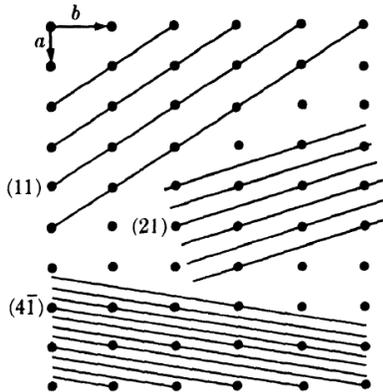


# Röntgenbeugung (I):

## Millersche Indizes:



- Linien mit niedrigsten Indices haben die größte Abstand und die größte Dichte der Gitterpunkte.

## Das reziproke Gitter:

- Das Röntgen-Beugungsbild eines Kristalls ist nicht das direkte Bild des Kristallgitters selbst, sondern das Bild des reziproken Gitters, das dem Kristallgitter zugeordnet ist.
- Ein 3-dimensionales punkt Gitter wird durch drei Basisvektoren  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  beschreiben.
- Wir bilden die Basisvektoren  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ , und  $\mathbf{c}^*$  des reziproken Gitters:

$$\mathbf{a}^* = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{b}^* = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{c}^* = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}$$

## Die Eigenschaft der Basisvektoren:

- Der reziproke Gittervektor  $\mathbf{G} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$  steht senkrecht auf den Gitterebene ( $hkl$ ).
- Der Betrag  $|\mathbf{G}|$  ist umgekehrt proportional zum Abstand  $d_{hkl}$  zwischen zwei benachbarten Ebenen der Ebenschar ( $hkl$ ).

$$\text{Es gilt } |\mathbf{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}, \text{ oder } d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|}$$

- Das reziproke Gitter eines Bravais-Gitters gehört zum gleichen Kristallsystem wie das reale Gitter, kann aber eine andere Zentrierung haben.

## Beugung am Kristallgitter

### Bragg-Gleichung

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

$\theta$ : Braggwinkel, d: Gitterebenenabstand,  $\lambda$ : die Wellenlänge, n: Beugungsordnung

### Methoden

	$\lambda$	$\theta$
• Laue Methode	variable	Konstant
• Pulvermethoden	Konstant	variable

### Laue Methode

Charakteristika:

- Einkristall – Methode, fester Kristall
- Weißes Röntgenlicht statten
- Röntgenfilm fest
- Anwendung zur Kristallorientierung

### Pulvermethoden

Charakteristika:

- Monochromatisches Röntgenlicht
- Debye-Scherrer: zylindrischer Röntgenfilm (2D Detektor, Pilatus)

#### Anwendung:

- Meist zur Phasenanalyse (Vermessen charakteristischer d-Werte)
- Strukturverfeinerung mit Hilfe sogenannter Rietveld – Methoden

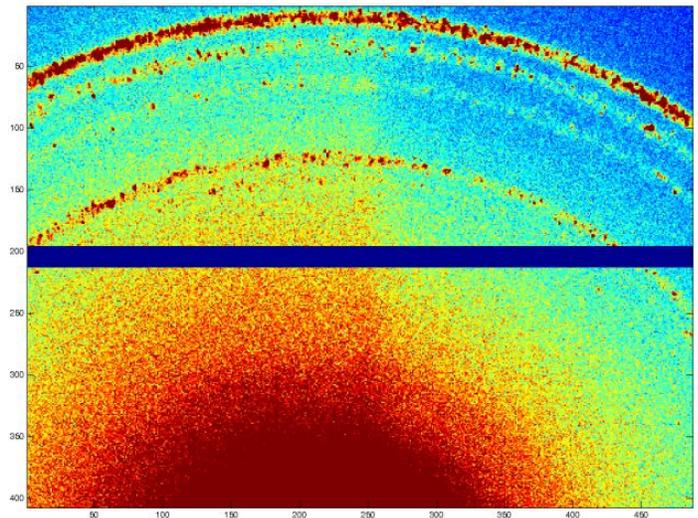
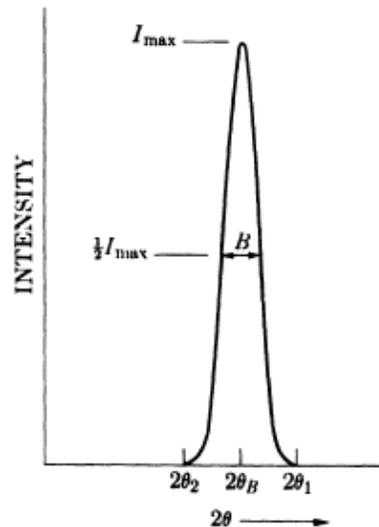


Fig. 1 The measured Diffraction pattern of Quarz with Pilatus

### Debye-Scherrer-Aufnahmen

In kubische Kristalle  $\rightarrow \sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$ ,

Wenn die Kristalle sehr klein sind, hat das eine Verbreiterung der Röntgenreflexe zur Folge, die durch die Scherrer-Gleichung beschrieben wird:



$$t = \frac{0.9 \lambda}{B \cos \theta_B} \text{ Scherrer-Gleichung}$$

Dabei ist:

- $B$  die volle Halbwertsbreite des Reflexes, gemessen im Bogenmaß
- $\lambda$  die Wellenlänge der Röntgenstrahlung
- $t$  die Ausdehnung des Kristalls senkrecht zu den Netzebenen des Reflexes
- $\theta_B$  der Beugungswinkel

### **Beispiele:**

Wenn  $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$ ,  $d = 1.0 \text{ \AA}$ ,  $\theta = 49^\circ$ .

Für  $t = 1 \text{ mm}$ , d. h.  $10^7$  parallel Lattice planes  $\rightarrow B = 2 \times 10^{-7}$  radian ( $10^{-5}$  deg.)

Für  $t = 500 \text{ \AA}$ , d. h. 500 parallel Lattice planes  $\rightarrow B = 4 \times 10^{-3}$  radian (0.2 deg.)!