

3.4.4 Merkmale Kapitel 3.4

- Die **Bragg-Bedingung** legt fest in welcher Raumrichtung bei gegebenem Gitter und einfallendem Wellenvektor \mathbf{k} überhaupt Reflexe auftreten können, die **Strukturamplitude** F_S bestimmt, welche Intensität die Reflexe haben.
 - Die Strukturamplitude enthält die Art ("j") und "Anordnung" (\mathbf{r}_j) der Atome der Basis des Kristalls.
 - Ein Teil dieser Information steckt in den (tabellierten) **Atomformfaktoren** f_j .
- Die Auswertung der Formel für die Strukturamplitude führt zu **Auslöschungregeln** 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.

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

bcc Gitter	$h + k + l =$	ungerade Zahl n_{ug}
fcc Gitter	$h, k, l =$	$\left\{ \begin{array}{l} \text{alle gerade} \\ \text{alle ungerade} \end{array} \right.$