

Methoden moderner Röntgenphysik: Streuung und Abbildung

G. Grübel, A. Philippi-Kobs, O. Seeck, L. Frenzel, F. Lehmkuhler

CRYSTAL TRUNCATION RODS (CTR)

In Bornscher Näherung, ist die an einem Kristall gestreute Amplitude gegeben durch

$$A(\vec{q}) \propto S(\vec{q}) \sum_{n_1=-M_1}^{N_1-1} \sum_{n_2=-M_2}^{N_2-1} \sum_{n_3=-M_3}^{N_3-1} \exp(i\vec{q} \cdot [n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}]),$$

mit dem Strukturfaktor $S(\vec{q})$, dem Wellenvektorübertrag \vec{q} und den Vektoren der Einheitszelle $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. Bei unendlichen kristallen sind alle M_k und N_k gleich unendlich. Bei semi-infiniten Kristallen mit einer Oberfläche in z.B. \vec{a}, \vec{b} -Ebene ist M_3 endlich, z.B. $M_3=0$. Für ein kubisches Kristallsystem und einer Änderung von \vec{q} entlang \vec{c} (z-Achse) können \vec{a} und \vec{b} vernachlässigt werden. Das Problem wird damit eindimensional.

- a) Berechnen Sie die gestreute Intensität $I(q_z)$ der CTR für den 1-dimensionalen semi-infiniten Kristall mit der Oberfläche bei $M_3=0$ und endlichem aber sehr großen N_3 .

Verwenden Sie $I(q_z) = |A(q_z)|^2$ und $\sum_{n=0}^{N-1} x^n = \frac{x^{N/2} - x^{-N/2}}{x^{1/2} - x^{-1/2}} \cdot x^{\frac{N-1}{2}}$.

- b) Skizzieren Sie $I(q_z)$ und erklären sie den Verlauf für $N_3 \rightarrow \infty$.

Zur realistischeren Berechnung wird nun eine Eindringtiefe für Röntgenstrahlung eingeführt. Die Intensität der Röntgenstrahlen bei Tiefe z in einem absorbierenden Material folgt $I(z) = I_0 \exp(-z/\Lambda)$ mit Absorptionslänge Λ .

- c) Modifizieren Sie die Streuamplitude $A(q_z)$ für den 1-dimensionalen semi-infiniten Kristall mit der Oberfläche bei $M_3=0$ unter Berücksichtigung der Absorptionseffekte bei jedem Summanden
- d) Verwenden Sie $N_3 |\vec{c}| \gg \Lambda$ und $|\vec{c}| \ll \Lambda$ (beides normalerweise der Fall) um die Streuintensität $I(q_z)$ für den 1-dimensionalen semi-infiniten Kristall zu berechnen mit der Oberfläche bei $M_3=0$ und endlichem aber sehr großen N_3 inklusive Absorption. Skizzieren Sie das Ergebnis und vergleichen Sie es mit b).