11.1. Grundlagen der Beugungsmethoden

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

$$n\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta_{hkl} \qquad \text{für orthorh. Gitter: } d_{hkl} = \sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}$$

Integrale **Intensität** der an der Netzebenenschar mit dem Millerindex hkl gebeugten Strahlung im Pulverdiagramm:

$$I_{hkl} = \mid F_{hkl} \mid^2 H_{hkl} LPA$$

mit (Röntgen)

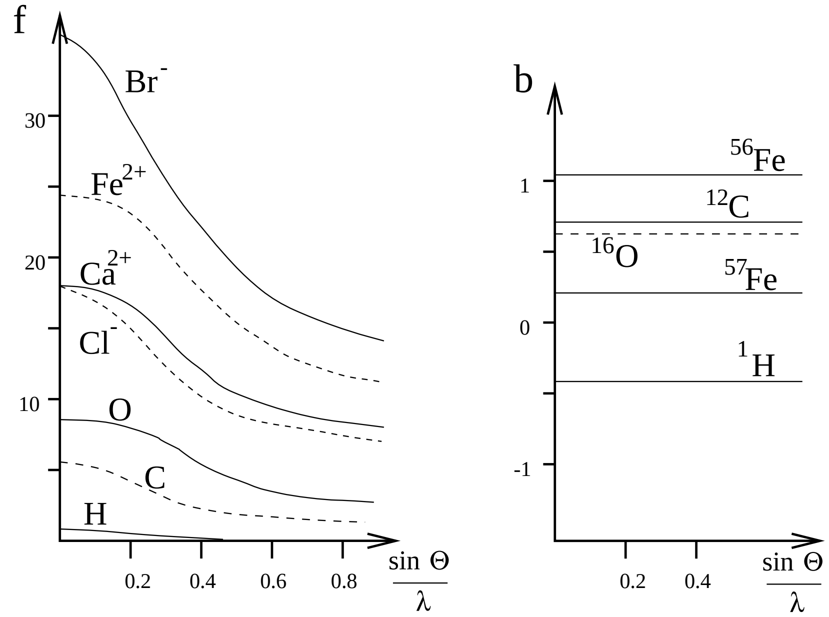
$$F_{hkl} = \sum_{Atome j} f_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

bzw. (Neutronen)

$$F_{hkl} = \sum_{Atome j} b_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

und L: Lorentzfaktor, P: Polarisationsfaktor
H_{hkl}: Flächenhäufigkeitsfaktor, A: Absorptionsfaktor

Atomformfaktoren f/Streulängen b:
Abhängigkeit der 'Streukraft' eines Atoms vom Beugungswinkel θ und der Wellenlänge λ



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