

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	13
2	Kristallgitter	14
2.1	Das Translationsgitter	14
2.1.1	Die Elementarzelle	14
2.1.2	Atomparameter	16
2.1.3	Die sieben Kristallsysteme	17
2.2	Die 14 Bravais-Gitter	18
2.2.1	Hexagonale, trigonale und rhomboedrische Systeme	20
2.2.2	Reduzierte Zellen	23
3	Geometrie der Röntgenbeugung	25
3.1	Röntgenstrahlung	25
3.2	Interferenz am eindimensionalen Gitter	30
3.3	Die Laue-Gleichungen	32
3.4	Netzebenen und <i>hkl</i> -Indices	35
3.5	Die Braggsche Gleichung	37
3.6	Höhere Beugungsordnungen	38
3.7	Die Quadratische Braggsche Gleichung	39
4	Das reziproke Gitter	42
4.1	Vom realen zum reziproken Gitter	42
4.2	Ewald-Konstruktion	45
5	Strukturfaktoren	48
5.1	Atomformfaktoren	48
5.2	Auslenkungsparameter	50
5.3	Strukturfaktoren	54
6	Symmetrie in Kristallen	58
6.1	Einfache Symmetrieelemente	58
6.1.1	Kopplung von Symmetrieelementen	60
6.1.2	Kombination von Symmetrieelementen	60
6.2	Blickrichtungen	62
6.3	Translationshaltige Symmetrieelemente	64
6.3.1	Kombination von Translation und anderen Symmetrieelementen	65
6.3.2	Kopplung von Translation und anderen Symmetrieelementen	65

6.4	Die 230 Raumgruppen	68
6.4.1	Raumgruppen-Notation der International Tables for Crystallography	68
6.4.2	Zentrosymmetrische Kristallstrukturen	76
6.4.3	Die „asymmetrische Einheit“	76
6.4.4	Raumgruppentypen	78
6.4.5	Gruppe-Untergruppe-Beziehungen	78
6.5	Beobachtbarkeit von Symmetrie	80
6.5.1	Mikroskopische Struktur	80
6.5.2	Makroskopische Eigenschaften und Kristallklassen	80
6.5.3	Symmetrie des Translationsgitters	80
6.5.4	Symmetrie des Beugungsbildes: Die Laue-Gruppen	81
6.6	Bestimmung der Raumgruppe	84
6.6.1	Bestimmung der Lauegruppe	84
6.6.2	Systematische Auslöschungen	85
6.7	Transformationen	89
7	Experimentelle Methoden	92
7.1	Einkristalle: Züchtung, Auswahl und Montage	92
7.2	Röntgenbeugungsmethoden an Einkristallen	97
7.2.1	Filmmethoden	98
7.2.2	Vierkreis-Diffraktometer	101
7.2.3	Reflexprofile und Abtast-Modus	106
7.3	Flächendetektoren	110
7.4	Datenreduktion	117
7.4.1	LP-Korrektur	118
7.4.2	Standardabweichungen	119
7.4.3	Absorptionskorrektur	121
7.5	Andere Beugungsmethoden	124
7.5.1	Neutronenbeugung	124
7.5.2	Elektronenbeugung	125
8	Strukturlösung	126
8.1	Fouriertransformationen	126
8.2	Patterson-Methoden	128
8.2.1	Symmetrie im Pattersonraum.	130
8.2.2	Strukturlösung mit Harker-Peaks.	131
8.2.3	Bildsuchmethoden.	134
8.3	Direkte Methoden	135
8.3.1	Harker-Kasper-Ungleichungen.	135

8.3.2	Normalisierte Strukturfaktoren.	136
8.3.3	Sayre-Gleichung.	137
8.3.4	Triplett-Beziehungen.	138
8.3.5	Nullpunktswahl	141
8.3.6	Strategien zur Phasenbestimmung	142
9	Strukturverfeinerung	146
9.1	Methode der kleinsten Fehlerquadrate	146
9.1.1	Verfeinerung gegen F_o - oder F_o^2 -Daten.	151
9.2	Gewichte	152
9.3	Kristallographische R-Werte	154
9.4	Verfeinerungstechniken	155
9.4.1	Lokalisierung und Behandlung von H-Atomen	157
9.4.2	Verfeinerung mit Einschränkungen	158
9.4.3	Dämpfung	160
9.4.4	Restriktionen durch Symmetrie	160
9.4.5	Restelektronendichte	161
9.5	Verfeinerung mit der Rietveld-Methode	162
10	Spezielle Effekte	165
10.1	Fehlordnung	165
10.1.1	Besetzungs-Fehlordnung	165
10.1.2	Lagefehlordnung und Orientierungsfehlordnung	166
10.1.3	1- und 2-Dimensionale Fehlordnung	169
10.2	Modulierte Strukturen	170
10.3	Quasikristalle	171
10.4	Anomale Dispersion und „absolute Struktur“	171
10.4.1	Chiralität und „absolute Struktur“	178
10.5	Extinktion	181
10.6	Renninger-Effekt	183
10.7	Der $\lambda/2$-Effekt	185
10.8	Thermisch Diffuse Streuung (TDS)	186
11	Fehler und Fallen	188
11.1	Falsche Atomsorten	188
11.2	Verzwilligung	190
11.2.1	Klassifizierung nach dem Zwillingsselement	191
11.2.2	Klassifizierung nach dem makroskopischen Erscheinungsbild	191
11.2.3	Klassifizierung nach der Entstehung	192

11.2.4	Beugungsbilder von Zwillingskristallen und deren Interpretation	193
11.2.5	Verzwilligung oder Fehlordnung?	201
11.3	Fehlerhafte Elementarzellen	202
11.4	Raumgruppenfehler	203
11.5	Nullpunktsfehler	204
11.6	Schlechte Auslenkungsfaktoren	206
12	Interpretation der Ergebnisse	208
12.1	Bindungslängen und Winkel	208
12.2	Beste Ebenen und Torsionswinkel	209
12.3	Strukturgeometrie und Symmetrie	211
12.4	Strukturzeichnungen	213
12.5	Elektronendichten	217
13	Kristallographische Datenbanken	219
13.1	Inorganic Crystal Structure Database ICSD	219
13.2	Cambridge Structural Database CSD	219
13.3	Metals Crystallographic Data File CRYSTMET	221
13.4	Andere Datensammlungen zu Kristallstrukturen	221
13.5	Deponierung von Strukturdaten in den Datenbanken	221
13.6	Kristallographie im Internet	224
14	Gang einer Kristallstrukturbestimmung	225
15	Beispiel einer Strukturbestimmung	228
16	Literatur	249