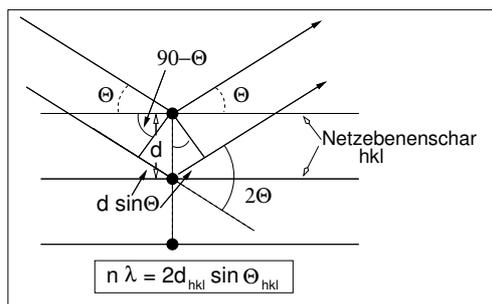


### 3. Grundlagen der Beugungsmethoden

#### ① 'Position' des Reflexes:



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

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

für orthorh. 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

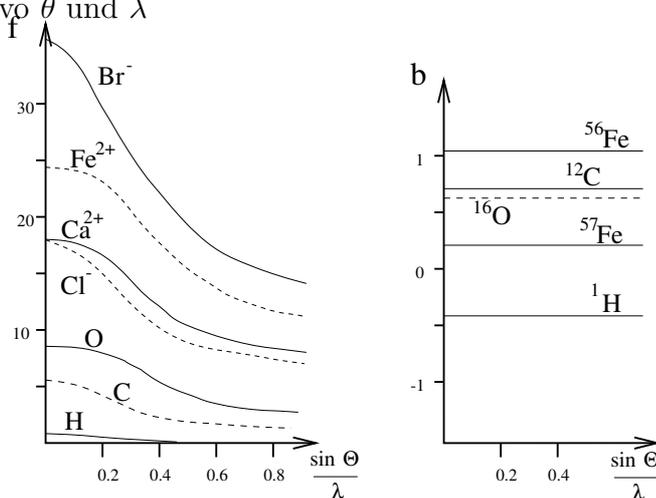
Integrale Intensität der an der Netzebenenchar  $hkl$  gebeugten Strahlung (im Pulverdiagramm):

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

mit:

- LP: Lorentz- und Polarisationsfaktor
- $H_{hkl}$ : Flächenhäufigkeitsfaktor
- A: Absorptionsfaktor
- $F_{hkl} = \sum_{\text{Atome } j} f_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$  (für Röntgen)
- $F_{hkl} = \sum_{\text{Atome } j} b_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$  (für n)
- mit:

– **Atomformfaktoren  $f$ /Streulängen  $b$ :** Abhängigkeit der 'Streukraft' eines Atoms von  $\theta$  und  $\lambda$



– **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 | $x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z$<br>$x + \frac{1}{2}, y, z + \frac{1}{2}$<br>$x, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ | $h+k=2n$<br>$h+l=2n$<br>$k+l=2n$         |
| R      | 3 fach primitiv | $x + \frac{1}{3}, y + \frac{2}{3}, z + \frac{2}{3}$<br>$x + \frac{2}{3}, y + \frac{1}{3}, z + \frac{1}{3}$              | $-h+k+l=3n$                              |