

5. Prinzip der Beugung

LAUE-/BRAGG'sche-Gleichung, reziprokes Gitter, EWALD-Konstruktion



'Grundlagen der Röntgenbeugung', SS 24, Caroline Röhr

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmethoden

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenab-
stände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung,
Streuvektor

Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

- ① Grundlagen
Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden
- ② LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)
Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung
MILLER-Indizes, Netzebenenabstände
- ③ LAUE-Gleichung (Vektorform)
Basics Vektorrechnung
LAUE-Gleichung, Streuvektor
- ④ Reziprokes Gitter
- ⑤ BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?
- ⑥ Zusammenfassung: Von BRAGG ... bis EWALD

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmetho-
den

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenab-
stände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung,
Streuvektor

Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

① Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

② LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung
MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

③ LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung
LAUE-Gleichung, Streuvektor

④ Reziprokes Gitter

⑤ BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

⑥ Zusammenfassung: Von BRAGG ... bis EWALD

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmethoden

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenabstände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung,
Streuvektor

Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

Prinzip und Analogie zur Optik

5. Prinzip der Beugung



Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

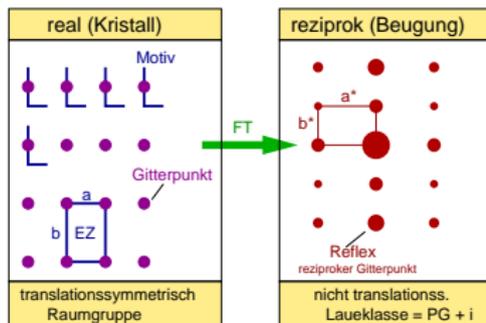
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Prinzip und Analogie zur Optik

- ▶ Wellenlänge monochromatischer Strahlung \approx Atomabstände (λ ca. 100 pm/1 Å)
- ▶ Superposition von Wellen mit Phasenverschiebung
- ▶ alles analog Beugung am Spalt/Gitter der Wellen-Optik ($\lambda = 400\text{-}800$ nm)
- ▶ 2D-Beispiele*



- ▶ reziproke Abstandsverhältnisse Gitter \leftrightarrow 'Reflexe'
- ▶ Orte (beschrieben durch reziprokes Gitter) \mapsto Gitterinformation
- ▶ Intensitäten \mapsto Motivinformation
- ▶ Punktgruppe des Beugungsmusters \mapsto LAUE-Klasse (Kristallklasse + $\bar{1}$)
- ▶ Prinzipien: Position/Intensität/Breite von Reflexen (FFT)
- ▶ Informationen bei Einkristallen bzw. Pulvern (DISCUS, DIFFRACTOGRAM)

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

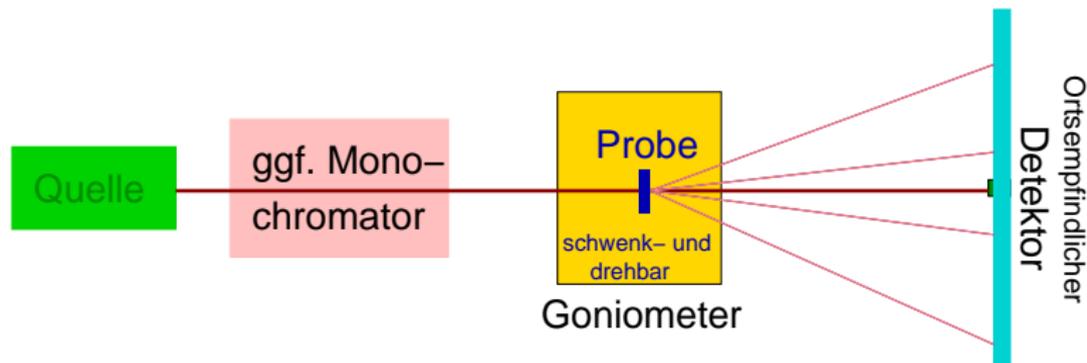
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Einteilung der Beugungsmethoden



▶ nach Strahlungsart

- 1 Röntgen (X; elektromagnetische Strahlung, Röntgenröhre, Laborbetrieb)
- 2 Elektronen (e^- ; Elektronenmikroskop!)
- 3 Neutronen (n ; Kernreaktor oder Spallationsquelle am Synchrotron)

▶ nach Probe

- 1 Gase, Flüssigkeiten, amorphe Feststoffe \mapsto sehr speziell
- 2 kristalline Feststoffe
 - Einkristalle \mapsto Demo DIFFRACTOGRAM (EPFL) oder XRAYVIEW
 - Pulver \downarrow Informationen ?

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

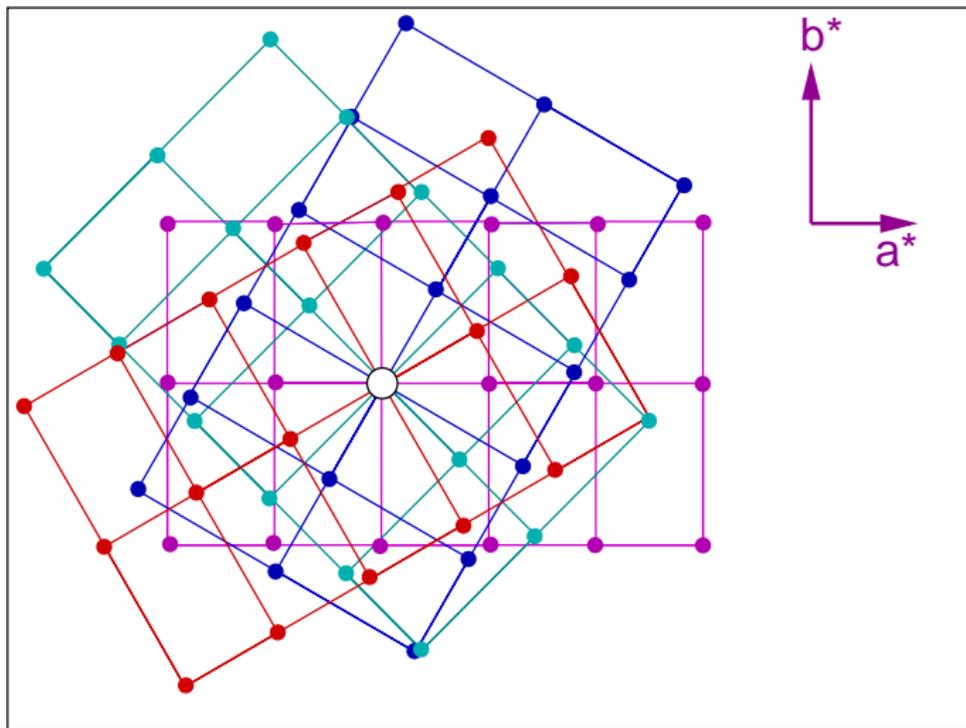
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Informationen aus Pulvern ?



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

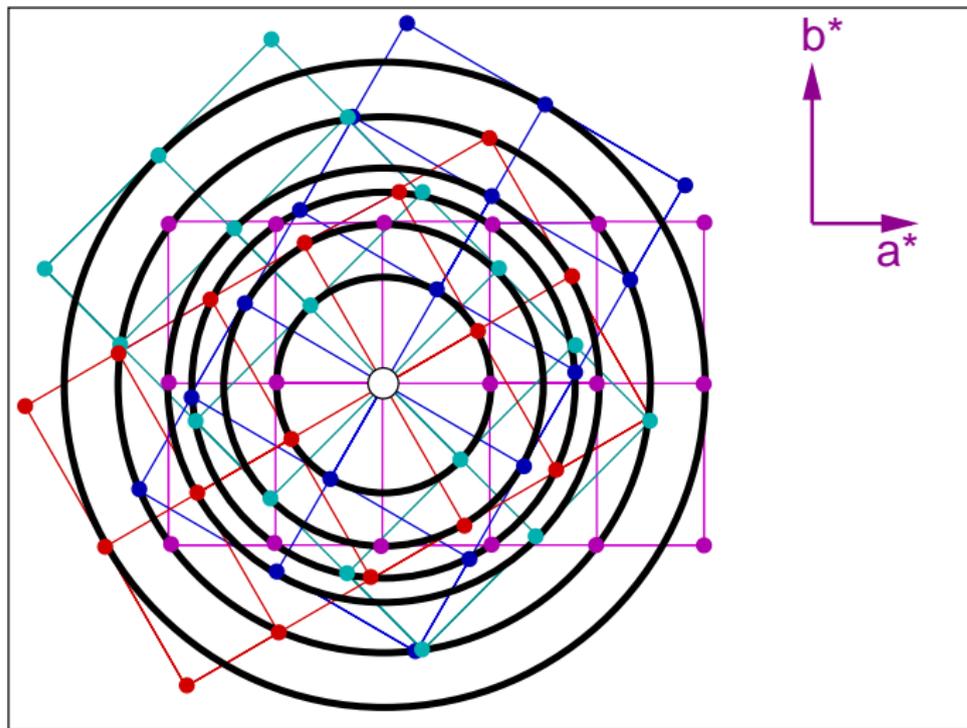
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Informationen aus Pulvern ?



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

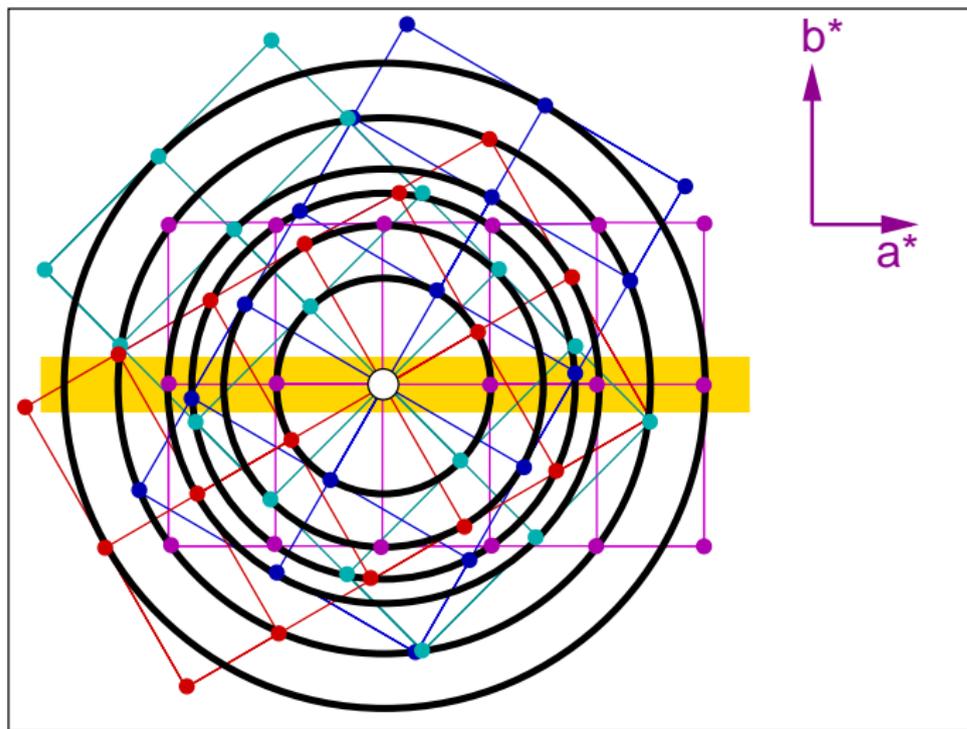
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Informationen aus Pulvern ?



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

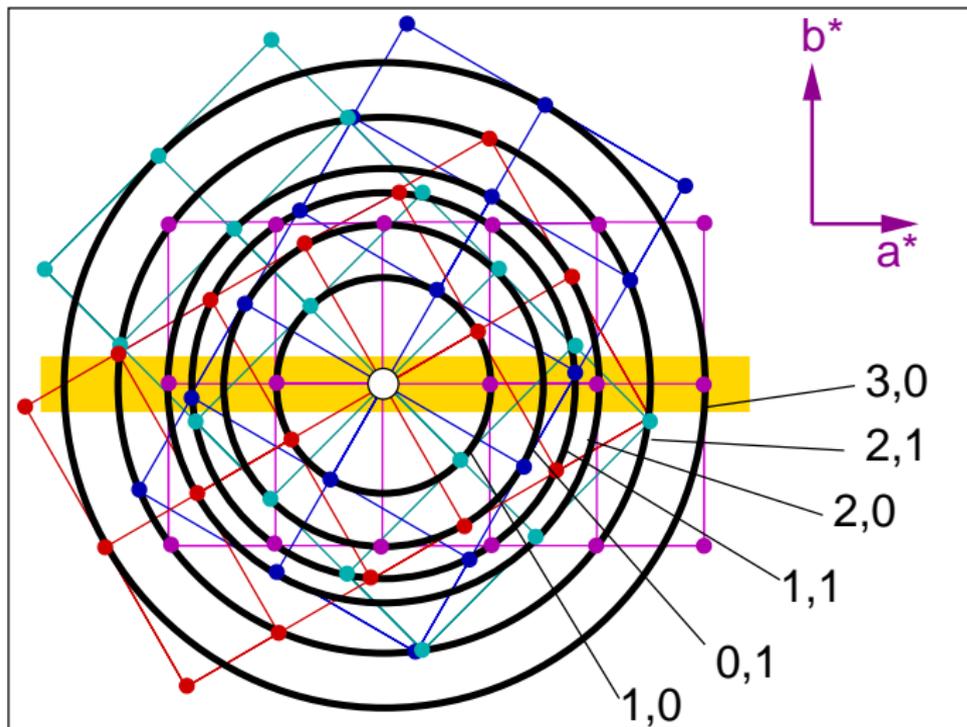
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Informationen aus Pulvern ?



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

① Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

② LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung
MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

③ LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung
LAUE-Gleichung, Streuvektor

④ Reziprokes Gitter

⑤ BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

⑥ Zusammenfassung: Von BRAGG ... bis EWALD

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmethoden

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenab-
stände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

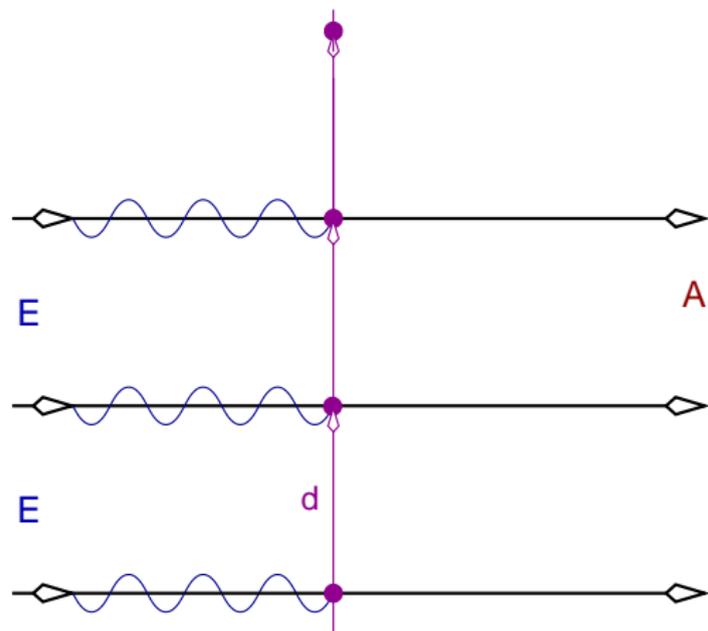
LAUE-Gleichung,
Streuvektor

Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

Spezialfall: Senkrechter Einfall, LAUE-Gleichung*



* anstelle mechanischem Schiegebildchen

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

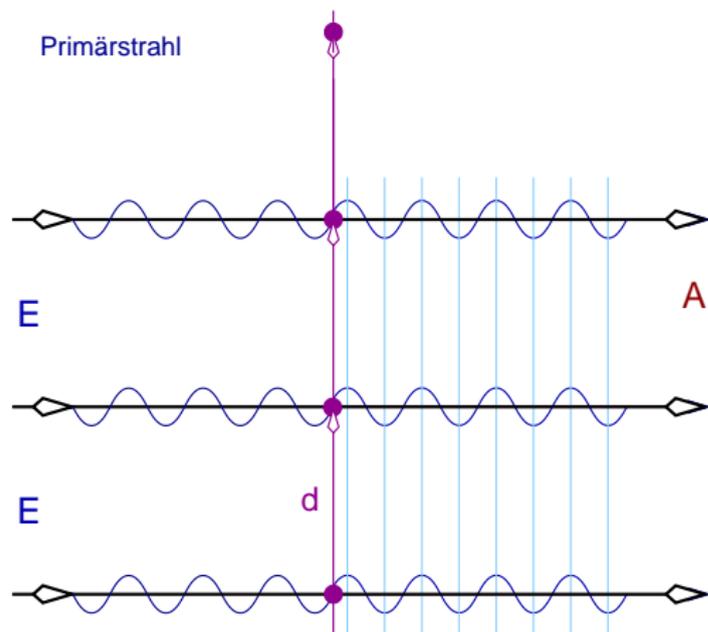
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Spezialfall: Senkrechter Einfall, LAUE-Gleichung*



* anstelle mechanischem Schiegebildchen

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

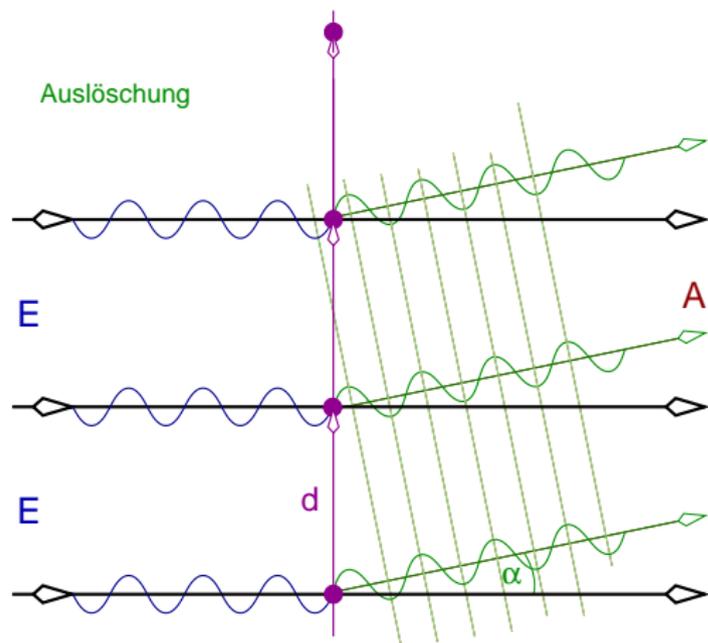
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Spezialfall: Senkrechter Einfall, LAUE-Gleichung*



* anstelle mechanischem Schiegebildchen

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

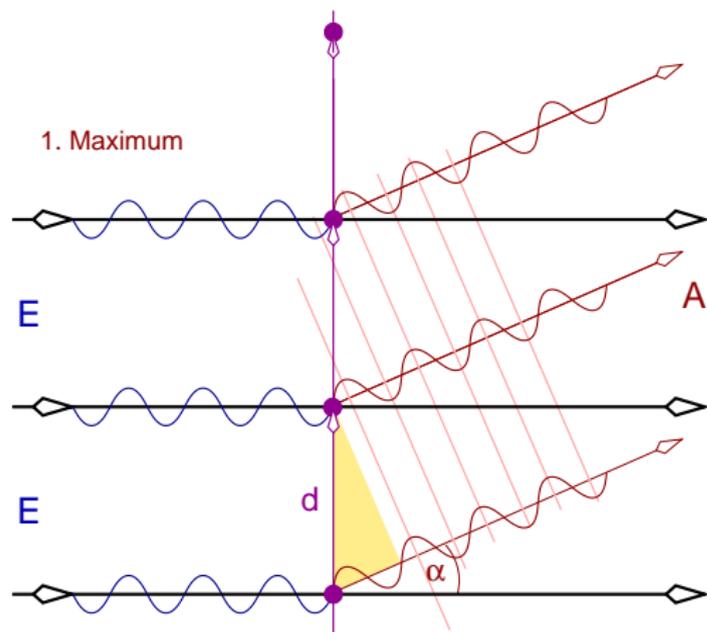
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Spezialfall: Senkrechter Einfall, LAUE-Gleichung*



* anstelle mechanischem Schiegebildchen

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

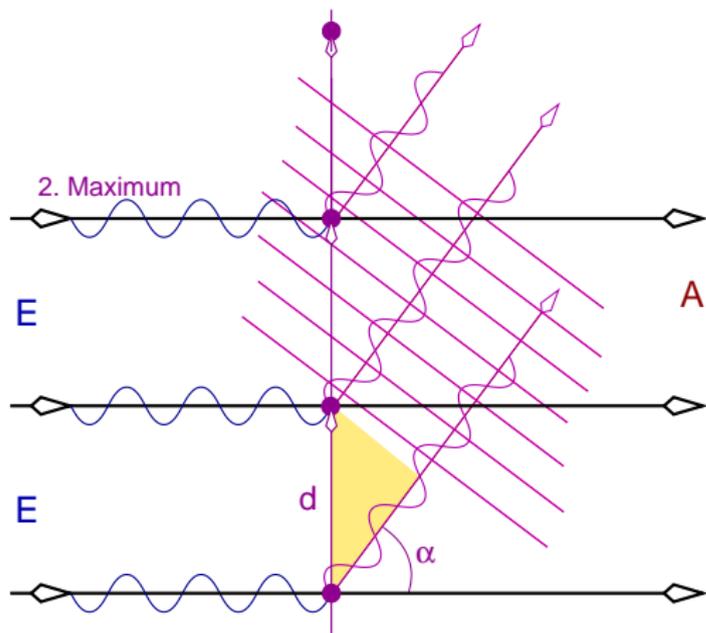
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Spezialfall: Senkrechter Einfall, LAUE-Gleichung*



* anstelle mechanischem Schiegebildchen

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

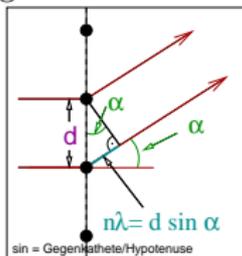
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

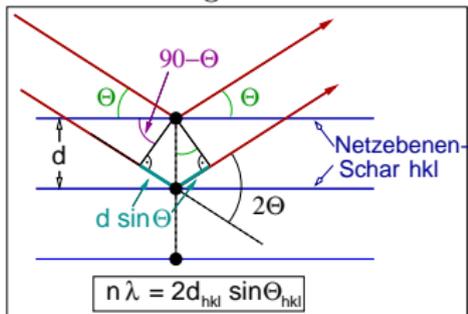
Zusammenfassung

Gleichungen von LAUE und BRAGG/BRAGG (Vektorfrei)

► LAUE-Gleichung



► BRAGG'sche Gleichung



WILLIAM LAWRENCE BRAGG (o)

WILLIAM HENRY BRAGG (u)

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

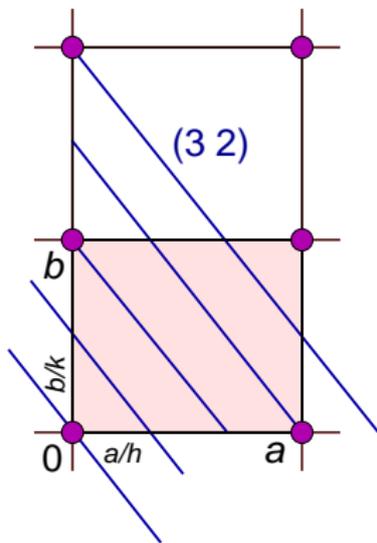
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Netzebenenabstände (in 2D, kartesisch)

- ▶ Netzebenenchar (hier (32)) schneiden die Achsen bei $\frac{a}{3}$ bzw. $\frac{b}{2}$



- ▶ Fläche des gelben Rechtecks bzw. des doppelten roten Dreiecks:

$$2 \cdot \left(\frac{1}{2} s d \right) = \frac{a}{h} \frac{b}{k} \quad \text{bzw. aufgelöst} \quad s^2 = \frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ für s^2 gilt aber nach PYTHAGORAS auch:

$$s^2 = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ Gleichsetzen (und damit Eliminieren von s):

$$s^2 = \frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2} = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ und Auflösen nach $\frac{1}{d^2}$:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2}$$

- ▶ bzw. entsprechend in 3D (kartesisch/orthorhombisch)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \sqrt{\left(\frac{h}{a} \right)^2 + \left(\frac{k}{b} \right)^2 + \left(\frac{l}{c} \right)^2}$$

- ▶ \mapsto Indizierung von Pulverdiffraktogrammen

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

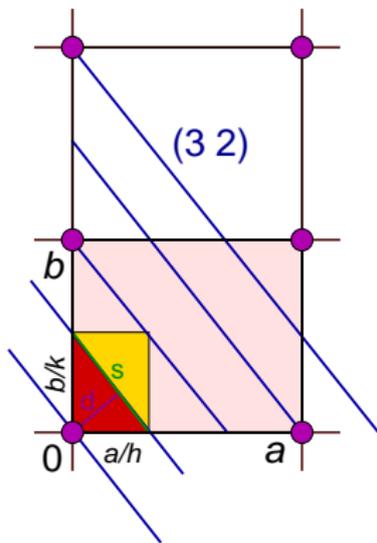
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Netzebenenabstände (in 2D, kartesisch)

- ▶ Netzebenenchar (hier (32)) schneiden die Achsen bei $\frac{a}{3}$ bzw. $\frac{b}{2}$



- ▶ Fläche des gelben Rechtecks bzw. des doppelten roten Dreiecks:

$$2 \cdot \left(\frac{1}{2} s d \right) = \frac{a}{h} \frac{b}{k} \quad \text{bzw. aufgelöst} \quad s^2 = \frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ für s^2 gilt aber nach PYTHAGORAS auch:

$$s^2 = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ Gleichsetzen (und damit Eliminieren von s):

$$s^2 = \frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2} = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ und Auflösen nach $\frac{1}{d^2}$:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2}$$

- ▶ bzw. entsprechend in 3D (kartesisch/orthorhombisch)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \sqrt{\left(\frac{h}{a} \right)^2 + \left(\frac{k}{b} \right)^2 + \left(\frac{l}{c} \right)^2}$$

- ▶ \mapsto Indizierung von Pulverdiffraktogrammen

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

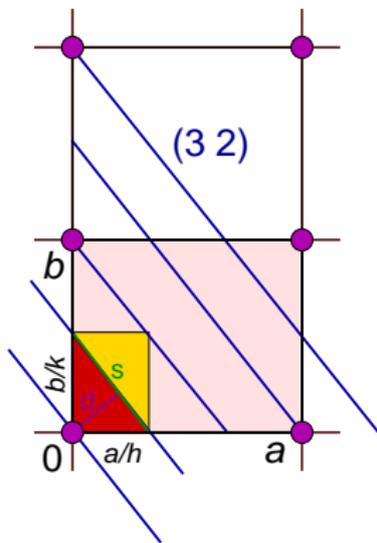
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Netzebenenabstände (in 2D, kartesisch)

- ▶ Netzebenenchar (hier (32)) schneiden die Achsen bei $\frac{a}{3}$ bzw. $\frac{b}{2}$



- ▶ Fläche des gelben Rechtecks bzw. des doppelten roten Dreiecks:

$$2 \cdot \left(\frac{1}{2} s d \right) = \frac{a}{h} \frac{b}{k} \quad \text{bzw. aufgelöst} \quad s^2 = \frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ für s^2 gilt aber nach PYTHAGORAS auch:

$$s^2 = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ Gleichsetzen (und damit Eliminieren von s):

$$s^2 = \frac{1}{d^2} \frac{a^2}{h^2} \frac{b^2}{k^2} = \frac{a^2}{h^2} + \frac{b^2}{k^2}$$

- ▶ und Auflösen nach $\frac{1}{d^2}$:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2}$$

- ▶ bzw. entsprechend in 3D (kartesisch/orthorhombisch)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \sqrt{\left(\frac{h}{a} \right)^2 + \left(\frac{k}{b} \right)^2 + \left(\frac{l}{c} \right)^2}$$

- ▶ \mapsto Indizierung von Pulverdiffraktogrammen

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Netzebenenabstände (in 3D)

▶ kubisch

$$\frac{1}{d_{hkl}} = \sqrt{\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}}$$

▶ ...

▶ monoklin

$$\frac{1}{d_{hkl}} = \sqrt{\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}}$$

▶ triklin

$$\frac{1}{d_{hkl}} =$$

$$\sqrt{\frac{\frac{h^2}{a^2} \sin^2 \alpha + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma + \frac{2kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + \frac{2hl}{ac} (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) + \frac{2hk}{ab} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)}{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}}$$

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

① Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

② LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung
MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

③ LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung
LAUE-Gleichung, Streuvektor

④ Reziprokes Gitter

⑤ BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

⑥ Zusammenfassung: Von BRAGG ... bis EWALD

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmethoden

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenabstände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

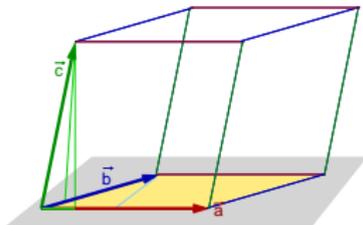
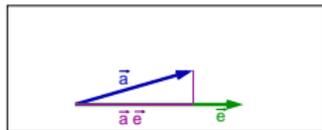
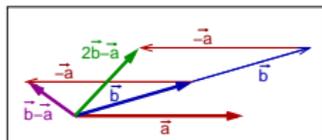
LAUE-Gleichung,
Streuvektor

Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

Vektoren



- ▶ Addition, Subtraktion, Multiplikation mit Skalaren

- ▶ Skalar- oder Punktprodukt:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}| |\vec{b}| \cos(\vec{a}, \vec{b})$$

$$\square \text{ d.h. } \vec{a} \perp \vec{b} \mapsto \vec{a} \cdot \vec{b} = 0$$

- \square Spezialfall: Projektion von \vec{a} auf beliebigen Einheitsvektor \vec{e} : $a_e = \vec{a} \cdot \vec{e}$

- ▶ Vektor- oder Kreuzprodukt: $\vec{v} = \vec{a} \times \vec{b}$

$$\square \text{ anschaulich } \vec{v} \perp \vec{a}, \vec{b}$$

$$\square \text{ d.h. f\u00fcr } \vec{a} \parallel \vec{b} \mapsto \vec{a} \times \vec{b} = \vec{0}$$

- \square Betrag des Vektorproduktes:

$$|\vec{a} \times \vec{b}| = |\vec{a}| |\vec{b}| \sin(\vec{a}, \vec{b}) \quad (\text{Fl\u00e4che des von } \vec{a} \text{ und } \vec{b} \text{ aufgespannten Parallelogramms})$$

- ▶ Spatprodukt: $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = V$

- \square anschaulich: Volumen des durch \vec{a} , \vec{b} und \vec{c} aufgespannten Parallelepipeds

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

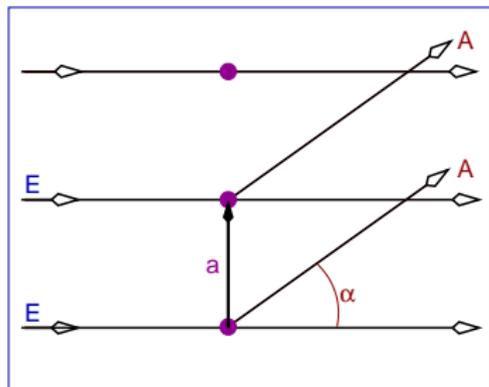
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Atomkette, senkrechter Einfall, Vektorschreibweise (LAUE-Gleichung)

- Atomkette mit Abstand $a = |\vec{a}|$



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

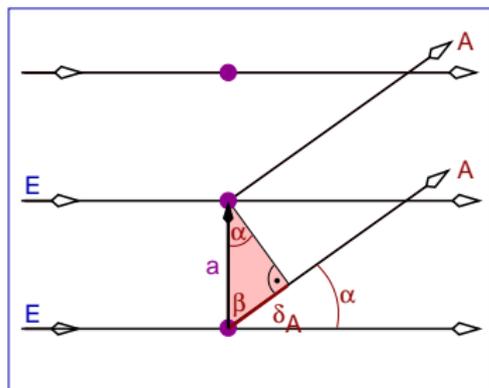
Atomkette, senkrechter Einfall, Vektorschreibweise (LAUE-Gleichung)

- ▶ Atomkette mit Abstand $a = |\vec{a}|$
- ▶ Wegdifferenz δ_A zwischen den Strahlen:

$$\delta_A = |\vec{a}| \sin \alpha_A$$

- ▶ oder als Funktion des Winkels β_A :

$$\delta_A = |\vec{a}| \cos \beta_A$$



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Atomkette, senkrechter Einfall, Vektorschreibweise (LAUE-Gleichung)

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmethoden

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenabstände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung,
Streuvektor

Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

- ▶ Atomkette mit Abstand $a = |\vec{a}|$
- ▶ Wegdifferenz δ_A zwischen den Strahlen:

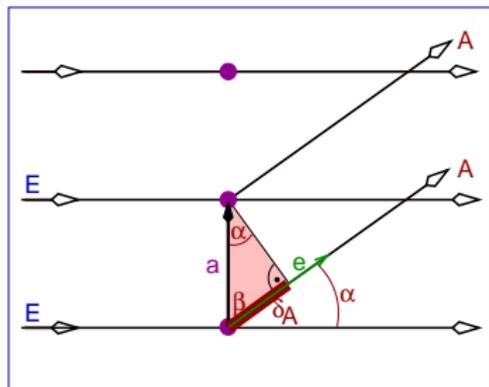
$$\delta_A = |\vec{a}| \sin \alpha_A$$

- ▶ oder als Funktion des Winkels β_A :

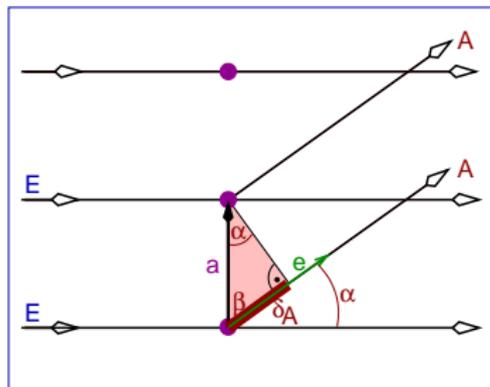
$$\delta_A = |\vec{a}| \cos \beta_A$$

- ▶ $\delta_A =$ Projektion von \vec{a} auf die Ausfallrichtung (Einheitsvektor \vec{e}_A)

$$\delta_A = |\vec{a}| \cos(\vec{a}, \vec{e}_A) = \vec{a} \vec{e}_A$$



Atomkette, senkrechter Einfall, Vektorschreibweise (LAUE-Gleichung)



- ▶ Atomkette mit Abstand $a = |\vec{a}|$
- ▶ Wegdifferenz δ_A zwischen den Strahlen:

$$\delta_A = |\vec{a}| \sin \alpha_A$$

- ▶ oder als Funktion des Winkels β_A :

$$\delta_A = |\vec{a}| \cos \beta_A$$

- ▶ $\delta_A =$ Projektion von \vec{a} auf die Ausfallrichtung (Einheitsvektor \vec{e}_A)

$$\delta_A = |\vec{a}| \cos(\vec{a}, \vec{e}_A) = \vec{a} \vec{e}_A$$

- ▶ positive Interferenz der Streuwellen
 \mapsto Wegdifferenz δ_A
(Phasenverschiebung) = λ (bzw.
einem Mehrfachen (n))

$$n\lambda = \delta_A = |\vec{a}| \cos(\vec{a}, \vec{e}_A)$$

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

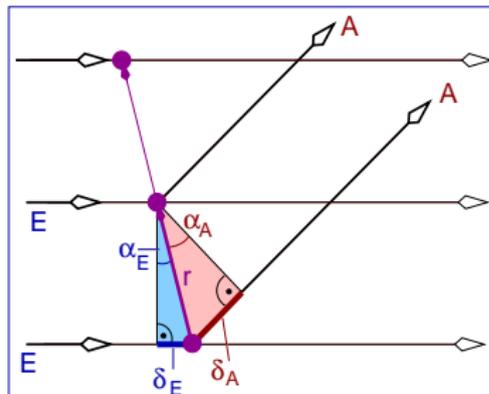
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Atomkette, schiefer Einfall (BRAGG'sche Gleichung)

- ▶ allgemeiner Gittervektor: \vec{r}
- ▶ Wegdifferenz Strahlen: $\delta_A + \delta_E$



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

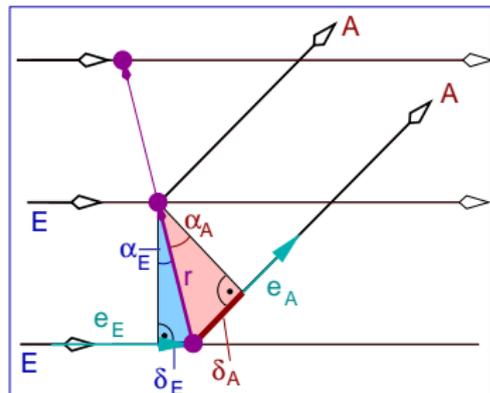
BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Atomkette, schiefer Einfall (BRAGG'sche Gleichung)

5. Prinzip der Beugung

- ▶ allgemeiner Gittervektor: \vec{r}
- ▶ Wegdifferenz Strahlen: $\delta_A + \delta_E$
- ▶ für beide Dreiecke gilt analog dem senkrechten Einfall:



$$\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A)$$

$$\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E)$$

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

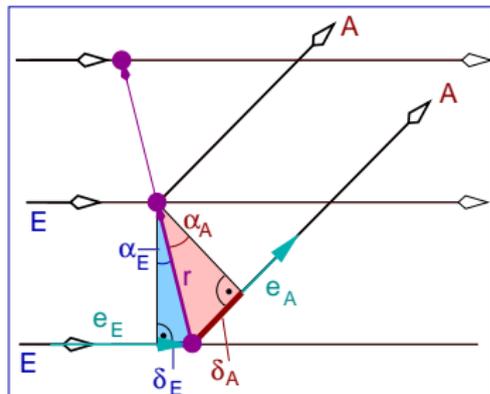
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Atomkette, schiefer Einfall (BRAGG'sche Gleichung)



- ▶ allgemeiner Gittervektor: \vec{r}
- ▶ Wegdifferenz Strahlen: $\delta_A + \delta_E$
- ▶ für beide Dreiecke gilt analog dem senkrechten Einfall:

$$\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A)$$

$$\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E)$$

- ▶ bzw. als Skalarprodukte mit den Einheitsvektoren \vec{e}_A bzw. \vec{e}_E formuliert
(Projektion von \vec{r} auf diese Richtungen)

$$\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A) = \vec{r} \vec{e}_A$$

$$\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E) = -\vec{r} \vec{e}_E$$

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

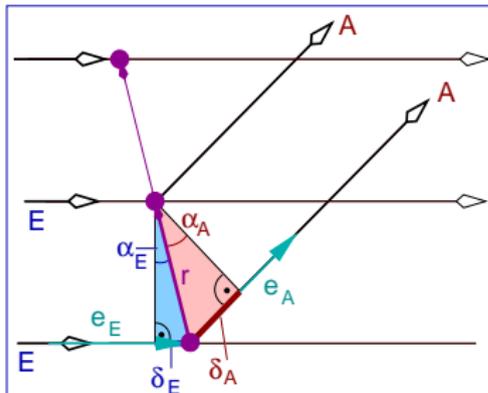
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Atomkette, schiefer Einfall (BRAGG'sche Gleichung)



- ▶ allgemeiner Gittervektor: \vec{r}
- ▶ Wegdifferenz Strahlen: $\delta_A + \delta_E$
- ▶ für beide Dreiecke gilt analog dem senkrechten Einfall:

$$\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A)$$

$$\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E)$$

- ▶ bzw. als Skalarprodukte mit den Einheitsvektoren \vec{e}_A bzw. \vec{e}_E formuliert
(Projektion von \vec{r} auf diese Richtungen)

$$\delta_A = |\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_A) = \vec{r} \vec{e}_A$$

$$\delta_E = -|\vec{r}| \cos(\vec{r}, \vec{e}_E) = -\vec{r} \vec{e}_E$$

- ▶ d.h. für die Summe (gesamte Phasenverschiebung)

$$\delta_A + \delta_E = \vec{r} \vec{e}_A - \vec{r} \vec{e}_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

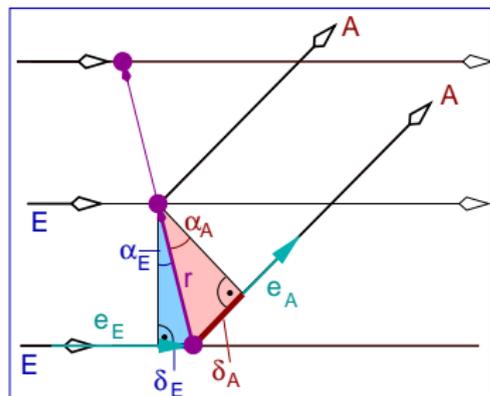
Zusammenfassung

Streuvektor und EWALD-Konstruktion

5. Prinzip der Beugung

- ▶ positive Interferenz bei einem Gangunterschied von λ :

$$\lambda = \delta_A + \delta_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$



Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Streuvektor und EWALD-Konstruktion

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

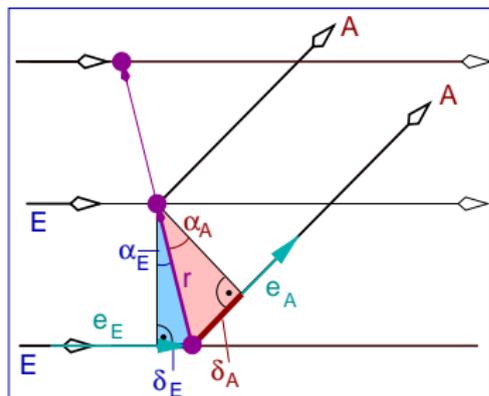
Zusammenfassung

- ▶ positive Interferenz bei einem Gangunterschied von λ :

$$\lambda = \delta_A + \delta_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$

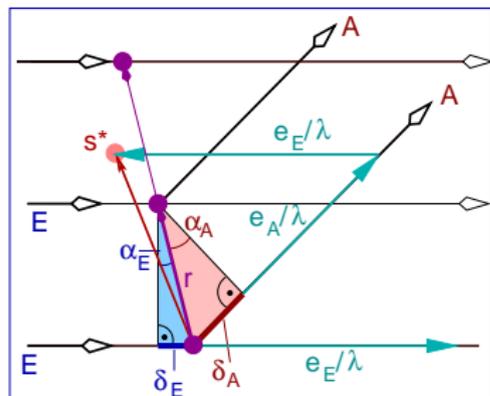
- ▶ Trick: auf λ 'normierte' Einheitsvektoren:

$$1 = \vec{r} \underbrace{\left(\frac{\vec{e}_A}{\lambda} - \frac{\vec{e}_E}{\lambda} \right)}_{\vec{s}^*}$$



Streuvektor und EWALD-Konstruktion

5. Prinzip der Beugung



- ▶ positive Interferenz bei einem Gangunterschied von λ :

$$\lambda = \delta_A + \delta_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$

- ▶ Trick: auf λ 'normierte' Einheitsvektoren:

$$1 = \vec{r} \underbrace{\left(\frac{\vec{e}_A}{\lambda} - \frac{\vec{e}_E}{\lambda} \right)}_{\vec{s}^*}$$

- ▶ bzw. für den Streuvektor \vec{s}^* :

$$\vec{s}^* = \frac{1}{\vec{r}}$$

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

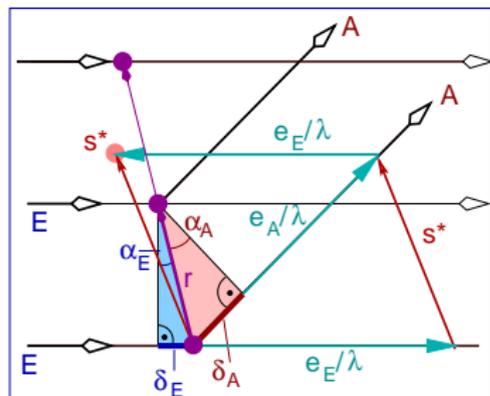
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Streuvektor und EWALD-Konstruktion

5. Prinzip der Beugung



- ▶ positive Interferenz bei einem Gangunterschied von λ :

$$\lambda = \delta_A + \delta_E = \vec{r}(\vec{e}_A - \vec{e}_E)$$

- ▶ Trick: auf λ 'normierte' Einheitsvektoren:

$$1 = \vec{r} \left(\underbrace{\frac{\vec{e}_A}{\lambda} - \frac{\vec{e}_E}{\lambda}}_{\vec{s}^*} \right)$$

- ▶ bzw. für den Streuvektor \vec{s}^* :

$$\vec{s}^* = \frac{1}{\vec{r}}$$

- ▶ EWALD-Konstruktion (Praxis)
 - ▶ Streuvektor um $1/\lambda$ vom Strahl weg verschieben
 - ▶ Richtung 0 \leftrightarrow Spitze Streuvektor = Ausfallrichtung des Strahls

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

① Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

② LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung
MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

③ LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung
LAUE-Gleichung, Streuvektor

④ Reziprokes Gitter

⑤ BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

⑥ Zusammenfassung: Von BRAGG ... bis EWALD

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmethoden

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenabstände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung,
Streuvektor

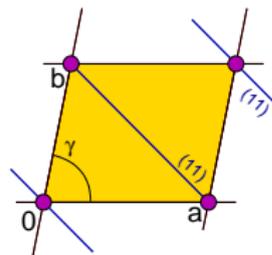
Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

reales \leftrightarrow reziprokes Gitter

- ▶ reales Gitter: Basisvektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

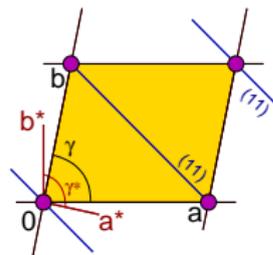
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

reales \leftrightarrow reziprokes Gitter

- ▶ **reales Gitter:** Basisvektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- ▶ **reziprokes Gitter:** Basisvektoren \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^*
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

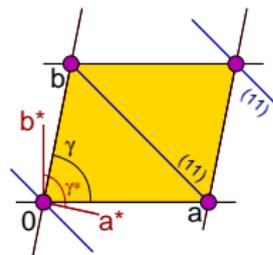
Zusammenfassung

reales \leftrightarrow reziprokes Gitter

- ▶ **reales Gitter:** Basisvektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- ▶ **reziprokes Gitter:** Basisvektoren \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^*
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$
- ▶ **Bezug zwischen beiden Gittern** (! Definition !)

$$\vec{r}^* = \frac{1}{\vec{r}}$$

- ▶ erfüllt wenn:
 - ① $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0$ usw. und $\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1$ usw.
 - ② $h, k, l =$ MILLER-Indizes der reale Netzebenen(scharen)



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

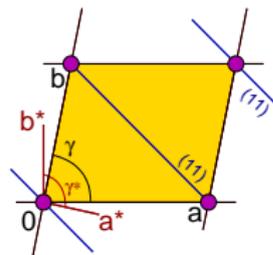
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

reales \leftrightarrow reziprokes Gitter

- ▶ **reales Gitter:** Basisvektoren $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- ▶ **reziprokes Gitter:** Basisvektoren $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$
- ▶ **Bezug zwischen beiden Gittern (! Definition !)**
$$\vec{r}^* = \frac{1}{\vec{r}}$$
- ▶ erfüllt wenn:
 - ① $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0$ usw. und $\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1$ usw.
 - ② $h, k, l =$ MILLER-Indizes der reale Netzebenen(scharen)
- ▶ da $\vec{r} = \frac{1}{s^*} = \frac{1}{r^*} \mapsto$ Reflex, wenn $\vec{r}^* = \vec{s}^*$



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

reales \leftrightarrow reziprokes Gitter

- ▶ **reales Gitter:** Basisvektoren $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- ▶ **reziprokes Gitter:** Basisvektoren $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$
- ▶ Gittervektoren: $\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$
- ▶ **Bezug zwischen beiden Gittern** (! Definition !)

$$\vec{r}^* = \frac{1}{\vec{r}}$$

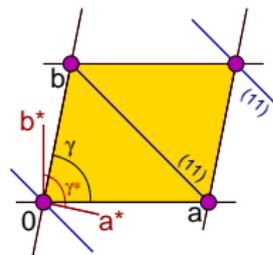
- ▶ erfüllt wenn:

- ① $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0$ usw. und $\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 1$ usw.
- ② $h, k, l =$ MILLER-Indizes der reale Netzebenen(scharen)

- ▶ da $\vec{r} = \frac{1}{s^*} = \frac{1}{r^*} \mapsto$ Reflex, wenn $\vec{r}^* = \vec{s}^*$

- ▶ weitere Beziehungen:

- ▶ mit $\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{b} \times \vec{c} \cdot \vec{a}}$
- ▶ und da $(\vec{b} \times \vec{c}) \cdot \vec{a} = V$ (Spatprodukt)
- ▶ folgt: $\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V}$
- ▶ d.h. $\vec{a}^* \perp b, c$ -Fläche usw. (Def. Vektorprodukt)



5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

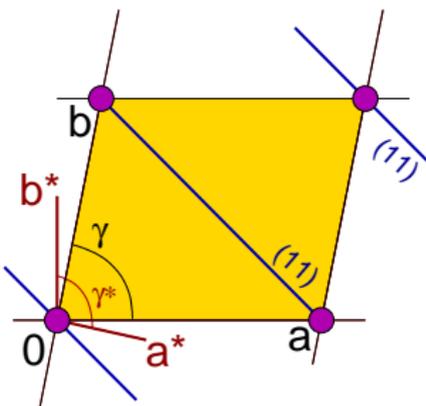
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

2D-Beispiel, schiefwinklig



► reziproke Basis: $\vec{a}^* \perp \vec{b}$, $\vec{b}^* \perp \vec{a}$

► $\gamma^* = 180 - \gamma$

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

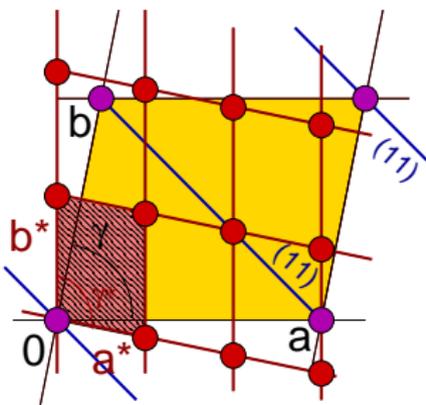
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

2D-Beispiel, schiefwinklig



- ▶ reziproke Basis: $\vec{a}^* \perp \vec{b}$, $\vec{b}^* \perp \vec{a}$
- ▶ $\gamma^* = 180 - \gamma$
- ▶ reziprokes Gitter in dieser Basis

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

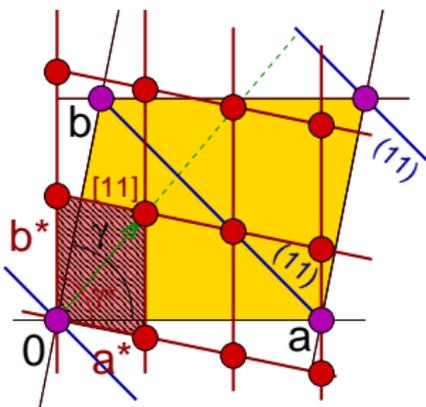
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

2D-Beispiel, schiefwinklig



- ▶ reziproke Basis: $\vec{a}^* \perp \vec{b}$, $\vec{b}^* \perp \vec{a}$
- ▶ $\gamma^* = 180 - \gamma$
- ▶ reziprokes Gitter in dieser Basis
- ▶ und Gittervektoren (z.B. $[h, k] = [1, 1]$).

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

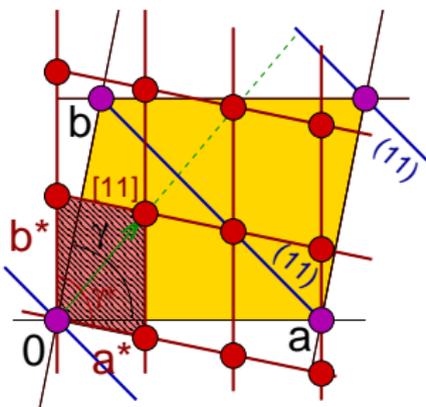
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

2D-Beispiel, schiefwinklig



- ▶ reziproke Basis: $\vec{a}^* \perp \vec{b}$, $\vec{b}^* \perp \vec{a}$
- ▶ $\gamma^* = 180 - \gamma$
- ▶ reziprokes Gitter in dieser Basis
- ▶ und Gittervektoren (z.B. $[h, k] = [1, 1]$).
- ▶ anschaulich: reziproker Gittervektor $[h, k] \perp$ Netzebenenschar (h, k) im realen Raum.
- ▶ Länge: $|\vec{r}^*| = \frac{1}{d}$

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

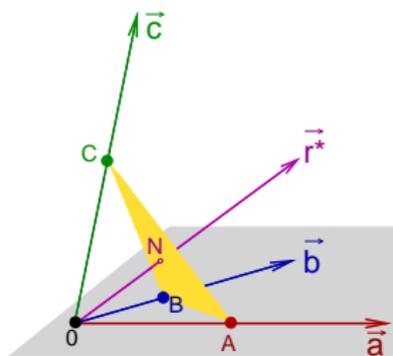
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Reziprokes Gitter: Beweise I



Beweis, dass $r^* \perp$ Ebene ABC

- ▶ Definition MILLER-Indizes:

$$h = \frac{\vec{a}}{OA} \text{ bzw. } \overrightarrow{OA} = \frac{\vec{a}}{h} \text{ usw.}$$

- ▶ damit gilt für Vektoren auf der Ebene ABC

$$\overrightarrow{BA} = \frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h} \text{ bzw. } \overrightarrow{CA} = \frac{\vec{c}}{l} - \frac{\vec{a}}{h}$$

- ▶ diese Vektoren sind \perp zu r^* , wenn die Skalarprodukte verschwinden, z.B.

$$0 = r^* \cdot \overrightarrow{BA} = r^* \cdot \left(\frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h} \right)$$

- ▶ mit der Definition des reziproken Gittervektors

$$0 = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot \left(\frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{a}}{h} \right)$$

- ▶ und da $\vec{a}^* \cdot \vec{b} = 0$ usw.

$$0 = -(h\vec{a}^*) \cdot \frac{\vec{a}}{h} + (k\vec{b}^*) \cdot \frac{\vec{b}}{k}$$

$$0 = -\vec{a}^* \cdot \vec{a} + \vec{b}^* \cdot \vec{b} = -1 + 1 \text{ (q.e.d.)}$$

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

Reziprokes Gitter: Beweis II

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

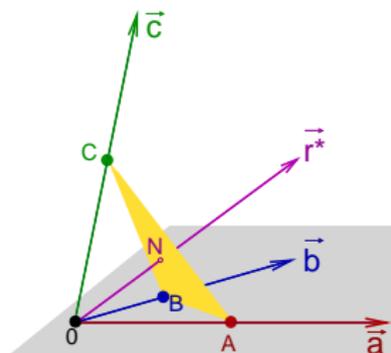
Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung



Beweis, dass $|\vec{r}^*| = \frac{1}{d_H}$ ($H = hkl$)

- Die Projektion von \vec{OA} in Richtung \vec{r}^* soll damit dem Abstand d benachbarter Netzebenenscharen H entsprechen:

$$d_H = \frac{\vec{a}}{h} \cdot \frac{\vec{r}^*}{|\vec{r}^*|}$$

- mit der Definition von \vec{r}^*

$$\frac{1}{d_H} = \frac{h}{\vec{a}} \cdot \frac{|\vec{r}^*|}{(h\vec{a}^* + kb^* + lc^*)}$$

- und da alle gemischten Produkte $\vec{a} \cdot \vec{b}^*$ verschwinden und $\vec{a} \cdot \vec{a}^* = 1$ ist folgt:

$$\frac{1}{d_H} = \frac{|\vec{r}^*|}{(\vec{a} \cdot \vec{a}^*)} = |\vec{r}^*| \text{ (q.e.d.)}$$

Zusammenfassung reziprokes Gitter

- ▶ Jeder Netzebenenschar im Realraum (MILLER-Indizes h,k,l) entspricht ein Gitterpunkt im reziproken Raum.
- ▶ Da für positive Interferenz der Streuvektor mit einem reziproken Gittervektor zusammenfallen muss, gibt es nur ganzzahlige Indizes h,k,l .
- ▶ Mit der EWALD-Konstruktion des Streuvektors = reziproken Gittervektors kann der Ort der **Reflexe** (?) um den Kristall herum praktisch sehr einfach ermittelt werden.
- ▶ Die Motivinformation (Phasenverschiebungen innerhalb der Elementarzelle des realen Gitters) ist in den Intensitäten enthalten.

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

① Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

② LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung
MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

③ LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung
LAUE-Gleichung, Streuvektor

④ Reziprokes Gitter

⑤ BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

⑥ Zusammenfassung: Von BRAGG ... bis EWALD

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmethoden

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenabstände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

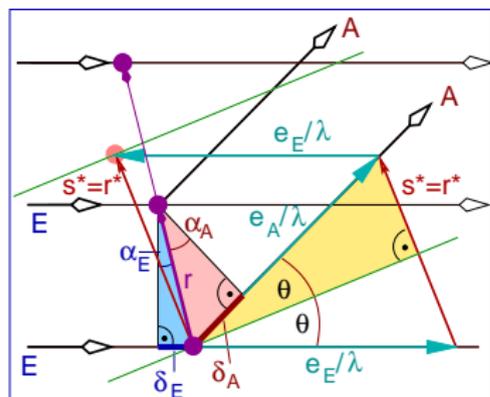
LAUE-Gleichung,
Streuvektor

Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

θ , Streuvektor und BRAGG'sche Gleichung



- ▶ 2θ = Winkel zwischen ein- und ausfallendem Strahl
- ▶ (virtuelle) grüne Ebene \perp zu \vec{r}^*
- ▶ halbiert den um $1/\lambda$ verschobenen Streuvektor \vec{s}^*

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

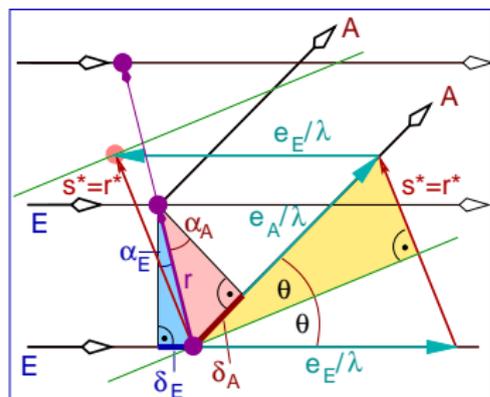
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung

θ , Streuvektor und BRAGG'sche Gleichung

5. Prinzip der Beugung



- ▶ $2\theta =$ Winkel zwischen ein- und ausfallendem Strahl
- ▶ (virtuelle) grüne Ebene \perp zu r^*
- ▶ halbiert den um $1/\lambda$ verschobenen Streuvektor s^*
- ▶ im gelben rechtwinkligen Dreieck:

$$\sin \theta = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypotenuse}} = \frac{|r^*|/2}{1/\lambda}$$

$$2 \sin \theta = |r^*| \lambda$$

$$\lambda = 2 \frac{1}{|r^*|} \sin \theta = 2d \sin \theta$$

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

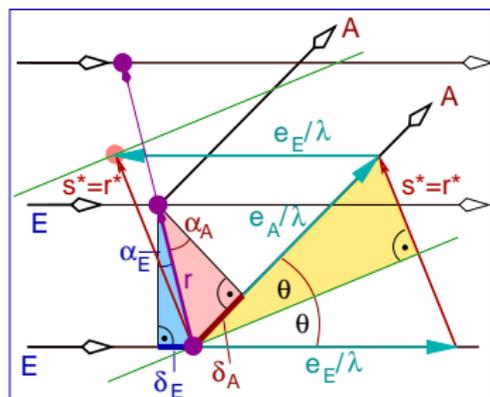
Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung

θ , Streuvektor und BRAGG'sche Gleichung

5. Prinzip der Beugung



- ▶ 2θ = Winkel zwischen ein- und ausfallendem Strahl
- ▶ (virtuelle) grüne Ebene \perp zu r^*
- ▶ halbiert den um $1/\lambda$ verschobenen Streuvektor s^*
- ▶ im gelben rechtwinkligen Dreieck:

$$\sin \theta = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypotenuse}} = \frac{|r^*|/2}{1/\lambda}$$

$$2 \sin \theta = |r^*| \lambda$$

$$\lambda = 2 \frac{1}{|r^*|} \sin \theta = 2d \sin \theta$$

- ▶ grüne Ebene = 'Spiegel' für den Strahlengang
- ▶ Beugung, als Reflexion 'verkauft'!

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung

① Grundlagen

Prinzip und Analogie zur Optik
Einteilung der Beugungsmethoden

② LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung
MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

③ LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektorrechnung
LAUE-Gleichung, Streuvektor

④ Reziprokes Gitter

⑤ BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

⑥ Zusammenfassung: Von BRAGG ... bis EWALD

Grundlagen

Prinzip, Analogie
zur Optik

Einteilung der
Beugungsmethoden

LAUE- und
BRAGG'sche-
Gleichung
(Vektorfrei)

Beugung am
Gitter,
LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes,
Netzebenenabstände

LAUE-
Gleichung
(Vektorform)

Basics Vektoren

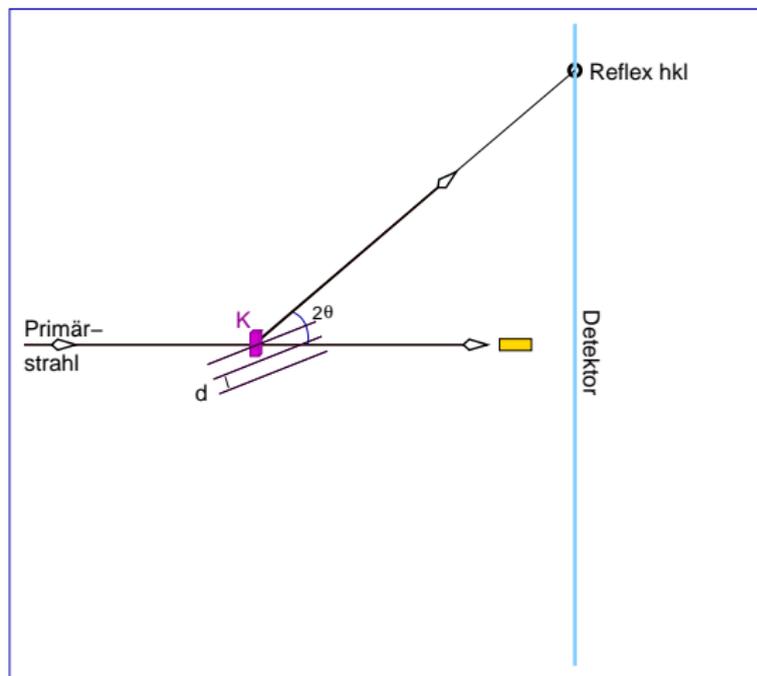
LAUE-Gleichung,
Streuvektor

Reziprokes
Gitter

BRAGG'sche
Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammen-
fassung

Von BRAGG ...



▶ BRAGG-Bedingung für Reflex hkl (\vec{h})

▶ $\lambda = 2d_{\vec{h}} \sin \theta_{\vec{h}}$

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche-Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

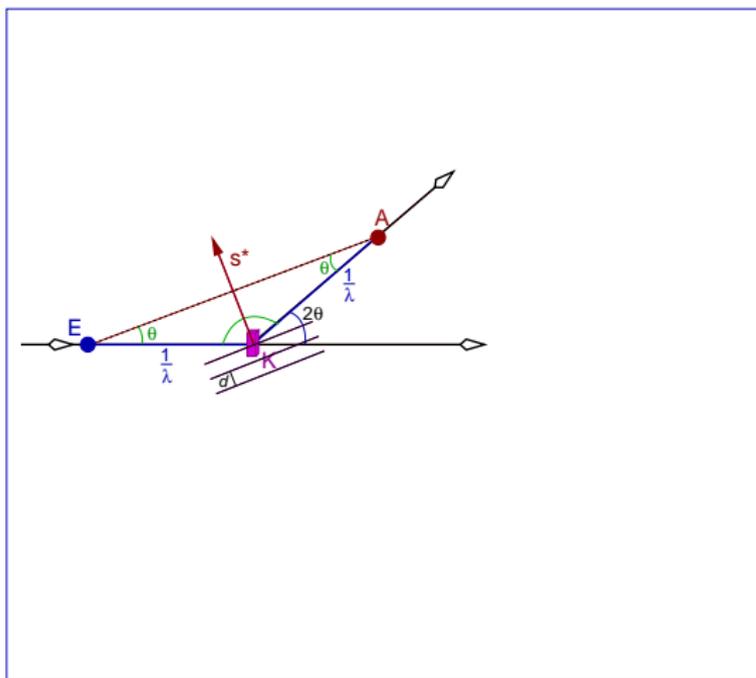
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung

... über den Streuvektor ...



- ▶ mit reziprokem Gittervektor: $\frac{1}{d_{\vec{h}}} = \frac{2}{\lambda} \sin \theta_{\vec{h}} = |\vec{r}_{\vec{h}}^*|$
- ▶ 'Reflektions'bedingung: Streuvektor $\vec{s}_{\vec{h}}^*$ ($|\vec{d}_{\vec{h}}|$)=reziproker Gittervektor $\vec{r}_{\vec{h}}^*$
- ▶ \vec{s}^* winkelhalbierend zwischen ein- und aus-fallendem Strahl

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

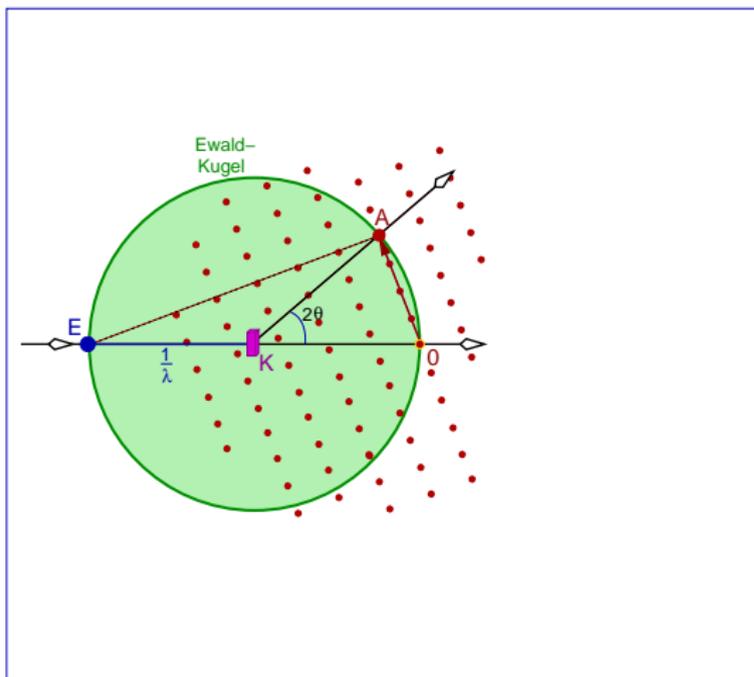
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ? Reflexe ?

Zusammenfassung

EWALD-Konstruktion



- ▶ 'Reflektions'bedingung erfüllt für alle $r_{\vec{h}}^*$,
- ▶ deren Endpunkte auf einer Kugel mit Radius = $\frac{1}{\lambda}$
- ▶ um den Kristall liegen \mapsto EWALD-Kugel



Paul Peter EWALD
(1888-1985)

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

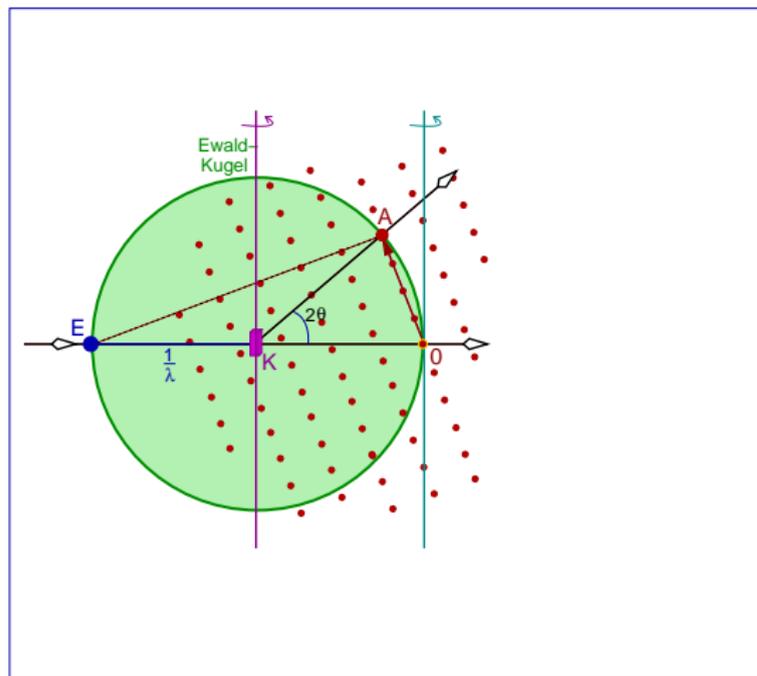
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

EWALD-Konstruktion



- ▶ Drehung des Kristalls \leftrightarrow Drehung des reziproken Gitters
- ▶ Reflexe wandern durch die 'Reflektions'bedingung \Rightarrow

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

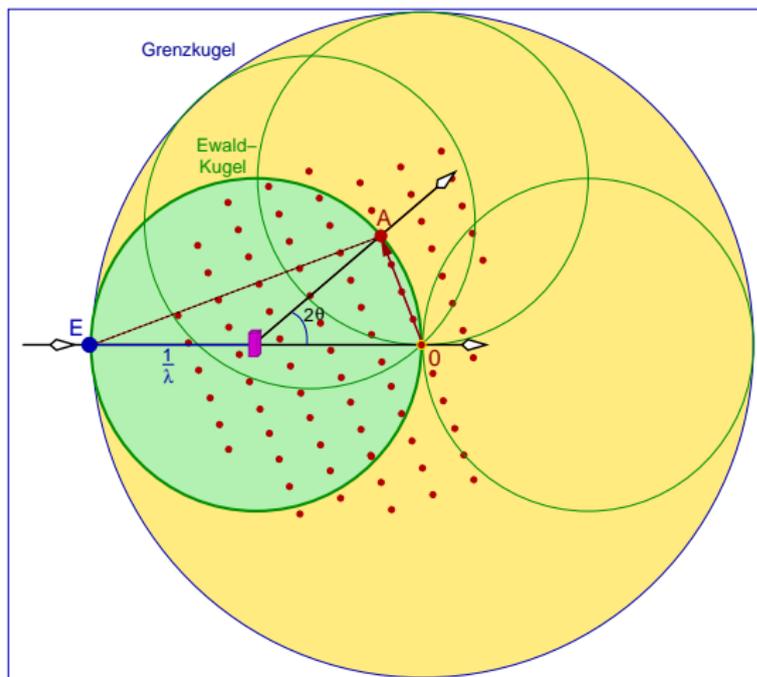
LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

EWALD-Konstruktion: Grenzkugel



- ▶ Grenzkugel: durch Kristalldrehungen insgesamt erfassbarer Bereich des reziproken Gitters
- ▶ Radius: $\frac{2}{\lambda}$

5. Prinzip der Beugung

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung

▶ Voraussetzung für Einkristall-Beugungsuntersuchungen

- ▶ monochromatische Strahlung mit $\lambda \approx$ Atomabstand
- ▶ Primärstrahl mit fester Einfallrichtung
- ▶ Einkristall
- ▶ ortsempfindlicher Detektor

▶ EWALD-Konstruktion (Orte der Reflexe)

- ▶ EWALD-Kugel: Kugel mit Radius $1/\lambda$ um Kristall (real \mapsto reziprok)
- ▶ 'Reflektions'bedingung: Streuvektor \vec{s}^* fällt mit reziprotem Gittervektor \vec{r}^* zusammen
- ▶ wenn \vec{r}^* auf EWALD-Kugel $\mapsto \vec{s}^* \mapsto$ BRAGG-Reflex
- ▶ gebeugter Strahl vom Kristall zur Spitze des reziproken Gittervektors = Streuvektors

▶ Konsequenzen für Experimente

- ▶ Kristalldrehungen um mindestens 2 Achsen
- ▶ Detektoren mit möglichst großer Fläche
- ▶ Radius der Grenzkugel: $\frac{2}{\lambda}$
- ▶ Reflex-Volumina (Mosaik-Struktur) \mapsto 'Scans' für integrale Intensitäten

Grundlagen

Prinzip, Analogie zur Optik

Einteilung der Beugungsmethoden

LAUE- und BRAGG'sche Gleichung (Vektorfrei)

Beugung am Gitter, LAUE-Gleichung

MILLER-Indizes, Netzebenenabstände

LAUE-Gleichung (Vektorform)

Basics Vektoren

LAUE-Gleichung, Streuvektor

Reziprokes Gitter

BRAGG'sche Gleichung ?
Reflexe ?

Zusammenfassung