

3.4.4 Merkpunkte Kapitel 3.4

Die **Bragg-Bedingung** legt fest in welcher Raumrichtung bei gegebenem Gitter und einfallendem Wellenvektor $\underline{k}$ überhaupt Reflexe auftreten können, die **Strukturamplitude** F_S bestimmt, welche Intensität die Reflexe haben.

- Die Strukturamplitude enthält die Art ("j") und "Anordnung" ($\underline{r}_j$) der Atome der Basis des Kristalls.
- Ein Teil dieser Information steckt in den (tabellierten) **Atomformfaktoren** f_j .

$$F_S = \sum_j f_j \cdot \exp [i \cdot \underline{r}_j \cdot \underline{G}]$$

Die Auswertung der Formel für die Strukturamplitude führt zu **Auslöschungsregeln** für einige Gittertypen.

Es ist verhältnismäßig einfach das Beugungsbild eines gegebenen Kristalls zu errechnen.

- Die Umkehraufgabe ist sehr schwierig: Aus einem gegebenen Beugungsbild ist der vorliegende Kristall nicht einfach zu errechnen.
- Sofern jedoch noch Zusatzinformationen vorliegen, kann das Problem heute routinemäßig gelöst werden.

bcc Gitter $h + k + l =$ ungerade Zahl n_{ug}

fcc Gitter

$h, k, l =$

{

alle
gerade

alle
ungerade