

Strukturmethoden:
Röntgenstrukturanalyse von
Einkristallen

Sommersemester 2024

Christoph Wölper

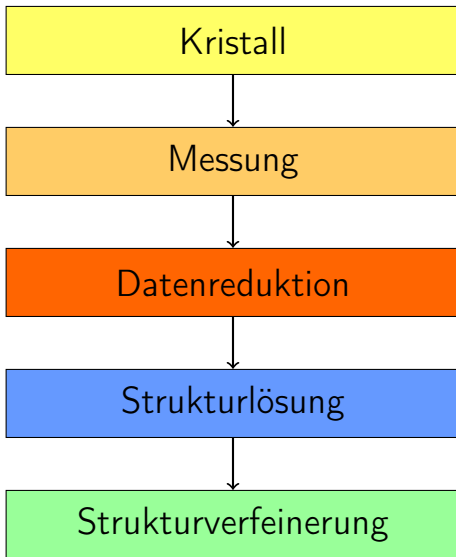
Institut für Anorganische Chemie der Universität Duisburg-Essen

Vorlesungsunterlagen

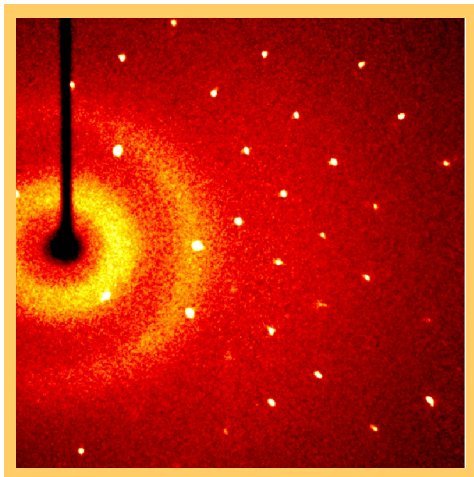
- Moodle läuft:
`https://moodle.uni-due.de/course/view.php?id=40684`
- Home-Page: unter AK Schulz → Teaching →
Strukturmethoden

Was bisher geschah

- Gitter im Detail
 - Symmetrie von Gittern
 - Wahl der Elementarzelle
 - Gitterzentrierungen
 - Bravais-Gitter
- Raumgruppen
 - mathematische Definition einer Gruppe
 - Raumgruppensymbole
 - Asymmetrische Einheit
 - Spezielle Lagen
- M.C. Escher! Flächengruppen, es geht auch in 2D!



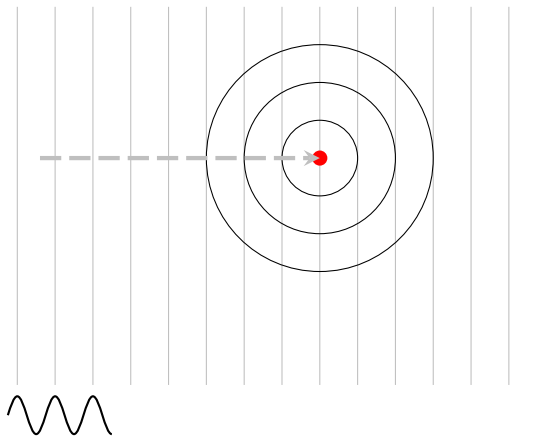
Wie sehen die Messwerte aus?



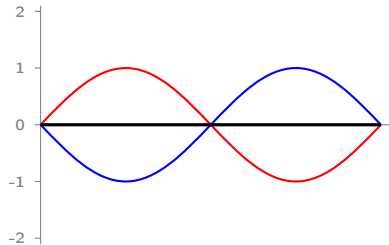
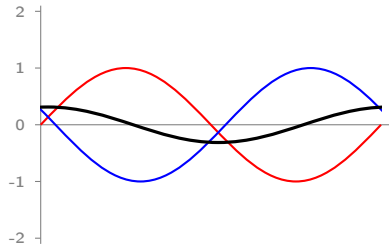
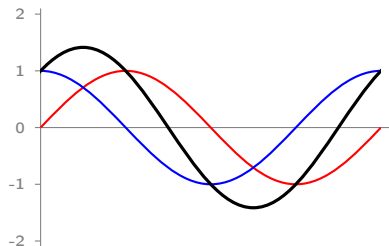
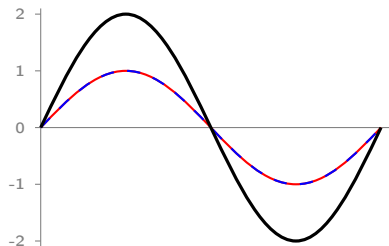
Woher kommen die Beugungsmaxima?

- Wie wechselwirkt Röntgenstrahlung mit Materie?
- Streuung
- Interferenz

Streuung nach Thomson



Interferenz



Interferenz

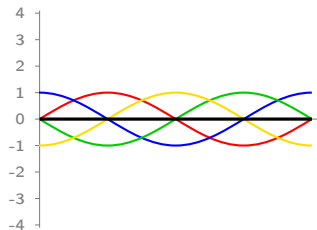
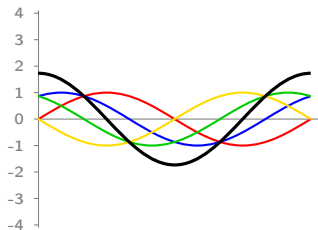
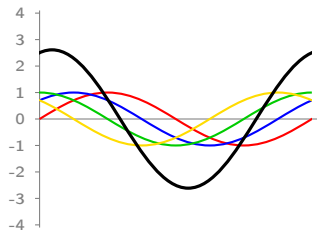
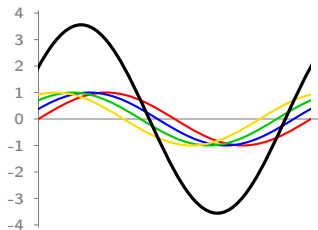
für 2 Wellen:

- 0° Phasendifferenz \mapsto konstruktive Interferenz
- 180° Phasendifferenz \mapsto destruktive Interferenz/Auslöschung

für mehrere Wellen:

- 0° Phasendifferenz \mapsto konstruktive Interferenz
- gleichmäßige Verteilung der Phasen \mapsto Auslöschung

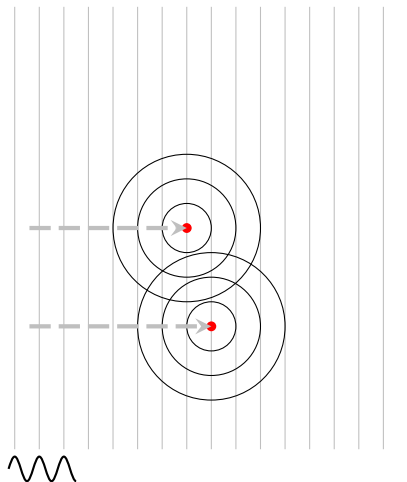
Interferenz



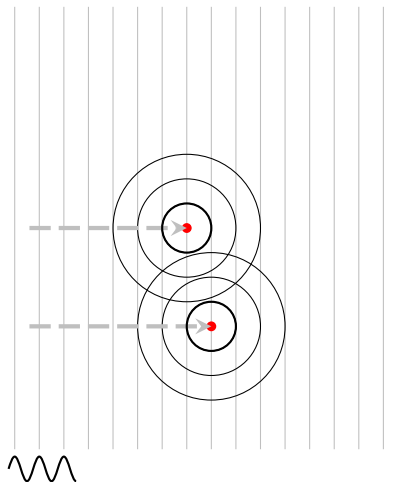
Interferenzbedingungen

- Kohärenz (konstante Phasendifferenz)
- in der Praxis Sekundärwellen der selben Ausgangswelle
- Gitterabstände und Wellenlänge müssen ähnlich sein

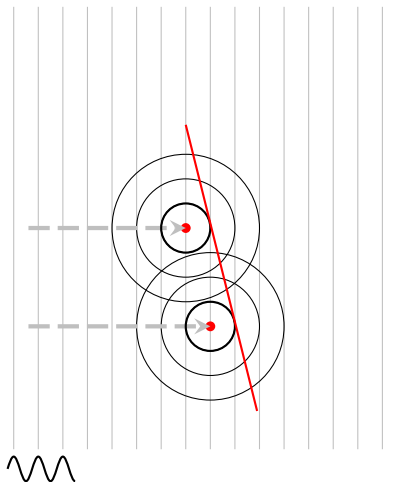
Beugung am Gitter



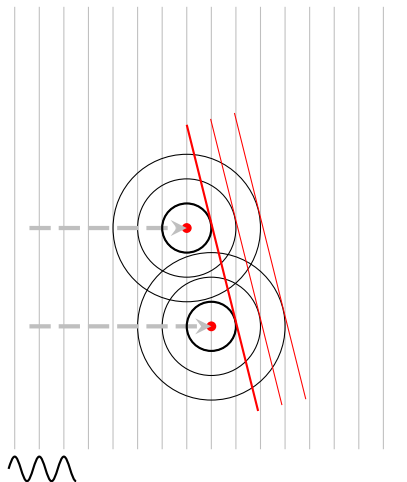
Beugung am Gitter



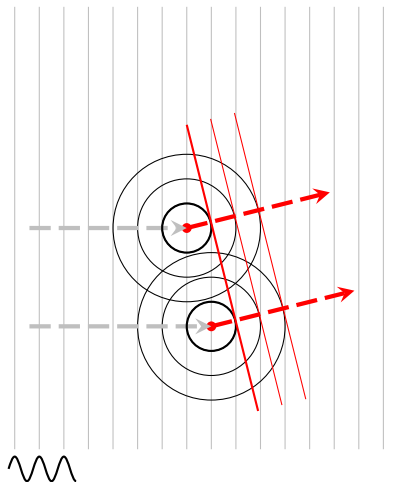
Beugung am Gitter



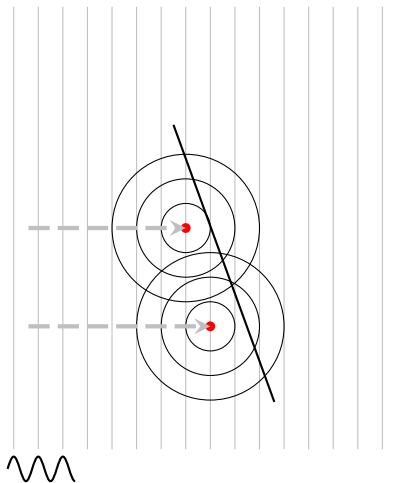
Beugung am Gitter



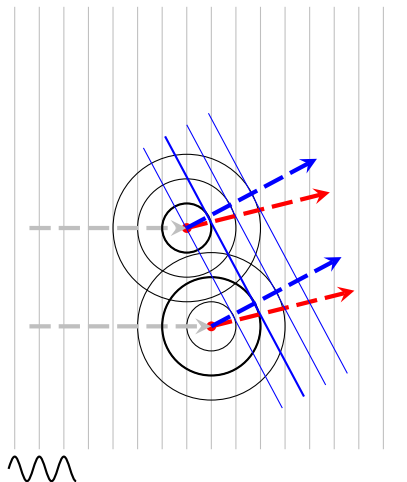
Beugung am Gitter



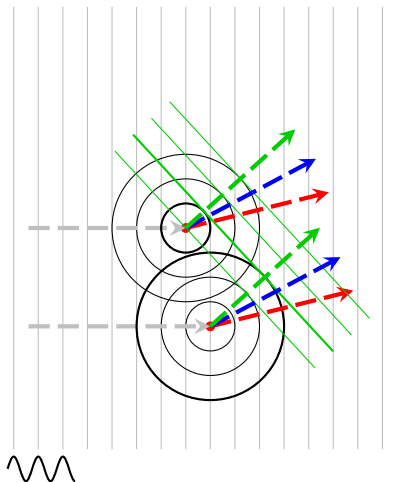
Beugung am Gitter



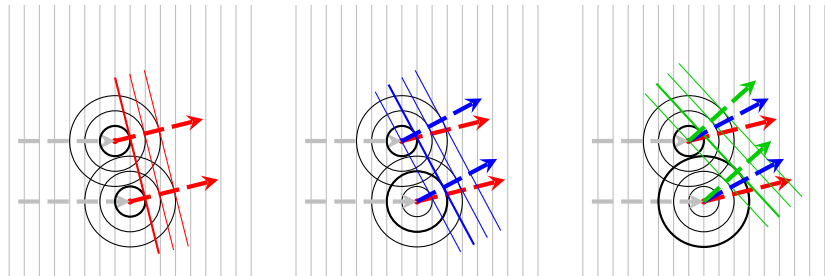
Beugung am Gitter



Beugung am Gitter

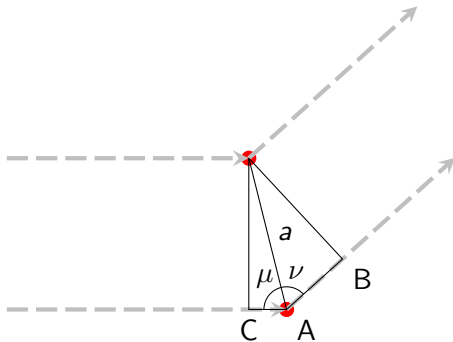


Beugung am Gitter



$$a \cos \mu + a \cos \nu = n\lambda$$

Beugung am Gitter

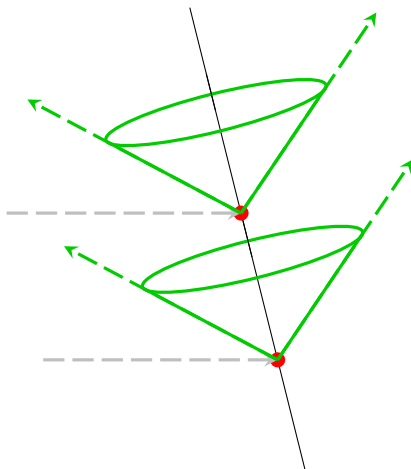


$$\overline{CA} + \overline{AB} = a \cos \mu + a \cos \nu = n\lambda$$

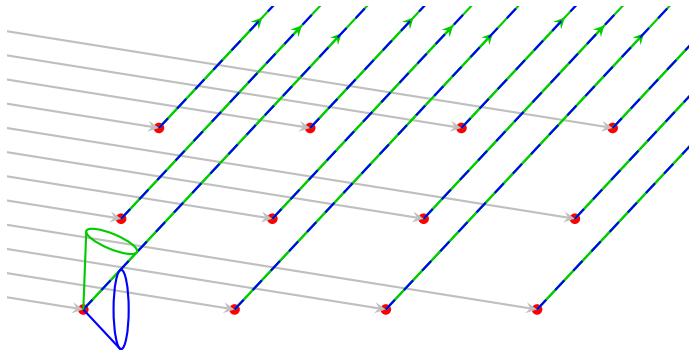
Beugung am Gitter

- in drei Dimensionen konzentrische Kugeln statt Kreise für die Position der Wellenberge
- Tangenten bilden einen Kegelmantel
- Ausbreitungsrichtung kegelförmig senkrecht zum dargestellten Kegelmantel mit Öffnungswinkel von 2ν

Beugung am Gitter



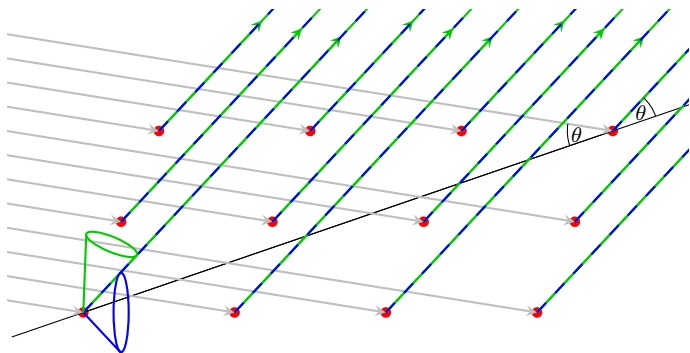
Beugung am Gitter



$$a \cos \mu_a + a \cos \nu_a = n_a \lambda$$

$$b \cos \mu_b + b \cos \nu_b = n_b \lambda$$

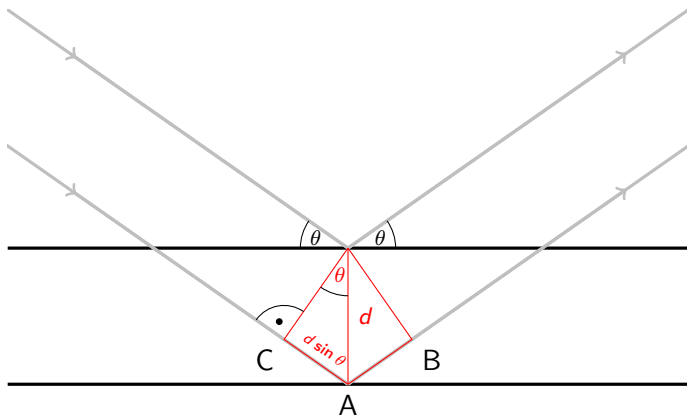
Beugung am Gitter



$$a \cos \mu_a + a \cos \nu_a = n_a \lambda$$

$$b \cos \mu_b + b \cos \nu_b = n_b \lambda$$

Reflexion an Gitterebenen



$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

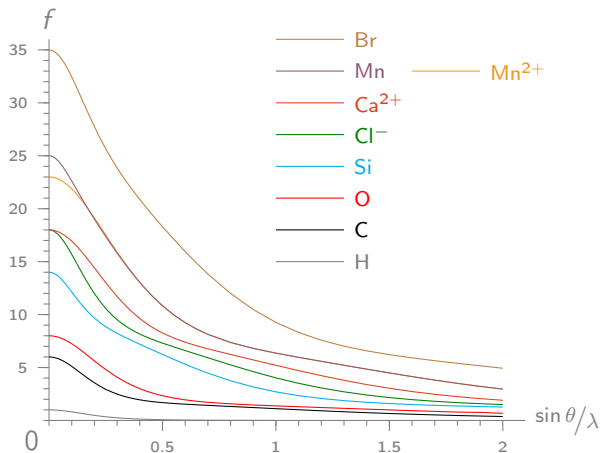
Reflexion an Gitterebenen

- h , k und l sind ganzzahlig
→ die Miller-Indices resultieren aus den Beugungsordnungen
- ein Kristall ist periodisch aufgebaut
→ Beweis durch Beugungsbild mit diskreten Maxima

Reflexintensitäten

- Beschreibung der Streuwellen als Kugelwellen nur für punktförmige Atome exakt
- Durch Interferenz und thermische Bewegung nicht isotrop
- Streufaktor f für quantitative Beschreibung
 - Sphärische Elektronendichte statt Punktatom
 - Atoms In Molecules (AIM) Ansatz

Reflexintensitäten



Der Streufaktor ist eine Funktion von θ und Atomsorte

Reflexintensitäten

- Beschreibung der Streuwellen als Kugelwellen nur für punktförmige Atome exakt
- Durch Interferenz und thermische Bewegung nicht isotrop
- Streufaktor f für quantitative Beschreibung
 - Sphärische Elektronendichte statt Punktatom
 - Atoms In Molecules (AIM) Ansatz
- Elektronendichte in der Miller-Ebene
- Wasserstoffatome müssen gesondert behandelt werden