

Grundlagen der Elektronenstreuung

Für die Elektronenstreuung gilt wie im Falle der Neutronenstreuung für den differentiellen Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\mathbf{s}_s}{d\Omega} = |f(\mathbf{q})|^2$$

Der Streuprozess findet für die betrachteten Energien an den Elektronen der Atomhülle statt. Die räumlich Ausdehnung der Hüllelektronen ist in der Größenordnung der Wellenlänge und daher zeigt die Streuung eine Winkelabhängigkeit mit $f(\theta)$.

Streuprozess

Entscheidend für den Streuprozess ist das Coulomb-Potential: $V(r) = -\frac{e^2 Z_{eff}}{4\pi\epsilon_0 r}$

Hieraus ergibt sich für den Brechungsindex:

$$n(r) = \frac{\mathbf{l}}{\mathbf{l}_m} = \frac{p_m}{p} = \sqrt{\frac{2(E-V)E_0 + (E-V)^2}{2EE_0 + E^2}} \quad \text{mit } V(r) \ll E; E_0 \quad \longrightarrow \quad n(r) = 1 - \frac{V(r)}{E} \frac{E_0 + E}{2E_0 + E} + \dots$$

Der Brechungsindex ist also $n \geq 1$, da das Coulomb-Potential negativ ist.

Grundlagen der Elektronenstreuung

Elastische Streuung für kleine Streuwinkel

Die gestreute Welle hat die Form:
$$\mathbf{y}_s = \mathbf{y}_0 \left[e^{2pik_0r} + i \frac{f(\mathbf{q})}{r} e^{2pikr} \right]$$

Hierbei ist die Streuamplitude wieder eine komplexe Größe mit $f(\mathbf{q}) = |f(\mathbf{q})| e^{ih(\mathbf{q})}$ und der Faktor $i = \exp(ip/2)$ bewirkt eine **Phasenverschiebung um 90°**. Diese Phasenverschiebung lässt sich aus folgender Betrachtung ableiten:

Die einfallende Welle ist gegeben durch:
$$\mathbf{y} = \mathbf{y}_0 \sin(2pkx)$$

Die gestreute Welle zeigt durch die Wechselwirkung im Medium ein Phasenverschiebung ϕ :

$$\mathbf{y}_s = \mathbf{y}_0 \sin(2pkx + \mathbf{j}) = \mathbf{y}_0 \sin(2pkx) \cos(\mathbf{j}) + \mathbf{y}_0 \cos(2pkx) \sin(\mathbf{j})$$

Die Phasenverschiebung ergibt sich durch den Unterschied im Lauf $\mathbf{D} = (n-1)t$ der Wellen durch verschiedene Medien mit unterschiedlichen Brechungsindizes (Schichtdicke t).

$\mathbf{j} = \frac{2p}{l}$? Da sich für kleine Werte von ϕ für $\sin \phi = \phi$ und für $\cos \phi = 1$ ergibt, gilt:

$$\mathbf{y}_s = \mathbf{y}_0 \sin(2pkx) + \mathbf{y}_0 \mathbf{j} \sin(2pkx + p/2) = \mathbf{y} + i\mathbf{y}_{sc}$$

In Abhängigkeit vom Streuwinkel entsteht darüber hinaus ein weiterer kleinerer Beitrag zur Phasenverschiebung. => Nicht notwendigerweise Interferenz zwischen einfallender und gestreuter Welle möglich !

Interferenz und Beugung

Für die Objektrekonstruktion wird das Muster analysiert, das bei der Überlagerung der bei dem Streuprozess vom streuenden Atom ausgesandten Kugelwellen entsteht. Diese Überlagerung der Teilwellen wird **Interferenz** genannt. Vor allem bei Streuung von Strahlung an periodischen Objekten (z.B. Kristall) findet man bevorzugte Richtungen, in denen Intensitätsmaxima zu beobachten sind (**Beugungsbild**). Anders als in der geometrischen Optik bildet ein Strahl von einem Punkt im Objekt nicht den zugehörigen Punkt im Abbild ab. Vielmehr trägt jeder Punkt im Intensitätsmaximum des Beugungsbildes die Information des ganzen Objekts.

Beugung (Diffraktion)

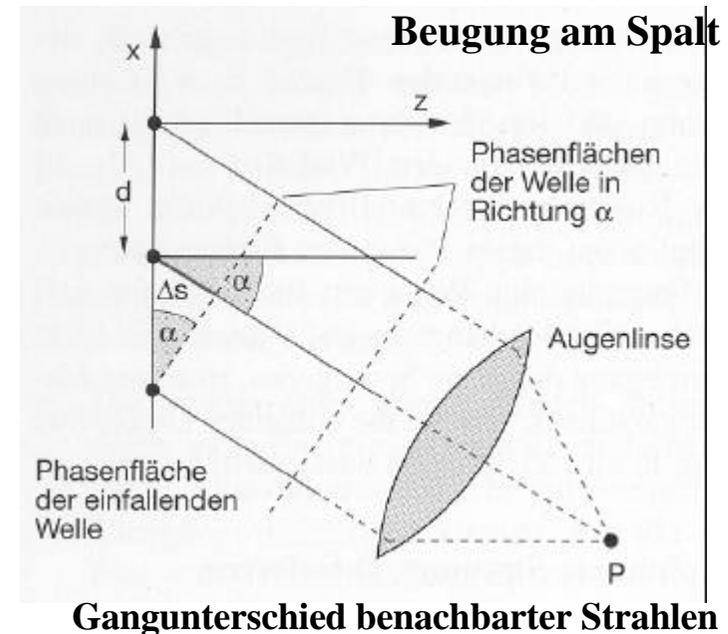
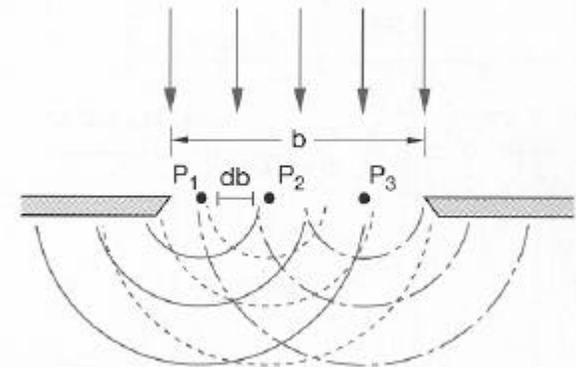
Bei der Wechselwirkung von Licht mit **Objekt einer räumlichen Ausdehnungen in der Größenordnung der Wellenlänge treten Beugungserscheinungen** auf (sichtbar z.B. bei Wasserwellen, Lichthöfe oder Halos bei kleinen Partikeln um Lichtquellen). Als Beugung bezeichnet man in der Optik das Phänomen, dass ein Lichtbündel beim Durchgang durch eine begrenzte Öffnung (z.B. Spalt) oder beim Passieren an Kanten nicht durchlässiger Medien, die einen Teil des Strahls absorbieren oder reflektieren, teilweise aus seiner ursprünglichen Richtung abgelenkt wird. Man kann also Licht in solchen Richtungen beobachten, in die es nach der geometrischen Optik nicht kommen dürfte (=> Ursache hierfür: Kugelwellen nach dem **Huygen'schen Prinzip**).

Beugung am Spalt

Um die grundsätzlichen Eigenschaften der Beugung zu veranschaulichen, betrachten wir zuerst die Beugung an einem einfachen Objekt, dem Spalt.

Gegeben ist sei Spalt der Breite b . Licht einer Quelle aus großer Entfernung fällt auf den Spalt, so dass dieses Licht in guter Näherung als paralleles Strahlenbündel („kohärentes“) gesehen werden kann. Jeder Raumpunkt P im Spalt ist Ausgangspunkt einer Kugelwelle. Der periodische Abstand dieser fiktiven Raumpunkte sei d . Die Streuung an diesen Raumpunkten führt dazu, dass die Strahlen hinter dem Spalt im Prinzip unter beliebigen Winkeln α zu finden sind. Benachbarte Strahlen weisen dabei einen Phasenunterschied auf:

$$\Delta j = \frac{2p}{l} \Delta s = \frac{2p}{l} d \cdot \sin \alpha$$



Beugung am Spalt

Die Gesamtamplitude von N streuenden Raumpunkten auf der Graden des Spalts ist dann gleich der Summe über alle Teilamplituden der Einzelstreuer:

$$E_s = E_0 e^{i\omega t} \longrightarrow E_s = E_0 \sum_{j=1}^N e^{i(\omega t + j\phi)} = E_0 e^{i\omega t} \sum_{j=1}^N e^{i(j-1)\Delta\phi} \quad \text{mit } \phi_1 = 0$$

Die Summe der geometrischen Reihe ist:

$$\sum_{j=1}^N e^{i(j-1)\Delta\phi} = \frac{e^{iN\Delta\phi} - 1}{e^{i\Delta\phi} - 1}$$

$$= e^{i[(N-1)/2]\Delta\phi} \cdot \frac{e^{i(N/2)\Delta\phi} - e^{-i(N/2)\Delta\phi}}{e^{i\Delta\phi/2} - e^{-i\Delta\phi/2}}$$

$$= e^{i[(N-1)/2]\Delta\phi} \cdot \frac{\sin[(N/2)\Delta\phi]}{\sin(\Delta\phi/2)}$$

Die Intensität der gestreuten Strahlung ist somit:

$$\longrightarrow I(\alpha) = E_0^2 \cdot \frac{\sin^2[Np(d/l)\sin\alpha]}{\sin^2[p(d/l)\sin\alpha]}$$

Der Verlauf von $I(\alpha)$ hängt entscheidend vom Verhältnis d/λ ab. Für $d < \lambda$ hat $I(\alpha)$ nur ein Maximum für $\alpha = 0$ und fällt dann auf $I = 0$ ab für größere Werte von α . Für sehr kleine α können wir $\sin(\alpha) \approx \alpha$ annehmen.

Beugung am Spalt

Für $d < \lambda$ und $\sin(\alpha) \ll 1$ ist auch $\pi(d/\lambda) \cdot \sin(\alpha) \ll 1$ und damit gilt:

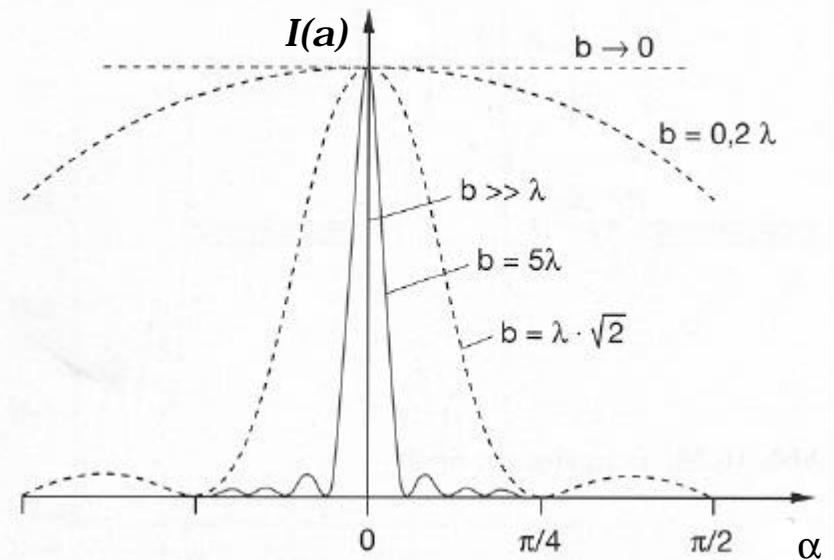
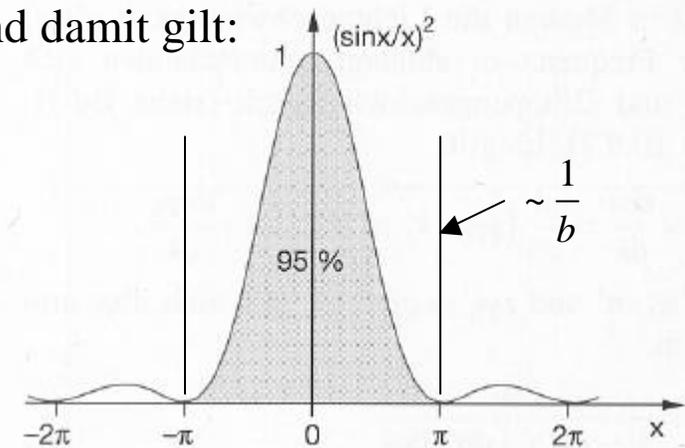
$$I(\mathbf{a}) = N^2 E_0^2 \cdot \frac{\sin^2 x}{x^2} \quad \text{mit } x = N \cdot \pi(d/\lambda) \cdot \sin(\alpha)$$

Da $N = b/d$ gilt, folgt das für $N \rightarrow \infty$ nun $d \rightarrow 0$ geht.
Es folgt:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} I(\mathbf{a}) = E_0^2 \cdot \frac{\sin^2 x_b}{x_b^2} \quad \text{mit } x_b = \pi(b/\lambda) \cdot \sin(\alpha)$$

Die Intensitätsverteilung zeigt ein Minimum für $\sin(\alpha) = \lambda/b$. Allerdings sind für $\alpha > \lambda/b$ noch weitere kleinere Nebenmaxima zu finden.

Diese Beugungserscheinungen lassen sich nicht nur beim Strahlendurchgang von Licht durch eine begrenzte Öffnung beobachten, sondern auch bei einem begrenzten Hindernis.

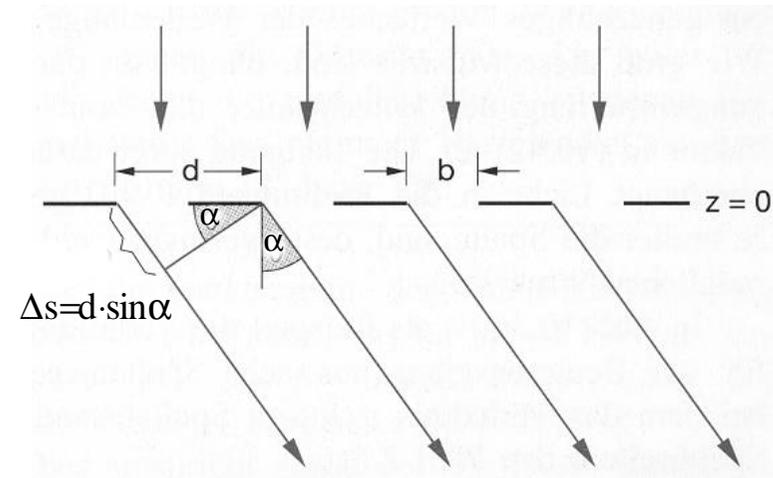


Intensitätsverteilung von $I(\mathbf{a})$

Beugung an einer Vielzahl von Spalten (Gitter)

Fällt eine ebene Welle senkrecht auf eine Anordnung von N parallelen Spalten, so ist die Intensitätsverteilung $I(\mathbf{a})$ im wesentlichen durch zwei Faktoren bestimmt:

- Die Interferenz zwischen Lichtbündeln verschiedener Spalte: Die hieraus resultierende Verteilung entspricht genau der behandelten kohärenten Emission der N fiktiven (periodisch angeordneten) Raumpunkte.
- Die durch die Beugung an jedem Spalt verursachte Intensitätsverteilung



Beugungsgitter bestehend aus N parallelen Spalten

Ist b die Spaltbreite und d der Abstand der benachbarten Spalte, so ergibt sich für die Intensitätsverteilung:

$$I(\mathbf{a}) = E_0^2 \frac{\sin^2[\mathbf{p}(b/L)\sin\mathbf{a}]}{[\mathbf{p}(b/L)\sin\mathbf{a}]^2} \cdot \frac{\sin^2[N\mathbf{p}(d/L)\sin\mathbf{a}]}{\sin^2[\mathbf{p}(d/L)\sin\mathbf{a}]}$$

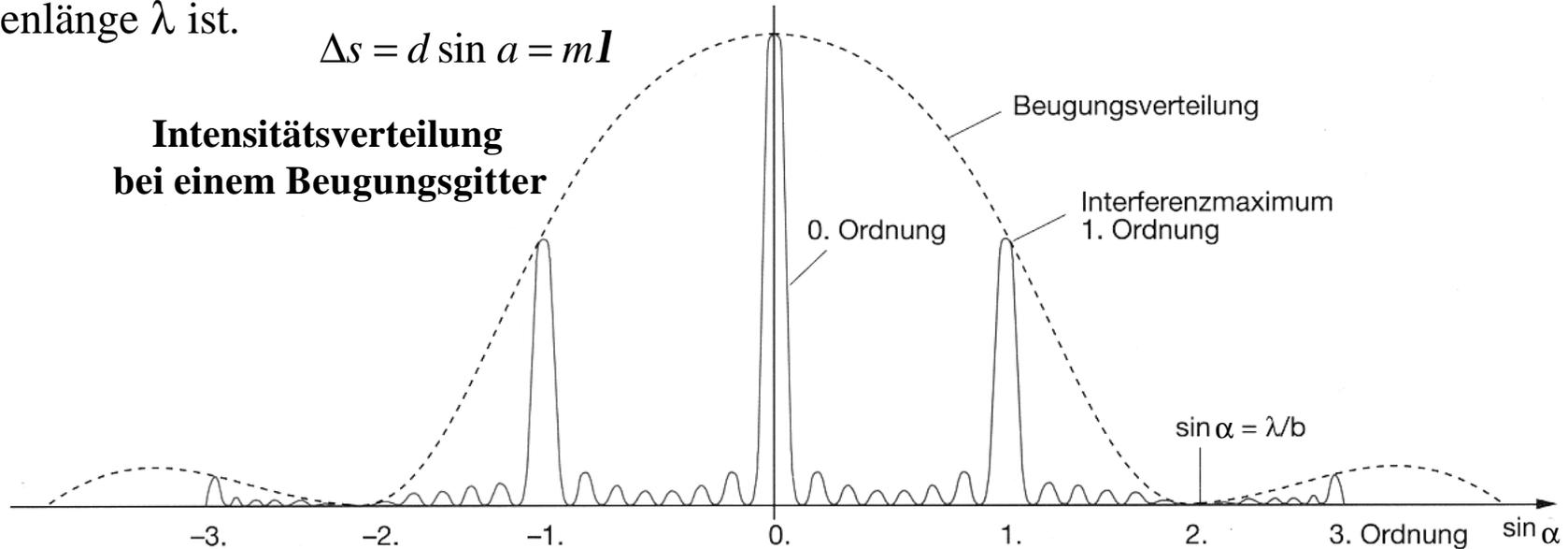
↙
Beugung am Einzelspalt

↘
Interferenz von N Spalten

Beugung an einer Vielzahl von Spalten (Gitter)

Maxima von $I(\alpha)$ treten in denjenigen Richtungen auf, für welche der Wegunterschied zwischen den Teilstrahlen aus benachbarten Spalten ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge λ ist.

$$\Delta s = d \sin \alpha = m \lambda$$



Hauptmaxima: Beugungsmaxima (besser Interferenzmaxima) m -ter Ordnung $m_{\max} = d / \lambda$

Nebenmaxima: Bei N Spalten gibt es $N-2$ kleine Nebenmaxima bei:

$$\sin \alpha_p = \frac{(2p+1)\lambda}{2N \cdot d} \quad \text{mit } p = 1, 2, \dots, N-2$$

Die zugehörige Intensität ist gegeben durch I_p und ist für große N vernachlässigbar klein.

$$I_p = \frac{E_0^2}{N^2} \frac{1}{\sin^2(2p+1)\lambda / (2N)}$$

Kohärente und inkohärente Streuung

Die Möglichkeit der Interferenz von Strahlen ist nur bei einem **kohärenten Streuprozess** (siehe Phasenverschiebung beim Streuprozess) und bei periodischer Anordnung der Streuer möglich. Dann liegt also eine **fest Phasebeziehung** zwischen den Strahlen der individuellen Streuer vor. Die Situation ändert sich vollständig, wenn die Streuer unregelmäßig angeordnet sind oder ihre Orte zeitlich fluktuieren. Die Strahlen einer solchen Anordnung zeigen **statistisch verteilte oder zeitlich variierende Phasenbeziehungen** und sind charakteristisch für **inkohärente Streuung**.

Streuintensitäten

- Bei der kohärenten Streuung ist die Gesamtintensität gleich dem **Quadrat der Summe aller Streuamplituden** (unter Beachtung ihre relativen Phasen).
- Bei der inkohärenten Streuung **addieren sich die Amplituden der Einzelwellen**, die relativen Phasen mitteln sich heraus und spielen für die Intensität keine Rolle.

Anwendung in der kohärenten Streuung in der Optik

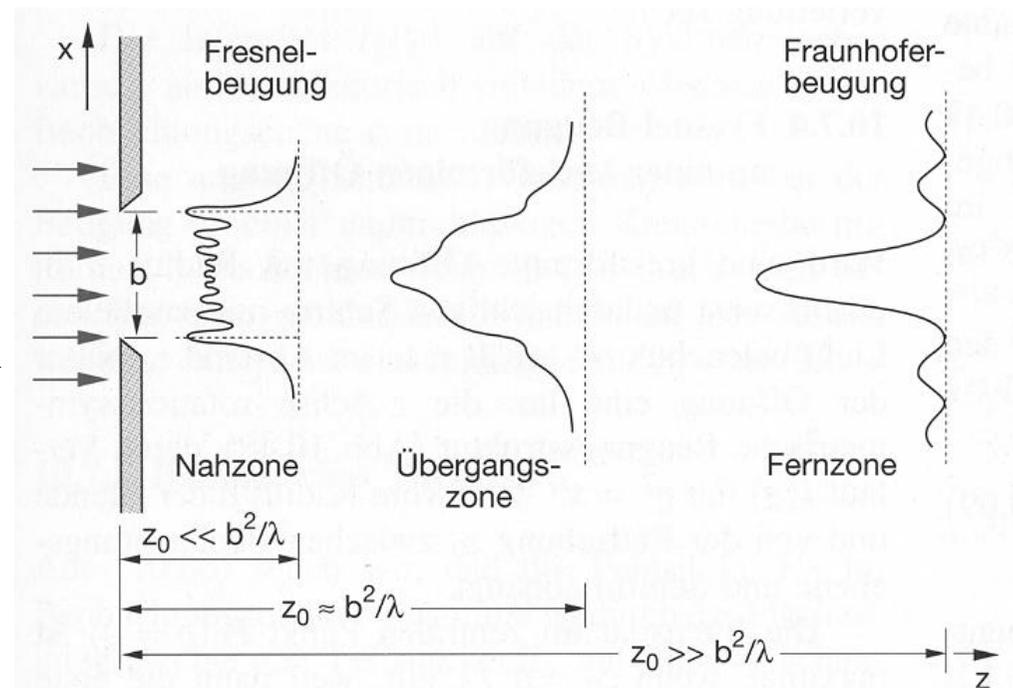
Reflexionsgitter zur Monochromatisierung von Licht („Beugungsgitter“)

Fraunhofer – und Fresnel-Beugung

Wenn wie im vorherigen Abschnitt über Beugung davon ausgegangen wird, dass es sich bei einfallenden und gestreuten Strahlenbündel um parallele Lichtbündel handelt, wird von **Fraunhofer-Beugung** gesprochen. Diese Bedingung ist in guter Näherung erfüllt, wenn der Abstand der Bildebenen vom beugenden Hindernis sehr groß in Bezug auf die Wellenlänge des Lichts und die räumlich Ausdehnung der Hindernisses ist.

Die Situation wird komplizierter wenn die einzelnen Strahlenbündel divergent (bzw. konvergent) sind ($\alpha \pm \Delta\alpha$). Diese Eigenschaft ist besonders im Nahfeld hinter dem streuenden Hindernis gegeben und wird **Fresnel-Beugung** genannt.

In der Kristallographie findet die Fraunhofer-Beugung Anwendung !



Fresnel –und Fraunhofer Beugung am Spalt

Fresnel-Beugung

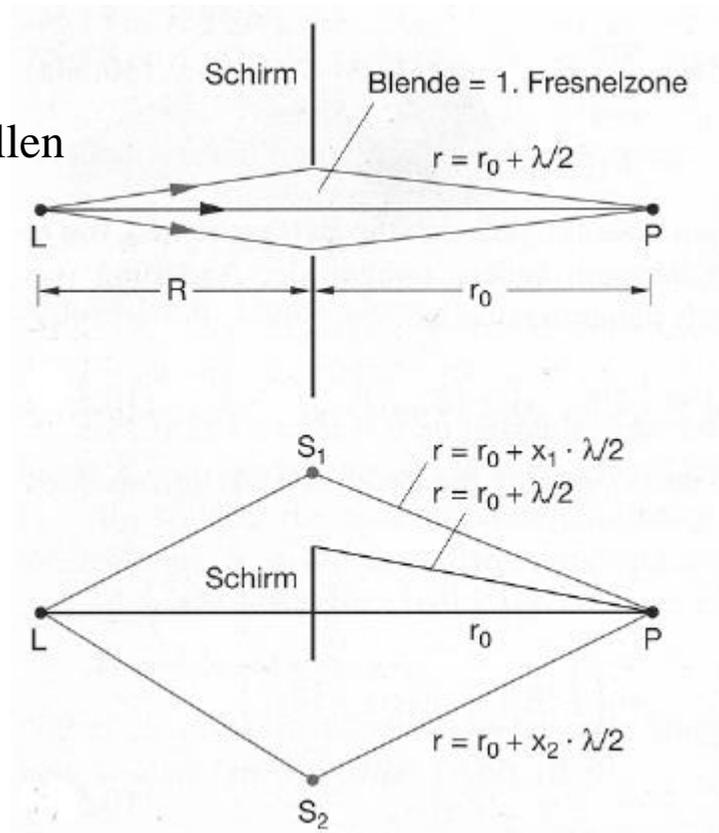
Da man bei der Fresnel-Beugung die Strahlintensität im Nahfeld betrachtet, spielt für die Interferenz der Wellen im Punkt P die Ausdehnung des Hindernisses für den Laufweg des Licht vom Hindernis zur Bildebene eine Rolle.

$$E(P) = \frac{2E_0}{R + r_0} e^{-i[k(R+r_0) - \omega t]}$$

Die Abstände $r = r_0 + m \cdot \lambda/2$ kennzeichnen die sogenannten **Fresnelzonen**. Von diesen Zonen gibt es alternierend positive und negative Beiträge zur Intensität am Punkt P.

Wenn durch eine kreisförmige Öffnung nur die erste Fresnelzone durchgelassen wird (oder durch eine Scheibe abgeschirmt wird), so ist die Intensität im Punkt P (im Nahfeld) doppelt so groß wie ohne Öffnung (bzw. ohne Scheibe).

Radius des Hindernisses: $r = \sqrt{r_0 \cdot l} \longrightarrow$



Fresnel-Beugung einer kreisförmigen Öffnung /Scheibe

Fresnel-Beugung: $\rho^2 \geq \lambda r_0$
 Fraunhofer-Beugung: $\rho^2 \ll \lambda r_0$

Fresnelsche Zonenplatte

Werden in einer geeigneten Anordnung nun z.B. nur die geradzahligen Zonen durchgelassen, so kann im Punkt P noch mehr Licht konzentriert werden. Eine solche Anordnung von vielen konzentrischen Ringen heißt **Fresnelsche Zonenplatte**. Eine solche Zonenplatte wirkt wie eine Linse mit der Brennweite:

$$f = \frac{r_1^2}{\lambda}$$

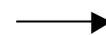
Die Brennweite einer Zonenplatte wird durch den Radius der 1. Zone und durch die Wellenlänge bestimmt. Eine Zonenplatte zeigt also eine wellenlängenabhängige Brennweite (=> Anwendung als Röntgenlinsen)

Röntgenlinsen

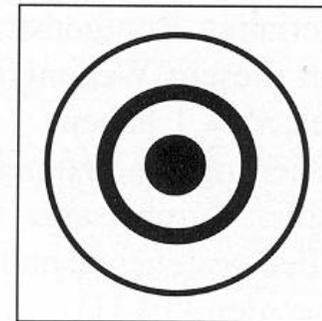
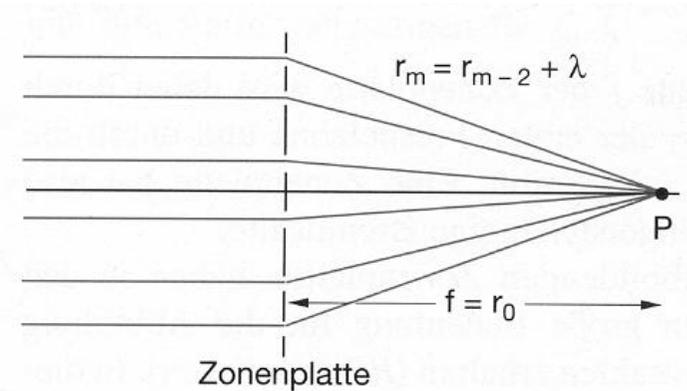
Beispiel für $\lambda = 5 \text{ nm}$ eine Brennweite $f = 1 \text{ mm}$

$$r_0^2 = f \cdot \lambda = 5 \text{ mm}^2$$

einige 100 Ringe mit $0.1 \mu\text{m}$
Genauigkeit (Elektronenstrahlolithographie)



Problem: transversale Auflösung $\sim 4\lambda$
longitudinale Auflösung $\sim 16\lambda$



Prinzip der Fresnel'schen Zonenplatte

Objektrekonstruktion und Diffraction im Fourierbild

Analogie zwischen Mikroskopie und Beugungsverfahren

Wichtige Eigenschaften des
Abbildungsprozesses:

Auflösung

Rayleigh-Kriterium:

$$\varepsilon \cdot D \sim \lambda$$

ε : Winkelabstand

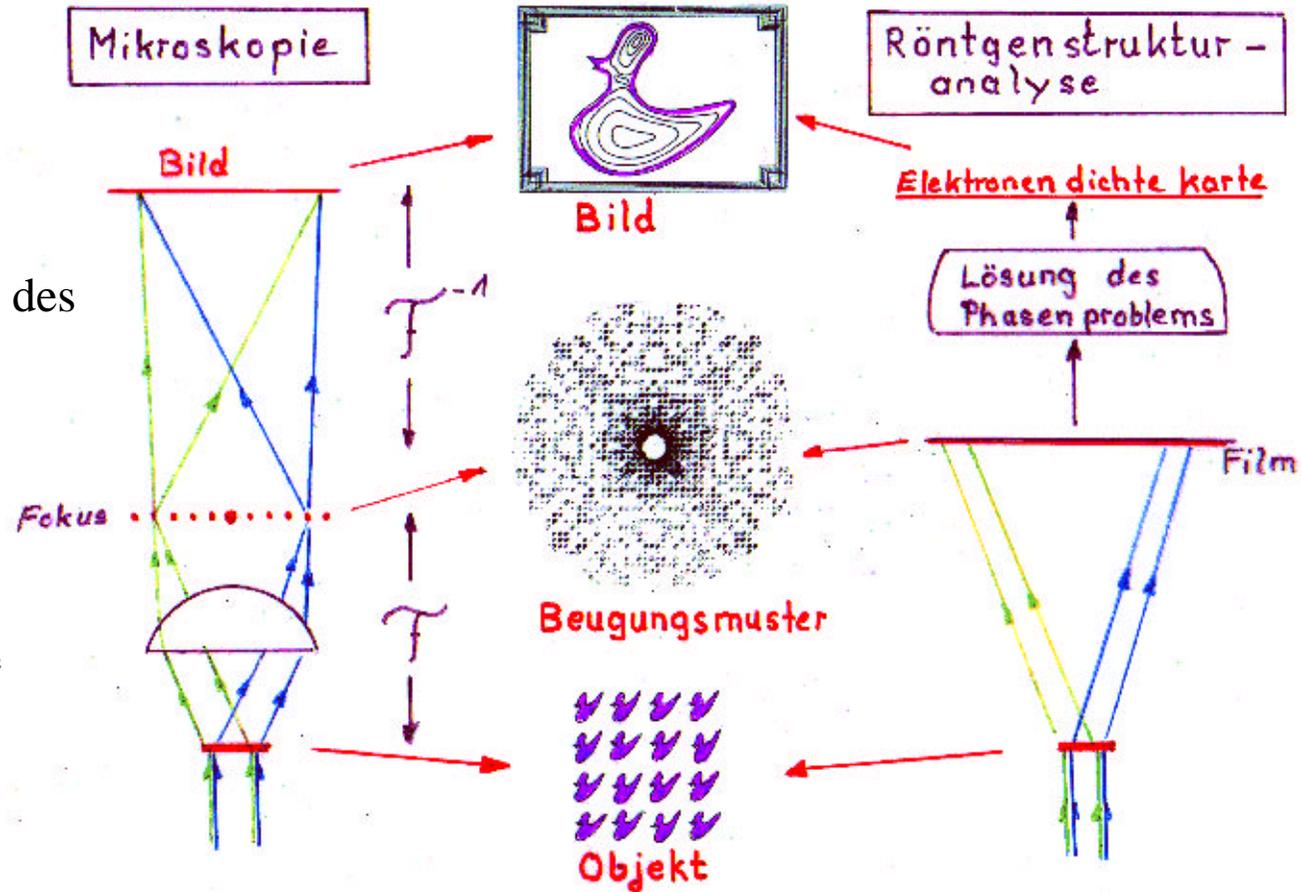
D: Durchmesser der Linse

Kontrast

lokale Unterschiede
in der Streukraft

Intensität

- hohe Primärstrahlintensität
- im Kristall durch den Gitterfaktor



F: Fouriertransformation

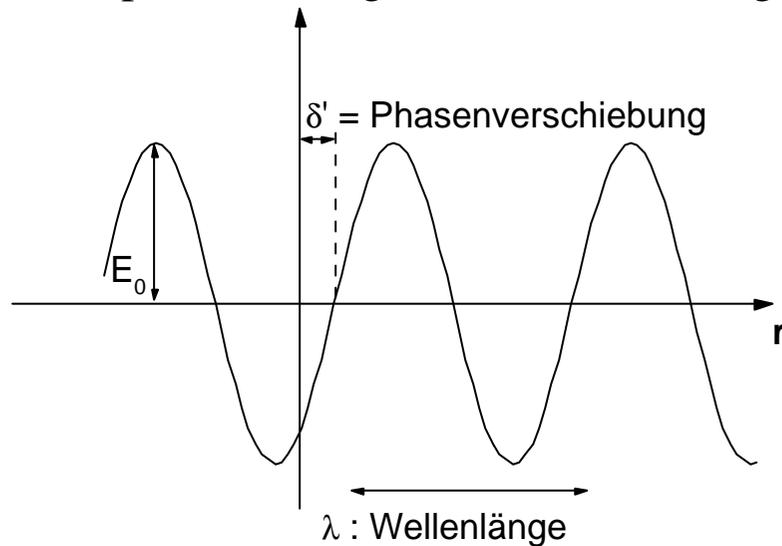
F^{-1} : inverse Fouriertransformation

Beschreibung des Diffraktionsbildes für ein beliebiges Objekt

Motivation

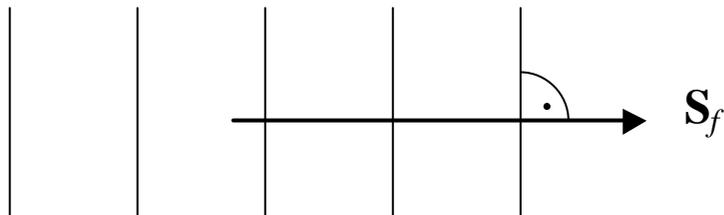
Die Strahlung im Wellenbild als „Mittel zum Ausmessen“ der mikroskopischen Struktur:

Beispiel einer allgemeinen elektromagnetischen Welle:



$$E(\mathbf{r}, t) = E_0 e^{2\pi i \left(\frac{\mathbf{S}_f \mathbf{r}}{l} - nt + d' \right)}$$
$$= E_0 \left[\cos 2\pi \left(\frac{\mathbf{S}_f \mathbf{r}}{l} - nt + d' \right) + i \sin 2\pi \left(\frac{\mathbf{S}_f \mathbf{r}}{l} - nt + d' \right) \right]$$

Das ist eine ebene Welle, wobei der Einheitsvektor \mathbf{S}_f die Richtung der Wellenfront angibt.



Bedingung erfüllt bei großem Abstand der Lichtquelle vom beugenden Objekt.

Beschreibung des Diffraktionsbildes für ein beliebiges Objekt

Zwei ebene Wellen, die sich in gleicher Richtung mit gleicher Wellenlänge λ und mit gleicher Frequenz ν bewegen, können sich durch ihre Phase unterscheiden:

$$E_1(\mathbf{r}, t) = E_0 e^{2\pi i \left(\frac{\mathbf{S}_f \mathbf{r}}{l} - \nu t + d_1' \right)}$$

$$E_2(\mathbf{r}, t) = E_0 e^{2\pi i \left(\frac{\mathbf{S}_f \mathbf{r}}{l} - \nu t + d_2' \right)} = E_1(\mathbf{r}, t) e^{2\pi i d} \quad \text{mit } d = d_2' - d_1'$$

Die Überlagerung zweier solcher Wellen ergibt:

$$E_1(\mathbf{r}, t) + E_2(\mathbf{r}, t) = E_1(\mathbf{r}, t) (1 + e^{2\pi i d})$$

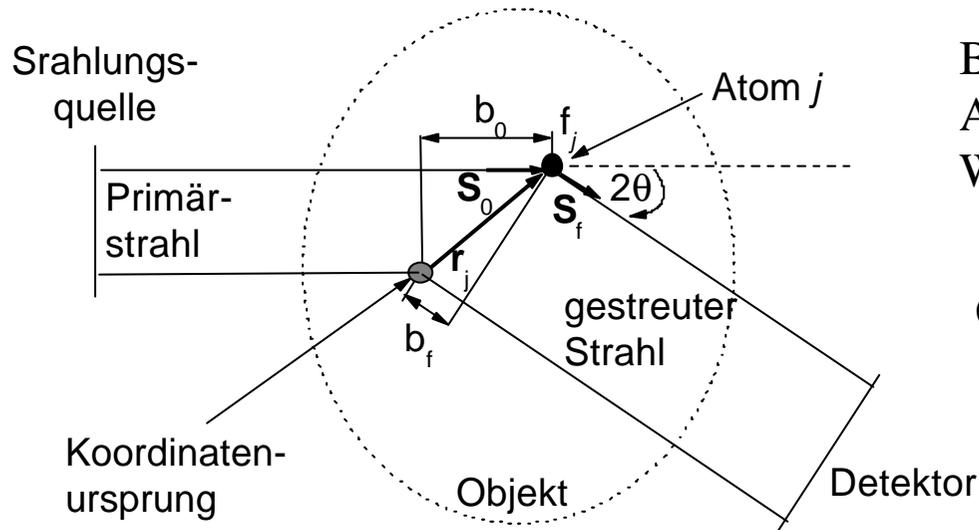
konstanter Faktor

Phasenfaktor

Dieses Beispiel zeigt, daß es einen konstanten Faktor gibt und einen Phasenfaktor, der die gegenseitige Beziehung beider Wellen beschreibt (zeitlich konstanter Phasenfaktor => Kohärenz !).

Beschreibung des Diffraktionsbildes für ein beliebiges Objekt

Wenn man eine ebene Welle an einem beliebigen Objekt streut, dann wird von jedem Atom j eine ebene Welle mit unterschiedlicher Phase gestreut. Diese Phase enthält eine Information über die Lage des Atoms im Objekt.



Berechnung der Phase ϕ_j der Welle die am Atom j gestreut wird, verglichen mit der Welle, die am Ursprung gestreut wird.

Gangunterschied beider Wellen: $b_f - b_0$

$$\mathbf{j}_j = 2\mathbf{p} \frac{b_f - b_0}{l}$$

$$\mathbf{j}_j = 2\mathbf{p} (\mathbf{r}_j \mathbf{s}_f - \mathbf{r}_j \mathbf{s}_0) / l = 2\mathbf{p} \mathbf{r}_j (\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_0)$$

$$\boxed{\mathbf{j}_j = 2\mathbf{p} \mathbf{r}_j \mathbf{s}} \quad \text{mit dem Streuvektor}$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_0 = \frac{\mathbf{s}_f}{l} - \frac{\mathbf{s}_0}{l}$$

f_j gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der die Welle am Atom j gestreut wird.

Für Röntgenbeugung ist

$$f_j \sim Z$$

Beschreibung des Diffraktionsbildes für ein beliebiges Objekt

Der Strukturfaktor $F(\mathbf{s})$ stellt das Verhältnis zwischen Streuung an einem realen Objekt und der Streuung an einem einzelnen Atom im Ursprung dar:

$$F(\mathbf{s}) = F(\mathbf{r}, t) f_j e^{i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}_j}$$

Wenn der für alle Wellen gleiche Teil $F(\mathbf{r}, t)$ weggelassen wird erhält man:

$$F(\mathbf{s}) = f_j e^{i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}_j}$$

Wenn alle Wellen, die von jedem Atom im Objekt in eine bestimmte Richtung gestreut werden sich überlagern (Interferenz), so erhält man:

$$F(\mathbf{s}) = \sum_j f_j e^{i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}_j}$$

Interferenz – oder Diffraktionsbild

Dies ist die grundlegende Formel zur Berechnung des Diffraktogramms und entspricht allgemein mathematisch formuliert der Fouriertransformation des Objektes:

$$F(\mathbf{s}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\mathbf{r}) e^{i2\mathbf{p}\mathbf{s}\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$d\mathbf{r}$: Volumenelement

$\rho(\mathbf{r})$: Elektronendichteverteilung (Röntgenbeugung)

bzw. kohärente Streulängendichteverteil. (Neutronenbeug.)

Beschreibung des Diffraktionsbildes für ein beliebiges Objekt

Wenn man eine spezielle diskrete Dichteverteilung betrachtet

$$\mathbf{r}(\mathbf{r}) = \sum_j f_j \mathbf{d}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}) \quad \text{mit der Dirac'schen Deltafunktion } \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r})$$

erhält man eingesetzt in die Fouriertransformation und nach Integration wieder die Summenformel für das Diffraktionsbild.

Nachdem gezeigt wurde, daß das Diffraktionsbild die Fouriertransformation des Objektes ist, kann mit Hilfe der inversen Fouriertransformation aus dem Diffraktionsbild das Objekt (bzw. die Elektronendichteverteilung bei Röntgenbeugung) berechnet werden.

$$\mathbf{r}(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\mathbf{s}) e^{-i2\pi\mathbf{s}\mathbf{r}} d\mathbf{s} \quad d\mathbf{s}: \text{Volumenelement im reziproken Raum (s-Raum)}$$

$F(\mathbf{s})$ entspricht bei der Streuung von Photonen dem elektrischen Feld $E(\mathbf{s})$. Weder $E(\mathbf{s})$ noch $F(\mathbf{s})$ kann direkt gemessen werden, sondern nur deren Quadrate d.h. die Intensität.

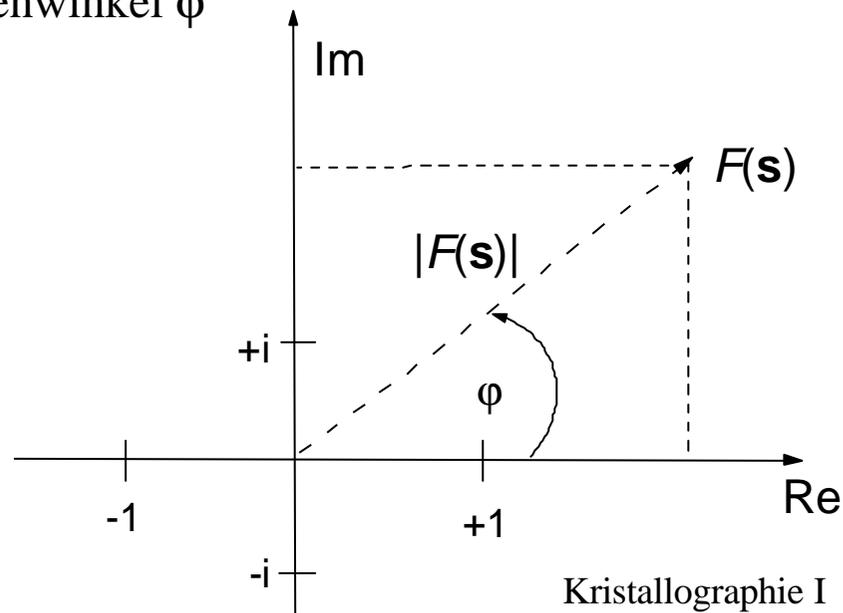
Der Strukturfaktor

Da $F(\mathbf{s})$ im allgemeinen eine komplexe Zahl ist, errechnet sich die Intensität wie folgt:

$$I(\mathbf{s}) = F(\mathbf{s})F^*(\mathbf{s}) \quad \text{wobei } F^*(\mathbf{s}) \text{ das konjugiert Komplexe von } F(\mathbf{s}) \text{ ist.}$$

$$\text{Komplexe Darstellung: } F(\mathbf{s}) = |F(\mathbf{s})|e^{i\mathbf{f}} \quad \Rightarrow \quad I(\mathbf{s}) = |F(\mathbf{s})|^2 e^{i\mathbf{f}} e^{-i\mathbf{f}} = |F(\mathbf{s})|^2$$

Das bedeutet, daß bei einem Diffraktionsbild immer nur Intensitäten $I(\mathbf{s})$ gemessen werden, nicht aber die eigentlich notwendige Größe der Streuamplitude $F(\mathbf{s})$. Aus $I(\mathbf{s})$ läßt sich aber nur der Betrag von $F(\mathbf{s})$ also $|F(\mathbf{s})|$ berechnen, nicht aber der Phasenwinkel φ \Rightarrow Phasenproblem !!



$$F = F_r + iF_i$$

$$F_i = |F| \sin \mathbf{f}$$

$$F_r = |F| \cos \mathbf{f}$$

$$\mathbf{f} = \tan^{-1} (F_i/F_r)$$