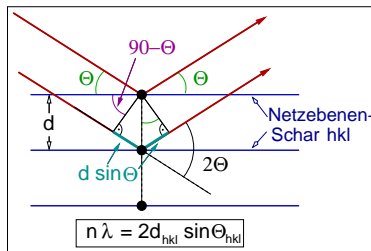


2. Grundlagen der Beugungsmethoden

① 'Position' des Reflexes:



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

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

für orthorhombische 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

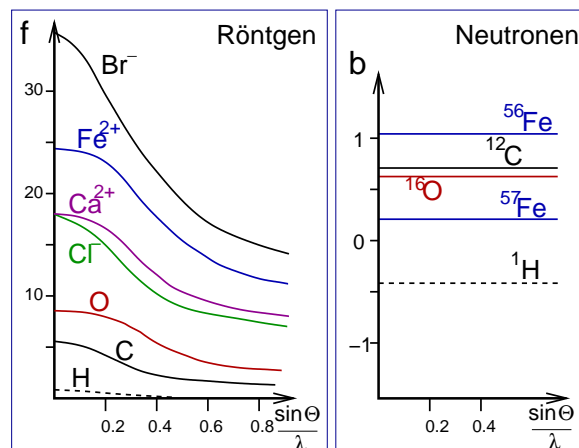
Integrale Intensität der an der Netzebenen-schar hkl gebeugten Strahlung (im Pulverdiagramm):

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

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 Neutronen)
- mit:

– **Atomformfaktoren f /Streulängen b :** Abhängigkeit der 'Streukraft' eines Atoms von 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	$x + \frac{1}{3}, y + \frac{2}{3}, z + \frac{2}{3}$ $x + \frac{2}{3}, y + \frac{1}{3}, z + \frac{1}{3}$	$-h + k + l = 3n$