



Röntgenbeugung, Kristallflächen, Miller-Indizes, Bragg'sche Gleichung

Röntgenstrahlen:

Wenn Elektronen mit sehr viel Energie auf ein Metall gelangen entstehen Röntgenstrahlen. Es handelt sich dabei um elektromagnetische Wellen. Sie besitzen eine sehr kurze Wellenlänge (10^{-12} - 10^{-9} m) und eine hohe Frequenz. Bei der Entstehung von Röntgenstrahlen, werden aus den inneren Schalen eines Atoms Elektronen herausgeschleudert. Dann entsteht dort eine Lücke, die dann mit Elektronen von weiter außen liegenden Schalen aufgefüllt werden. Dabei geben die Elektronen, welche die Lücke auffüllen Photonen ab.

Kristallebenen und ihre Orientierung

Um die Lage einer Kristallfläche zu bestimmen benötigt man die **Miller-Indizes**. Dazu legt man ein Koordinatensystem mit drei Achsen (a,b,c) in die Elementarzelle des Kristalls. Nun bestimmt man die Schnittpunkte der Koordinatenachsen mit derjenigen Kristallfläche, die dem Ursprung am nächsten ist (m, n, p). Zur Kennzeichnung der Kristallfläche werden die Kehrwerte von m, n, p verwendet, diese werden dann als Miller-Indizes (hkl) bezeichnet. Mit den drei Zahlen hkl bezeichnet man eine Schar von Kristallebenen (Netzebenen).

Beugung an der Kristallebene

Die Wellenlänge der Röntgenstrahlung und die Atomabstände im Kristallgitter liegen in der gleichen Größenordnung. Dadurch kann es zur Beugung der Röntgenstrahlen kommen. Wir betrachten bei der Röntgenbeugung zwei aufeinander folgende parallele Kristallebenen mit dem Abstand d und zwei parallele Röntgenstrahlen. Dabei gilt, wie bei sichtbarem Licht, „Einfallswinkel gleich Austrittswinkel“. Der Einfallswinkel ist θ . Der erste Strahl wird an der oberen Kristallebene gebeugt und der zweite an der darunter liegenden. Daraus folgt, dass der zweite Strahl eine längere Strecke, bis zum Auftreffen auf die tiefere Kristallebene, zurücklegen muss. Diese Strecke hat eine Länge von $d \times \sin\theta$. Beim Austritt ist der zweite Strahl wieder um das gleiche Stück länger als der erste. Dem entsprechend muss der zweite Strahl insgesamt eine um $2 \times d \times \sin\theta$ längere Strecke zurücklegen als der erste.

Um ein gegenseitiges Auslöschung durch Interferenz der beiden Strahlen zu verhindern muss nun die Länge $2 \times d \times \sin\theta$ ein Vielfaches der Wellenlänge λ sein.

Daraus folgt die **Bragg'sche Gleichung**:

$$\mathbf{n} \times \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{2} \times \mathbf{d} \times \mathbf{\sin\theta} \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots$$

Dem entsprechend kommt es also nur bei bestimmten Winkeln zu einer Reflexion des Strahls.

Das Prinzip der Röntgenbeugung wird genutzt um die Struktur einer Verbindung im Kristall zu ermitteln oder Substanzen zu identifizieren.

Literatur:

- Riedel/Janiak 7. Auflage

Fragen:

- 1.) Wozu dienen die Miller-Indizes und wie bildet man diese?
- 2.) Wie lautet die Bragg'sche Gleichung und was bedeuten die Variablen (Skizze)?