

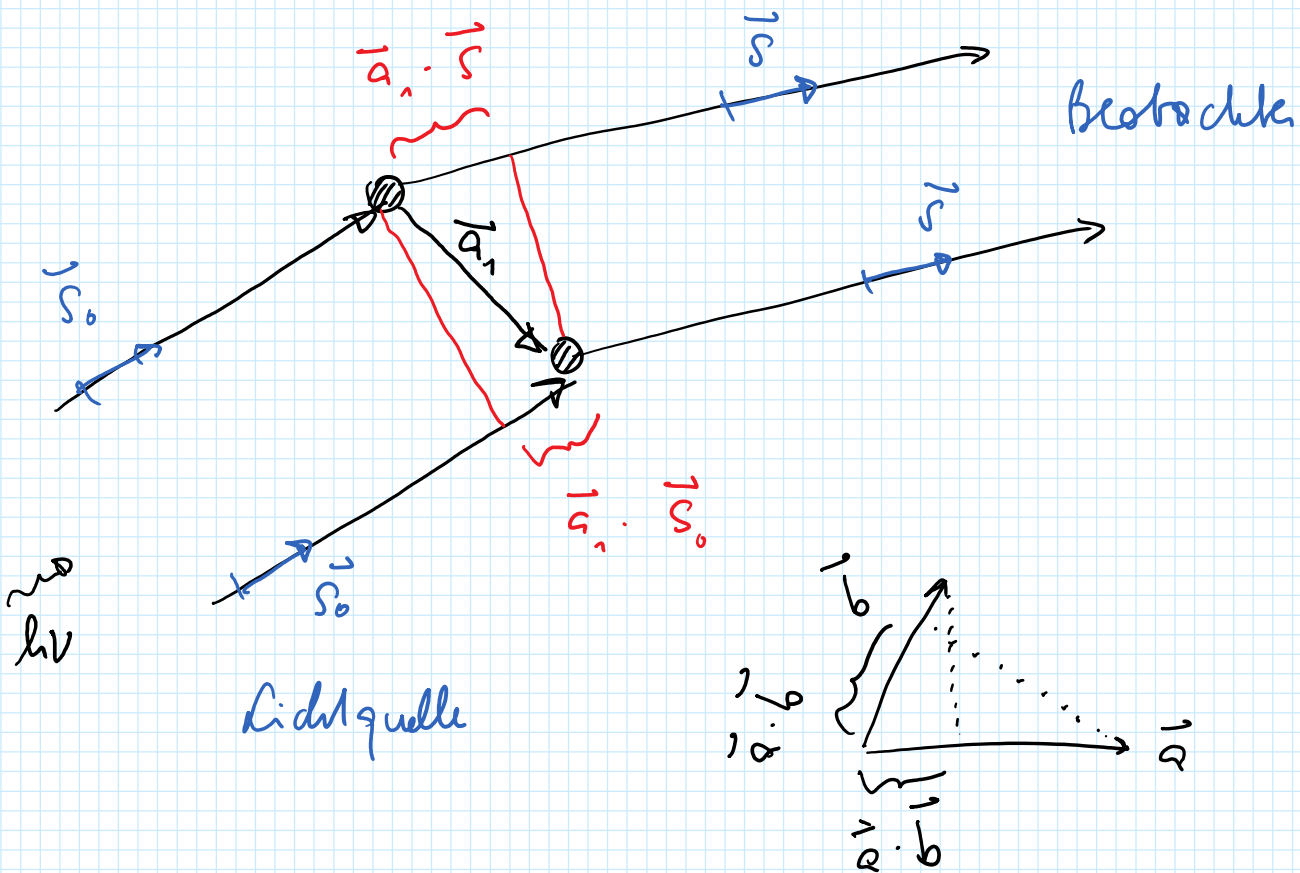
Kame Gleichungen

- monochromatische X-ray

Beobachter + Quelle weit weg
(parallele Strahlbündel)

- um elastische Streuung ($E = \text{const}$)

- $\sigma = n\lambda$ (konstr. Interferenz)



konstr. Interferenz : $a_1 \cdot \sin \theta_1 - a_1 \cdot \sin \theta_0 = n\lambda$

$$\vec{a}_1 (\vec{s} - \vec{s}_0) = u_1 \lambda$$

$$\vec{a}_2 (\vec{s} - \vec{s}_0) = u_2 \lambda$$

$$\vec{a}_3 (\vec{s} - \vec{s}_0) = u_3 \lambda$$

$$\vec{s} - \vec{s}_0 = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \vec{G}$$

Beweis: Multipl. mit \vec{a}_1

$$\vec{a}_1 (\vec{s} - \vec{s}_0) = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot \vec{G} \cdot \vec{a}_1$$

$$\begin{aligned} \vec{G} \cdot \vec{a}_1 &= (u_1 \vec{a}_1^* + u_2 \vec{a}_2^* + u_3 \vec{a}_3^*) \cdot \vec{a}_1 \\ &= u_1 \underbrace{\vec{a}_1^* \cdot \vec{a}_1}_{2\pi} \end{aligned}$$

$$\vec{G} \cdot \vec{a}_1 = u_1 \cdot 2\pi$$

$$\vec{a}_1 (\vec{s} - \vec{s}_0) = \frac{\lambda}{2\pi} \cdot u_1 \cdot 2\pi$$

$$\vec{a}_1 (\vec{s} - \vec{s}_0) = u_1 \cdot \lambda$$

Wellenvektor $\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \vec{s}$ $|\vec{k}_0| = |\vec{k}|$

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \vec{s} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

(Impuls)

$$\vec{h} = \vec{p} = \frac{m \vec{v}}{\lambda} \Rightarrow \vec{h} \parallel \vec{v}$$

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} = \frac{m\vec{v}}{\hbar} \Rightarrow \vec{k} \parallel \vec{v}$$

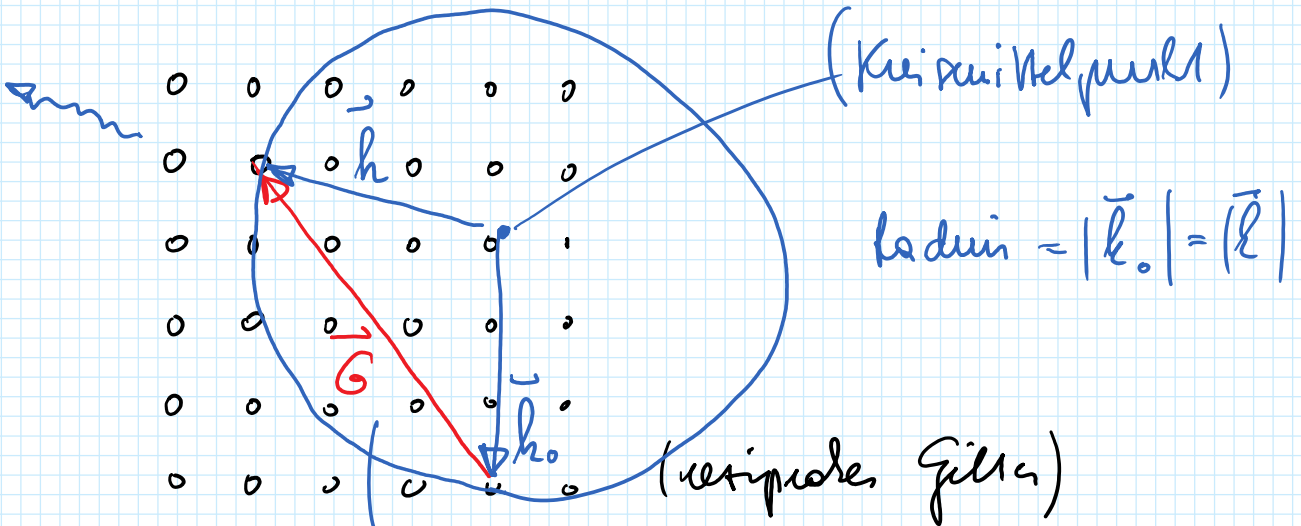
$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}$$

klarisch: $|\vec{k}_0| = |\vec{k}|$

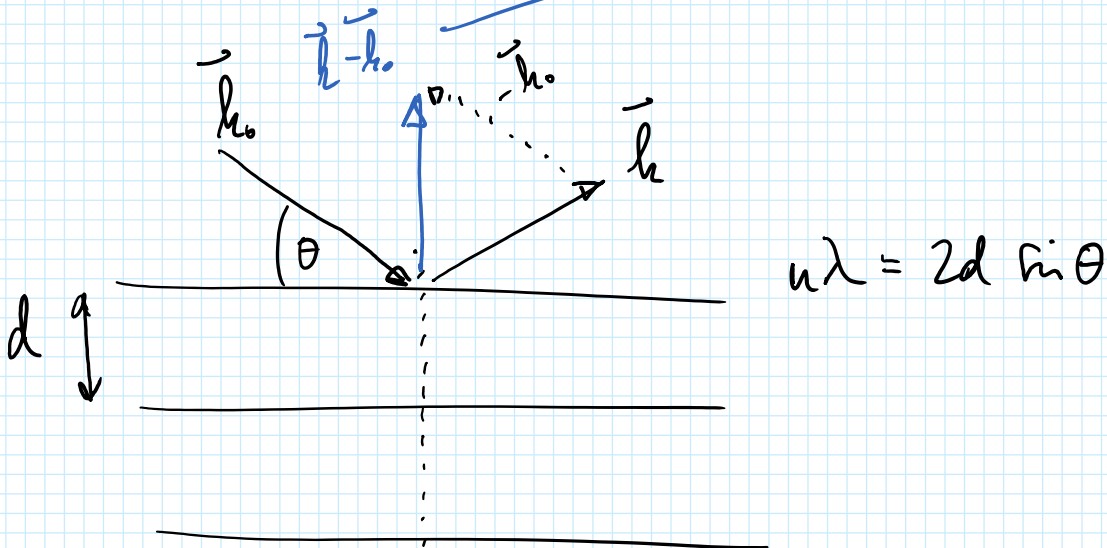
$$\vec{k}_0 \parallel \vec{S}_0$$

$$\vec{k} \parallel \vec{S}$$

$$h\nu_0$$



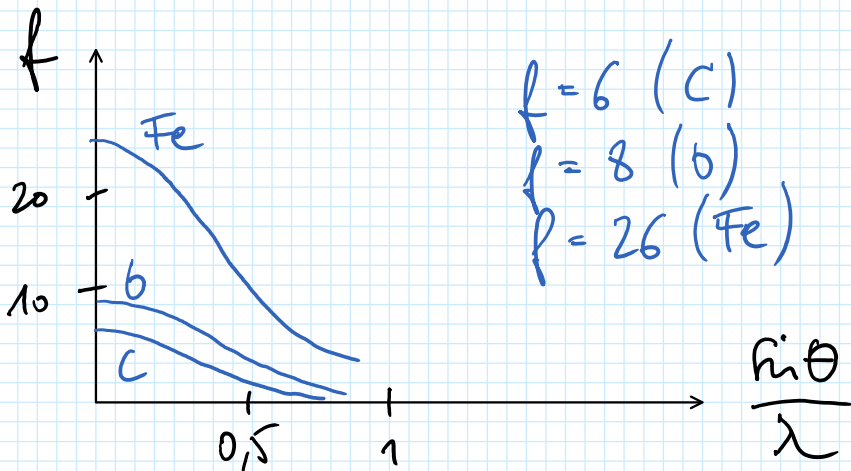
$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G}$$



1.4 Gitterfaktor und Strukturfaktor

1.4 Streufaktor und Strukturfaktor

Streufaktor f



Strukturfaktor F_{hkl} der Elementarzelle

$$F_{hkl} = \sum_j f_j e^{i\phi_{hkl}(j)}$$

(Atom j)

$$\phi_{hkl}(j) = 2\pi (hx_j + ky_j + lz_j)$$

$\begin{pmatrix} x_j \\ y_j \\ z_j \end{pmatrix}$ Koordinaten des j Atoms

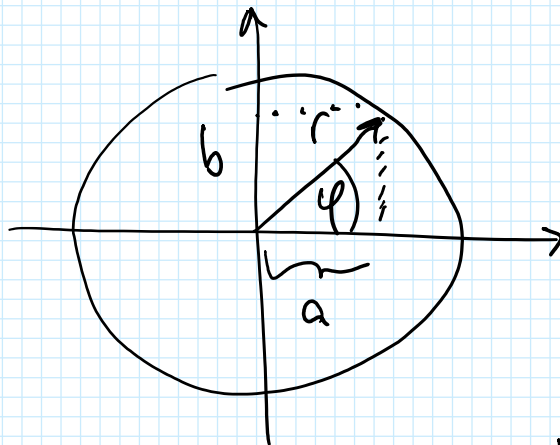
F_{hkl} = komplexe Zahl

$$z = a + ib$$

$$a = r \cdot \cos \varphi$$

$$a = r \cdot \cos \varphi$$

$$b = r \cdot \sin \varphi$$



$$z = r \cdot e^{i\varphi}$$

Intensität des (hkl) Reflexes: I_{hkl}

$$I_{hkl} \sim |F_{hkl}|^2$$

Betragsquadrat

$$|z|^2 = z^* \cdot z$$

$$(a - ib) \cdot (a + ib)$$

$$= a^2 + b^2 = r^2$$

Elektronendichteverteilung $\rho(\vec{r})$

$$-2\pi i (h_x + h_y + h_z)$$

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{hkl} F_{hkl} \cdot e^{i\vec{r} \cdot \vec{h}}$$

$\sqrt{\dots}$ $\sqrt{\overline{hkl}}$ $n \times n$

(ρ an der Stelle $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$)

"Fourier-Synthese der Elektronendichte"

(Manifestation in Eq. vorher gezeigt)

z.B. 10^4 Fourierkoeffizienten bei Proteinen

1.5 Methode der Röntgenbeugung

① Kaue Verfahren (1912)

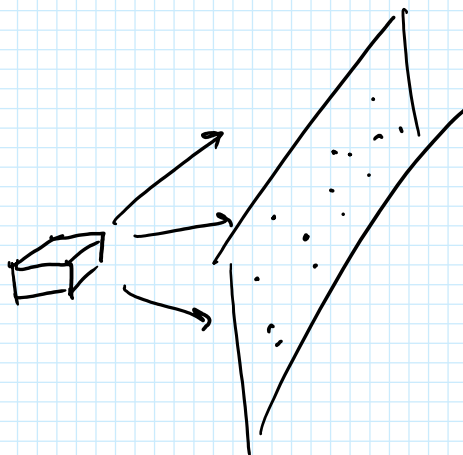
- Einkristall

- nicht-monochromatisches Röntgenlicht

viele Reflexe von verschiedenen λ

→ "Indizierungsproblem"

$h\nu$
→
(viele λ)

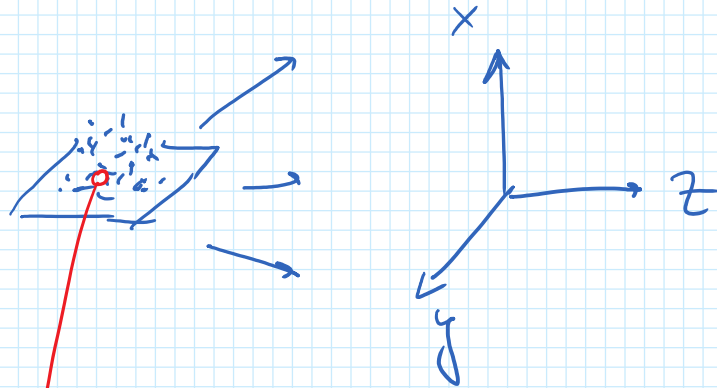


② Pulvermethode

(Debye und Scherrer)

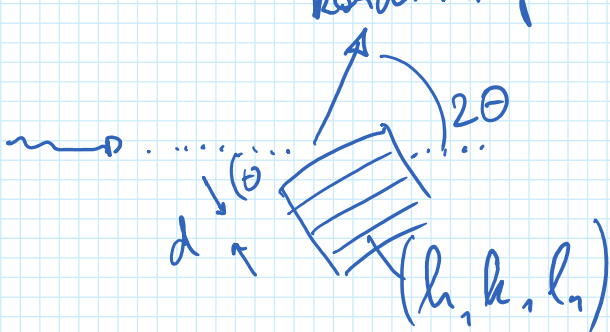
- Pulver
- monochromatisches Röntgenlicht (festes λ)

$h\nu$
→

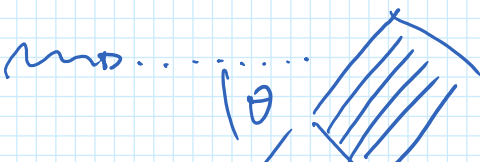


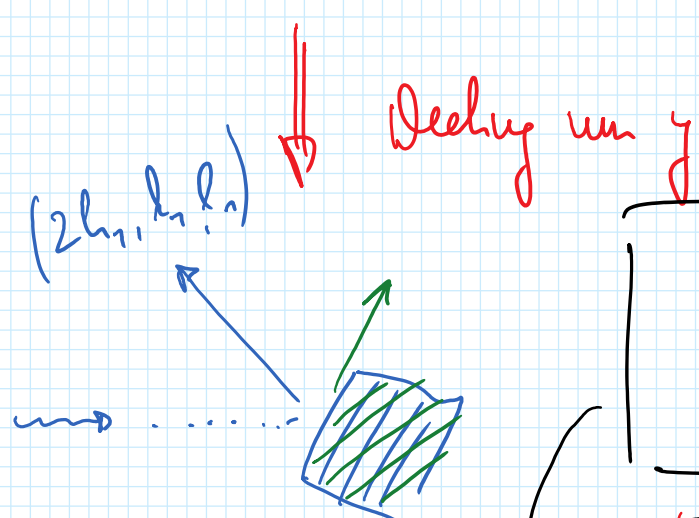
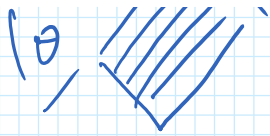
1 Kristallit

konstr. Interferenz (Maximum)

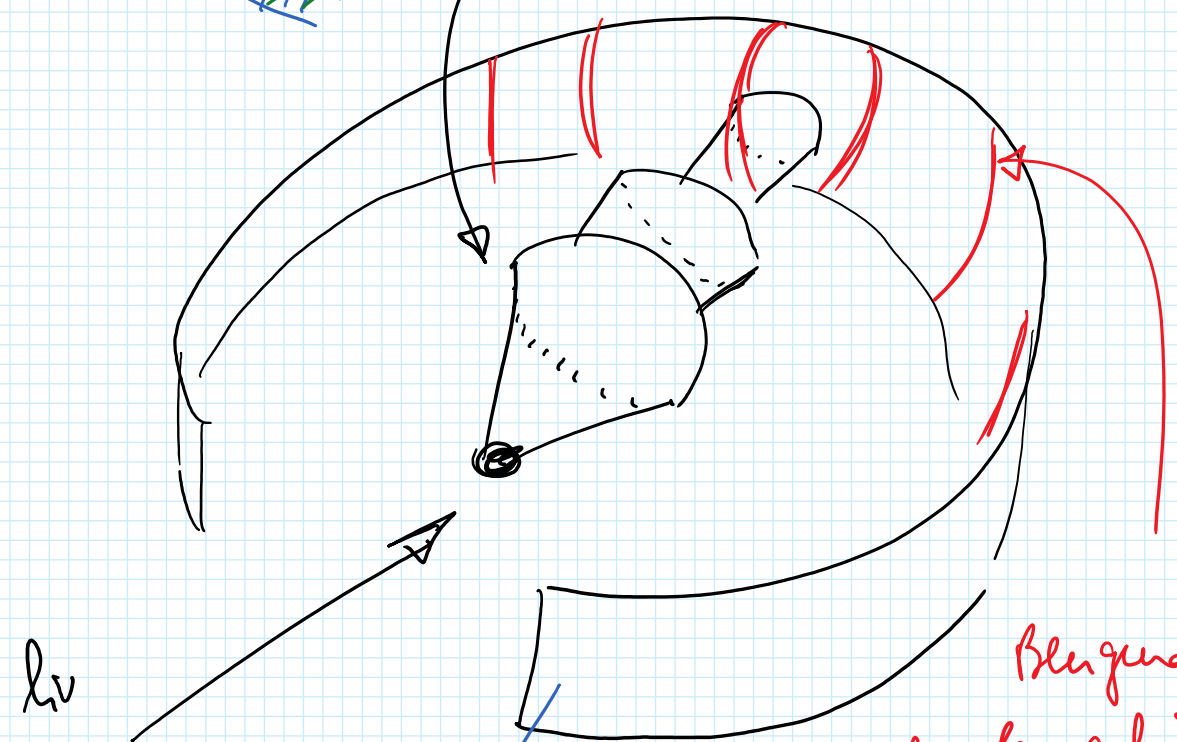


↓ Drehung um y





Es entstehen
Blenzungkegel !!



Blenzungkegel
ergeben gekrümmte
Linien auf dem
Büchelschein
(jeder für 1 Blenzung!)

aufgerollt

