

Strukturmethoden:  
Röntgenstrukturanalyse von  
Einkristallen

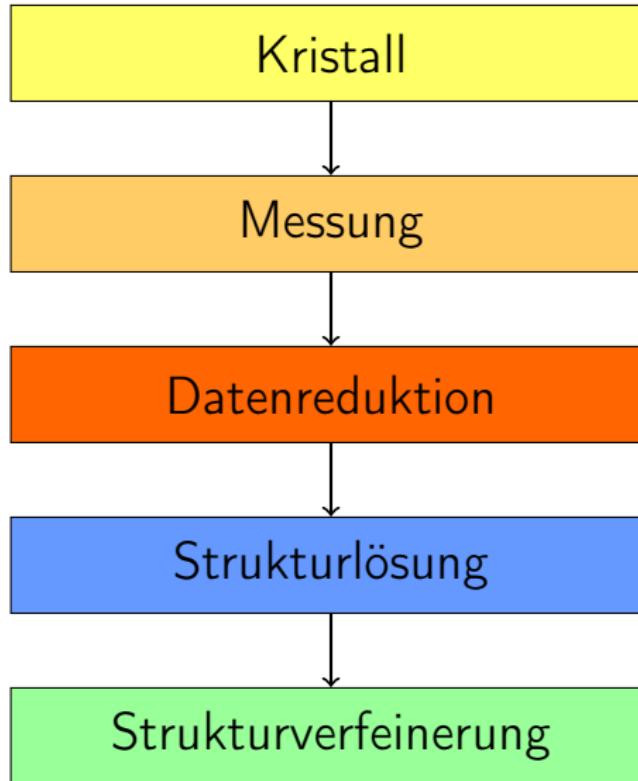
Sommersemester 2025

Christoph Wölper

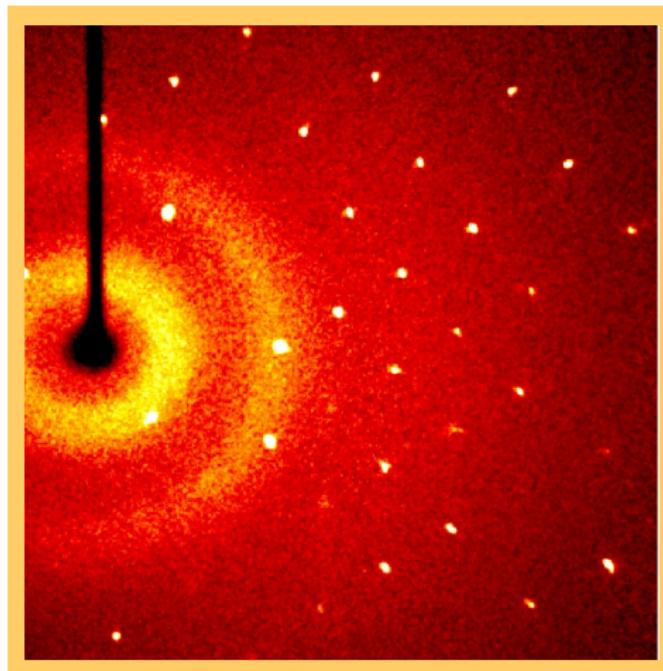
Institut für Anorganische Chemie der Universität Duisburg-Essen

# 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!



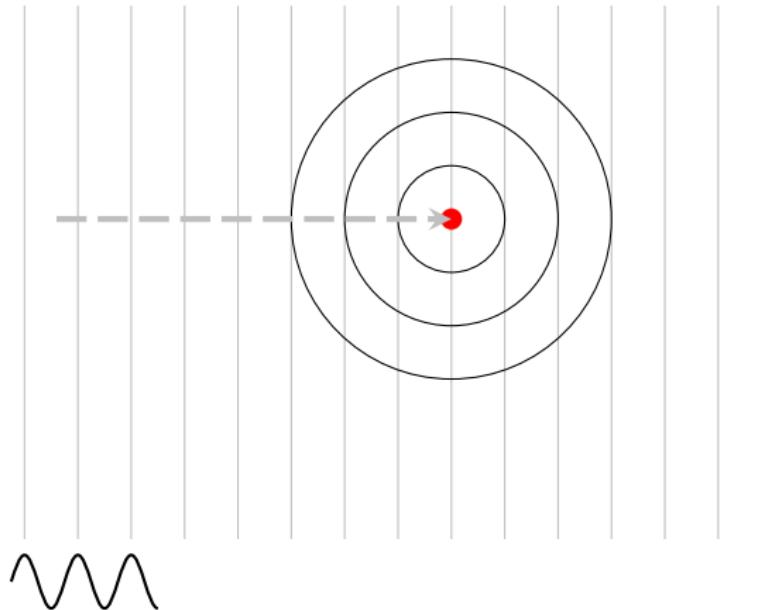
## Wie sehen die Messwerte aus?



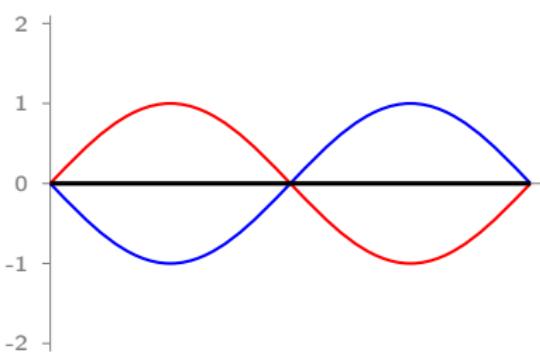
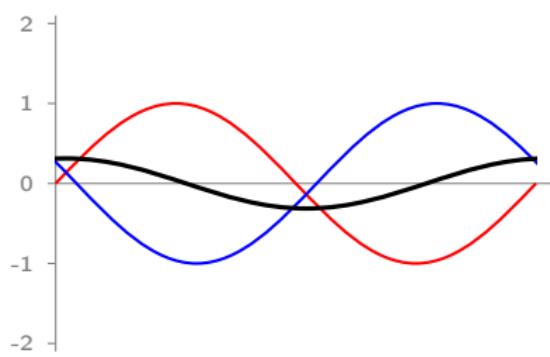
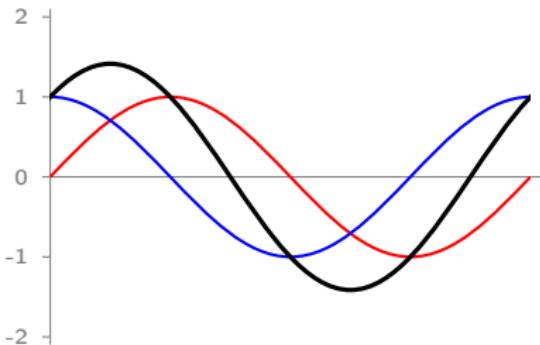
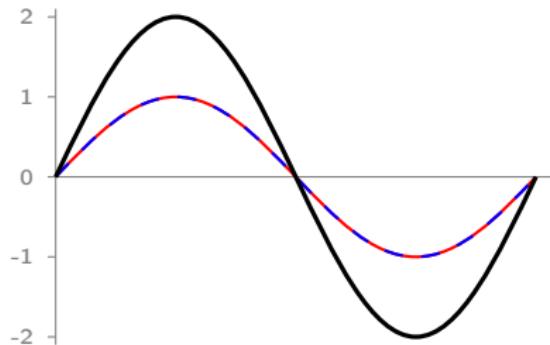
## Woher kommen die Beugungsmaxima?

- Wie wechselwirkt Röntgenstrahlung mit Materie?
- Streuung
- Interferenz

## Streuung nach Thomson



## Interferenz



## Interferenz

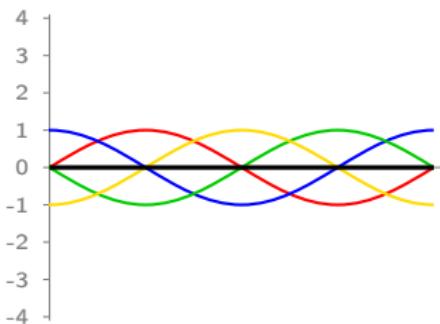
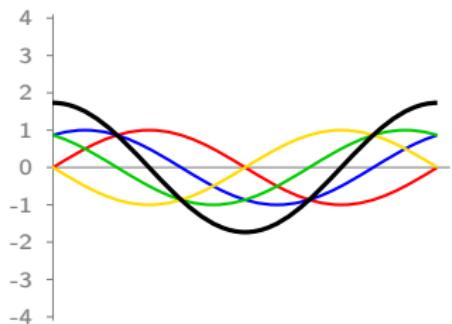
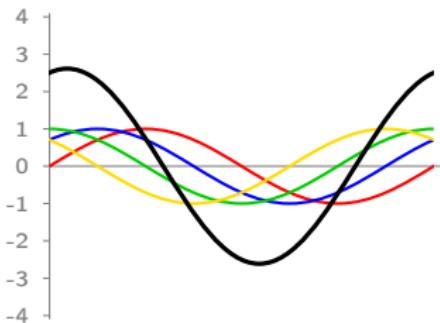
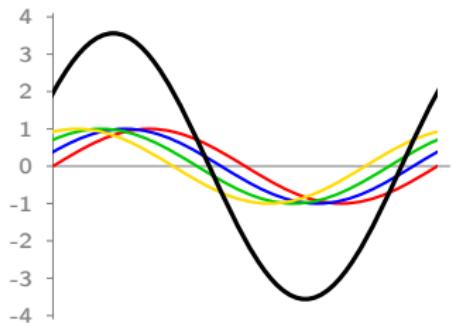
für 2 Wellen:

- $0^\circ$  Phasendifferenz  $\mapsto$  konstruktive Interferenz
- $180^\circ$  Phasendifferenz  $\mapsto$  destruktive Interferenz/Auslöschung

für mehrere Wellen:

- $0^\circ$  Phasendifferenz  $\mapsto$  konstruktive Interferenz
- gleichmäßige Verteilung der Phasen  $\mapsto$  Auslöschung

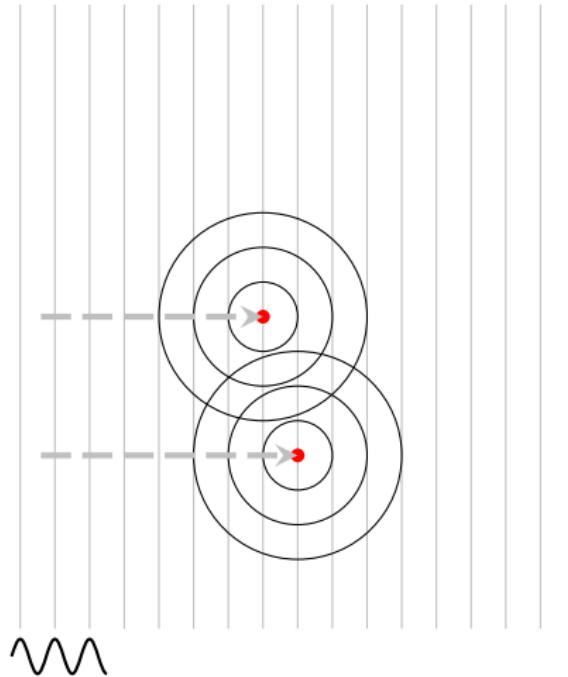
# Interferenz



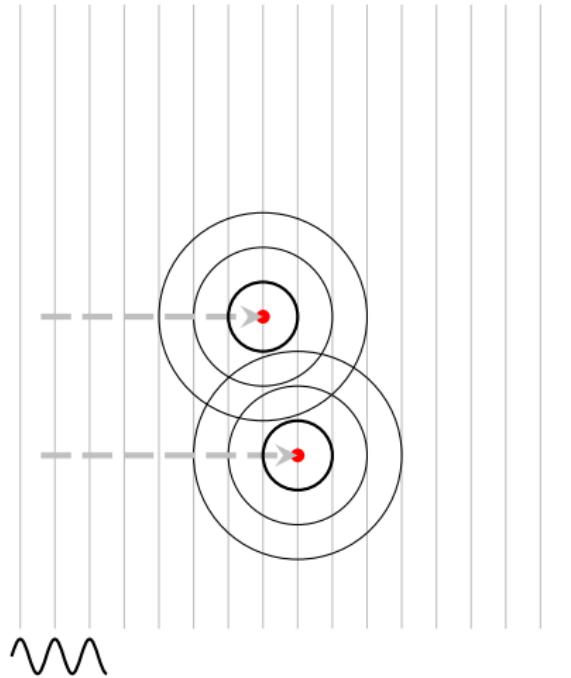
## Interferenzbedingungen

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

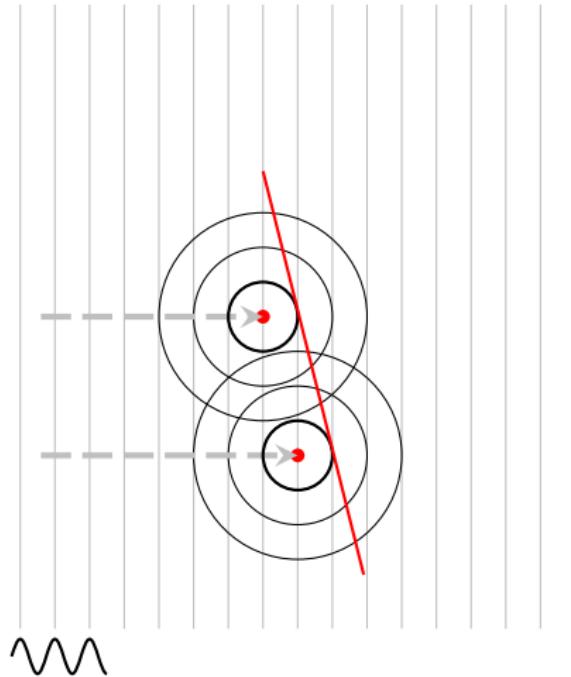
## Beugung am Gitter



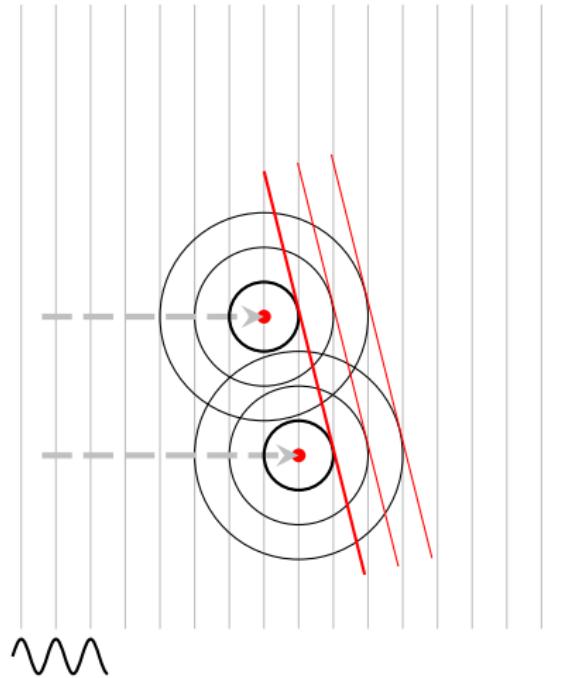
## Beugung am Gitter



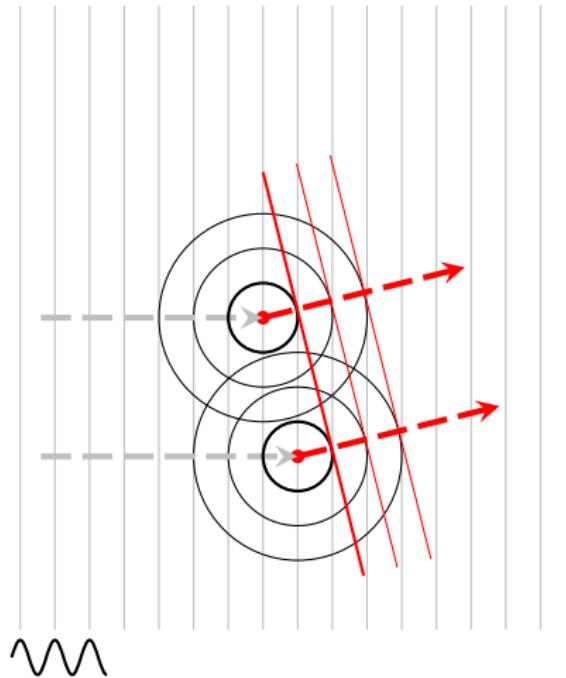
## Beugung am Gitter



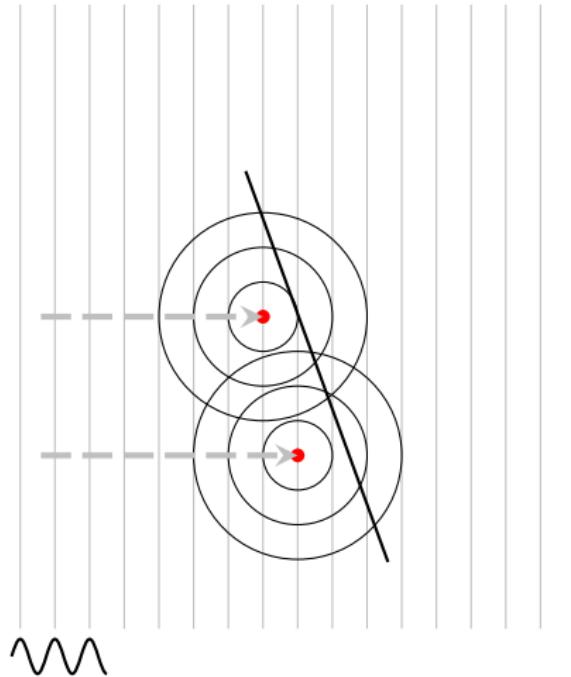
## Beugung am Gitter



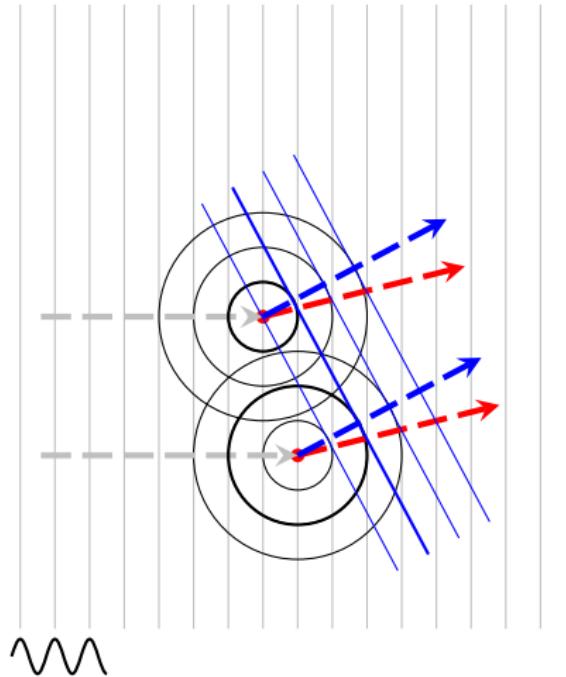
## Beugung am Gitter



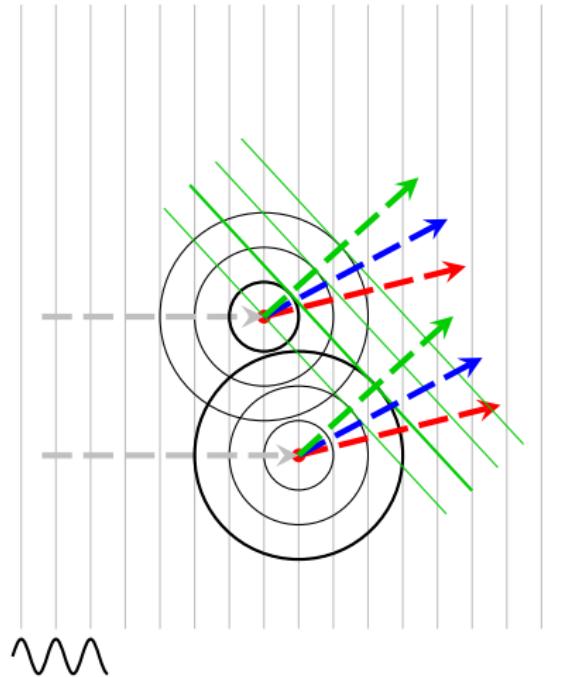
## Beugung am Gitter



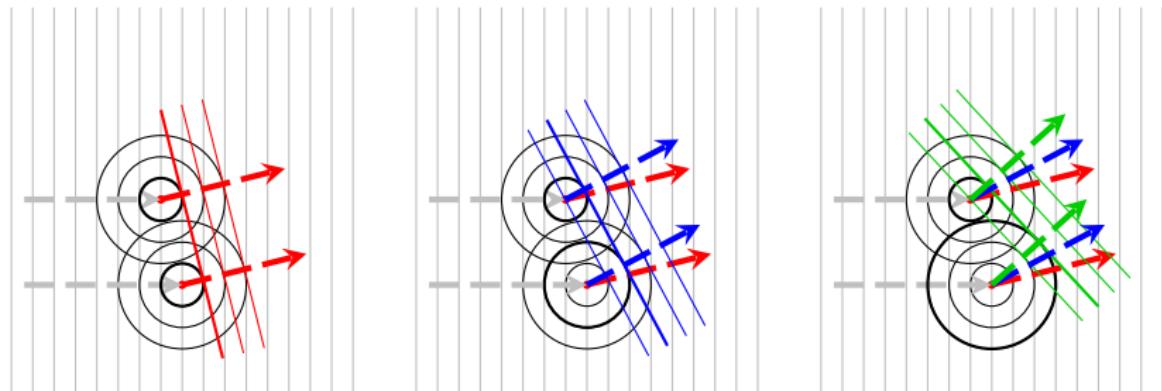
## Beugung am Gitter



## Beugung am Gitter

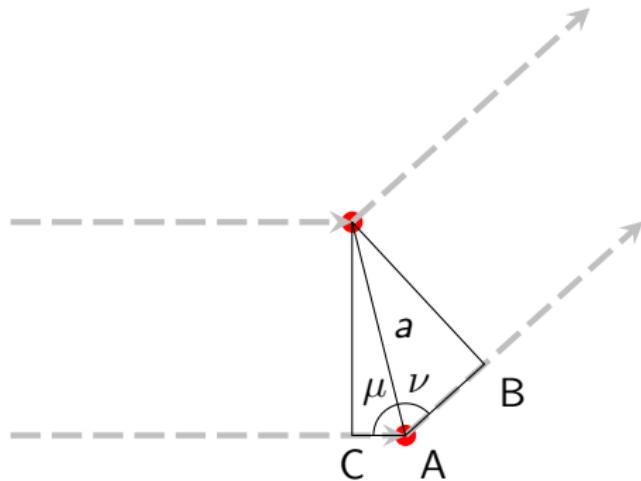


## Beugung am Gitter



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

## Beugung am Gitter

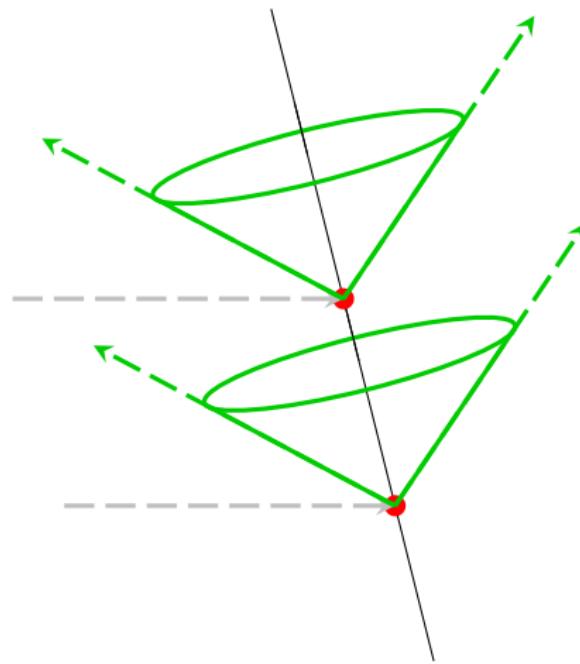


$$\overline{CA} + \overline{AB} = a \cos \mu + a \cos \nu = n\lambda$$

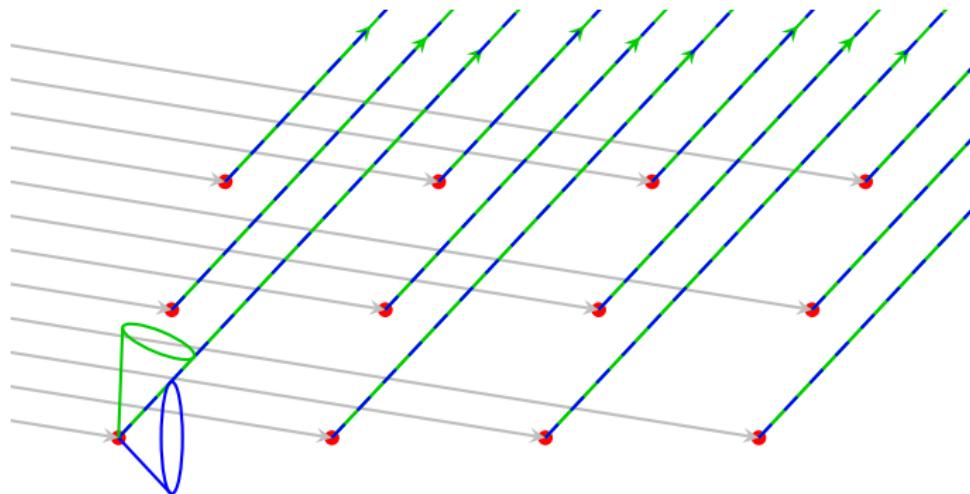
## Beugung am Gitter

- 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  $2\nu$

## Beugung am Gitter



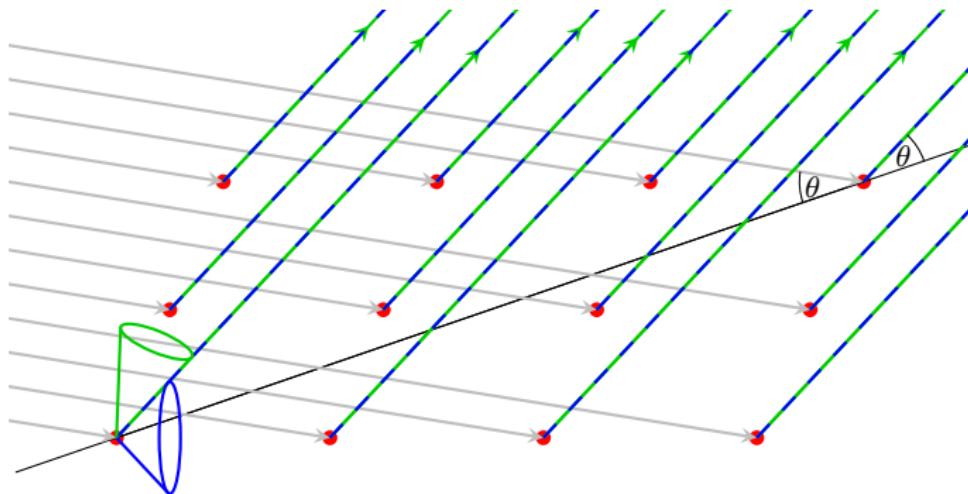
## Beugung am Gitter



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

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

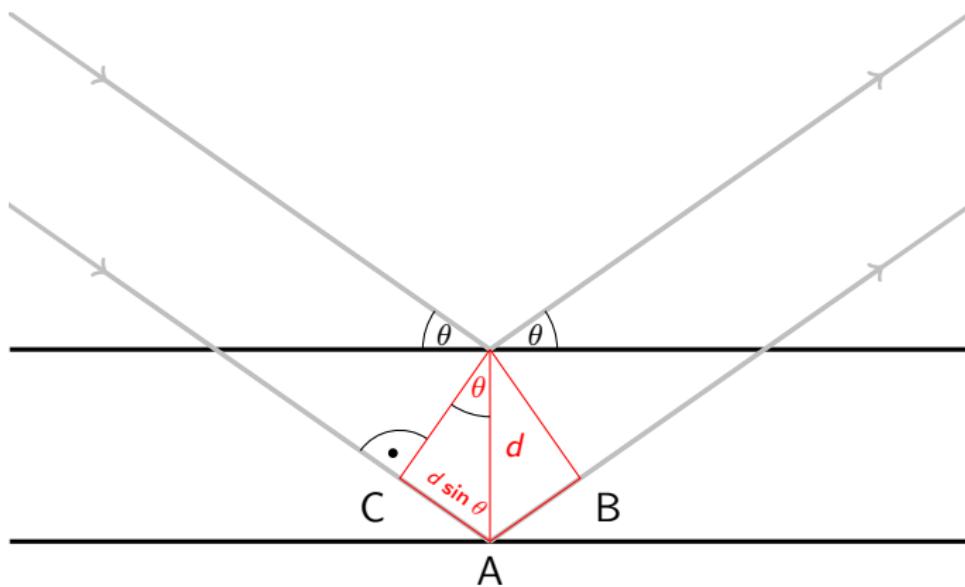
## Beugung am Gitter



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

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

## Reflexion an Gitterebenen



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

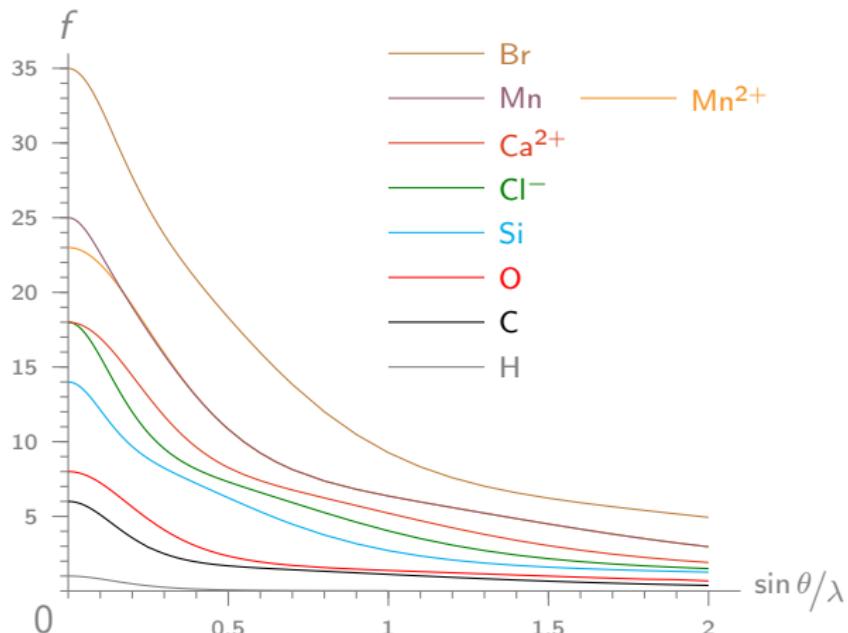
## Reflexion an Gitterebenen

- $h, k$  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  $\theta$  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