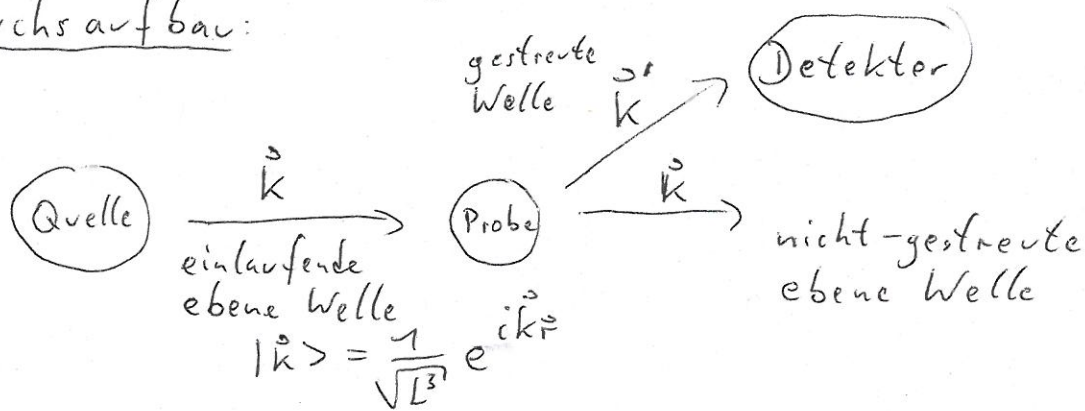


13. Beugung / Streuung am Kristall

- An einer periodischen Struktur kann man Beugung durchführen (z.B. optisches Gitter)
- Bei einem Kristall (also einer periodischen Anordnung von Atomen) wirken die Atome als Streuzentren für von außen zugeführter Strahlung

Versuchsaufbau:



Wichtig: λ im Bereich der Gitterkonstante, damit Interferenz beobachtet werden kann

(Bragg's Gesetz $n\lambda = 2d \sin \theta$, $n=1,2,\dots$)

$\Rightarrow$ Röntgenlicht (X-rays), Materiewelle wie Neutronen e^- , Myonen

Voraussetzungen:

- die gestreute Welle wird nicht nochmal gestreut (keine Doppelstreuung)
- Strahlungsquelle (Q) und Detektor (D) sind hinreichend weit von der Streumaterie entfernt, so daß einlaufende und auslaufende Welle als eben betrachtet werden können
- $V(\vec{r})$: Streupotential, $\rho(\vec{r})$: Streudichte

Benutzen:

Fermis Goldene Regel (erste störungstheoretische Näherung)

- Übergangsrate pro Zeiteinheit für eine Streuung von einem Teilchen mit $\vec{k}$ zu $\vec{k}'$

$$\Gamma(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}})$$

Energieerhaltung (elastische Streuung) ($|\vec{k}| = |\vec{k}'|$)

- Matrixelement

$$\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \int d\vec{r} \frac{e^{-i\vec{k}'\vec{r}}}{\sqrt{L^3}} V(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{L^3}} = \frac{1}{L^3} \int d\vec{r} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}} V(\vec{r})$$

$\vec{k}$ wechselwirkt mit V und dann auf $\vec{k}'$ projiziert

Fourier Transformation

- gültig für periodische oder nicht-periodische Potentiale (Streudichten)
- Streudichte, Streupotential kann man sich wie ein örtlich variierenden optischen Index vorstellen (mehr später)
- $\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle$ ist Null für periodische Potentiale, außer für $\vec{G} = \vec{k}' - \vec{k} = \text{reziproker Gittervektor}$

Beweis: sei $\vec{r} = \vec{R} + \vec{x}$ $\vec{R}$: Gittervektor
 $\vec{x}$: Position in der Einheitszelle EZ

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle &= \frac{1}{L^3} \int d\vec{r} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}} V(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{R}} \int_{EZ} d\vec{x} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})(\vec{x}+\vec{R})} V(\vec{x}+\vec{R}) \end{aligned}$$

- mit periodischen Potential $V(\vec{x}+\vec{R}) = V(\vec{x})$

$$\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^3} \left[\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{R}} \right] \left[\int_{EZ} d\vec{x} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{x}} V(\vec{x}) \right] \quad (13.1)$$

$= 0$ außer für $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$ (Ewald-Kugel)

Lave-Gleichung

Lave-Bedingung

(13.2)

Geometrische Deutung in 13.1.4

Poisson's Summationsformel

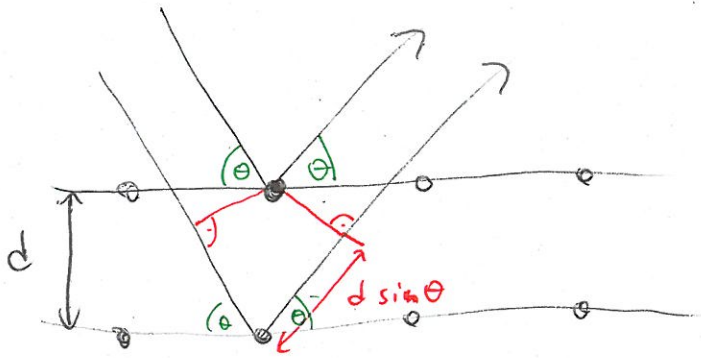
$\Rightarrow$ Erhaltung von Kristall-Impuls

$$\text{Eq. 12.1: } e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1$$

Def. vom reziproken Gitter

siehe 12.1.3

13.1.2 Beugungsmethode: Bragg-Bedingung für Lichtbeugung



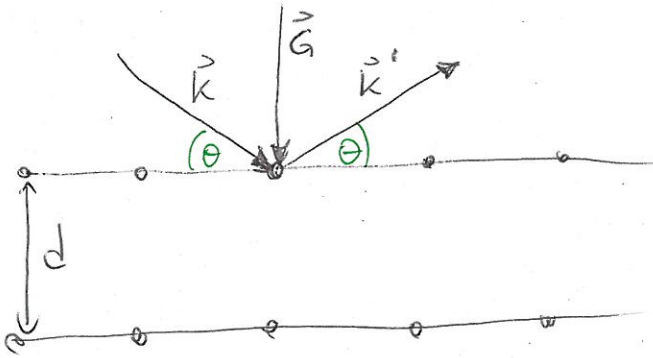
zusätzlicher Weg = $2 d \sin \theta$

Konstruktive Interferenz

$$n \lambda = 2 d \sin \theta \quad n = 1, 2, \dots$$

Bragg's Gesetz

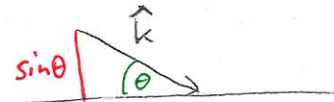
13.1.3 Äquivalenz von Laue und Bragg Bedingung



- Abstand zwischen Ebenen

(Eq. 12.8) $d = 2\pi / |\vec{G}_{\min}|$

- Geometrie: $\hat{k} \cdot \hat{G} = \sin \theta = -\hat{k}' \cdot \hat{G}$



$\wedge$ = Einheitsvektor

- Laue-Bedingung

$$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G} \quad \text{mit} \quad |\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} (\hat{k}' - \hat{k}) = \vec{G} \quad | \cdot \hat{G}$$

$$\hat{G} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} (\hat{k}' + \hat{k}) = \hat{G} \cdot \vec{G}$$

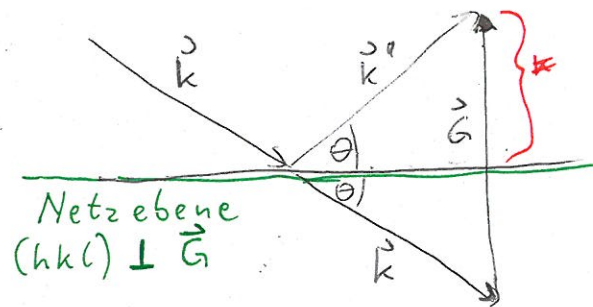
$$\frac{2\pi}{\lambda} (\sin \theta' - \sin \theta) = |\vec{G}| \quad \theta = -\theta'$$

$$\frac{2\pi}{|\vec{G}|} (2 \sin \theta) = \lambda \quad | \text{ mit Eq. 12.8}$$

$$2 d \sin \theta = n \lambda \Rightarrow \text{Bragg-Bedingung}$$

$\uparrow$
 $n=1$ für $\vec{G}_{\min}$

$$k' \sin \theta = k \sin \theta$$



13.1.4 Geometrische Deutung (Veranschaulichung) der Streubedingung

Lave-Bedingung: $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G}$

$$\Rightarrow \vec{k}' = \vec{G} + \vec{k} \quad |^2$$

$$|\vec{k}'|^2 = |\vec{k}|^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{G} + |\vec{G}|^2$$

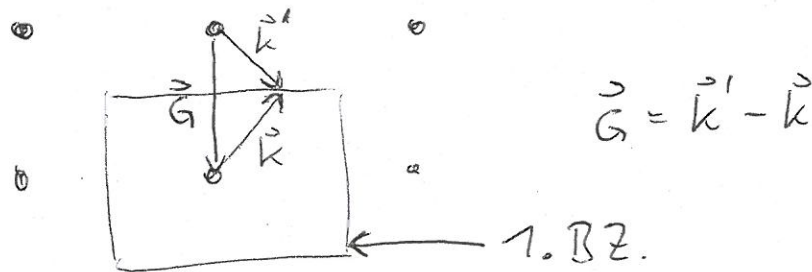
mit elastischer Streuung: $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$

$$\Rightarrow 2\vec{k} \cdot \vec{G} + |\vec{G}|^2 = 0$$

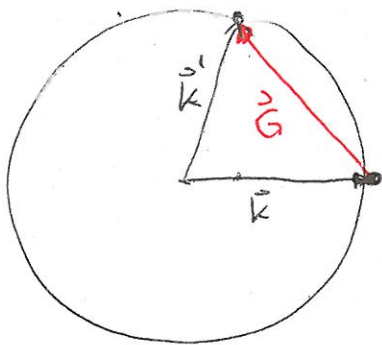
mit $\hat{G} = \frac{\vec{G}}{|\vec{G}|}$ (Einheitsvektor) und $\vec{G} \Rightarrow -\vec{G}$ auch reziproker Gittervektor

$$\Rightarrow \vec{k} \cdot \hat{G} = \frac{|\vec{G}|}{2}$$

$\Rightarrow$ Projektion von Wellenvektor $\vec{k}$ auf $\hat{G}$ ist $\frac{|\vec{G}|}{2}$



Ewald Konstruktion



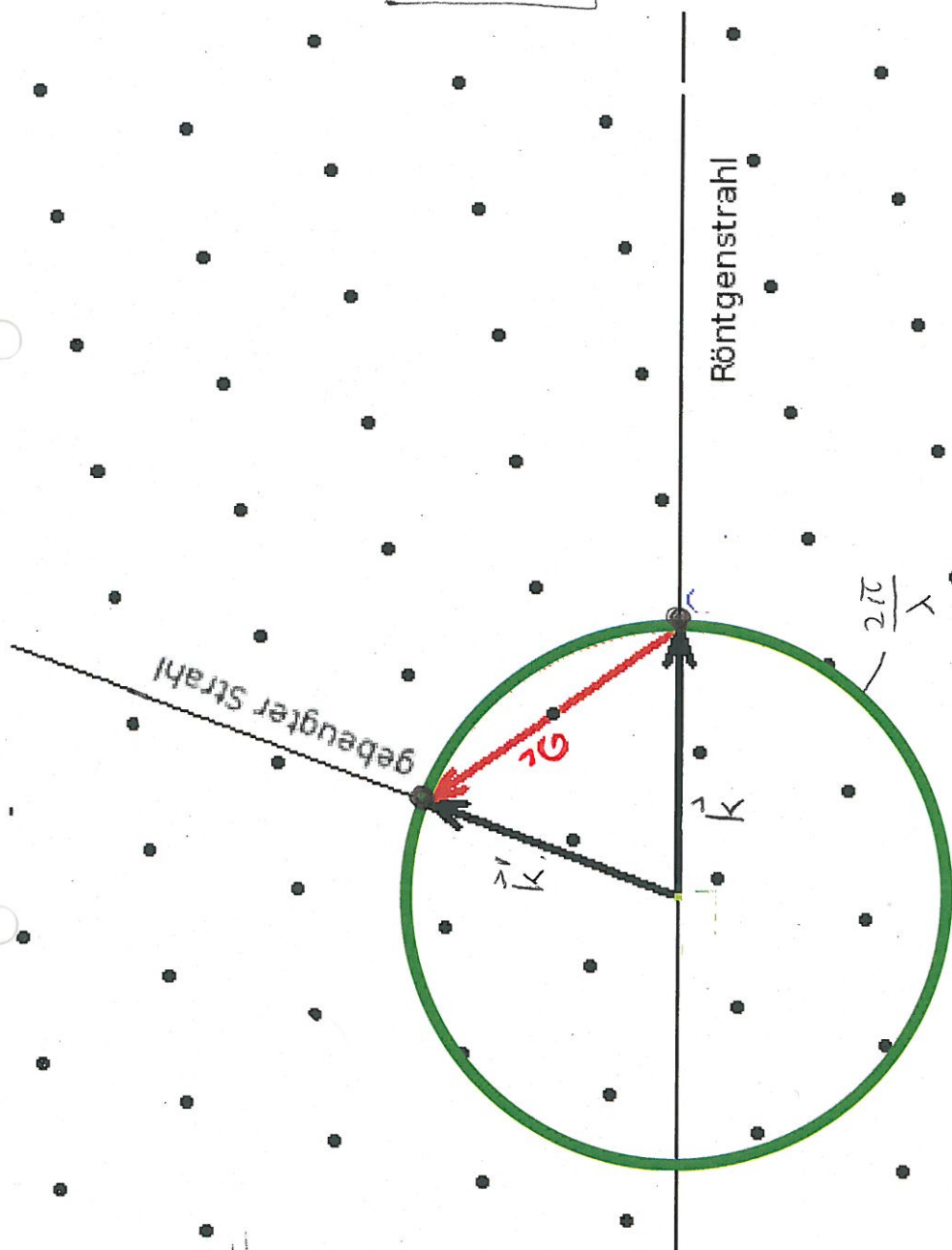
- 1) Wähle einen beliebigen Punkt des reziproken Gitters
- 2) $\vec{k}$ deutet auf diesen Punkt
- 3) Zeichne eine Kugel (Ewald-Kugel)
 $|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda}$
- 4) alle Punkte des reziproken Gitters, die auf die Kugel fallen, erfüllen die Streubedingung

- im Allgemeinen gibt es bei festem λ (also feste Wellenlänge und Richtung) keine Reflexe
- Deshalb betrachtet man entweder ein kontinuierliches Spektrum der Wellenlänge bei fester Richtung (Lave-Verfahren) oder verändert die Richtung (Drehkristall) bei festem λ

Ewald-Kugel

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$$

Laue-Bedingung



Lave - Verfahren: - kontinuierliches Spektrum von λ
- feste Richtung

Drehkristall - Verfahren: - λ fest
- alle Richtungen abfahren

Debye - Scherrer - Polykristall - Verfahren: - λ fest
- alle Richtungen
da Polykristall
(mehr später)

13.2 Streuamplitude

○ Fermis Goldene Regel für die Übergangsrate

$$\Gamma(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}})$$

Eq. 13.1

$$\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \underbrace{\frac{1}{L^3} \sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}}}_{\sim \text{Lave-Bedingung}} \underbrace{\int_{Ez} d\vec{x} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}} V(\vec{x})}_{\sim \text{Strukturfaktor}}$$

Strukturfaktor:

$$S(\vec{G}) = \int_{Ez} d\vec{x} e^{i\vec{G} \cdot \vec{x}} V(\vec{x}) \quad (13.5)$$

⇒ Streuintensität

für die Gitterebenen
definiert mit (hkl)

$$I_{(hkl)} \sim |S_{(hkl)}|^2 \quad (13.6)$$

• gute Näherung: das Streupotential ist die Summe der Streupotentiale aller Atome in der Ez

$$V(\vec{x}) = \sum_{\substack{\text{atom } j \\ Ez}} V_j(\vec{x} - \vec{x}_j) \quad \vec{x}_j: \text{Position von Kern } j \text{ in Ez}$$

13.2.1 Streuamplitude von Neutronen

Neutronen: nicht geladene Teilchen

$\Rightarrow$ streuen hauptsächlich an den Atomkernen
durch die Kernkräfte

$\Rightarrow$ sehr kurze Reichweite

$\Rightarrow \approx$ delta-Fkt.

$$V(\vec{x}) = \sum_{\substack{\text{atom } j \\ \text{EZ}}} f_j \delta(\vec{x} - \vec{x}_j) \quad \vec{x}_j: \text{Position von Kern } j \text{ in EZ}$$

f_j : Atomformfaktor

$$f_j = \frac{2\pi \hbar^2 b_j}{m}$$

m : Masse von Neutron

b_j : nukleare Streulänge

in Eq. 13.5 $\Rightarrow$

Strukturfaktor $S(\vec{G}) \sim \sum_{\substack{\text{atom } j \\ \text{EZ}}} b_j e^{i\vec{G}\vec{x}_j} \quad (13.7)$

$\nearrow$ Tabellen

13.2.2 Streuamplitude von X-rays (Röntgenstrahlen)

• X-rays streuen hauptsächlich an e^-

da $\frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2$ viel größer für e^- als für Kerne

da Massen $m_e \ll m_{\text{atom}}$

$\Rightarrow V(\vec{x})$ ist proportional zur e^- -Dichte

$$V_j(\vec{x} - \vec{x}_j) = Z_j g_j(\vec{x} - \vec{x}_j)$$

Z_j : Atomnummer von Atom j

g_j : Reichweite, ungefähr die Atomgröße

$$\Rightarrow S(\vec{G}) = \sum_{\substack{\text{atom } j \\ \text{EZ}}} f_j(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{x}_j}$$

mit dem Formfaktor $f_j(\vec{G})$ proportional zu Z_j

- oft $f_j(\vec{G}) \approx \text{konstant}$
- $f_j(\vec{G})$ ist die Fourier-Transformation des Streupotential

$$f_j(\vec{G}) = \int d\vec{x} e^{i\vec{G}\vec{x}} V_j(\vec{x})$$

mit $V_j(\vec{x})$ proportional zur Elektronendichte von Atom j

② Vergleich Neutronen $\Leftrightarrow$ X-rays Streuung

X-rays: $f_j \sim Z_j \Rightarrow$ starke Streuung von schweren Atomen, schwache Streuung für kleine Atome wie Wasserstoff

- schwierige Unterscheidung von Atomen mit ähnlichen Z_j
- f_j hängt vom Winkel ab und von $\vec{G}$

Neutronen: - Streulänge b_j variiert sehr stark, manchmal sogar negativ

- Wasserstoff streut stark
- unabhängig von $\vec{G}$

○ 13.2.3 Elektronenstreuung

ähnlich, aber komplizierter

$S_{(hkl)}$ kann direkt bestimmt werden, nicht nur $|S_{(hkl)}|^2$

13.2.4 Einfache Beispiele

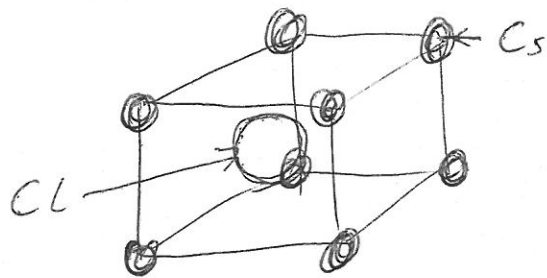
(Eq. 13.6) $\Rightarrow I_{(hkl)} \sim |S_{(hkl)}|^2$

für orthogonale Gittervektoren

$$S_{(hkl)} = \sum_{\substack{\text{atom } j \\ \in \mathbb{Z}}} f_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} \quad (13.11)$$

$[x_j, y_j, z_j]$: Koordinaten von Atom j

1. Beispiel Caesium Chlor CsCl



Einfach kubisch, $Z = 2$
mit Basis

$$\text{Cs } [0, 0, 0]$$

$$\text{Cl } \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$$

Struktur-Faktor

↓ Atomformfaktor

$$S_{(hkl)} = f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cl}} e^{2\pi i (h, k, l) \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]}$$

$$= f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cl}} (-1)^{h+k+l}$$

13.3 Auswahlregeln (Systematische Auslöschung)

2. Beispiel: reines Caesium Cs

bcc $\Rightarrow$ einfach kubisch mit Basis

$$\text{Cs } [0, 0, 0]$$

$$\text{Cs } \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$$

$$S_{(hkl)} = f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cs}} e^{2\pi i (h, k, l) \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]}$$

$$= f_{\text{Cs}} [1 + (-1)^{h+k+l}]$$

$\Rightarrow$ verschwindet für $h+k+l = \text{ungerade}$

$\Rightarrow$ die zusätzliche Ebenen führen zum Auslöschen

3. Beispiel: Kupfer, fcc = einfach kubisch mit Basis

$$[0, 0, 0], \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right], \left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right], \left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$$

$$S_{(hkl)} = f_{\text{Cu}} \left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)} \right]$$

$\Rightarrow$ verschwindet, außer für alle h, k, l entweder gerade oder ungerade

Zusammenfassung der Auswahlregel

(einfach kubisch) sc : alle h, k, l erlaubt

bcc : $h+k+l$ muß gerade sein

fcc : h, k, l müssen alle gerade oder ungerade sein

- sehr allgemein, z.B. face-centered orthorhombic ist wie fcc
- Auswahlregeln gelten auch, wenn die Basis viele Atome hat

Beispiel 4: Zink Schwefel, ZnS , fcc mit Basis

$$\begin{aligned}\text{Zn} & [0, 0, 0] \\ \text{S} & \left[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right]\end{aligned}$$

- mit fcc ist einfach kubisch mit Basis

$$[0, 0, 0], \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right], \left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right], \left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$$

folgt eine Basis von 8 Atomen

$$\text{Zn} : [0, 0, 0], \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right], \left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right], \left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$$

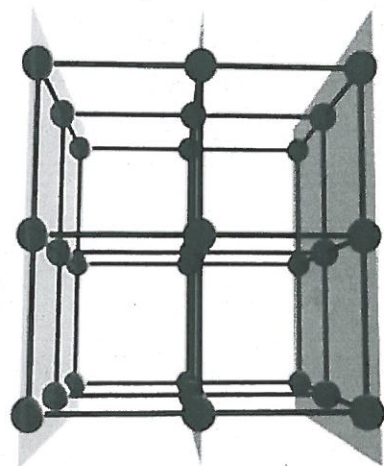
$$\text{S} : \left[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right], \left[\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}\right], \left[\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right], \left[\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right]$$

$$\Rightarrow S(hkl) = f_{\text{Zn}} \left[1 + e^{2\pi i (h, k, l) \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]} + \dots \right] + f_{\text{S}} \left[e^{2\pi i (h, k, l) \left[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right]} + \dots \right]$$

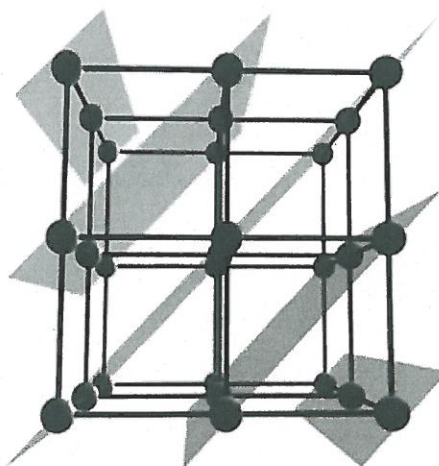
$$\Rightarrow S(hkl) = \underbrace{\left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)} \right]}_{\text{verschwindet wie fcc}} \cdot \underbrace{\left[f_{\text{Zn}} + f_{\text{S}} e^{2\pi i (h, k, l) \left[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right]} \right]}_{\text{Feinstruktur}}$$

Allgemein

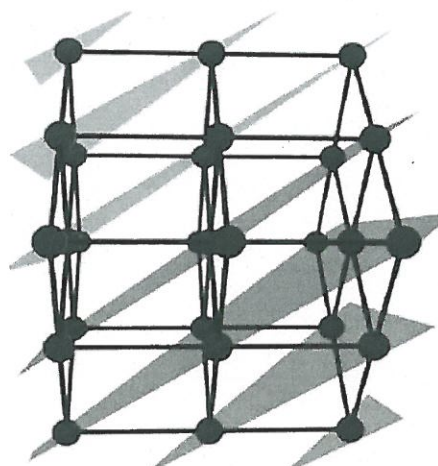
$$S(h, k, l) = \int_{\text{Gitter}} (h, k, l) \times \int_{\text{Basis}} (h, k, l) \quad (13.13)$$



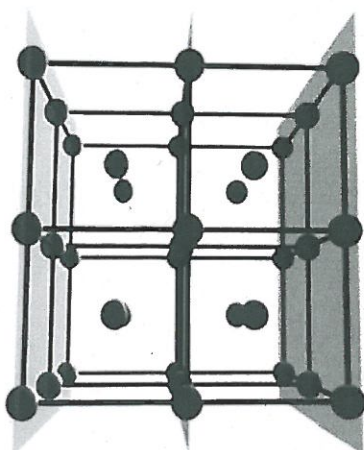
(010) family of lattice planes



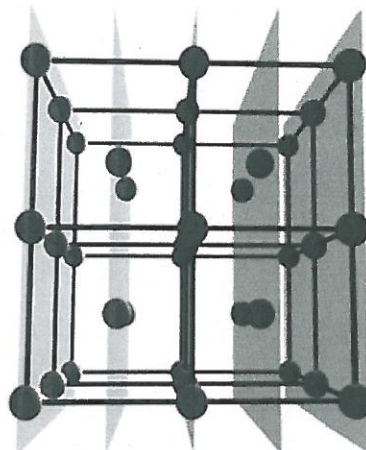
(110) family of lattice planes



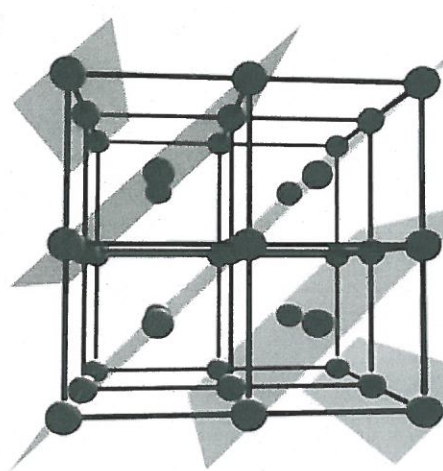
(111) family of lattice planes



(010) family of planes
(not all lattice points included)



(020) family of lattice planes



(110) family of lattice planes

13.4 Geometrische Interpretation der Auswahlregeln

- benutzen konventionelle (orthogonale Achsen) für EZ anstatt primitive EZ

⇒ nicht alle Miller Indizes korrespondieren zu Ebenenschar

z.B. sc-Gitter $(hkl) = (010)$

⇒ keine Ebene geht durch das Zentrum vom bcc-Gitter

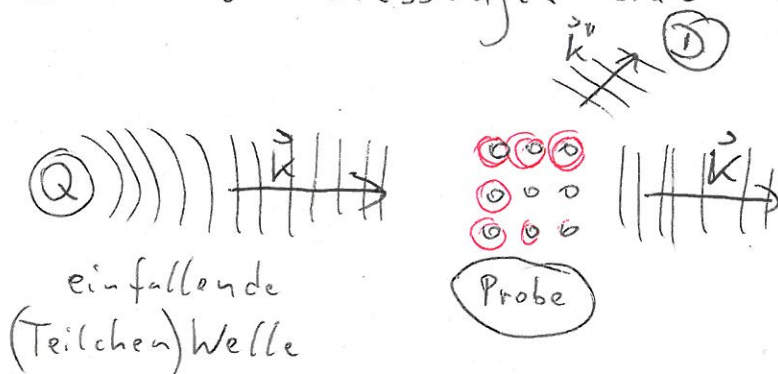
⇒ (010) ist kein reziproker Gittervektor des bcc-Gitters

- jedoch ist (020) ein Gittervektor des bcc

- fehlende Ebene vom (010) macht destruktive Interferenz im bcc-Gitter

13.5 Experimentelle Streumethoden

- alle Streumessungen sind analog:



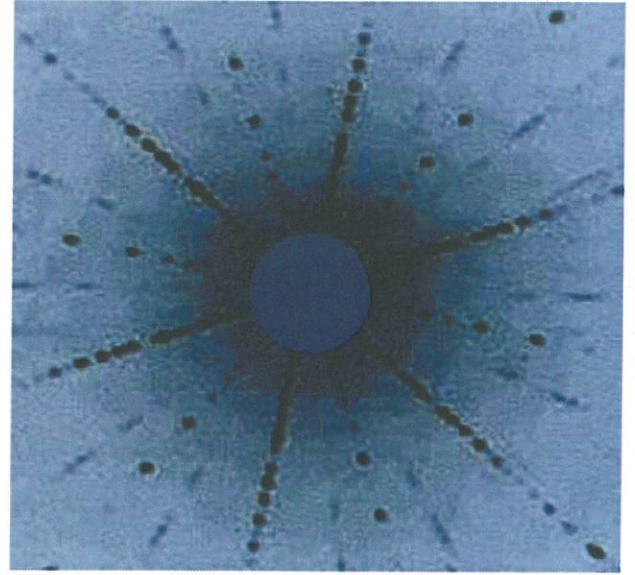
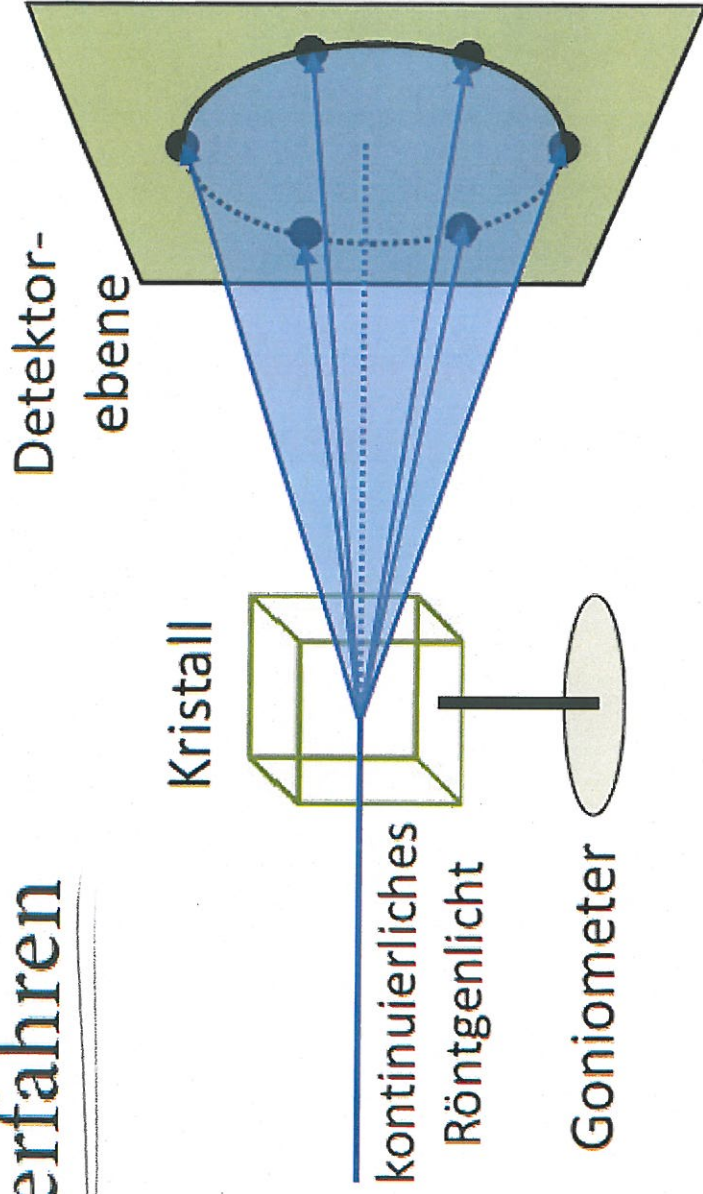
man mißt Streuwinkel und Streuintensität

⇒ Bestimmung von Gitterabständen

13.5.1 Lave Methode

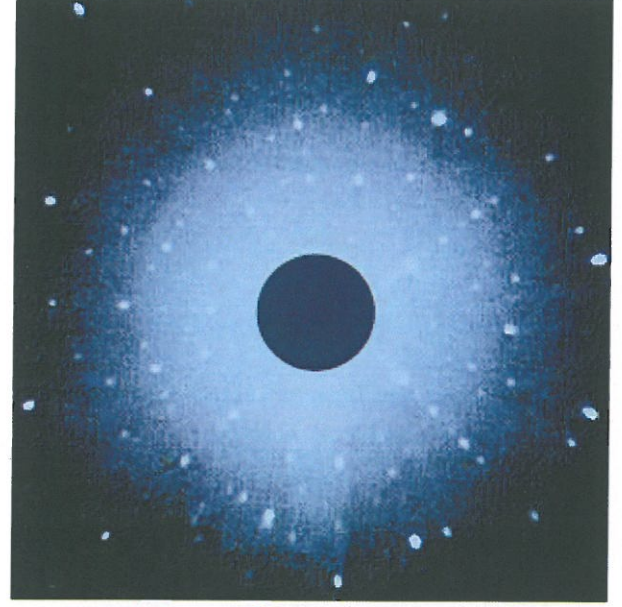
- großer Kristall
- kontinuierliches Spektrum von Wellenlänge λ
- feste Richtung
- mißt in der Detektorebene ein Punktmuster
- ⇒ jeder Punkt gehört zu einer bestimmten Ebenenschar mit Millersche Indizes (hkl)

13.5.1 Laue-Verfahren



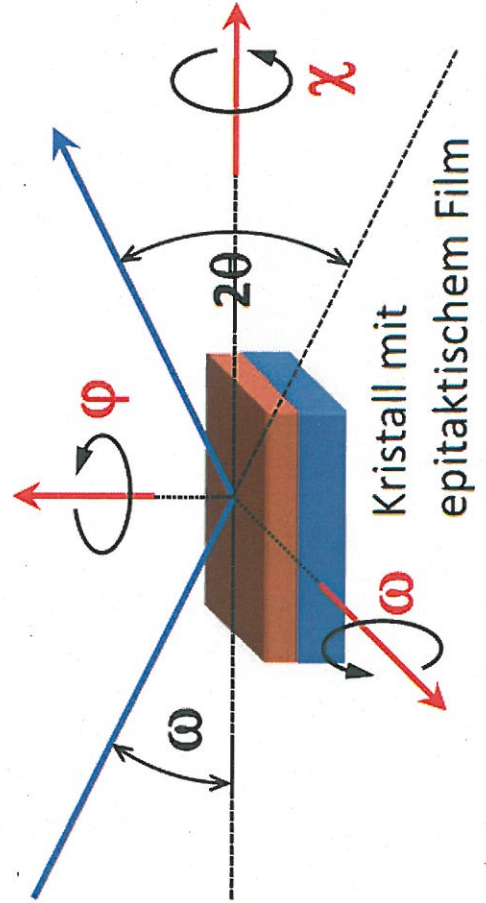
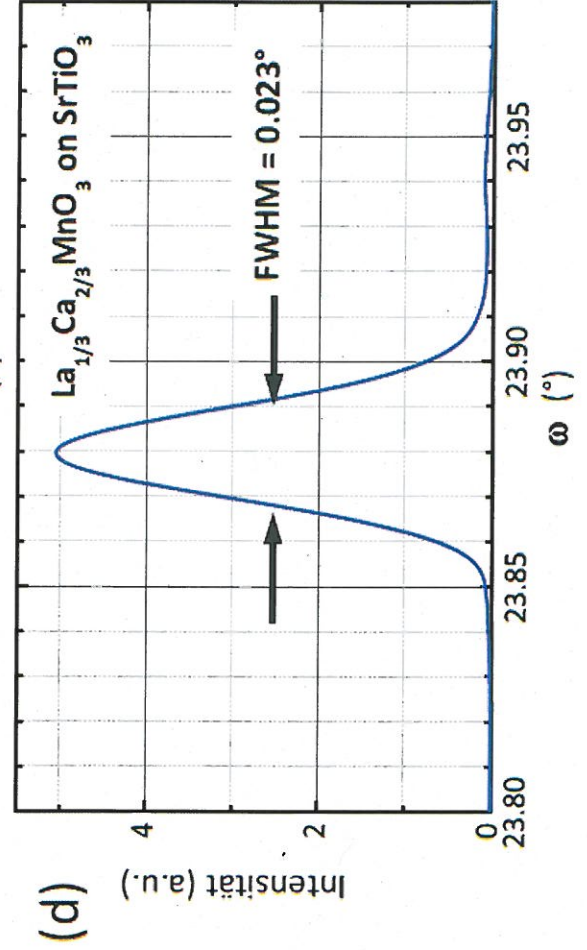
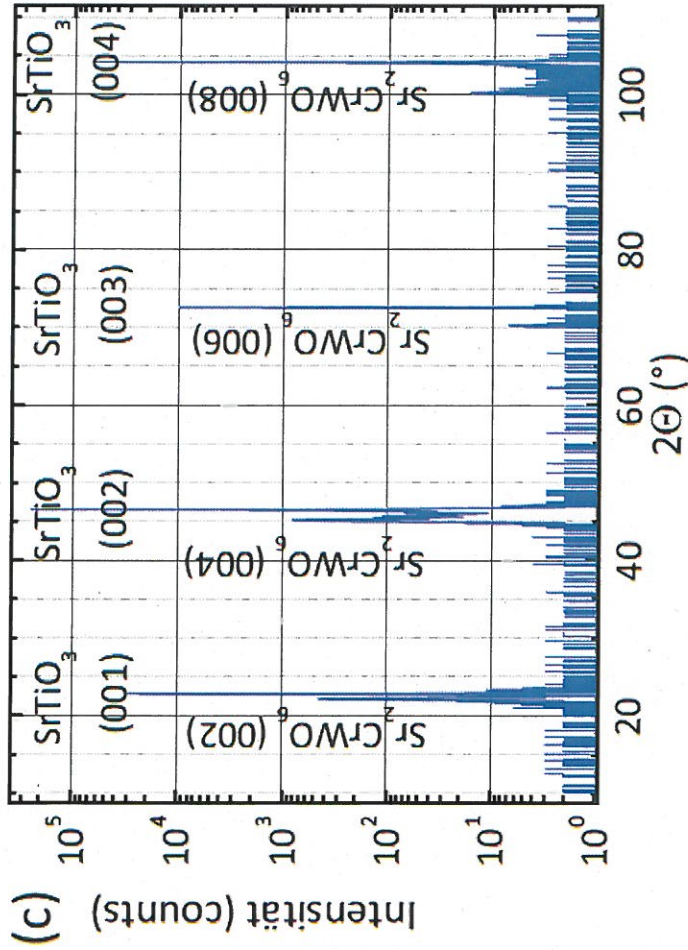
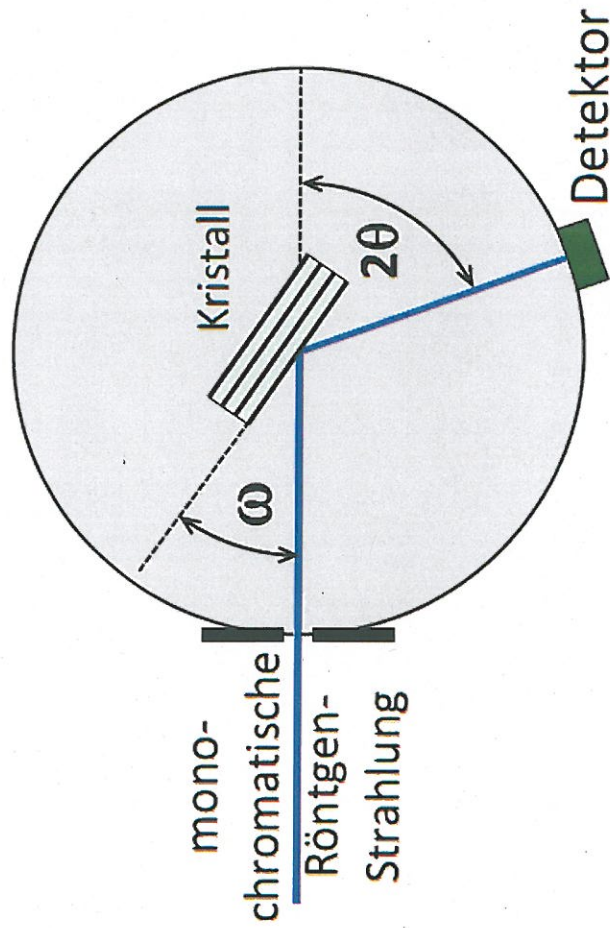
6H-SiC in
(0001)-Orientierung

6-zählige Symmetrie
der hexagonalen
Struktur

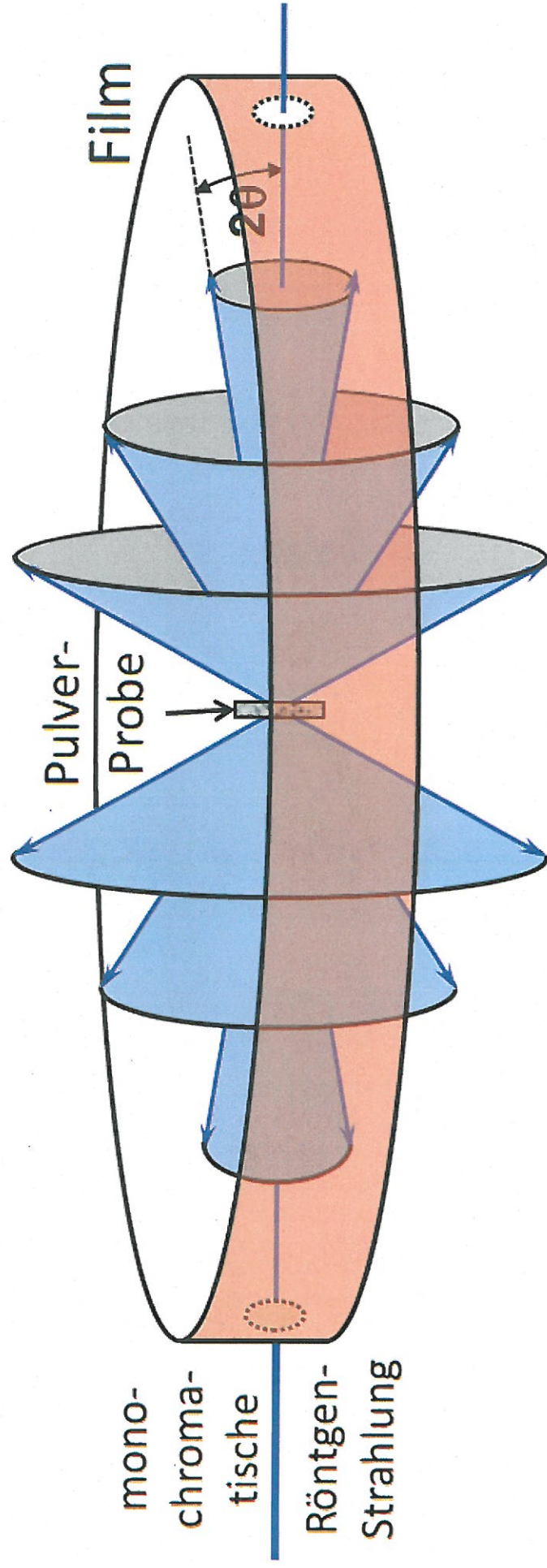


Si

4-zählige Symn
der Diamant-
Struktur



13.5.3 Debye-Scherrer-Verfahren



- jede Ebenenschar greift sich aus dem kontinuierlichen Röntgenspektrum genau die Wellenlänge heraus, für die die Bragg-Bedingung erfüllt ist
- z.B. Röntgenstrahl entlang einer n -zähligen Drehachse
 $\Rightarrow$ Punktmuster hat ebenfalls eine n -zählige Symmetrie
- zur Bestimmung der Kristallsymmetrie und Ausrichten von Einkristallen
- unpraktisch für Strukturbestimmung

○ 13.5.2 Drehkristall Verfahren

- monochromatische Röntgen-Strahlen (λ fest)
- Kristall und Detektor werden gedreht
- Intensität bei 2θ -Winkel gemessen
- Kristall mit Goniometer um drei weitere Achsen drehen
 - $\rightarrow$ bei festem 2θ kann eine ω -Drehung die Mosaizität bei epitaktischen Filmen bestimmen
 - $\rightarrow \psi$ -Drehung um Textur der Films in der Ebene zu bestimmen

○ 13.5.3 Debye-Scherrer Verfahren

- monochromatische Röntgen-Strahlung (λ fest)
- Pulverprobe von mikro/nano-Kristallen
 - $\Rightarrow$ weisen alle möglichen Kristallrichtungen auf
 - $\Rightarrow$ Beugungsbedingung immer für Netzebenen erfüllt
 λ fest und θ beliebig
 - $\Rightarrow$ für gegebenen Millerschen Indizes und feste Einstrahlrichtung liegen die Reflexe auf einem Kegelmantel

⇒ auf einen ringförmigen Detektor (z.B. Film) werden kreisförmige Bogenstücke dieser Kegelmäntel detektiert

- keine "großen" Einkristalle nötig

Auswahlregeln

sc	alle h, k, l erlaubt
bcc	$h+k+l$ muß geradzahlig sein
fcc	h, k, l müssen alle geradzahlig oder ungeradzahlig sein

$\{hkl\}$	$N = h^2 + k^2 + l^2$	multiplicity	cubic	bcc	fcc
100	1	6	✓		
110	2	12	✓	✓	
111	3	8	✓		✓
200	4	6	✓	✓	✓
210	5	24	✓		
211	6	24	✓	✓	
220	8	12	✓	✓	✓
221	9	24	✓		
300	9	6	✓		
310	10	24	✓	✓	
311	11	24	✓		✓
222	12	8	✓	✓	✓
⋮	⋮	⋮	⋮		

Die Multiplizität beeinflusst die Intensität

$$I_{\{hkl\}} \sim \text{Mul}\{\{hkl\}\} \cdot |S_{\{hkl\}}|^2 \quad (13.14)$$

- für Neutronenstreuung einfach auszurechnen
- für Röntgenstrahlen schwierig, da $S = S(\vec{G})$ ← Strukturfaktor

$$(Eq. 13.8) \Rightarrow S(\vec{G}) = \sum_{\substack{\text{atom } j \\ \in Z}} f_j(\vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{x}_j}$$

← Atomformfaktor

$$(Eq. 13.9) \Rightarrow f_j(\vec{G}) = \int_{\text{all space}} d\vec{x} e^{i\vec{G} \cdot \vec{x}} V_j(\vec{x})$$

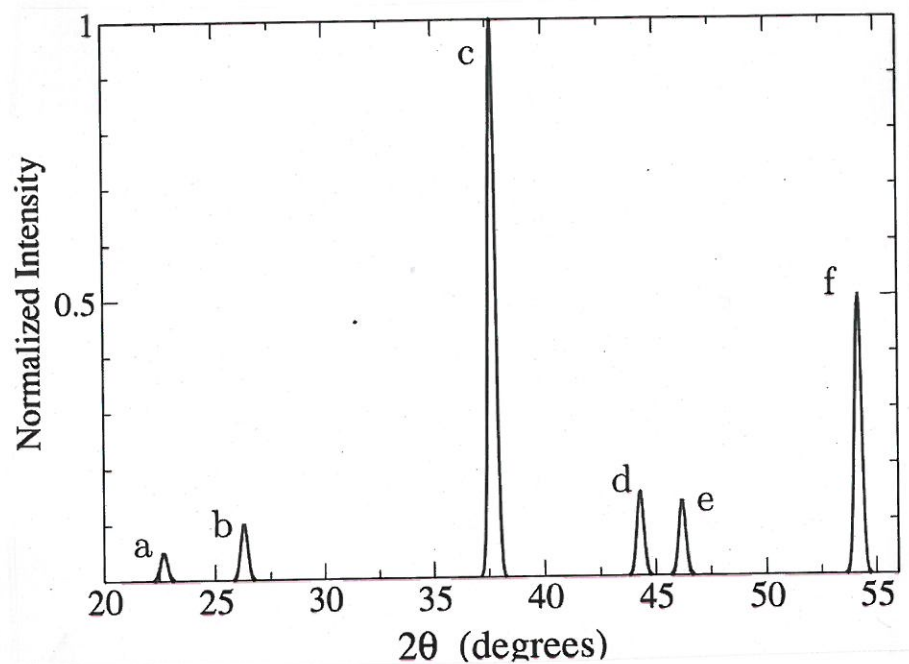
$$\approx \sim Z_j \left(\frac{\sin(x) - x \cos(x)}{x^3} \right) \quad \text{mit } x = |\vec{G}| r_0$$

für kleine Winkel ($\vec{G} \ll \frac{1}{r_0}$) $\Rightarrow f_j \sim Z_j$

- Debye-Waller Faktor: Temperaturabhängigkeit von $I_{\{hkl\}}$
- Lorentz - Polarisationskorrektur

Example: Pulver von PrO_2 , Mikrokristalle
Neutronenstreuung, $\lambda = 0.123 \text{ nm}$

Messung:



Eq. 12.12: Bragg's Gesetz

$$d(hkl) = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

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

peak	2θ	$d = \lambda / (2 \sin \theta)$	d_a^2/d^2	$3d_a^2/d^2$	$N = h^2 + k^2 + l^2$	$\{hkl\}$	$a = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$
a	22.7°	0.313 nm	1	3	3	111	.542 nm
b	26.3°	0.270 nm	1.33	3.99	4	200	.540 nm
c	37.7°	0.190 nm	2.69	8.07	8	220	.537 nm
d	44.3°	0.163 nm	3.67	11.01	11	311	.541 nm
e	46.2°	0.157 nm	3.97	11.91	12	222	.544 nm
f	54.2°	0.135 nm	5.35	16.05	16	400	.540 nm

- d_a ist d für peak a

- d_a^2/d^2 mit Faktor multiplizieren, um ganzzahlige Werte zu erhalten $\Rightarrow 3 d_a^2/d^2$

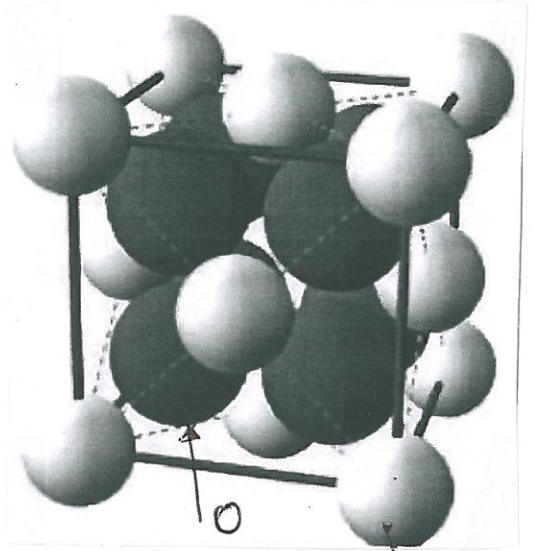
- $N = h^2 + k^2 + l^2 \Rightarrow \{hkl\} \Rightarrow a = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$

- Auswahlregel $\Rightarrow \text{fcc}$

- für Neutronenstreuung können wir die Intensität gut ausarbeiten
- für X-rays müßten wir die Winkelabhängigkeit des Formfaktors f_j kennen

PrO_2 - Kristall:

fcc mit Basis $\text{Pr} [0,0,0]$
 $\text{O} [\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$ und $[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}]$



mit Eq. 13.13:

$$S(hkl) = \underbrace{\left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)} \right]}_{\text{Auswahlregel}} * \underbrace{\left[b_{\text{Pr}} + b_{\text{O}} \left(e^{i\pi/2(h+k+l)} + e^{i\pi/2(h+k+3l)} \right) \right]}_{\text{Intensität}}$$

mit Eq. 13.14:

$$I_{\{hkl\}} \sim M_{\{hkl\}} \left| b_{\text{Pr}} + b_{\text{O}} \left(e^{i\pi/2(h+k+l)} + e^{i\pi/2(h+k+3l)} \right) \right|^2$$

Scattering Intensity			
peak	$\{hkl\}$	$I_{\{hkl\}}/C \propto M S ^2$	Measured Intensity
a	111	$8b_{\text{Pr}}^2$	0.05
b	200	$6[b_{\text{Pr}} - 2b_{\text{O}}]^2$	0.1
c	220	$12[b_{\text{Pr}} + 2b_{\text{O}}]^2$	1.0
d	311	$24b_{\text{Pr}}^2$	0.15
e	222	$8[b_{\text{Pr}} - 2b_{\text{O}}]^2$	0.13
f	400	$6[b_{\text{Pr}} + 2b_{\text{O}}]^2$	0.5

- wir entnehmen

$$I_d = 3I_a \quad I_c = 2I_f \quad I_c = \frac{4}{3}I_b$$

$\Rightarrow$ Übereinstimmung mit Messungen

$$\text{mit } \frac{I_c}{I_a} = \frac{12[b_{\text{Pr}} + 2b_{\text{O}}]^2}{8b_{\text{Pr}}^2} = 20 \quad \leftarrow \text{Messung}$$

$$\Rightarrow b_{\text{Pr}} = -0.43b_{\text{O}} \quad \text{or} \quad b_{\text{Pr}} = 0.75b_{\text{O}}$$

$$\text{mit } \frac{I_b}{I_a} = \frac{6[b_{\text{Pr}} - 2b_{\text{O}}]^2}{8b_{\text{Pr}}^2} \Rightarrow b_{\text{Pr}} = 0.75b_{\text{O}} \quad \text{or} \quad b_{\text{Pr}} = -3.1b_{\text{O}}$$