

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Kristallgitter	3
2.1	Das Translationsgitter	3
2.1.1	Die Elementarzelle	4
2.1.2	Atomparameter	5
2.1.3	Die sieben Kristallsysteme	6
2.2	Die 14 Bravais-Gitter	7
2.2.1	Hexagonale, trigonale und rhomboedrische Systeme	8
2.2.2	Reduzierte Zellen	11
3	Röntgenbeugung	13
3.1	Röntgenstrahlung	13
3.2	Interferenz am eindimensionalen Gitter	18
3.3	Die Laue-Gleichungen	20
3.4	Netzebenen und <i>hkl</i> -Indices	22
3.5	Die Braggsche Gleichung	24
3.6	Höhere Beugungsordnungen	25
3.7	Die quadratische Braggsche Gleichung	26
4	Das reziproke Gitter	29
4.1	Vom realen zum reziproken Gitter	29
4.2	Ewald-Konstruktion	32
5	Strukturfaktoren	35
5.1	Atomformfaktoren	35
5.2	Auslenkungsparameter	37
5.3	Strukturfaktoren	40
6	Symmetrie in Kristallen	45
6.1	Einfache Symmetrieelemente	45
6.1.1	Kopplung von Symmetrieelementen	47

6.1.2	Kombination von Symmetrieelementen	47
6.2	Blickrichtungen	49
6.3	Translationshaltige Symmetrieelemente	51
6.3.1	Kombination von Translation und anderen Symmetrieelementen	51
6.3.2	Kopplung von Translation und anderen Symmetrieelementen	51
6.4	Die 230 Raumgruppen	56
6.4.1	Raumgruppen-Notation der International Tables for Crystallography	56
6.4.2	Zentrosymmetrische Kristallstrukturen	61
6.4.3	Die „asymmetrische Einheit“	61
6.4.4	Raumgruppentypen	62
6.4.5	Gruppe-Untergruppe-Beziehungen	63
6.5	Beobachtbarkeit von Symmetrie	64
6.5.1	Mikroskopische Struktur	64
6.5.2	Makroskopische Eigenschaften und Kristallklassen	65
6.5.3	Symmetrie des Translationsgitters	65
6.5.4	Symmetrie des Beugungsbildes: Die Laue-Gruppen	65
6.6	Bestimmung der Raumgruppe	68
6.6.1	Bestimmung der Lauegruppe	68
6.6.2	Systematische Auslöschungen	70
6.7	Transformationen	73
7	Experimentelle Methoden	77
7.1	Einkristalle: Züchtung, Auswahl und Montage	77
7.2	Röntgenbeugungsmethoden an Einkristallen	83
7.3	Flächendetektorsysteme	83
7.4	Einkristall-Messung auf einem Flächendetektorsystem	89
7.5	LP-Korrektur	96
7.6	Berechnung der Standardabweichungen	97
7.7	Absorptionskorrektur	99
7.8	Andere Beugungsmethoden	101
7.8.1	Neutronenbeugung	101
7.8.2	Elektronenbeugung	103
7.9	Zeitaufgelöste Kristallographie	103
8	Strukturlösung	107
8.1	Fouriertransformationen	107
8.2	Patterson-Methoden	110
8.2.1	Symmetrie im Pattersonraum	111
8.2.2	Strukturlösung mit Harker-Peaks	112
8.2.3	Bildsuchmethoden	114
8.3	Direkte Methoden	115

8.3.1	Harker-Kasper-Ungleichungen	115
8.3.2	Normalisierte Strukturfaktoren	116
8.3.3	Sayre-Gleichung	117
8.3.4	Triplett-Beziehungen	118
8.3.5	Nullpunktswahl	121
8.3.6	Strategien zur Phasenbestimmung	122
8.3.7	Alternative Direkte Methoden	125
9	Strukturverfeinerung	127
9.1	Methode der kleinsten Fehlerquadrate	128
9.1.1	Verfeinerung gegen F_o - oder F_o^2 -Daten	132
9.2	Gewichte	133
9.3	Kristallographische R -Werte	134
9.4	Verfeinerungstechniken	136
9.4.1	Lokalisierung und Behandlung von H-Atomen	137
9.4.2	Verfeinerung mit Einschränkungen	138
9.4.3	Dämpfung	140
9.4.4	Restriktionen durch Symmetrie	140
9.4.5	Restelektronendichte	141
9.5	Verfeinerung mit der Rietveld-Methode	141
10	Spezielle Effekte	145
10.1	Fehlordnung	145
10.1.1	Besetzungs-Fehlordnung	145
10.1.2	Lagefehlordnung und Orientierungsfehlordnung	146
10.1.3	1- und 2-Dimensionale Fehlordnung	149
10.2	Modulierte Strukturen	150
10.3	Quasikristalle	151
10.4	Anomale Dispersion und „absolute Struktur“	152
10.4.1	Chiralität und „absolute Struktur“	157
10.5	Extinktion	160
10.6	Renninger-Effekt	162
10.7	Der $\lambda/2$ -Effekt	163
10.8	Thermisch Diffuse Streuung (TDS)	164
11	Fehler und Fallen	167
11.1	Falsche Atomzuordnung	168
11.2	Verzwilligung	169
11.2.1	Klassifizierung nach dem Zwillingselement	170
11.2.2	Klassifizierung nach dem makroskopischen Erscheinungsbild	171
11.2.3	Klassifizierung nach der Entstehung	171
11.2.4	Beugungsbilder von Zwillingskristallen und deren Interpretation	172

11.2.5 Verzwilligung oder Fehlordnung?	178
11.3 Fehlerhafte Elementarzellen	179
11.4 Raumgruppenfehler	180
11.5 Nullpunktsfehler	182
11.6 Schlechte Auslenkungsfaktoren	183
12 Interpretation der Ergebnisse	185
12.1 Bindungslängen und Winkel	185
12.2 Beste Ebenen und Torsionswinkel	187
12.3 Struktur und Symmetrie	188
12.4 Strukturzeichnungen	189
12.5 Elektronendichten	194
13 Kristallographische Datenbanken	195
13.1 Inorganic Crystal Structure Database ICSD	195
13.2 Metals Crystallographic Data File CRYSTMET	197
13.3 Pearson's Crystal Data PCD	197
13.4 Cambridge Structural Database CSD	197
13.5 Protein-Datenbank (PDB)	200
13.6 Crystallography Open Database COD	200
13.7 Andere Datensammlungen zu Kristallstrukturen	200
13.8 Deponierung von Strukturdaten in den Datenbanken	200
13.9 Kristallographie im Internet	201
14 Gang einer Kristallstrukturbestimmung	203
15 Beispiel einer Strukturbestimmung	207
Anhang: Kristallographische Lehrbücher und Programme	229
Literatur	233
Sachverzeichnis	237