

5. Prinzip der Beugung

Laue/Bragg'sche Gleichung, reziprokes Gitter, Ewald-Konstruktion



M+K-Basiskurs 'Kristallographie und Beugung', WS 2018/2019, C. Röhr

Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

Laue und Bragg'sche Gleichung (Vektorfrei)

Miller-Indizes, Netzebenenabstände

Laue-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung
Lauegleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

Bragg'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung: Von Bragg ... bis Ewald

Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

Laue und Bragg'sche Gleichung (Vektorfrei)

Miller-Indizes, Netzebenenabstände

Laue-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung

Lauegleichung, Streuvektor

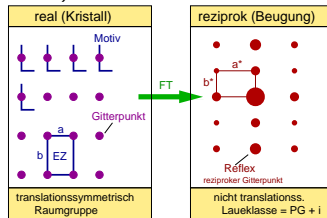
Reziprokes Gitter

Bragg'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung: Von Bragg ... bis Ewald

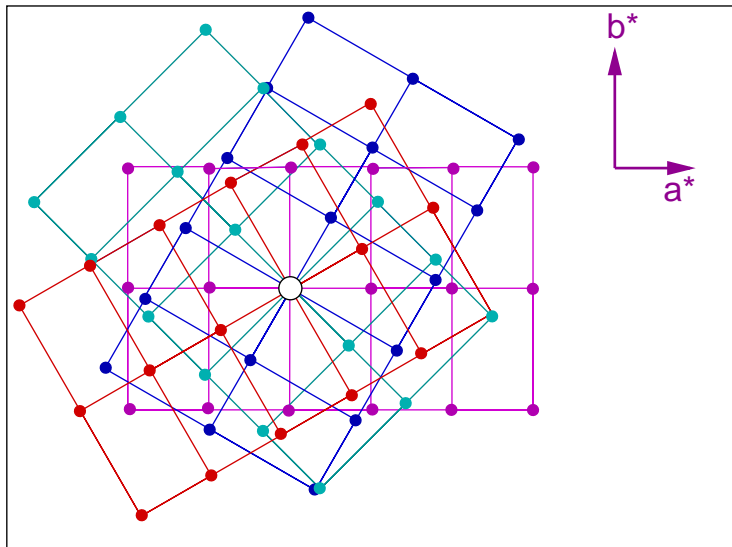
Prinzip und Analogie zur Optik

- ▶ Wellenlänge monochromatischer Strahlung \approx Atomabstände
- ▶ Superposition von Wellen mit Phasenverschiebung
- ▶ Röntgenbeugung analog Beugung am Spalt/Gitter der Optik
- ▶ 2D-Beispiele (Dias und Laser)

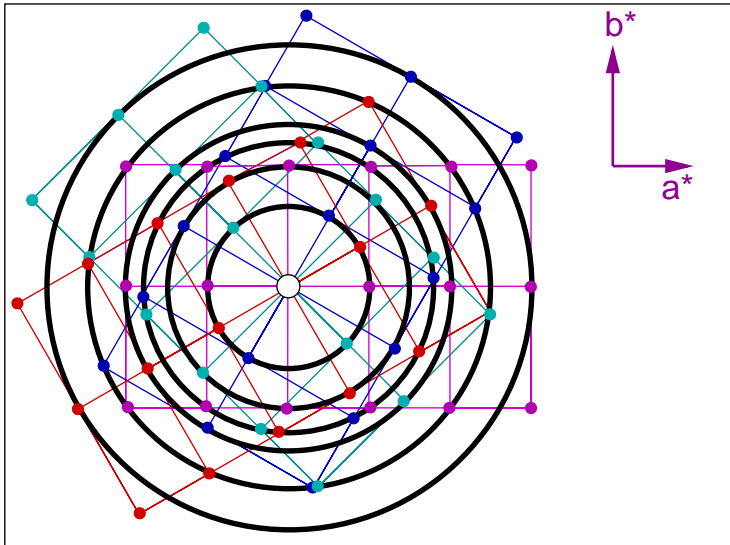


- ▶ reziproke Abstandsverhältnisse Gitter \leftrightarrow 'Reflexe'
 - ▶ Orte (beschrieben durch reziprokes Gitter) \mapsto Gitterinformation
 - ▶ Intensitäten \mapsto Motivinformation
 - ▶ Punktgruppe des Beugungsmusters \mapsto Laueklasse (Kristallklasse + $\bar{1}$)
- ▶ Prinzipien: Position/Intensität/Breite von Reflexen
 - ▶ Informationen bei Einkristallen bzw. Pulvern \Downarrow als Proben

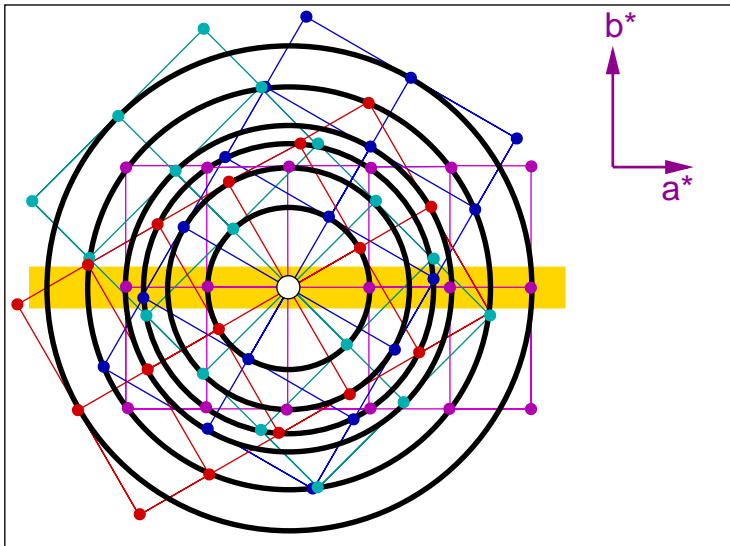
Informationen aus Pulvern ?



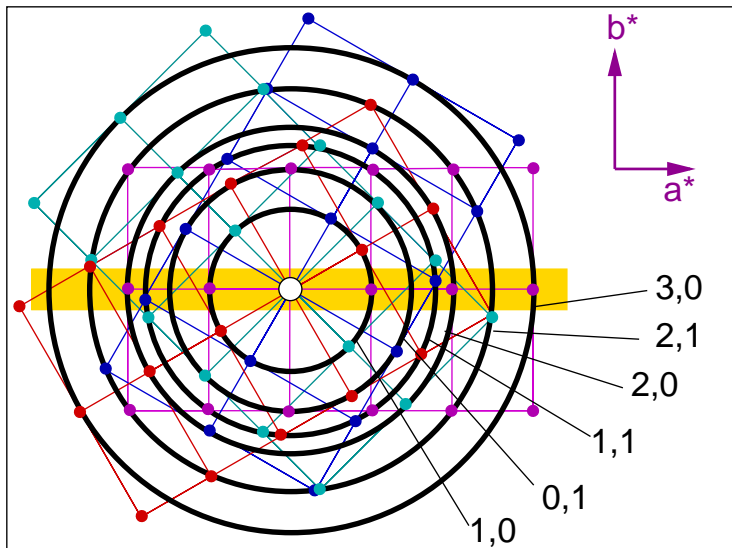
Informationen aus Pulvern ?



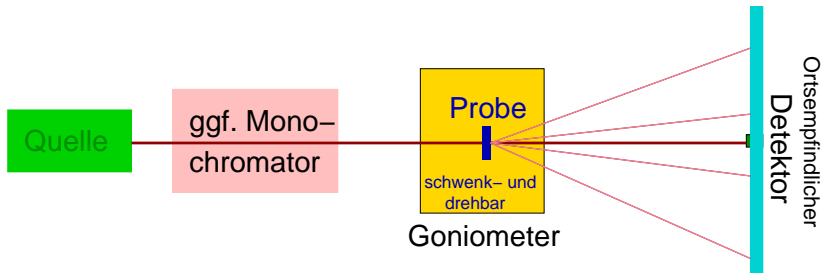
Informationen aus Pulvern ?



Informationen aus Pulvern ?



Einteilung der Beugungsmethoden



► nach Strahlungsart

1. Röntgen (elektromagnetische Strahlung)
2. Elektronen
3. Neutronen

► nach Probe

1. Gase, Flüssigkeiten, amorphe Feststoffe → sehr speziell
2. kristalline Feststoffe
 - Einkristalle
 - Pulver

Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

Laue und Bragg'sche Gleichung (Vektorfrei)

Miller-Indizes, Netzebenenabstände

Laue-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung

Lauegleichung, Streuvektor

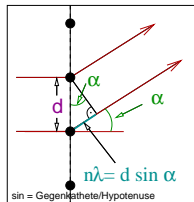
Reziprokes Gitter

Bragg'sche Gleichung ? Reflexe ?

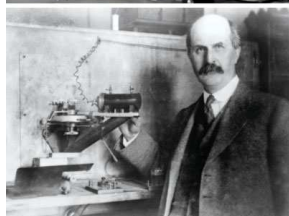
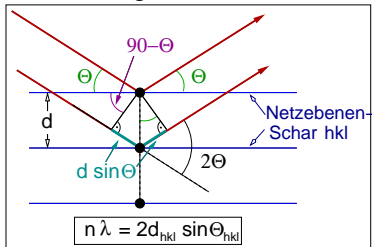
Zusammenfassung: Von Bragg ... bis Ewald

Gleichungen von Laue und Bragg/Bragg (Vektorfrei)

▶ Laue-Gleichung



▶ Bragg'sche Gleichung

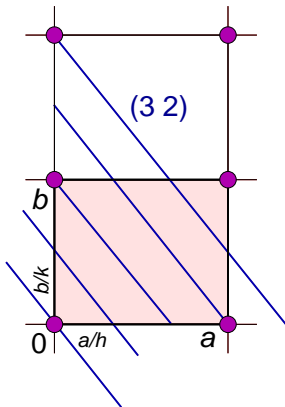


William Lawrence Bragg (o)

William Henry Bragg (u)

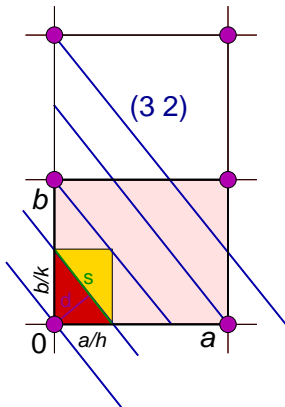
Netzebenenabstände (in 2D, kartesisch)

- ▶ Netzebenenschar (hier (3 2)) schneiden die Achsen bei $\frac{a}{3}$ bzw. $\frac{b}{2}$



Netzebenenabstände (in 2D, kartesisch)

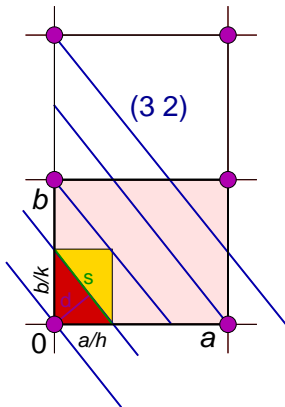
- ▶ Netzebenenschar (hier (3 2)) schneiden die Achsen bei $\frac{a}{3}$ bzw. $\frac{b}{2}$



- ▶ Fläche des gelben Rechtecks bzw. des doppelten roten Dreiecks: $2 \cdot \left(\frac{1}{2}sd\right) = \frac{a}{h} \frac{b}{k}$
- ▶ bzw. aufgelöst: $s^2 = \frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2}$
- ▶ für s^2 gilt aber nach Pythagoras auch: $s^2 = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$
- ▶ Gleichsetzen (und damit Eliminieren von s): $\frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2} = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$
- ▶ und Auflösen nach $\frac{1}{d^2}$: $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2}$

Netzebenenabstände (in 2D, kartesisch)

- ▶ Netzebenenchar (hier (3 2)) schneiden die Achsen bei $\frac{a}{3}$ bzw. $\frac{b}{2}$



- ▶ Fläche des gelben Rechtecks bzw. des doppelten roten Dreiecks: $2 \cdot \left(\frac{1}{2}sd\right) = \frac{a}{h} \frac{b}{k}$
- ▶ bzw. aufgelöst: $s^2 = \frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2}$
- ▶ für s^2 gilt aber nach Pythagoras auch: $s^2 = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$
- ▶ Gleichsetzen (und damit Eliminieren von s): $\frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2} = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$
- ▶ und Auflösen nach $\frac{1}{d^2}$: $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2}$
- ▶ bzw. entsprechend in 3D: $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}$
- ▶ \mapsto Indizierung von Pulverdiffraktogrammen

Netzebenenabstände (in 3D)

- ▶ kubisch

$$\frac{1}{d_{hkl}} = \sqrt{\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}}$$

- ▶ ...

- ▶ monoklin

$$\frac{1}{d_{hkl}} = \sqrt{\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}}$$

- ▶ triklin

$$\frac{1}{d_{hkl}} =$$

$$\sqrt{\frac{\frac{h^2}{a^2} \sin^2 \alpha + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma + \frac{2kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + \frac{2hl}{ac} (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) + \frac{2hk}{ab} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)}{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}}$$

Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

Laue und Bragg'sche Gleichung (Vektorfrei)

Miller-Indizes, Netzebenenabstände

Laue-Gleichung (Vektorform)

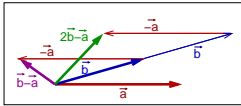
Basics Vektorrechnung
Lauegleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

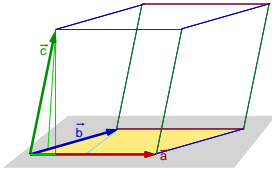
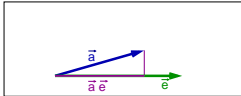
Bragg'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung: Von Bragg ... bis Ewald

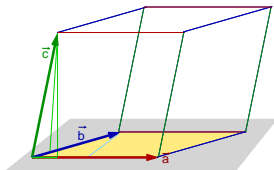
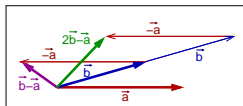
Vektoren



► Addition, Subtraktion, Multiplikation mit Skalaren



Vektoren



► Addition, Subtraktion, Multiplikation mit Skalaren

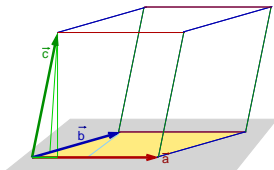
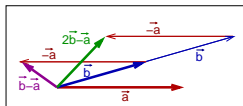
► Skalar- oder Punktprodukt: $\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}| |\vec{b}| \cos(\vec{a}, \vec{b})$

□ d.h. $\vec{a} \perp \vec{b} \mapsto \vec{a} \cdot \vec{b} = 0$

□ Spezialfall: Projektion von \vec{a} auf beliebigen

Einheitsvektor \vec{e} : $a_e = \vec{a} \cdot \vec{e}$

Vektoren



► Addition, Subtraktion, Multiplikation mit Skalaren

► Skalar- oder Punktprodukt: $\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}| |\vec{b}| \cos(\vec{a}, \vec{b})$

d.h. $\vec{a} \perp \vec{b} \mapsto \vec{a} \cdot \vec{b} = 0$

Spezialfall: Projektion von \vec{a} auf beliebigen

Einheitsvektor \vec{e} : $a_e = \vec{a} \cdot \vec{e}$

► Vektor- oder Kreuzprodukt: $\vec{v} = \vec{a} \times \vec{b}$

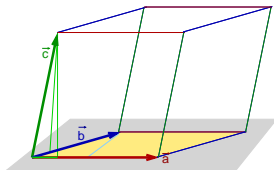
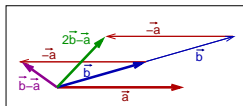
anschaulich $\vec{v} \perp \vec{a}, \vec{b}$

d.h. für $\vec{a} \parallel \vec{b} \mapsto \vec{a} \times \vec{b} = \vec{0}$

Betrag des Vektorproduktes:

$|\vec{a} \times \vec{b}| = |\vec{a}| |\vec{b}| \sin(\vec{a}, \vec{b})$ (Fläche des von \vec{a} und \vec{b} aufgespannten Parallelogramms)

Vektoren



- ▶ Addition, Subtraktion, Multiplikation mit Skalaren

- ▶ Skalar- oder Punktprodukt: $\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}| |\vec{b}| \cos(\vec{a}, \vec{b})$

- d.h. $\vec{a} \perp \vec{b} \mapsto \vec{a} \cdot \vec{b} = 0$

- Spezialfall: Projektion von \vec{a} auf beliebigen

- Einheitsvektor \vec{e} : $a_e = \vec{a} \cdot \vec{e}$

- ▶ Vektor- oder Kreuzprodukt: $\vec{v} = \vec{a} \times \vec{b}$

- anschaulich $\vec{v} \perp \vec{a}, \vec{b}$

- d.h. für $\vec{a} \parallel \vec{b} \mapsto \vec{a} \times \vec{b} = \vec{0}$

- Betrag des Vektorproduktes:

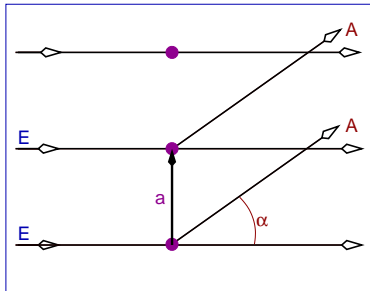
- $|\vec{a} \times \vec{b}| = |\vec{a}| |\vec{b}| \sin(\vec{a}, \vec{b})$ (Fläche des von \vec{a} und \vec{b} aufgespannten Parallelogramms)

- ▶ Spatprodukt: $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = V$

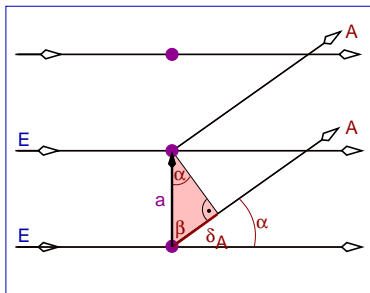
- anschaulich: Volumen des durch \vec{a} , \vec{b} und \vec{c} aufgespannten Parallelepipeds

Atomkette, senkrechter Einfall, Vektorschreibweise (Laue-Gleichung)

- Atomkette mit Abstand $a = |\vec{a}|$



Atomkette, senkrechter Einfall, Vektorschreibweise (Laue-Gleichung)



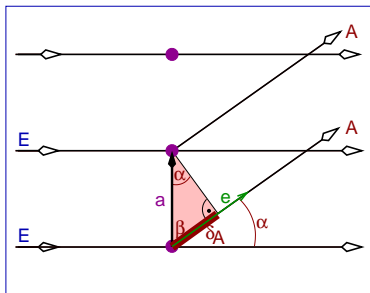
- ▶ Atomkette mit Abstand $a = |\vec{a}|$
- ▶ Wegdifferenz δ_A zwischen den beiden Strahlen:

$$\delta_A = |\vec{a}| \sin \alpha_A$$

- ▶ oder als Funktion des Winkels β_A :

$$\delta_A = |\vec{a}| \cos \beta_A$$

Atomkette, senkrechter Einfall, Vektorschreibweise (Laue-Gleichung)



- ▶ Atomkette mit Abstand $a = |\vec{a}|$
- ▶ Wegdifferenz δ_A zwischen den beiden Strahlen:

$$\delta_A = |\vec{a}| \sin \alpha_A$$

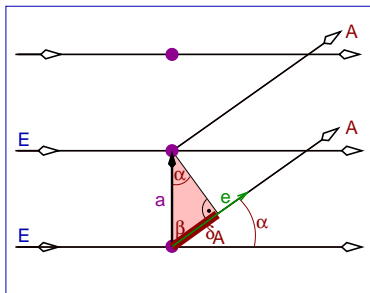
- ▶ oder als Funktion des Winkels β_A :

$$\delta_A = |\vec{a}| \cos \beta_A$$

- ▶ $\delta_A =$ Projektion von \vec{a} auf die Ausfallrichtung (Einheitsvektor \vec{e}_A)

$$\delta_A = |\vec{a}| \cos(\vec{a}, \vec{e}_A) = \vec{a} \vec{e}_A$$

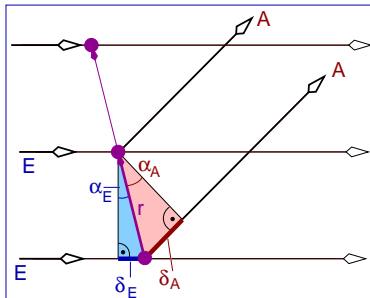
Atomkette, senkrechter Einfall, Vektorschreibweise (Laue-Gleichung)



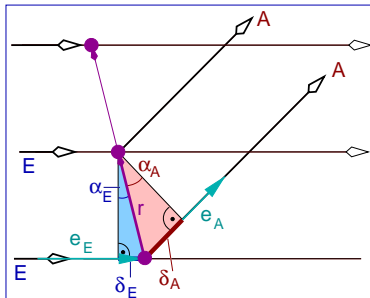
- ▶ Atomkette mit Abstand $a = |\vec{a}|$
- ▶ Wegdifferenz δ_A zwischen den beiden Strahlen:
 - $\delta_A = |\vec{a}| \sin \alpha_A$
- ▶ oder als Funktion des Winkels β_A :
 - $\delta_A = |\vec{a}| \cos \beta_A$
- ▶ $\delta_A =$ Projektion von \vec{a} auf die Ausfallrichtung (Einheitsvektor \vec{e}_A)
 - $\delta_A = |\vec{a}| \cos(\vec{a}, \vec{e}_A) = \vec{a} \vec{e}_A$
- ▶ positive Interferenz der Streuwellen \mapsto Wegdifferenz δ_A (Phasenverschiebung) $= \lambda$ (bzw. einem Mehrfachen (n))
 - $n\lambda = \delta_A = |\vec{a}| \cos(\vec{a}, \vec{e}_A)$

Atomkette, schiefer Einfall (Bragg'sche Gleichung)

- ▶ allgemeiner Gittervektor: \vec{r}
- ▶ Wegdifferenz Strahlen: $\delta_A + \delta_E$



Atomkette, schiefer Einfall (Bragg'sche Gleichung)

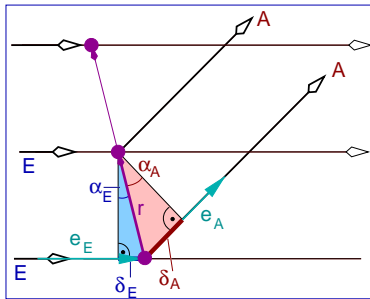


- ▶ allgemeiner Gittervektor: \vec{r}
- ▶ Wegdifferenz Strahlen: $\delta_A + \delta_E$
- ▶ für beide Dreiecke gilt analog dem senkrechten Einfall:

$$\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A) \quad \text{bzw.}$$

$$\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E)$$

Atomkette, schiefer Einfall (Bragg'sche Gleichung)



- ▶ allgemeiner Gittervektor: \vec{r}
- ▶ Wegdifferenz Strahlen: $\delta_A + \delta_E$
- ▶ für beide Dreiecke gilt analog dem senkrechten Einfall:

$$\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A) \quad \text{bzw.}$$

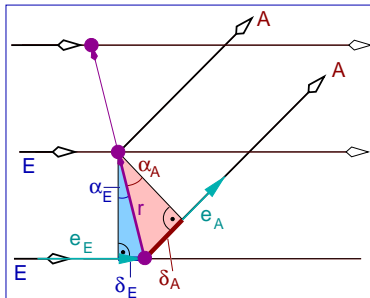
$$\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E)$$

- ▶ bzw. als Skalarprodukte mit den Einheitsvektoren \vec{e}_A bzw. \vec{e}_E formuliert (Projektion von \vec{r} auf diese Richtungen)

$$\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A) = \vec{r} \vec{e}_A$$

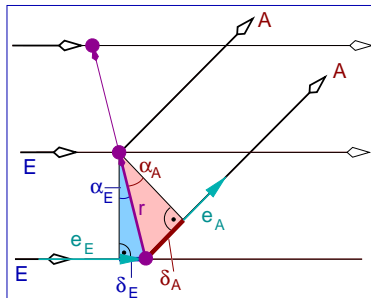
$$\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E) = -\vec{r} \vec{e}_E$$

Atomkette, schiefer Einfall (Bragg'sche Gleichung)



- ▶ allgemeiner Gittervektor: \vec{r}
- ▶ Wegdifferenz Strahlen: $\delta_A + \delta_E$
- ▶ für beide Dreiecke gilt analog dem senkrechten Einfall:
 - $\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A)$ bzw.
 - $\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E)$
- ▶ bzw. als Skalarprodukte mit den Einheitsvektoren \vec{e}_A bzw. \vec{e}_E formuliert (Projektion von \vec{r} auf diese Richtungen)
 - $\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A) = \vec{r} \vec{e}_A$
 - $\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E) = -\vec{r} \vec{e}_E$
- ▶ d.h. für die Summe (gesamte Phasenverschiebung)
 - $\delta_A + \delta_E = \vec{r} \vec{e}_A - \vec{r} \vec{e}_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$

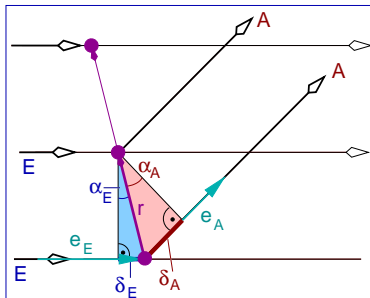
Streuvektor und Ewaldkonstruktion



- ▶ positive Interferenz bei einem Gangunterschied von λ :

$$\lambda = \delta_A + \delta_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$

Streuvektor und Ewaldkonstruktion



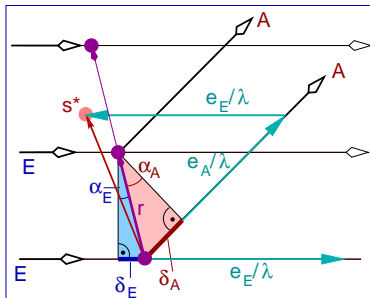
- ▶ positive Interferenz bei einem Gangunterschied von λ :

$$\lambda = \delta_A + \delta_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$

- ▶ Trick: auf λ 'normierte' Einheitsvektoren:

$$1 = \vec{r} \underbrace{\left(\frac{\vec{e}_A}{\lambda} - \frac{\vec{e}_E}{\lambda} \right)}_{\vec{s}^*}$$

Streuvektor und Ewaldkonstruktion



- ▶ positive Interferenz bei einem Gangunterschied von λ :

$$\lambda = \delta_A + \delta_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$

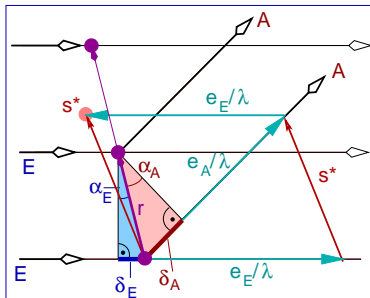
- ▶ Trick: auf λ 'normierte' Einheitsvektoren:

$$1 = \vec{r} \left(\underbrace{\frac{\vec{e}_A}{\lambda} - \frac{\vec{e}_E}{\lambda}}_{\vec{s}^*} \right)$$

- ▶ bzw. für den Streuvektor \vec{s}^* :

$$\vec{s}^* = \frac{1}{\vec{r}}$$

Streuvektor und Ewaldkonstruktion



- ▶ positive Interferenz bei einem Gangunterschied von λ :

$$\lambda = \delta_A + \delta_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$

- ▶ Trick: auf λ 'normierte' Einheitsvektoren:

$$1 = \vec{r} \left(\underbrace{\frac{\vec{e}_A}{\lambda} - \frac{\vec{e}_E}{\lambda}}_{\vec{s}^*} \right)$$

- ▶ bzw. für den Streuvektor \vec{s}^* :

$$\vec{s}^* = \frac{1}{\vec{r}}$$

- ▶ Ewald-Konstruktion (Praxis)

- ▶ Streuvektor um $1/\lambda$ vom Strahl weg verschieben
- ▶ Richtung 0 \mapsto Spitze Streuvektor = Ausfallrichtung des Strahls

Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

Laue und Bragg'sche Gleichung (Vektorfrei)

Miller-Indizes, Netzebenenabstände

Laue-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung
Lauegleichung, Streuvektor

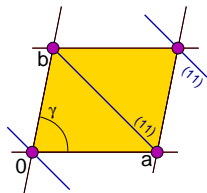
Reziprokes Gitter

Bragg'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung: Von Bragg ... bis Ewald

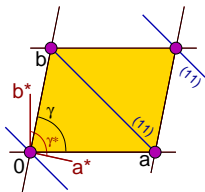
reales \leftrightarrow reziprokes Gitter

- ▶ reales Gitter: Basisvektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- ▶ Gittervektoren $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$

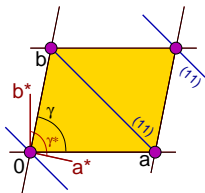


reales \leftrightarrow reziprokes Gitter

- ▶ **reales Gitter:** Basisvektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- ▶ Gittervektoren $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- ▶ **reziprokes Gitter:** Basisvektoren \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^*
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

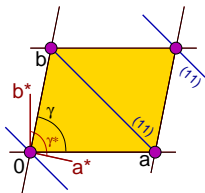


reales \leftrightarrow reziprokes Gitter



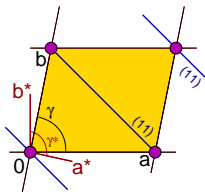
- ▶ **reales Gitter:** Basisvektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- ▶ Gittervektoren $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- ▶ **reziprokes Gitter:** Basisvektoren \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^*
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$
- ▶ **Bezug zwischen beiden Gittern (! Definition !)** $\vec{r}^* = \frac{1}{r}$
- ▶ erfüllt wenn:
 1. $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0$ usw. und $\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1$ usw.
 2. $h, k, l =$ Millerindizes der reale Netzebenen(scharen)

reales \leftrightarrow reziprokes Gitter



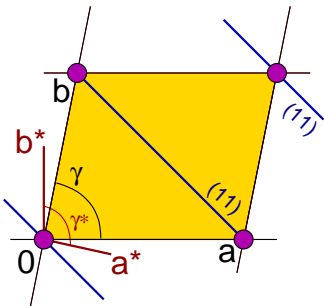
- ▶ **reales Gitter:** Basisvektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- ▶ Gittervektoren $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- ▶ **reziprokes Gitter:** Basisvektoren \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^*
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$
- ▶ **Bezug zwischen beiden Gittern (! Definition !)** $\vec{r}^* = \frac{1}{r}$
- ▶ erfüllt wenn:
 1. $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0$ usw. und $\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1$ usw.
 2. $h, k, l =$ Millerindizes der reale Netzebenen(scharen)
- ▶ da $\vec{r} = \frac{1}{s^*} = \frac{1}{r^*} \mapsto$ Reflex, wenn $\vec{r}^* = \vec{s}^*$

reales \leftrightarrow reziprokes Gitter



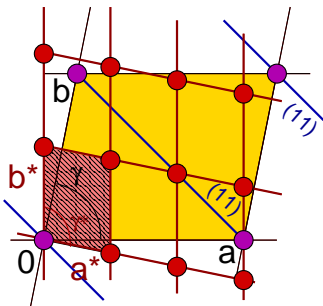
- ▶ **reales Gitter:** Basisvektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- ▶ Gittervektoren $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- ▶ **reziprokes Gitter:** Basisvektoren \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^*
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$
- ▶ **Bezug zwischen beiden Gittern (! Definition !)** $\vec{r}^* = \frac{1}{r}$
- ▶ erfüllt wenn:
 1. $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0$ usw. und $\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1$ usw.
 2. $h, k, l =$ Millerindizes der reale Netzebenen(scharen)
- ▶ da $\vec{r} = \frac{1}{s^*} = \frac{1}{r^*} \mapsto$ Reflex, wenn $\vec{r}^* = \vec{s}^*$
- ▶ weitere Beziehungen:
 - ▶ mit $\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{b \times c} \frac{1}{a}$
 - ▶ und da $(\vec{b} \times \vec{c}) \cdot \vec{a} = V$ (Spatprodukt)
 - ▶ folgt: $\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}$
 - ▶ d.h. $\vec{a}^* \perp b, c$ -Fläche usw. (Def. Vektorprodukt)

2D-Beispiel, schiefwinklig



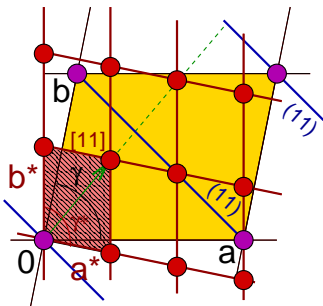
- ▶ reziproke Basis: $\vec{a}^* \perp \vec{b}$, $\vec{b}^* \perp \vec{a}$
- ▶ $\gamma^* = 180 - \gamma$

2D-Beispiel, schiefwinklig



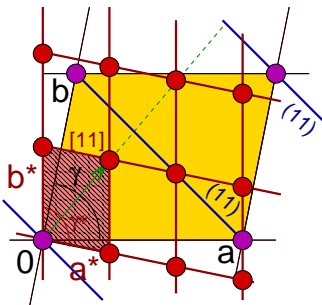
- ▶ reziproke Basis: $\vec{a}^* \perp \vec{b}$, $\vec{b}^* \perp \vec{a}$
- ▶ $\gamma^* = 180 - \gamma$
- ▶ reziprokes Gitter in dieser Basis

2D-Beispiel, schiefwinklig



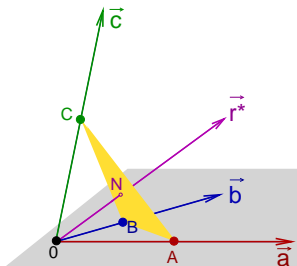
- ▶ reziproke Basis: $\vec{a}^* \perp \vec{b}$, $\vec{b}^* \perp \vec{a}$
- ▶ $\gamma^* = 180 - \gamma$
- ▶ reziprokes Gitter in dieser Basis
- ▶ und Gittervektoren (z.B. $[h, k] = [1, 1]$).

2D-Beispiel, schiefwinklig



- ▶ reziproke Basis: $\vec{a}^* \perp \vec{b}$, $\vec{b}^* \perp \vec{a}$
- ▶ $\gamma^* = 180 - \gamma$
- ▶ reziprokes Gitter in dieser Basis
- ▶ und Gittervektoren (z.B. $[h, k] = [1, 1]$).
- ▶ anschaulich: reziproker Gittervektor $[h, k] \perp$ Netzebenen­schar (h, k) im realen Raum.
- ▶ Länge: $|\vec{r}^*| = \frac{1}{d}$

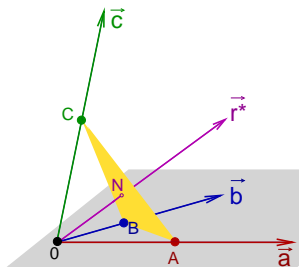
Reziprokes Gitter: Beweise I



Beweis, dass $\vec{r}^* \perp$ Ebene ABC

- ▶ Definition Millerindizes:
 $h = \frac{\vec{a}}{OA}$ bzw. $\vec{OA} = \frac{\vec{a}}{h}$ usw.
- ▶ damit gilt für Vektoren auf der Ebene ABC
 $\vec{BA} = \frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h}$ bzw. $\vec{CA} = \frac{\vec{c}}{l} - \frac{\vec{a}}{h}$
- ▶ diese Vektoren sind \perp zu \vec{r}^* , wenn die Skalarprodukte verschwinden, z.B.
 $0 = \vec{r}^* \cdot \vec{BA} = \vec{r}^* \cdot \left(\frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h}\right)$
- ▶ mit der Definition des reziproken Gittervektors
 $0 = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot \left(\frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h}\right)$
- ▶ und da $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0$ usw.
 $0 = -(h\vec{a}^*) \cdot \frac{\vec{a}}{h} + (k\vec{b}^*) \cdot \frac{\vec{b}}{k}$
 $0 = -\vec{a}^* \cdot \vec{a} + \vec{b}^* \cdot \vec{b} = -1 + 1$ (q.e.d.)

Reziprokes Gitter: Beweise II



Beweis, dass $|\vec{r}^*| = \frac{1}{d_H}$ ($H = hkl$)

- ▶ Die Projektion von \vec{OA} in Richtung \vec{r}^* soll damit dem Abstand d benachbarter Netzebenenscharen H entsprechen:

$$d_H = \frac{\vec{a}}{h} \cdot \frac{\vec{r}^*}{|\vec{r}^*|}$$

- ▶ mit der Definition von \vec{r}^*

$$\frac{1}{d_H} = \frac{h}{\vec{a}} \cdot \frac{|\vec{r}^*|}{(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*)}$$

- ▶ und da alle gemischten Produkte $\vec{a} \cdot \vec{b}^*$ verschwinden und $\vec{a} \cdot \vec{a}^* = 1$ ist folgt:

$$\frac{1}{d_H} = \frac{|\vec{r}^*|}{(\vec{a} \cdot \vec{a}^*)} = |\vec{r}^*| \quad (\text{q.e.d.})$$

Zusammenfassung reziprokes Gitter

- ▶ Jeder Netzebenenschar im Realraum (Millerindizes h,k,l) entspricht ein Gitterpunkt im reziproken Raum.
- ▶ Da für positive Interferenz der Streuvektor mit einem reziproken Gittervektor zusammenfallen muss, gibt es nur ganzzahlige Indizes h,k,l .
- ▶ Mit der Ewald-Konstruktion des Streuvektors = reziproken Gittervektors kann der Ort der **Reflexe** (?) um den Kristall herum praktisch sehr einfach ermittelt werden.
- ▶ Die Motivinformation (Phasenverschiebungen innerhalb der Elementarzelle des realen Gitters) ist in den Intensitäten enthalten.

Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

Laue und Bragg'sche Gleichung (Vektorfrei)

Miller-Indizes, Netzebenenabstände

Laue-Gleichung (Vektorform)

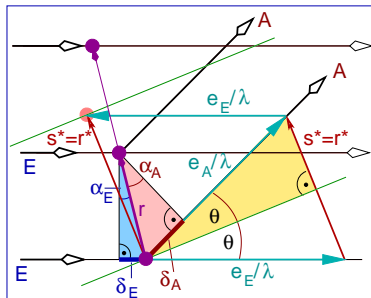
Basics Vektorrechnung
Lauegleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

Bragg'sche Gleichung ? Reflexe ?

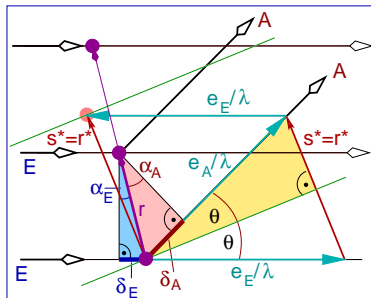
Zusammenfassung: Von Bragg ... bis Ewald

Θ , Streuvektor und Bragg'sche Gleichung



- ▶ $2 \Theta =$ Winkel zwischen ein- und ausfallendem Strahl
- ▶ (virtuelle) grüne Ebene \perp zu \vec{r}^*
- ▶ halbiert den um $1/\lambda$ verschobenen Streuvektor \vec{s}^*

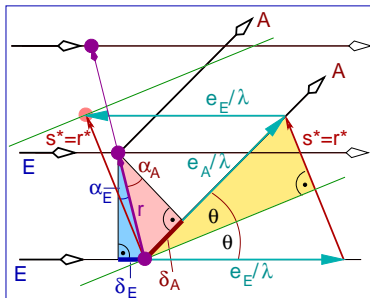
Θ , Streuvektor und Bragg'sche Gleichung



- ▶ 2Θ = Winkel zwischen ein- und ausfallendem Strahl
- ▶ (virtuelle) grüne Ebene \perp zu r^*
- ▶ halbiert den um $1/\lambda$ verschobenen Streuvektor s^*
- ▶ im gelben rechtwinkligen Dreieck:

$$\sin \Theta = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypotenuse}} = \frac{|r^*|/2}{1/\lambda}$$
- ▶ d.h. $2 \sin \Theta = |r^*| \lambda$
- ▶ oder $\lambda = 2 \frac{1}{|r^*|} \sin \Theta = 2d \sin \Theta$

Θ , Streuvektor und Bragg'sche Gleichung



- ▶ 2Θ = Winkel zwischen ein- und ausfallendem Strahl
- ▶ (virtuelle) grüne Ebene \perp zu r^*
- ▶ halbiert den um $1/\lambda$ verschobenen Streuvektor s^*
- ▶ im gelben rechtwinkligen Dreieck:

$$\sin \Theta = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypotenuse}} = \frac{|r^*|/2}{1/\lambda}$$
- ▶ d.h. $2 \sin \Theta = |r^*| \lambda$
- ▶ oder $\lambda = 2 \frac{1}{|r^*|} \sin \Theta = 2d \sin \Theta$
- ▶ grüne Ebene = 'Spiegel' für den Strahlengang
- ▶ Beugung, als Reflexion verkauft!

Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

Laue und Bragg'sche Gleichung (Vektorfrei)

Miller-Indizes, Netzebenenabstände

Laue-Gleichung (Vektorform)

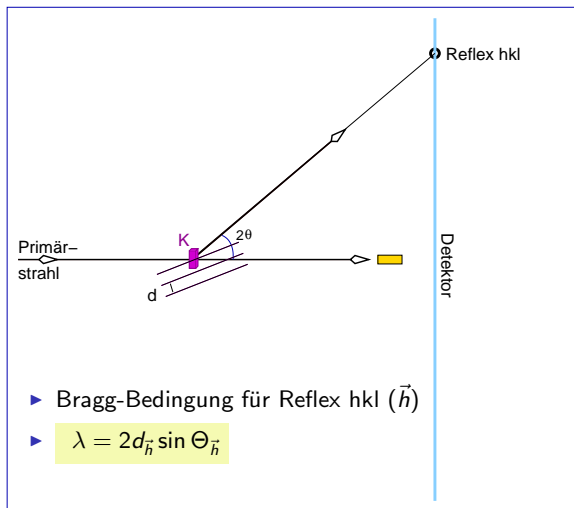
Basics Vektorrechnung
Lauegleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

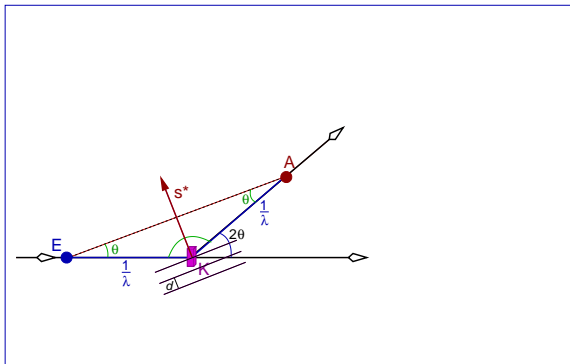
Bragg'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung: Von Bragg ... bis Ewald

Von Bragg ...

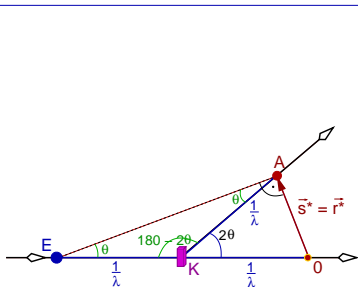


... über den Streuvektor ...



- ▶ mit reziprokem Gittervektor: $\frac{1}{d_{\vec{h}}} = \frac{2}{\lambda} \sin \Theta_{\vec{h}} = |\vec{r}_{\vec{h}}^*|$
- ▶ 'Reflektions'bedingung: Streuvektor $\vec{s}_{\vec{h}}^*$ ($\parallel d_{\vec{h}}$) = reziproker Gittervektor $\vec{r}_{\vec{h}}^*$
- ▶ \vec{s}^* winkelhalbierend zwischen ein- und aus-fallendem Strahl

... zur Ewald-Konstruktion

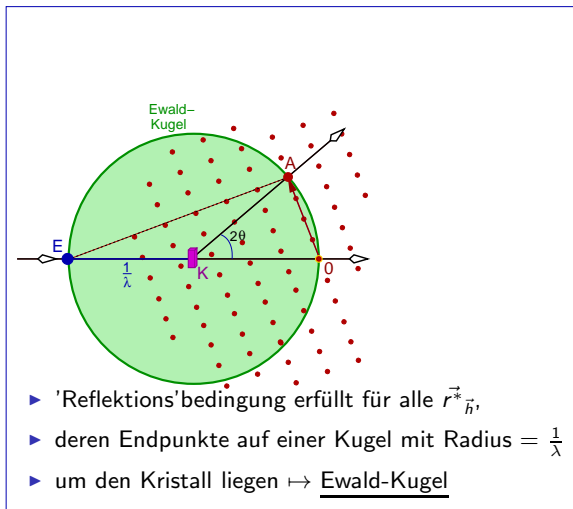


- ▶ Streuvektor $\vec{s}_{\vec{h}}^* = \vec{r}_{\vec{h}}^*$ um $\frac{1}{\lambda}$ verschieben

- ▶ $\sin \Theta = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypotenuse}} = \frac{OA}{EKO} = \frac{|\vec{r}^*|}{2/\lambda}$

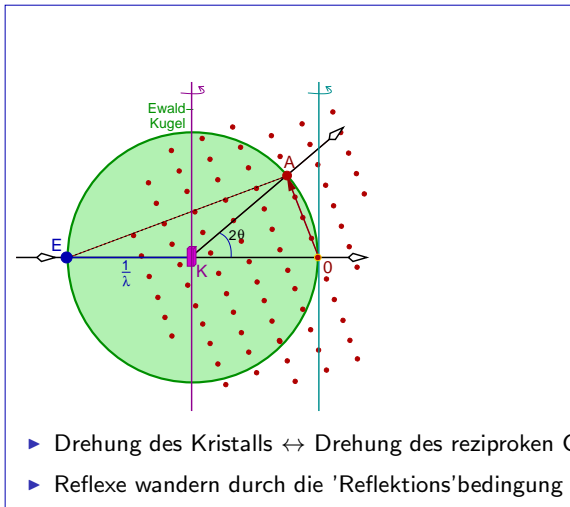
- ▶ Vorteil:

Ewald-Konstruktion

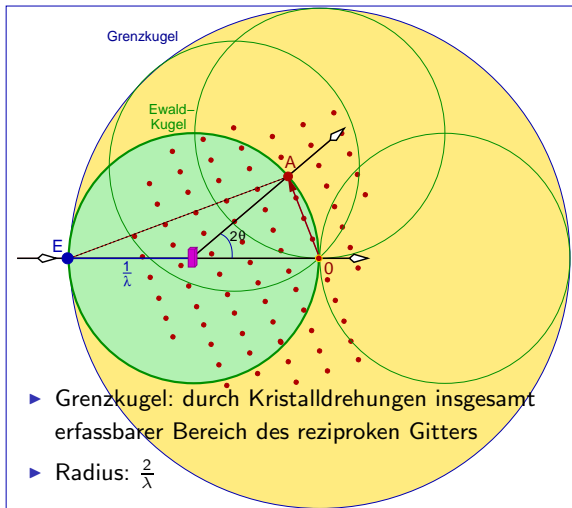


Paul Peter Ewald (1888-1985)

Ewald-Konstruktion



Ewald-Konstruktion: Grenzkugel



Zusammenfassung

- ▶ **Voraussetzung für Einkristall-Beugungsuntersuchungen**
 - ▶ monochromatische Strahlung mit $\lambda \approx$ Atomabstand
 - ▶ Primärstrahl mit fester Einfallrichtung
 - ▶ Einkristall
 - ▶ ortsempfindlicher Detektor
- ▶ **Ewald-Konstruktion (Orte der Reflexe)**
 - ▶ Ewald-Kugel: Kugel mit Radius $1/\lambda$ um Kristall (real \mapsto reziprok)
 - ▶ 'Reflektions'bedingung: Streuvektor \vec{s}^* fällt mit reziprokem Gittervektor \vec{r}^* zusammen
 - ▶ wenn \vec{r}^* auf Ewald-Kugel $\mapsto \vec{s}^* \mapsto$ Bragg-Reflex
 - ▶ gebeugter Strahl vom Kristall zur Spitze des reziproken Gittervektors = Streuvektors
- ▶ **Konsequenzen für Experimente**
 - ▶ Kristalldrehungen um mindestens 2 Achsen
 - ▶ Detektoren mit möglichst großer Fläche
 - ▶ Radius der Grenzkugel: $\frac{2}{\lambda}$
 - ▶ Reflex-Volumina (Mosaik-Struktur) \mapsto 'Scans' für integrale Intensitäten \Rightarrow