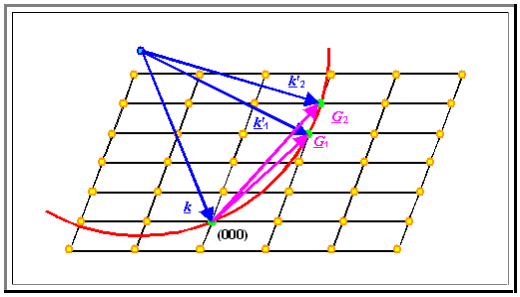
3.3.2 Die Ewald Konstruktion der Beugung

- Nachdem wir jetzt das reziproke Gitter verstanden haben, wollen wir es auch benutzen.
  - Die erste Anwendung betrifft die sogenannte **Ewald Konstruktion der Beugung**. Es handelt sich dabei um eine an Einfachheit nicht mehr zu überbietende geometrische Umsetzung der vektoriellen Bragg Bedingung.
- Gegeben sei ein Wellenvektor $\underline{\boldsymbol{k}}$ und ein Gitter; beide haben eine feste räumliche Orientierung zueinander. Denn obwohl der Wellenvektor die Dimension $\mathbf{cm^{-1}}$ hat, d.h. im Ortsraum eigentlich gar nicht definiert ist, legt er doch über **Amplitude** = $\boldsymbol{A}(\underline{r}) = \boldsymbol{A_0} \cdot e^{i\underline{kr}}$ die Richtung der Welle im Ortsraum eindeutig fest.
  - Wir fragen, welche der unendlich vielen Netzebenenscharen des Gitters die Bragg-Bedingung erfüllen.
  - Dazu zeichnen wir einfach das reziproke Gitter in der exakten Orientierung relativ zu dem Wellenvektor (beide können in dasselbe **KO** System eingezeichnet werden, da beide die Maßeinheit $\mathbf{m^{-1}}$ haben). Die Spitze des Wellenvektors lassen wir auf dem Nullpunkt des reziproken Gitters enden.
  - Danach zeichen wir einen *Kreis* mit Mittelpunkt am Anfangspunkt von $\underline{\boldsymbol{k}}$ und Länge $|\underline{\boldsymbol{k}}|$. *Drei*dimensional wird das natürlich eine *Kugel*, die sogenannte **Ewald Kugel**.
  - Das war's. Offenkundig, wie unten zu sehen, erfüllen alle Ebenen, deren reziproke Gitterpunkte von der Ewaldkugel geschnitten werden, die (zweite Variante der) Bragg -Bedingung. (Nicht vergessen: Jeder Punkt im reziproken Gitter steht für eine Ebenenschar des Raumgitters!)

$$\underline{\boldsymbol{k}}' - \underline{\boldsymbol{k}} = \underline{\boldsymbol{G}}$$

- Die ganze Konstruktion ist unten gezeigt; die möglichen $\underline{\boldsymbol{k}}'$ Werte sind eingezeichnet.



- Es drängt sich natürlich eine *Frage* auf: Ein *mathematischer* Kreis schneidet einen *mathematischen* Punkt *nie*, da sowohl Linie als auch Punkt unendlich "dünn" sind.
  - Was also heißt "...geschnitten werden..." in unserem Fall? Einfach nur, daß Ewald Kugel und reziproker Gitterpunkt sich *nahe genug* kommen.
  - Aha! Und was heißt *nahe genug*? Nun ja, eine echte Welle hat nie eine exakte Wellenlänge, sondern eine bestimmte Frequenz- und Wellenlängenverteilung, und damit auch einen $\underline{\boldsymbol{k}}$-Vektor mit einer gewissen Längenverteilung $\Delta\underline{\boldsymbol{k}}$. Unsere Kreislinie ist also keine Linie, sondern ein dünnes Band - und damit kann man einen Punkt schon "schneiden".
  - Außerdem sind unsere reziproken Gitter*punkte* bei echten Kristallen auch keine *mathematischen* Punkte, sondern haben eine endliche Ausdehnung, die proportional zu den reziproken Dimensionen des realen Kristalls sind. Nur ∞ große Kristalle haben ∞ kleine reziproke Gitterpunkte.
- Damit kann man, wenn man will (und kann) "*nahe genug*" beliebig genau quantifizieren. Wir wollen (und können) das aber nicht - glauben es aber trotzdem.
- Man kann die Ewald Konstruktion natürlich sofort erweitern und zum Beispiel untersuchen:
  - Was passiert, wenn die einfallende Welle nicht *monochromatisch* ist, sondern einen bestimmten Bereich an Wellenlängen abdeckt? *Klar*: Viele Kugeln einzeichnen (ein Kontinuum); eine trifft einen gegeben Punkt des reziproken Gitters immer, wir bekommen Reflexe von (fast) allen Ebenen.
  - Was passiert, wenn die einfallende Welle monochromatisch ist, wir aber den Kristall *drehen*. *Klar*: Bei einem definierten Drehwinkel wird ein herausgegriffener Punkt des reziproken Gitters "reflektieren", d.h. die Ewald Kugel schneiden.
- Damit sind wichtige Methoden zur Strukturuntersuchung schon angedeutet, wir werden darauf später noch näher eingehen.