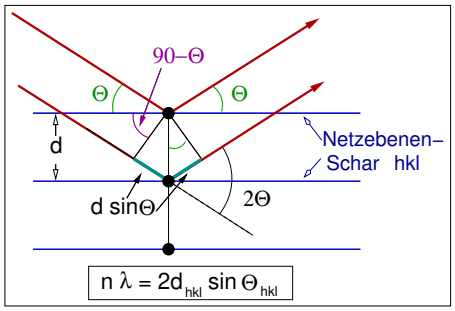
3. Grundlagen der Beugungsmethoden

① 'Position' des Reflexes:



Winkel $2\theta_{hkl}$ zwischen Primärstrahl und der an der Netzebenenschar mit dem Millerindex hkl gebeugten Strahlung:

$$\boxed{n\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta_{hkl}}$$

für orthorhomische Gitter:

$$\frac{1}{d_{hkl}} = \sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}$$

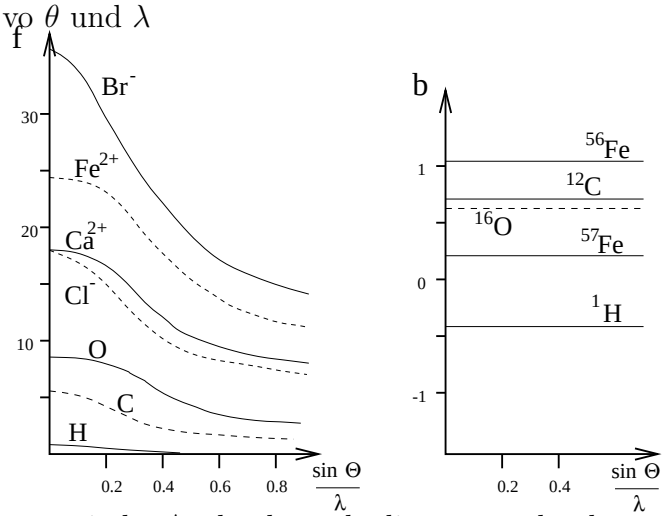
② Intensität

Integrale Intensität der an der Netzebenenschar hkl gebeugten Strahlung (im Pulverdiagramm):

$$\boxed{I_{hkl} = |\,F_{hkl}\,|^2\, H_{hkl} LPA}$$

mit:

- LP: Lorentz- und Polarisationsfaktor
- H_{hkl}: Flächenhäufigkeitsfaktor
- A: Absorptionsfaktor
- $F_{hkl} = \sum_{Atome j} f_j e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)}$ (für Röntgen)
- $F_{hkl} = \sum_{Atome j} b_j e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)}$ (für n)
- mit:
  - **Atomformfaktoren f/Streulängen b:** Abhängigkeit der 'Streukraft' eines Atoms vo θ und λ



  - **Phase:** Systematische Auslöschungsbedingungen durch zentrierte Gitter

Symbol		zusätzliche Atompositionen	Bedingung für das Auftreten von Reflexen
P	primitiv	-	-
I	2 fach primitiv	$x+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$	h+k+l=2n
C	2 fach primitiv	$x+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, z$	h+k=2n
F	4 fach primitiv	$x+\frac{1}{2}, y+\frac{1}{2}, z$ $x+\frac{1}{2}, y, z+\frac{1}{2}$ $x, y+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$	h+k=2n h+l=2n k+l=2n
R	3 fach primitiv	$x+\frac{1}{3}, y+\frac{2}{3}, z+\frac{2}{3}$ $x+\frac{2}{3}, y+\frac{1}{3}, z+\frac{1}{3}$	-h+k+l=3n