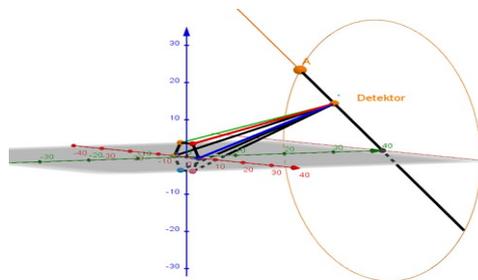


## Beugung am Kohlenstoff-Ring [Elektronenbeugung.ggb](#)

Mittels Röntgenbeugung an den Kohlenstoff-Targets in den handelsüblichen Elektronenbeugungsröhren kann gezeigt werden, dass für die Interferenzringe im Wesentlichen die Beugung an zweidimensionalen, vom Elektronenstrahl senkrecht durchstrahlten Kohlenstoff-Strukturen verantwortlich ist. Die meist vermutete Bragg-Reflexion spielt, wenn überhaupt, nur eine untergeordnete Rolle.

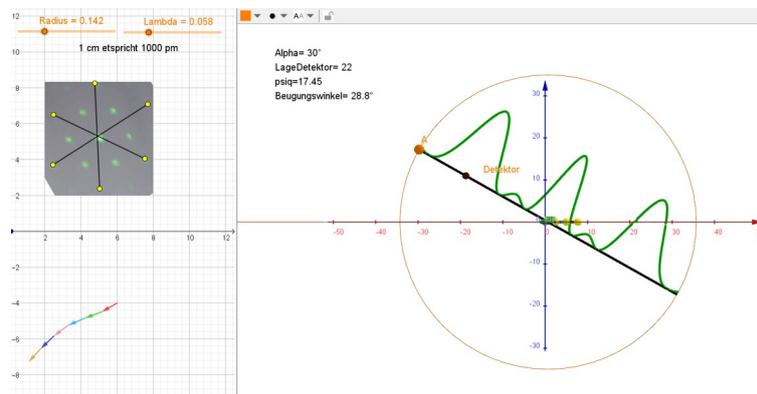
In MNU 2/2022 wird beschrieben, wie eine phänomen-orientierte Erklärung der Beobachtungen auf der Basis zweidimensionaler Gitter im Unterricht gelingen kann.

Mit dem hier beschriebenen geometrischen Modell [Elektronenbeugung.ggb](#) soll die Interferenz auf der Grundlage der Zeigerdarstellung modelliert werden. Zu Grunde liegt diese Vorstellung:



Gebeugt wird an einem Kohlenstoffring im Koordinatenursprung. Die Erscheinung auf dem Bildschirm soll punktweise abgetastet werden. Dazu wird zunächst eine Durchmesser-Linie festgelegt, dann der Bildpunkt - im Folgenden Detektor genannt - längs dieses Durchmessers gewählt. Die Modellierung muss im 3-D-Modus erfolgen. Zur Vereinfachung der quantitativen Auswertung wurde im Programm eine Frontalansicht auf den simulierten Bildschirm eingestellt.

Die Datei zeigt die folgende Ansicht:



Die grüne Ortslinie zeigt die Intensität über jedem Ort des Detektors auf dem eingestellten Durchmesser. Im Textfeld sieht man den momentanen Winkel des Durchmessers gegenüber der Rechtsachse, den Abstand des Detektors vom Mittelpunkt, die berechnete Intensität  $\psi_{iq}$  und den zugehörigen Beugungswinkel.

Im linken Teil der Abbildung sieht man die Zeigerstellung für die sechs Zeiger am Ort des Detektors und ein bearbeitetes Foto eines Interferenzmusters für die Beugung von Licht

am Modell eines Kohlenstoff-Rings. Zur besseren Orientierung sind die sechs Maxima, die zum kleineren Gitterabstand gehören, durch Punkte und Verbindungslinien hervorgehoben.

### **Dem Modell liegen folgende Annahmen zu Grunde:**

- Der Elektronenstrahl verläuft in Richtung der y-Achse, orthogonal zur Papierebene.
- Die Elektronen-Quelle liegt auf der y-Achse „in unendlicher Ferne“.
- Der Beugungs-relevante Maßstab ist: 1 cm entspricht 1000 pm.
- Ein sechseckiger Kohlenstoff-Ring liegt im Ursprung des Koordinatensystems, der eingestellte Radius des Umkreises von 0,142 cm entspricht 142 pm. Damit sind die beiden „Netzebenen-Abstände“ im Modell 123 pm und 213 pm wie für die Netzebenen von Kohlenstoff bekannt.
- Die Wellenlänge ist einstellbar, im Bild 0,058 cm, entsprechend 58 pm. Für den Vergleich mit den Realwerten bei z.B. 4,5 kV muss man die Wellenlänge auf 0,018 cm einstellen.
- Der Schirm liegt im Abstand 40 cm vom Kohlenstoff-Target.
- Eingestellte Werte und zugehörige Ergebnisse sind im Textfeld angegeben. Die Maße auf dem Schirm dürfen im Maßstab 1:1 abgelesen werden, weil die Strahlensätze gelten.
- Der Detektor ist auf einem Radius durch Anfassen mit der Maus verschiebbar angeordnet. Achtung: man sollte einen Mindestabstand zum Ursprung von 5 mm einhalten, um den Kontakt zum Punkt „Detektor“ nicht zu verlieren.
- Der zugehörige Durchmesser wird durch Anfassen des Punktes A mit der Maus auf den gewünschten Winkel eingestellt. Man sollte im Bereich über 5° bleiben – wieder, um die Beweglichkeit des Punktes nicht einzubüßen.

### **Anregungen für Messungen**

#### **Orientierung im Modell, Modellieren des Beugungsbildes eines zweidimensionalen, ferneordneten Graphitgitters (Graphen)**

Einstellen der Winkel 30°, 60° und 90° im Vergleich mit dem eingblendeten Foto. Vergleich mit einem Originalexperiment an einlagigen Graphen-Layern: CHO, Y. ET AL (2014). *Transmission Electron Microscopy Specimen Preparation for Layer-area Graphen by a direct Transfer Method*. Seoul: Applied Microscopy. 135. <http://www.appmicro.org>. (30.09.2021)

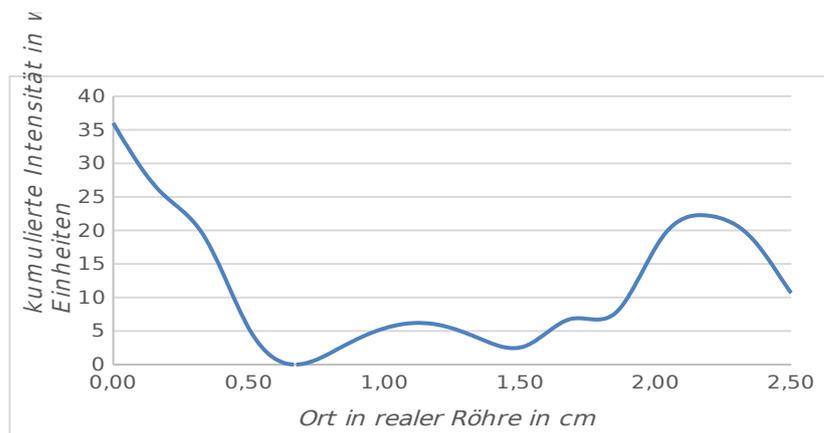
Es ist interessant, den Detektor in die jeweiligen Maxima zu verschieben und auf die zugehörige Zeigerstellung zu achten. Dann wird klar, warum die beiden Maxima für den kleinen bzw. großen Gitterabstand im Kohlenstoff so deutlich verschiedene Höhe haben!

#### **Modellieren des Effekts regellos angeordneter Kohlenstoffringe**

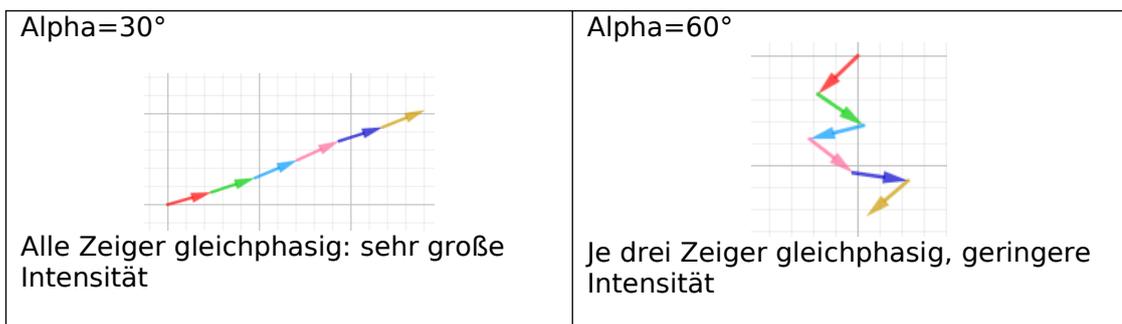
In einem vereinfachten Vorgehen kann man annehmen, dass eine regellose Anordnung beugender Kohlenstoff-Ringe die eben erzeugten Maxima auf Kreisen um das Hauptmaximum wandern lässt. Das lässt sich dadurch modellieren, dass man für jeden Radius die Intensitäten aus den zwei Einstellungen von Alpha: 30° und 60° addiert und das Ergebnis einem ganzen Kreis zuordnet.

Systematisches Vorgehen erfordert händisches Vorgehen und Ablesung der Intensität für verschiedene Orte des Detektors bei jedem der beiden Winkel 30° bzw. 60° und anschließende Summation, bevorzugt in einer Tabellenkalkulation, z.B. Elektronenbeugung.xlsx (in dieser pdf-Datei angehängt). Daraus ergibt sich das folgende Muster.

Achtung: Da die reale Röhre nur einen kleinen Schirmradius hat, darf man sich bei der händischen Messung auf Beugungswinkel unter etwa 15° beschränken. Das entspricht Orten des Detektors mit Werten unter etwa 10 cm. Damit die Messunsicherheit dabei hinreichend gering bleibt, benötigt man genügend viele Stützpunkte. Daher sollte man bei der kleinen Wellenlänge von etwa 18 pm (4,5 keV) in 0,5 cm-Schritten vorgehen, auch wenn das ein wenig Feinmotorik fordert.

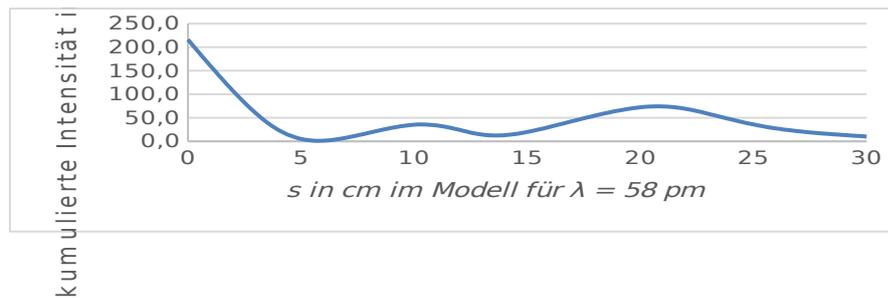


Wenn man mit den Originaldaten der Röhren aus  $\lambda = d \cdot \sin(\alpha)$  und den beiden Werten für  $d$  bei Kohlenstoff und  $\lambda = 18 \text{ pm}$  den erwarteten Ort der Maxima auf dem Bildschirm berechnet, erhält man aus  $\tan(\alpha) \cdot 13,5 \text{ cm} = \text{Ort}$  eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen GeoGebra-Modell, mathematischer Vorhersage und Experiment (siehe Abbildung im nächsten Modellierungsschritt). Die Intensität des weiter außen liegenden Maximums ist aber größer als die des anderen. Das steht im Widerspruch zu den Beobachtungen im Realexperiment. Der Grund wird klar, wenn man die Zeigerstellungen in den Maxima beachtet.



Trotz dieser Situation erscheinen die Maxima zu den Einstellungen 30°, 90° und 150° im Experiment kleiner als die drei anderen Paare. Hier kann Übereinstimmung erst durch die weiter unten dargestellte Berücksichtigen der Beugung an den Einzelobjekten erzielt werden.

Die ermittelte Kurve erscheint noch etwas wellig. Das könnte behoben werden, wenn man nicht nur über zwei Winkel „numerisch integrieren“ würde, sondern z.B. in einem Winkelbereich von 5° bis 65° in Schritten von 5° vorgeht. Wegen der Symmetrie würde man damit einen Vollkreis abdecken. Die Welligkeit verschwindet. Das liegt daran, dass jede Orientierung eines Kohlenstoffrings zur Intensität an jedem Punkt des Bildschirms beiträgt. Hiervon kann man sich überzeugen, wenn man im Modell z.B. einen nur etwas von der idealen Lage 30° abweichenden Winkel einstellt. Das zu 30° gehörige Maximum ist dadurch nicht verschwunden. Das folgende Diagramm zeigt den Erfolg des eben beschriebenen, mühsamen Vorgehens. Für den Unterricht wird es nicht empfohlen.



Elektronenbeugung\_fein.xlsx (in dieser pdf-Datei angehängt)

### Berücksichtigen der Beugung am Einzel-Atom

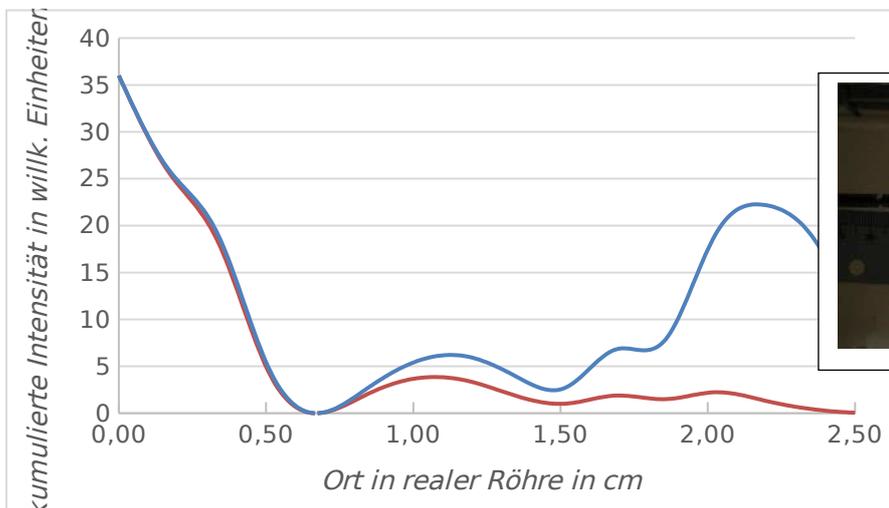
*Die Periodizität des Gitters bestimmt die Periodizität des Interferenzmusters. Die Struktur des Einzelobjekts bestimmt über die globale Helligkeitsverteilung.*

Das Ergebnis von eben muss also noch mit der Helligkeitsverteilung moduliert werden, die sich aus den Radien  $a$  der beugenden Atome ergibt. Diese Verteilung wird durch eine Bessel-Funktion beschrieben, deren erste Nullstelle  $\beta$  der Gleichung

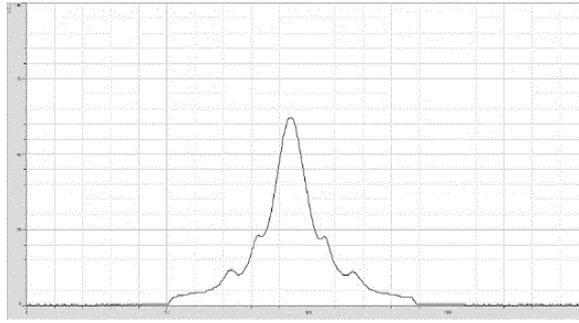
$$\frac{2\pi \cdot a \cdot \sin(\beta)}{\lambda} \approx 3,83$$

genügt (Lexikon der Optik, Bd. 1, Heidelberg, 2003. 74) .

Die modulierende Bessel-Funktion kann mit befriedigender Genauigkeit durch eine  $\cos^2$ -Funktion mit der gleichen ersten Nullstelle angenähert werden. In der Tabelle Elektronenbeugung.xlsx (in dieser pdf-Datei angehängt) geschieht diese Annäherung in Spalte E. Man erhält den rot gezeichneten Graphen.



Das Verhältnis der Peakhöhen kann berechnet werden. Es sollte mit dem im Originalexperiment gemessenen Verhältnis von etwa 1,67 übereinstimmen. Da die Intensitäten im Originalexperiment wegen eines nach außen abnehmenden Offsets angehoben erscheinen, muss man die dortigen Peakhöhen durch Bilden der Differenz zum Untergrund berechnen. Diese Messung gelingt z.B. mit der VideoCom- CCD-Kamera von Leybold:



Übereinstimmung des Quotienten der Peakhöhen wird erreicht, indem man den Wert in Zelle E1 der Tabelle variiert. Die beste Anpassung erhält man für  $E1=7,72$ .

Das führt wegen  $\tan(\beta) = \frac{7,72}{10}$  zu  $\sin(\beta) \approx 0,611$ . Mit dem Wert für  $\lambda = 18,3 \text{ pm}$

erhält man den Radius des beugenden Einzelatoms von  $a \approx 59 \text{ pm}$ .

Das passt gut zum Tabellenwert des Radius von Kohlenstoff-Atomen (70 pm). Man darf annehmen, dass die Beugungswahrscheinlichkeit für Elektronen an einem Atom mit zunehmendem Radius stark abnimmt, denn auch die zugrundeliegende Nachweiswahrscheinlichkeit für ein Hüllenelektron nimmt nach außen stark ab. Aus der unten angegebenen Quelle kann man erschließen, dass diese Nachweiswahrscheinlichkeit bei  $59/70 = 84 \%$  des Tabellenwerts für den Radius nur noch  $< 5\%$  des Wertes im Zentrum ausmacht.

(MIKHAILOVSKIJ, I.M. ET AL.(2009): *Imaging the atomic orbitals of carbon atomic chains with field-emission electron microscopy*. PhysRevB 80/2009.165404-5.

[www.researchgate.net/profile/Igor-Mikhailovskij/publication/228616738](http://www.researchgate.net/profile/Igor-Mikhailovskij/publication/228616738). 27.11.2021)