streuung an einem Phonon

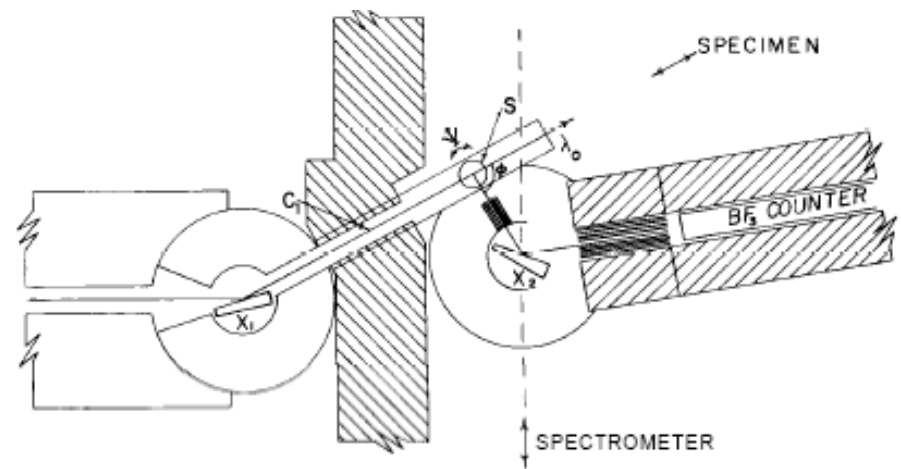
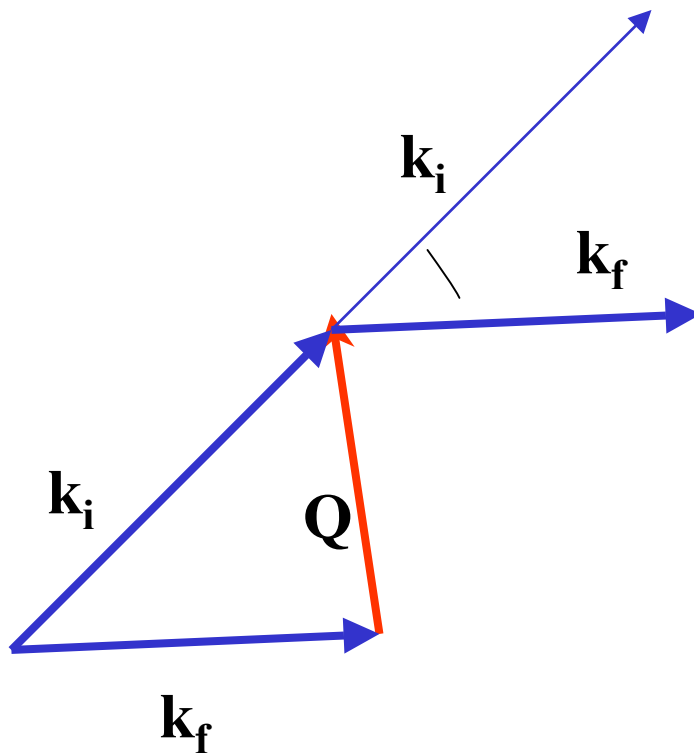
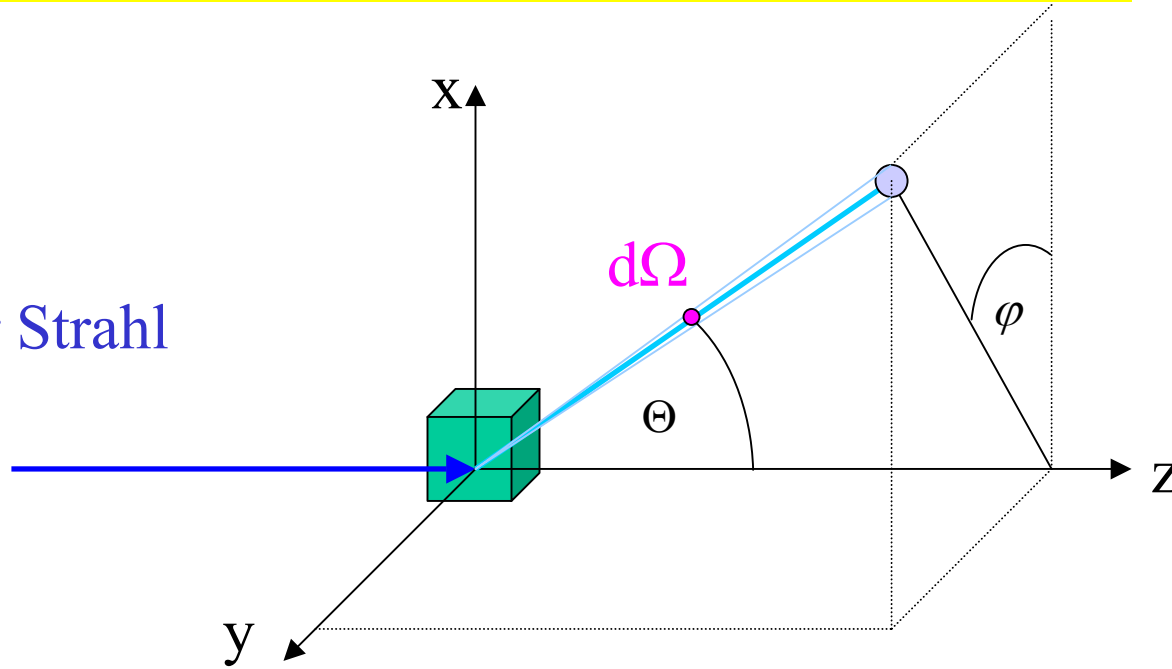


Fig. 3: The first crude version of the triple-axis crystal spectrometer [24 - 26]. Monoenergetic neutrons are selected by the large single crystal monochromator (X1) and impinge on the specimen (S), which is located on a table whose orientation ( $\psi$ ) in the horizontal plane can be selected. This table can be moved along the direction of the incident beam as desired. The analyzing spectrometer, which employs crystal X2, is a diffractometer (of especially large aperture) which can be translated as a unit; the angle ( $\theta$ ) through which the examined neutrons are scattered is determined by triangulation.

# Differentieller Streuquerschnitt

einfallender Strahl



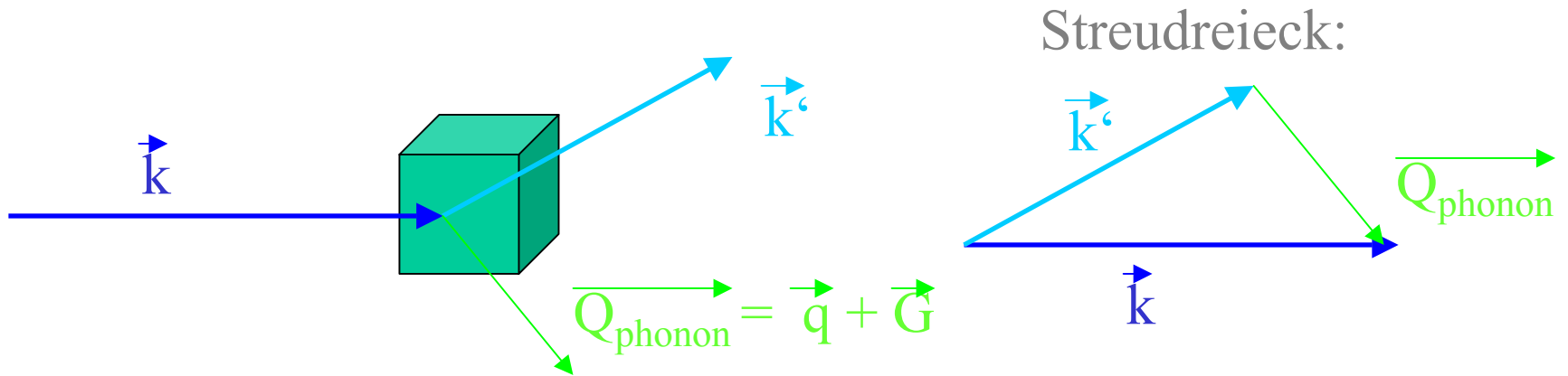
**Intensität=**

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Fluss gestreuter Neutronen in } (\Omega, d\Omega)}{\text{Fluss einfallender Neutronen}}$$

**Differentieller=**  
**Streuquerschnitt**

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{\text{Fluss gestreuter Neutronen in } (\Omega, d\Omega) \text{ mit Energie } \in [E', E'+dE']}{\text{Fluss einfallender Neutronen}}$$

$$\sigma = \int \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega$$



$$E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m}$$

$$E_{\text{Phonon}} = \hbar \cdot \omega = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot (k^2 - k'^2)$$

Anzahl der Teilchen, die mit Energieübertrag  $E$  in  
Raumwinkel  $d\Omega$  gestreut werden :

a) elastisch  $E=0$  (Beugung = **diffraction**)

b) inelastisch  $E$  ungleich 0

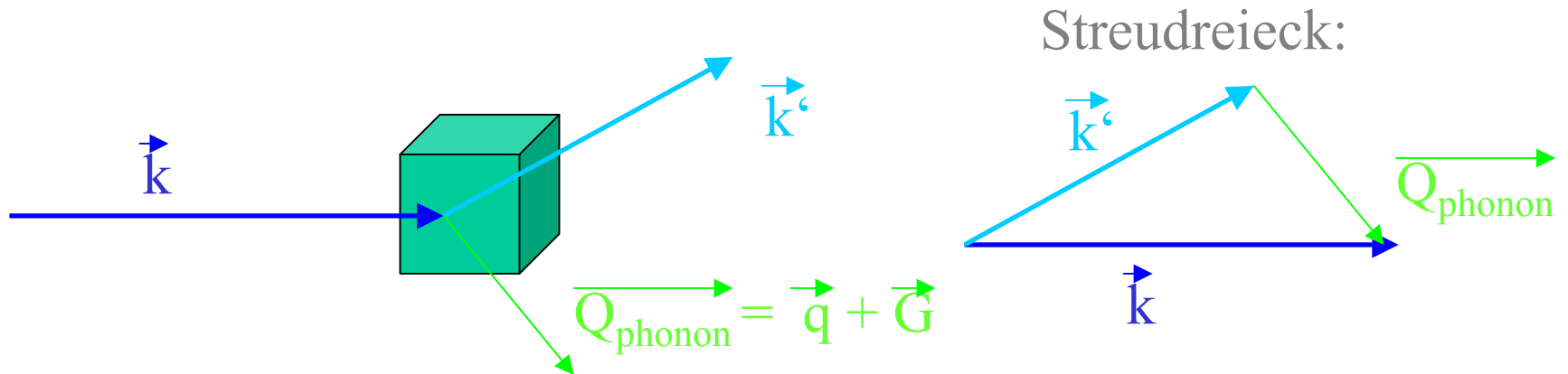
a)+b)= **scattering**

a) → Statik (Struktur) ⇔ BEUGUNG

b) → Dynamik (Anregungen, Phononen, Magnonen, Kristallfelder, ..)  
im Festkörper : z.B. kollektive Anregungen

Festkörper sind meist periodische Gebilde : Translationssymmetrie

**Symmetrie → Begrenzung der Beugungs- und der Streubilder**



$\mathbf{k}=\mathbf{k}'+\mathbf{Q}$  Kristallimpuls und Energieerhaltung  $E=E'+E_{\text{anregung}}$  (alternative Indizes i,f)

## Streudreieck !

die beobachtete Intensität kann man nur als Funktion von  $\mathbf{Q}$  und  $E$  darstellen :  
Streufunction

$$S(\mathbf{Q}, E) := \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE}$$

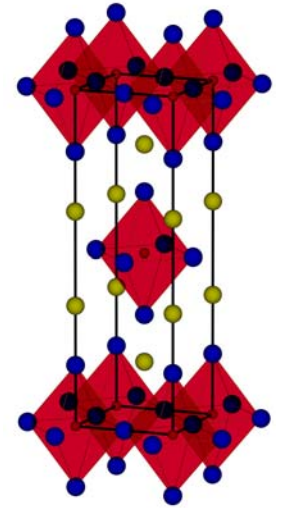
elastisch  $S(\mathbf{Q}, E=0) =: S(\mathbf{Q}) \Leftrightarrow$  **BEUGUNG**

Kristallgitter :  $S(\mathbf{Q})$  ungleich 0 nur falls  $\mathbf{Q}$  reziproker Gittervektor

Strukturbestimmung : Messung von  $S(\mathbf{Q})$  für möglichst viele  $\mathbf{Q} \rightarrow$  Berechnung der Kristallstruktur

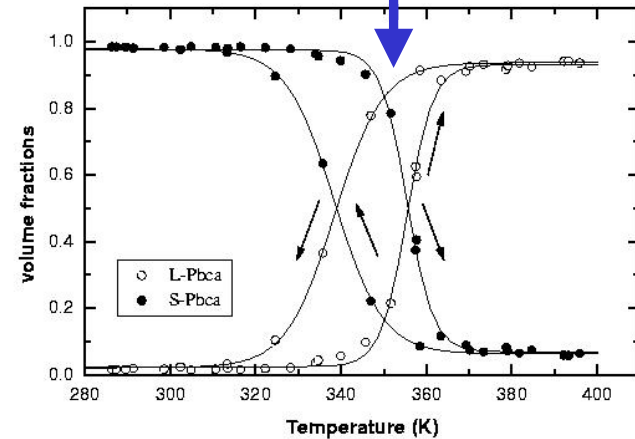
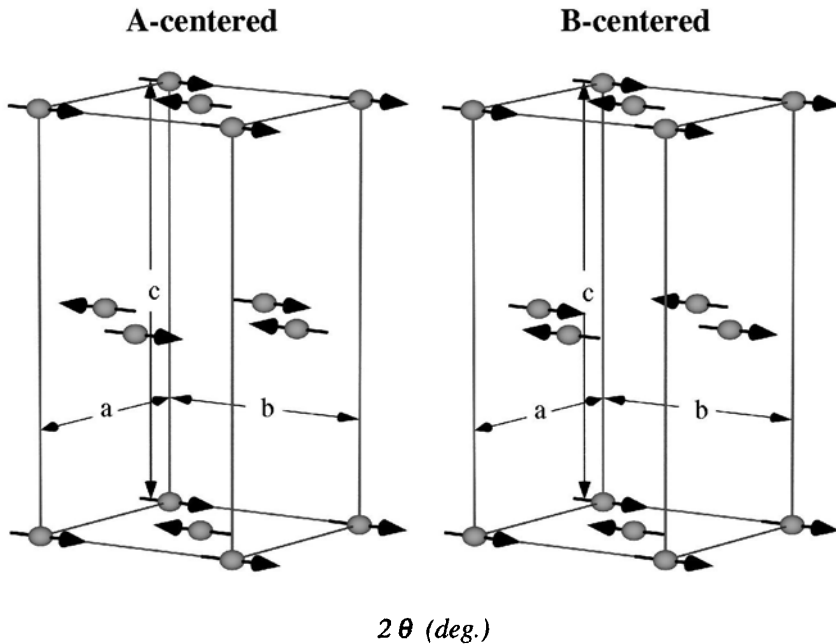
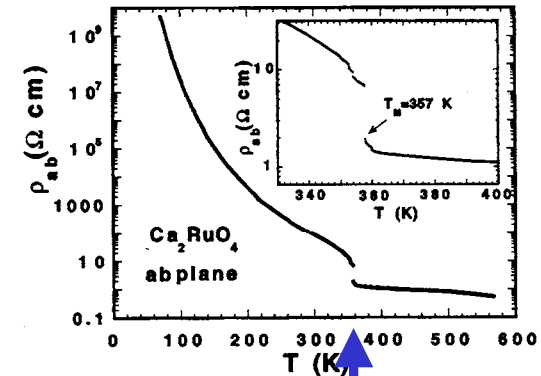
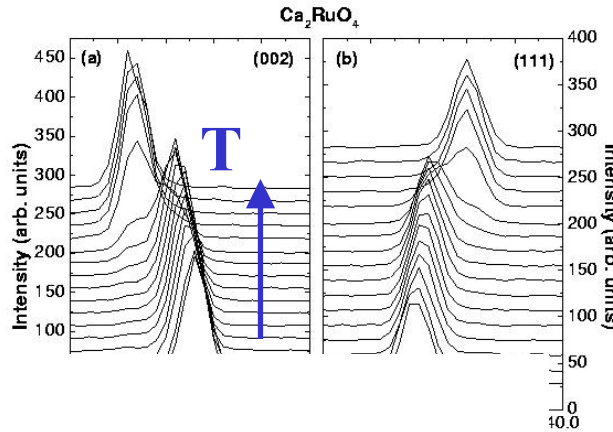
- Beugung von Röntgen, Neutronen oder Elektronen → Kristallstruktur
- Beugung von Neutronen ( $S=0.5$ ) → Magnetische Struktur

Beispiel aus aktueller Forschung : Ruthenate



# Metal-Insulator-Übergang in $\text{Ca}_2\text{RuO}_4$

Nakatsuji et al., PRB 2001  
Alexander et al., PRB 2000



symmetry in metallic AND in insulating phases  
Pbca : one-c tilt plus one-c rotation



- Beugung von Röntgen, Neutronen oder Elektronen → Kristallstruktur
- Beugung von Neutronen ( $S=0.5$ ) → Magnetische Struktur

Beispiel aus aktueller Forschung : Ruthenate

Merke : perfekte Translationsordnung  $\Leftrightarrow$  scharfe Bragg-Peaks

$S(Q)$  ungleich 0 nur für  $Q$  reziproker Gittervektor

$$S(Q) = \delta(Q - G)$$

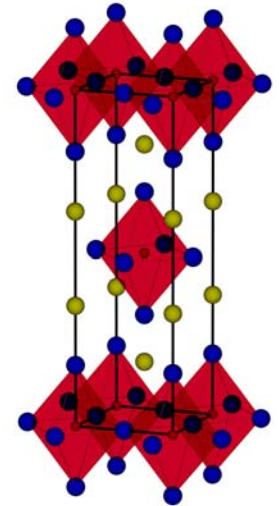
Wieso ? Fourier-Transformation ist dann  $\delta$ -Funktion !

Ordnung nur kurzreichweitig  $\Leftrightarrow$  verbreiterte „Bragg“-Peaks

$\Leftrightarrow$  diffuse Streuung

Ordnung zerfällt mit  $\exp(-r/\lambda) \cdot 1/r \Leftrightarrow S(Q)$  ist Lorentz-Peak

(in beiden Fällen beobachtet man eine Faltung mit der Auflösung)



amorphe Festkörper  $\Rightarrow S(Q)$  ist kontinuierlich aber immer noch moduliert

Flüssigkeiten und Gase  $\Rightarrow$  Messung von  $S(Q)$  bestimmt den strukturellen Aufbau

(Molekülstruktur, und Anordnung der Moleküle zueinander)

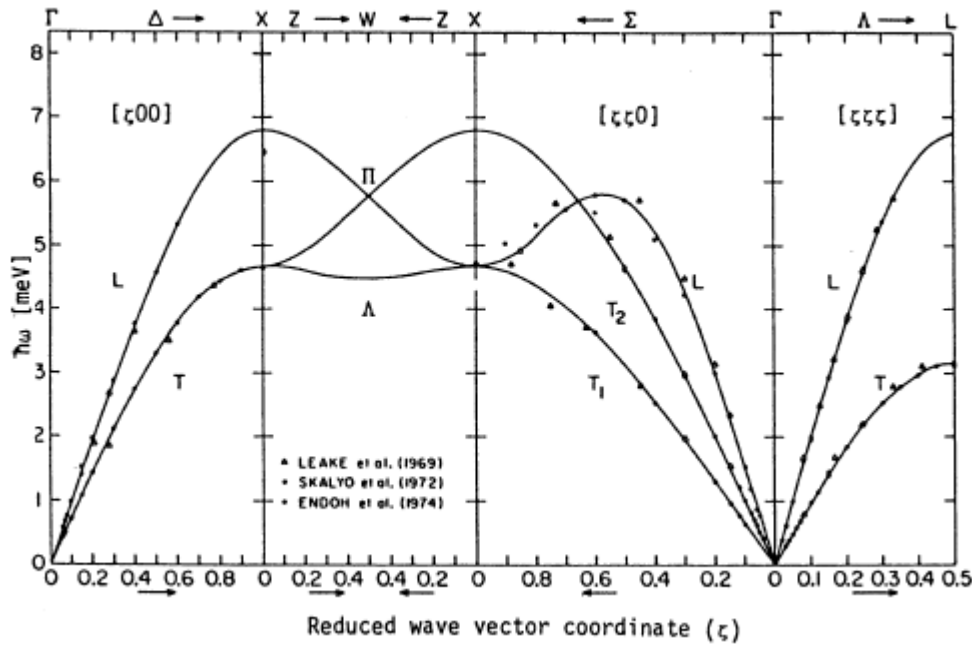
$S(Q)$  ergibt die Paar-Verteilungsfunktion

Merke : hohe Symmetrie  $\Leftrightarrow$  Reduzierung der Streuung auf wenige Bragg-Peaks

(mit hoher Intensität !)

Übertragung auf die inelastische Streuung :  $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{Q}$  Kristallimpuls und Energieerhaltung  $E = E' + E_{\text{anregung}}$

Wie sieht das Streu-Bild aus ?



# Neon Phononendispersion

Anregungen gibt es zu jedem (erlaubtem)  $q \rightarrow$  keine Peaks im Q-Raum !  
 ABER : spezielle Symmetrie  $\Rightarrow$  zu jedem Q gibt es z.B. im Falle der Phononen nur bestimmte E  
 **$\rightarrow$  Dispersionsfläche z.B. der Phononen**

Scan-Richtung erzeugt einen Peak :  $S(Q=\text{const.}, E)$  ungleich 0 bei  $E=E_{\text{phonon}}(Q)$   
 wieder : spezielle Symmetrie  $\Leftrightarrow$  Einschränkung von  $S(Q, E)$

- Gibt es ein Analogon zur diffusen elastischen Streuung ? **JA**
- falls Lebensdauer der Anregungen endlich  $\Rightarrow$  Peaks in E werden breit
- falls örtliche Ausdehnung nicht unendlich  $\Rightarrow$  Peaks in Q werden breit
- z.B. lokale Schwingung  $\Rightarrow$  flache Mode ohne Struktur in Q

-Allgemein : Wenn Anregungen nicht durch ein diskretes Spektrum beschrieben werden :  
 $S(Q, E)$  misst eine **Korrelationsfunktion**

# I.2. Symmetrie von periodischen Kristallstrukturen

## I.2.1 Die sieben Kristallsysteme und Bravaisgitter

- Kristallperiodizität ist nur mit bestimmten Drehachsen kompatibel :

Drehachse  $n=1,2,3,4,6$

eine solche Klasse  $\rightarrow$  Bedingungen an  $a,b,c,\alpha,\beta,\gamma \rightarrow$  Gruppierung der Symmetrie-Klassen gleicher Art

Triklin : 1,  $\bar{1}$  keine Beschränkung

Monoklin : 2, m, 2/m für monokline Achse **b**  $\rightarrow \alpha=\gamma=90^\circ$

orthorhombisch analog alle Winkel gleich  $90^\circ$

tetragonal zusätzlich  $a=b$

rhomboedrisch  $a=b=c$ , alle Winkel gleich von  $90^\circ$  verschieden

hexagonal  $\gamma=120^\circ$

kubisch wie tetragonal plus  $a=b=c$



dies sind die 7 Kristall-Systeme entsprechend den **primitiven** Gittern

zusätzlich **nicht primitive** Gitter (nicht alle Translationen sind durch das Gitter gegeben)

Auguste Bravais (1850)  $\rightarrow$  14 Bravais-Gitter

Beispiel : tetragonal innenzentriert :

Warum gibt es nur 14 Bravais-Gitter ?

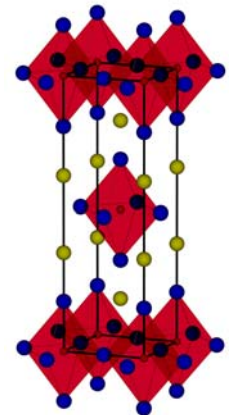
tetragonal F-zentriert nichts neues, sondern entspricht

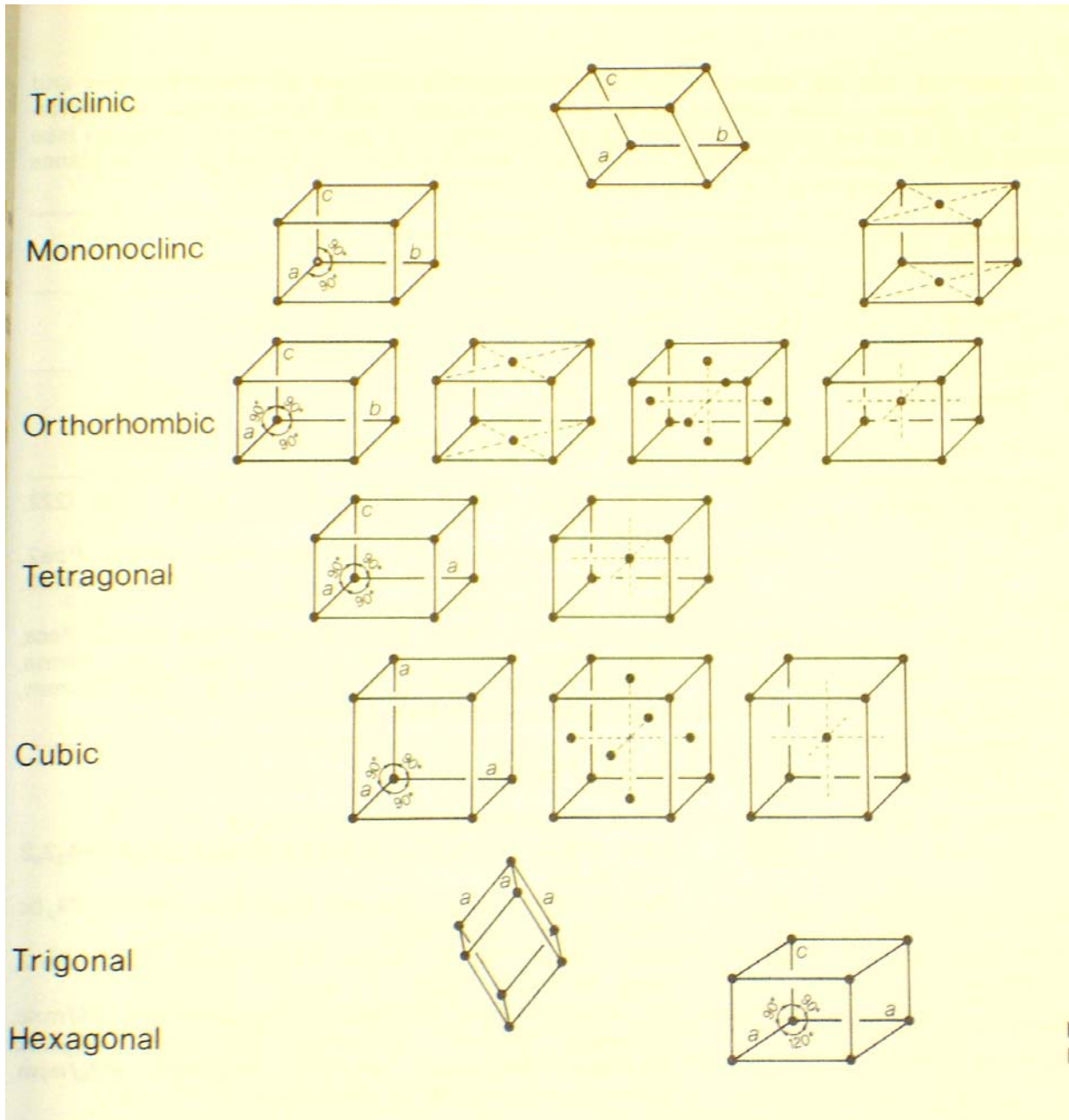
tetragonal innenzentriert :

mit  $a/\sqrt{2}, a/\sqrt{2}, c$

tetragonal A-zentriert? : Nur A geht nicht, da tetragonal, A und B Zentrierung

ergibt aber F-Zentrierung





Zentrierung

**P**- primitiv

**I** innen (body)

(0.5,0.5,0.5)

**F** Flächen (face)

(0.5,0.5,0)

(0.5,0,0.5)

(0,0.5,0.5)

**A,B,C**

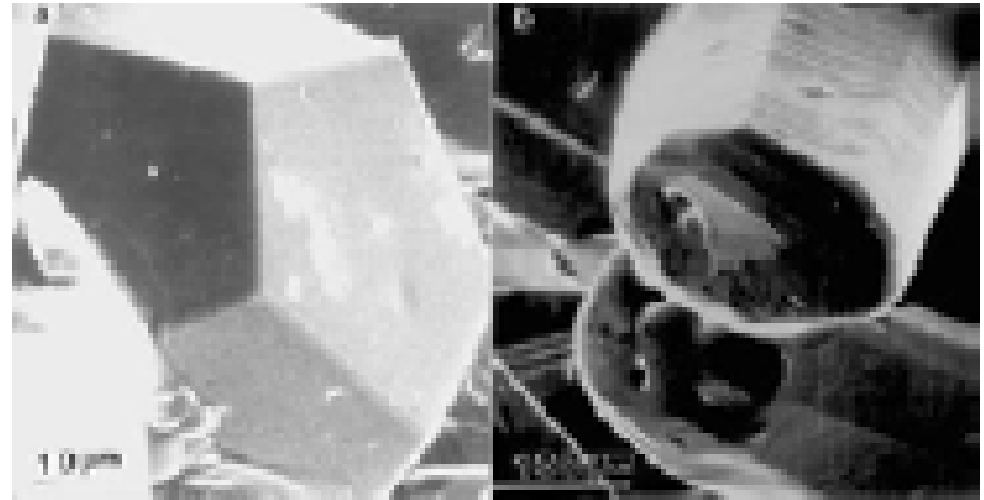
bei der entsprechenden

Fläche **A** (0,0.5,0.5)

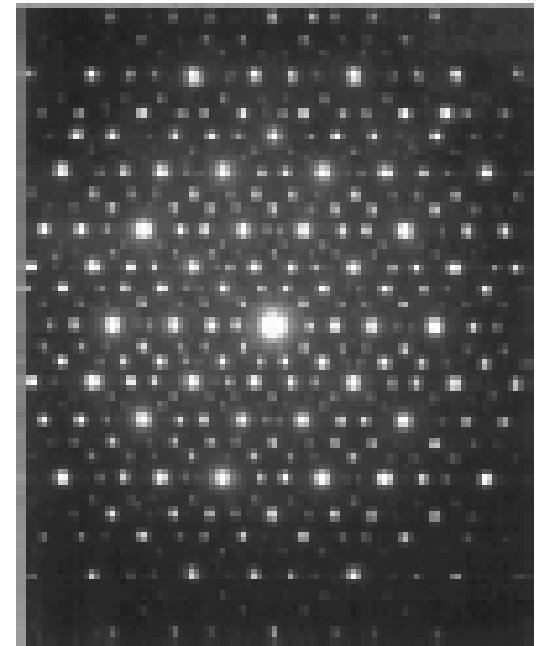
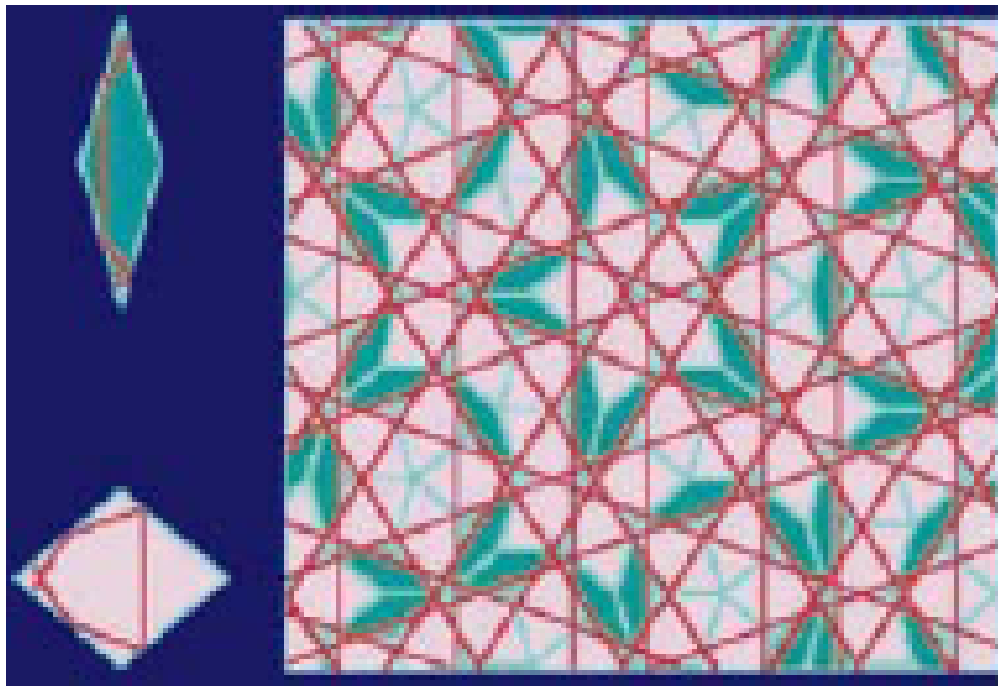
Erlaubte  
Symmetrieachsen:

1, 2, 3, 4, 6

NICHT 5, > 6



Quasikristall: *AlFeCu*



# I.2.2 Raumgruppen

Raumgruppe := Set der geometrischen Symmetrie-Operationen, die ein drei-dimensionales periodisches Objekt in sich überführen.

Fedorov (1890); Schoenflies (1891) : 230 Raumgruppen

32 Punktgruppen : Gruppen von Operationen die einen Punkt unverändert lassen (Hessel 1830):  
Drehungen und Inversionen

Systeme mit gleicher Punktgruppe entsprechen einer Kristall-Klasse (wichtig für Tensoreigenschaften)

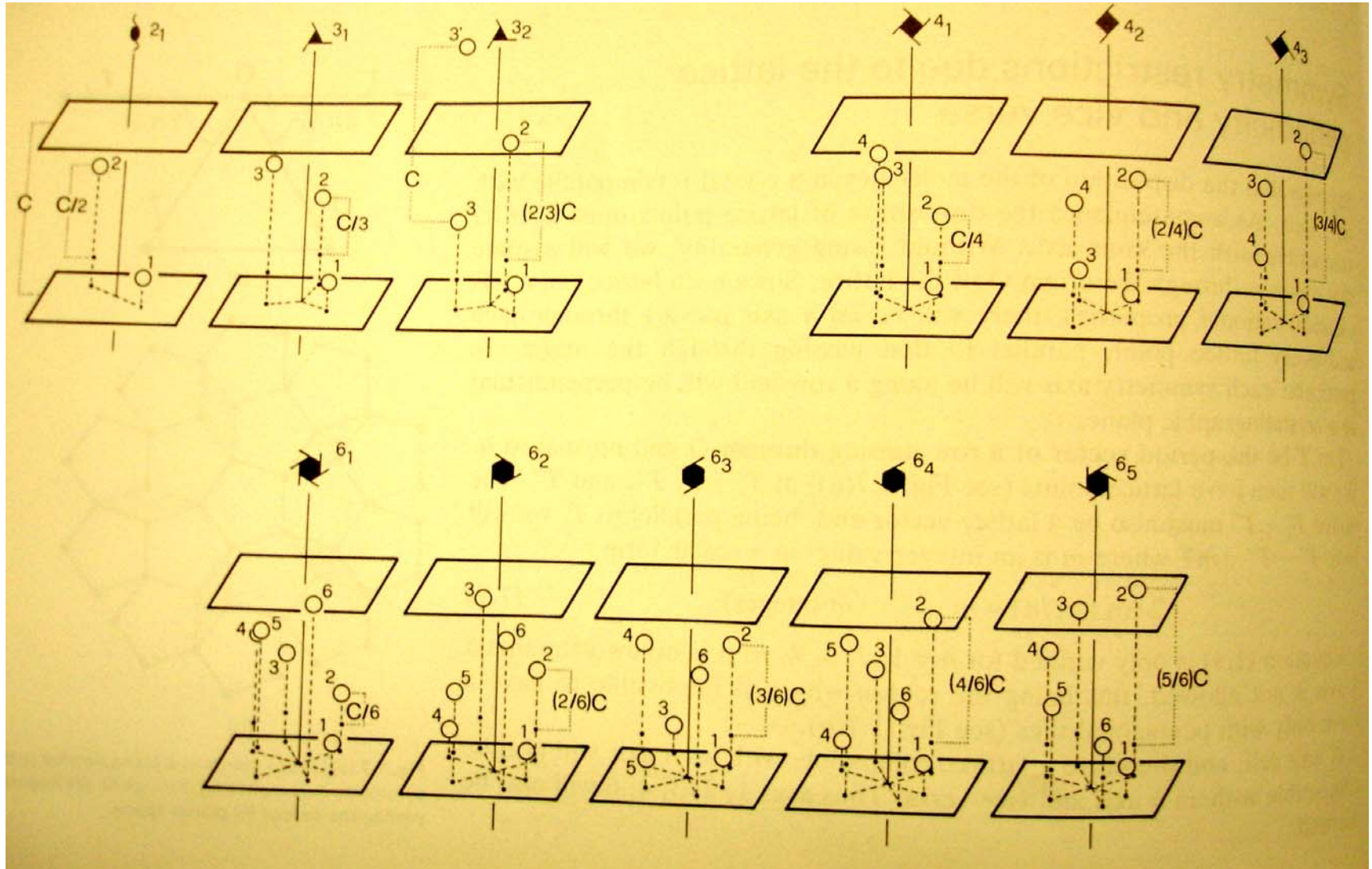
**Table 1.6.** List of the 32 point groups

Crystal systems	Point groups		Laue classes	Lattice point groups
	Non-centro-symmetric	Centro-symmetric		
Triclinic	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\bar{1}$
Monoclinic	2	m	2/m	2/m
Orthorhombic	222	mm2	mmm	mmm
Tetragonal	4	$\bar{4}$	4/m	] 4/mmm
	422	4mm, $\bar{4}2m$	4/mmm	
Trigonal	3	$\bar{3}$	$\bar{3}$	] $\bar{3}m$
	32	$\bar{3}m$	$\bar{3}m$	
Hexagonal	6	$\bar{6}$	6/m	] 6/mmm
	622	6mm, $\bar{6}2m$	6/mmm	
Cubic	23	$m\bar{3}$	$m\bar{3}$	] $m\bar{3}m$
	432	$\bar{4}3m$	$m\bar{3}m$	



32 Punktgruppen plus 14 Bravais-Gitter → 72 Raumgruppen

zusätzlich: Schraubenachsen und Gleitspiegelungen → **nicht-symmorphe Raumgruppen**



## Symbole : Hermann-Mauguin

**A** x y z

**A** Zentrierungstyp P,I,F,A,C

x,y,z Symmetrie-Operationen an Position 1,2,3

**m** Spiegelebene

**n** Gleitspiegelebene

**Zahl** Drehachse

**i<sub>j</sub>** Schraubenachse (i Drehung, j Translation)

Beispiel : **I 4/m m m**

innenzentriert

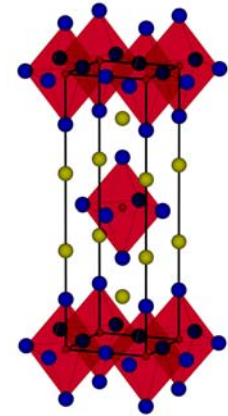
tetragonal mit Spiegelebene senkrecht zur Achse

Spiegelebene senkrecht zu x(und zu y)

Spiegelebene senkrecht zu [110]

-alles Wissenswerte zu den 230 Raumgruppe ist tabelliert :

**International tables for crystallography**





**Table 1.9.** The 230 three-dimensional space groups arranged by crystal systems and point groups. Space groups (and enantiomorphous pairs) that are uniquely determinable from the symmetry of the diffraction pattern and from systematic absences (see p. 159) are shown in bold-type. Point groups without inversion centres or mirror planes are emphasized by boxes

Crystal system	Point group	Space groups
Triclinic	<b>1</b> 1	P1 P $\bar{1}$
Monoclinic	<b>2</b> m 2/m	P2, P2 $\bar{1}$ , C2 Pm, Pc, Cm, Cc P2/m, P2 $\bar{1}$ /m, C2/m, P2/c, <b>P2<math>\bar{1}</math>/c</b> , C2/c
Orthorhombic	<b>222</b> mm2 mmm	P222, <b>P222<math>\bar{1}</math></b> , <b>P2<math>\bar{1}</math>2<math>\bar{1}</math>2</b> , <b>P2<math>\bar{1}</math>2<math>\bar{1}</math>2<math>\bar{1}</math></b> , <b>C222<math>\bar{1}</math></b> , C222, F222, I222, I2 $\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ Pmm2, Pmc2 $\bar{1}$ , Pcc2, Pma2 $\bar{1}$ , Pca2 $\bar{1}$ , Pnc2 $\bar{1}$ , Pmn2 $\bar{1}$ , Pba2, Pna2 $\bar{1}$ , Pnn2, Cmm2, Cmc2 $\bar{1}$ , Ccc2, Amm2, Abm2, Ama2, Aba2, Fmm2, <b>Fdd2</b> , Imm2, Iba2, Ima2 Pmmm, <b>Pnnn</b> , Pccm, <b>Pban</b> , Pmma, <b>Pnna</b> , Pmna, <b>Pcca</b> , Pbam, <b>Pccn</b> , Pbcm, Pnmm, Pmmn, <b>Pbcn</b> , <b>Pbca</b> , Pnma, Cmcm, Cmca, Cmmm, Cccm, Cmna, <b>Ccca</b> , Fmmm, <b>Fddd</b> , Immm, Ibam, <b>Ibca</b> , Imma
Tetragonal	<b>4</b> 4 4/m <b>422</b> 4mm $\bar{4}m$ 4/mmm	P4, <b>P4<math>\bar{1}</math></b> , P4 $\bar{2}$ , <b>P4<math>\bar{3}</math></b> , I4, I4 $\bar{1}$ P4, I4 P4/m, P4 $\bar{2}$ /m, <b>P4/n</b> , P4 $\bar{2}$ /n, I4/m, I4 $\bar{1}$ /a P422, <b>P42<math>\bar{1}</math>2</b> , P4 $\bar{1}$ 22, <b>P4<math>\bar{1}</math>2<math>\bar{1}</math>2</b> , <b>P4<math>\bar{2}</math>22</b> , P4 $\bar{2}$ 2 $\bar{1}$ 2, P4 $\bar{3}$ 22, P4 $\bar{3}$ 2 $\bar{1}$ 2, I422, I4 $\bar{1}$ 22 P4mm, P4bm, P4 $\bar{2}$ cm, P4 $\bar{2}$ nm, P4cc, P4nc, P4 $\bar{2}$ mc, P4 $\bar{2}$ bc, I4mm, I4cm, I4 $\bar{1}$ md, I4 $\bar{1}$ cd P42m, P42c, P4 $\bar{1}$ m, P4 $\bar{2}$ c, P4 $\bar{1}$ m2, P4 $\bar{1}$ c2, P4 $\bar{1}$ b2, P4 $\bar{1}$ n2, I4m2, I4c2, I42m, I42d P4/mmm, P4/mcc, <b>P4/nbm</b> , <b>P4/nnc</b> , P4/mbm, P4/mnc, <b>P4/nmm</b> , <b>P4/ncc</b> , P4 $\bar{2}$ /mmc, P4 $\bar{2}$ /mcm, <b>P4<math>\bar{2}</math>/nbc</b> , <b>P4<math>\bar{2}</math>/nnm</b> , P4 $\bar{2}$ /mbc, P4 $\bar{2}$ mnm, <b>P4<math>\bar{2}</math>/nmc</b> , <b>P4<math>\bar{2}</math>/ncm</b> , I4/mmm, I4/mcm, I4 $\bar{1}$ /amd, I4 $\bar{1}$ /acd
Trigonal-hexagonal	<b>3</b> 3 <b>32</b> 3m 3m <b>6</b> 6 6/m <b>622</b> 6mm 6m 6/mmm	P3, P3 $\bar{1}$ , P3 $\bar{2}$ , R3 P3, R3 P312, P321, <b>P3<math>\bar{1}</math>12</b> , <b>P3<math>\bar{1}</math>21</b> , <b>P3<math>\bar{2}</math>12</b> , <b>P3<math>\bar{2}</math>21</b> , R32 P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c P31m, P31c, P3m1, P3c1, R3m, R3c P6, <b>P6<math>\bar{1}</math></b> , <b>P6<math>\bar{5}</math></b> , P6 $\bar{3}$ , <b>P6<math>\bar{2}</math></b> , <b>P6<math>\bar{4}</math></b> , P6 P6/m, P6 $\bar{3}$ /m P622, <b>P6<math>\bar{2}</math>22</b> , <b>P6<math>\bar{3}</math>22</b> , <b>P6<math>\bar{4}</math>22</b> , <b>P6<math>\bar{5}</math>22</b> P6mm, P6cc, P6 $\bar{3}$ cm, P6 $\bar{3}$ mc P6m2, P6c2, P62m, P62c P6/mmm, P6/mcc, P6 $\bar{3}$ /mcm, P6 $\bar{3}$ /mmc
Cubic	<b>23</b> m3 <b>432</b> 43m m3m	P23, F23, I23, <b>P2<math>\bar{1}</math>3</b> , I2 $\bar{1}$ 3 Pm3, Pn3, Fm3, Fd3, Im3, Pa3, Ia3 P432, <b>P4<math>\bar{3}</math>2</b> , F432, <b>F4<math>\bar{3}</math>2</b> , I432, <b>P4<math>\bar{3}</math>2</b> , P4 $\bar{3}$ 2, I4 $\bar{3}$ 2 P43m, F43m, I43m, P43n, F43c, I43d Pm3m, Pn3n, Pm3n, Pn3m, Fm3m, Fm3c, Fd3m, Fd3c, Im3m, Ia3d

*Pbcn*

$D_{2h}^{14}$

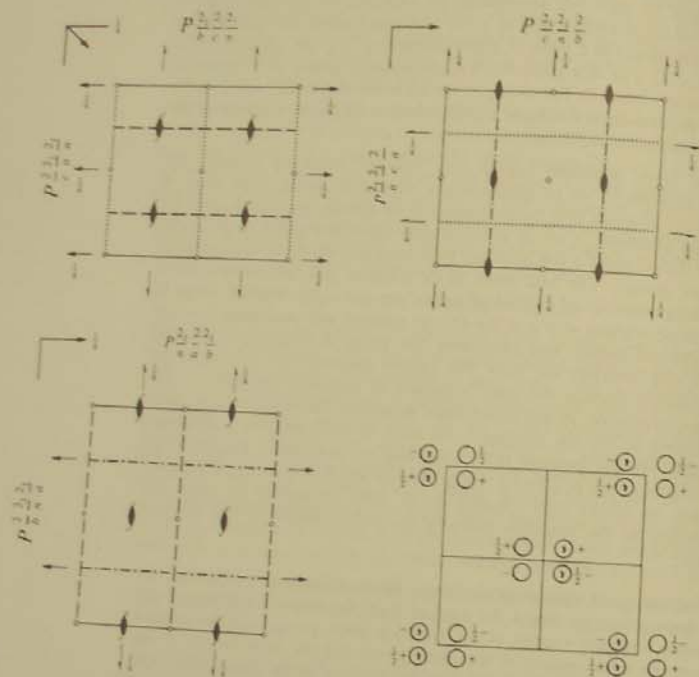
*m m m*

Orthorhombic

No. 60

$P2_1/b2/c2_1/n$

Patterson symmetry  $Pmmm$



Origin at  $\bar{1}$  on  $1c1$

Asymmetric unit  $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq \frac{1}{2}$

Symmetry operations

- (1)  $\bar{1}$  (2)  $2(0,0,1)$   $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$  (3)  $2(0,y,1)$   $x, y, \frac{1}{2}$  (4)  $2(\frac{1}{2},0,0)$   $x, \frac{1}{2}, 0$   
 (5)  $\bar{1}$   $0,0,0$  (6)  $n(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$   $x, y, \frac{1}{2}$  (7)  $c(x,0,z)$  (8)  $b(\frac{1}{2}, y, z)$

Fig. 1.22. Representation of the group *Pbcn* (as in International Tables for Crystallography).

CONTINUED

Symmetry in crystals | 29

No. 60

*Pbcn*

Generators selected (1);  $t(1,0,0)$ ;  $t(0,1,0)$ ;  $t(0,0,1)$ ; (2); (3); (5)

Positions

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates
8 <i>d</i> $\bar{1}$	(1) $x, y, z$ (2) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ (3) $\bar{x}, y, z + \frac{1}{2}$ (4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z$ (5) $\bar{x}, \bar{y}, z$ (6) $x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ (7) $x, y, z + \frac{1}{2}$ (8) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z$

Reflection conditions

General:

$0kl: k=2n$   
 $h0l: l=2n$   
 $hk0: h+k=2n$   
 $h00: h=2n$   
 $0k0: k=2n$   
 $00l: l=2n$

Special: as above, plus

$hkl: h+k=2n$

$hkl: h+k, l=2n$

$hkl: h+k, l=2n$

4 *c*  $2_1$   $0, y, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$   $0, \bar{y}, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

4 *b*  $\bar{1}$   $0, \frac{1}{2}, 0$   $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$   $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, 0, 0$

4 *a*  $\bar{1}$   $0,0,0$   $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$   $0,0, \frac{1}{2}$   $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

Symmetry of special projections

Along  $[001]$   $c2mm$

$a'=a$   $b'=b$

Origin at  $0,0,z$

Along  $[100]$   $p2gm$

$a'=\frac{1}{2}b$   $b'=c$

Origin at  $x,0,0$

Along  $[010]$   $p2gm$

$a'=\frac{1}{2}c$   $b'=a$

Origin at  $0,y,0$

Maximal non-isomorphic subgroups

- I [2] $P2_12_2$ , ( $P2_12_12_2$ ) 1; 2; 3; 4  
 [2] $P112_1/n$  ( $P2_1/c$ ) 1; 2; 5; 6  
 [2] $P12/c1$  ( $P2/c$ ) 1; 3; 5; 7  
 [2] $P2_1/b11$  ( $P2_1/c$ ) 1; 4; 5; 8  
 [2] $Pbc2_1$  ( $Pca2_1$ ) 1; 2; 7; 8  
 [2] $Pb2n$  ( $Pnc2$ ) 1; 3; 6; 8  
 [2] $P2_1cn$  ( $Pna2_1$ ) 1; 4; 6; 7

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $Pbcn(a'=3a)$ ; [3] $Pbcn(b'=3b)$ ; [3] $Pbcn(c'=3c)$

Minimal non-isomorphic supergroups

I none

II [2] $Abma(Cmca)$ ; [2] $Bbab(Ccca)$ ; [2] $Cmcm$ ; [2] $Ibam$ ; [2] $Pbcb(2a'=a)(Pcca)$ ;

## I.2.3 Verschiedene Zellen

-primitive Zelle : Raum-Volumen, das bei Translation mittels allen möglichen Translationsvektoren  $T$  eines Bravais-Gitters den Raum gerade vollständig ausfüllt, ohne zu überlappen oder Löcher zu bilden

-es gibt verschiedene Möglichkeiten

-Zelle muss nicht die Symmetrie des Bravais-Gitters haben

$$V_p = |(a \times b) \cdot c|$$

bcc (body centered cubic)  $V_p = 0.5 V_{\text{konventionell}}$

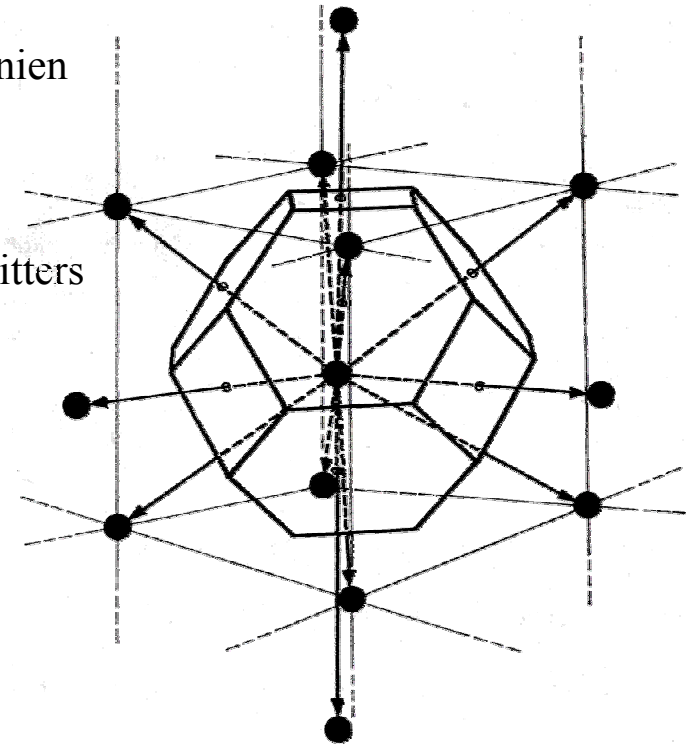
fcc (face centered cubic)  $V_p = 0.25 V_{\text{konventionell}}$

Wigner-Seitz-Zelle :

Konstruktion : Zeichne Ebenen senkrecht zu den Verbindungslinien auf jeweils den Mitten

Wigner-Seitz-Zelle hat Symmetrie des Bravais-Gitters

Bedeutung : alle Punkte in der Wigner Seitz-Zelle um  $\mathbf{0}$  sind näher an  $\mathbf{0}$  als an allen anderen Punkten des Gitters



# Wigner-Seitz Zelle

## Primitive Elementarzelle in 3D

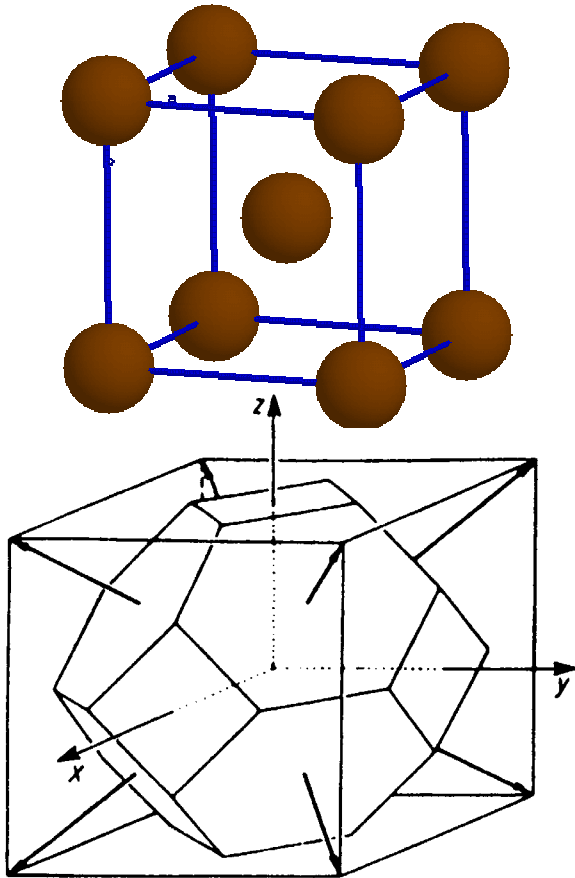


Figure 5.11. Wigner-Seitz cell for the body-centered structure.

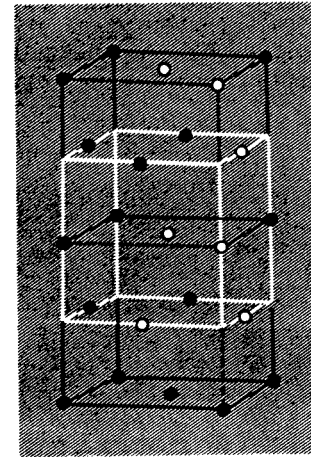


Figure 5.12. Conventional unit cell of the fcc structure. In the cell which is marked black, the atoms are situated on the corners and faces of the cubes. In the white cell, the atoms are at the centers of the edges.

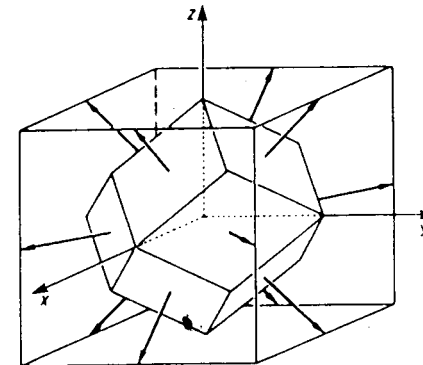
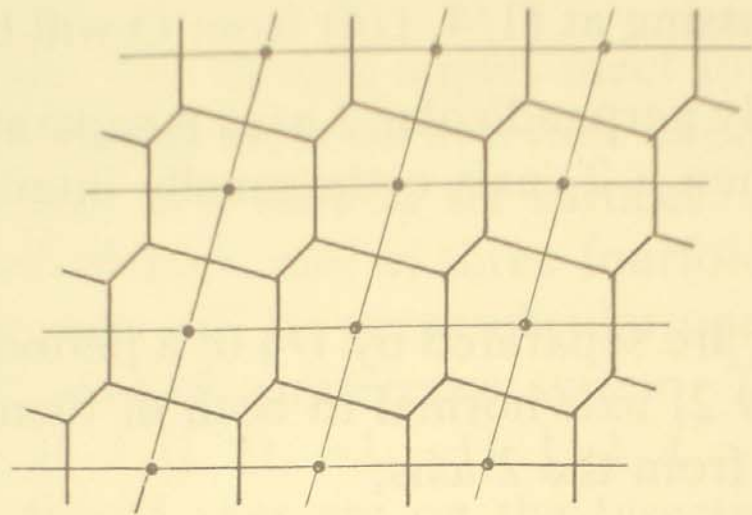
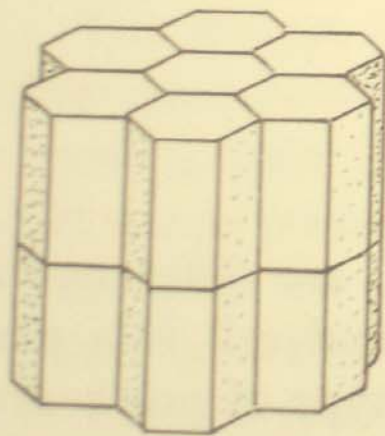


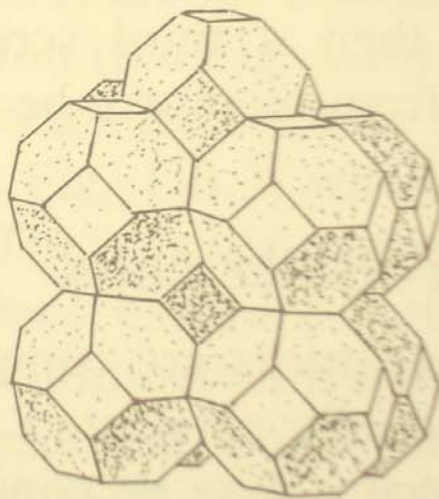
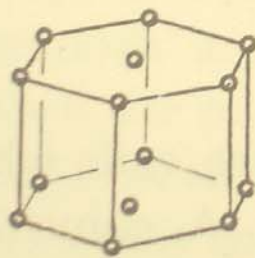
Figure 5.13. Wigner-Seitz cell for the fcc structure. It is constructed from the white cell which is marked in Fig. 5.12.



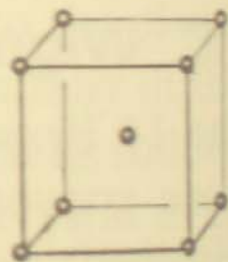
(a)



(b)



(c)



# I.3. Kristallstrukturbestimmung (Kristallographie)

## I.3.0 Wellen in periodischen Strukturen

kristalliner Festkörper hat eine periodische Anordnung

→ zur Beschreibung benötigt man periodische Funktionen

→ a) statische Wellen

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \cos(\mathbf{k}\mathbf{r}) + i \sin(\mathbf{k}\mathbf{r})$$

$\Psi(\mathbf{r})$  ist auf Ebene senkrecht zu  $\mathbf{k}$  konstant

Abstand zweier Ebenen mit gleichem Wert von  $\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$

$$\lambda := 2\pi/k \quad \text{Wellenlänge}$$

$\mathbf{k}$  ist Wellenvektor oder Propagationsvektor

b) zeitabhängige Welle

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$$

oszilliert abhängig von  $\mathbf{r}$  und  $t$

$$\text{Periode } T_0 := 2\pi/\omega \quad \text{oder } \omega = 2\pi/T_0$$

Maximum bewegt sich mit  $\lambda/T_0$  oder  $\omega/k$

c) statische Wellen, die die Symmetrie des Gitters besitzen:

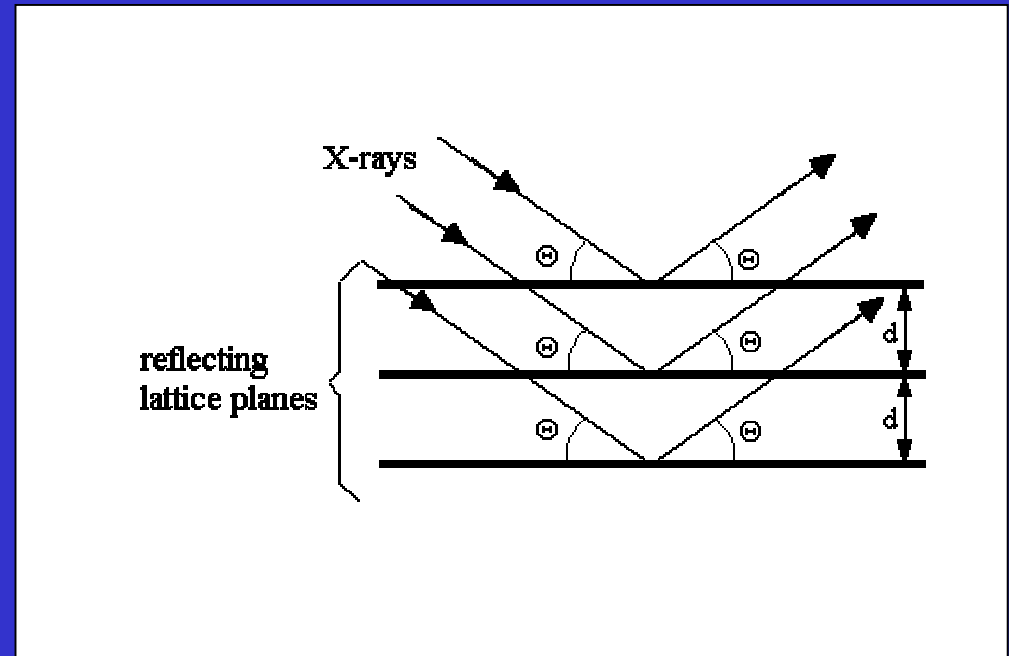
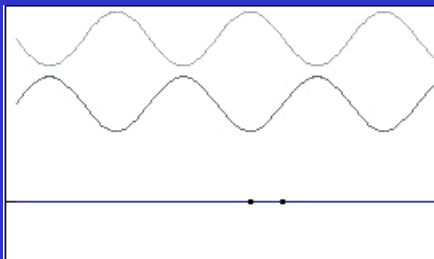
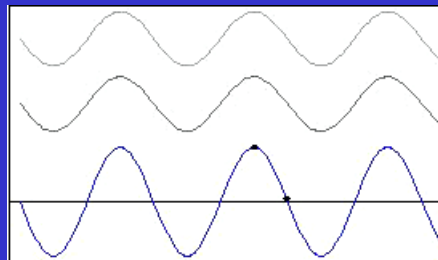
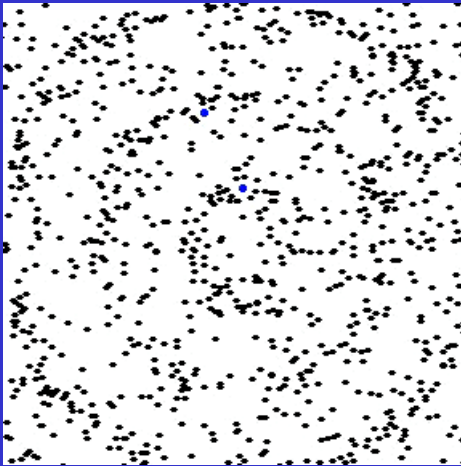
Beispiel ein-dimensional : Kette mit Abstand  $a$

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \Psi(\mathbf{r} + m \cdot \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} + m\mathbf{a})}$$

$$\Leftrightarrow m\mathbf{k}\mathbf{a} = 2\pi \text{ für beliebiges } m \Leftrightarrow \mathbf{k} = 2\pi/\mathbf{a} \text{ oder vielfaches !}$$



# Wellen machen es einfacher !



- Abtasten mit elektromagnetischer Welle
- Gitterschwingungen sind Wellen (Phononen)
- auch Elektronen verhalten sich wie Wellen

# I.3 Das reziproke Gitter und Beugung

Definition : Gegeben sein eine Welle  $\Psi(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  in einem Bravais-Gitter, dessen Gitterpunkte durch Vektoren  $\mathbf{R}$  festgelegt sind. Der Satz aller Vektoren, für die für alle  $\mathbf{r}$  gilt

$$\Psi(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \Psi(\mathbf{r}+\mathbf{R})=e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}+\mathbf{R})}$$

heißt das reziproke Gitter ( $\mathbf{RG}$ ).

Bemerkungen :

a) für beliebige  $\mathbf{k}$  ist die Bedingung nicht erfüllt (Länge kleiner als „eins durch“ kleinster Gitterabstand)

b) Beispiel : simple cubic ;  $\mathbf{k}_0=2\pi/a \cdot (1,0,0)$

$\mathbf{k}_0$  ist Punkt des RG

$$\mathbf{R}=a(n_1,n_2,n_3)$$

$$\rightarrow e^{i(\mathbf{k}_0\mathbf{R})}=\exp[i(2\pi/a \cdot a \cdot \{(1,0,0) \cdot (n_1,n_2,n_3)\})]=1$$

c) reziprokes Gitter ist wichtig :

Beugung von Wellen am Kristallgitter

generelle Untersuchungen von Wellen im Bravais-Gitter

Zerlegung in Wellen  $\Leftrightarrow$  Fourier-Transformation

Übertrag des Impulserhaltungssatzes im freien Raum auf das Kristall-Gitter

Bravais-Gitter :  $\mathbf{R}=n_1 \cdot \mathbf{a}+n_2 \cdot \mathbf{b}+n_3 \cdot \mathbf{c}$

reziprokes Gitter :  $\mathbf{K}=h \cdot \mathbf{a}^*+k \cdot \mathbf{b}^*+l \cdot \mathbf{c}^*$

Eigenschaften : a)  $\mathbf{0}$  ist Punkt des reziproken Gitters

b)  $\mathbf{G}$  und  $\mathbf{G}'$  Punkte des RG  $\Rightarrow n*\mathbf{G}+m*\mathbf{G}'$  Punkt des reziproken Gitters für  $n,m$  ganzzahlig

c)  $\mathbf{G}$  ungleich  $\mathbf{0}$  des reziproken Gitters  $\Rightarrow \mathbf{G}$  hat endliche Länge

a-c) Reziprokes Gitter ist Translationsgitter



# Reziprokes Gitter

Vektor im reziproken Raum:

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

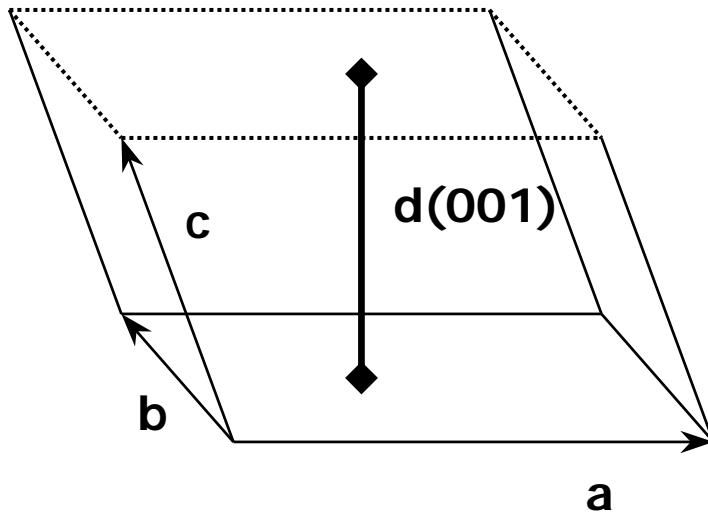
Basis im reziproken Raum ( $2\pi$ ):

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{n}_{100}}{d_{100}}; \vec{b}^* = \frac{\vec{n}_{010}}{d_{010}}; \vec{c}^* = \frac{\vec{n}_{001}}{d_{001}}$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}}$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}}$$

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}}$$



$$\vec{x}_i \cdot \vec{x}_j^* = \delta_{ij}; \quad x_{i,j} = a, b, c$$

- Bemerkungen : a) das reziproke Gitter ist selbst ein Bravais-Gitter
- b) das reziproke Gitter des reziproken Gitters ist das ursprüngliche Bravais-Gitter
- c) orthogonales Bravais-Gitter
  - $\mathbf{a}^*$  ist parallel zu  $\mathbf{a}$  mit der Länge  $a^*=2\pi/a$
- d) Volumen der primitiven Zelle im reziproken Gitter :  $(2\pi)^3/V$   
mit  $V$  Volumen der primitiven Zelle im realen Raum

Allgemeine Bedeutung :

$n(\mathbf{r})$  sei eine Funktion mit der Translationsinvarianz bezüglich des Bravais-Gitters BG  
 $n(\mathbf{r}+\mathbf{R})=n(\mathbf{r})$  für alle  $\mathbf{R}$  aus BG und alle  $\mathbf{r}$

dann kann man  $n(\mathbf{r})$  in eine Fourier-Reihe zerlegen :  $n(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{G} \text{ aus RG}} n(\mathbf{G}) \cdot e^{i \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$

**-in der Fourier-Zerlegung treten nur Wellen auf, die kompatibel mit dem Gitter sind**

-Beispiel eine Dimension : BG :  $R=na$     RG :  $G=m[2\pi/a]$      $f(r)=\sum_m f_m \exp\{i(2\pi/a)mr\}$   
 es treten nur Wellen auf mit  $q= m(2\pi/a)$  also einer Wellenlänge von  $a/m$   
 also die Gitterkonstante ist ein ganzzahliges Vielfaches von der Wellenlänge

# Beispiele für reziproke Gitter :

a) einfach kubisch  $\mathbf{a}^* = (2\pi/a)(1,0,0) \dots$

Gitter ist wieder einfach kubisch mit der Gitterkonstante  $(2\pi/a)$

b) fcc-Gitter mit  $a$  Gitterkonstante der konventionellen Zelle :

dies ist ungleich komplizierter, da die primitiven Translationsvektoren nicht orthogonal sind

RG ist ein kubisch innenzentriertes Gitter Gitterkonstante  $2*(2\pi/a)$

die Dichte der der reziproken Gittervektoren ist kleiner als bei einem einfach Gitter mit  $a$  !

c) bcc-Gitter mit  $a$  Gitterkonstante der konventionellen Zelle :

reziprokes Gitter ist fcc mit Gitterkonstante  $2*(2\pi/a)$

in b) und c) benutzt man meist trotzdem das Gitter entsprechend der konventionellen Gitterkonstante  $(2\pi/a)$

$\mathbf{a}^* = (2\pi/a)(1,0,0)$ ,  $\mathbf{b}^* = (2\pi/a)(0,1,0)$  und  $\mathbf{c}^* = (2\pi/a)(0,0,1)$

aber mit Einschränkungen : fcc-Gitter :  $h*\mathbf{a}^* + k*\mathbf{b}^* + l*\mathbf{c}^*$  ist RG-Vektor nur  $h+k$  gerade und  $h+l$  gerade  
(dann ist auch  $k+l$  gerade)

bcc-Gitter :  $h*\mathbf{a}^* + k*\mathbf{b}^* + l*\mathbf{c}^*$  ist RG-Vektor nur  $h+k+l$  gerade

allgemein : ist das Bravais-Gitter zentriert, bezieht man das RG auf die konventionelle Zelle mit speziellen

Bedingungen an  $hkl$  aus  $h*\mathbf{a}^* + k*\mathbf{b}^* + l*\mathbf{c}^*$

I-Zentrierung :  $(h+k+l)$  gerade      F-Zentrierung :  $(h+k), (k+l), (h+l)$  alle gerade

C-Zentrierung :  $(h+k)$  gerade (A,B-Zentrierung analog)

# Reziprokes Gitter (kubisch innenzentriert)

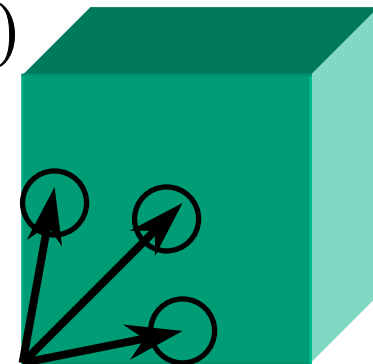
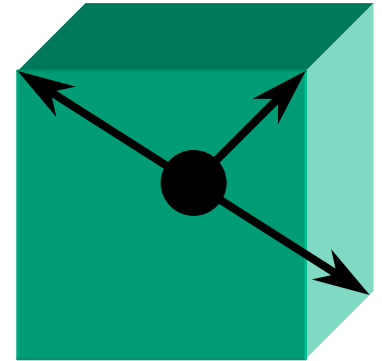
$$2\Pi=1$$

$$\vec{t}_1 = \frac{\mathbf{a}}{2}(\bar{1}11); \quad \vec{t}_2 = \frac{\mathbf{a}}{2}(1\bar{1}1); \quad \vec{t}_3 = \frac{\mathbf{a}}{2}(11\bar{1})$$

$$\vec{b}_1 = \frac{\vec{t}_2 \times \vec{t}_3}{\vec{t}_1 \cdot \vec{t}_2 \times \vec{t}_3}$$

$$\vec{t}_2 \times \vec{t}_3 = \frac{\mathbf{a}^2}{2}(011); \quad \vec{t}_1 \cdot \vec{t}_2 \times \vec{t}_3 = \frac{\mathbf{a}^3}{2}$$

$$\vec{b}_1 = \frac{1}{\mathbf{a}}(011); \quad \vec{b}_2 = \frac{1}{\mathbf{a}}(101); \quad \vec{b}_3 = \frac{1}{\mathbf{a}}(110)$$



Innenzentriert  $\rightarrow$  Flächenzentriert  
mit Länge  $2/a$

# Reziprokes Gitter (kubisch flächenzentriert)

$$\vec{t}_1 = \frac{\mathbf{a}}{2}(110); \quad \vec{t}_2 = \frac{\mathbf{a}}{2}(101); \quad \vec{t}_3 = \frac{\mathbf{a}}{2}(011)$$

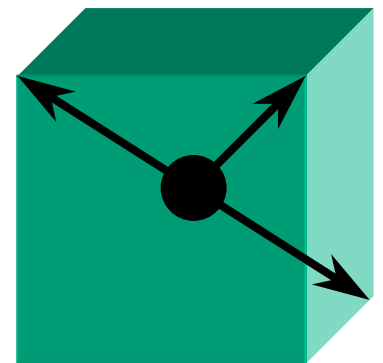
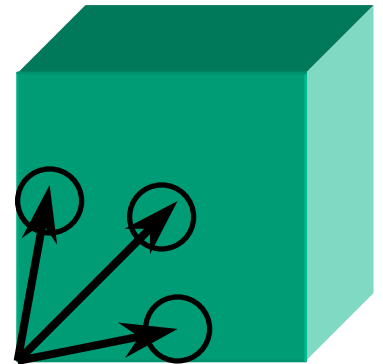
$$\vec{b}_1 = \frac{\vec{t}_2 \times \vec{t}_3}{\vec{t}_1 \cdot \vec{t}_2 \times \vec{t}_3}$$

$$\vec{t}_2 \times \vec{t}_3 = \frac{\mathbf{a}^2}{2}(-1-11); \quad \vec{t}_1 \cdot \vec{t}_2 \times \vec{t}_3 = -\frac{\mathbf{a}^3}{4}$$

$$\vec{b}_1 = \frac{1}{\mathbf{a}}(11\bar{1}); \quad \vec{b}_2 = \frac{1}{\mathbf{a}}(1\bar{1}1); \quad \vec{b}_3 = \frac{1}{\mathbf{a}}(\bar{1}11)$$

Flächenzentriert → Innenzentriert  
mit Länge  $2/a$

$1/a \cdot (100)$  ist KEIN reziproker Gittervektor !!!



# Auslöschungsregeln

-zentriertes Gitter  $\rightarrow$  reziprokes Gitter entspricht nicht der einfachen Vorstellung

reale Zelle kleiner  $\rightarrow$  reziproke Zelle muss größer sein !

man benutzt dennoch :

aber Auslöschungsregeln :

**I**  $h+k+l$  gerade

**F**  $h+k$  und  $k+l$  gerade

**C**  $h+k$  gerade



$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}}$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}}$$

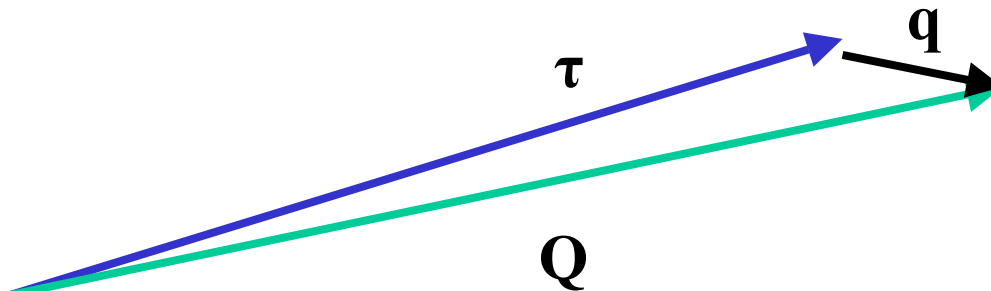
$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}}$$

$$h \cdot \vec{a}^* + k \cdot \vec{b}^* + l \cdot \vec{c}^*$$

# 1. Brillouin-Zone := Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters

jeder Vektor  $\mathbf{Q}$  lässt sich zerlegen in

$$\mathbf{Q} = \boldsymbol{\tau} + \mathbf{q} \quad \text{mit } \boldsymbol{\tau} \text{ reziproker Gittervektor} \\ \text{und } \mathbf{q} \text{ in der 1. Brillouin-Zone}$$

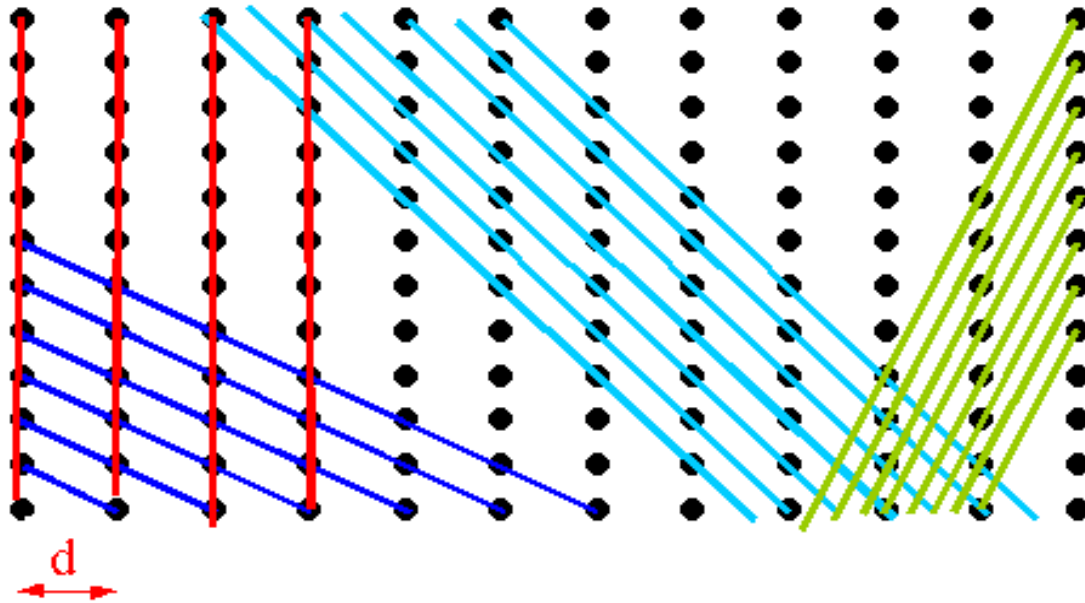


Bedeutung : Wellenvektor : grosses  $\mathbf{Q} \rightarrow$  Periodizität kleiner als Gitterkonstante  
dieser Teil unwesentlich

Bemerkung zur Notation :  $\mathbf{Q}$  und  $\mathbf{q}$  meistens wie hier; manchmal  $\mathbf{k}, \mathbf{K}$  statt  $\boldsymbol{\tau}$  manchmal  $\mathbf{G}$

# Gitter-Ebenen und Miller Indices

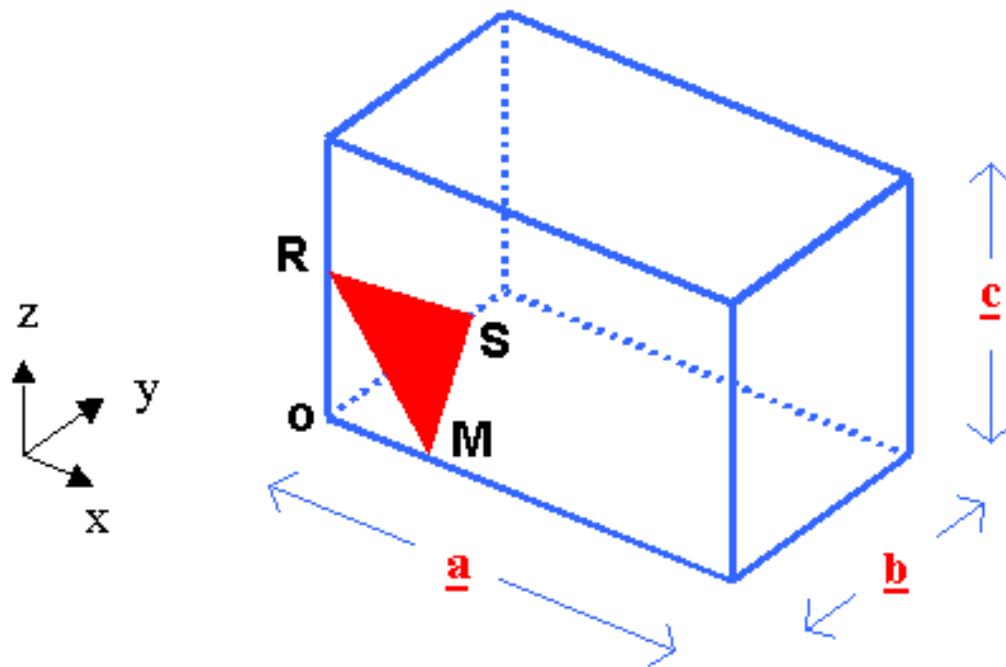
Man kann das Gitter unterteilen in Sets von Ebenen.  
Beliebige Möglichkeiten, dies zu tun !





- Alle Ebenen in so einem Gitter sind identisch !
- die Ebenen sind “imaginär”
- der senkrechte Abstand zwischen solcher Ebenen ist der d-Wert

Wie kann man diese Sets benennen ?



Finde  
 Achsenabschnitte  
**a,b,c: 1/4, 2/3, 1/2**

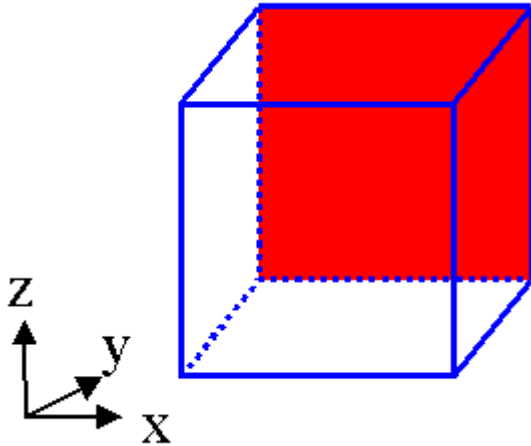
nimm Kehrwerte  
 4, 3/2, 2

Multipliziere zu ganzen  
 Zahlen: **(8 3 4)**  
 [falls notwendig]

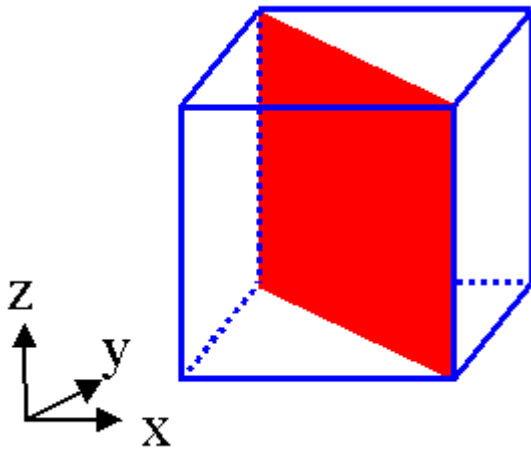
Label (h k l) schneidet bei  $\mathbf{a/h}$ ,  $\mathbf{b/k}$ ,  $\mathbf{c/l}$

(hkl) ist der **MILLER INDEX** dieser Ebene

(runde Klammern, keine Kommas).



Ebene senkrecht zu y  
schneidet bei  $\infty$ , 1,  $\infty$   
→ **(0 1 0) Ebene**



Diagonale 1, 1,  $\infty$   
→ **(1 1 0) Ebene**

**NB** ein Index 0 bedeutet,  
dass die Ebene parallel zu  
dieser Achse ist !

# d-Wert-Formel

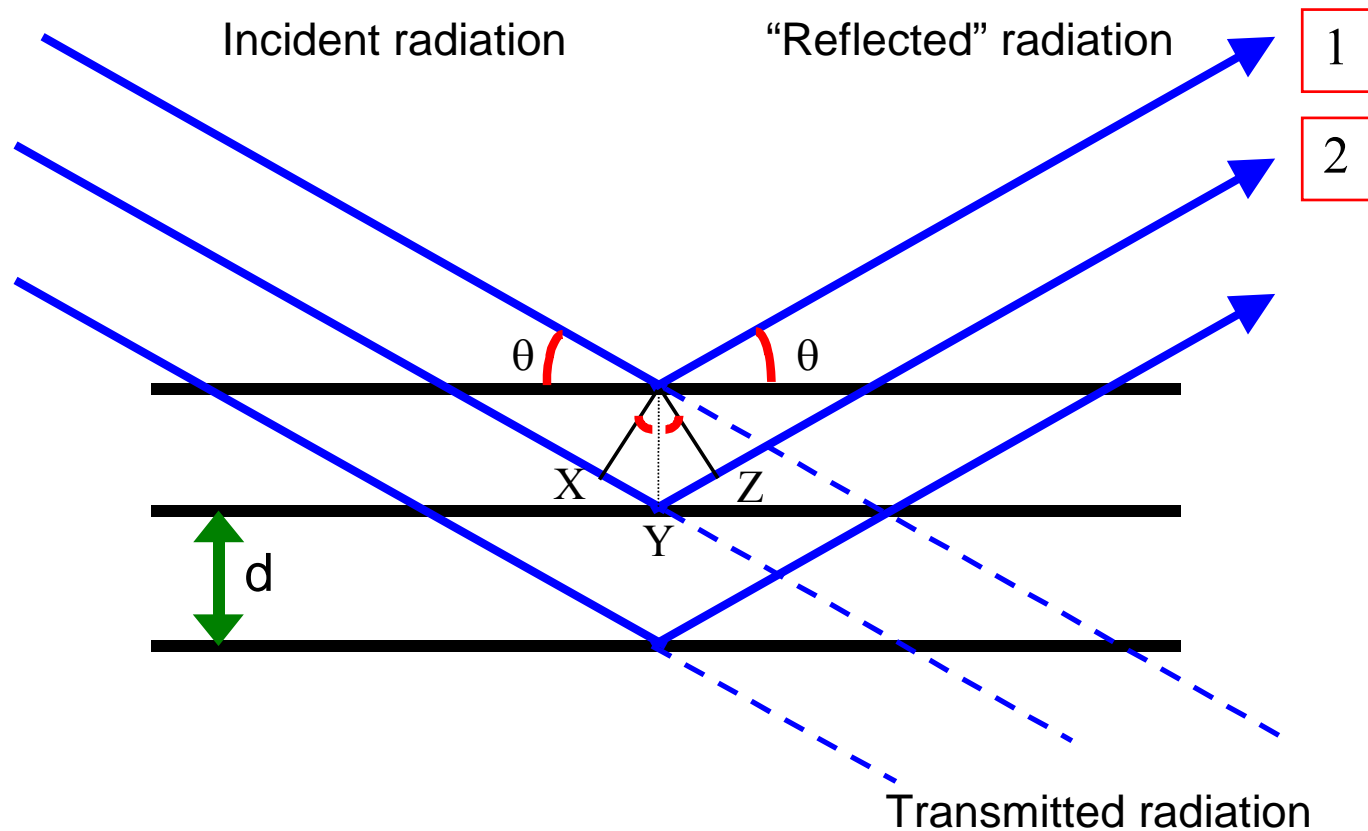
For orthogonal crystal systems  
(i.e.  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ ) :-

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

For cubic crystals (special case  
of orthogonal)  $\mathbf{a=b=c}$  :-

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

e.g. for (1 0 0)  $d = a$   
(2 0 0)  $d = a/2$   
(1 1 0)  $d = a/\sqrt{2}$  etc.



Strahl 2 hat gegenüber Strahl 1 mehr Strecke  $XYZ = 2d \sin \theta$

damit

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

**Bragg's Law**

- die Miller Indizes einer Ebenenschar sind die Koordinaten des **kürzesten reziproken Gittervektors senkrecht zu den Ebenen**
- die Wahl der Basisvektoren bestimmt rez. Gitter und (hkl)

## Gegenüberstellung

direkter (realer) Raum

primitive Translationen  $a, b, c$

Ebenenschar

(hkl)

Abstand der Ebenen

$d$  in cm oder Å

Bedeutung Ortskoordinate

reziproker Raum

primitive Translationen  $a^*, b^*, c^*$

Punkt im reziproken Gitter

$$\mathbf{G} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$$

Länge von  $\mathbf{G} = 2\pi/d$

$\mathbf{G}$  in  $\text{cm}^{-1}$  oder  $\text{Å}^{-1}$

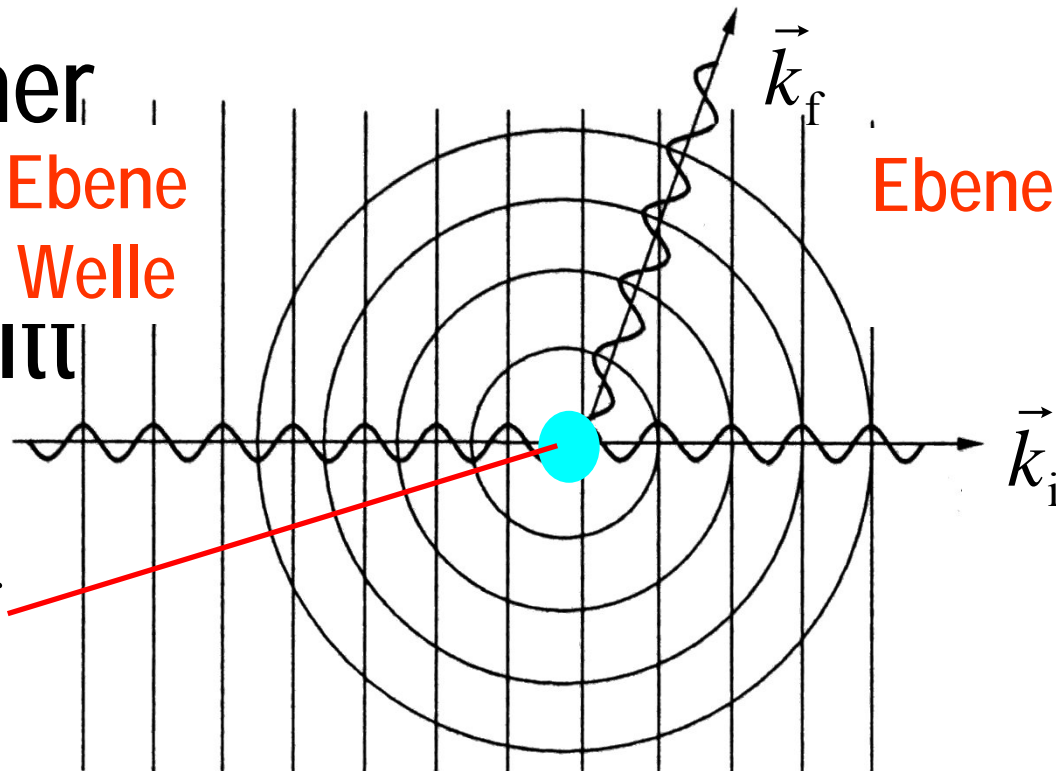
Wellenvektor

# Intrinsischer Streu Querschnitt

Ebene  
Welle

Ebene & Sphärische  
Welle

Scattering Center  
at  $\vec{r} = 0$



$$e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \rightarrow e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + f(\Omega) \frac{e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}}{r}$$

Total Cross Section:

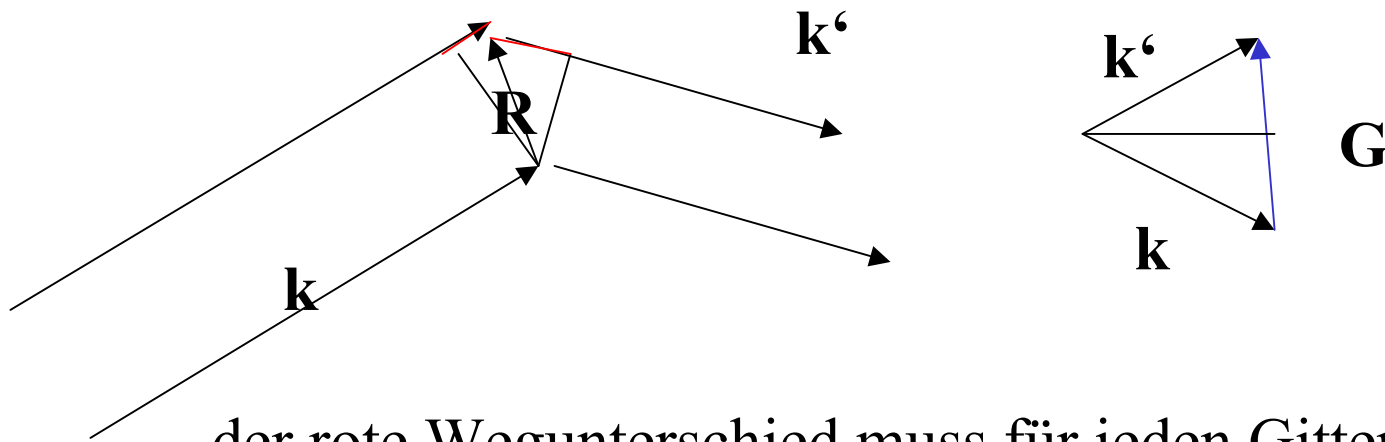
$$\sigma = \iint \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 d\Omega$$

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 = |f(\Omega)|^2$$

$$\sigma = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |f(\vartheta, \phi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\phi$$

# von Laue Formulierung des Bragg-Gesetzes

- der Kristall besteht aus einem Bravais-Gitter
- einfallende Welle wird von jedem Atom radial gestreut ohne Phasenverschiebung (vgl. Mehrfachspalt oder Gitter in der Optik)
- Reflexe nur bei Interferenz zwischen den Punkten des Bravaisgitters



-der rote Wegunterschied muss für jeden Gittervektor  $\mathbf{R}$  ein vielfaches von der Wellenlänge ausmachen  
Länge von  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{k}'$  ist  $2\pi/\lambda$  !

$\mathbf{R} * (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi * \mathbf{m}$  für alle Gittervektoren  $\mathbf{R}$

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

da Länge von  $\mathbf{G} = 2\pi/d$  ergibt sich direkt die Bragg-Glchg.

# I.IV Elementare Wechselwirkung : Strahlung - Materie

Was ist die Wechselwirkung :

a) Röntgen-Strahlung

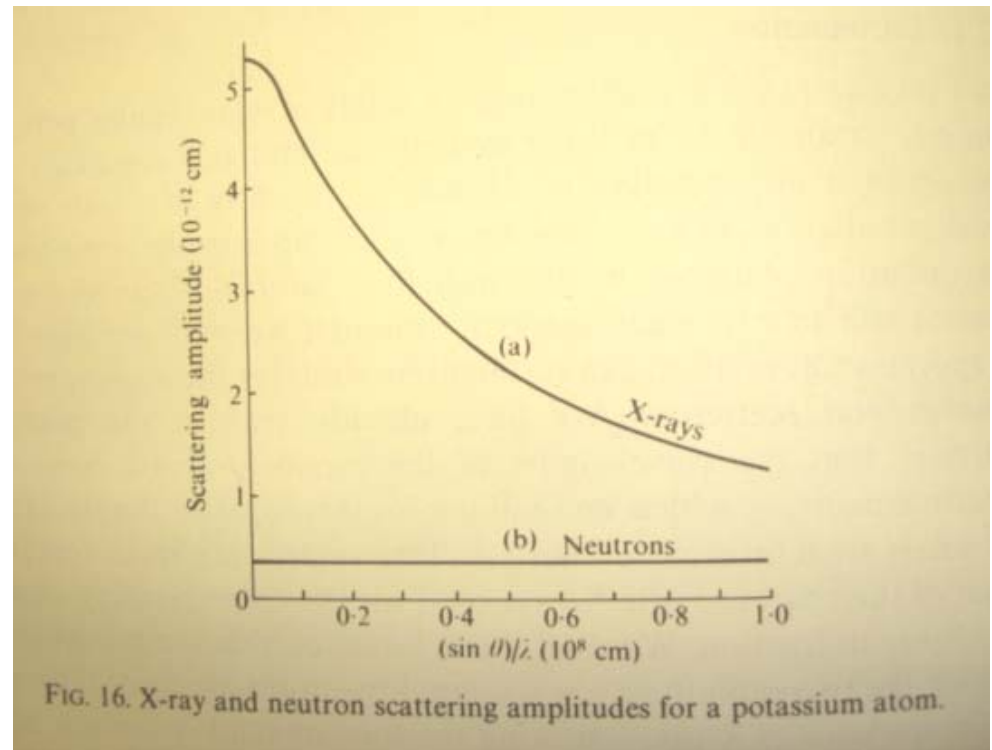
A Amplitude der Strahlung,  $e, m$  Elektronenladung und –masse  
 $\chi$  Winkel zwischen Anfangspolarisierung und  $\mathbf{k}'$

geeignete Polarisierung

Atom mit Atomzahl  $Z$  :  
Vorwärtsstreuung !

Compton (1935)

endliche Ausbreitung der Elektronenwolke => Abfall (Formfaktor)  
International Tables (Programme)





## Neutronen-Streuung :

### nukleare Wechselwirkung (falls nicht magnetisch)

- die meisten Atome streuen Neutronen innerhalb eines Faktors 2-3  
Pb zu C : 1.5 für Neutronen und 20 für Röntgen
- lokale Wechselwirkung → kein Formfaktor,
- kein Polarisationsfaktor
- es gibt auch schwache Wechselwirkung zwischen dem Neutron und den Ladungen der Atome ABER 10000 mal schwächer  
Schwinger : magnetisches Moment des Neutrons und Elektronen  
-1.46  $10^{-16}$  cm und ähnliche Größenordnungen

### einzelner Kern :

**einfallende Welle**  $\Psi(\mathbf{r})=e^{ikz}$       **Streuwelle sphärisch**  $\Psi(\mathbf{r})=-(b/r)e^{ikr}$

r Abstand vom Ursprung, wo der Kern fest sitzt

$b=\alpha+i\beta$  **komplexe** Streulänge,

deren Imaginärteil die Absorption beschreibt; weit von

Absorptionskanten können wir zunächst nur Realteil betrachten

**Streuquerschnitt :  $\sigma$  = ausfallender Neutronenstrom / Einfallfluss**

**v Geschwindigkeit der Neutronen :**

$$\sigma = 4\pi r^2 v \frac{|(\mathbf{b} / r) e^{ikr}|^2}{v |e^{ikz}|^2}$$
$$= 4\pi b^2$$

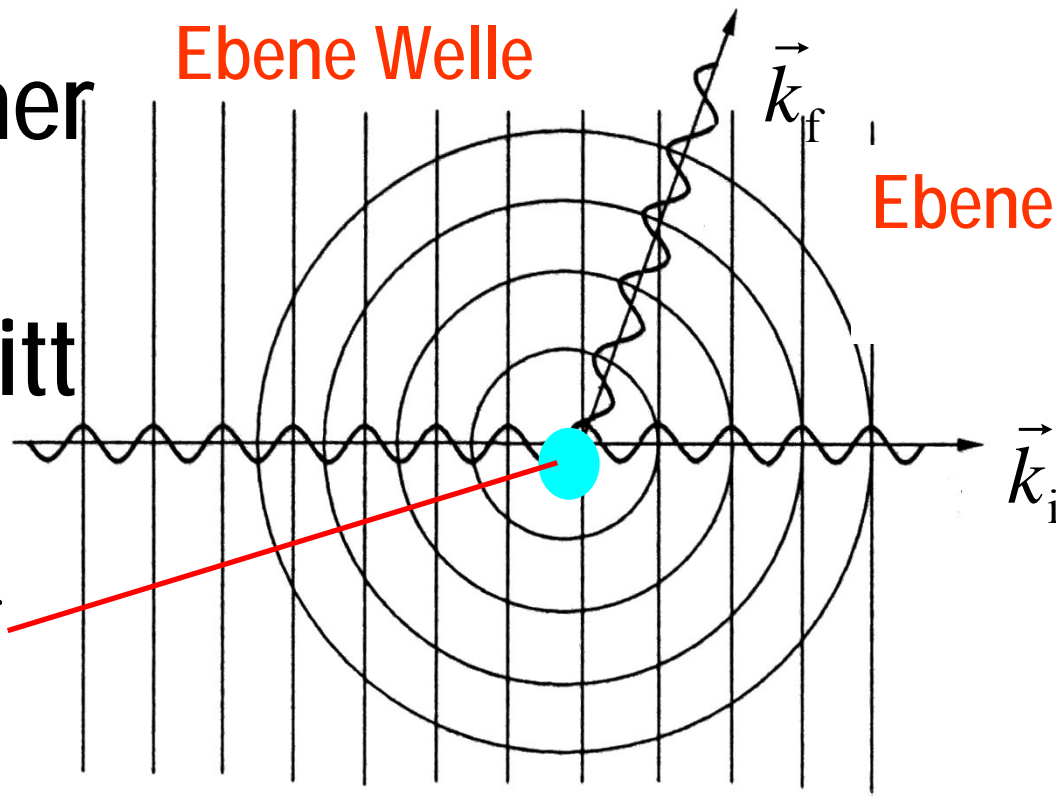
**Streuung so effektiv wie eine Scheibe mit Radius  $\sim b$**

# Intrinsischer Streu Querschnitt

Ebene Welle

Ebene & Sphärische  
Welle

Scattering Center  
at  $\vec{r} = 0$



$$e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \rightarrow e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + f(\Omega) \frac{e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}}{r}$$

Total Cross Section:

$$\sigma = \iint \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 d\Omega$$

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 = |f(\Omega)|^2$$

$$\sigma = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |f(\vartheta, \phi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\phi$$

## Breit-Wigner Formel : Potential und resonante Streuung

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \left| k\xi + \frac{\frac{1}{2}\Gamma_n^{(r)}}{(E - E_r) + \frac{1}{2}i(\Gamma_n^{(r)} + \Gamma_a^{(r)})} \right|^2$$

$$\sigma = 4\pi \left| \xi + \frac{\text{constan t}}{(E - E_r) + \frac{1}{2}i(\Gamma_n^{(r)} + \Gamma_a^{(r)})} \right|^2$$

**E, Neutronen-Energie, E<sub>r</sub> Resonanzenergie um einen Compound zu erzeugen**

**ξ harte Streuung des Kerns, Potentialterm (positiv)**

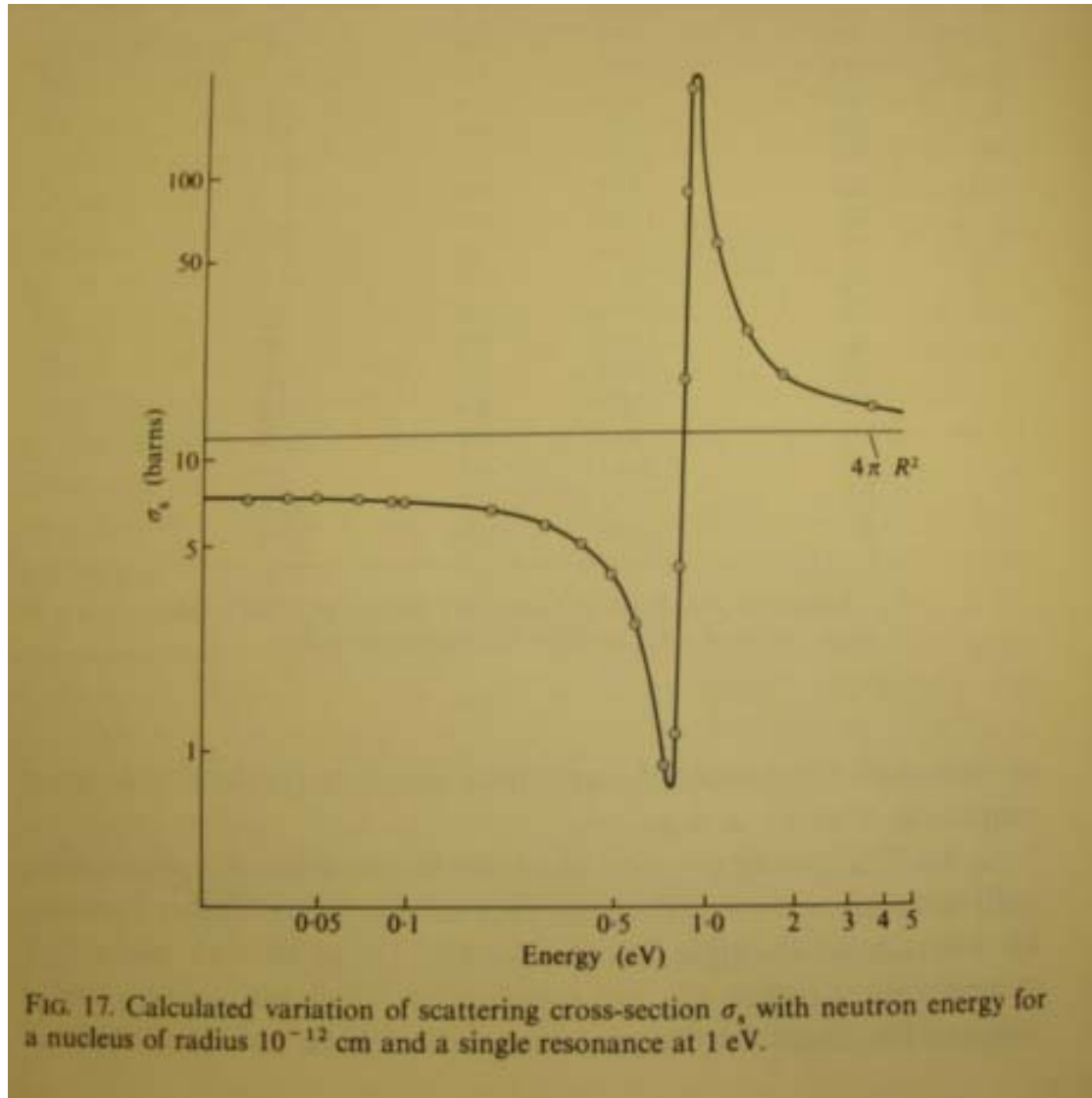
**Γ<sub>n</sub> und Γ<sub>a</sub> sind die Breiten der Resonanz zur Emittierung des Neutrons und zur Absorption**

**Potentialterm : proportional zum Kern-Radius\*\*2**

**→ A-Abhängigkeit**

**Resonanzterm kann negativ werden und dominieren**

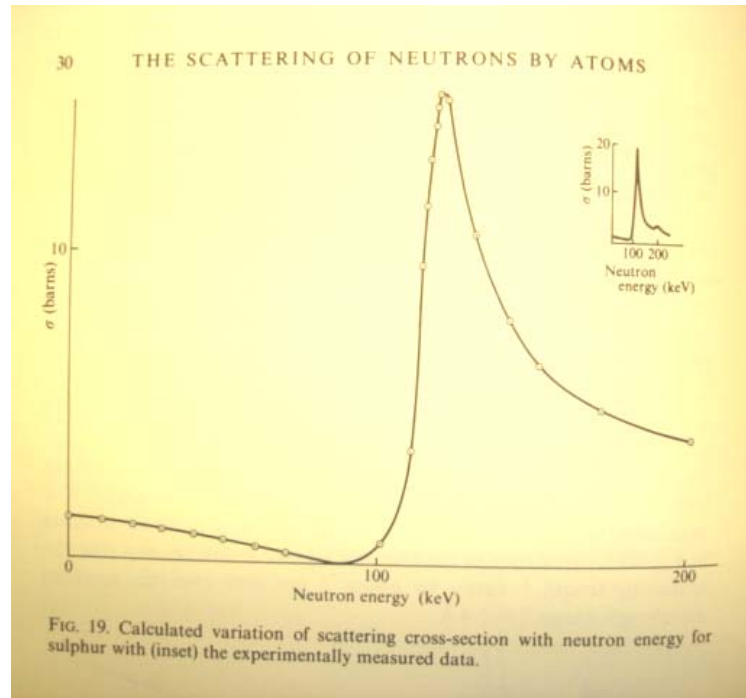
Beispiel :  $\Gamma_n$  ,  $\Gamma_a$  0.001eV und 0.1eV  $E_r$  1eV und Radius  $10^{-12}$ cm



$\sim Rh$

**Beispiel :  $\Gamma_n, \Gamma_a$  18keV und klein,  $E_r$  111keV  
und Radius  $0.44 \cdot 10^{-12}$ cm**

**32S Schwefel**



**bei thermischen Neutronen-Energien ist  $b$  konstant :  
weniger als 0.3% Unterschied zwischen 0 und 1000eV**

**$b$  ist reell, weit weg von einer Resonanz**

**Gebundener und freier Kern :**

**bis jetzt war der Kern fest auf dem Ursprung**

**bei freiem Kern :**

$$\sigma_{\text{frei}} = \left( \frac{A}{A+1} \right)^2 \sigma_{\text{gebunden}}$$

**im Falle von H ein Faktor 4 !**

# Der Beitrag des nuklearen Spins :

nuklearer Spin  $I$  kann mit dem Neutron zu  $I+1/2$  und  $I-1/2$   
kombinieren

→ zwei Streulängen  $b_+$  und  $b_-$

Aufteilung in kohärente und inkohärente Streuung

$$\sigma = S + s$$

Gewichte der beiden Möglichkeiten :  $w_+$  und  $w_-$

entsprechend der Entartungen  $(2J+1)$

$$w_+ = (I+1)/(2I+1) \quad \text{und} \quad w_- = I/(2I+1)$$

damit  $S = 4\pi(w_+b_+ + w_-b_-)^2$  und  $s = 4\pi w_+w_-(b_+ - b_-)^2$

$$\sigma = 4\pi(w_+b_+^2 + w_-b_-^2)$$

-nur die kohärente Streuung kann Interferenz produzieren !

Beispiel : H  $b_+$  und  $b_-$  betragen  $1.04$  und  $-4.7 \cdot 10^{-12}$  cm

damit ist  $\sigma = 81$  barn ( $10^{-24}$  cm<sup>2</sup>) und  $S$  nur 2 barn !!!



## Isotopen-Effekt :

Beispiel Eisen :  $^{54}\text{Fe}$  und  $^{56}\text{Fe}$  haben 0.42 und  $1.01 \times 10^{-12} \text{cm}$  b-Werte  
(und zusätzlich Unterschiede für Spin-Konfiguration !)

**mittlere Streulänge** : nur diese geht in Strukturfaktor-Berechnung ein

$$\bar{\mathbf{b}} = \sum w_i \mathbf{b}_i$$

$$\mathbf{b}_i = \bar{\mathbf{b}} - (\bar{\mathbf{b}} - \mathbf{b}_i)$$

**ungeordnete (inkohärente) Streuung** :

$$E(\mathbf{s}) = 4\pi \{ \overline{\mathbf{b}^2} - \bar{\mathbf{b}}^2 \}$$

**-die kohärente Streulänge entspricht dem  
Röntgen-Atom-Streufaktor,**

**nur sie ist wichtig für die Bragg-Streuung**

**meist beschränkt man sich auf die Bezeichnung  $\mathbf{b}$**

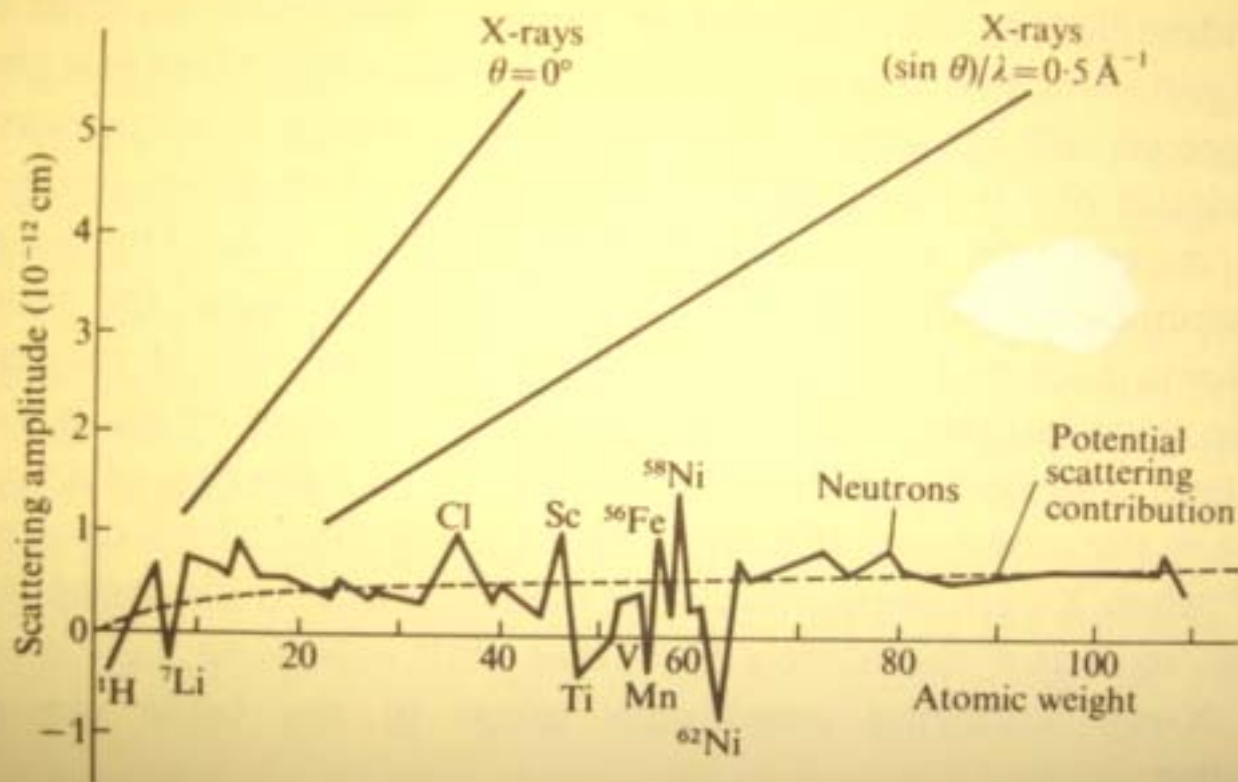


FIG. 22. Irregular variation of neutron scattering amplitude with atomic weight due to superposition of 'resonance scattering' on the slowly increasing 'potential scattering'; for comparison the regular increase for X-rays is shown. (From *Research (London)* 7, 257 (1954).)

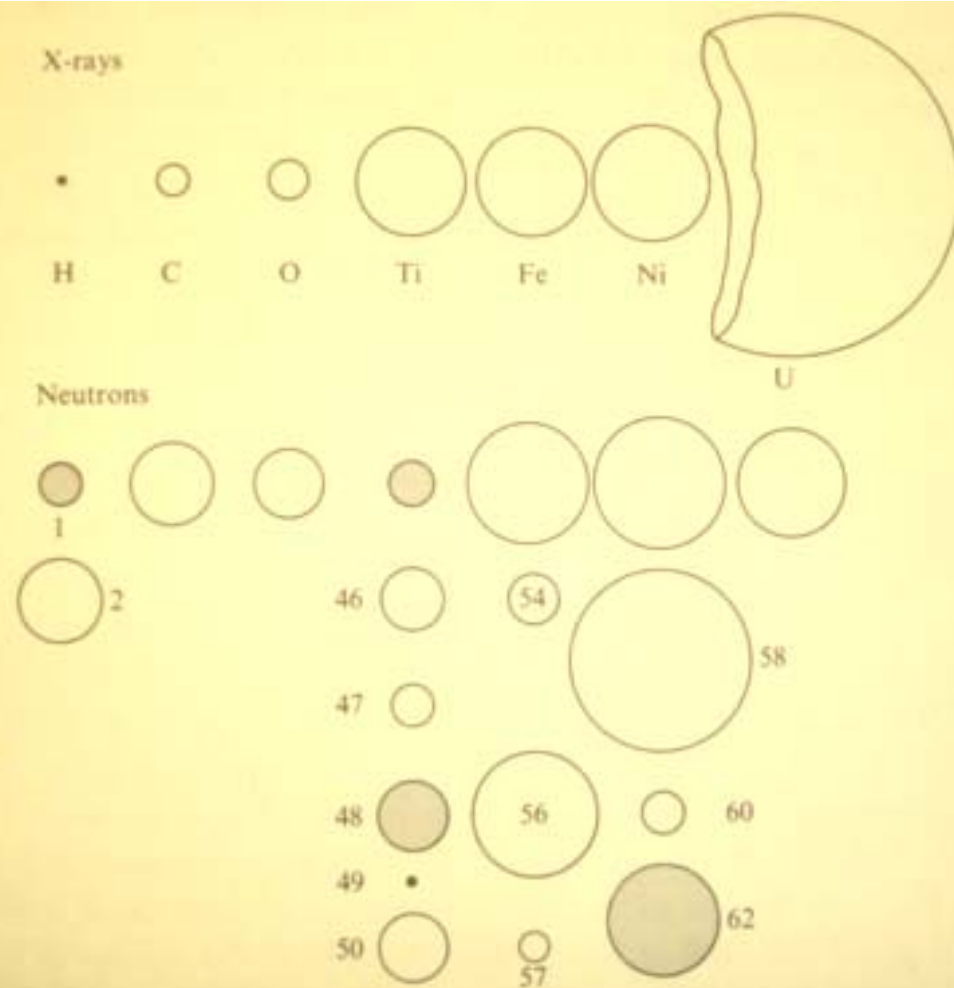


FIG. 25. The visibilities of some atoms and isotopes for X-rays and neutrons. The radii of the circles are proportional to the scattering amplitude  $b$ . Negative values of  $b$  are indicated by the cross-hatched shading.

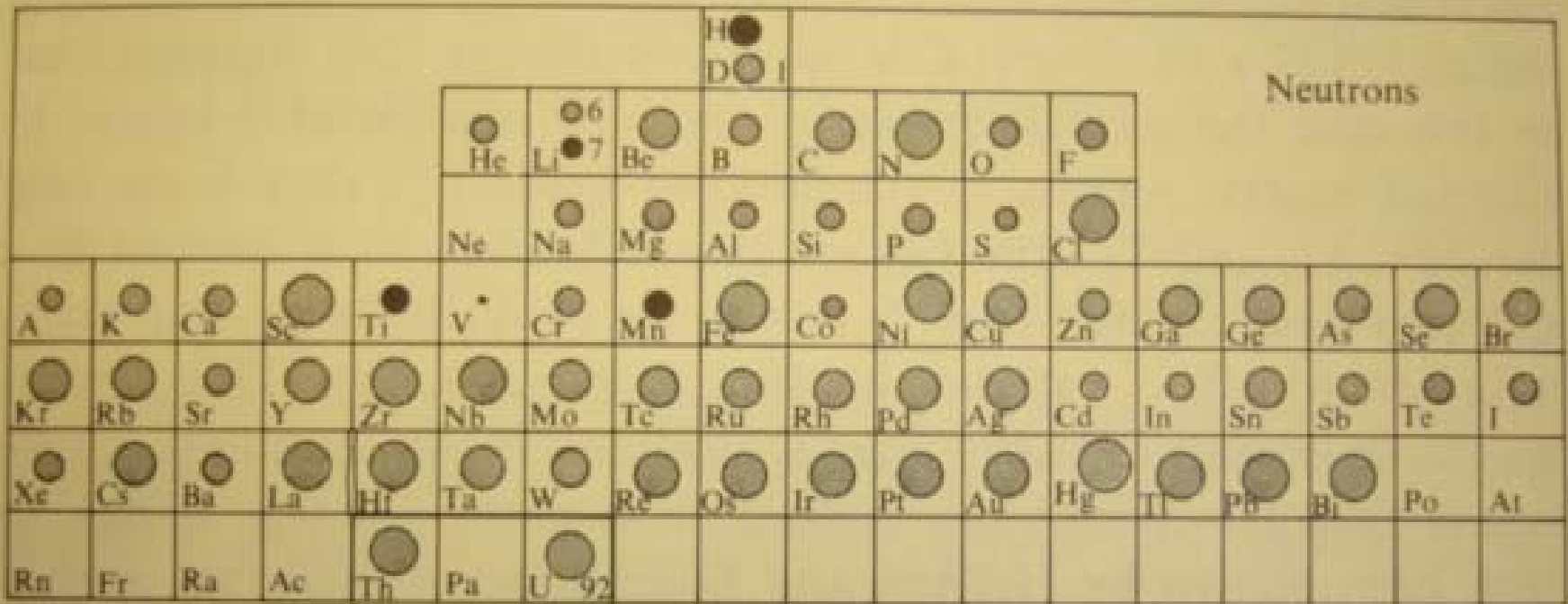


FIG 23. Diagrammatic representation of the neutron scattering cross-section of the elements. The radii of the circles are proportional to  $b$  and their areas are proportional to  $\mathcal{S}$ . The black areas shown for H, Li, Ti, and Mn indicate a negative value for  $b$ .

# Besondere Atome

- H stark inkohärent
- V fast nur inkohärent (kein Strukturbeitrag)
- Ti negative Streulänge (Null-Legierung möglich)
- Al gesamter Querschnitt (koh.+ink.+abs.) sehr gering  
→ geringe Schwächung des Strahls
- Cd, B, Gd, Eu, Sm sehr hohe Absorption

Anwendungen : H Moderator, Abschwächer

V Eichsubstanz

Al Konstruktion

Cd, Gd, B,  ${}^6\text{Li}$  ... Beam-Stop, Blenden,  
Kollimatoren