# Zur Optik der Reflexion von Röntgenstrahlen an Kristallen.

Weitwinkeldiagramme als reziprokes Gitterbild in hyperbolischen Polarkoordinaten.

Von

H. Seemann, Freiburg i. Br.

Mit 15 Abbildungen.

Die früheren Arbeiten des Verf.<sup>1</sup>) (1916-1930) behandelten die Kristallanalyse aus Liniendiagrammen mit dem Ziele, ein unmittelbar anschauliches Bild der Gitterebenen in größtmöglicher Vollständigkeit und Sicherheit dem Diagramm entnehmen zu können, womöglich ganz ohne vektoranalytische Hilfsmittel. Hierfür sollte die wichtigste Operation der darstellenden Geometrie, die Zentralprojektion, herangezogen werden, da deren geometrische Voraussetzungen schon bei Erzeugung des Diagramms durch die Röntgenstrahlen selbst geschaffen werden, sofern die vom Verf. 1916 ausgearbeitete "Röntgenoskopischen Methoden ohne Spalt"<sup>2</sup>) benutzt Das gemeinsame Kennzeichen dieser Anordnungen von werden. Strahlenquelle, Kristall und photographische Platte nebst Blenden ist im Gegensatz zu den bis 1916 bekannten Methoden die Bündelung konvergenter, meist fächerförmiger Primärstrahlen in einem sehr kleinen Kristall oder einem geeigneten Punkt in ihm, etwa einer schmalen Kantenfläche, so daß demnach auch die reflektierten Strahlen als homozentrisches Bündel von diesem Punkt aus - nunmehr divergent - direkt auf die photographische Platte projiziert werden.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>) H. SEEMANN, Annalen der Physik Bd. 51, S. 391-413, 1916; Bd. 53, S. 462 --491, 1917; Bd 6, S. 1-46, 1930; Bd. 6, S. 793-824, 1930; Bd. 7, S. 633-648, 1930. Physikalische Zschr. Bd. 18, S. 242-249, 1917; Bd. 20, S. 169-175, 1919; Bd. 20, S. 51-58, 1919.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>) H. SEEMANN, Annalen der Physik IV Bd. 49, S. 470-480, 1916.

Es resultiert hierbei eine Zentralprojektion mit Spiegelung und es ist zu zeigen, wie aus dieser Zentralprojektion auf der Projektionsfläche ein Bild des Querschnittes einer kristallographischen Flächenzone (Ebenenscharen mit einer gemeinsamen Richtung) zustande kommt einschließlich der Wiedergabe einer beschränkten Anzahl Einzelebenen (Netzebenen) jeder Schar.

Weiterhin ergibt sich, daß die Weitwinkeldiagramme der hier neu zu beschreibenden Art bei geeigneten Versuchsbedingungen in großer Annäherung eine Abbildung des Zonenquerschnittes "nach reziproken Radien", also fast winkeltreu darstellen. Da bei der praktischen Kristallanalyse aber genaueste Winkeltreue und Abstandstreue (Streckentreue) gefordert wird, besteht der größte Teil der Ausführungen aus der Darstellung der Ursachen der Bildverzerrungen, die um so stärker werden, je größer der Divergenzwinkel des reflektierten Strahlenbündels ist, und weiterhin aus der Darstellung des Entzerrungsverfahrens. Der Umfang dieser Ableitungen ist nur dadurch unverhältnismäßig groß geworden, daß zur Sicherung der Allgemeinverständlichkeit die Operationen der darstellenden Geometrie nicht als bekannt vorausgesetzt wurden.

Wenn es sich darum handelte, die Bildtransformation des Querschnittes der zu untersuchenden Zone durch die analytische Funktion des BRAGGschen Gesetzes in der Projektionsebene zu bewerkstelligen, so wäre die Aufgabe sehr einfach und führte zu einer konformen Abbildung, denn die BRAGGsche Gleichung enthält zwei derartige Funktionen, von denen die eine, die Funktion  $w = \frac{1}{z}$ ; z = d (Netzebenenabstand), die bekannteste ist. Es ist die "Transformation nach reziproken Radien". Die zweite Funktion  $w = \sin z$ ;  $z = \varphi$ (Glanzwinkel) führt ebenfalls zu konformen Abbildungen. Somit müssen auch bei gemeinsamer Anwendung beider Transformationen konforme Abbildungen entstehen.

In Wirklichkeit ist aber das Röntgeninterferenzverfahren keine physikalische Ausführung des Verfahrens der konformen Abbildung, denn es spielt sich in einem Raumgebilde ab und nicht in Ebenen, die durch komplexe Gleichungen darstellbar sind, wie es für die konforme Abbildung Voraussetzung ist. Gerade dieser räumliche Charakter des Bilderzeugungsverfahrens bietet andererseits den Vorteil, die darstellende Geometrie zur Deutung und zur Umformung der verzerrten Bilder in ihre Originalform zu verwenden. Man kann demnach das Projektionsverfahren der Röntgeninterferenzen als eine

Vereinigung von Zentralprojektion, Spiegelung und Transformation mittels analytischer Funktionen ansprechen. Auf den Umstand, daß das Projektionszentrum endliche Größe haben muß und das zu projizierende Gitterbild in einer im Verhältnis zur Größe des Originals astronomischen Entfernung entsteht, soll hier nicht eingegangen werden.

Der Erfolg der vorliegenden Arbeit ist der, diese Abbildungsarten mit rein geometrischen Mitteln auch in den Fällen in anschaulichste Form gebracht zu haben, in denen die analytischen einschließlich der rektoriellen Darstellungen entweder versagen oder sehr schwierig und unübersichtlich werden.

So ist es z. B. praktisch so gut wie unerreichbar, mit Hilfe der LAUEschen Gleichungen selbst unter günstigsten Lagebedingungen des Kristalls die Länge der Linienstücke an allen Stellen des Diagramms genau zu berechnen, geschweige denn die Form dieser Linienstücke, insbesondere die durch die endliche Spaltweite (Unschärfe des Zentrums der Strahlenkegel) verursachte rhombische Form, die in den ersten Jahren nach der LAUE-FRIEDBICHschen Entdeckung bei den LAUE-Punkten viel diskutiert wurde und keine exakte Lösung fand. Mit den zu beschreibenden Konstruktionen ergibt sich jede feinste Einzelheit dieser Art automatisch, wie die Abb. 6, 7 und 8 ohne jede Erläuterung in Evidenz zeigen. Die dick ausgezogenen kurzen Linienstücke verdanken ihre Breite und ihre schräg abgeschnittenen Enden der Breite des Strahlenzentrums und der Form des Leuchtstreifens.

Die praktisch wichtigste Errungenschaft ist aber die Leichtigkeit mit der die Rektifikation schief projizierter Diagramme ausgeführt werden kann ohne alle Rechnung nur mit den einfachsten Methoden der darstellenden Geometrie. Diese Möglichkeit macht die oft so schwierige, nicht selten sogar unmögliche Orientierung des Kristalls in eine Hauptlage gegenüber der Projektionsfläche oder der Drehachse entbehrlich. Bei der Aufnahme von Schichtliniendiagrammen, WEISSENBERG-, SCHIEBOLD- und SAUTER-Diagrammen werden an diese "Zentrierung" des Kristalls die höchsten Anforderungen gestellt. Anderenfalls geraten die an sich nahezu gleichgestalteten Punkte in unentwirrbares Durcheinander, vollends im Schichtliniendiagramm.

Grundsätzlich wäre es als weiterer Vorteil anzusprechen, daß man auf diese Weise nicht auf die Auswahl einer Schichtliniengruppe von Strukturflächen angewiesen wäre wie beim WEISSEN-

136

BERG-, SCHIEBOLD- und SAUTER-Diagramm, sondern alle, die im Bereiche der Plattenfläche liegen, auf eine Platte gleichzeitig aufnehmen könnte, ohne daß dadurch eine Verwechslung der Zugehörigkeit der Interferenzen entstände wie es im Schichtliniendiagramm unvermeidlich ist. Denn letzteres wird aus rundlichen Flecken gebildet, die sich ihrer Gestalt nach gleichen und nur durch ihre gegenseitige Lage kennzeichnend sind. Die Weitwinkeldiagramme und vollständigen Spektraldiagramme bestehen dagegen aus Spektrallinien, deren Lage, Richtung und Krümmung das Kriterium der Zugehörigkeit darstellen.

Praktisch kann die gleichzeitige Aufnahme mehrerer Flächengruppen indessen nur in beschränktem Umfang ausgenutzt werden, da die Diagramme mehrere Zonen auf einer Aufnahme ein zu kompliziertes Bild ergeben und eine erhebliche Schärfe der Linien, also eine meist nicht vorhandene Güte des Kristallwachstums voraussetzen.

## Entwicklung.

Als Verf. nach Ausarbeitung der spaltlosen Methoden, insbesondere der Schneidenmethode, die Erzeugung vollständiger Liniendiagramme in Angriff nahm, lag nur ein von DE BROGLIE<sup>1</sup>) veröffentlichtes, aber nicht diskutiertes Diagramm vor, das außer dem Hauptspektrum auch mehrere Nebenspektren erkennen ließ. Da es mit der BRAGGschen Drehkristallmethode aufgenommen war, die BRAGG selbst bis dahin nur mit ionometrischer Registrierung benutzt hatte, zeigte es die diesem Verfahren eigene Verzerrung und Versetzung der Linien der Nebenspektren, denn die fokussierende BRAGG-Methode fokussiert nur im Hauptspektrum (Äquatorspektrum), in den Nebenspektren, also im Azimut des Fokussierungskreises dagegen nicht.

Die Verzerrung äußert sich darin, daß die Spektrallinien der Nebenspektren nahezu parallel denen des Hauptspektrums verlaufen, während die dazugehörigen erzeugenden Strukturflächen (011), (012), (013), (023) usw. bis nahe 72<sup>0</sup> gegen die das Hauptspektrum erzeugende Fläche (001) geneigt sind.

Hier fehlte also aus damals noch unaufgeklärten Gründen gerade die Eigenschaft der Nebenspektrallinien, die eine winkeltreue Abbildung der sie erzeugenden Strukturflächen ermöglichte.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>) DE BROGLIE, C. R. Bd. 158, S. 177, 1914.

Verf. fand jedoch bei der Ausarbeitung der Schneidenmethode (1915) und auch bei der Lochkameramethode (1917), daß hier die Nebenspektren um so schrägere Linien aufwiesen, je stärker die zugehörigen Strukturflächen gegen die Hauptfläche (Spaltfläche) geneigt war, ferner daß die Linien der Nebenspektren im Gegensatz zu denen DE BROGLIES ebenso scharf waren wie die des Hauptspektrums und endlich, daß die Nebenspektren ohne Ausnahme in gerader Richtung verliefen.

Diese Beobachtung erst wies darauf hin, daß es praktisch möglich sein müsse, die Strukturflächen als Linien abzubilden und damit ein direktes Spurbild der Netzebene des Kristalls in winkeltreuer Lage in etwa 10<sup>9</sup>-facher Vergrößerung zu ermöglichen.

Die Entwicklung eines solchen Verfahrens erforderte neue technische Hilfsmittel und wurde daher von anderen Seiten nicht verfolgt. Das Punktdiagramm wurde aber auch deshalb allgemein bevorzugt, weil es gleichsam ein Bild der Atomanordnung des Kristalls zu sein schien. Erst in jüngster Zeit gelang es SCHIEBOLD und und SAUTER, dieses Ziel mit praktisch ausreichender Annäherung an die genaue geometrische Form unmittelbar im Diagramm zu erreichen. Es entsteht zwar auch hier kein einfaches perspektives Bild des räumlichen Kristallgitters, sondern auf einem Diagramm nur je eine "Gitterfläche" des sog. "reziproken Gitters", also eine Abbildung einer bestimmten räumlichen Gruppe von Strukturflächen.

Ein vorausgegangener Versuch dieser Art war das WEISSEN-BERGsche Goniometerverfahren. Es führt zu einer so starken Verzerrung des reziproken Gitterbildes, daß man es als solches nicht mehr erkennen kann. Da es auch apparativ erheblich schwieriger ist und sonst keinerlei Vorzüge speziell gegenüber der SAUTERschen Modifikation des SCHIEBOLDschen Verfahrens besitzt, verdient das SAUTERsche Goniometer entschieden den Vorzug.

Der erste Schritt auf dem vom Verf. eingeschlagenen Wege war 1916 die Benutzung konvergenter Strahlenbündel mit dem Projektionszentrum im Kristall, der entweder an sich sehr klein oder klein ausgeblendet wurde (Röntgenspektroskopische Methoden ohne Spalt 1. c.). Der zweite Schritt mußte die experimentelle Prüfung des BRAGGschen Gesetzes hinsichtlich seiner universellen Gültigkeit für beliebige Einfallsrichtungen gegen das Gitter bei konstantem Glanzwinkel gegen eine beliebige Gitterebene sein, denn es war damals noch keineswegs sicher, daß die Spiegelung jeder Strukturfläche sowohl ihrer Helligkeit als auch ihrer Richtung nach ganz unab-

hängig von der Richtung des einfallenden Strahles gegen die anderen (nicht in Reflexstellung befindlichen) Flächen sei. Die auf Raumkoordination bezogenen LAUEschen Gleichungen machten es nicht anschaulich, daß die geometrischen Örter der Paare von einfallenden und ausfallenden monochromatischen Strahlen Hauptschnittmantellinien von Kegeln waren, die fest an die Struktur des Kristalls gebunden sind. Sie ließen sich ohne weiteres nur auf eine fest gegebene Einfallsrichtung eines linienförmigen Primärstrahls anwenden, waren auch zunächst nur so gedacht und jedenfalls nur so bewiesen. Andererseits war das BRAGGsche Gesetz nur für eine Strukturfläche und eine Einfallsebene abgeleitet. Es bestand daher nur aus einer Gleichung. Bezog man diese auf Raumkoordinaten, insbesondere Polarkoordinaten, so stellte sie allerdings für jeden Wert der Variabeln einen Kegel von Strahlen dar, die alle zusammen eine konzentrische und koaxiale Schar bilden.

Die damaligen Bedenken gegen eine solche physikalische Deutung gründeten sich in erster Linie auf den Polarisationsfaktor, den man nicht kannte. Weiter sprachen die sehr früh beobachteten Aufhellungslinien dafür, daß sich mindestens die Helligkeit der Reflexe in gewissen, von den anderen Strukturflächen bedingten Richtungen sprungweise änderte. Schließlich war auch zu erwarten, daß die Eindringungstiefe bei schiefer Einfallsebene kontinuierliche Helligkeitsübergänge im Reflexkegel verursachte.

Die Mehrzahl der damaligen Forscher war aber in dem Glauben, daß die auf der DE BROGLIESchen Diagrammen erstmalig erschienenen Spektrallinien nur die Abbildung des Spaltes des Spektrographen seien, um so mehr als ja das von DE BROGLIE benutzte BRAGGsche Drehkristallverfahren fokussierte, wenn auch nicht wie bei optischen Spektrometern mit gleichzeitig auftretenden Strahlenbündeln, sondern mit sukzessive erzeugten (unechte Fokussierung).

Die Bedeutung der Auffindung der Methoden ohne Spalt durch den Verf. lag daher in erster Linie darin, daß mit dieser Vorstellung vom Zustandekommen der Spektrallinien gebrochen wurde. Es zeigte sich, daß ein punktförmiges Diaphragma gleichfalls Spektrallinien erzeugte, sofern man mit ihm räumliche Primärstrahlkegel ausblendete, was durch Verwendung flächenförmiger Strahlenquellen geschah. Diese nicht vorausgesehene Erscheinung erst wies den Weg zur praktischen Anwendung der BRAGGschen Gleichung auf Raumkoordination, und damit zur Realisierung von Reflexkegeln.

Obwohl sich bei der Neuheit des Grundphänomens allerlei noch ungeklärte Nebenerscheinungen in den Weg stellten<sup>1</sup>), konnte doch schon 1917<sup>2</sup>) die Geometrie der Reflexkegel und das auf ihnen beruhende "reziproke Röntgengitterbild" mit mehreren Figuren in ihren Grundzügen entworfen werden. Die Fig. 1 dieser alten Arbeit ist in Abb. 1 hier nochmals wiedergegeben.

Alle Merkmale der im folgenden näher zu beschreibenden Röntgenprojektionen nach dem "BRAGGschen Sinus-Satz der Glanzwinkelordnung" für eine gegebene Wellenlänge und Netzebenenabstand sind in dieser Figur enthalten. Es bleibt nur übrig, die Projektionsfiguren mehrerer Strukturflächen einer kristallographischen Zone



Abb. 1. Reflexkegelbild zweier Ordnungen einer Wellenlänge an einer Strukturfläche im Schnitt mit der Leuchtfläche B und der Projektionsfläche P (Ann. d. Physik 1917).

(Netzebenebüschel) von teils gleichem, teils verschiedenem Netzebenenabstand übersichtlich darzustellen, um ohne weiteres das reziproke Bild des Netzebenengitters, soweit es von dieser Zone dargestellt wird, zu erhalten. Die Kernpolygone der Projektionsfiguren sind die einfachen reziproken Gitterbilder in fast geradliniger Gestalt und in fast linearer Skala.

Es hat viele Jahre gedauert, bis die Reflexkegel hier und da zur beiläufigen Erläuterung herangezogen wurden und Glauben fanden.

Der Grund dafür ist darin zu suchen, daß alle Verfahren zur Einkristallanalyse mit monochromatischen Strahlen die Drehung des Kristalls gegenüber dem photographischen Film benutzen und daher unter dem Namen Drehkristallmethoden zusammengefaßt werden. Das Erzeugungsverfahren der Weitwinkeldiagramme ist eine typische "Festkristallmethode", jedoch nicht immer eine solche mit gemeinsamem Zentrum aller Reflexkegel, meist sogar mit Reflexregelflächen höheren Grades ohne Spitzen und ohne Rotationssymmetrie. Die

<sup>1)</sup> und außerdem der Krieg.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>) H. SEEMANN, Annalen der Physik IV Bd. 53, S. 462-491, 1917.

Anwendung der Lagenkugel ist daher im Gegensatz zu dem Hinweis EWALDS im "Handbuch der Physik" von GEIGER und SCHEEL (Bd. XXIII 2, S. 355, 1933) bei den dort abgebildeten Weitwinkeldiagrammen des Verf. nicht möglich. Ein gemeinsames Zentrum erhalten die Reflexstrahlenflächen vielmehr erst in dem vom Verf. genannten Spezialfall, daß Aufpunkt und Quellpunkt zusammenfallen oder sich sehr nahe kommen. Letzteres Verfahren benutzte nach dem Verf. erstmalig Kossel<sup>1</sup>) (1935) (nicht KRATKY, 1927, s. EWALD l. c.), um Weitwinkeldiagramme herzustellen, indem er einen Kupfereinkristall mit einem sehr dünnen Bündel Kathodenstrahlen zur Aussendung und inneren Reflexion der Röntgenstrahlen brachte.

Doch war es schon vorher LINNIK<sup>2</sup>) (1929) gelungen, die in Abb. 1 dargestellten Hyperbeln, die in den vom Verf. veröffentlichten vollständigen Spektraldiagrammen von 1917 nur in Aufnahmen von Kaliumplatincyanür annähernd ebenso "vollständig" enthalten waren (im Zentrum), mit monochromatischen Strahlen sauber aufzunehmen. Kreise und ellipsenartige Ovale fehlen diesen Diagrammen LINNIKS grundsätzlich ebenso wie den "vollständigen" des Verf. Erst die "Weitwinkeldiagramme" enthalten also vom Standpunkt der projektiven Geometrie alle überhaupt möglichen Kurven und Scharen eines Kugelsektors von nahezu 180<sup>o</sup>.

Die Bezeichnung "vollständige Röntgen-Spektral-Diagramme" war vom Verf. 1919 gewählt worden, um auszudrücken, daß nicht nur die in den BRAGGschen Einzelspektren erscheinenden Hauptspektren, sondern auch die Nebenspektren vollständig enthalten sind. Die Weitwinkeldiagramme LINNIKS entstehen rein röntgenographisch betrachtet nur durch Verlängerung der Spektrallinien. Insofern sind auch sie ein weiterer Schritt zur Erstreckung der Linien über ein ganzes Diagramm mit über 90<sup>0</sup> Bildwinkel. Die Linien der Fig. 1 von 1917 besitzen etwa die Länge der LINNIKSchen Linien (Abb. 1).

Mit diesen Ausführungen soll nicht gesagt werden, daß eine möglichst große Länge der Linien für die Kristallanalyse notwendig oder auch nur vorteilhaft sei. Im Gegenteil, eine Beschränkung in bestimmten Richtungen auf das Maß der "vollständigen Spektral-Diagramme", die sich durch Abblenden leicht erreichen läßt, dürfte von Fall zu Fall zu erwägen sein.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>) W. KOSSEL, V. LOEK und H. VOGES, Zschr. f. Physik Bd. 94, S. 139-144, 1935. - W. KOSSEL, Annalen der Physik Bd. 26, S. 533-553, 1936.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>) W. LINNIK, Nature Bd. 124, S. 946, 1929. Berichte XXXV, 2.

Dagegen ist es eine wesentliche Voraussetzung für das Gelingen der Strukturanalyse nach dem hier zu beschreibenden Verfahren, daß es mit Sicherheit möglich sein muß, die vorhandenen Linienstücke zu ganzen Hyperbelästen zu ergänzen. Hierauf wurde vom Verf. hingewiesen, ausführlicher erst 1930<sup>1</sup>). Die Aufgabe besteht demnach nicht darin, wie man aus den zitierten Sätzen schließen muß, ein Punktdiagramm in Beziehung zum Kristallgitter zu bringen und an jeden Punkt einen Index zu schreiben, sondern ein Liniendiagramm von solcher Vollständigkeit entweder ganz zu erzeugen oder graphisch zu ergänzen, daß der Querschnitt einer Zone von Netzebenenscharen in  $10^{10}$  facher Vergrößerung abgebildet ist und dann für Geübte einer Indizierung kaum mehr bedarf.

# Aufnahmeverfahren und Analyse der Liniendiagramme.

Die Analyse eines aufgenommenen "vollständigen Spektral-Diagrammes" beginnt mit der Vervollständigung der Linienstücke zu großen Hyperbelbogen- und -scharen, wie sie in den Abb. 3, 4, 7, 8, 9 dargestellt sind und in den Röntgenaufnahmen Abb. 2 auftreten. Damit ist das vollständige Röntgengitterbild gefunden. Es ist das hyperbolisch verzerrte reziproke Gitterbild einer kristallographischen Zone des Kristalls. Sodann wird diese Verzerrung durch einfache Übertragung in ein hyperbolisches Polarkoordinatennetz beseitigt. Diesem zweiten Schritt folgt als letzter das Ausmessen der Abstände der gewonnenen Linien zur Absolutbestimmung der Gitterkonstanten und die Abstandsverhältnisse der den Basisatomen zuzuordnenden Scharen paralleler Hyperbeln bzw. Geraden im rektifizierten reziproken Gitterbild.

Aus den Abb. 3, 4 und 5 sind die geometrischen Grundlagen des Aufnahmeverfahrens ohne analytische Hilfsmittel erkennbar. Abb. 3 und 4 zeigen je eine röntgenstrahlende Fläche A, von denen monochromatische Strahlen konzentrisch auf einen Punkt des Kristalls K (oder eine punktförmige Kristallfläche) fallen, an diesem reflektiert und auf die photographische Platte P projiziert werden. Wie aus Abb. 1 ersichtlich, liegen alle Interferenzrichtungen hierbei auf Kegelmänteln, die die beiden parallelen Ebenen A und P in so viel Hyperbeln schneiden als Reflexionswinkel vorhanden sind, im Fall der Abb. 1 in 2 Hyperbelpaaren in den Abb. 3 und 4 in  $2 \times 3$ und  $2 \times 5$  Hyperbelästen auf jeder Ebene. Da die Strahlung mono-

142

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>) H. SEEMANN, Annalen der Physik Bd. 6, S. 793-823, 1930.

chromatisch angenommen wird, stellen die verschiedenen Reflexkegel die Reflexionsordnungen dar. Die Achsen der Kegel stehen alle senkrecht auf OC und laufen in Abb. 3 den eingetragenen Hauptachsen OB, CD und OK, CE parallel. Sie sind nicht gekennzeichnet. Die technischen Mittel, um eine derartige Abblendung des Strahlenzentrums in einem Punkt des Kristalls zu erzielen, werden weiter unten behandelt.

Der Kristall ist rein schematisch zusammengesetzt dargestellt aus zwei Strukturflächen mit verschiedenen Gitterkonstanten d und d'. Nur diese beiden Flächen sind reflektierend gedacht.



Abb. 2. Weitwinkeldiagramm von ZUCKER mit Cu-K-Strahlung, ohne Abblendung der durchfallenden Primärstrahlen in der Anordnung der Abb. 3 und 4 aufgenommen. Die Aufnahme enthält außer dem Kernpolygon (Abb. 9, Mitte) des monoklinen Kristalls noch eine Anzahl Hyperbeln einer Scharengruppe, deren Zentrum außerhalb des Diagramms liegt, entsprechend den schief projizierten Gruppen der Abb. 14 und 15, untere Hälften.

Dann entstehen die beiden Scharen von Hyperbeln auf P, deren Scheiteltangenten den beiden dargestellten Strukturflächen des Kristalls parallel laufen. In Abb. 3 sollen die beiden Strukturflächen unter  $90^{0}$  gegeneinander geneigt sein, so daß die beiden halben Hauptachsen CE und CD der beiden Scharen senkrecht aufeinander stehen. In Abb. 4 sind sie um  $45^{0}$  gegeneinander geneigt.

Man erkennt in beiden Abbildungen gut, daß die Strukturflächen mit kleinem d Hyperbeln in großen Scheitelabständen erzeugen und umgekehrt. Das Verhältnis beider ist ungefähr 3:5.

Denkt man sich nun statt der im ganzen leuchtenden Fläche A nur den Streifen OB leuchtend, so entsteht auf P ein Bild von ihm — etwa auf einem Leuchtschirm —, dessen Umrisse den Umrissen



Abb. 3. Schnittbild von 2 Reflexkegelscharen monochromatischer Röntgenstrahlen an zwei senkrecht zueinander stehenden Struk-

turflächen eines punktförmigen Kristallelementes von K mit dem willkürlichen Gitterkon-

stantenverhältnis d:d'=3:5 und der Zonenachse  $OC\_P$ . Der Reflexpunkt des Kristalls halbiert OC. Die Ebene A ist als Ort aller das Reflexbild auf P erzeugenden Leuchtpunkte gedacht. Die nicht eingezeichneten beiden Achsen der beiden Kegelscharen stehen im

Reflexpunkt von K senkrecht OC und sind parallel OB und OK. Hieraus ergibt sich, daß die Schnittfiguren der Primärstrahlkegel mit der Ebene A den Schnittfiguren der Reflexkegel mit P kongruent sein müssen, so daß sie durch Orthogonalprojektion miteinander zur Deckung gebracht werden können. Bei dieser Deckoperation fallen aber nur die durch schwarze Flecke und punktierte Strahlen gekenzeichneten Leuchtpunkte auf den Achsen OB und OK mit den von ihnen erzeugten Reflexpunkten auf den Achsen CD bzw. CE zusammen. Alle übrigen Paare von Leucht- und Reflexpunkten liegen spiegelbildlich zu OBDC und OKCE. Die Anwendung dieser in Abb. 7 und 8 näher beschriebenen Symmetrien ermöglicht eine einfache Konstruktion aller Reflexpunkte nach Lage und Form bei beliebiger Wahl der Leuchtflächenstücke auf A.

des Leuchtstreifens kongruent sind. Der Inhalt des Bildes besteht aber nur aus den kongruenten Abbildungen derjenigen Hyperbelbogenstücke des Streifens OB, deren Strahlen längs der Reflexkegel-

mäntel am Kristallpunkt reflektiert werden. Die ganze übrige Fläche von OB erscheint in ihrem Bilde auf P dunkel. Ebenso wird OK in CE abgebildet.

Läßt man nun den leuchtenden Streifen auf A um O rotieren, so rotiert das Bild CD synchron mit gleicher Winkelgeschwindigkeit mit. Hierbei bleiben aber die Abstände der dick gezeichneten Schnittpunkte von OB und CD mit den Hyperbeln nicht konstant, wie ohne

Abb. 4. Schnittbild von Reflexkegelscharen wie Abb. 3 an zwei unter 45° gegeneinander geneigten Strukturflächen mit d: d' = 3:5. Auch hier werden nur die auf den Achsen der Hyperbelscharen liegenden Leuchtpunkte von A auf die ihnen parallelen Achsen von P reflektiert und fallen Orthogonalprobei zusammen. jektion Da aber die (allein leuchtend gedachte) Halbachse OB der einen Schar auch die andere Schar schneidet, so projiziert sie eine doppelte Reihe von Reflexen auf P, die eine, OB, ortho-



gonal nach CD und die andere schief nach CE. Die zusammengehörigen Paare von Leuchtpunkten und Reflexpunkten sind durch runde und eckige Flecke gekennzeichnet. Der Strahlengang ist punktiert. Die Auffindung der Punktlagen erfolgt in der Orthogonalprojektion nach Abb. 7 und 8. Letztere entspricht Abb. 4, ist aber versehentlich seitenverkehrt ausgeführt.

weiteres klar ist. Die Schnittpunkte wandern auf den Hyperbeln und treffen sukzessive die Schnittpunkte der Hyperbeln miteinander.

In diesen Punkten erzeugt jeder der von A auf K fallenden Strahlen nicht nur den einen senkrecht unter seinem Ausgangspunkt liegenden Fleck auf P, sondern je einen zweiten weit entfernt liegenden der zweiten Hyperbel, die beim Wandern gekreuzt wird.

Diese Komplikation möge zunächst dadurch ausgeschaltet werden, daß eine die ganze Fläche P bedeckende Metallplatte, die nur

146

einen schmalen Schlitz dicht oberhalb CD besitzt, synchron mit dem Leuchtstreifen OB rotiert. Dann können in jedem Augenblick nur die Punkte der Hyperbeln auf P entstehen, die vertikal unter dem rotierenden Leuchtstreifen liegen.

Legt man, wie es in Abb. 3 geschehen ist, den Leuchtstreifen einmal nach OB und einmal nach OK senkrecht zu den Strukturflächen, so entstehen auf P zwei geradlinige Reihen CD und CE von Reflexpunkten, die genau das reziproke Gitterbild<sup>•</sup>der beiden dargestellten Strukturflächen des Kristalls bildeten, wenn die Abstände der Flecke auf CD bzw. CE voneinander gleich groß wären. Sie sind es nicht, weil sie den Tangenten der Glanzwinkel proportional sind und nicht den Sinus, wie das BRAGGsche Gesetz aussagt. Nur in der Nähe von C ist  $\sin \varphi$  und tg $\varphi$  annähernd einander proportional. Hier also kommt das Röntgenbild mit beliebiger Genauigkeit dem reziproken Punktgitter des Kristalls nahe.

Abb. 5 zeigt die Abweichung in graphischer Darstellung. Der obere Teil der Zeichnung ist das Gitter eines einfachen kubischen Kristalls, in das die Flächen (011) und (012) eingetragen sind. Die Gitterkonstanten d' bzw. d dieser beiden Flächen sind die sinus der Winkel v' bzw. v, die die Fläche mit der Kubusfläche (001) bilden, wenn  $d_0 = 1$  gesetzt ist.

Der untere Teil der Abb. 5 stellt die Strahlenbündel der reflektierten Strahlen dar, die gemäß der Anordnung der Abb. 4 auf der Projektionsebene GCD entsteht, wenn das Kristallgitter in Abb. 5 aus der Zeichenebene um HR als Achse um 90<sup>°</sup> herausgedreht wird und in K mit dem Strahlenbündel zur Berührung gebracht wird. Auch die Strahlenbündel links und rechts von KC sind in Abb. 5 in die Zeichenebene "umgelegt" worden.

Man erkennt nun leicht die Beziehungen des BRAGGschen Gesetzes bei Projektion der Reflexe auf eine Ebene, wenn man sich die räumliche Anordnung nach Abb. 4 klar macht. Dort hat man sich je eine monochromatisch leuchtende Linie OB und eine ebensolche von O nach der vorderen rechten Ecke von A zu denken, die bei der oben beschriebenen Schlitzblendenanordnung auf P nur die beiden Reflexpunktreihen CD bzw. CG (vgl. Abb. 5) entstehen lassen. Die Strahlen rechts um KC in Abb. 5 entsprechen in Abb. 4 den beiden ersten punktierten Linien von K nach den Schnittpunkten der beiden C am nächsten liegenden Hyperbeln auf CD. Die drei links von KC liegenden Strahlen in Abb. 5 sind die in Abb. 3 nicht eingetragenen Strahlen von K nach den 3 ersten Hyperbelscheiteln auf CG.

Abb. 5 läßt übersichtlich erkennen, daß laut BRAGGschem Gesetz

$$\mathbf{d'}: \mathbf{d} \Longrightarrow \sin \mathbf{v'}: \sin \mathbf{v} \Longrightarrow \sin \varphi' \quad \sin \varphi$$

und weiterhin den Zusammenhang von  $\sin \varphi'$  und  $\sin \varphi$  mit den experimentell nach Abb. 4 ermittelten Scheitelabständen a und a' der Hyperbeln, der hier im Mittelpunkt der Betrachtung steht.

Die Scheitelabstände der Hyperbeln der verschiedenen Ordnungen der reflektierten Wellenlängen sind nicht proportional den sin $\varphi$  und somit auch nicht den sinv, sondern sie sind die Tangenten von den Winkeln  $\varphi$ ,  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$ ,  $\varphi_1'$ ,  $\varphi_2'$  usw., deren sinus sich wie 1:2:3:4. verhalten.

Abb. 5. BRAGGSches Gesetz in graphi-scher Darstellung. In dem oberhalb HR dargestellten Kristallgitter sind zwei senkrecht zur Zeichenebene zu denkende Strukturflächen durch ausgezogene Parallele hervorgehoben und die zugehörigen Gitterkonstanten d und d'eingetragen. Die Fläche mit dem größeren d'erzeugt G kleinere Glanzwinkel  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$ ,  $\varphi_3$ deren sinus sich wie



1:2:3:verhalten. Die Fläche mit dem kleineren d erzeugt größere Glanzwinkel  $\varphi_1', \varphi_2'$ deren sinus sich ebenfalls wie 1:2:3: verhalten. Auf eine ebene photographische Platte GD werden aber nicht die sinus, sondern die Tangenten a projiziert, die nicht proportional den sinus, sondern hyperbolisch wachsen. Daher die hyperbolische Verzerrung der Röntgenprojektion des Gitters. Um die drei Teile der Abb. 5 in die räumliche Lage der Abb. 3 und 4 zu bringen, muß das Gitter um HR als Achse um 90° aus der Zeichenebene herausgedreht werden, die Ebene KCG um 45°, die Ebene KCD um 261/2°, letztere beiden um KC = b als Achse, die mit HR in der Zeichenebene bleibt. Bei den Schiebold-Sauter-Goniometern dagegen liegt der Kristall bei Aufnahme der Äquatordiagramme so wie in Abb. 5. GD bedeutet dann die um CK als Achse rotierende Scheibe, die nur durch einen in der Zeichenebene von C nach D reichenden Schlitz von den reflektierten Strahlen getroffen werden kann. Der Kristall rotiert synchron mit der Scheibe um eine durch K senkrecht zur Zeichenebene stehende Achse. Das linienförmige Primärstrahlbündel fällt in der Richtung  $K \rightarrow C$  durch den Kristall hindurch.

Die Tangenten findet man also nach der bekannten geometrischen Beziehung zwischen sinus und tg, die aus den Tabellen der Kreisfunktionen unmittelbar abgelesen werden kann:

1) 
$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\sin^2 \varphi} - 1}}$$

Gleichung 1) ist identisch mit der Funktion der Höhe h eines rechtwinkeligen Dreiecks zur größeren Kathede a, wenn die kleinere Kathede b = 1 gesetzt wird:

2)  $\frac{1}{a^2} - \frac{1}{h^2} = 1$ 



Abb. 6. Konstruktion einer einzelnen Reflexhyperbel aus einem Diagramm, das ein kurzes Reflexbogenstück L und die Primär $projection L_0 des Leuchtfleckes B$ enthält, mit Hilfe der Orthogonalprojektion der Raumfiguren der Abb. 3 und 4 auf die Ebene P. 0 = Spitze des Reflexkegels (Kristallpunkt).  $L_0 = direkte Zentral$ projektion des Primärstrahlbündels BO auf die Projektionsfläche P (Abb. 3, 4). L = Reflexprojektion des reflexfähigen Teils von B, der auf der Schnitthyperbel des Reflexkegels liegt. Die Breite des Bogenstückes L ist

gleich der Breite der Parallelprojektion des reflektierenden Kristallstückchens (und  $\neq$  Kegelachse). aa = Hauptachse der Schnitthyperbeln, b = halbe Nebenachse der Schnitthyperbel = Abstand des Kristalls von der Projektionsebene.  $\varphi$ =Asymptotenwinkel der Schnitthyperbel = Glanzwinkel (Reflexwinkel).  $\pi/2 - \varphi$ = halber Kegelwinkel. LB  $\neq$  2b. Dieselbe Aufgabe mit Hilfe mehrerer Reflexe einer streifenförmigen Leuchtquelle siehe Abb. 7 und 8.

Gleichung 2) hat die Form der Mittelpunktgleichung einer gleichseitigen Hyperpel mit den Halbachsen 1, wenn

$$x = \frac{1}{h}$$
 und  $y = \frac{1}{a}$ 

gesetzt wird. Letztere Inversion ändert an dem hyperbolischen Zusammenhang von a und h nichts, da sie bei beiden Variablen erfolgt und im Resultat lediglich deren Vertauschung bewirkt, die in Gleichung 1) schon ausgeführt ist. Die Skalen der Hyperbelscheitel auf den Radiusvektoren CD, CE der Abb. 3 und CD, CG der Abb. 4 sind daher hyperbolisch. Es bedarf keines besonderen Beweises,

daß diese Skalen für sämtliche Radiusvektoren der ganzen Abb. 3 und 4 hyperbolisch sind, denn die Kegelschnitte (Hyperbeln) der Abb. 3 und 4 teilen die Radiusvektoren nach bekannten Gesetzen der Geometrie (harmonische Schnitte) in hyperbolische Abschnitte, die sich verhalten wie  $a_1 : a_2 : a_3$  usw. in Abb. 5.

Es handelt sich also um einfache Beziehungen der Kegelschnitte im Raum und in der Ebene. Der Abstand KC der Kegelspitzen von der Projektions- bzw. Kegelschnittebene P hat die Länge der halben



Abb. 7. Orthogonalprojektion der Leuchtebene A auf die Ebene P der Abb. 3 und 4 (vgl. zunächst Abb. 8, untere Hälfte). Wie in Abb. 6 projiziert der Leuchtstreifen AO durch Spiegelung am Kristall bei O von den Stellen 1, 2, 3-8 aus, die von den Hyperbeln geschnitten werden, auf allen entgegengesetzten Ästen der gleichen Hyperbeln die spiegelbildlich ähnlichen Reflexstreifen  $1_a, 3_a, 5_a, 6_a, 8_a$  einerseits und  $2_b, 4_b, 7_b$  andererseits. Wenn der Leuchtstreifen auf den Mittelpunkt zuführt oder in bestimmtem Abstand an ihm vorbeiführt, so gilt jeweils dasselbe auch von den Reflexreihen. Die direkte Zentralprojektion OB des Leuchtstreifens OA auf das Diagramm teilt jeweils den Winkel zwischen den Reflexreihen so, daß die Scharachsen die Winkelhalbierenden von  $\measuredangle AO3_a$ einerseits und  $\geqq AO2_b$  andererseits sind.

Nebenachse b. Alle Hyperbein der Abb. 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 haben also gleich große Nebenachsen und sind hierdurch als Scharengruppe gekennzeichnet. Die einzelnen Scharen unterscheiden sich voneinander nur durch ihre verschiedene Achsenrichtung und Scheitelabstände. Abb. 5 und 7 (oben) zeigt, wie die Abstände graphisch gewonnen werden können, wenn b und  $a_1$  gegeben ist.



Abb. 8. Untere Hälfte: Orthogonalprojektion der Raumfigur Abb. 4 auf die Projektionsebene P, jedoch mit anderer Lage des Lichtstreifens, der auf CG von Abb. 4 zu denken ist und in der Diagonale von C nach bl schief reflektiert wird. Im übrigen wie Abb. 7. — Obere Hälfte: Konstruktion der Scheitelabstände a und Asymptoten einer Reflex-Hyperbelschar aus dem Abstand b Kristallfilm (gemeinsame halbe Nebenachse aller Hyperbeln einer Schar) und dem Glanzwinkel bzw. tgφ. Die hyperbolische Skala, wie sie in allen Abbildungen auftritt, wird durch die gewonnenen Werte a<sub>1</sub>, a<sub>2</sub>, a<sub>3</sub> dargestellt, wenn h die lineare Längeneinheit des Radiusvektors ist.

Dieser gemeinsame Parameter b der ganzen Scharengruppe gibt nun ein gutes Mittel zur Darstellung der hier zu behandelnden Be-

ziehung zwischen dem Kristallgitter Abb. 5 und reziprokem Gitterbilde in die Hand.

Läßt man b (den Abstand KC der projizierenden Strahlenkegelspitzen von der Projektionsebene der, bzw. die halbe Nebenachse, Hyperbeln) wachsen, während man die Hauptachsen  $a_1$ ,  $a_1$ ,  $a_1$ , " usw. der Hyperbeln konstant hält, so verlieren die Hyperbeln mehr und



Abb. 9. Reziproke hyperbolische Abbildung der Hauptzone eines kubischen Kristalls, bestehend aus den beiden Gruppen (001), (002), (003) und (011), (022), (033), (044) und (055). Die gemeinsame halbe Nebenachse b aller Hyperbeln ist vom Zentrum aus eingetragen. Die 4 Achsen der 4 Scharen sind der Übersichtlichkeit halber fortgelassen. Die Reduktion der Figur erfolgt nach Abb. 10 oder 11 durch Umzeichnen.

mehr ihre Krümmung und rücken gleichzeitig näher zum gemeinsamen Mittelpunkt bis ihre Abstände  $a_2$ ,  $a_3$ ,  $a_4$  usw. ein ganzes Vielfaches von  $a_1$  sind, bis also die Skala des Radiusvektors linear wird.

Schon in der Abb. 9 ist erkennbar, daß die Kernfiguren fast geradlinig sind und unmittelbar das reziproke Liniengitterbild des Kristalls darstellen. Das reziproke Punktgitterbild ergibt sich hieraus von selbst als Lote vom Mittelpunkt auf die geraden oder fast geraden Linien.

Mit Hilfe dieser Anschauung ist es nun leicht die Hyperbeln der Kristalldiagramme zu verstehen und auf das Gitterbild zu reduzieren. Es ist nichts weiter nötig als das hyperbolische Polarkoordinatennetz auf ein lineares zurückzuführen. Dann werden aus allen Hyperbeln gerade Linien, die in Scharen äquidistanter Par-



Abb. 10. Reduktion eines hyperbolisch verzerrten Quadrates aus Abb. 9 durch Umzeichnen des in ein hyperbolisches Polarkoordinatennetz eingetragenen Hyperbelblattes in ein lineares (gewöhnliches) Polarkoordinatennetz.



Abb. 11. Reduktion zweier Hyperbelbogenblätter aus Abb. 9 durch Umzeichnen mit Hilfe von hyperbolisch und linear geteilten Radiusvektoren.

allelen auftreten. Die Abstandskonstanten dieser Scharen sind umgekehrt proportional den Gitterkonstanten der Strukturflächen der das Diagramm erzeugenden Kristallzone. Die Lote vom Mittelpunkt auf die einzelnen Scharen sind also unmittelbar die Vektoren des reziproken Gitterbildes.

Die Reduktion der Hyperbelscharengruppen auf ihren Mittelpunkt ist äußerst einfach. Sie besteht darin, daß man die Schnittpunkte der Kurven auf ihren Radiusvektor zum Mittelpunkt verschiebt um den Differenzbetrag des hyperbolischen Vektors zum linearen Vektor, wie es in Abb. 10 und 11 anschaulich erkennbar ist. Der eine Radiusvektor ist linear geteilt, der andere hyperbolisch gemäß Abb. 5. Aus den in Abb. 10 und 11 gezeichneten

Hyperbelblättern werden hierdurch einfache Quadrate und reguläre Polygone. Das Bogen-Achtspitz der Abb. 11 ist der Abb. 9 entnommen.

## Partielle Weitwinkeldiagramme.

Die bisherigen Ausführungen beziehen sich nur auf Liniendiagramme mit so langen Linien, daß diese mehrere Schnittpunkte miteinander haben, also um "Weitwinkeldiagramme", die mit großen leuchtenden Flächen wie in Abb. 3 und 4 erzeugt werden, gleichgültig, ob die Leuchtflächen tatsächlich eine große strahlende Fläche bildet oder durch eine schmale bewegte Leuchtfläche ersetzt wird. Die Abb. 2 und 4 zeigen, wie kompliziert ein solches Diagramm durch die große Anzahl möglicher Linien wird, obwohl die von schwach besetzten Strukturflächen stammenden Linien so gut wie unsichtbar bleiben.

Es war daher von Anfang an das Bestreben des Verf., die Linien für die Zwecke der Strukturanalyse nicht in solcher Länge zu erzeugen, daß allzuviele Schnittpunkte auftreten. Dieses Ziel war in den "vollständigen Spektraldiagrammen" von 1918 verwirklicht. Hier bildeten die Richtungen der kurzen hyperbolisch gekrümmten Spektrallinien (gegebenenfalls auch unter Beachtung des kontinuierlichen Spektrums) sehr leicht erkennbare Kriterien für die Zugehörigkeit der Interferenzen im Gegensatz zu den Fleckendiagrammen, denen dieses Merkmal fehlt.

Es soll nunmehr behandelt werden, wie man sich aus diesen "Hyperbelbogendiagrammen" (statt "vollständige Spektraldiagramme") das wirklich vollständige Hyperbelscharensystem der Spektrallinien, also die Weitwinkeldiagramme, konstruieren kann, um dann in der oben beschriebenen einfachen Koordinatentransformation das reziproke Gitterbild zu gewinnen.

Hierzu ist Abb. 6 eine Hyperbel aus dem Diagramm herausgegriffen. Auf die Hyperbel ist nach Abb. 3 oder 4 die Leuchtfläche A orthogonal projiziert samt dem Reflexpunkt K des Kristalls und den zugehörigen erzeugenden einfallenden und reflektierten Strahlen. Da in Abb. 3 und 4 der Abstand der beiden parallelen Ebenen A und D von K gleich groß ist, nämlich gleich der halben Nebenachse b sämtlicher konzentrischer Scharen, so sind die "erzeugenden Leuchthyperbelscharen" auf A kongruent den erzeugten auf P. Bei der orthogonalen Projektion fallen sie also zusammen. Dann ergibt sich das sehr einfache und instruktive Bild der Abb. 6.

Der Mittelpunkt der Hyperbel ist der Reflexpunkt des Kristalles und OK ist die Spur der reflektierenden Netzebeneschar. B sei ein auf der Fläche A (Abb. 3 und 4) liegender Leuchtfleck. Aus seinem Innern vermögen dann nur die auf dem kurzen Hyperbelbogen liegenden Leuchtpunkte sich durch Spiegelung in Punkt O nach L auf P zu projizieren. L hat genau dieselbe Länge und Breite wie der Bogen in B und liegt spiegelbildlich zu B mit aa als Symmetrieachse. Wenn der Kristall gut durchlässig ist, entsteht bei Lo ein Kreisfleck geometrisch gleich B. In diesem erscheint der Auslöschungsbogen L<sub>o</sub> von genau derselben Gestalt wie L, aber spiegelbildlich zu KO als Symmetrielinie, als helle Linie. Die gestrichelten Verbindungslinien sind die Projektionen der einfallenden (rechts von aa) und der reflektierten und durchfallenden Strahlen (links von aa). Die Linie OB hat keine physikalische Bedeutung. Der Winkel dieser gestrichelten Projektionen mit OK ist nicht der Glanzwinkel  $\varphi$ . Dieser ist vielmehr gleich dem halben Asymptotenwinkel NOK, denn die Asymptoten sind die Projektionen der Seitenlinien des Reflexkegels (Abb. 1) auf P. Um die Asymptoten zu finden, trägt man die als bekannt vorausgesetzte Halbachse b (Abstand Kristall K--Platte P) ein.

Nun zur praktischen Auswertung eines experimentell genauen Diagramms. Die Aufgabe lautet: Wie konstruiert man zum Zwecke der Gewinnung des reziproken Vektors a die Hyperbel der Abb. 6, wenn nur bekannt ist, daß der Kristall senkrecht über O im Abstand b liegt und irgendwo oberhalb K eine monochromatische Strahlenquelle von solcher Größe aufgestellt ist, daß sie einen Reflexkegel schneidet und demnach einen kurzen Hyperbelbogen auf der Projektionsfläche entwirft. Sie braucht hierbei, wie oben ausgeführt, nicht auf A zu liegen, sondern gegebenenfalls ganz nahe oberhalb K (Abb. 3 und 4).

Diese Aufgabe ist nur dann genau lösbar, wenn der Leuchtfleck eine scharf begrenzte Form hat, etwa durch eine Kreis- oder Röhrenblende begrenzt ist, die voll durchstrahlt ist, so wie es B in Abb. 6 darstellt. Dann entsteht nicht nur der Hyperbelbogen L auf A, sondern auch die als schwarzer Kreis mit Aufhellungsstreifen erscheinende Projektion von B bei  $L_0$ , die als gestrichelter Kreis mit rechteckigem Streifen dargestellt ist. Die drei Punkte O,  $L_0$  und L bestimmen das Achsenkreuz der Hyperbel und die Koordinaten x und y des Punktes L. Aus der Mittelpunktsgleichung der Hyperbel

3) 
$$\frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} = 1$$

## Zur Optik der Reflexion von Röntgenstrahlen an Kristallen. 155

kann man dann a berechnen und damit die Asymptotenwinkel  $\varphi$  gewinnen. b  $\cdot \sin \varphi$  ist der gesuchte reziproke Vektor der die Hyperbel erzeugenden Strukturfläche (Abb. 5).

Wenn der Primärfleck  $L_o$  infolge unscharfer Begrenzung der Eintrittsblende nicht genau ausmeßbar ist oder wegen Undurchlässigkeit des Kristalls überhaupt nicht oder nur teilweise auf der Platte erscheint, so muß die Strahlenquelle so groß gewählt werden, daß mindestens 2 Hyperbelbogen derselben koaxialen Schar erzeugt werden. Die Strahlenquelle soll demnach möglichst in Richtung der Hauptachse eine größere Ausdehnung besitzen, sei es, daß sie an sich groß gewählt oder während der Exposition in dieser Richtung bewegt wird. Man erhält dann mindestens 2 Bogen von Reflexkegelschnitten verschiedener Ordnungen der benutzten Wellenlänge.

Aus diesen Bogen läßt sich die Hyperbelschar aber nur dann genau konstruieren, wenn die Schärfe und Länge der Bogen ausreicht, um in ihrer Mitte Tangenten anlegen zu können. Das wird bei Benutzung der bisher beschriebenen schmalen Leuchtstreifen zu ungenau sein. Man muß daher die leicht erkennbaren Schnittpunkte zweier Hyperbelscharen zu Hilfe nehmen, was um so vorteilhafter ist, als diese Schnittpunkte die Ecken eines der in Abb. 9 und 10 dargestellten Bogenpolygone und nach deren Reduktion auf lineare Polarkoordinaten die Ecken der reziproken Gitterfiguren sind.

Ein zweiter Weg besteht darin, die Strahlenquelle wie oben scharf zu begrenzen und ihr eine am besten lineare Gestalt zu geben mit der Richtung eines Vektors des Hyperbelscharnetzes (Abb. 3, 4 und 7).

Diese Bestrahlungsmethode wurde bei den vollständigen Spektraldiagrammen des Verf. angewandt und führt in der Darstellung der Abb. 3, 4 und 6 zu der Projektions-Abb. 7. Hier ist der bandförmige Leuchtstreifen aus Gründen der projektiven Darstellung wieder auf A gedacht, kann aber bei den Röntgenaufnahmen auch an beliebiger Stelle zwischen A und K liegen und dann entsprechend kürzer sein. In Abb. 7 ist er gestrichelt gezeichnet und reicht von A bis O. Die Verlängerung OB stellt die direkte Projektion des Leuchtstreifens durch das Diaphragma am Kristall hindurch auf der Platte P dar. Sie möge zunächst für die Orientierung im Diagramm nicht benutzt werden, da sie unter Umständen nicht (undurchlässiger Kristall) oder unvollkommen auf der Platte erscheint.

Bei beliebiger Lage des Streifens AO zu den Hyperbelachsen wird vertikal unterhalb OA auf P keine Spektrallinie erzeugt. Dies ist vielmehr nur der Fall, wenn der Leuchtstreifen parallel einer der Hyperbelscharachsen liegt, sich also auf diese orthogonal projiziert. Dieser Spezialfall, der durch künstliches Abblenden hergestellt werden kann, wie eingangs S. 144, Absatz 2, beschrieben, ist nochmals in Abb. 8 dargestellt.

Zunächst zu dem allgemeinen Fall von Abb. 7.

Es entstehen 2 Bogenreihen, die zum Mittelpunkt der Scharen Sie bilden je eine Reihe Ordnungen derselben Wellenhinführen. länge in hyperbolischer Skala des Radiusvektors, der durch die Mitten der Bogen hindurchgeht. Die Richtungen der Bogen geben ohne weiteres die Zugehörigkeit zu ihren Hyperbeln an, sofern nur die Bogenstücke nicht zu kurz gewählt werden, also der Leuchtstreifen nicht zu schmal. Es ist Aufgabe der experimentellen Praxis, das Optimum an Länge zu finden. Da in der Praxis nur solche Hyperbeln in Frage kommen, deren Achsen die Normalen dicht besetzter Netzebenen bilden, ist eine große Meßgenauigkeit der Bogentangenten nicht erforderlich. Sollte aber dennoch Unklarheit über die Zugehörigkeit bestehen, etwa wegen schlechten Wachstums des Kristalls, so bleibt der vollkommen sichere Weg übrig, den Leuchtstreifen durch das Kristalldiaphragma auf die Platte zu exponieren. Ist der Kristall sehr durchlässig, so wird zur Vermeidung von Überexposition und Unschärfe ein absorbierender Schirmstreifen eingeschaltet. Ist er undurchlässig, so wird bei herausgenommenem Kristall kurz exponiert. Mit dieser primären Projektionsspur ist die Aufgabe der Konstruktion der Hyperbeln so einfach und klar wie oben bei Abb. 3 und 4 beschrieben. Voraussetzung für genaue Bestimmung ist die genau radikale Lage der Projektionsspur und die gute Zonenzentrierung des Kristalls senkrecht zur Platte.

Die zuletzt beschriebenen Verfahren stellen die Methode der vom Verf. ursprünglich "vollständige Spektraldiagramme" später "Zonendiagramme" genannten Projektionen dar. Man kann sie noch vorteilhaft abwandeln, indem man statt eines gleich breiten Leuchtstreifens einen sektorförmigen wählt. Dann werden die dem Mittelpunkt fern liegenden Hyperbelbogen bedeutend länger als die innen liegenden, wie Abb. 12 zeigt. Verbindet man die Endpunkte dieser Bogen durch zwei Radiusvektoren OU und OW und reduziert ihre hyperbolischen Abstände 1', 2', 3', 4', 5' in obiger Weise auf lineare 1, 2, 3, 4, 5, so werden die Bogenscharen einander parallele Ge-

rade und bilden nunmehr unmittelbare Stücke des gesuchten reziproken Strichgitters, die sich zusammen mit dem der anderen Hyperbeln leicht zum vollständigen Gitter ergänzen lassen.

Die keilförmige Gestalt der Leuchtfläche ist zwar experimentell leicht und scharf begrenzt herstellbar, aber es ist auch bei geeigneter Bewegung eines Leuchtfleckes nicht einfach, alle Teile gleich hell strahlen zu lassen. Der Vorteil dieser Art Projektion ist der, daß die außen liegenden Hyperbelbogen so groß ausfallen, daß man ihre Tangenten oder Endpunkte genau feststellen kann und damit die Richtung der linear reduzierten Gittergeraden nach Abb. 10 und 11, während die innen fast punktförmigen Hyperbelbogen der Abb. 12 nur zur Zählung der Ordnungen und zur Intensitätsmessung mit verwendet werden.

Eine wesentliche Abwandlung des Verfahrens der vollständigen Spektraldiagramme ist die oben angedeutete Ausblendung der senkrecht unter dem Leuchtstreifen liegenden Hyperbelbogenscharen mit Hilfe einer Blende von genau gleicher Gestalt wie die Projektionsfigur auf P und



Abb. 12. Reduktion von außerachsialen Bogenstücken 1', 2', 3', 4', 5' einer Reflexhyperbelschar in Gittergerade 1, 2, 3, 4, 5 senkrecht zur Achse.

Abb. 3 und 4 erscheint, und synchrone Rotation des Leuchtstreifens und der Spaltblende um das Lot in K auf P (Abb. 3 und 4) als Achse.

Diese Methode ist die einzige, bei der man das reziproke Gitterbild der in Abb. 3 und 4 dargestellten Zone für sich allein auf die Platte bekommt und auch nur dann, wenn der Leuchtstreifen und die Blende schmal sind. Gibt man ihr z. B. die Form und Größe eines Viertelkreises, so bekommt man auch Reflexe anderer nicht senkrecht auf der Projektionsebene stehenden Flächen auf die Platte, die demnach anderen Zonen mit geneigter Achse angehören. Man erkennt sie teilweise auch in der Abb. 2 leicht daran, daß sie entgegengesetzte Krümmung wie die Hyperbeln der Abb. 3 und 4 haben.

## Schiefe Projektion der Zonen.

Wie aus den Abb. 3, 4, 7, 8, 9, 14 und 15 ersichtlich, bilden konzentrische Hyperbelscharen ausschließlich nach außen konkave geschlossene Figuren, also nur solche mit mindestens drei Spitzen. Zweiecke können nur entstehen, wenn sich zwei Hyperbeln in zwei Punkten schneiden, wobei entweder ein bikonvexer oder ein konkavkonvexes Zweieck entsteht. Da bei der Projektion nach Abb. 3 und 4 die b-Achsen unter allen Umständen gleich groß für alle Hyperbeln sind, so können Bogenzweiecke nur von nicht konzentrischen Hyperbelscharen gebildet werden, konkavkonvexe nur von koaxialen Hyperbeln, bikonvexe von beliebigen. Hieraus ergibt sich die wichtige Tatsache für die praktische Auswertung der Dia-



158

Abb. 13. Hauptschnitt der Reflexkegel von Abb. 3 und 4 im Schnitt mit zwei sich in C schneidenden Projektionsebenen PP und P'P', die senkrecht zur Zeichenebene liegen. Hilfsfigur zu Abb. 14 und 15.

Schar  $CD\langle$  unverändert stehen. Die Schar  $CE\langle$  in Abb. 3 und  $CG\langle$  in Abb. 4 verschieben und verändern sich in der Weise, wie Abb. 14, untere Hälfte, es zeigt. Die obere Hälfte stellt das Bild der gleichen Zone so dar, wie es auf der um den Winkel  $\varepsilon$  um C gedrehten Projektionsebene PP der Abb. 13 entstanden wäre. PP ist die Rektifikationsebene zu PP'. Beide Ebenen sind senkrecht zur Zeichenebene der Abb. 13 zu denken. Die Zonenachse KO (vgl. Abb. 3 und 4) liegt in Abb. 13 in ihr und steht in Abb. 14 senkrecht auf deren Zeichenebene der oberen Figurenhälfte. O' in

gramme, daß das Vorhandensein von Zweiecken, wie sie z. B. auch in Abb. 2 erkennbar sind, die Mitwirkung von mindestens zwei Zonen beweist und daß die beiden sich zweimal schneidenden Hyperbeln verschiedenen Zonen angehören. Man kann sich die Geometrie dieser Zweiecke an den Abb. 3 und 4 unschwer klarmachen, wenn man den Kristall K um eine der Reflexkegelachsen dreht, also z. B. um die parallel CD durch K laufende Achse. Dann bleibt die zugehörige

## Zur Optik der Reflexion von Röntgenstrahlen an Kristallen. 159

Abb. 14 ist der Lotfußpunkt von K auf der wirklichen Projektionsebene P'P' von Abb. 13, die gleichfalls in die Zeichenebene der Abb. 14 umgelegt ist um die "Achse der Perspektive" R, die in Abb. 13 senkrecht auf C steht. Sie ist die Schnittlinie der beiden Ebenen PP' und PP. C ist das Zentrum der Perspektive.

Wichtig bei diesen Übertragungen sind folgende Beziehungen:

- 1. Alle Achsen und Durchmesser der Hyperbelscharen der oberen Figur von Abb. 14 sind auch in der unteren gerade Linie.
- 2. Sie schneiden sich auch in beiden Halbfiguren in einem Punkt.



Abb. 14. Rektifikation einer unter 45° schief projizierten Reflexkegelschar gemäß Abb. 13 (untere Hälfte obiger Figur). Die obere Hälfte der Abb. 14 ist die rektifizierte Figur. Der Mittelpunkt Q der schief projizierten Scharen wird durch die Umzeichnung von O versetzt. Die Zusammenziehung aller links der Achse R liegenden Punkte der verzerrten Figur findet geradlinig auf den Radien zum Projektionszentrum C hin statt, wie das Beispiel c' $\rightarrow$  c<sub>1</sub> zeigt. c<sub>1</sub> ist der rektifizierte Punkt von c'. Das Verhältnis m:n wird aus Abb. 13 entnommen. Die Achse R entspricht der Schnittlinie der beiden Projektionsebenen PP und P'P' in Abb. 13.

- 3. Dieser Punkt liegt aber bei der unteren Halbfigur in Q, bei der oberen in O.
- 4. O ist Mittelpunkt des regulären Kernpolygons der vervollständigten oberen Halbfigur (wie in Abb. 9). Q ist Schnittpunkt der Diagonalen (Mittelpunkt) in dem vervollständigten schiefen Kernpolygon der unteren Halbfigur (Abb. 14).

5. Q ist in dem Spezialfall der Abb. 14 nur Mittelpunkt der einen Hyperbelschar, deren Nebenachse QT' und Hauptachse O'Q ist. Die Hauptachse der anderen Schar ist fO' und O' der Mittelpunkt. Beide Scharen in der unten Halbfigur.

Wenn die Zonenachse K beliebig schief gegen P'P liegt (allgemeiner Fall), ändert sich an obigem nur die Tatsache, daß die Achse der einzelnen Hyperbeln nicht mehr zusammenfallen, aber sich nach wie vor im gemeinsamen Mittelpunkt Q schneiden. Abb. 15



Abb. 15. Rektifikation einer unter 45° schief projizierten Reflexkegelschar, die außerdem noch um ihre gemeinsame Achse b verdreht ist. Die untere Hälfte der Figur ist die verzerrte Diagrammfigur, die obere Hälfte ist die Fortsetzung der unteren, aber rektifiziert. Die verzerrte Figur greift ebenso wie die rektifizierte teilweise in die andere über, um die Form der Kernpolygone erkennen zu lassen. Das Umzeichnungsverfahren ist dasselbe wie Abb. 14.

zeigt eine solche völlig schiefe Projektion. Abb. 13 gilt auch unverändert für diese. Die Kernpolygone beider Halbfiguren sind vollständig ausgezogen, übergreifen einander also, wie es bei tatsächlicher Ausführung der Rektifikation mit der ganzen Figur gemacht werden müßte.

Diese Operation ist sehr einfach. Die Punkte a', b', c' usw. der verzerrten Halbfiguren der Abb. 14 und 15 werden, wie Abb. 14

für den Punkt c' zeigt, mit dem Zentrum der Perspektive C verbunden und von c' aus auf die Achse R der Perspektive das Lot m gefällt. m wird in Abb. 13 eingetragen und das dort gewonnene n wieder in Abb. 14 eingesetzt. Dann ist  $c_1$  der gesuchte Punkt der rektifizierten Figur. Man vergleiche seine Lage mit der von c.

Um die Lage von R und C im aufgenommenen Diagramm zu finden, muß der Lotfußpunkt O' des Kristalls (vgl. Abb. 3 und 4) auf der Projektionsfläche P'P' (photographische Platte) apparativ markiert werden, was sehr einfach ist. Q erscheint im Diagramm (vgl. Beziehung 4 oben) als Schnittpunkt der Diagonalen des aufgenommenen Kernpolygons. Damit ist QO' nach Abb. 13 seiner Länge und Lage nach gewonnen. Da der Abstand KO' gleichfalls apparativ bekannt ist, kann der wichtigste Punkt C berechnet oder zeichnerisch bestimmt werden.

Die praktische Ausführung ist das Werk von einer halben Stunde bei den Abb. 14 oder 15. Fehler werden durch das Kurvenlineal erkannt und ausgeglichen.

## Inhalt.

Mit Hilfe eines neuen Goniometerverfahrens werden "vorwärts reflektierte Weitwinkeldiagramme" erzeugt, die ohne weiteres eine symmetrietreue Abbildung des Querschnitts einer Netzebenenzone darstellen. Die einzelnen Netzebenen erscheinen als durchgehende Linien, die im Mittelgebiet des Diagramms fast geradlinig sind, den Flächen der Zone parallel laufen und fast äquidistante Scharen bilden, jedoch im umgekehrten Abstandsverhältnis der Linien (wie im reziproken Gitter). Die vom Mittelpunkt des Kernpolygons radial nach allen Seiten gleichmäßig zunehmende Verzerrung ist hyperbolisch invers. Als Verzerrungsfunktion wird die tabellarisch gegebene Beziehung sin $\varphi$ : tg $\varphi$  abgeleitet, mit deren Hilfe die Entzerrung in einem gewöhnlichen Polarkoordinatennetz sehr einfach und genau erfolgen kann. Das reduzierte Bild ist das genaue, vielfach periodische "reziproke Liniengitter" der erzeugenden Zone. Die Abbildungen schief projizierter Zonen werden mit Hilfe einfacher Operationen der darstellenden Geometrie rektifiziert (symmetrietreu gemacht). Das rein geometrisch durchgeführte Darstellungsverfahren mittels projektiver Doppelebene (statt Lagenkugel) gibt auch quantitativen Aufschluß über die bei Festkristallmethoden genau definierte Form und Größe von Kurzlinien- und Punktdiagrammen, z. B. LAUE-Diagrammen.

Die Mittel zur experimentellen Prüfung der beschriebenen geometrischen Auswertungsverfahren wurden von der "Freiburger Wissenschaftlichen Gesellschaft" in dankenswerter Weise zur Verfügung gestellt.

Laboratorium des Verfassers, Dezember 1936.

# **ZOBODAT - www.zobodat.at**

Zoologisch-Botanische Datenbank/Zoological-Botanical Database

Digitale Literatur/Digital Literature

Zeitschrift/Journal: <u>Berichte der naturforschenden Gesellschaft zu</u> <u>Freiburg im Breisgau</u>

Jahr/Year: 1936

Band/Volume: 35

Autor(en)/Author(s): Seemann Hugo J.

Artikel/Article: Zur Optik der Reflexion von Röntgenstrahlen an Kristallen. Weitwinkeldiagramme als reziprokes Gitterbild in hyperbolischen Polarkoordinaten. 134-161