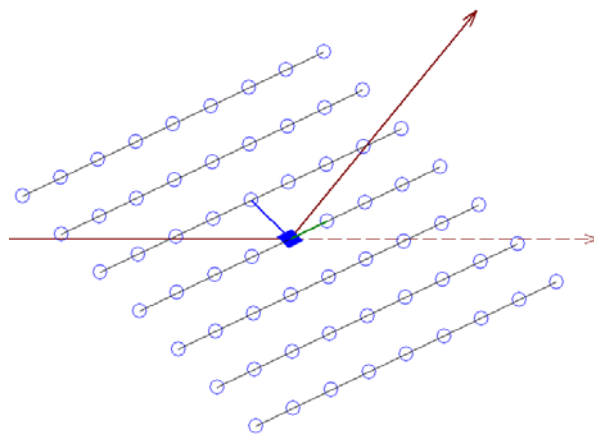
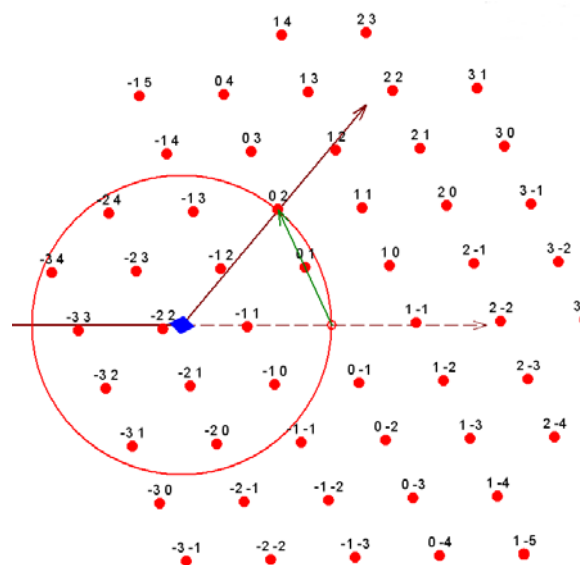


Bragg'sche Reflexion am Kristallgitter



im
realen...

... und im
reziproken
Raum



Starten

Das Programm *Bragg02* muss nicht installiert werden. Es kann auf die Festplatte kopiert, aber auch direkt von der CD gestartet werden.

Die Fenstergröße lässt sich durch Ziehen des Randes beliebig einstellen; sie sollte nicht zu klein gewählt werden. Auch der Vollbild-Modus (Vollbild-Icon oben rechts anklicken) ist möglich.

Es wird empfohlen, vor dem Durcharbeiten der Experimente das Tutorial *Bragg02 Doku.pdf* auszudrucken. Dann entfällt das lästige Hin- und Herschalten zwischen dem Anleitungs- und dem Experimentier-Fenster.

Wer die Beschreibung vom *Acrobat Reader* auf dem Bildschirm anzeigen lässt, sollte von der Lesezeichen-Funktion (linker Rand) Gebrauch machen. Sie gestattet das direkte Ansteuern jedes einzelnen Kapitels.

Experiment 1 - Kristall mit Translationsgitter

Klicken auf...	Wirkung
Experiment Nr. 1 / Start	Es erscheint ein kleines blaues Parallelogramm, das den realen Kristall symbolisiert.
Kristall drehen / Start	Der Kristall dreht sich um eine Achse senkrecht zur Bildebene. Der Drehwinkel Omega wird angezeigt.
Kristall drehen / schneller, langsamer	Möglichkeit zur Einstellung einer sinnvollen Drehgeschwindigkeit
Kristall drehen / Stop, Grundposition	Drehung anhalten

Das Bild des Kristalls hat keine weitere Bedeutung. Es soll nur den Ursprungspunkt des Geräte-Koordinatensystems symbolisieren.

Direktes Gitter / Gitterpunkte	Es erscheinen die Maschen des Translationsgitters, symbolisiert durch Kreise.
Direktes Gitter / Achsen	Es erscheinen die Achsen a (grün) und b (blau). Sie schließen einen Winkel $>90^\circ$ ein.

Stark vereinfacht (und nicht ganz korrekt) kann man das Gitter als Bild einer Kristallstruktur mit einem Atom pro Elementarzelle in (0,0,0) interpretieren.

Das Programm rechnet intern mit monokliner Metrik ($a = 300 \text{ pm}$, $b = 390 \text{ pm}$, $\gamma = 111^\circ$, ausgezeichnete Achse c). Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird stets nur die Äquatorialebene in c-Richtung abgebildet.

Röntgenstrahl / primär	Es erscheint ein brauner Pfeil, der den Röntgenstrahl darstellt.
-------------------------------	--

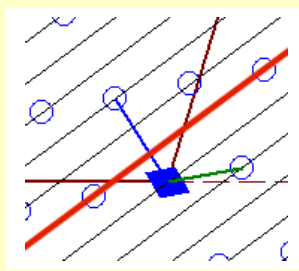
Das Programm rechnet intern mit der Wellenlänge $\lambda = 154.051 \text{ pm}$. Es kann nicht eindringlich genug darauf hin gewiesen werden, dass der Pfeil lediglich die Ausbreitungsrichtung einer ebenen Welle kennzeichnet, die den Kristall in voller Breite überstreicht. Die Kenntnis der Experimente "Bragg01" wird vorausgesetzt.

Kristall drehen / Start	Der Kristall dreht sich erneut.
--------------------------------	---------------------------------

Man erkennt, dass Omega der Winkel zwischen dem Primärstrahl und der Achse a ist. Dies ist willkürlich. Die Bezugsrichtung ($\omega = 0^\circ$) kann beliebig gewählt werden.

Experiment 2 - Netzebenen im Translationsgitter

Klicken auf...	Wirkung
Experiment Nr. 2 / Start	Das Translationsgitter und der Röntgenstrahl erscheinen.
Kristall drehen / Start	Der Kristall rotiert. Ab und zu gerät eine Netzebenenschar in Reflexionsstellung, und ein reflektierter Strahl blitzt auf.
<p><i>Um die Bragg'sche Reflexion genauer studieren zu können, bringen wir im folgenden einige Netzebenen "per Hand" in Reflexionsstellung.</i></p>	
Kristall drehen / Stop	Drehung anhalten
Kristall drehen / Grundposition	Der Kristall wird auf $\Omega = 0^\circ$ positioniert.
Kristall drehen / nächster Reflex	Ω wird so eingestellt ($10,9^\circ$), dass sich die Netzebenenschar $(-1\ 3\ 0)$ in Reflexionsstellung befindet.



Zur Erinnerung: Die Millerschen Indizes hkl lassen sich am einfachsten von den Achsenabschnitten der ersten Netzebene, die nicht durch den Ursprung verläuft, ableiten. Dies ist die im Bildausschnitt rot eingefärbte Netzebene: sie schneidet die (grüne) Achse a bei -1 , die (blaue) Achse b bei $+1/3$, die (senkrecht zur Zeichenebene stehende) Achse c erst im Unendlichen. Die Kehrwerte dieser drei Abschnitte (hier also: $-1\ 3\ 0$) sind die gesuchten Indizes.

*Aus den Gitterkonstanten und den hkl lassen sich die d -Werte (**senkrechte** Abstände der Netzebenen untereinander) berechnen. Sie sind jeweils rechts oben in der Info-Box angegeben.*

Kristall drehen / nächster Reflex	Zu Übungszwecken wende man diesen Befehl noch mehrmals an und leite jeweils die Millerschen Indizes aus den Achsenabschnitten ab.
--	---

Man wird hierbei stets teilerfremde Indextripel finden. Warum in der blau unterlegten Info-Box trotzdem Indizes mit gemeinsamem Teiler >1 auftauchen, z.B. "Reflex $-2\ 4\ 0$ ($= 2.$ Ordnung von $-1\ 2\ 0$)", wird in Experiment 3 erläutert.

Experiment 3 - Winkel-Definitionen, Beugungsordnung und Bragg'sche Gleichung

Klicken auf...

Wirkung

Experiment Nr. 3 / Start

Es erscheint das Translationsgitter mit der hervor gehobenen Netzebenenschar (100) sowie primärer und reflektierter Röntgenstrahl.

Der Primärstrahl (korrekter: die Wellenfront!) trifft unter dem Einfallswinkel Θ (nicht eingezeichnet) auf die Netzebene. Nach dem Reflexionsgesetz (Ausfallswinkel = Einfallswinkel) verlässt auch der reflektierte Strahl die Ebene unter dem gleichen Winkel. Weil die Netzebene ihrerseits mit dem Primärstrahl den Winkel Θ einschließt, erfährt der Strahl insgesamt die Richtungsänderung 2Θ . Diese ist (im Gegensatz zur Position der Netzebene) makroskopisch messbar.

Winkel zeigen / 2Theta

Der makroskopisch messbare Winkel 2Θ wird angezeigt.

Kristall drehen / Grundposition

Kristall drehen / nächster Reflex

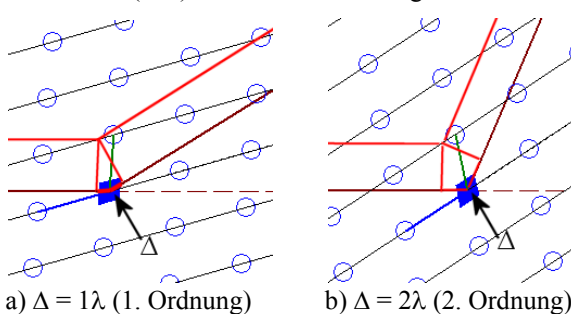
Diese Schaltfläche wird wiederholt angeklickt, bis sich bei $\omega = 85,0^\circ$ die Netzebene (100) wiederum in Reflexionsstellung befindet. Die Info-Box zeigt an: $2\theta = 31,9^\circ$, $d = 280,1$ pm.

Kristall drehen / nächster Reflex

Die Schaltfläche wird weiter angeklickt, bis bei $\omega = 102,4^\circ$ der Reflex (200) erscheint.

Offensichtlich befindet sich auch hier die Netzebenenschar (100) in Reflexionsstellung. Eine Netzebenenschar (200) existiert nicht, weil auf einer

Netzebene (100) in Reflexionsstellung:



Ebene, die die Achse a in $1/2$ schneidet und parallel zu b verläuft, keine Gitterpunkte liegen.

Untersucht man für beide Fälle die Phasendifferenz Δ zweier Wellen, die an benachbarten Ebenen reflektiert werden, erkennt man, dass die Beugungsordnung n im Falle b) 2 ist.

Die Bragg'sche Gleichung zur Berechnung des Beugungswinkels lässt sich in der Form

$$\sin \theta = \frac{\lambda / 2}{d / n}$$

schreiben. Man erkennt, dass man die Beugungsordnung außer Acht lassen kann, wenn man mit dem "fiktiven" Netzebenenabstand d/n arbeitet. Dies rechtfertigt die Benutzung nicht-teilerfremder Millerscher Indizes.

Experiment 4 - Diffraktogramm

Klicken auf...	Wirkung
Experiment Nr. 4 / Start	Es erscheint das Translationsgitter in Grundstellung ($\omega = 0^\circ$).
Kristall drehen / nächster Reflex	Der Kristall wird gedreht, bis bei $\omega = 10,9^\circ$ die Netzebene (-130) die Bragg'sche Reflexionsbedingung erfüllt.

Eine Vorrichtung zum Detektieren von Röntgenstrahlung ("Zählrohr", Scintillationszähler o.ä.), in Richtung des gebeugten Strahls positioniert, wird nun Strahlung registrieren.

Diffraktogramm / zeigen	Es erscheint ein Achsensystem: Registrierte Intensität aufgetragen gegen Beugungswinkel 2θ .
Kristall drehen / nächster Reflex	Wird diese Schaltfläche wiederholt angeklickt, erscheinen weitere Beugungsmaxima.

*Die gezeigte Darstellung nennt man ein **Diffraktogramm**.*

Bei einem Kristall mit unbekannten Gitterkonstanten oder in unbekannter Orientierung ist das hier gezeigte Verfahren zur Registrierung der Beugungswinkel und –Intensitäten nicht anwendbar, weil man 2θ bzw. ω nicht kennt und folglich die Registriervorrichtung nicht positionieren kann. Hier gibt es zwei Auswege:

- Man wählt eine Registriermethode, bei der in jedem Moment der gesamte Winkelbereich erfasst wird. Das strahlenempfindliche Medium sollte den Kristall dabei zylindrisch umgeben. Geeignet sind z.B. Röntgenfilme, Image Plates oder sog. ortsempfindliche Detektoren. Die so entstandenen Bilder nennt man **Drehkristallaufnahmen**.*
- Man untersucht fein gepulverte Proben. Da die einzelnen Kristallite völlig regellos orientiert sind, gibt es für jede Netzebene in jedem Moment einige Kristallite, auf die der Primärstrahl unter dem Bragg'schen Glanzwinkel trifft. Mit dieser Technik entstehen **Pulverdiffraktogramme**.*

Wird der Röntgenstrahl von der „Oberseite“ einer Netzebene reflektiert, liegt der Beugungswinkel 2θ im Bereich 0° bis 180° . Reflexion an der „Unterseite“ ist ebenfalls möglich und führt zu Winkeln im Bereich 180° bis 360° . Da dies keinen Informationsgewinn ergibt, registrieren die meisten Vorrichtungen nur den erstgenannten Bereich.

Auch das hier beschriebene Simulationsprogramm ignoriert aus Gründen der Übersichtlichkeit die „nach unten“ fallenden Strahlen.

Experiment 5 - Der Streuvektor

Klicken auf...	Wirkung
Experiment Nr. 5 / Start	
Kristall drehen / Grundposition	Es erscheint das Translationsgitter in Grundstellung ($\omega = 0^\circ$).
Kristall drehen / nächster Reflex	Die Netzebene (-130) erfüllt bei $\omega = 10,9^\circ$ die Reflexionsbedingung.
Direktes Gitter / Streuvekt. (Schaltfläche mehrmals betätigen!)	Es wird ein hellblauer Vektor ein- und ausgeschaltet, der den Winkel zwischen Primär- und reflektiertem Strahl genau halbiert.
<i>Dieser Vektor (die Normale der Netzebene) nimmt eine Sonderstellung im Beugungsexperiment ein: dreht man den Kristall beliebig um den Vektor, bleibt die Beugungsbedingung erhalten. Weil Röntgenbeugung auch vielfach als Röntgenstreuung bezeichnet werden kann, nennt man ihn Streuvektor.</i>	
Kristall drehen / nächster Reflex (Schaltfläche mehrmals betätigen!)	Es erscheinen weitere Netzebenenscharen mit ihren Streuvektoren.
<i>Man erkennt, dass der Streuvektor stets senkrecht auf der reflektierenden Netzebenenschar steht.</i> <i>Nun versuche man, eine Beziehung zwischen der Vektorlänge und dem Netzebenenabstand d zu entdecken.</i>	
<i>Durch die Richtung des Streuvektors ist die Orientierung der Netzebenenschar im Raum eindeutig charakterisiert. Wie später noch begründet werden wird, hat es sich als außerordentlich praktisch erwiesen, als Länge des Vektors den dimensionslosen Term $n \cdot \lambda / d$ zu wählen. Man zeige an Hand der Bragg'schen Gleichung, dass dieser Ausdruck dem Sinus des Beugungswinkels θ proportional ist!</i> <i>Zur Visualisierung des dimensionslosen Terms wird ein Vergrößerungsfaktor VF mit der Dimension [Länge] benötigt. Meist werden Zentimeter gewählt; aber bei der Computerdarstellung ist die Skalierung auf die Pixelgröße des Bildschirms praktischer.</i>	
(Fenster vergrößern / verkleinern)	Durch "Ziehen" der Ränder oder Ecken des Bildfensters bei gedrückter linker Maustaste wird der Abbildungsmaßstab geändert. Entsprechend ändert sich der in der Info-Box angezeigte Wert für den Vergrößerungsfaktor VF.

Experiment 6 - Der Ursprungspunkt des Streuvektors

Klicken auf...	Wirkung
----------------	---------

Experiment Nr. 6 / Start

Kristall drehen / Grundposition

Es erscheint das Translationsgitter in Grundstellung ($\omega = 0^\circ$).

Kristall drehen / nächster Reflex

Die Netzebene (-130) erfüllt bei $\omega = 10,9^\circ$ die Reflexionsbedingung. Es erscheint ein grüner Pfeil als Kopie des Steuvektors.

Dieser neue Streuvektor ist gegenüber dem ursprünglichen um VF (Vergrößerungsfaktor, Dimension [Pixel]) in Strahlrichtung parallel verschoben. Diese Verschiebung ist zulässig, weil der Fußpunkt des Streuvektors frei gewählt werden kann.

Kristall drehen / nächster Reflex (mehrmals)

Es erscheinen die Streuvektoren weiterer Reflexe.

Die Länge des Streuvektors ist stets, wie in der Infobox dargestellt,

$$VF \cdot \frac{n \cdot \lambda}{d} [\text{Pixel}]$$

mit VF - willkürlicher Vergrößerungsfaktor
n - Beugungsordnung
 λ - Wellenlänge (154,051 pm)
d - realer Netzebenenabstand

Offensichtlich liegt bei der gewählten Ursprungsverschiebung der Endpunkt des Streuvektors stets auf dem gebeugten Strahl. Außerdem scheint es, als ob die Strecke vom Kristallmittelpunkt zum Schnittpunkt Strahl / Streuvektor die Länge VF habe.

Ein Beweis für diese Vermutungen folgt später!

Experiment 7 - Die Menge der Streuvektoren

Klicken auf...

Wirkung

Experiment Nr. 7 / Start

Kristall drehen / Grundposition

Es erscheint das Translationsgitter in Grundstellung ($\omega = 0^\circ$). Der neue Ursprungspunkt der Streuvektoren ist durch einen blauen Punkt mit rotem Rand gekennzeichnet.

Kristall drehen / nächster Reflex (mehrmals)

Es erscheinen die Streuvektoren weiterer Reflexe. Ihre Endpunkte sind durch rote Punkte markiert und verschwinden nicht mehr.

Direktes Gitter / Gitterpunkte und Netzebenen

Die Gitterpunkte und Netzebenen werden nicht mehr dargestellt. Damit wird das Muster der bisher gezeigten Streuvektoren übersichtlicher.

Kristall drehen / Start

Der Kristall wird automatisch gedreht; dabei erscheinen nach und nach alle Streuvektoren. Sie sind mit ihren Miller-Indizes h und k bezeichnet.

Die Streuvektoren beziehen sich auf das reale Translationsgitter des Kristalls. Daher ändern sie ihre Richtung, wenn die durch ω gekennzeichnete Kristallorientierung sich ändert.

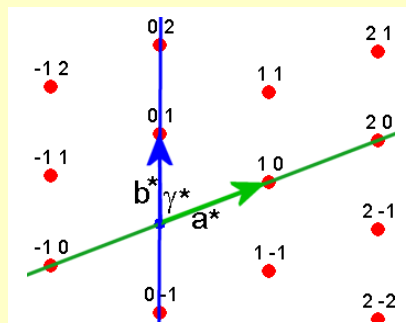
Anders ausgedrückt: das von den roten Punkten gebildete Gittermuster rotiert synchron zum Kristall.

Kristall drehen / Stop

Der Kristall rotiert nicht mehr.

(Sollte nicht der volle ω -Bereich von 0° bis 360° abgefahren worden sein, kann man notfalls mit dem Schalter "Punkte im rez. Gitter / alle zeigen" sämtliche möglichen Streuvektoren sichtbar machen)

Offensichtlich bilden die Streuvektoren ein regelmäßiges, wenn auch schiefwinkliges Gittermuster.



Es ist zweckmäßig, als Basis dieses Gitters die Vektoren (10) und (01) zu wählen. Um sie von den Gitterkonstanten des realen Kristalls zu unterscheiden, bezeichnet man sie als a^ , b^* und den eingeschlossenen Winkel als γ^* .*

Experiment 8 - Reflex (100) im direkten und im reziproken Gitter

Klicken auf...

Wirkung

Experiment Nr. 8 / Start Der Kristall erscheint mit (100) in Reflexionsstellung. Zusätzlich ist der Streuvektor eingezeichnet.

Aufgabe: Für einen Kristall mit den Gitterkonstanten a und b , die den Winkel γ einschließen, ist der Betrag (die Länge) des Streuvektors $hk = (10)$ zu berechnen. Der Vergrößerungsfaktor sei VF .

Lösung: Die Netzebene (10) schneidet die Achse a bei $1/a$ und verläuft parallel zur Achse b . Damit ist für diese Ebenenschar

$$\cos(\gamma - 90^\circ) = \sin \gamma = \frac{d}{a},$$

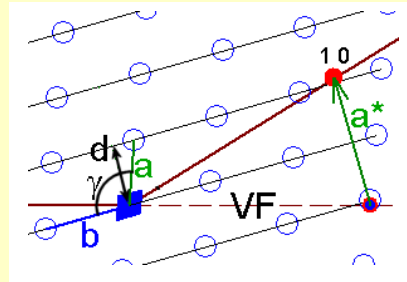
$$\text{also } d = a \cdot \sin \gamma$$

Die Länge des Streuvektors ist vereinbarungsgemäß (vgl. Experiment 6)

$$VF \cdot \frac{n \cdot \lambda}{d}. \text{ Da der Streuvektor von}$$

$hk = (10)$ der Basisvektor a^* des Streuvektor-Gittermusters ist, folgt mit $n = 1$:

$$a^* = VF \cdot \frac{\lambda}{a \cdot \sin \gamma}$$



a^* ist proportional dem Reziprokwert der Gitterkonstante a . Man bezeichnet deshalb das von a^* (und b^* , c^* ; s. Experiment 9) aufgespannte Netz als **reziprokes Gitter** des Kristalls. Die **reziproken Achsen** definieren den **reziproken Raum**.

Experiment 9 - Winkel im reziproken Gitter

Klicken auf...

Wirkung

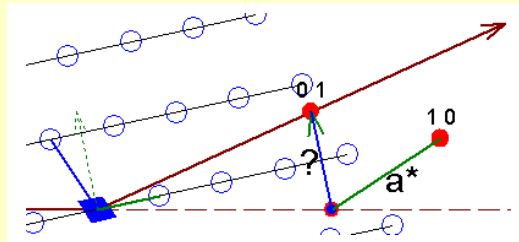
Experiment Nr. 9 / Start Der Kristall erscheint mit (010) in Reflexionsstellung. Zusätzlich ist der Streuvektor eingezeichnet.

Aufgabe: In Anlehnung an Experiment 8 berechne man übungshalber die Länge der reziproken Achse b^* .

Lösung:

$$b^* = VF \cdot \frac{\lambda}{b \cdot \sin \gamma}$$

(Der Lösungsweg ist analog zu a^* und muss hier nicht ausgeführt werden)

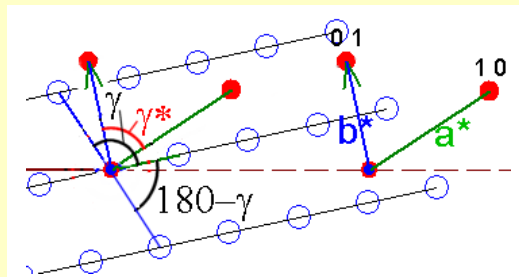


Aufgabe: Der von den reziproken Achsen eingeschlossene Winkel γ^* ist zu berechnen.

Lösung: Da der Ursprung der Streuvektoren frei wählbar ist, werden sie in den Ursprung des realen Gitters parallel verschoben.

Der Winkel zwischen a und der negativen Achse b beträgt $180^\circ - \gamma$. Auf den Schenkeln dieses Winkels stehen definitionsgemäß die Streuvektoren a^* bzw. b^* senkrecht. Da zwei Winkel, deren Schenkel aufeinander senkrecht stehen, gleich sind, ist der von a^* und b^* eingeschlossene Winkel

$$\gamma^* = 180^\circ - \gamma$$



Zusammenfassung: Eigenschaften des reziproken Gitters

- 1) Jeder Gitterpunkt im reziproken Raum symbolisiert eine Netzebenenschar des realen Raumes.
- 2) Jeder Vektor (hkl) im reziproken Gitter steht senkrecht auf der gleichnamigen Netzebenenschar des realen Gitters. Daraus folgt, dass die reziproken Basisvektoren a^* , b^* , c^* jeweils senkrecht auf den realen Gitterebenen bc , ca bzw. ab stehen. Dies gilt auch umgekehrt ($a \perp b^*c^*$ usw.).
- 3) Für monokline Gitter mit der ausgezeichneten Achse c gelten folgende Umrechnungsformeln:

$$a^* = \frac{VF \cdot \lambda}{a \cdot \sin \gamma} \quad b^* = \frac{VF \cdot \lambda}{b \cdot \sin \gamma} \quad c^* = \frac{VF \cdot \lambda}{c}$$

$$\alpha^* = 90^\circ \quad \beta^* = 90^\circ \quad \gamma^* = 180^\circ - \gamma$$

VF ist ein willkürlich wählbarer Vergrößerungsfaktor, der die Dimension [Länge] haben kann.

(Alternativ wird oftmals $VF = 1/\lambda$ mit der Dimension [1/pm] gesetzt.)

- 4) Die Formeln für die übrigen Kristallsysteme (**mit Ausnahme des triklinen!**) ergeben sich sinngemäß mit $\gamma = 90^\circ$ bzw. 120° .

Experiment 10 - Absolute Positionen der Streuvektoren

Klicken auf...

Wirkung

Experiment Nr. 10 / Start

Kristall drehen / Grundposition

Der Kristall wird auf $\omega = 0^\circ$ positioniert.

Kristall drehen / nächster Reflex

Es erscheint die Netzebenenschar (-130) in Reflexionsstellung sowie der zugehörige Streuvektor. Der Schnittpunkt des Streuvektors mit dem gebeugten Strahl ist durch einen roten Kreis markiert.

Kristall drehen / nächster Reflex (mehrmals wiederholen)

Es erscheinen weitere Netzebenen. Die jeweiligen Markierungen werden nicht mit dem Kristall gedreht. Sie behalten vielmehr ihre feste Position relativ zum Primärstrahl bei.

Es darf vermutet werden, dass alle so erzeugten Punkte auf einem Kreis mit dem Radius VF liegen.

Zur Erinnerung: der "Vergrößerungsfaktor" VF, der Abstand zwischen dem Ursprung des realen Gitters und dem Ursprung der Streuvektoren, ist eine frei wählbare Länge. Der in der Info-Box angezeigte Wert hängt von der Größe des Bildfensters ab.

Kristall drehen / Start (Stop, schneller, langsamer)

Alle abbildbaren Netzebenen geraten nach und nach in Reflexionsstellung.

Die Zahl der Netzebenen im Kristall ist beliebig groß. In Reflexionsstellung gelangen indes nur diejenigen mit $d/n \geq \lambda/2$ (warum?).

Anmerkungen

- a) Reflexe, die auf die untere Hälfte des Kreises fallen. wurden aus Gründen der Übersichtlichkeit fortgelassen. Sie liefern keine zusätzliche Information.
- b) Gelegentlich taucht unmotiviert ein einzelner Reflex (1 -5) auf. Ursache ist ein hartnäckiger Programmierfehler. Wer den findet, bekommt einen Orden.

Experiment 11 - Der Ewaldkreis

Klicken auf...	Wirkung
Experiment Nr. 11 / Start	Es erscheint ein Kreis (Mittelpunkt im Ursprung des realen Gitters). Auf seiner Peripherie liegt der Ursprung des reziproken Gitters. a^* und c^* sind abgebildet.
Kristall drehen / Start	Alle abbildbaren Netzebenen geraten nach und nach in Reflexionsstellung. In diesem Moment liegen ihre Streuvektoren exakt auf dem Kreis.
(bei Bedarf: Kristall drehen / Grundposition	Der Kristall wird auf $\omega = 0^\circ$ positioniert. Alle Bisher gespeicherten Reflexe werden gelöscht.
(bei Bedarf: Kristall drehen / schneller	

Dieses Experiment entspricht dem vorangegangenen. Lediglich der Kreis als geometrischer Ort aller Reflexe ist eingezeichnet.

*Zu Ehren eines berühmten Kristallographen nennt man diesen Kreis den **Ewaldkreis**. Im allgemeinen Falle liegen alle Reflexe auf einer Kugel: der **Ewaldkugel**.*

Der Radius VF von Ewaldkreis bzw. -kugel ist willkürlich. Um eine sinnvolle bildliche Darstellung zu ermöglichen, wird hier die Längeneinheit Pixel gewählt.

Experiment 12 - Ewald-Konstruktion des Beugungswinkels

Klicken auf...

Wirkung

Experiment Nr. 12 / Start Es erscheint der Primärstrahl mit Ewaldkreis.

Punkte im rez. Gitter / alle zeigen Es erscheinen alle abbildbaren Punkte des reziproken Gitters.

Zur Erinnerung: Alle Netzebenen mit $d/n \geq \lambda/2$ können die Bragg'sche Reflexionsbedingung erfüllen.

Keiner der gezeigten Punkte des reziproken Gitters liegt exakt auf dem Ewaldkreis.

Kristall drehen / nächster Reflex

Der Kristall wird gedreht, bis bei $\omega = 10,9^\circ$ der Punkt (-1 3) genau auf dem Ewaldkreis liegt. Der Streuvektor sowie die Winkel θ und 2θ werden angezeigt.

Punkte im rez. Gitter / zeigen, falls reflektiert

Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden alle Punkte, die nicht auf dem Ewaldkreis liegen, gelöscht.

Neu ist die grüne Hilfslinie vom linken Schnittpunkt des Primärstrahls mit der Ewaldkugel zum Punkt (-1 3).

Die beiden grünen Linien bilden bei (-1 3) einen rechten Winkel (Satz des Thales: Der Umfangswinkel über dem Durchmesser eines Kreises ist ein rechter).

Weiterhin gilt der Satz: Über der gleichen Sehne ist der Umfangswinkel stets halb so groß wie der Mittelpunktswinkel. Weil der Winkel zwischen gebeugtem Strahl und Primärstrahl als 2θ definiert ist, taucht am linken Durchstoßpunkt θ auf.

Daher gilt im rechtwinkligen Dreieck

$$\sin \theta = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypotenuse}} = \frac{\text{Betrag des Streuvektors}}{2 \cdot \text{Radius des Ewaldkreises}}$$

Für die Länge des Streuvektors wurde $n \cdot (\lambda/d) \cdot VF[\text{Pixel}]$ gewählt (Experiment 6), für den Radius des Ewaldkreises $VF[\text{Pixel}]$. Daher gilt

$$\sin \theta = \frac{n \cdot (\lambda/d) \cdot VF}{2 \cdot VF} = \frac{n \cdot \lambda}{2 \cdot d}$$

oder auch

$$n \cdot \lambda = 2d \cdot \sin \theta$$

Unschwer ist zu erkennen, dass es sich hierbei um die Bragg'sche Gleichung handelt.

Damit ist gezeigt, dass die zunächst recht willkürlich erscheinenden Annahmen

- *Länge des Streuvektors ist umgekehrt proportional zu d und*
- *Ursprungspunkt des Streuvektors ist gegenüber dem Ursprungs des realen Gitters um die Länge VF verschoben*

zu sehr brauchbaren Möglichkeiten führen:

a) Sind die Gitterkonstanten bekannt, lässt sich nach den in Experiment 9 angegebenen Formeln das reziproke Gitter aufspannen. Sodann wird der Kristall um eine beliebige Achse gedreht. Immer, wenn ein Gitterpunkt die Oberfläche der Ewaldkugel durchschneidet, tritt ein Reflex auf. Dies wird in Experiment 13 visualisiert.

b) Sind die Gitterkonstanten unbekannt, registriert man bei jedem im Verlaufe der Drehung auftretenden Reflex den Schnittpunkt des gebeugten Strahls mit der Ewaldkugel (Experiment 14). So erhält man nach einiger Zeit eine größere Zahl von Punkten des reziproken Gitters. Man wählt drei sinnvolle Basisvektoren, aus denen sich die Gitterkonstanten des realen Raumes berechnen lassen.

Experiment 13 - Reziprokes Gitter und Ewaldkreis

Klicken auf...

Wirkung

- Experiment Nr. 13 / Start** Das reziproke Gitter und der Ewaldkreis erscheinen.
- Kristall drehen / Start** Der Kristall und das reziproke Gitter rotieren.
- Kristall drehen / langsamer** (ggf. mehrmals) Man wähle eine möglichst geringe Drehgeschwindigkeit.

Immer, wenn einer der Gitterpunkte genau auf den Ewaldkreis fällt, erscheint ein gebeugter Strahl unter dem Winkel 2θ . Dieser könnte von einer Messvorrichtung detektiert werden; meist trägt man die Intensität gegen den Beugungswinkel auf.

Bei gleichförmiger Änderung des Drehwinkels ω erscheinen die Reflex in regelloser Abfolge.

Man vergleiche diese Beschreibung der Diffraktogramm-Entstehung mit der in Experiment 4 dargestellten:

Direktes Gitter / Gitterpunkte Das reale Gitter erscheint.

Direktes Gitter / Netzebenen Netzebenen in Reflexionsstellung werden angezeigt.

Punkte im rez. Gitter / nicht zeigen Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird das reziproke Gitter ausgeblendet.

Es zeigt sich, dass eine Vorhersage, welche Netzebenenschar als nächste in Reflexionsstellung gelangt, aus dem realen Gitter heraus fast unmöglich, bei Verwendung des reziproken Gitters dagegen trivial ist.

Experiment 14 - Unbekannter Kristall

Klicken auf...

Wirkung

Experiment Nr. 14 / Start

Es erscheinen Primärstrahl, Ewaldkreis und Ursprung des reziproken Gitters.

Kristall drehen / Start

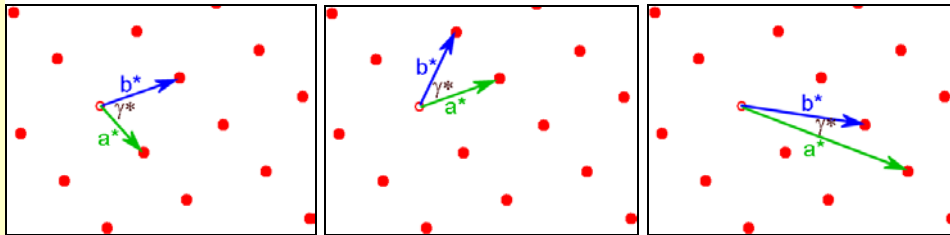
Der Kristall rotiert; nach und nach erscheinen die Gitterpunkte, deren Netzebenen in Reflexionsstellung waren und werden festgehalten.

(Nach ca. einer ganzen Umdrehung:)

Kristall drehen / Stop

Nun sind alle Netzebenen, die bei der gewählten Wellenlänge die Reflexionsbedingung erfüllen können, als Punkte des reziproken Raumes abgebildet.

Die Basisvektoren a^ und b^* können prinzipiell beliebig gewählt werden:*



Die günstigste Aufstellung des reziproken Gitters wird durch die (hier nicht behandelte) Symmetrie bestimmt.

Nach der Festlegung der Elementarzelle im reziproken Raum lassen sich auch die Gitterkonstanten des realen Gitters sowie die Orientierung des Kristalls relativ zum Messgerät berechnen.

Die beschriebene Methode gestattet eine vollautomatische Bestimmung der Metrik eines unbekannten Einkristalls.