Theoretische Festkörperphysik I
Elementare Grundbegriffe

Franz Wegner
Institut für Theoretische Physik
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Vorbemerkung

Dieses Skriptum gibt eine Einführung in einige Grundbegriffe der theoretischen Festkörperphysik. Es vereinigt einige theoretische Aspekte der Vorlesung "Physik VI" sowie der einstündigen Vorlesung "Theoretische Festkörperphysik I".

Literatur

S. Hunklinger / C. Enss, Festkörperphysik, Skriptum
O. Madelung, Festkörpertheorie I+II, Heidelberger Taschenbücher; Introduction to Solid-State Theory, Springer
C. Kittel, Einführung in dei Festkörperphysik, Oldenbourg; Introduction to Solid State Physics, John Wiley
C. Kittel, Quantentheorie der Festkörper, Oldenbourg; Quantum Theory of Solids, John Wiley
auch:
W. Ludwig, Festkörperphysik I,II, Akad. Verlagsges. Frankfurt
J. Ziman, Principles of the Theory of Solids, Cambridge Univ. Press
J. Ziman, Electrons and Phonons, Oxford Clarendon Press
N. Ashcroft, D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinchardt, Winston; jetzt auch in deutsch

1 Born-Oppenheimer-Huang-Näherung

In der Festkörperphysik betrachtet man in der Regel Schwingungsanregungen (Phononen) und elektronische Anregungen als Elementar-Anregungen, zu denen dann weitere in der Regel kollektive Anregungen kommen können.

Begründet wird diese Aufteilung durch die Born-Oppenheimer-Nährung, die auch adiabatische Näherung genannt wird. Man fasst zunächst Atomkerne und die inneren Elektronen zu Ionen zusammen. (Letztere sieht man als annähernd starr an. Soweit notwendig werden die Polarisierbarkeit und die magnetischen Momente der Ionen berücksichtigt.)

Für die starren Ionen und die äusseren Elektronen hat man den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H &= H_{\rm el} + H_{\rm ion} + H_{\rm el-ion} = T + V && (1.1)\\ H_{\rm el} &= -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} && (1.2)\\ H_{\rm ion} &= -\sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_i^2} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V_{\rm ion}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) && (1.3)\\ H_{\rm el-ion} &= \sum_{i,j} V_{\rm el-ion}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j). && (1.4) \end{aligned}$$

Dabei werden die Ortskoordinaten und die Massen der Ionen mit $\mathbf{R}$ und M_i, die der äußeren Elektronen mit $\mathbf{r}$ und m bezeichnet. Da die Massen der Ionen erheblich größer sind als die der Elektronen, vernachlässigt man zunächst die kinetische Energie der Ionen. Dann werden die Ortskoordinaten der Ionen gute Quantenzahlen und man löst für vorgegebene $\mathbf{R}_i$ das Elektronenproblem

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_j^2} + V(..\mathbf{R}_i..;..\mathbf{r}_j..)\right\}\psi_\alpha(..\mathbf{R}_i..;..\mathbf{r}_j..) = E_\alpha(..\mathbf{R}_i..)\psi_\alpha(..\mathbf{R}_i..;..\mathbf{r}_j..). \quad (1.5)$$

Die vollständige Schrödinger-Gleichung lautet dann für die Wellenfunktion

$\Psi = \sum_\alpha \phi_\alpha(..\mathbf{R}_i..)\psi_\alpha(..\mathbf{R}_i..;..\mathbf{r}_j..)$

$$H\Psi = -\sum_{\alpha,i}\frac{\hbar^2}{2M_i}\left(\frac{\partial^2\phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2}\psi_\alpha \underbrace{+2\frac{\partial\phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i}\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i} + \phi_\alpha\frac{\partial^2\psi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2}}\right) + \sum_\alpha E_\alpha\phi_\alpha\psi_\alpha = E\sum_\alpha \phi_\alpha\psi_\alpha \quad (1.6)$$

Würden die Terme, die durch die geschwungene Klammer gekennzeichnet sind, fehlen, so bliebe die Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktion ϕ_α

$$-\sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i}\frac{\partial^2\phi_\alpha}{\partial \mathbf{R}_i^2} + E_\alpha(..\mathbf{R}_i..)\phi_\alpha(..\mathbf{R}_i..) = E\phi_\alpha(..\mathbf{R}_i..). \quad (1.7)$$

Dabei ist E_α das neue effektive Ionenpotential. In dieser Näherung separiert die Gleichung in eine für die Elektronen (ψ_α) und eine für die Gitterschwingungen (ϕ_α).

Der mit der Klammer bezeichnete Anteil in (1.6) stellt die Elektron-Phonon-Wechselwirkung dar.

Die zu Grunde liegende Vorstellung ist, dass sich die Elektronen rasch bewegen und damit den Ionen adiabatisch folgen. Da $m/M_{\rm p} = 1/1836 \ll 1$, erfolgt die Bewegung der Elektronen und der Ionen auf zwei verschiedenen Zeitskalen.

Jedoch seien zwei Probleme dieser Näherung erwähnt:

1) Die ψ_α sind sehr schwer zu bestimmen, insbesondere wenn die $\mathbf{R}_i$ kein reguläres Gitter bilden. Dazu kommt, dass es für spezielle Werte der $\mathbf{R}_i$ Entartungen gibt.

2) Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung trägt meist nur wenig zur Grundzustandsenergie bei. Aber sie ist trotzdem für viele Festkörper-Effekte wichtig. (Peierls-Instabilität, Supraleitung, el. Leitfähigkeit). Das gilt vor allem dann, wenn die wesentlichen Elektronen-Anregungsenergien in der Größenordnung der Phononen-Energien sind.

Als Ausgangspunkt hat sich die näherungsweise Entkopplung von Phonon- und Elektron-Freiheitsgraden sehr bewährt.

2 Periodische Gitter: Deckoperationen

2.a Translationen

Ein periodisches Gitter geht unter Translationen um drei Vektoren $\mathbf{a}^{(1)}$, $\mathbf{a}^{(2)}$, $\mathbf{a}^{(3)}$, die nicht komplanar sind, in sich über. Dadurch entsteht ein Bravaisgitter oder primitives Gitter, das heißt ein Punktgitter, dessen Gitterpunkte sich schreiben lassen

$$\mathbf{R}^{(n)} = n_1\mathbf{a}^{(1)} + n_2\mathbf{a}^{(2)} + n_3\mathbf{a}^{(3)} \tag{2.1}$$

mit ganzen Zahlen n_1, n_2, n_3. Falls die $\mathbf{a}^{(i)}$ so gewählt sind, dass sämtliche Translationen, die das Gitter mit sich zur Deckung bringen, durch $\mathbf{R}^{(n)}$ darstellbar sind, spricht man von primitiven Gittervektoren. Diese $\mathbf{a}^{(i)}$ spannen eine Elementarzelle auf.

Unter einer Wigner-Seitz-Zelle versteht man alle Punkte, die einem Gitterpunkt am nächsten sind. Auf diese Weise entsteht eine Einteilung des Raumes in lauter gleiche Gitterzellen. Beispiele siehe Hunklinger, S. 24, Abb. 1.26 und 1.27, Madelung I, S. 60, Fig. 2.11 und 2.12. Ihr Volumen ist das der Elementarzelle.

Daneben verwendet man auch die (konventionelle) Einheitszelle, ein ganzzahliges Vielfaches der Elementarzelle. Das Volumen der Einheits- oder Elementarzelle ist

$$V_z = |(\mathbf{a}^{(1)} \times \mathbf{a}^{(2)}) \cdot \mathbf{a}^{(3)}|. \tag{2.2}$$

Innerhalb einer Einheits- oder Elementarzelle befinden sich r Atome $i = 1, ...r$, deren Orte man durch

$$\mathbf{R}_{n,i} = (n_1 + s_{1,i})\mathbf{a}^{(1)} + (n_2 + s_{2,i})\mathbf{a}^{(2)} + (n_3 + s_{3,i})\mathbf{a}^{(3)} \tag{2.3}$$

angibt.

Tabelle einiger kubischer Gitter mit einer Einheitszelle in Form eines Würfels der Seitenlänge a, $|\mathbf{a}^{(1)}| = |\mathbf{a}^{(2)}| = |\mathbf{a}^{(3)}| = a$, $\mathbf{a}^{(1)} \cdot \mathbf{a}^{(2)} = \mathbf{a}^{(2)} \cdot \mathbf{a}^{(3)} = \mathbf{a}^{(3)} \cdot \mathbf{a}^{(1)} = 0$.

Gitter	r		$\mathbf{s}_1$ ($\mathbf{s}_5$	$\mathbf{s}_2$ $\mathbf{s}_6$	$\mathbf{s}_3$ $\mathbf{s}_7$	$\mathbf{s}_4$ $\mathbf{s}_8$)	primitive Gittervektoren	Volumen der Elementarzelle
sc	1		(000)				$\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}, \mathbf{a}^{(3)}$	a^3
bcc	2		(000)	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$			$\frac{\mathbf{a}^{(1)}+\mathbf{a}^{(2)}-\mathbf{a}^{(3)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(1)}+\mathbf{a}^{(3)}-\mathbf{a}^{(2)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(2)}+\mathbf{a}^{(3)}-\mathbf{a}^{(1)}}{2},$	$a^3/2$
fcc	4		(000)	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$\frac{\mathbf{a}^{(1)}+\mathbf{a}^{(2)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(1)}+\mathbf{a}^{(3)}}{2}, \frac{\mathbf{a}^{(2)}+\mathbf{a}^{(3)}}{2}$	$a^3/4$
NaCl	8	Na	(000)	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	wie fcc	$a^3/4$
		Cl	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}00)$	$(0\frac{1}{2}0)$	$(00\frac{1}{2})$		
CsCl	2	Cs,Cl	(000)	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$			wie sc	a^3
Diamant / ZnS	8	C,Zn	(000)	$(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	wie fcc	$a^3/4$
		C,S	$(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$	$(\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4})$	$(\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4})$	$(\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4})$		

(2.4)

Dabei steht sc für simple cubic (einfach kubisch), bcc für body-centered cubic (kubisch raumzentriert), fcc für face-centered cubic (kubisch flächenzentriert). Figuren dazu siehe Kittel, Fig. 28 bis 30.

2.b Allgemeine Deckoperationen

Ein Gitter geht im Allgemeinen nicht nur durch Translationen sondern auch durch Drehungen und /oder Spiegelungen in sich über. Im allgemeinen gibt es einen Satz von orthogonalen Transformationen α und Translationen $\mathbf{a}$, so dass das Gitter unter den Transformationen

$$\mathbf{r}' = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{a} = \{\alpha, \mathbf{a}\}\mathbf{r} \tag{2.5}$$

in sich übergeht.

Die Determinante einer orthogonalen Matrix kann entweder $+1$ oder -1 sein. Wir beginnen mit $\det(\alpha) = +1$. Dann gehört die Matrix α zur SO(3).
Ein Spezialfall ist die Einheits-Matrix (Identität): Alle Eigenwerte von α sind $+1$. Dann stellt $(\alpha, \mathbf{a}) = (1, \mathbf{R}^{(n)})$ die **Translationen** dar.

Da alle Eigenwerte einer orthogonalen Matrix betragsmäßig gleich 1 sind, ist ein Eigenwert von α gleich $+1$ (Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$, Richtung der Drehachse), die beiden anderen sind $e^{\pm i\phi}$ mit dem Drehwinkel ϕ. Falls $\mathbf{an}^{(0)} = 0$, dann ist dies eine **Drehung**, falls aber $\mathbf{an}^{(0)} \neq 0$, dann muss man das Gitter auch noch in Richtung der Drehachse verschieben und man spricht von einer **Schraubung**.

Im zweiten Fall ist $\det(\alpha) = -1$. Wir betrachten zunächst zwei Spezialfälle:
Falls alle Eigenwerte gleich -1 sind, $(\alpha, \mathbf{a}) = (-1, \mathbf{a})$, dann stellt die Operation eine **Inversion** am Zentrum $\mathbf{a}/2$ dar, $\mathbf{r}' = \mathbf{a} - \mathbf{r}$.
Ist dagegen ein Eigenwert -1 mit Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$ und sind zwei Eigenwerte $+1$, dann hat man es bei $\mathbf{a} \parallel \mathbf{n}^{(0)}$ mit einer **Spiegelung** an einer Ebene senkrecht zu $\mathbf{n}^{(0)}$ durch $\mathbf{a}/2$ und andernfalls mit einer **Gleitspiegelung** zu tun. Generell gilt: Falls die Verschiebung $\mathbf{a}$ Komponenten in den Richtungen mit Eigenwerten $+1$ hat, dann benötigt man zusätzlich zur Drehung oder Spiegelung noch eine Verschiebung. Andernfalls kann man Drehachse oder Spiegelebene so wählen, dass eine Verschiebung nicht notwendig ist.
Allgemein hat man für $\det(\alpha) = -1$ einen Eigenwerte -1 mit Eigenvektor $\mathbf{n}^{(0)}$ und ein Eigenwert-paar $e^{\pm i\phi}$. Dies beschreibt dann eine **Drehspiegelung** mit Drehachse parallel zu $\mathbf{n}^{(0)}$ und Spiegelebene senkrecht darauf.

Wir betrachten noch, welche Drehwinkel ϕ möglich sind (wir tun das hier nur für ein Bravais-Gitter, doch lässt sich der Beweis leicht verallgemeinern): Mit der Notation $R_\mu^{(n)} = \sum_i A_{\mu i} n_i$ mit $A_{\mu i} = a_\mu^{(i)}$, beschreiben wir die Operation $\alpha\mathbf{R}^{(n)} = \mathbf{R}^{(m)}$ in der Matrix-Form $\alpha A n = A m$ oder $m = A^{-1}\alpha A n$. Diese Gleichung ergibt für ein beliebiges ganzzahliges Tripel (n_1, n_2, n_3) ganzzahlige (m_1, m_2, m_3). Daher muss die Matrix $A^{-1}\alpha A$ lauter ganzzahlige Einträge haben. Dann ist aber die Spur

$$\mathrm{Sp}(A^{-1}\alpha A) = \mathrm{Sp}(\alpha) = \pm 1 + 2\cos\phi \tag{2.6}$$

ganzzahlig. Daher bleiben nur die Möglichkeiten

$$\boxed{\begin{array}{llllll} \cos\phi = & +1 & +1/2 & 0 & -1/2 & -1 \\ & & 6\text{-} & 4\text{-} & 3\text{-} & 2\text{-} \quad \text{zählige Drehachse.} \end{array}} \tag{2.7}$$

2.c Gruppeneigenschaften, Raumgruppe und Punktgruppe

Die zweimalige Anwendung einer Deckoperation stellt wieder eine Deckoperation dar. Auch ist die Rückgängigmachung (also das Inverse) einer Deckoperation wieder eine Deckoperation. Diese stellen also eine Gruppe dar, die Raumgruppe. Man findet für die zweimalige Anwendung und das Inverse

$$\{\alpha|\mathbf{a}\}\{\alpha'|\mathbf{a}'\} = \{\alpha\alpha'|\alpha\mathbf{a}' + \mathbf{a}\}, \tag{2.8}$$

$$\{\alpha|\mathbf{a}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}| - \alpha^{-1}\mathbf{a}\}. \tag{2.9}$$

Die Menge der Operationen α bildet selbst eine Gruppe, die Punktgruppe. Je nachdem, ob man a) das Bravaisgitter oder die Kristallstruktur, b) die Punktgruppe oder die Raumgruppe betrachtet, unterscheidet man

	Bravaisgitter	Kristallstruktur
Punktgruppe	7 Kristallsysteme	32 kristallographische Punktgruppen
Raumgruppe	14 Bravaisgitter	230 Kristallklassen

3 Reziprokes Gitter und Streuung

3.a Etwas elastische Streuung

Trifft ein Teilchen (Elektron, Photon, Neutron) auf einen Körper, so kann unterschiedliches geschehen: Das Teilchen kann unverändert hindurchlaufen, es kann streuen, ohne den Körper zu verändern (elastische Streuung), es kann den Körper in einen anderen Zustand überführen (inelastische Streuung) einschließlich der Möglichkeit, dass dabei andere Teilchen erzeugt oder herausgeschlagen werden, und es kann absorbiert werden. Wir betrachten zunächst nur den einfachsten Fall der elastischen Streuung (tatsächlich nimmt der Körper dabei zumindest Impuls auf, wobei die dadurch bedingte Änderung der Schwerpunktsenergie aber vernachlässigbar ist).

Bei Streuung an einem einzelnen Teilchen (Ion oder Elektron) geht von diesem eine Streuwelle aus. Im einfachsten Fall kann man diese durch die Streulänge f darstellen, die zu einer isotropen Streuung führt. Wird die einlaufende ebene Welle durch eine Amplitude

$$A = A_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t)} \tag{3.1}$$

beschrieben, so erhält man für die Streuwelle, die am Ort r' gestreut wird, die Amplitude

$$A_\mathrm{s} = A_0 \frac{f}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}' + k_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - \omega_0 t)} \tag{3.2}$$

Unter der Annahme, dass die Streuwelle in einer Entfernung groß gegenüber der Ausdehnung des Körpers beobachtet wird, vernachlässigt man in Nenner r', ersetzt dort also $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r$, während man im Exponenten den von $\mathbf{r}'$ abhängigen Wegunterschied berücksichtigen muss, $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'/r$. Man führt noch den Wellenvektor $\mathbf{k}$ in Richtung des Beobachtungspunktes $\mathbf{r}$ ein, $\mathbf{k} = k_0 \mathbf{r}/r$ und erhält dann für die Streuamplitude

$$A_\mathrm{s} = A_0 \frac{f \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 r}}{r} \mathrm{e}^{\mathrm{i}((\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}' - \omega_0 t)}. \tag{3.3}$$

Die Streuamplitude hängt also wesentlich vom Streuvektor $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ ab.

Die Streuung erfolgt im Körper an vielen Streuern und auch diese sind nicht unbedingt punktförmig. Man muss daher die Dichte $\rho(\mathbf{r})$ der Streuer berücksichtigen. Unter Einführung dieser Dichte erhält man die Amplitude in der Form

$$A_\mathrm{s} = A_0 \frac{\mathrm{e}^{ik_0 r - \omega_0 t}}{r} \mathcal{A} \tag{3.4}$$

mit der Streuamplitude

$$\mathcal{A} = f \int \mathrm{d}^3 r \rho(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}. \tag{3.5}$$

Bei Anwesenheit verschiedener Streuer ist $f\rho(\mathbf{r})$ durch $\sum_i f_i \rho_i(\mathbf{r})$ zu ersetzen.

Der Streuquerschnitt ergibt sich dann zu

$$\mathrm{d}\sigma = |A_\mathrm{s}|^2 r^2 \mathrm{d}\Omega / |A_0|^2 = |\mathcal{A}|^2 \mathrm{d}\Omega = f^2 \int \mathrm{d}^3 r d^3 r' \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\Omega. \tag{3.6}$$

Nehmen wir zunächst an, ρ sei konstant. Dann finden wir für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{d\Omega} = f^2 \rho^2 \int \mathrm{d}^3 r \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \int \mathrm{d}^3 r' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} \tag{3.7}$$

Im Wesentlichen folgt für einen makroskopischen Körper hieraus ein $\delta(\mathbf{K})$. Wir können das folgendermaßen sehen: Nehmen wir an, der Körper sei ein Quader. In x-Richtung sei er von 0 bis a ausgedehnt. Die x-Integrationen liefern dann

$$\int_0^a \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}K_x x} \int_0^a \mathrm{d}x' \mathrm{e}^{\mathrm{i}K_x x'} = \frac{4 \sin^2(\frac{K_x a}{2})}{K_x^2}. \tag{3.8}$$

Diese Funktion ist bereits von der Beugung am Schlitz bekannt. Sie hat ein ausgeprägtes Maximum bei $K_x = 0$, eine erste Nullstelle bei $K_x = \pi/a$, was für eine makroskopische Ausdehnung a sehr klein ist und fällt unter Oszillationen für größeres K_x wie $1/K_x^2$ ab. Für makroskopische Ausdehnung a kann man sie durch eine δ-Funktion ersetzen. Den Vorfaktor findet man durch Integration

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}K_x \frac{4\sin^2(\frac{K_x a}{2})}{K_x^2} = 2a \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\sin^2 k}{k^2} = 2\pi a. \tag{3.9}$$

Entsprechend werden die Integrationen in den beiden anderen Raumrichtungen durch geführt, so dass man für konstantes ρ schließlich

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = f^2 \rho^2 (2\pi)^3 V_\mathrm{P} \delta^3(\mathbf{K}) \tag{3.10}$$

mit dem Volumen V_P des Körpers erhält. Dies ist eine Streuung in Vorwärtsrichtung (schatten und Beugung). Für einen Körper anderer (aber hinreichend kompakter) Form gilt (3.10) ebenfalls. Je größer der Körper desto kleiner ist der Bereich, in der die Fourier-Transformierte wesentlich von 0 verschieden ist. Ansonsten verwendet man, dass das Integral über $\mathbf{K}$

$$\int d^3K \int_V d^3r \int_V d^3r' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \int_V d^3r \int_V d^3r' \int d^3K \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \int_V d^3r \int_V d^3r' (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = (2\pi)^3 V_\mathrm{P}. \tag{3.11}$$

Interessanter sind die Beiträge, die dadurch entstehen, dass $\rho(\mathbf{r})$ von seinem Mittelwert abweicht. Ersetzen wir $\mathbf{r}$ durch $\mathbf{r}+\mathbf{r}'$, dann bleibt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f^2 V_\mathrm{P}(\rho^2(2\pi)^3\delta^3(\mathbf{K}) + \int d^3r g(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}) \tag{3.12}$$

mit der Korrelationsfunktion

$$g(\mathbf{r}) = \langle \rho(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}'+\mathbf{r})\rangle - \langle\rho\rangle^2, \tag{3.13}$$

wobei $\langle ... \rangle$ die Raummittelung über $\mathbf{r}'$ anzeigt. In einer amorphen Substanz oder einer Flüssigkeit hängt g nur vom Abstand (nicht von der Richtung) r ab. Der Streuquerschnitt ergibt die (dreidimensionale) Fouriertransformierte von $g(r)$.

Man beachte, dass wir hier nur die Einfach-Streuung betrachtet haben. Der Probekörper muss also so dünn sein, dass Mehrfach-Streuung vernachlässigbar ist.

3.b Gitter und reziprokes Gitter

In einem idealen Kristall berücksichtigt man die langreichweitige Ordnung, die sich darin ausdrückt, dass ρ gitterperiodisch ist

$$\rho(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n) = \rho(\mathbf{r}). \tag{3.14}$$

Entwickelt man ρ in eine Fourier-Reihe

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_\mathbf{G} \rho_\mathbf{G} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \tag{3.15}$$

dann ist

$$\rho(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n) = \sum_\mathbf{G} \rho_\mathbf{G} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}. \tag{3.16}$$

Aus der Gitterperiodizität folgt also, dass $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n}$ für alle $\mathbf{R}_n$ gleich 1 sein muss. Das ist genau dann erfüllt, wenn es für die Basisvektoren $\mathbf{a}$ gilt. Man muss daher

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G} = 2\pi m_i \tag{3.17}$$

mit ganzzahligen m_i fordern. Für allgemeines $\mathbf{R}_n$ gilt dann $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} = \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\sum_i n_i m_i} = 1$.

Die Vektoren $\mathbf{G}$, die (3.17) erfüllen, heißen reziproke Gittervektoren. Wir bezeichnen sie mit $\mathbf{G}_m$, wobei m aus den drei Indices m_1, m_2, m_3 besteht. (Im Skriptum Hunklinger/Enss mit h, k, l bezeichnet) Die Lösung der Gleichung

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G}_m = 2\pi m_i \tag{3.18}$$

kann zunächst in der Form

$$\mathbf{G}_m = \sum_{j=1}^{3} m_j \mathbf{b}_j, \quad \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{i,j} \tag{3.19}$$

geschrieben werden. Die letztere Gleichung hat die Lösung

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{V_\mathrm{Z}}(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{V_\mathrm{Z}}(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{V_\mathrm{Z}}(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2). \tag{3.20}$$

Dabei ist $V_\mathrm{Z} = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3$ das Volumen der Elementarzelle, das mit dem Volumen der Elementarzelle des reziproken Gitters über $(\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2) \cdot \mathbf{b}_3 = (2\pi)^3/V_\mathrm{Z}$ verknüpft ist.

Man sieht aus der Darstellung (3.19), dass die reziproken Gittervektoren selbst ein Gitter bilden mit den Basisvektoren $\mathbf{b}$, das reziproke Gitter.

3.c Streuung am Gitter

Wir betrachten zunächst die Entwicklungskoeffizienten ρ_m in der Entwicklung

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_m \rho_m \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}}, \tag{3.21}$$

wobei wir jetzt ρ_m statt $\rho_{\mathbf{G}_m}$ schreiben. Wir erhalten diese Koeffizienten durch Integration über die Elementarzelle, in dem wir über das von den Basisvektoren $\mathbf{a}$ aufgespannte Parallelepiped integrieren,

$$\rho_m = \frac{1}{V_\mathrm{Z}} \int_{V_\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}). \tag{3.22}$$

Man führt hier die Fourier-Entwicklung bezüglich der drei Richtungen der $\mathbf{a}$ durch analog zur eindimensionalen Fourier-Entwicklung. Man beachte, dass

$$\int_{V_\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}} = \begin{cases} V_\mathrm{Z} & \text{für } \mathbf{G} = 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{3.23}$$

(Man findet das leicht, indem man $\mathbf{r} = \sum_i s_i \mathbf{a}^{(i)}$, $0 \le s_i \le 1$ parametrisiert.) Nachdem aber $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_n} = 1$, muss die Integration nicht unbedingt über das Parallelepiped erfolgen. Vielmehr können Volumen-Bereiche auch um Gittervektoren verschoben berücksichtigt werden. Zum Beispiel kann man auch über die Wigner-Seitz-Zelle integrieren, die im vorhergehenden Abschnitt eingeführt wurde.

Für mehrere Arten von Streuern erhält man dann den differentiellen Streuquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |\mathcal{A}|^2 = (2\pi)^3 V_\mathrm{P} \sum_m |\sum_i f_i \rho_{i,m}|^2 \delta^3(\mathbf{G}_m - \mathbf{K}). \tag{3.24}$$

Es entstehen also diskrete Streupeaks an den reziproken Gittervektoren, die über die Fourier-Transformierten von ρ Auskunft geben. Insbesondere findet man die reziproken Gittervektoren, die die Berechnung der $\mathbf{a}$ erlauben. Damit erhält man Aufschluss über die Gitterstruktur.