

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 $\underline{G}_{hkl}$

● $\mathbf{g}_{hkl}$ ist ein *reziproker Gittervektor* mit den Eigenschaften

- 1. 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:

$$a_i \cdot g_j = 2 \pi \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases}$$

Wichtige Eigenschaften des reziproken Gitters:

- 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.

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

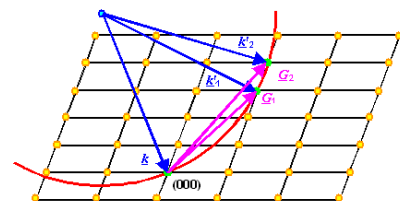
$$\underline{k} - \underline{k}' = \underline{G}_{hkl}$$

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

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

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

**Das reziproke Gitter ist die Fouriertransformierte
des Ortsgitters**



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

- Die Strukturamplitude enthält die Art ("j") und "Anordnung" ($\underline{r}_j$) der Atome der Basis des Kristalls.
- Ein Teil dieser Information steckt in den (tabellierten) **Atomformfaktoren** f_j .

$$F_s = \sum_j f_j \cdot \exp [i \cdot \underline{r}_j \cdot \underline{G}]$$

Die Auswertung der Formel für die Strukturamplitude führt zu **Auslöschungregeln** 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

$h, k, l =$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{alle gerade} \\ \text{alle ungerade} \end{array} \right.$

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