

3.2.3 Zusammenfassung Kapitel 3.2

Die Wechselwirkung von Kristallen mit Wellen, die Wellenlängen im Bereich der Gitterkonstante oder kleiner haben, ist das Rückgrat der gesamten Strukturanalytik.

- "Beliebt" sind Röntgenstrahlen, Elektronenstrahlen und Neutronenstrahlen. Mathematisch sind sie in der einfachsten Form alle durch eine Welle der Form $\psi = \psi_0 \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ beschrieben.
- Grundlegende Phänome der Wechselwirkung sind Absorption (hier uninteressant) und *Interferenz*.

Die Interferenz einer Welle mit dem periodischen Gitter des Kristalls wird zunächst durch das *Bragg-Gesetz* beschrieben. In qualitativer Form (und im Rückblick) besagt es:

1. Zu betrachten ist die spezielle Wechselwirkung einer *ebenen* Welle mit irgendeiner Netzebenen*schar* $\{\mathbf{hkl}\}$ des Kristalls. Die gesamte Wechselwirkung mit allen individuellen Ebenen ist die Summe der einzelnen Wechselwirkungen.
2. Die Wechselwirkung mit einer gegebenen Ebenenschar hat genau *zwei* Möglichkeiten
 - Entweder es passiert überhaupt nichts - die Welle "ignoriert" $\{\mathbf{hkl}\}$ und läuft einfach weiter.
 - Oder sie wird an $\{\mathbf{hkl}\}$ reflektiert (mit Einfallswinkel = Ausfallswinkel)
3. Die zweite Möglichkeit (Reflektion) erfolgt dann, und nur dann, wenn der Einfallswinkel der Welle auf $\{\mathbf{hkl}\}$ einen ganz bestimmten Wert Θ_B hat (den "*Bragg-Winkel*")
4. Der Bragg-Winkel ist einfach zu bestimmen: Er ist der Winkel bei dem konstruktive Interferenz auftritt; man erhält durch simple Geometrie:

$$\sin(\Theta_B) = \frac{\lambda}{2 \cdot d_{\mathbf{hkl}}}$$

- Mit $d_{\mathbf{hkl}}$ = Abstand zwischen den $\{\mathbf{hkl}\}$ Ebenen (aus Kenntnis des Gittertyps und der $\mathbf{h}, \mathbf{k}, \mathbf{l}$ berechenbar!); λ = Wellenlänge. Außerdem denken wir daran, dass z.B. die $\{111\}$, $\{222\}$ oder $\{333\}$ Ebenen verschieden sind!

Damit läßt sich für einen gegebenen Kristall und eine gegebene Welle exakt ausrechnen, in welchen Raumrichtungen überhaupt reflektierte, oder besser gesagt *gebeugte* Wellen auftreten *können*.

Das Bragg Gesetz verknüpft zwei Vektoren - den Wellenvektor $\underline{\mathbf{k}}$ der einfallenden Welle, und den Wellenvektor $\underline{\mathbf{k}'}$ der eventuell gebeugten Welle. Damit liegt nahe, es als Vektorgleichung zu formulieren.

- Es ergibt sich eine extrem einfache Beziehung: Beugung erfolgt dann, und nur dann, falls gilt

$$\underline{\mathbf{k}} - \underline{\mathbf{k}'} = \underline{\mathbf{G}}_{\mathbf{hkl}}$$

Mit $\underline{\mathbf{G}}$ = ausschließlich durch das Gitter definierter Vektor, genannt "*rezipoker Gittervektor*", mit den Eigenschaften

1. $\underline{\mathbf{G}}$ steht *senkrecht* auf der betrachteten Ebenenschar $\{\mathbf{hkl}\}$
 2. $|\underline{\mathbf{G}}| = 2\pi/d_{\mathbf{hkl}}$
- Abgesehen von der hier noch unwichtigen *Richtung* ist der reziproke Gittervektor damit eindeutig charakterisiert.

Zum Schluß sollte man sich noch klar machen, daß Mutter Natur hier *wieder mal* die einfachstmögliche Formulierung eines komplexen Problems gewählt hat: Aus logischen Gründen braucht man mindestens die beiden Wellenvektoren und eine Gittereigenschaft. Eine einfachere Gleichung als die obige Vektorgleichung ist logisch nicht möglich.