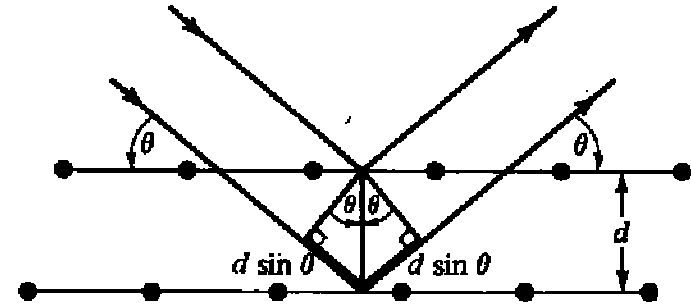


M3: Beugung an periodischen Kristallgittern

Liste wichtiger Grundbegriffe (aus Festkörperphysik / Physik V):

- Bragg-Reflexion
- Miller-Indizes
- reziprokes Gitter, reziproker Gittervektor
- Wellenvektorübertrag / Streuvektor
- Beugungsbedingung $\vec{Q} = \vec{G}$
- Ewald-Konstruktion
- Strukturfaktor



Wiederholung: Ewaldkonstruktion

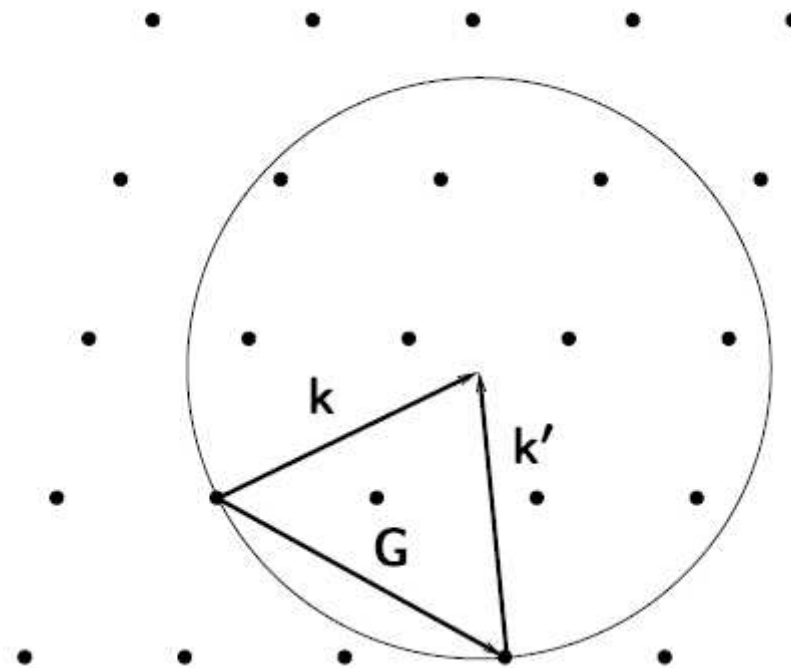


Abbildung 3.3: Ewald-Konstruktion. Beugungsmaxima ergeben sich, wenn der Wellenvektorübertrag einem Vektor \mathbf{G} des reziproken Gitters entspricht.

Faserbeugung

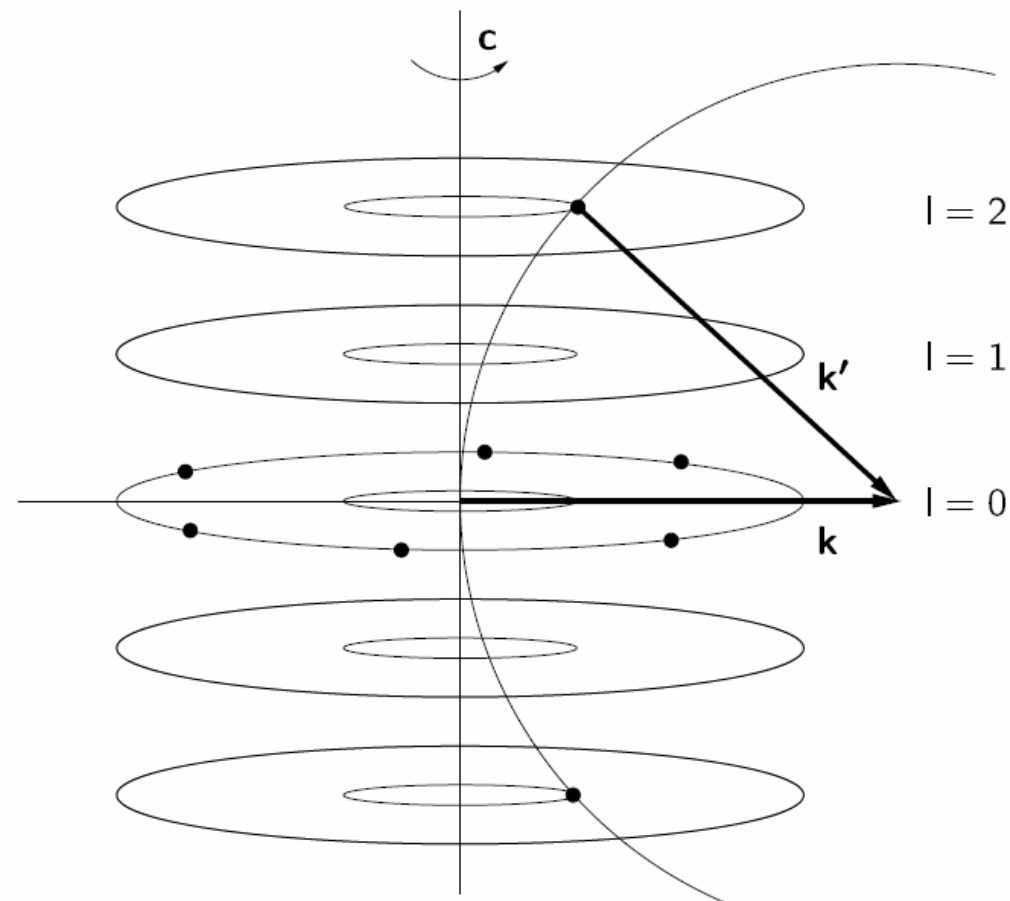
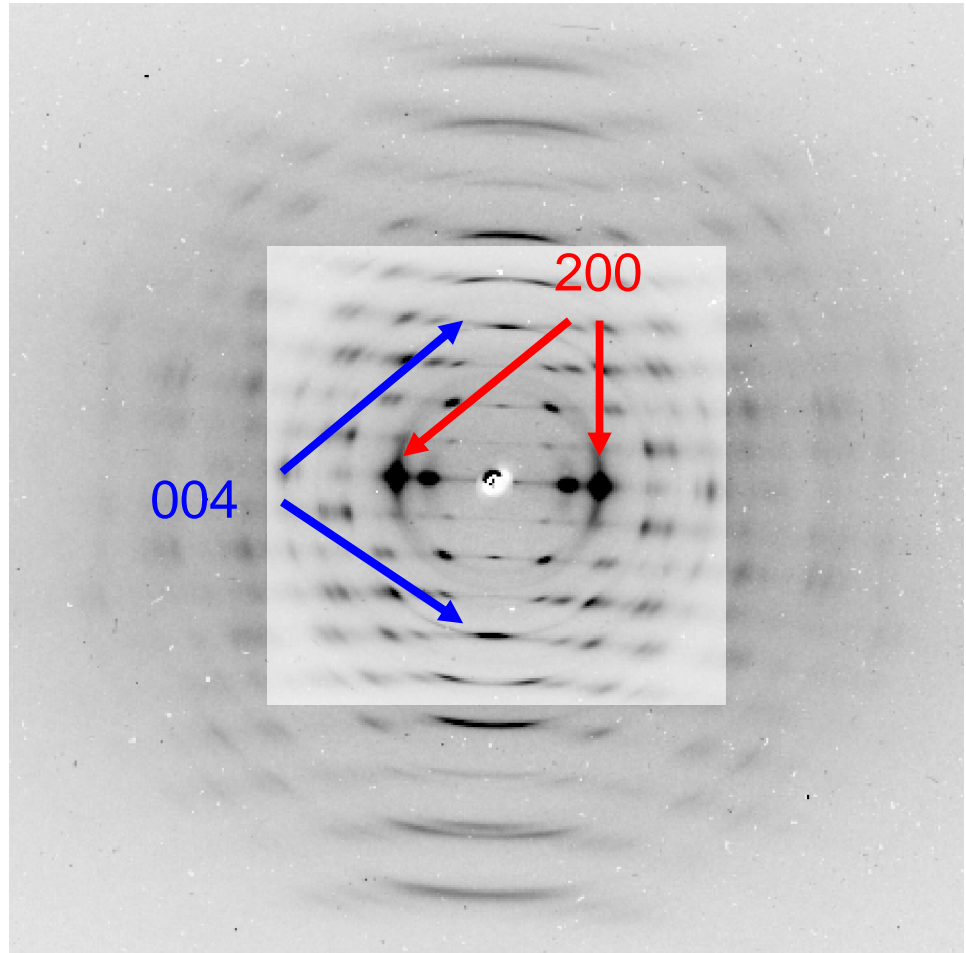
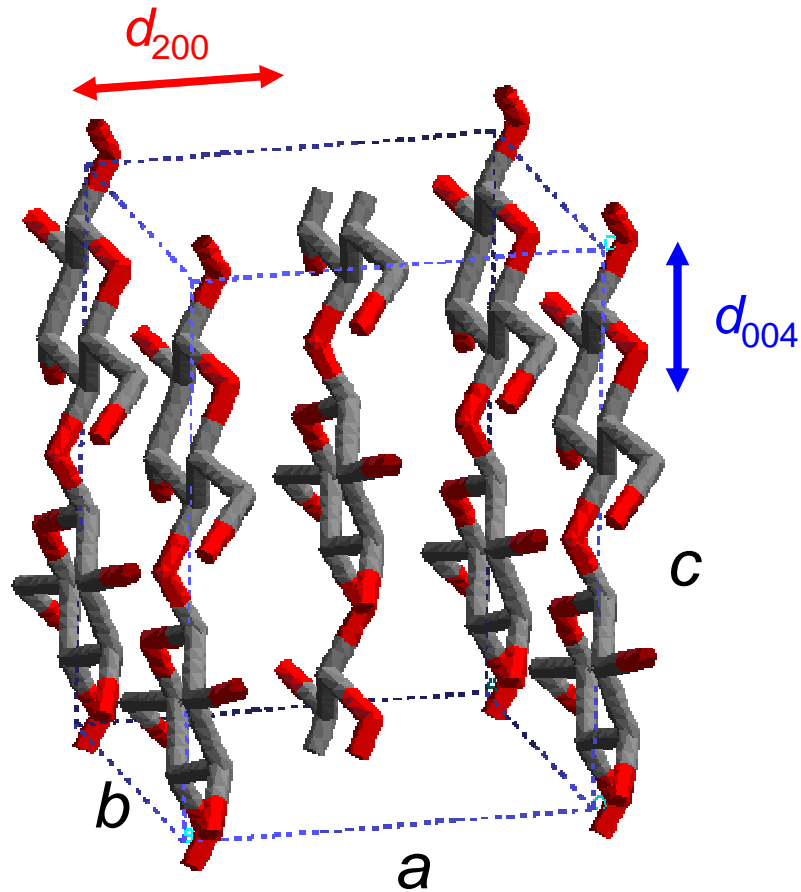


Abbildung 3.4: Drehkristall- bzw. Fasertexturaufnahme. Wird das reziproke Gitter eines Kristalls um eine Achse senkrecht zu \mathbf{k} gedreht, so beschreiben alle Gitterpunkte, die in einer zur Achse senkrechten Ebene liegen, einen Kreis. Fällt die Drehachse mit einer Hauptachse des Kristalls zusammen (hier \mathbf{c}), so ergeben sich für alle dazugehörigen Ebenen mit h, k beliebig und $l = 0, 1, 2, \dots$ äquidistante Kreise. Die Ewaldkugel ist angedeutet.

Wiederholung/Beispiel: Kristallstruktur nativer Zellulose




einzelne Holzfaser (Pappel)

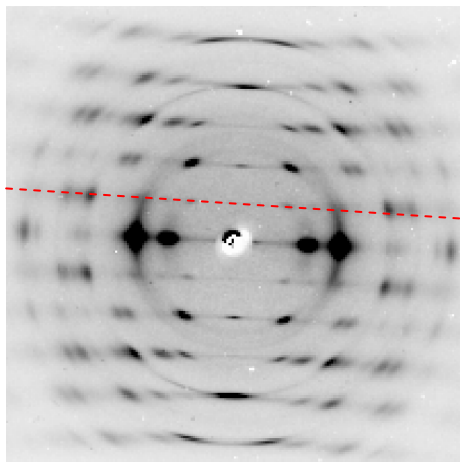
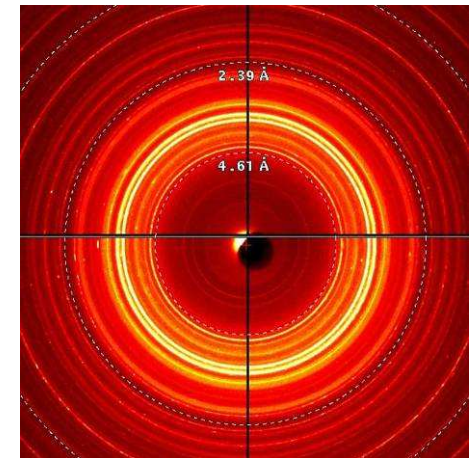
M. Müller, M. Burghammer, J. Sugiyama
Holzforschung **60**, 474-479 (2006)

speziell biologische / nanokristalline Materialien

Textur (Orientierungsverteilung von Kristallen):

Einkristall (→ allgemeine Textur) → **Fasertextur** → Pulvertextur


 = Vorzugsorientierung (vom Pulver aus)
 = Unordnung (vom Einkristall aus)

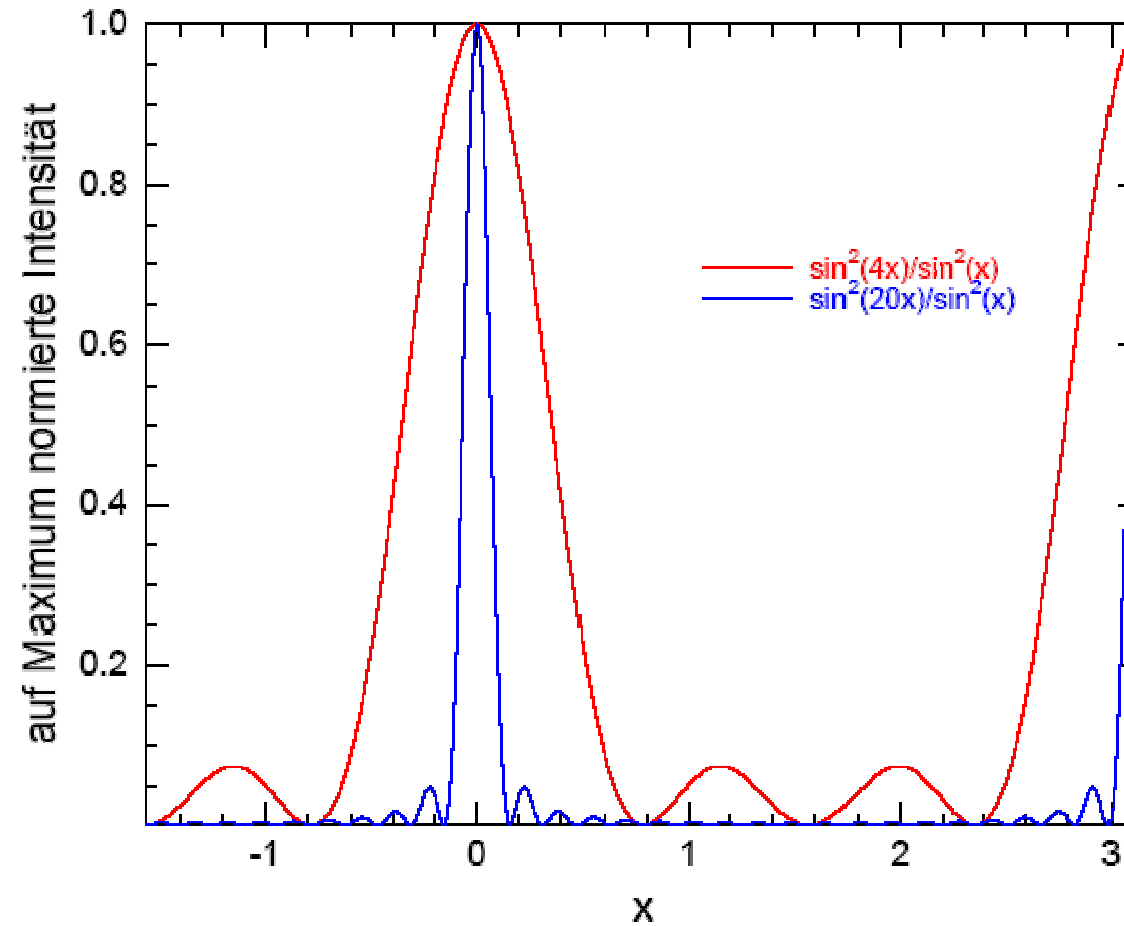


Fasertextur gibt mehr Informationen als Pulver: „Schichtlinien“ mit gleichem l -Index

nicht perfekt: „Orientierungsfunktion“



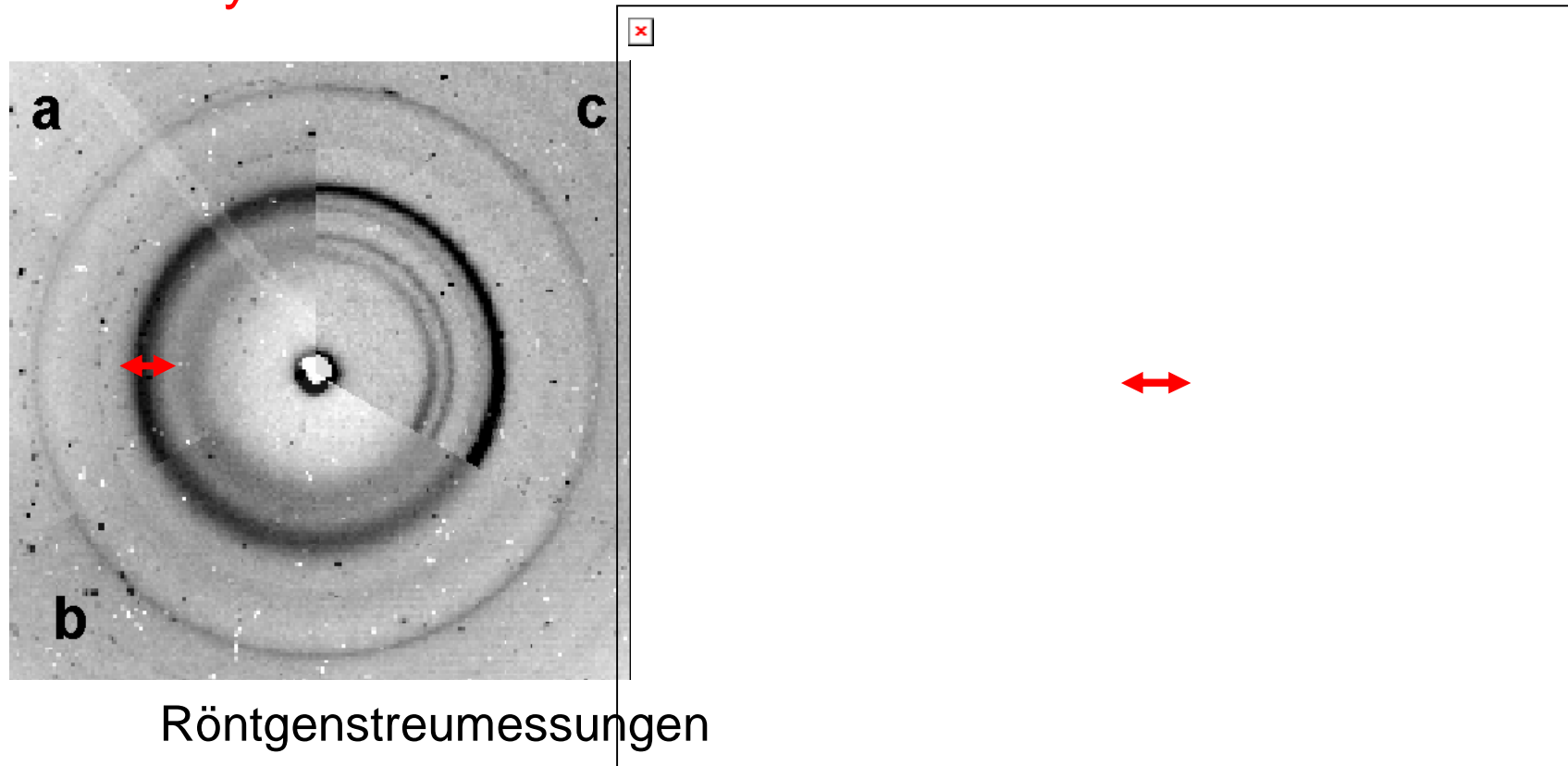
Reflexverbreiterungen (vgl. Laue-Interferenzfunktion;
analog zu Spaltanzahl bei optischen Gittern)



Scherrer-Formel:

$$d \text{ (\AA)} = \frac{2\sqrt{3 \ln 2} \lambda}{\pi \text{ FWHM}_{2\Theta} \cos \Theta}$$

In vitro synthetisierte Zellulose



Röntgenstreuungsmessungen

	d_{200} (Å)	Kristallgröße \varnothing (Å)	Kristallinität (%)
a <i>in vitro</i>	4.00(1)	29(2)	39(4)
b endogen	4.10(3)	21(2)	29(3)
c bakteriell	3.96(1)	62(1)	64(6)

M3.1: Röntgen- und Neutronendiffraktion


Streuung an **Elektronenhülle (Röntgen)** bzw. **Atomkernen (Neutronen)**

↓
Streuvermögen steigt mit Z^2

↓
Streuvermögen variiert regellos
und isotonenabhängig

$$\lambda (\text{\AA}) = 12.4/E (\text{keV})$$

$$\lambda (\text{\AA}) = 0.28/\sqrt{E (\text{eV})}$$

- **quantitative** Kristallstrukturanalyse (schwache Wechselwirkung, rein kinematische Betrachtung wie oben)
- konventionell zunächst nicht ortsauflösend (s. aber M3.3!)
- gute **Faserdiagramme** liefern ausreichend Daten („Auflösung“ 1 Å) 
- Besonderheit **Wasserstoff** (wichtig für biologische Proben!):
 - schwach streuend für Röntgenstrahlung
 - stärker streuend als C, O für Neutronen und Kontrast H – D

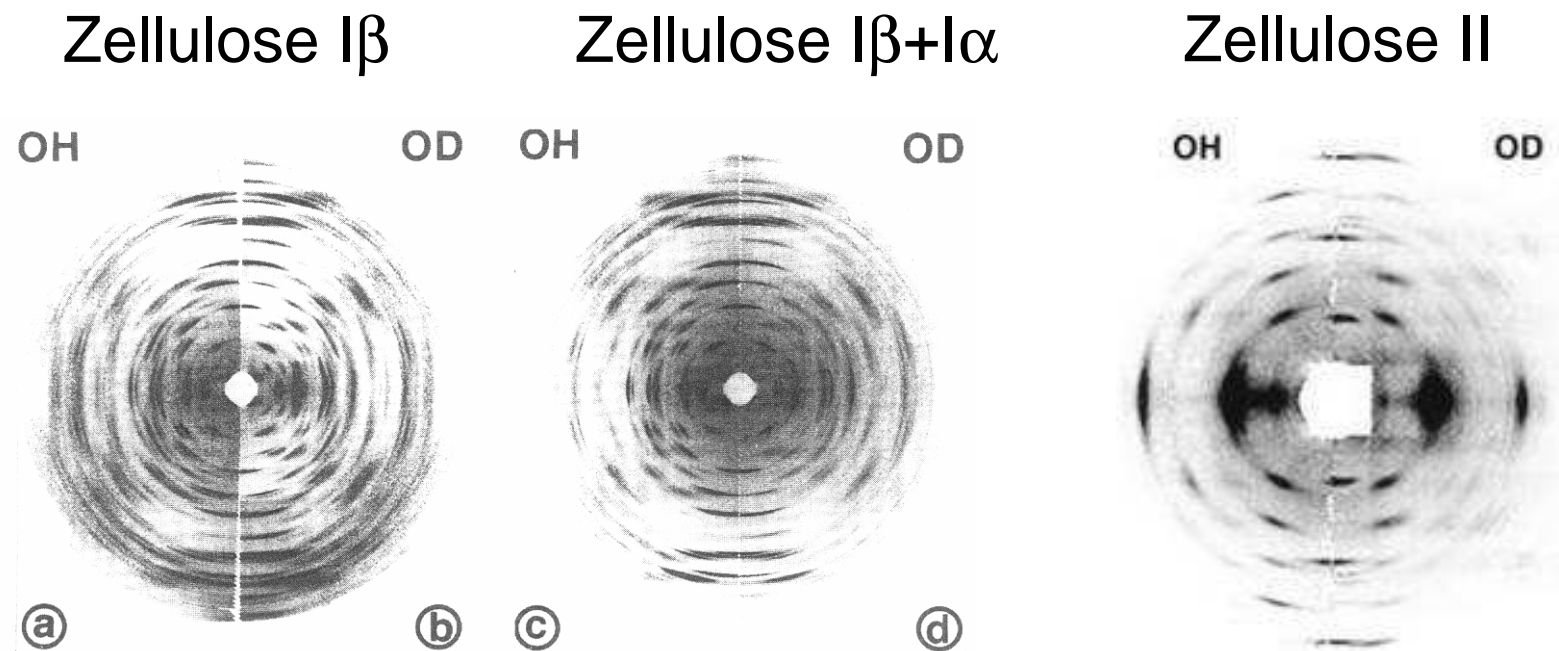


Kontrastvariation für Neutronen durch Deuterierung

unterschiedlicher (Verhältnis D/H 3.2) kohärenter
Neutronen-Streuquerschnitt von H und D

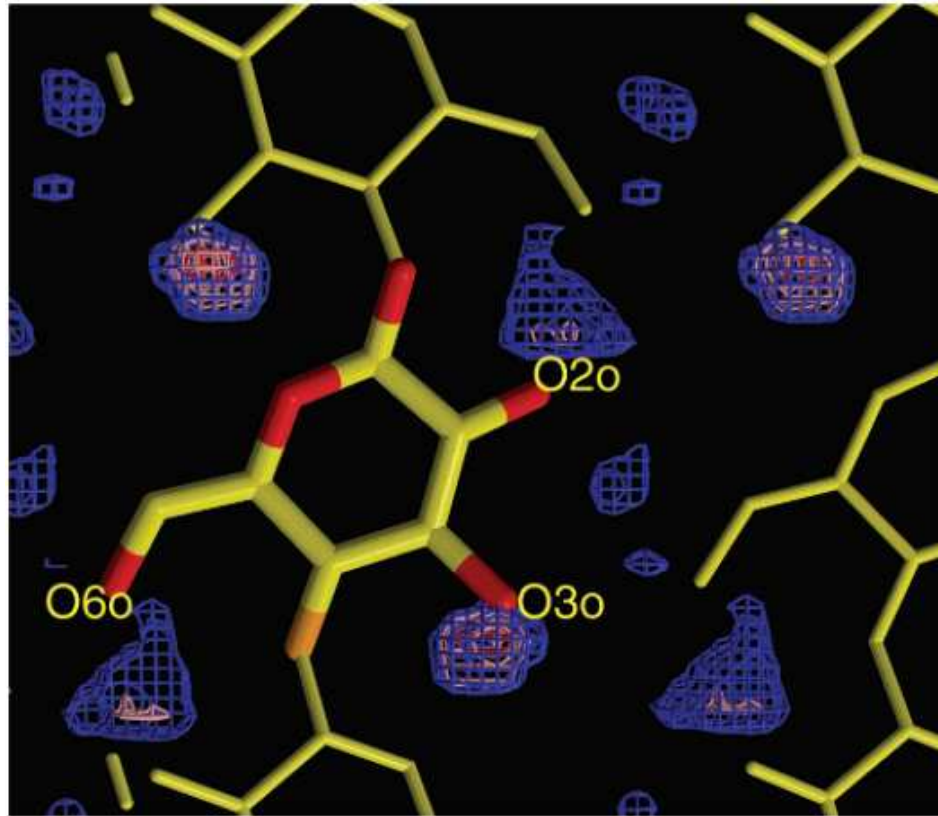
⇒ Strukturfaktor ändert sich bei Deuterierung (Austausch)

⇒ Wasserstoffpositionen genauer bestimmbar



Zellulose I

Wasserstoffdichte aus Differenz H-D



Wasserstoffbrückenbindungen
(aus Atomabständen zu berechnen)

