

3.6.1 Merkpunkte Kapitel 3

- ▶ Kristalle untersucht man durch *Wellen* mit geeigneten Wellenlängen λ (passend zur Gitterkonstanten).
- ▶ Reflektion an Ebene $\{hkl\}$ unter *Bragg-Winkel* Θ_B falls *Bragg-Bedingung* für konstruktive Interferenz erfüllt ist.

● d_{hkl} ist der Abstand der Ebenen $\{hkl\}$

- ▶ Vektorielle Form der Bragg-Bedingung mit reziprokem Gittervektor \underline{G}_{hkl}
 - \underline{G}_{hkl} ist ein *reziproker Gittervektor* mit den Eigenschaften
 1. \underline{G} steht *senkrecht* auf der betrachteten Ebene $\{hkl\}$
 2. $|\underline{G}| = 2\pi/d_{hkl}$

▶ Formale Definition reziprokes Gitter im 3D:

- Liefert identische Vektoren wie die geometrische Konstruktion (plus Vorzeichen)
- Einfacher (und allgemeiner) ist:

$$\underline{a}_i \cdot \underline{g}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases}$$

▶ Wichtige Eigenschaften des reziproken Gitters:

- \underline{G}_{hkl} senkrecht auf $d(hkl)$.
- $|\underline{G}_{hkl}| = 2\pi/d_{hkl}$; d_{hkl}
- $\underline{G} \cdot \underline{T} = 2\pi \cdot n$.

▶ Ewaldkugel-Konstruktion für Beugung:

- Erlaubt schnelle und einfache Betrachtung aller Varianten von Beugungsexperimenten.
- Hier für monochromatische Strahlung gezeigt.

Röntgen-, Elektronen- und Neutronenwellen bzw. -Strahlen.

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

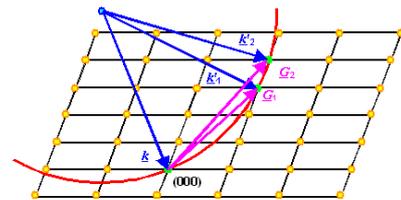
$$\underline{k} - \underline{k}' = \underline{G}_{hkl}$$

$$\underline{g}_1 = 2\pi \cdot \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{\underline{a}_1 \cdot (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)} = 2\pi \cdot \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{V}$$

$$\underline{g}_2 = 2\pi \cdot \frac{\underline{a}_3 \times \underline{a}_1}{\underline{a}_1 \cdot (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)} = 2\pi \cdot \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{V}$$

$$\underline{g}_3 = 2\pi \cdot \frac{\underline{a}_1 \times \underline{a}_2}{\underline{a}_1 \cdot (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)} = 2\pi \cdot \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_2}{V}$$

Das reziproke Gitter ist die Fouriertransformierte des Ortsgitters



Die **Bragg-Bedingung** legt fest in welcher Raumrichtung bei gegebenem Gitter und einfallendem Wellenvektor \mathbf{k} überhaupt Reflexe auftreten können, die **Strukturamplitude** F_s bestimmt, welche Intensität die Reflexe haben.

- Die Strukturamplitude enthält die Art ("j") und "Anordnung" (r_j) der Atome der Basis des Kristalls.
- Ein Teil dieser Information steckt in den (tabellierten) **Atomformfaktoren** f_j .

$$F_s = \sum_j f_j \cdot \exp [i \cdot r_j \cdot G]$$

Die Auswertung der Formel für die Strukturamplitude führt zu **Auslöschungsregeln** für einige Gittertypen.

Es ist verhältnismäßig einfach das Beugungsbild eines gegebenen Kristalls zu errechnen.

- Die Umkehraufgabe ist sehr schwierig: Aus einem gegebenen Beugungsbild ist der vorliegende Kristall nicht einfach zu errechnen.
- Sofern jedoch noch Zusatzinformationen vorliegen, kann das Problem heute routinemäßig gelöst werden.

bcc Gitter $h + k + l =$ ungerade Zahl n_{ug}

fcc Gitter

$h, k, l =$

alle gerade
 {
 alle ungerade

Röntgen-, Elektronen- und Neutronenstrahlen werden für Strukturuntersuchungen verwendet. Sortierkriterien sind:

- Probe:** Monokristallin oder polykristallin.
- Röntgenstrahl:** Monochromatisch oder polychromatisch.
- Verfahren:** Statisch (nichts bewegt sich) oder dynamisch (Strahlung aus mehreren Richtungen oder Probe dreht sich um 1 - 3 Achsen).
- Abbildung:** Beugungsbild (= Bild des reziproken Gitter) oder Strukturbild (= Bild im Ortsraum).

Verfahren sind komplex, aber weitgehend automatisiert. Selbst die Strukturbestimmung von extrem komplexen Eiweißkristallen ist heute möglich.

Beispiele:

- Laue Verfahren:** Polychromatisch, Monokristall, Schnelle Bestimmung der Einkristallorientierung.
- Debye-Scherrer Verfahren:** Monochromatisch, Polykristallin, Strukturbestimmung an Pulvern (**Drehkristalldiffraktometer** Monochromatisch, Monokristall oder Polykristall, Beugungsbild. Präzisionsmessungen)
- Transmissionselektronenmikroskop:** Monochromatisch, Monokristall oder Polykristall, Beugungsbild und Strukturbild. Extrem mächtige Methode

Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu Kapitel 3