

Kristallographie und Röntgenbeugung

Tina Hilbig

16.04.2009

Gliederung

- 1 Grundlagen der Kristallographie
 - Einteilung der Festkörper
 - Struktur der Kristalle
 - Indizierung
 - reziprokes Gitter
- 2 Röntgenbeugung
 - Röntgenstrahlung
 - Laue-Bedingung
 - Bragg-Bedingung
 - Ewaldsche Konstruktion
 - Röntgenverfahren zur Strukturanalyse von Kristallen
- 3 Zusammenfassung
- 4 Quellen

Einteilung der Festkörper

Festkörper

kristalliner Festkörper

regelmäßige, periodisch wiederkehrende Anordnungen der Strukturbausteine in allen 3 Raumrichtungen

amorpher Festkörper

keine Fernordnung der Strukturbausteine

monokristallin

periodisch
wiederkehrende
Atomstruktur
erstreckt sich über
das ganze Volumen

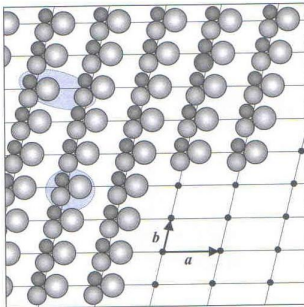
polykristallin

einkristalline Bereiche
erstrecken sich über wenige
 μm
statistische Verteilung der
Orientierung der Kristallite

idealer Kristall: monokristalliner Festkörper ohne Gitterfehler

Kristallstruktur

Kristallgitter: periodische dreidimensionale Anordnung von Atomen Molekülen oder Ionen, deren Art und geometrische Struktur die äußere Erscheinung und physikalischen Eigenschaften des Kristalls bestimmt



Kristallstruktur (7)

$$\text{Kristallstruktur} = \text{Raumgitter} + \text{Basis}$$

Raumgitter, Punktgitter: mathematische Abstraktion des Kristallgitters auf eine räumliche periodische Anordnung von Punkten, die den Gitterpunkten entsprechen

Basis: Gruppe von Atomen, Molekülen oder Ionen, die jedem Gitterpunkt zugeordnet ist

Translationsvektoren und Kristallachsen

primitive Translation:

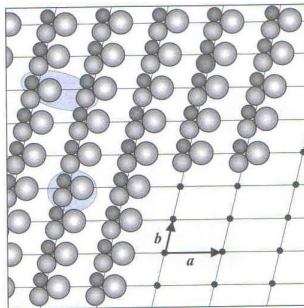
Das Punktgitter ist vollständig durch einen Satz dreier Vektor \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} (**primitive Translationsvektoren**) beschrieben.

Jedem Gitterpunkt kann ein Translationsvektor \vec{T} zugeordnet werden:

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

$n_1, n_2, n_3 \dots$ ganze Zahlen

Kristallachsen: durch die primitiven Translationsvektoren definierte Richtungen



Kristallstruktur (7)

Elementarzelle und Einheitszelle

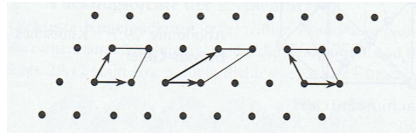
Elementarzelle

- Parallelepiped, welches durch 3 primitive Translationsvektoren aufgespannt wird
- Zelle mit kleinstmöglichem Volumen, die durch wiederholte Anwendung der möglichen Translationsoperationen den gesamten Raum ausfüllt

Elementarzelle und Einheitszelle

Elementarzelle

- Parallelepipiped, welches durch 3 primitive Translationsvektoren aufgespannt wird
- Zelle mit kleinstmöglichem Volumen, die durch wiederholte Anwendung der möglichen Translationsoperationen den gesamten Raum ausfüllt

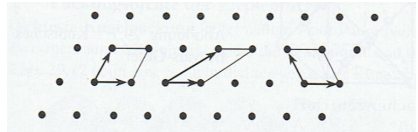


verschiedene Möglichkeiten für Elementarzellen (3)

Elementarzelle und Einheitszelle

Elementarzelle

- Parallelepipid, welches durch 3 primitive Translationsvektoren aufgespannt wird
- Zelle mit kleinstmöglichem Volumen, die durch wiederholte Anwendung der möglichen Translationsoperationen den gesamten Raum ausfüllt



verschiedene Möglichkeiten für Elementarzellen (3)

Einheitszelle

soll die Symmetrie des Raumgitters möglichst offensichtlich widerspiegeln

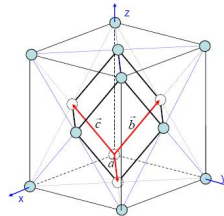
Elementarzelle und Einheitszelle

Elementarzelle

- Parallelepipid, welches durch 3 primitive Translationsvektoren aufgespannt wird
- Zelle mit kleinstmöglichem Volumen, die durch wiederholte Anwendung der möglichen Translationsoperationen den gesamten Raum ausfüllt

Einheitszelle

soll die Symmetrie des Raumgitters möglichst offensichtlich widerspiegeln



Vergleich von Elementar- und Einheitszelle am Beispiel des kubisch flächenzentrierten Gitters (5)

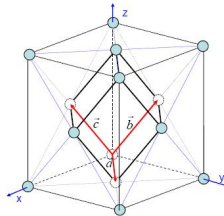
Elementarzelle und Einheitszelle

Elementarzelle

- Parallelepipid, welches durch 3 primitive Translationsvektoren aufgespannt wird
- Zelle mit kleinstmöglichem Volumen, die durch wiederholte Anwendung der möglichen Translationsoperationen den gesamten Raum ausfüllt

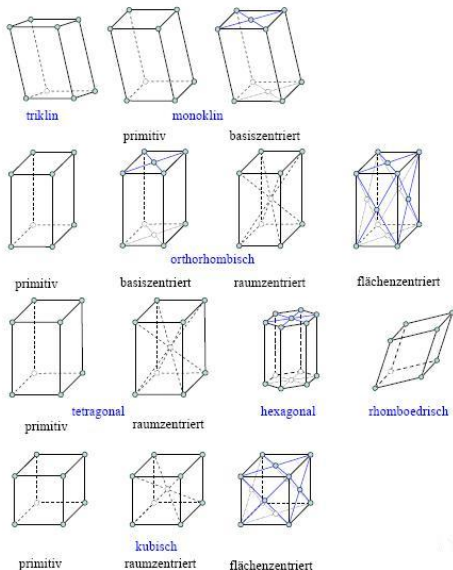
Einheitszelle

soll die Symmetrie des Raumgitters möglichst offensichtlich widerspiegeln



Vergleich von Elementar- und Einheitszelle am Beispiel des kubisch flächenzentrierten Gitters (5)

$$V_{\text{Einheitszelle}} \geq V_{\text{Elementarzelle}}$$



Die 14 Bravais-Gitter:

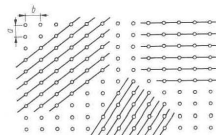
Beschreibung eines Gitters durch 6 Gitterkonstanten:

- Längen der die Einheitszelle aufspannenden Vektoren
- Winkel zwischen diesen Vektoren

Kristallsystem	Abkürzung	Achsen	Winkel	Beispiele
Triklin	tr	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \alpha_3$	$B_2O_3 \cdot 3H_2O$, H_3BO_3
Monoklin	m	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$ $\alpha_1 \neq 90^\circ$	KNO_3 , CuO $CaSO_4 \cdot 2H_2O$
Orthorhombisch	o	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$	Ga, S, SiO_2 , P
Tetragonal	t	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$	TiO_2 , SiO_2
Hexagonal	h	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = 90^\circ$ $\alpha_3 = 120^\circ$	He, Mg, Co, Zn SiO_2
Rhomboedrisch	rh	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 \neq 90^\circ$	As, $CaCO_3$
Kubisch	k	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$	Fe, Ni, Cu, NaCl, CsCl, Diamant

Netzebene und Millersche Indizes

Netzebene: beliebige Ebene, die mit Gitterpunkten besetzt ist

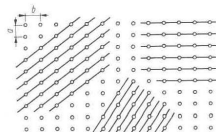


Netzebenen (1)

Netzebene und Millersche Indizes

Netzebene: beliebige Ebene, die mit Gitterpunkten besetzt ist

→ Definition mittels Schnittpunkten der Ebene mit den Kristallachsen



Netzebenen (1)

Netzebene und Millersche Indizes

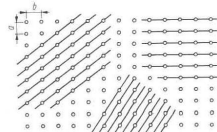
Netzebene: beliebige Ebene, die mit Gitterpunkten besetzt ist

→ Definition mittels Schnittpunkten der Ebene mit den Kristallachsen

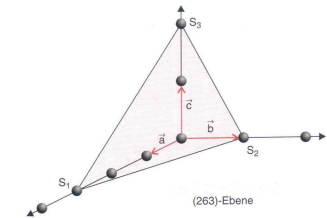
Millersche Indizes $h^m k^m l^m$:

Bildung der Millerschen Indizes:

- (1) Bestimmung der Schnittpunkte der Ebene mit den Kristallachsen in Einheiten der Gitterkonstanten, $S_1 : m_1 \vec{a}, S_2 : m_2 \vec{b}, S_3 : m_3 \vec{c}$
- (2) Bildung der Reziprokwerte, $\frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}$
- (3) Erweiterung zu teilerfremden ganzen Zahlen, dazu Multiplikation mit kleinster ganzer Zahl p : $h = \frac{p}{m_1}, k = \frac{p}{m_2}, l = \frac{p}{m_3}$



Netzebenen (1)



Bsp. Millersche Indizes (4)

Netzebene und Millersche Indizes

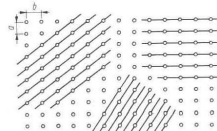
Netzebene: beliebige Ebene, die mit Gitterpunkten besetzt ist

→ Definition mittels Schnittpunkten der Ebene mit den Kristallachsen

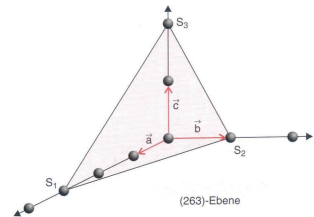
Millersche Indizes $h^m k^m l^m$:

Bildung der Millerschen Indizes:

- (1) Bestimmung der Schnittpunkte der Ebene mit den Kristallachsen in Einheiten der Gitterkonstanten, $S_1 : m_1 \vec{a}, S_2 : m_2 \vec{b}, S_3 : m_3 \vec{c}$
 $\Rightarrow m_1 = 3, m_2 = 1, m_3 = 2$
- (2) Bildung der Reziprokwerte, $\frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}$
- (3) Erweiterung zu teilerfremden ganzen Zahlen, dazu Multiplikation mit kleinster ganzer Zahl p : $h = \frac{p}{m_1}, k = \frac{p}{m_2}, l = \frac{p}{m_3}$



Netzebenen (1)



Bsp. Millersche Indizes (4)

Netzebene und Millersche Indizes

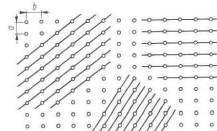
Netzebene: beliebige Ebene, die mit Gitterpunkten besetzt ist

→ Definition mittels Schnittpunkten der Ebene mit den Kristallachsen

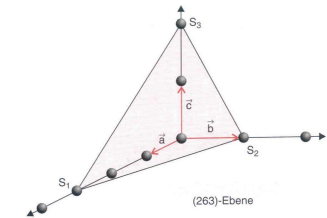
Millersche Indizes $h^m k^m l^m$:

Bildung der Millerschen Indizes:

- (1) Bestimmung der Schnittpunkte der Ebene mit den Kristallachsen in Einheiten der Gitterkonstanten, $S_1 : m_1 \vec{a}, S_2 : m_2 \vec{b}, S_3 : m_3 \vec{c}$
 $\Rightarrow m_1 = 3, m_2 = 1, m_3 = 2$
- (2) Bildung der Reziprokwerte, $\frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}$
 $\Rightarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2}$
- (3) Erweiterung zu teilerfremden ganzen Zahlen, dazu Multiplikation mit kleinster ganzer Zahl p : $h = \frac{p}{m_1}, k = \frac{p}{m_2}, l = \frac{p}{m_3}$



Netzebenen (1)



Bsp. Millersche Indizes (4)

Netzebene und Millersche Indizes

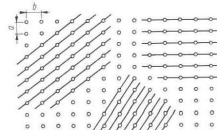
Netzebene: beliebige Ebene, die mit Gitterpunkten besetzt ist

→ Definition mittels Schnittpunkten der Ebene mit den Kristallachsen

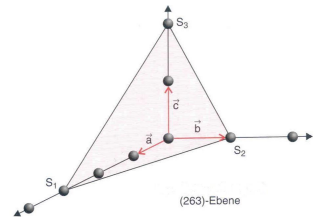
Millersche Indizes $h^m k^m l^m$:

Bildung der Millerschen Indizes:

- (1) Bestimmung der Schnittpunkte der Ebene mit den Kristallachsen in Einheiten der Gitterkonstanten, $S_1 : m_1 \vec{a}, S_2 : m_2 \vec{b}, S_3 : m_3 \vec{c}$
 $\Rightarrow m_1 = 3, m_2 = 1, m_3 = 2$
- (2) Bildung der Reziprokwerte, $\frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}$
 $\Rightarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2}$
- (3) Erweiterung zu teilerfremden ganzen Zahlen, dazu Multiplikation mit kleinster ganzer Zahl
 $p: h = \frac{p}{m_1}, k = \frac{p}{m_2}, l = \frac{p}{m_3}$
 $\Rightarrow h = 2, k = 6, l = 3$



Netzebenen (1)



Bsp. Millersche Indizes (4)

Netzebene und Millersche Indizes

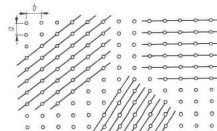
Netzebene: beliebige Ebene, die mit Gitterpunkten besetzt ist

→ Definition mittels Schnittpunkten der Ebene mit den Kristallachsen

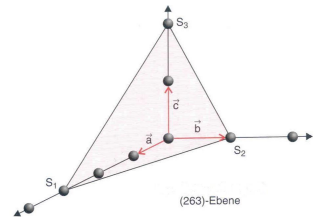
Millersche Indizes $h^m k^m l^m$:

Bildung der Millerschen Indizes:

- (1) Bestimmung der Schnittpunkte der Ebene mit den Kristallachsen in Einheiten der Gitterkonstanten, $S_1 : m_1 \vec{a}, S_2 : m_2 \vec{b}, S_3 : m_3 \vec{c}$
 $\Rightarrow m_1 = 3, m_2 = 1, m_3 = 2$
- (2) Bildung der Reziprokwerte, $\frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}$
 $\Rightarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2}$
- (3) Erweiterung zu teilerfremden ganzen Zahlen, dazu Multiplikation mit kleinster ganzer Zahl
 $p: h = \frac{p}{m_1}, k = \frac{p}{m_2}, l = \frac{p}{m_3}$
 $\Rightarrow h = 2, k = 6, l = 3$
 \Rightarrow Ebenenkennzeichnung durch Einklammern der Millerschen Indizes: (hkl)



Netzebenen (1)



Bsp. Millersche Indizes (4)

Netzebene und Millersche Indizes

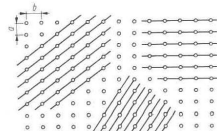
Netzebene: beliebige Ebene, die mit Gitterpunkten besetzt ist

→ Definition mittels Schnittpunkten der Ebene mit den Kristallachsen

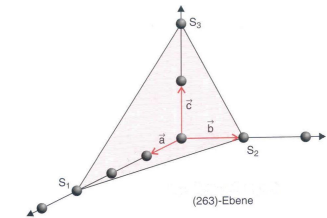
Millersche Indizes $h^m k^m l^m$:

Bildung der Millerschen Indizes:

- (1) Bestimmung der Schnittpunkte der Ebene mit den Kristallachsen in Einheiten der Gitterkonstanten, $S_1 : m_1 \vec{a}, S_2 : m_2 \vec{b}, S_3 : m_3 \vec{c}$
 $\Rightarrow m_1 = 3, m_2 = 1, m_3 = 2$
- (2) Bildung der Reziprokwerte, $\frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}$
 $\Rightarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2}$
- (3) Erweiterung zu teilerfremden ganzen Zahlen, dazu Multiplikation mit kleinster ganzer Zahl
 $p: h = \frac{p}{m_1}, k = \frac{p}{m_2}, l = \frac{p}{m_3}$
 $\Rightarrow h = 2, k = 6, l = 3$
 \Rightarrow Ebenenkennzeichnung durch Einklammern der Millerschen Indizes: $(hkl) \Rightarrow (263)$



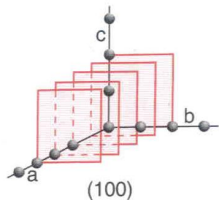
Netzebenen (1)



Bsp. Millersche Indizes (4)

Netzebene und Millersche Indizes

- jedes Tripel (hkl) definiert eine Schar paralleler Netzebenen
- äquivalente Ebene $\{hkl\}$
- Kristallrichtungen $[uvw]$
- äquivalente Richtungen $\langle uvw \rangle$
- Spezialfälle:
 - Ebenenschar verläuft parallel zur Kristallachse: entsprechender Index ist Null
 - negativer Achsenabschnitt: Minuszeichen über der Zahl angegeben, z.B.: $(\bar{h}kl)$
 - Indizierung im hexagonalen Gitter $(hkil)$ bzw. $[pstw]$



Bsp. für eine Netzebenen­schar in einem kubischen Gitter (4)

Konstruktion des reziprokes Gitter

Ortsraum

primitive
Translationsvektoren
 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

reziproker Raum

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = V_E$
...Volumen der Elementarzelle

$$\vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V_E}$$

$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V_E}$$

Konstruktion des reziprokes Gitter

Ortsraum

primitive
 Translationsvektoren
 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

reziproker Raum

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = V_E$
 ...Volumen der Elementarzelle

$$\vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V_E}$$

$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V_E}$$

- \vec{a}^* steht senkrecht auf der durch \vec{b} und \vec{c} aufgespannten Ebene und i.a. $\vec{a}^* \nparallel \vec{a}$
- $\vec{a}^* \vec{a} = 2\pi, \vec{b}^* \vec{b} = 2\pi, \vec{c}^* \vec{c} = 2\pi$
- $\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$ $\vec{G} = h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*$ n_1, n_2, n_3, h, k, l
 ... ganze Zahlen
 $\vec{T} \cdot \vec{G} = 2\pi(nh + nk + nl)$

- $V^* = \frac{(2\pi)^3}{V}$

Vergleich reales und reziprokes Gitter

Beispiele:

- (1) kubisch primitives Gitter mit
 Gitterkonstante a

$$V_E = a^3$$

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{(\vec{b} \times \vec{c})}{a^3} = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_a$$

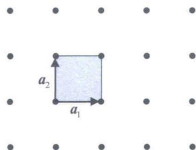
⇒ reziprokes Gitter: kubisch primitiv

Gitterkonstante: $a^* = \frac{2\pi}{a}$

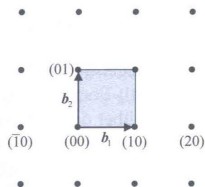
Volumen $V^* = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

- (2) kubisch flächenzentriertes Gitter
 ⇒ reziprokes Gitter: kubisch
 innenzentriert

Ortsraum

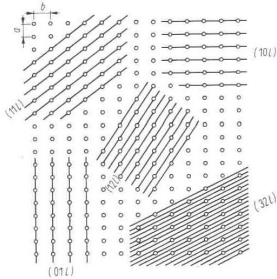


Reziproker Raum



Zusammenhang zwischen reziprokem Gitter und der
 Form der Elementarzelle des realen Gitters (7)

Netzebenenabstand

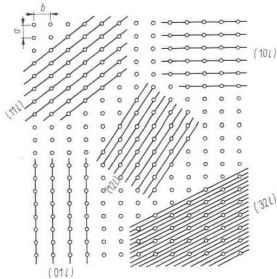


Besetzungsdichte von
Netzebenenscharen (1)

Netzebenenabstand d_{hkl} : senkrechter Abstand zweier aufeinanderfolgender Ebenen derselben Schar

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$$

Netzebenenabstand



Besetzungsdichte von
 Netzebenen (1)

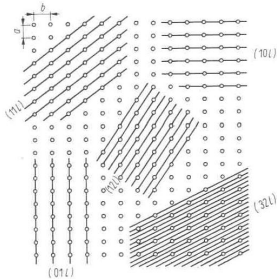
Netzebenenabstand d_{hkl} : senkrechter Abstand zweier aufeinanderfolgender Ebenen derselben Schar

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$$

▷ d_{hkl} kann bei Kenntnis des Kristallsystems aus den Indizes (hkl) berechnet werden

Bsp.: rechtwinkliges Gitter: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$

Netzebenenabstand



Besetzungsdichte von
Netzebenen (1)

Netzebenenabstand d_{hkl} : senkrechter Abstand zweier aufeinanderfolgender Ebenen derselben Schar

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$$

▷ d_{hkl} kann bei Kenntnis des Kristallsystems aus den Indizes (hkl) berechnet werden

Bsp.: rechtwinkliges Gitter: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$

▷ Je niedriger die Indizes einer Netzebene sind, desto dichter ist die Besetzung mit Atomen und desto größer ist der Netzebenenabstand

Netzebenenabstand

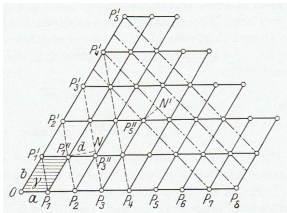
Netzebenenabstand d_{hkl} : senkrechter Abstand zweier aufeinanderfolgender Ebenen derselben Schar

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$$

▷ d_{hkl} kann bei Kenntnis des Kristallsystems aus den Indizes (hkl) berechnet werden

Bsp.: rechtwinkliges Gitter: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$

▷ Je niedriger die Indizes einer Netzebene sind, desto dichter ist die Besetzung mit Atomen und desto größer ist der Netzebenenabstand



Netzebenen (2)

Identitätsabstand I: kürzester Abstand translatorisch identischer Atome auf einer Geraden

Netzebenenabstand

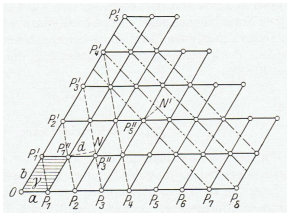
Netzebenenabstand d_{hkl} : senkrechter Abstand zweier aufeinanderfolgender Ebenen derselben Schar

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$$

▷ d_{hkl} kann bei Kenntnis des Kristallsystems aus den Indizes (hkl) berechnet werden

Bsp.: rechtwinkliges Gitter: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$

▷ Je niedriger die Indizes einer Netzebene sind, desto dichter ist die Besetzung mit Atomen und desto größer ist der Netzebenenabstand



Netzebenen (2)

Identitätsabstand I: kürzester Abstand translatorisch identischer Atome auf einer Geraden

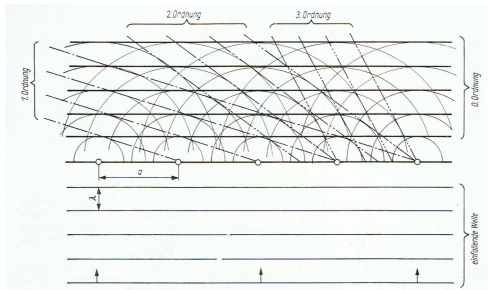
i.a. gilt: Identitätsabstand I in einer Richtung \neq Netzebenenabstand d_{hkl} der auf dieser Richtung senkrecht stehenden Netzebenen­schar

Röntgenbeugung

- Wellenlängenbereich von ca. $10^{-3} \dots 100 \text{ nm}$
- Brechzahl ≈ 1 in allen Materialien

Röntgenbeugung

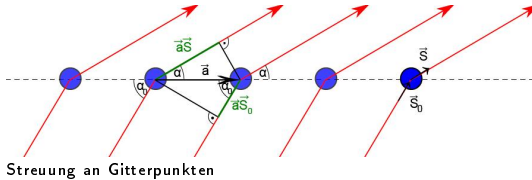
- Wellenlängenbereich von ca. $10^{-3} \dots 100 \text{ nm}$
- Brechzahl ≈ 1 in allen Materialien



Beugung einer ebenen Welle an einer Punktreihe (1)

- Abmessungen der beugenden Strukturen vergleichbar mit Wellenlängen der gebeugten Strahlung:
 $0,03 \text{ nm} \leq \lambda \leq 0,5 \text{ nm}$
- Beugung erfolgt an den Elektronen der Atome
→ Intensität der Beugung ist stark von der Ordnungszahl abhängig

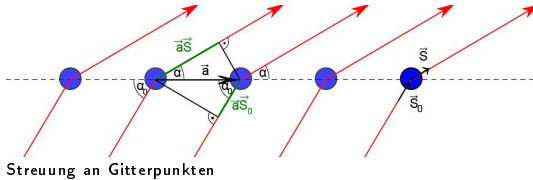
Laue-Bedingung



$\vec{S}, \vec{S}_0 \dots$ Normaleneinheitsvektoren der Richtung einfallender und gestreuter Strahlung

Gangunterschied: $\vec{a}\vec{S} - \vec{a}\vec{S}_0$

Laue-Bedingung



$\vec{S}, \vec{S}_0 \dots$ Normaleneinheitsvektoren der Richtung einfallender und gestreuter Strahlung

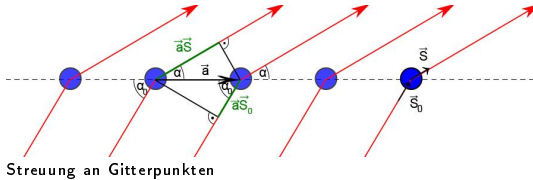
Gangunterschied: $\vec{a}\vec{S} - \vec{a}\vec{S}_0$

für konstruktive Interferenz ergeben sich die **Laue-Gleichungen**:

$$\begin{aligned} \vec{a}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= h\lambda & \text{bzw.} & & (\cos\alpha - \cos\alpha_0)\vec{a} &= h\lambda \\ \vec{b}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= k\lambda & & & (\cos\beta - \cos\beta_0)\vec{b} &= k\lambda \\ \vec{c}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= l\lambda & & & (\cos\gamma - \cos\gamma_0)\vec{c} &= l\lambda \end{aligned}$$

hkl... ganze Zahlen

Laue-Bedingung



$\vec{S}, \vec{S}_0 \dots$ Normaleneinheitsvektoren der Richtung einfallender und gestreuter Strahlung

Gangunterschied: $\vec{a}\vec{S} - \vec{a}\vec{S}_0$

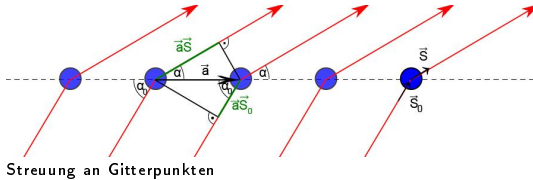
für konstruktive Interferenz ergeben sich die **Laue-Gleichungen**:

$$\begin{aligned} \vec{a}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= h\lambda & \text{bzw.} & & (\cos\alpha - \cos\alpha_0)\vec{a} &= h\lambda \\ \vec{b}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= k\lambda & & & (\cos\beta - \cos\beta_0)\vec{b} &= k\lambda \\ \vec{c}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= l\lambda & & & (\cos\gamma - \cos\gamma_0)\vec{c} &= l\lambda \end{aligned}$$

hkl... ganze Zahlen

Translationsvektor im reziproken Raum: $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

Laue-Bedingung



$\vec{S}, \vec{S}_0 \dots$ Normaleneinheitsvektoren der Richtung einfallender und gestreuer Strahlung

Gangunterschied: $\vec{a}\vec{S} - \vec{a}\vec{S}_0$

für konstruktive Interferenz ergeben sich die **Laue-Gleichungen**:

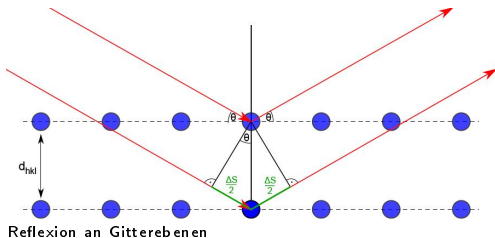
$$\begin{aligned} \vec{a}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= h\lambda & \text{bzw.} & & (\cos\alpha - \cos\alpha_0)\vec{a} &= h\lambda \\ \vec{b}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= k\lambda & & & (\cos\beta - \cos\beta_0)\vec{b} &= k\lambda \\ \vec{c}(\vec{S} - \vec{S}_0) &= l\lambda & & & (\cos\gamma - \cos\gamma_0)\vec{c} &= l\lambda \end{aligned}$$

hkl... ganze Zahlen

Translationsvektor im reziproken Raum: $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

Wellenzahlvektor: $\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{S}_0, \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{S} \quad \Rightarrow \quad \Delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}$

Bragg-Bedingung

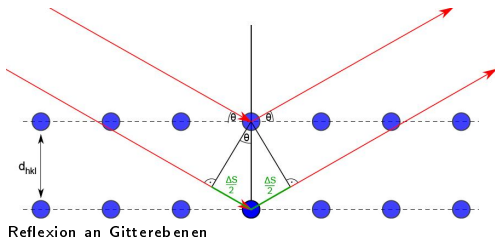


- ϑ ... Glanzwinkel bzw. Braggwinkel
- λ ... Wellenlänge
- d_{hkl} ... Netzebenenabstand
- n ... ganze Zahl, Beugungsordnung

Gangunterschied: $\Delta S = 2d_{hkl}\sin\vartheta$
für konstruktive Interferenz: $\Delta S = n\lambda$

$$\Rightarrow \boxed{n\lambda = 2d_{hkl}\sin\vartheta}$$

Bragg-Bedingung



ϑ ... Glanzwinkel bzw.
Braggwinkel
 λ ... Wellenlänge
 d_{hkl} ... Netzebenen-
abstand
 n ... ganze Zahl,
Beugungsordnung

Gangunterschied: $\Delta S = 2d_{hkl} \sin \vartheta$

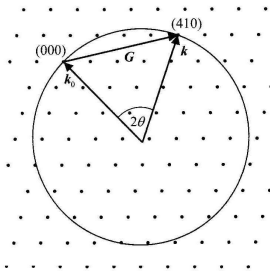
für konstruktive Interferenz: $\Delta S = n\lambda$

$$\Rightarrow \boxed{n\lambda = 2d_{hkl} \sin \vartheta}$$

Laue Indizes: mit der Ordnung der Interferenz n multiplizierte
Millersche Indizes

Konstruktion der Ewald-Kugel

Ewald-Kugel: Darstellung der elastischen Streuung an Gitterpunkten im reziproken Raum

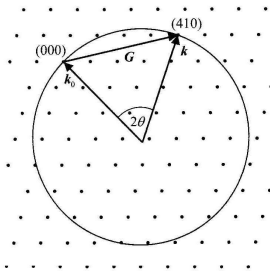


zweidimensionale Darstellung der Ewald-Kugel (7)

Konstruktion der Ewald-Kugel

Ewald-Kugel: Darstellung der elastischen Streuung an Gitterpunkten im reziproken Raum

- Kristall \rightarrow reziprokes Gitter

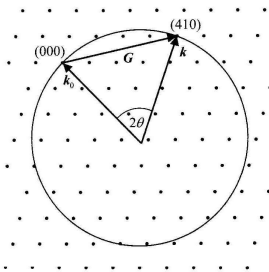


zweidimensionale Darstellung der Ewald-Kugel (7)

Konstruktion der Ewald-Kugel

Ewald-Kugel: Darstellung der elastischen Streuung an Gitterpunkten im reziproken Raum

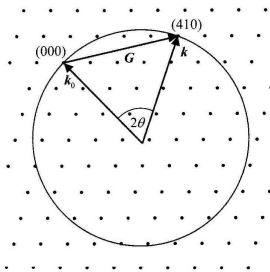
- Kristall \rightarrow reziprokes Gitter
- Primärstrahlrichtung, Wellenlänge: \vec{k}_0
 \rightarrow endet bei Koordinatenursprung (00)



zweidimensionale Darstellung der Ewald-Kugel (7)

Konstruktion der Ewald-Kugel

Ewald-Kugel: Darstellung der elastischen Streuung an Gitterpunkten im reziproken Raum

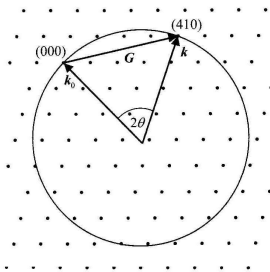


zweidimensionale Darstellung der Ewald-Kugel (7)

- Kristall \rightarrow reziprokes Gitter
- Primärstrahlrichtung, Wellenlänge: \vec{k}_0
 \rightarrow endet bei Koordinatenursprung (00)
- Anfangspunkt A von \vec{k}_0 fällt i.a. nicht mit Gitterpunkt zusammen
 \rightarrow Kugel um A mit Radius $|\vec{k}_0|$

Konstruktion der Ewald-Kugel

Ewald-Kugel: Darstellung der elastischen Streuung an Gitterpunkten im reziproken Raum

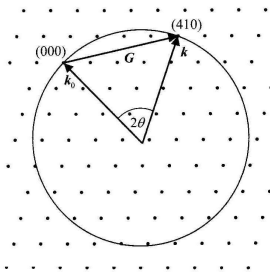


zweidimensionale Darstellung der Ewald-Kugel (7)

- Kristall \rightarrow reziprokes Gitter
- Primärstrahlrichtung, Wellenlänge: \vec{k}_0
 \rightarrow endet bei Koordinatenursprung (00)
- Anfangspunkt A von \vec{k}_0 fällt i.a. nicht mit Gitterpunkt zusammen
 \rightarrow Kugel um A mit Radius $|\vec{k}_0|$
- elastische Streuung: $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$
 \rightarrow alle Wellenvektoren ausgehend von A enden auf Kugeloberfläche

Konstruktion der Ewald-Kugel

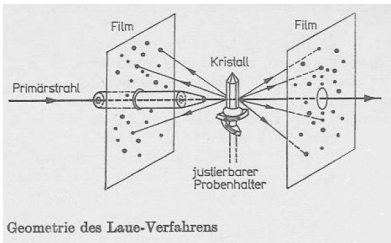
Ewald-Kugel: Darstellung der elastischen Streuung an Gitterpunkten im reziproken Raum



zweidimensionale Darstellung der Ewald-Kugel (7)

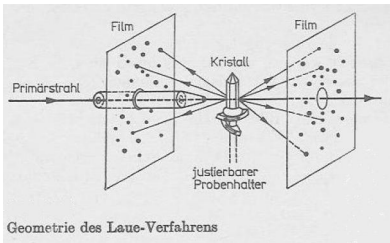
- Kristall \rightarrow reziprokes Gitter
- Primärstrahlrichtung, Wellenlänge: \vec{k}_0
 \rightarrow endet bei Koordinatenursprung (00)
- Anfangspunkt A von \vec{k}_0 fällt i.a. nicht mit Gitterpunkt zusammen
 \rightarrow Kugel um A mit Radius $|\vec{k}_0|$
- elastische Streuung: $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$
 \rightarrow alle Wellenvektoren ausgehend von A enden auf Kugeloberfläche
- notwendige Bedingung für Beugungsmaximum:
Laue-Bedingung: $\Delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}$
 \rightarrow gilt für \vec{k} der gebeugten Strahlung, die von A ausgehend auf Punkte \vec{k} des reziproken Gitters zeigen

Laue-Verfahren



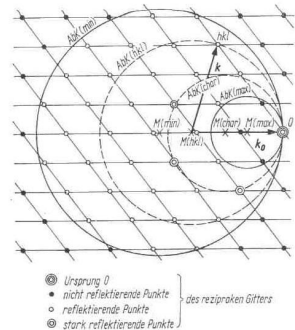
- Strahlung: kontinuierliches Röntgenspektrum
- Probe: feststehender Einkristall
- Prinzip: zu jeder Netzebenenschar gibt es eine Wellenlänge für die die Bragg-Bedingung erfüllt ist
- Anwendung: Untersuchung von Kristallorientierungen und -symmetrien, Feststellung von Kristallbaufehlern

Laue-Verfahren



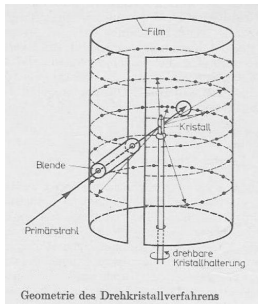
Geometrie des Laue-Verfahrens

- Strahlung: kontinuierliches Röntgenspektrum
 $\lambda_{min} \dots \lambda_{max}, k = \frac{2\pi}{\lambda}$
- Probe: feststehender Einkristall
- Prinzip: zu jeder Netzebenenschar gibt es eine Wellenlänge für die die Bragg-Bedingung erfüllt ist
- Anwendung: Untersuchung von Kristallorientierungen und -symmetrien, Feststellung von Kristallbaufehlern



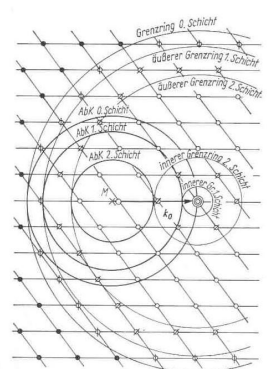
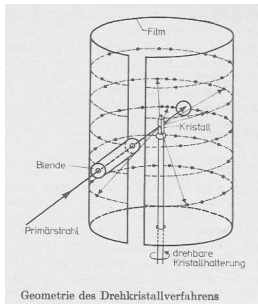
Laue Methode in der Ewaldschen Konstruktion (1)

Drehkristall-Verfahren*



- Strahlung: monochromatisch, Primärstrahlrichtung fest
- Probe: Einkristall
- Prinzip: Drehung des Kristalls um eine feste Achse, bei bestimmten Winkeln wird Bragg-Bedingung erfüllt

Drehkristall-Verfahren*

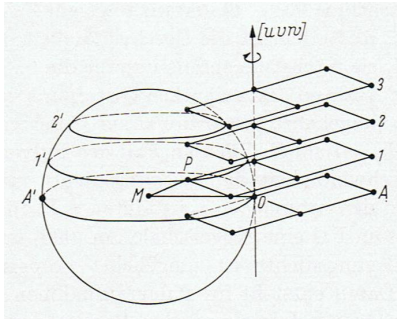


- Ursprung O des reziproken Gitters
- nicht reflektierende Punkte
- ⊗ reflektierende Punkte in der 0. Schicht
- ⊙ reflektierende Punkte in der 1. Schicht
- reflektierende Punkte in der 2. Schicht

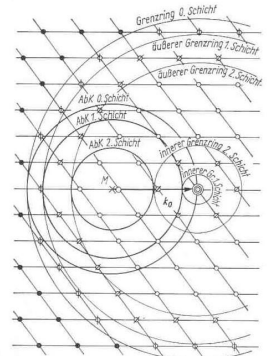
Drehkristall Methode in der Ewaldschen Konstruktion (1)

- Strahlung: monochromatisch, Primärstrahlrichtung fest , *Ewald-Kugel ortsfest*
- Probe: Einkristall
- Prinzip: Drehung des Kristalls um eine feste Achse, bei bestimmten Winkeln wird Bragg-Bedingung erfüllt *reziprokes Gitter dreht sich unter Ewald-Kugel durch*

Drehkristall-Verfahren*



Ewaldsche Ausbreitungskugel im dreidimensionalen reziproken Gitter (2)

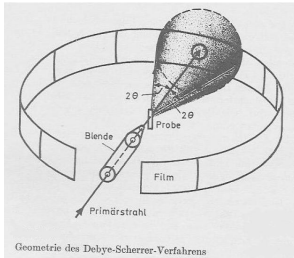


- ⊙ Ursprung O des reziproken Gitters
- nicht reflektierende Punkte
- ⊕ reflektierende Punkte in der 0. Schicht
- ⊖ reflektierende Punkte in der 1. Schicht
- ⊗ reflektierende Punkte in der 2. Schicht

Drehkristall Methode in der Ewaldschen Konstruktion (1)

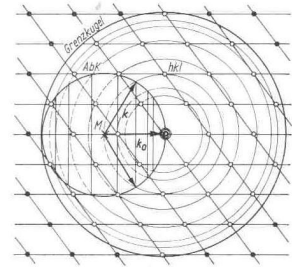
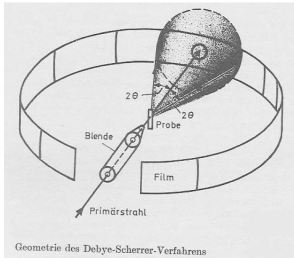
- Strahlung: monochromatisch, Primärstrahlrichtung fest, *Ewald-Kugel ortsfest*
- Probe: Einkristall
- Prinzip: Drehung des Kristalls um eine feste Achse, bei bestimmten Winkeln wird Bragg-Bedingung erfüllt *reziprokes Gitter dreht sich unter Ewald-Kugel durch*

Debye-Scherrer-Verfahren*



- Strahlung: monochromatisch, Primärstrahlrichtung fest
- Probe: polykristallines Kristallpulver
- Prinzip: unter den Kristalliten befindet sich stets eine ausreichende Anzahl, deren Netzebenen so liegen, dass sie Bragg genügen

Debye-Scherrer-Verfahren*



⊙ Ursprung O
 ● nicht reflektierende Punkte } des reziproken Gitters
 ○ reflektierende Punkte

Debye-Scherrer-Methode in der Ewaldschen Konstruktion (1)

- Strahlung: monochromatisch, Primärstrahlrichtung fest
Ewald-Kugel ortsfest
- Probe: polykristallines Kristallpulver
Vektor im reziproken Gitter kann jede beliebige Richtung einnehmen

- Prinzip: unter den Kristalliten befindet sich stets eine ausreichende Anzahl, deren Netzebenen so liegen, dass sie Bragg genügen
Bragg-Bed. ist auf Schnittkurve erfüllt mit: $G_{\text{Grenz}} = 2k_0 = \frac{4\pi}{\lambda}$

Zusammenfassung

Kristallographie:

- Kristall: anisotroper homogener Körper, der eine dreidimensional periodische Anordnung der Strukturbausteine (Atome, Ionen, Moleküle) besitzt
- Kristallstruktur=Raumgitter+Basis
- 14 unabhängige Raumgitter: Bravais-Gitter
- Millersche Indizes hkl : ganzzahlige, teilerfremde reziproke Werte der Achsenabschnitte der Ebene \rightarrow Kennzeichnung von Netzebenen
- Zusammenhang von Netzebenenabstand d_{hkl} und Translationsvektor des reziproken Gitters \vec{G} : $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$

Röntgenbeugung:

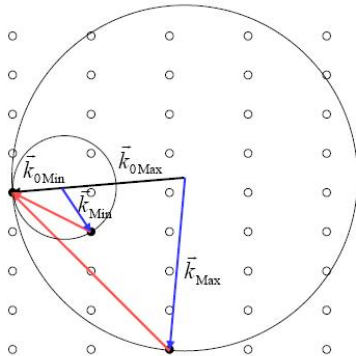
- Wellenlänge der Röntgenstrahlung in der Größenordnung der beugenden Strukturen ($0,03nm \leq \lambda \leq 0,5nm$)
- Bragg-Gleichung: $n\lambda = 2d_{hkl}\sin\vartheta$
- äquivalente Formulierung: Laue-Bedingung: $\Delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}$
- Ewaldsche Konstruktion zur Darstellung der elastischen Streuung an Gitterpunkten im reziproken Raum

Quellen

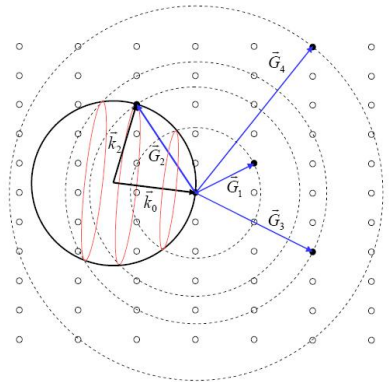
- (1) : W. Kleber, H.-J. Bautsch, J. Bohm, Einführung in die Kristallographie, Verlag Technik GmbH Berlin, 17.Auflage, 1990
- (2) : R. Glocker, Materialprüfung mit Röntgenstrahlen, Springer Verlag, 5.Auflage
- (3) : Stöcker (Hrsg.), Taschenbuch der Physik, Verlag Harri Deutsch, 5.Auflage, 2007
- (4) : W. Demtröder, Experimentalphysik 3, Springer Verlag, 3.Auflage, 2005
- (5) : Vorlesungsunterlagen - Physik der Materie 2
- (6) : Versuchsanleitung zum F-Praktikum, Röntgenversuche
- (7) : S. Hunklinger, Festkörperphysik, Oldenbourg Verlag München Wien, 2007
- (8) : W. Borchardt-Ott, Kristallographie, Springer Verlag, 6.Auflage, 2002

* zusätzliche Folien, die nicht im Vortrag vorkamen - zur Erklärung siehe Kleber, Kapitel 5.1.4, S. 355

weitere Abb. zu Laue- und Debye-Scherrer-Verfahren



Laue Methode in der Ewaldschen Konstruktion (1)



Debye-Scherrer-Methode in der Ewaldschen Konstruktion (1)