Die Flat-Cone Geometrie

J. Ihringer

Beim Messen eines Beugungsbildes ist es wünschenswert, zur optimalen Auflösung die Information aus dem vollen Raumwinkelbereich zu erfassen. Die konstruktive Realisierung der Diffraktometer zur Messung auf „einer Vollkugel“ erfordern mehrere Freiheitsgrade und sind deshalb mechanisch aufwendig (5-Kreis Geräte, Kappa Diffraktometer).

Weil Neutronen einen – im Vergleich zur Röntgenstrahlung – geringen Wirkungsquerschnitt mit Materie haben, sind die Proben mit ihrer Umgebung, Kryostaten oder Öfen, und die Zähler groß und schwer. Deshalb werden Konstruktionen mit wenigen mechanischen Freiheitsgraden bevorzugt.

Die einfachste Konstruktion für ein Diffraktometer besteht aus einem Drehtisch, in dessen Zentrum die Probe gelagert wird. Eine bevorzugte Ebene ist dann die „Äquatorialebene“. Ihre Normale ist die Achse des Drehtischs, in ihr liegt die Probe.

Messung von Pulverproben

Bei Pulverproben erscheint die Beugung in Kegeln um den Primärstrahl. Deshalb genügt die Messung der in die Äquatorialebene auslaufenden Strahlung. Zu diesem Zweck liegen die Zähler in der Äquatorialebene.

Messung von Einkristallen

Die Drehachse des Diffraktometers ist die Zonenachse [u,v,w] des Kristalls. Die Koordinaten u,v,w sind durch die Justierung des Kristalls auf dem Tisch gegeben.

Liegt der einfallende Strahl in der Äquatorialebene, dann werden in dieser Ebene nur Reflexe beobachtet, deren Indizes (h,k,l) der Bedingung $uh + vk + lw = 0$ genügen.

Reflexe, für die $uh + vk + lw = n$ mit $n \neq 0$ gilt, können in „höheren Schichten“ beobachtet werden. Dazu müssen die Zähler aus der Äquatorialebene angehoben und zur Probe hin ausgerichtet werden, was vor allem bei mehreren Zählern mit großem mechanischen Aufwand verbunden ist.

An diesem Punkt setzt die ***Flat-Cone*** Technik ein. Man erreicht durch Kippen der Äquatorialebene um einen bestimmten Winkel gegenüber der Richtung des Primärstrahls, dass mit sonst unverändertem Aufbau die Reflexe aus höheren Schichten gemessen werden können. Für diese Reflexe gilt $uh + vk + lw = n$ mit $n \neq 0$, der Wert für n der gewünschten Schicht definiert den Kippwinkel des gesamten Aufbaus. Gekippt wird der Drehtisch mitsamt der Probe und den Zählern.

Die ***Flat-Cone*** Technik erweitert die Möglichkeiten eines Drehkristall-Diffraktometers. Mit nur ***einem*** zusätzlichen Freiheitsgrad wird ein größerer Bereich des reziproken Gitters messbar.

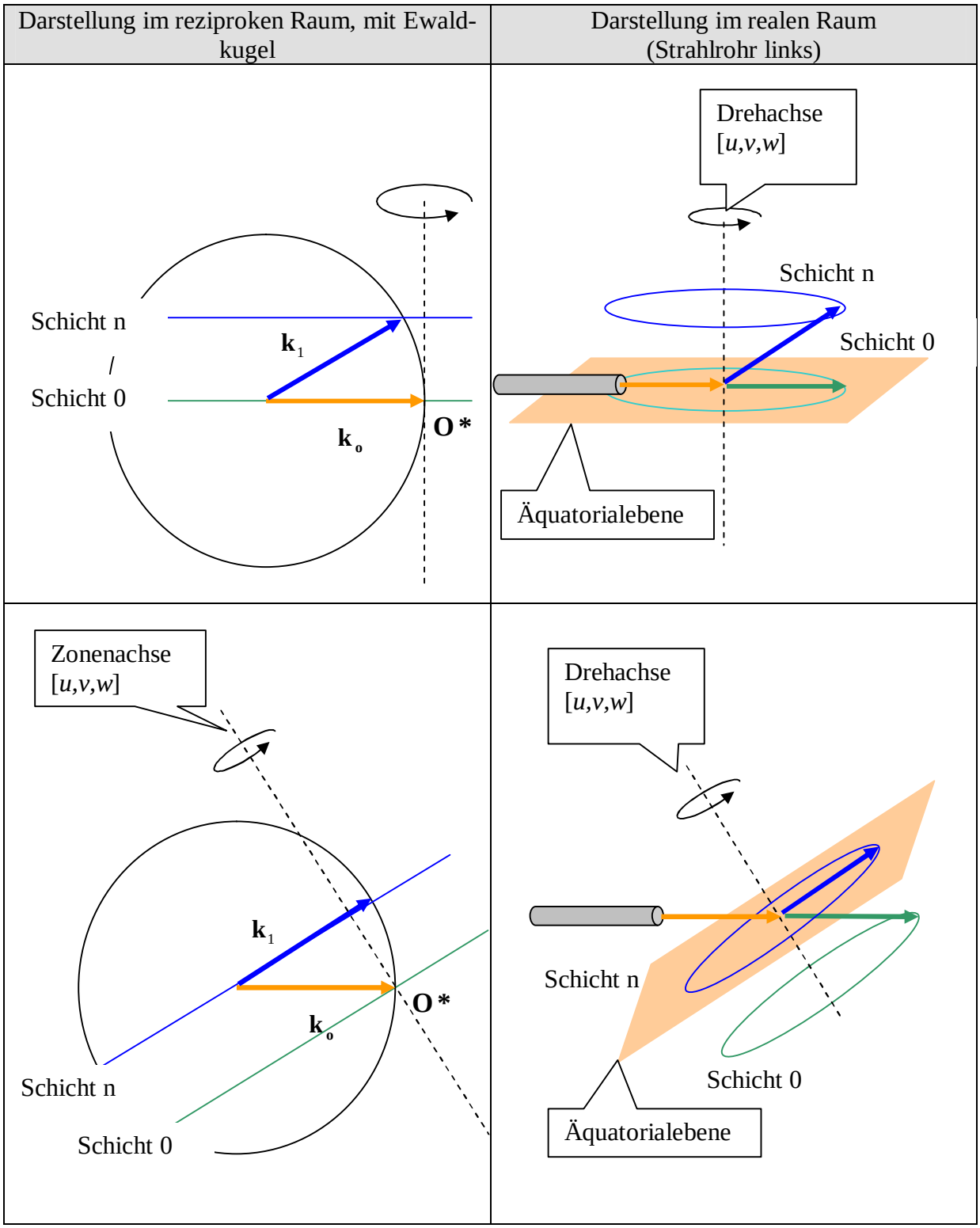

Abbildung 1 Aufbau in Drehkristall- (oben) und Flat-Cone Geometrie (unten). Durch entsprechende Neigung des Geräts wird die Schicht n in die Äquatorialebene gelegt. Orange: Primärstrahl, Grün: Schicht 0, Blau: Schicht n. $\mathbf{k}_o$ *,* $\mathbf{k}_1$ *Wellenvektoren der einfallenden und von einem Reflex angeregten Strahlung.*