**Online-Ergänzung zum Beitrag Modellieren mit der Zeigerdarstellung – mehr als nur Visualisieren**

Michael Rode

1. **Gliederung**

Im folgenden Beitrag werden die folgenden Gesichtspunkte behandelt

1. **Was auf der Grundlage des Heft-Beitrags als sicher gelten kann**

**2. Untersuchungen zum Intensitätsverlauf**

**2.1 Modellierung der Intensitätsverteilung**

**2.2 Weitere Aufschlüsse auf der Grundlage der gemessenen Intensitätsverteilung**

**2.3 Abschätzung der Größe der beugenden Objekte auf der Grundlage der Röntgenbeugung**

**2.4 Vergleich der beiden K-Strahlungs-Peaks**

**3.** **Literatur**

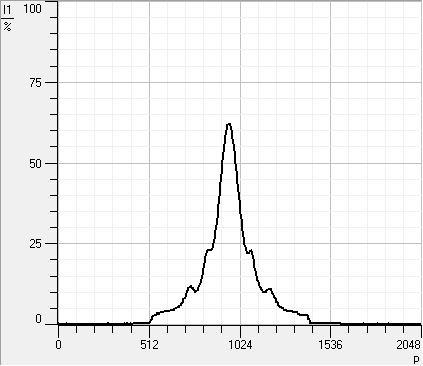
**1 Was als sicher gelten kann:**

* In Kohlenstoff-Ringen treten charakteristische Abstände von 123 pm bzw. 213 pm auf.
* Die in Elektronenbeugungsröhren beobachtete Interferenzerscheinung geht zu einem guten Teil auf zweidimensionale Gebilde aus verbundenen Kohlenstoffringen (Platelets) zurück, die als Gitter orthogonal vom Elektronenstrahl durchsetzt werden. Sie liegen in einer dünnen Basisschicht auf dem Trägermaterial ohne gegenseitige Ordnung der Lagen untereinander.
* Interferenzringe gehen auf eine Vielzahl regellos ange­ord­neter Kohlenstoff-Ringe zurück.
* Die zugehörige Modellierung ergibt zutreffende Werte für die relevanten Netzebenen­ab­stände.

**2** **Untersuchungen zum Intensitätsverlauf**

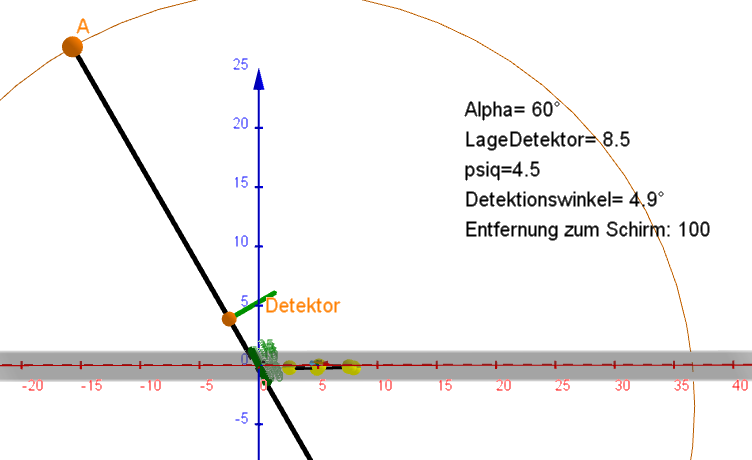
**2.1 Die Intensitätsverteilung lässt sich modellieren**

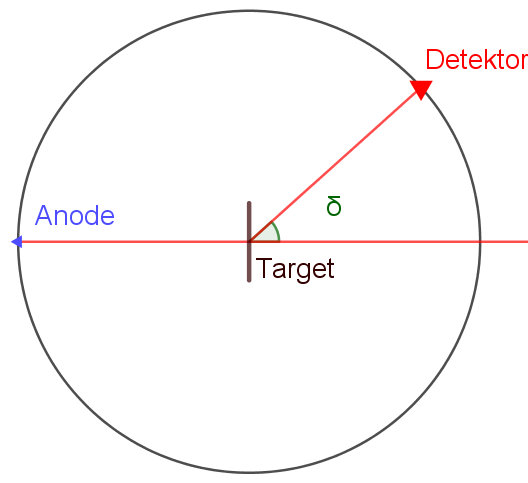
Mit Hilfe einer Einzeilen-CCD-Kamera (Leybold VideoCom) kann man den Intensitätsverlauf längs eines Schnitts durch das Hauptmaximum im Interferenzmuster an der Elektronenbeugungsröhre erfassen, wie Abbildung 1 zeigt.



**Abb. 1** Intensitätsverlauf längs eines Schnitts durch das Interferenzmaximum an einer Elektronenbeugungsröhre

Wenn man in einem GeoGebra-Modell mit der für Elektronenbeugungsexperimente typischen Wellenlänge von etwa 20 pm arbeiten möchte und gleichzeitig möglichst präzise ablesen möchte, muss man auf die Anzeige der Intensitätsverteilung als Ortslinie verzichten. An ihre Stelle kann die Anzeige im Spurmodus, verbunden mit einer numerischen Anzeige treten, in den Modellen psiq genannt. Zur Visualisierung wird der Wert von psiq als grün markierte Strecke am Ort des Detektors gezeigt.



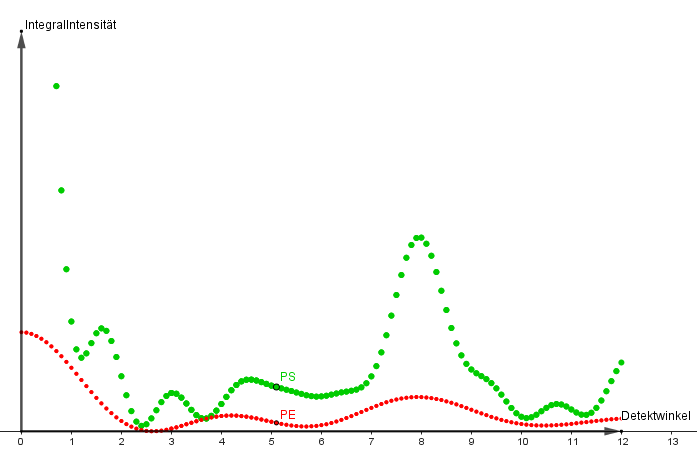


*α*

**Abb. 2** links: Frontalansicht des Bildschirms; rechts Seitenansicht mit dem Detektionswinkel *δ.*

Um die Helligkeitsverteilung längs eines Interferenzringes zu modellieren, muss man berücksichtigen, dass (entsprechend dem Huygens-Prinzip) jedes Kohlenstoff-Atom aus jedem Platelet zur Intensität an jedem Punkt des Bildschirms beiträgt. Darüber hinaus sind Platelets in der Basisschicht auf dem Target regellos angeordnet. Die dadurch hervorgerufenen Interferenzringe kann man, statt eine Drehung der beugenden Objekte zu modellieren, auch erfassen, indem man den Detektor über den ganzen Bildschirm führt. Das wird im Modell ausgeführt, indem man über alle Einstellwinkel *α* für den tra­gen­den Durchmesser die modellierte Intensität zu jedem der Detektionswinkel *δ* aufsum­miert. Aus Symmetrie­gründen darf man sich auf ein Winkel­intervall für *α* zwischen 0° und 59° beschränken.

Für eine angemessen genaue Untersuchung reicht es erfahrungsgemäß aus, *α* in 5°-Schritten zu erhöhen. Das geschieht in einer Rechentabelle. Dann wird der Detektionspunkt mittels Schieberegler z.B. in 1°-Schritten zwischen 0° und einer Obergrenze ver­größert. Die obere Grenze ergibt sich dabei aus den Abmessungen des Bildschirms an den Elektronen­beu­­­­gungs­röhren und der Wellenlänge. Für 17 pm beträgt sie etwa 10°. Ohne Modulation mit der noch zu diskutierenden globalen Helligkeitsverteilung ergibt sich der grün dargestellte Graph in Abbil­dung 3.



**Abb. 3:** Ergebnis der Modellation zu orthogonaler Durchstrahlung eines einzelnen Kohlenstoff-Rings aus sechs Atomen mit zugehöriger Integration über ein Winkelintervall von 55°. Dargestellt ist die aufsummierte Intensität über dem zum Detektionswinkel zugehörigen Kreisring. In roter Farbe ist das Ergebnis für einen einzelnen, in grüner Farbe für ein Platelet aus sieben Kohlenstoffringen dargestellt

Beide Graphen zeigen noch den Mangel, dass das Maximum zum kleineren Gitter­abstand sehr viel intensiver erscheint als das andere – im Widerspruch zu den Messdaten.

Den Grund für die **unterschiedlichen Peakhöhen** erkennt man in Abbildung 4 durch den Blick auf die Zeigerstellungen in den beiden Maxima. Alle betei­ligten Zeiger stehen im Fall des weiter außen liegenden Maximums gleichphasig, was eine größere Intensität bewirkt als im Fall des innen liegenden Maximums, bei dem es offenbar zwei Tripel von untereinander gleichphasigen Zeigern gibt. [EBeugg\_ortho\_Zeiger.ggb](file:///C:\Users\Michael%20Rode\Desktop\PlusLucisEBeugg\00_PlusL_202301\EBeugg_ortho_Zeiger.ggb)

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

**Abb. 4** Zeigerstellungen in den Maxima; links: außen liegendes Maximum; rechts: innen liegendes Maximum.

Ein Weg zur Beseitigung der Abweichung zwischen Modellergebnis und Realexperiment liegt in einer allge­meinen Regel für die Gestalt von Interferenzmustern. Sie ist - je nach Unterricht - vielleicht schon vom Doppelspalt her bekannt und lautet:

*Die Periodizität des Gitters bestimmt über die Periodizität des Interferenzmusters. Die Gestalt des Einzelobjektes bestimmt über die globale Helligkeitsverteilung.* [3]

Einzelobjekte sind hier Kohlenstoff-Atome, an deren Elektronenhülle die Beugung erfolgt. Die für die globale Helligkeitsverteilung verantwortlichen Einzelobjekte gleichen dabei in ihrer Wirkung Kreisblenden.

Die Intensi­tätsver­tei­lung bei Beugung an Kreisblenden kann durch Funktionen beschrieben werden, die eine Besselfunktion enthalten [1]. Diese Funktionen liegen außer­halb der Reichweite des Schulunterrichts, sie lassen sich aber mit Hilfe von Excel handhaben.

Für die Hüllkurve der Intensität *I(δ)*, die man unter dem Detektionswinkel *δ* vorfindet, sind die Parameter *a*: Atomradius und *I0*: Intensität im zentralen Maximum verantwortlich.

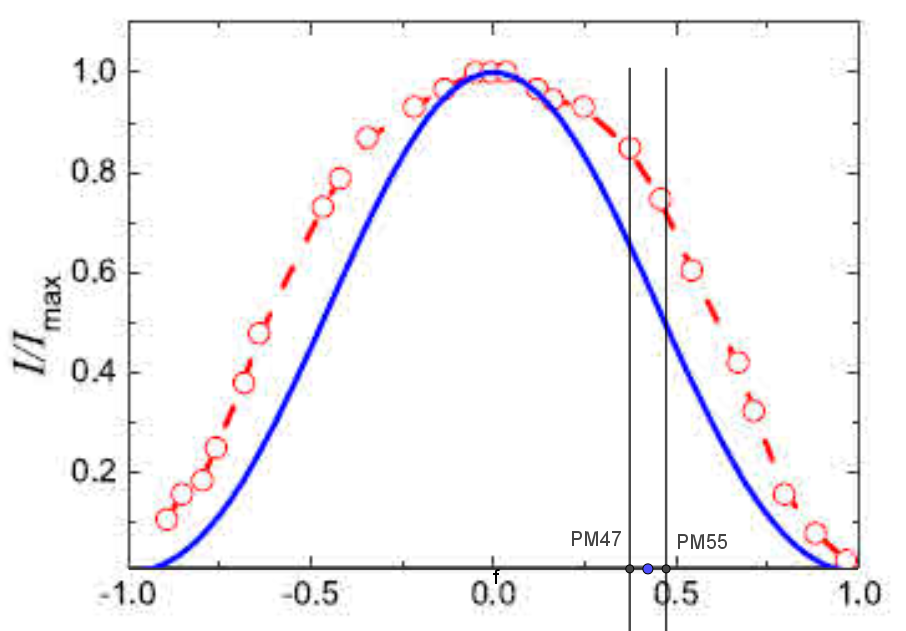
In der Schreibweise von Excel gilt . Diese Beziehung wird im Folgenden globHV(globale Helligkeitsverteilung)genannt. Die in der Klammer angefügte 1 bezeichnet eine Besselfunktion erster Ordnung J1(x).

*X* ist eine Funktion von *a* und *λ*; es gilt .

Die zugehörige Besselfunktion lässt sich mit dem Geometriewerkzeug nicht verarbeiten. Deswegen werden die daten aus dem geometrischen Modell von Hand in Excel übertragen. Man erhält Abbildung 5.

**Abb. 5** In blauer Farbe sind die entsprechend Abb. 4 übertragenen Daten dargestellt, in rot sieht man das Ergebnis der Anpassung.

Die Modulation des im Modell erarbeiteten, blau dargestellten Graphen mit der globalen Hellig­keitsverteilung globHV ergibt den rot dargestellten Graphen, der die Intensitätsverhältnisse qualitativ angemessen wieder­gibt, wenn man von einem Offset der Messwerte absieht. Im Rahmen der Messunsicherheit (± 0,5° für *δ*, entsprechend etwa ± 0,1 cm auf dem realen Bildschirm) können die theoretisch erwarteten Detektions­winkel bestätigt werden. Darüber hinaus kann man auch die Inten­sitäten bestimmen und mit den Messwerten aus Abbildung 1 vergleichen. Dort bestimmt man die Peak­höhen 6,6% und 4,3% (als Differenz aus Peakmaximum und Unter­grund) und erhält den Quoti­enten 1,53. Im Modell kann man durch Anpassen des Parameters *a* (Streuradius) die beiden Peak­höhen so einstellen, dass sich annähernd der gleiche Quotient (im Modell 1,55) ergibt. Das geschieht bei einem Streu­radius *a* von 55 pm, durchaus passend zum tabellierten Wert für den kovalenten Radius von Kohlenstoff, wenn man bedenkt, dass die Beugung an der Elektronenhülle der Kohlen­stoffatome erfolgt. Die Nach­­weiswahrscheinlichkeit für Elek­tro­nen nimmt mit zunehmendem Abstand vom Kern ab, so dass der für die Beugung bestimmende Radius kleiner sein kann als der Atomradius. Wie die Nachweiswahrscheinlichkeit für ein Elektron im Kohlenstoff mit dem Radius abnimmt, zeigt Abbildung 6, die auf der Grundlage von [2] ergänzt wurde.



**Abb. 6** Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Elektron in Kohlenstoff [2]

Dargestellt ist die Nachweiswahrscheinlichkeit über dem Radius. Dieser wird in relativen Einheiten, bezogen auf die Apparatur, angegeben. Auf Grundlage der Erläuterungen in [2] kann man die Rechtsachse in pm kalibrieren. Der in diesem Beitrag durch Anpassung gewonnene Schätzwerte für den Atomradius ist als Punkt PM 55 eingetragen. In [2] stellt die durchgezogene Linie die theoretisch erwartete Wahrscheinlichkeitsdichte in % vom Maximum dar. Die roten Markierungen sind die Messwerte. Auf dieser Basis gelangt man zu der Hypothese, für die Beugung sei nicht die gesamte Atomhülle verantwortlich, sondern nur ein Bereich, in dem die Wahrscheinlichkeitsdichte um weniger als 25% vom Maximum abweicht. Die Aus­wirkungen verschiedener Schätzwerte für den Radius erscheinen insgesamt als so gering, dass die Annahme berechtigt scheint, es handle sich bei beiden Werten um zufällige Abweichungen vom wahren Wert. Dieser darf als „etwa 50 pm“ angenommen werden.

**2.2** **Die gemessene Intensitätsverteilung erlaubt weitere Aufschlüsse**

Die Überlegungen zur globalen Helligkeitsverteilung erlauben mittels globHV eine weitere interessante Untersuchung. Als Grundlage dafür dient der blau dargestellte Graph in Abbildung 7, der die Messdaten mit der CCD-Kamera über einer Winkelskala darstellt.

**Abb. 7** Messdaten des Helligkeitsverlaufs mit angepassten globalen Hüllkurven

Die angegebene Funktion globHV besitzt für eine vorgegebene Wellenlänge *λ* die beiden Freiheitsgrade *a* und und muss als globale Helligkeitsverteilung durch die Maxima in der Messkurve verlaufen.

Eine Anpassung durch Variieren beider Parameter ergibt den rot dargestellten Graphen in Abbildung 7.

Es gelingt nicht, eine gemeinsame Funktion durch alle 5 Maxima zu legen. Die Anpassung wird aber mehr als befriedigend, wenn man *a* ≈ 45 pm wählt und auf die Passung im Hauptmaximum verzichtet (roter Graph). Der Übergang zum Endergebnis, dargestellt in violetter Farbe, gelingt dann durch die folgende Überlegung. Außer den Kohlenstoffatomen in Sechseckringen könnte es noch amorph organisierte geben. Es ist nicht abwegig, anzunehmen, dass deren Elektronenhüllen höhere Symmetrie aufweisen und daher ggf. größer erscheinen. Darauf weisen auch die Tabellenwerte für die van-der-Waals-Radien der Atome hin (170 pm). Addiert man nun zu der roten Hüllkurve einen Anteil, der durch einen Radius von etwa 75 pm bedingt wird und passt dessen *I0* geeignet an, so erhält man die violett dargestellte Kurve.

Das Ergebnis lässt sich mit etwas Mut so deuten: neben beugenden Kohlenstoff-Ringen, die die periodische Funktion bedingen, tragen zur beobachteten Erscheinung auch eine Vielzahl amorph organisierter Atome bei. Die für eine passende Modellierung erforderlichen Atomradien scheinen sich zwischen den beiden verschie­denen Bindungsformen zu unterscheiden.

**Fazit:** Die Modellierung, etwas tiefgehender befragt, liefert Aussagen über die an der Beugung beteiligten Atome, die mit anderweitig gewonnenen Ergebnissen gut zusammenpassen.

**2.3** **Abschätzung der Größe der beugenden Objekte auf der Grundlage von Röntgenbeugung**

Die beiden konkurrierenden Terme für die Beugung am ebenen Gitter  bzw. für die Deutung als Bragg-Reflexion ergeben erst bei hinreichend großer Wellenlänge unterscheidbare Ergebnisse. Die mit schulüblichen Geräten erzeugbare Röntgen-Wellenlänge der Kα-Strahlung von Kupfer ist geeignet, zwischen die Alternativen zu trennen. Man erwartet dabei die Winkel 42,3° für Bragg-Reflexion beim Netzebenenabstand 123 pm und 46,3° für Beugung auf der Grundlage orthogonaler Durchstrahlung eines ebenen Gitters mit *d*=213 pm. Bei dieser Wellenlänge gibt es kein Maximum zum Netzabstand 123 pm. Abbildung 8 zeigt ein Messergebnis:

**Abb. 8** Beugungsmuster hervorgerufen von einem Target aus einer Elektronenbeugungsröhre. Die Markierungen kennzeichnen von links nach rechts: Gitterpeak zu 213 pm von Kβ; Peakschwerpunkt für Bragg-Peak zu 123 pm und Kα, Gitterpeak zu 213 pm, Bragg-Peak zu Kupfer des Trägernetzes.

Das Muster zeigt, dass die Gitterbeugung aufgrund orthogonaler Durchstrahlung gegenüber den Bragg-Anteilen deutlich überwiegt. Beide Peaks sind allerdings etwa gleich breit. Das lässt auf annähernd gleich große beugende Gebilde schließen. Auf der Grundlage der Messdaten kann man diese abschätzen.

**Version Gitter**

Betrachtet werden, analog zu den Überlegungen für Mehrfachspalte, die beiden Nullstellen, die das Maximum begrenzen. Für diese gilt mit *N* = Zahl „beleuchteter Linien“ von links nach rechts:

bzw.

Umformung nach *N* ergibt

bzw.

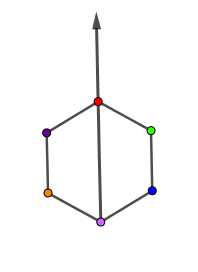
und endlich bzw. .

Ausmessen und Einsetzen ergibt *N* ≈ (39+25)/2 = 32. Da je zwei beugende Linien zu jedem Ring gehören und dessen Durchmesser ≈ 284 pm beträgt, ergibt sich für die Platelet-Größe ≈ 16·284 pm = (4,5 ± 0,8) nm. Wegen der zufälligen Deposition von Kohlenstoff auf dem Trägernetz ist dies ein stellvertretender Wert, der vom Target und auch vom zufällig bestrahlten Bereich abhängt.

**Version Bragg**

Auf den zugehörigen Peak kann das eben benutzte Verfahren nicht angewandt werden, da zum Netzlinien-Abstand von 123 pm kein Maximum existiert. Für Bragg-Reflexion gilt die Scherrer-Gleichung  . Darin ist die Halbwertsbreite des betrachteten Peaks, gemessen im Bogenmaß. Aus dem Graphen entnimmt man im Gradmaß , also im Bogenmaß . Daraus erhält man *N* ≈ 35, womit sich die Platelet-Größe 17,5·123 pm = 2,15 nm ergibt. Die Größe der Bragg-ähnlich bestrahlten Platelets passt dabei gut zu den Hersteller-Angaben, in denen eine Dicke der amorphen Schicht von etwa 7 nm angegeben wird.

Beide Verfahren ergeben einen nahezu gleichen Wert für *N*. Man könnte das so deuten, dass während der Depositionszeit in jeder Richtung gleich viele Atome angelagert werden. Die unterschiedlichen Abmessungen würden dann aus den beiden verschiedenen Gitterabständen resultieren. In der Literatur findet man bei [5] die Beschreibung richtungsabhängiger Wachstumsgeschwindigkeit. Es wird eine Hauptwachstumsrichtung angegeben, wie sie Abbildung 9 zeigt. Diese Richtung gehört zum Gitterabstand 213 pm.



**Abb. 9** Hauptwachstumsrichtung von Kohlenstoff-Strukturen (nach [5])

Unterschiedliche Wachstumsgeschwindigkeit würde unter dieser Annahme das Längenwachstum eines Platelets messen, würde also nicht die Anzahlen der Atome betreffen.

**2.4 Vergleich der beiden K-Strahlungs-Peaks**

In der Literatur [4] findet man, dass die Höhen zu den beiden K-Strahlungspeaks für Kupfer im Verhältnis 1:0,135 stehen. Abbildung 8 zeigt für die beiden Peaks Höhen gegenüber dem Untergrund von etwa 100:700, entsprechend etwa 14%. Diese Beobachtung unterstützt die Interpretation der Messdaten deutlich.

**3 Literatur**

[1] Paul, H. (2003). Lexikon der Optik. Heidelberg, Spektrum. 74.

[2] Mikhailovskij, I. M. et. al. (2009). Imaging the atomic orbitals of carbon atomic chains with field-emission electron microscopy. Phys.Rev.B 80, 165404.

[3] Koppelmann, G. (1982). Lichtoptische Analogieversuche zur Kristallgitterbeugung. Teil II. Gittereigenschaften und Beugungsbilder zweidimensionaler Kristalle. München, Physik und Didaktik 1/10. 47ff.

[4] Kahoul, A., N. Kup Aylikci, B. Deghfel, Y. Kasri, M. Nekkab (2014). New procedure calculation of photoninduced Kb/Ka intensity ratios for elements 16S to 92U. J. of Rad. Res. and Appl. Sc.: 346-362.

[5] van der Drift, A. (1967): Evolutionary Selection, A Principle Governing Growth Orientation in Vapour-Deposited Layers. Philips Res. Repts. 22. S. 274. <https://projects.iq.harvard.edu/files/taolab/files/evolutionary_selection_ref.pdf> (08.01.2021)