

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 Netzebenenschar **{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" **{hkl}** und läuft einfach weiter.
 - Oder sie wird an **{hkl}** reflektiert (mit Einfallswinkel = Ausfallswinkel)
3. Die zweite Möglichkeit (Reflektion) erfolgt dann, und nur dann, wenn der Einfallswinkel der Welle auf **{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:

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

- Mit d_{hkl} = Abstand zwischen den **{hkl}** Ebenen (aus Kenntnis des Gittertyps und der **h, k, 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 **k** der einfallenden Welle, und den Wellenvektor **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

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

Mit **G** = ausschließlich durch das Gitter definierter Vektor, genannt "**reziproker Gittervektor**", mit den Eigenschaften

1. **G** steht **senkrecht** auf der betrachteten Ebenenschar **{hkl}**
 2. $|\mathbf{G}| = 2\pi/d_{hkl}$
- 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.