

Information aus Beugungsexperimenten

- ◆ Position der Beugungsmaxima

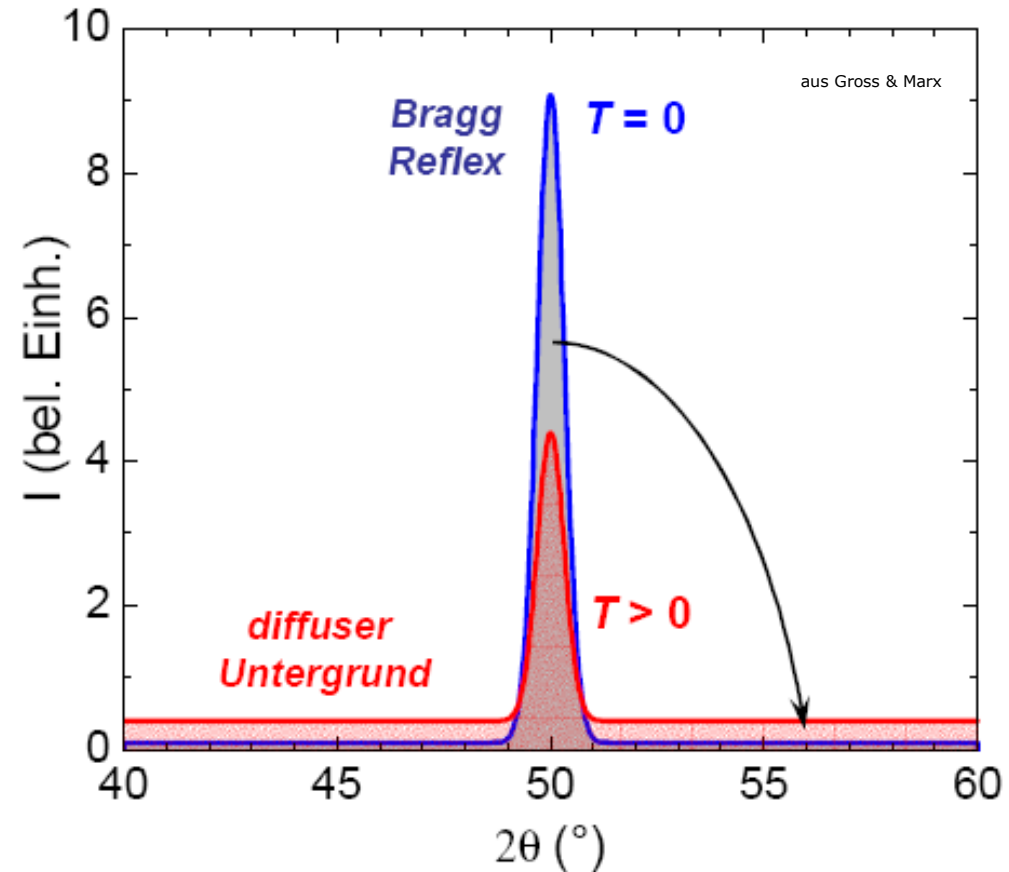
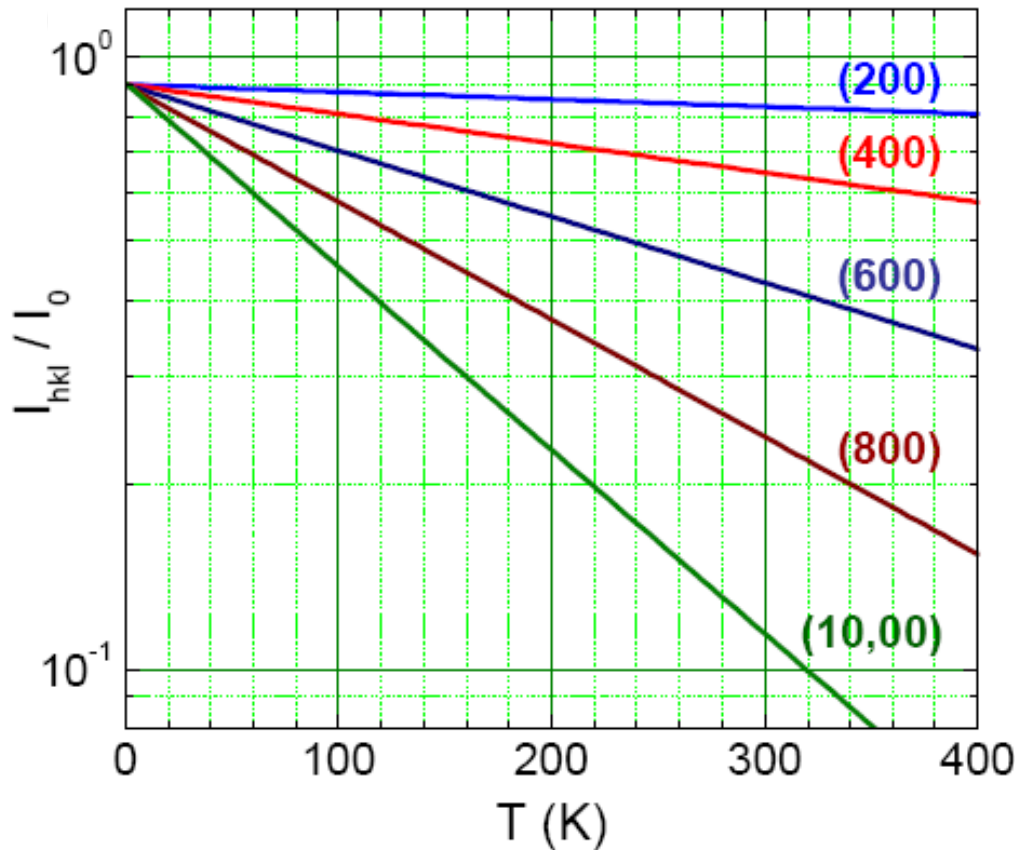
Periodizität / Gitter

- ◆ Intensität der Maxima

Struktur/Formfaktor — Basis

n.b. Phasenproblem

Temperaturabhängigkeit der Reflexintensität



T > 0: Atome vibrieren; Reflexe schwächer, aber gleich breit
 hohe Fourierkomponenten stärker betroffen
 Intensität 'geht' in diffusen Untergrund

Debye-Waller-Faktor $I \sim e^{-\alpha T}$ $I \sim e^{-\beta |G|}$

Peter Debye & NL
 Ivar Waller: S

$$\begin{aligned}
F &\sim \overline{\exp(i\vec{G}(\vec{R}+\vec{u}))} \\
&= F_0 \overline{\exp(i\vec{G}\vec{u})} \\
&\approx F_0 \left(1 + i\overline{\vec{G}\vec{u}} - \frac{1}{2} \overline{(\vec{G}\vec{u})^2} \right) \\
&= F_0 \left(1 + 0 - \frac{1}{2} \overline{|G|^2 |u|^2 \cos^2 \theta} \right)
\end{aligned}$$

$$\overline{\cos^2 \theta} = \frac{1}{4\pi} \int \cos^2 \theta \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \frac{1}{3}$$

$$\Rightarrow F \sim F_0 \left(1 - \frac{1}{6} |G|^2 \overline{u^2} \right)$$

$$\sim F_0 \exp\left(-\frac{1}{6} G^2 \overline{u^2}\right)$$

$$\Rightarrow I = I_0 \underbrace{\exp\left(-\frac{1}{3} \overline{u^2} G^2\right)}$$

Debye-Waller-Faktor

harmonischer Oszillator: $\bar{U} = \frac{3}{2} kT = \frac{1}{2} D \bar{u}^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 \bar{u}^2$

$$\Rightarrow \bar{u}^2 = \frac{3kT}{m\omega^2}$$

$$\Rightarrow I = I_0 \exp\left(-kT \frac{G^2}{m\omega^2}\right)$$

I nimmt mit T und |G| exponentiell ab.

→ Vibrationsamplitude abschätzbar.

Bei T=0: Nullpunktsenergie: $E_0 = \frac{3}{2} \hbar\omega$

Zur Hälfte kin. Energie: $\Rightarrow \bar{u} = \frac{3}{4} \hbar\omega$

$$\Rightarrow I = I_0 \exp\left(\frac{-\hbar G^2}{2m\omega}\right)$$

Mit $G = 10^{11} \text{ m}^{-1}$, $\omega = 10^{14} \text{ s}^{-1}$, $m = 10^{-25} \text{ kg}$:

Exponent ≈ -0.1 , also: $I/I_0 \approx 90 \%$

Sources

- X rays: bulk, surfaces, layers
- Neutrons: bulk
- Electrons: surfaces, thin films, milled samples
- Helium atoms: surfaces

Röntgenröhre

Bremsstrahlung

e^- im Kernfeld abgelenkt

kontinuierliches Spektrum

charakteristische Strahlung

Linienspektren

z. B. Cu:

$2p^{3/2} - 1s k_{\alpha 1}$ 8048 eV

$2p^{1/2} - 1s k_{\alpha 2}$ 8028 eV

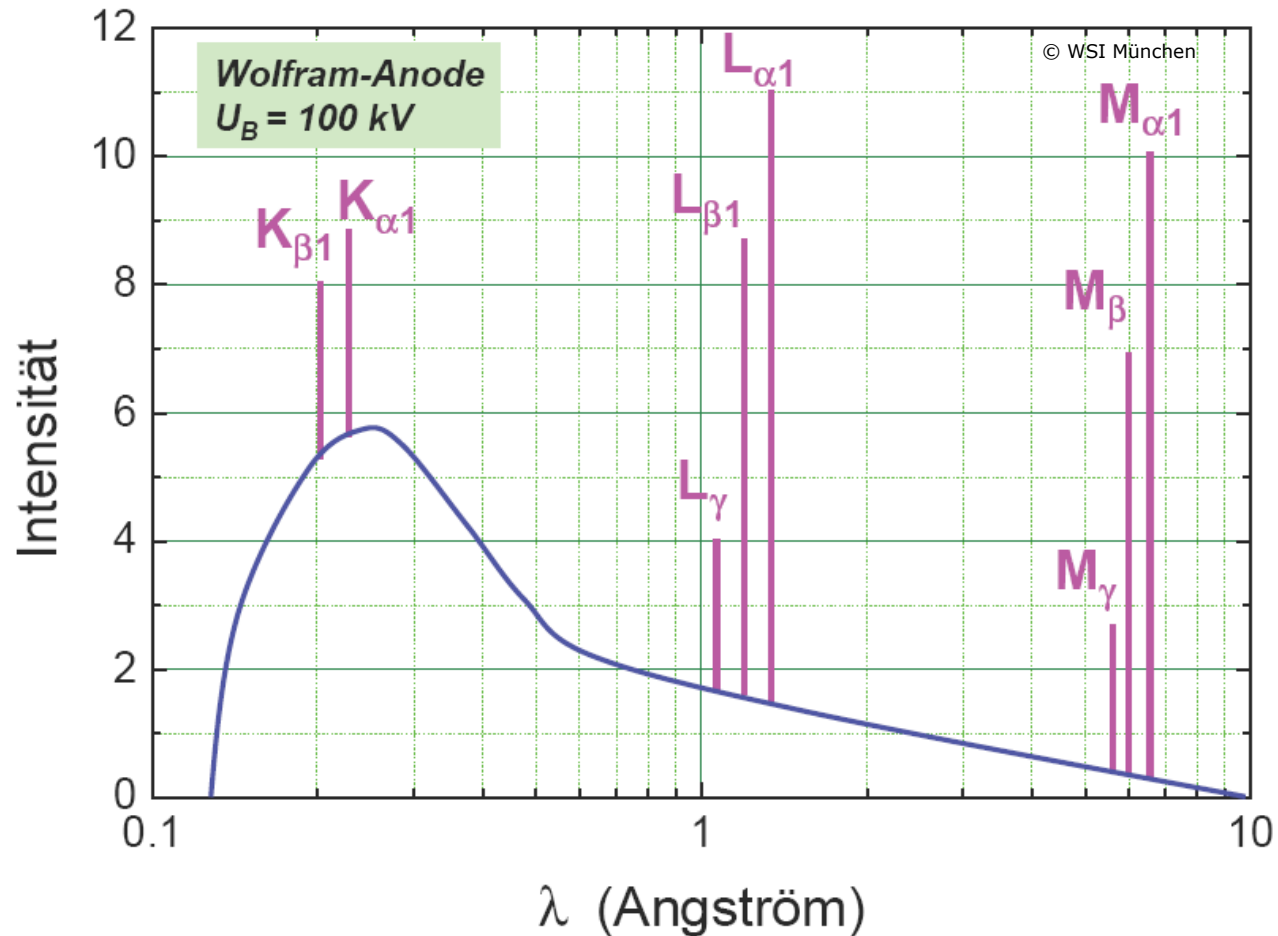
$3p^{1/2,3/2} - 1s k_{\beta}$ 8905 eV

einige eV breit

unpolarisiert

$\sim 1\%$ Wirkungsgrad

10 KW Röhre gibt 10 W Licht



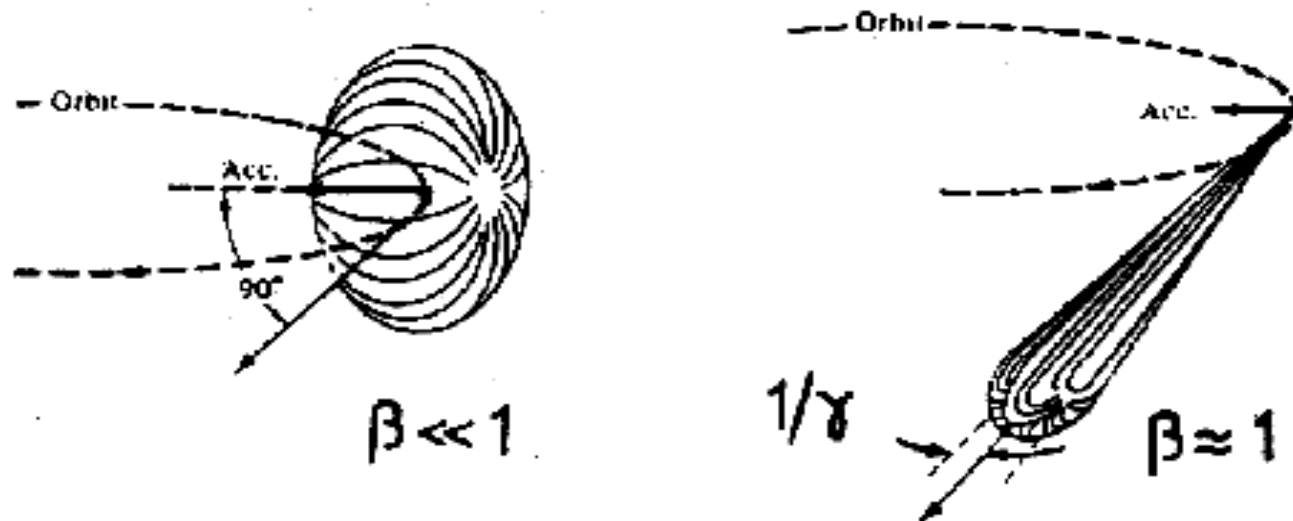
Synchrotronstrahlungsquellen

Bremsstrahlung hoch-relativistischer Elektronen

harte weiße Röntgenstrahlung emittiert in Konus γ^{-1} (7 mm auf 40 m)

ESRF, Grenoble:

$$E = 6 \text{ GeV}, \gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} \approx 12000, \text{ d.h. ca. } 1 \text{ m/s langsamer als } c$$



Emissionscharakteristiken eines kreisenden Elektrons
nichtrelativistischer und relativistischer Fall

Rubisco: protein controlling CO₂ uptake of green plants some 10¹¹ tons CO₂ per year

Unit cell:

$a \approx b = 15.72 \text{ nm}$

$c = 20.13 \text{ nm}$

$\approx 200.000 \text{ C, O, N atoms}$
 $+ 32 \text{ Mn}$

data:

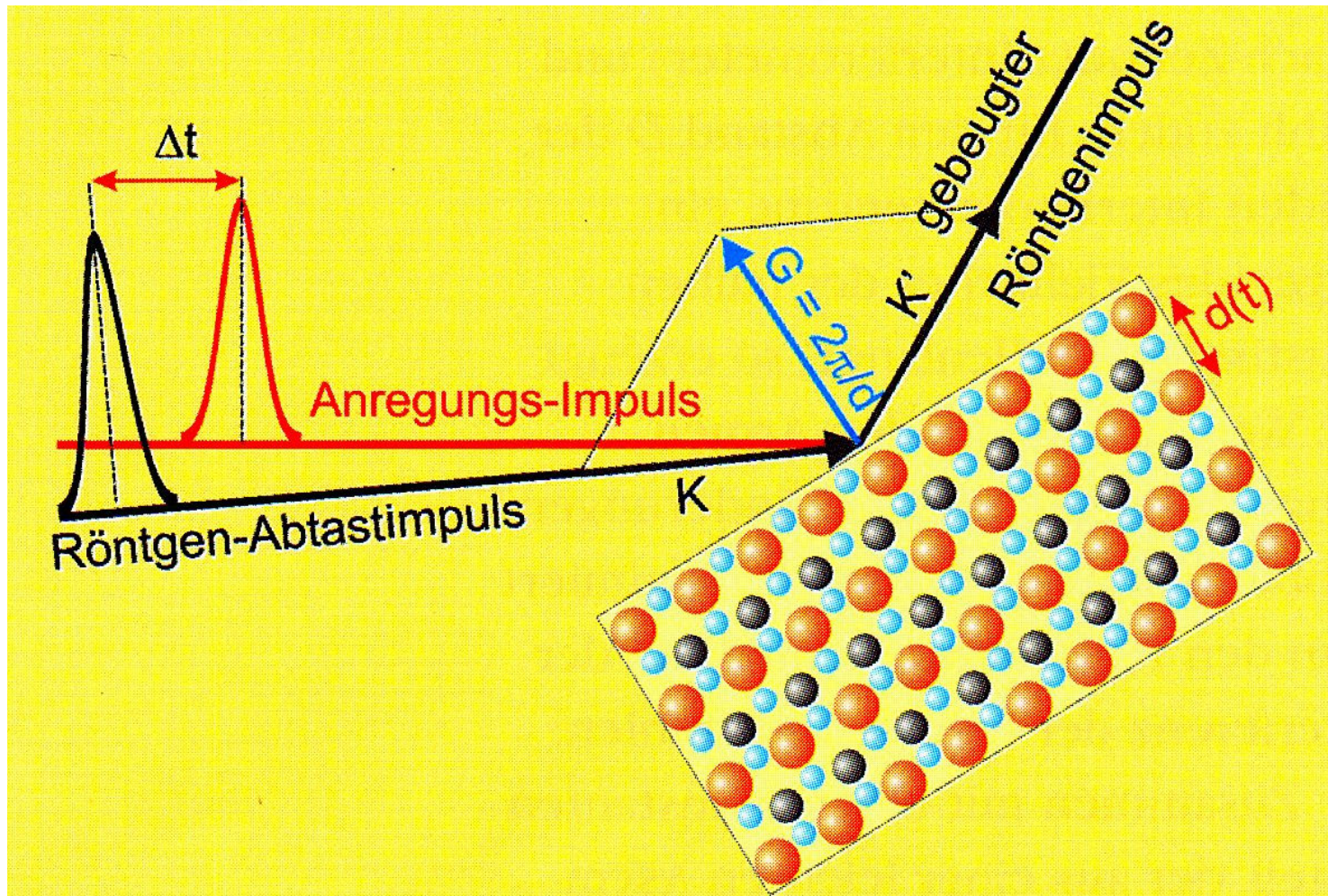
1s @Daresbury,

C.-I. Bränden et alii

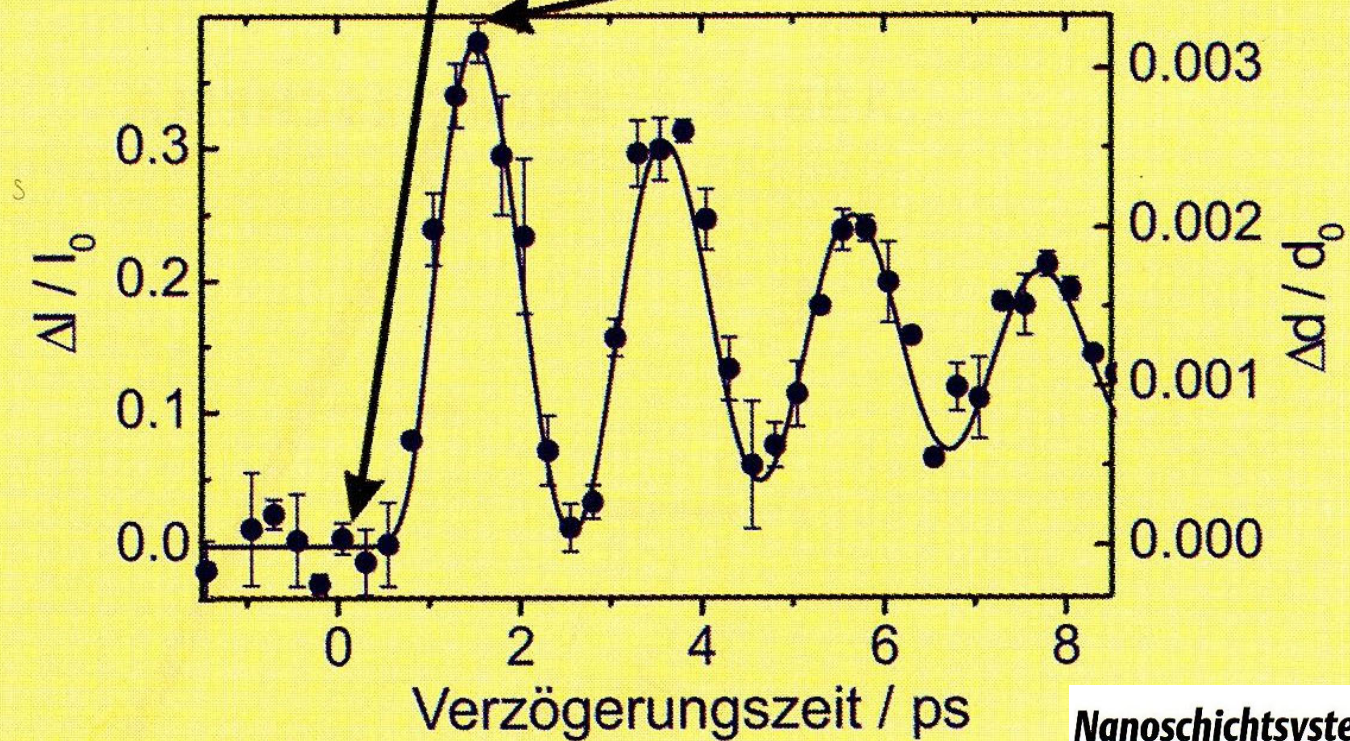
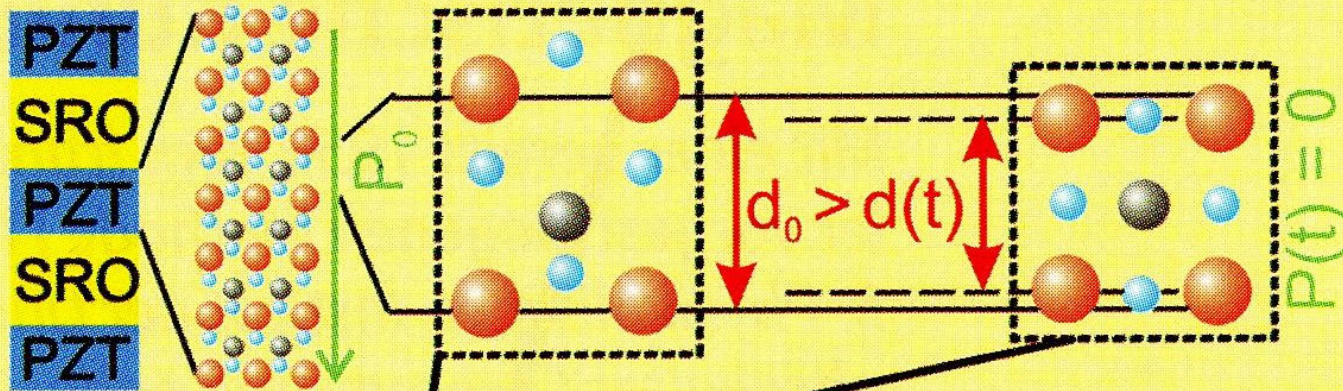
$\approx 100.000 \text{ spots}$

(6-50 keV)

Schwingende Nanoschichten im Röntgen-Stroboskop



Der Anregungs-Impuls versetzt das Kristallgitter in Bewegung. Nach einer Zeitverzögerung Δt wird der Röntgen-Abtastimpuls am Gittervektor G unter der Bragg-Bedingung $G = K' - K$ gestreut. Daraus wird die momentane Gitterkonstante $d(t) = 2\pi/G(t)$ bestimmt.



Nanoschichtsystem aus metallischem SRO und PZT, das wegen der Verschiebung der Anionen O^{2-} (blau) gegen die Kationen Pb^{4+} (rot) und Ti^{4+} (grau) eine ferroelektrische Polarisation P_0 aufweist. Schon nach 2 ps ist die Einheitszelle komprimiert und die ferroelektrische Polarisation $P(t)$ verschwunden. Die messbaren Änderungen $\Delta d/d_0$ der Gitterkonstante $d_0 = 0,409$ nm liegen im 100-fm-Bereich.

Thermal neutrons



SP_n : e.g. Xe^{143} , Sr^{90}

◆ Moderation using C, D_2O , H_2O

◆ e. g., Institut Laue Langevin, Grenoble

57 MW, 10 cm beam diameter, 1.5×10^{15} n/cm²s

2 ... 100 meV corresponding to 6 ... 0.6 Å

Dreiachsenspektrometer - (in)elastische Neutronenstreuung

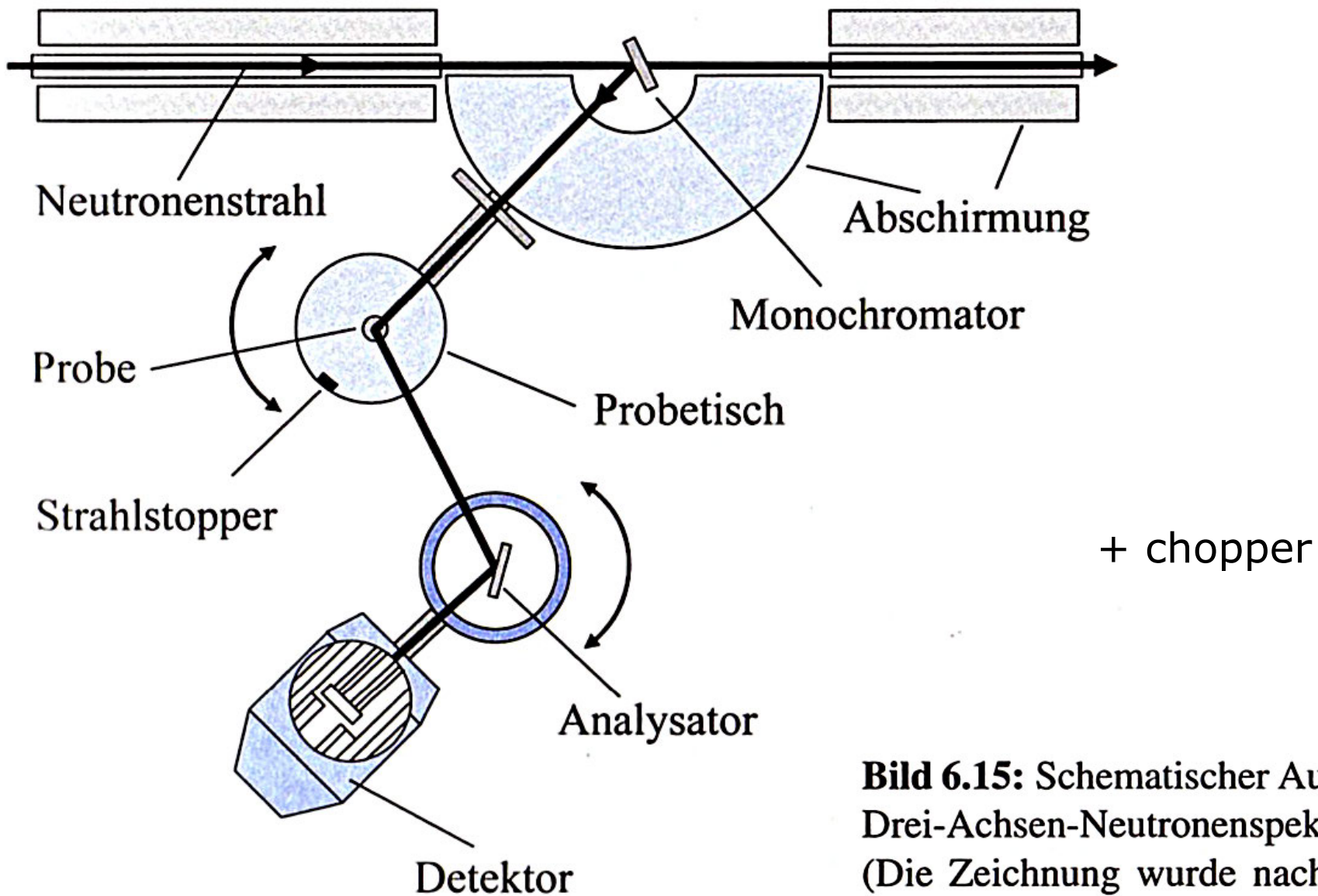


Bild 6.15: Schematischer Aufbau eines Drei-Achsen-Neutronenspektrometers. (Die Zeichnung wurde nach Angaben des Institut Laue-Langevin, Grenoble, für das Instrument IN3 erstellt.)

THE
PHYSICAL REVIEW

DIFFRACTION OF ELECTRONS BY A CRYSTAL OF NICKEL

BY C. DAVISSON AND L. H. GERMER

The most striking characteristic of these beams is a one to one correspondence, presently to be described, which the strongest of them bear to the Laue beams that would be found issuing from the same crystal if the incident beam were a beam of x-rays. Certain others appear to be analogues, not of Laue beams, but of optical diffraction beams from plane reflection gratings—the lines of these gratings being lines or rows of atoms in the surface of the crystal. Because of these similarities between the scattering of electrons by the crystal and the scattering of waves by three- and two-dimensional gratings a description of the occurrence and behavior of the electron diffraction beams in terms of the scattering of an equivalent wave radiation by the atoms of the crystal, and its subsequent interference, is not only possible, but most simple and natural. This involves the association of a wave-length with the incident electron beam, and this wave-length turns out to be in acceptable agreement with the value h/mv of the undulatory mechanics, Planck's action constant divided by the momentum of the electron.