11.2. Röntgenbeugung

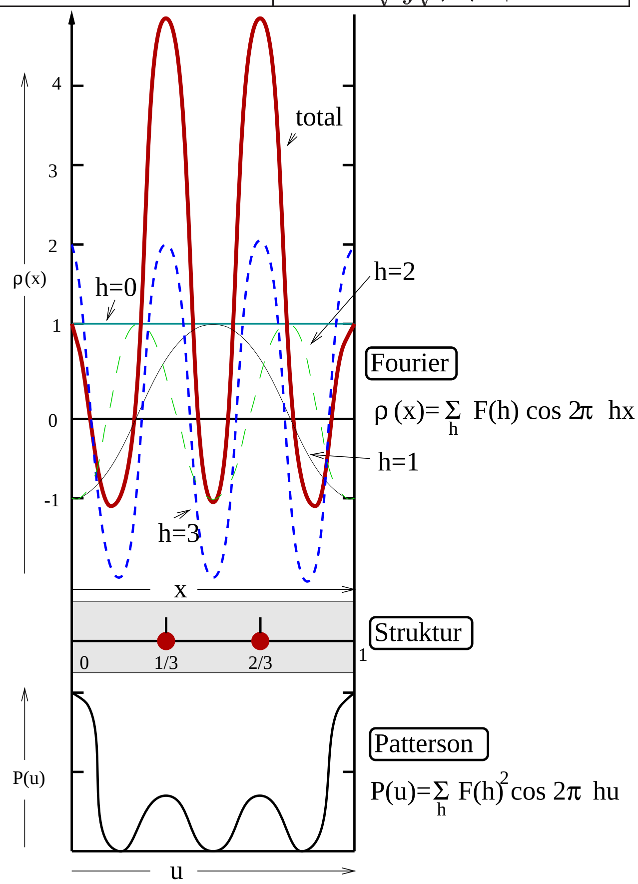
11.2.2. Einkristallmethode

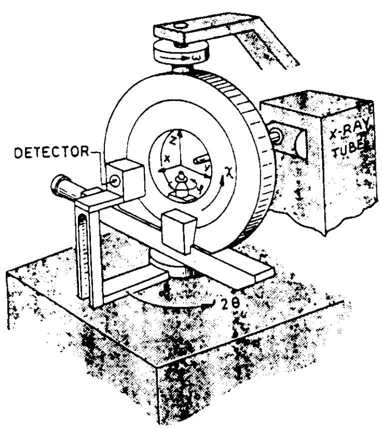
Realer, reziproker und Pattersonraum

Raum	reziprok	real	Vektor
Ort (Koord.)	$\vec{h}$ = h,k,l	$\vec{x}$ = x, y, z	$\vec{u}$ = u,v,w; $u = x_1 - x_2$ ...
Amplitude	Stukturfaktor F	Elektronendichte ρ	Pattersonfunktion P
Symmetrie	11 Laueklassen 81 Beugungssymbole aus F^2 <u>keine</u> Translationss.	32 Punktgruppen 230 Raumgruppen Translationss.	24 Pattersongruppen Harker-Geraden; Harker-Schnitte keine Translationss.
	$F_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^{N} f_j e^{2\pi i(\vec{h}\vec{x}_j)}$ $F_{\vec{h}} = \int \rho_{\vec{x}} e^{2\pi i \vec{h}\vec{x}} dV$	$\rho_{\vec{x}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F_{\vec{h}} e^{-2\pi i \vec{h}\vec{x}}$	$P_{\vec{u}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F_{\vec{h}}^2 e^{-2\pi i \vec{h}\vec{u}}$ $P_{\vec{u}} = \frac{1}{V} \int_V \rho_{\vec{x}} \rho_{\vec{x}+\vec{u}} dV$

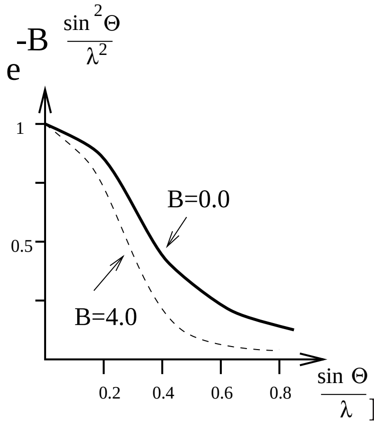
1-dimensionales Beispiel

h	F(h)
-3	2
-2	-1
-1	-1
0	2
1	-1
2	-1
3	2

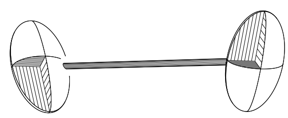




Vierkreisdiffraktometer



Temperaturfaktoren



Darstellung der Molekülstruktur von I_2