

Inhalt

Einleitung	1
1. Entdeckung und Anwendungen der Röntgenbeugung an Kristallen	1
Entdeckung, Anwendungen, Neutronen- und Elektronen-Beugung	
2. Strahlenschutz	4
I. Röntgenstrahlen	9
1. Bau der Röntgenröhre	9
2. Spektrum der emittierten Strahlung	11
a) Spannungsabhängigkeit des Spektrums	11
b) Bremsstrahlung	12
c) Charakteristische Strahlung	13
3. Wechselwirkung mit Materie	14
a) Absorption	14
b) Kohärente Streuung	18
Streuung durch ein freies Elektron, Streuung durch ein Atom	
c) Inkohärente Streuung	22
4. Nachweis von Röntgenstrahlung	22
a) Photographische Registrierung	22
b) Registrierung mit Quantendetektoren	24
Proportionalzählrohre, Szintillationszähler, Halbleiter-Detektoren	
5. Erzeugung monochromatischer Strahlung	27
a) Durch Kristallreflexion	27
b) Durch Impulshöhenanalyse	29
c) Durch Filterung	29
II. Kristalle	33
1. Translationsperiodizität	33
a) Baueinheit, Elementarzelle	33
b) Raumgitter	37
c) Netzebenen	37
Netzebenenabstand und Normale, MILLERSche Indizes, Reziprokes Gitter	
d) Kristallographische Richtungen und Zonen	41
e) Stereographische Projektion	42
f) Transformationen im Raumgitter	45

2. Symmetrie	47
a) Kristallographische Symmetrie	47
b) Kristallographische Symmetrie-Elemente	52
c) Symmetrie der Raumgitter	58
d) Zentrierte Zellen, Kristallsysteme	59
e) Symmetrie der Baueinheit	64
Baueinheiten mit Eigensymmetrie, Baueinheiten ohne Eigensymmetrie	
f) Raumgruppen	70
g) Punktlagen	79
h) Mathematische Darstellung von Symmetrie-Operationen	80
III. Röntgenbeugung und reziprokes Gitter	83
1. Kohärenz	83
2. Beugung am Atompaar	85
3. Beugung an einer amorphen Substanz	88
4. Beugung am Kristall	89
a) Beugungsbedingungen	89
Berechnung der Streuamplitude, Gitterfaktor und Beugungsbedingungen	
b) Schärfe der Beugungsbedingungen	92
c) Geometrische Auswertung der Beugungsbedingungen	95
d) BRAGGSche Gleichung	99
e) EWALDSche Konstruktion	101
5. Mathematische Beziehungen zwischen Raumgitter und reziprokem Gitter	104
6. Intensität eines Reflexes	107
7. Zusammenhang zwischen Strukturfaktor und Elektronendichteverteilung	111
IV. Kristallographische Symmetrie und Beugungsbild	115
1. Übersicht	115
2. Symmetrie des reziproken Gitters	116
3. Intensitäten-Symmetrie	117
a) Punktsymmetrie der Intensitätsverteilung	117
b) Abweichungen von der FRIEDELschen Regel	120
c) LAUE-Klasse	122
4. Auslöschungen	123
a) Auslöschungen als Folge von Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen	123
b) Auslöschungen als Folge einer Zellzentrierung	126
c) Diffraktions-Symbol	129
5. Vortäuschung von Symmetrien	133
Übersicht, Zwillingskristalle	
V. Abweichungen vom Idealkristall und ihr Einfluß auf das Beugungsbild	139
1. Störungen des Kristallbaus	139
Bau des Realkristalls, Sonderfälle des Idealkristalls	
2. Röntgenbeugungs-Verfahren zum Nachweis von Baufehlern in Kristallen	146
Substitutions-Fehlordnung, Positions-Fehlordnung, Nachweis einzelner Versetzungen in fehlerarmen Kristallen	

3. Wärmebewegung und Beugungsbild	149
a) Übersicht	149
b) Unabhängig schwingende Atome	151
1-Atomige Struktur, Beliebige Struktur	
c) Mittlerer Temperaturfaktor	155
d) Gitterschwingungen	157
Schwingungstypen und Spektrum, Einfluß auf das Beugungsbild, Experimenteller Nachweis, Beugungsbild modulierter Strukturen	
4. Mischkristalle	163
a) Ordnungsmöglichkeiten	163
b) Beugungsbild bei statistischer Verteilung der Mischungspartner	164
c) Beugungsbild bei Überstrukturbildung	166
5. Domänenordnung in Überstrukturen	167
Entstehung, Beugungsbild	
6. Fehlgeordnete OD-Kristalle	173
VI. Die Schwenk- und LAUE-Methode und ihre Anwendungen	181
1. Einführung	181
2. Herstellung von Einkristall-Präparaten	181
a) Wahl geeigneter Kristalle	181
Kristallgröße und -form, Probeaufnahmen, Prüfung der Kristalle auf Identität	
b) Präparation	184
Goniometerkopf, Befestigung des Kristalls	
3. Technischer Aufbau einer Schwenkkamera	191
4. Anwendung der EWALDSchen Konstruktion zur Deutung von Schwenk- und LAUE-Aufnahmen	195
a) Schwenkaufnahmen	195
EWALDSche Konstruktion, Gitterkonstante in Richtung der Drehachse, Drehkristall-Aufnahmen, Größe des Schwenkbereiches	
b) Konvergenzmethode	200
c) LAUE-Aufnahmen	202
5. BERNAL-Koordinaten	204
6. Justage von Einkristallen	207
a) Bestimmung der Dejustierung aus Schwenkaufnahmen	207
Doppelschwenkaufnahmen	
b) Korrektur der Dejustierung	211
c) Hilfsgerät zur Justierung	214
7. Bestimmung der Orientierung eines Kristalls aus LAUE-Aufnahmen	214
8. Konstruktion des reziproken Gitters aus Schwenkaufnahmen	219
a) Möglichkeiten zur Bestimmung des Raumgitters eines Kristalls	219
b) Zeichnerische Konstruktion des reziproken Gitters	223
c) Beispiel zur Konstruktion des reziproken Gitters eines justierten Kristalls	230
d) Beispiel für die Konstruktion des reziproken Gitters eines regellos orientierten Kristalls	237

9.	Bestimmung der Symmetrie eines Kristalls aus Schwenk- und LAUE-Aufnahmen	240
a)	Arbeitsablauf	240
b)	Nachweis einer Intensitäten-Symmetrie mit Hilfe von Schwenk-Aufnahmen	241
c)	Nachweis einer Intensitäten-Symmetrie mit Hilfe von LAUE-Aufnahmen	243
d)	Bestimmung von Auslöschungen	244
	Allgemeine Auslöschungen, Zonale und seriale Auslöschungen	
e)	Beispiele zur Bestimmung des Diffraktions-Symbols	247
10.	Beispiele für Anwendungen der Schwenk- und LAUE-Methode	251
a)	Bestimmung der Orientierung von Kristallen	251
b)	Masse des Zellinhaltes	253
c)	Symmetrie von Molekülen und anderen Baugruppen	254
VII.	Sammlung von Intensitätsdaten für Kristallstrukturanalysen	257
1.	Elektronendichteverteilung in Kristallen	257
2.	4-Kreis Diffraktometer	259
a)	Bau und Arbeitsweise	259
	Gerätetypen, Arbeitsweise, Kontrollmessungen	
b)	Bestimmung der Orientierung des Kristalls	261
c)	Reflexionsgeometrie	265
3.	Äqui-Inklinations-Diffraktometer	267
4.	WEISSENBERG-Methode	267
a)	Bau der WEISSENBERG-Kamera	267
b)	Geometrie der Aufnahme-Verfahren	269
c)	Abbildung des reziproken Gitters	272
d)	Anfertigung von WEISSENBERG-Aufnahmen	273
	Aufnahme einer 0. Schicht, Aufnahme einer höheren Schicht, Vermeidung von Doppelreflexionen (RENNINGER Effekt), Wahl des Schwenkbereiches	
e)	Indizierung der Aufnahmen	279
	Allgemeine Regeln, Beispiel, Bemerkungen zu WEISSENBERG-Aufnahmen von Kristallen höherer Symmetrie	
f)	Konstruktion des reziproken Gitters	285
5.	DE JONG-BOUMAN- und BUERGER-Methode	286
a)	Verfahren zur unverzerrten Abbildung des reziproken Gitters	286
b)	Anwendungen der Verfahren	288
c)	Ergänzung einer Serie von WEISSENBERG-Aufnahmen durch Präzessions-Aufnahmen	291
	Umsetzen des Kristalls, Justierung für Präzessions-Aufnahmen	
VIII.	Intensitätsmessung und Datenreduktion	299
1.	Integrale Intensitäten der Reflexe eines Mosaik-Kristalls	299
2.	Extinktion	303
a)	Einfluß auf die Ergebnisse von Kristallstrukturanalysen	303
b)	Primäre Extinktion	304
	Bemerkungen zur Beugung am Idealkristall, Geometrisches Modell der primären Extinktion	
c)	Sekundäre Extinktion	307
d)	Vermeidung von Extinktionsfehlern	308

3. Bestimmung integraler Intensitäten	308
a) Probleme bei der Intensitätsmessung	308
Voraussetzungen, Berücksichtigung des Mosaik-Aufbaues, Berücksichtigung des Untergrundes	
b) Intensitätsmessung mit Diffraktometer-Methoden	310
Grundlagen, scan-Arten	
c) Intensitätsmessung mit Filmmethoden	314
Grundlagen, Integrierende Messung, Visuelle Schätzung, Integrierende Registrierung	
d) Berechnung integraler Intensitäten aus Maximal-Intensitäten	321
Voraussetzungen, Aufspaltungskorrektur, Reflexgrößenänderung als Folge der Filmtranslation	
4. Korrektur integraler Intensitäten	325
a) Polarisationsfaktor	326
b) LORENTZfaktor	327
c) Absorptionsfaktor	329
5. Intensitätenangleich	331
a) Angleich verschieden stark belichteter Aufnahmen	331
b) Angleich von Aufnahmen verschiedener Schichten	331
IX. Pulvermethoden und ihre Anwendungen	335
1. Einführung	335
a) Anwendungsgebiete	335
b) EWALDSche Konstruktion des Beugungsbildes polykristalliner Präparate	335
2. Aufnahme-Verfahren	339
a) DEBYE-SCHERRER-Verfahren	339
b) GUINIER-Verfahren	342
c) Pulver-Diffraktometer	346
Geometrie des Strahlenganges, Registrierung des Diagramms, Intensitätsmessung	
3. Präparatherstellung	352
Für DEBYE-SCHERRER-Kameras, für GUINIER-Kameras, für Pulver-Diffraktometer	
4. Indizierung von Pulveraufnahmen	356
a) Indizierung bei bekannten Gitterkonstanten	356
Bestimmung von θ aus den Aufnahmen, Probleme bei der Zuordnung beobachteter und berechneter d -Werte	
b) Verfeinerung von Gitterkonstanten	358
Hochsymmetrische Kristalle mit kleinen Gitterkonstanten, Methode der kleinsten Quadrate	
c) Bestimmung von Gitterkonstanten	361
Kristalle beliebiger Symmetrie, Kristalle höherer Symmetrie	
5. Identifikation und qualitative Gemengeanalyse	367
Identifikation, Qualitative Gemengeanalyse	
6. Quantitative Gemengeanalyse	372
Intensität von Pulverlinien, Gemenge aus zwei Komponenten, Gemengeanalyse mit innerem Standard	

7. Untersuchungen unter veränderten Temperatur- und Druckbedingungen am Präparat	376
a) Anwendungsgebiete	376
Hochtemperatur-Untersuchungen, Tieftemperatur-Untersuchungen, Hochdruck-Untersuchungen	
b) Experimentelle Technik	379
Heizzusätze, Präparation für Hochtemperatur-Untersuchungen, Tieftemperatur-Zusätze, Hochdruck-Zusätze	
8. Texturuntersuchungen	382
a) Entstehung und praktische Bedeutung von Texturen	381
b) Texturanalyse	385
Fasertexturen, Walztexturen, Texturanalyse bei unbekannter Vorzugsrichtung	
9. Bestimmung von Teilchengrößen und Versetzungsdichten	390
a) Einfluß der Teilchengröße und von Verzerrungen des Raunggitters auf das Beugungsbild	390
Linienverbreiterung als Folge kleiner Teilchengrößen, Kleinwinkelstreuung, Linienverbreiterung als Folge hoher Versetzungsdichten, Spannungsmessung	
b) Berechnung und Bestimmung von Linienbreiten	393
Linienbreite und Teilchengröße, Linienbreite und Schwankungen des Netzebenenabstandes, Deutung und Messung von Linienprofilen	
X. Literatur	397
XI. Register	401