

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Kristallgitter</b>	<b>3</b>
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
<b>3</b>	<b>Röntgenbeugung</b> . . . . .	<b>13</b>
3.1	Röntgenstrahlung . . . . .	13
3.2	Interferenz am eindimensionalen Gitter . . . . .	18
3.3	Die Laue-Gleichungen . . . . .	20
3.4	Netzebenen und $hkl$ -Indices . . . . .	22
3.5	Die Braggsche Gleichung . . . . .	24
3.6	Höhere Beugungsordnungen . . . . .	25
3.7	Die quadratische Braggsche Gleichung . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Das reziproke Gitter</b> . . . . .	<b>29</b>
4.1	Vom realen zum reziproken Gitter . . . . .	29
4.2	Ewald-Konstruktion . . . . .	32
<b>5</b>	<b>Strukturfaktoren</b> . . . . .	<b>35</b>
5.1	Atomformfaktoren . . . . .	35
5.2	Auslenkungsparameter . . . . .	37
5.3	Strukturfaktoren . . . . .	40
<b>6</b>	<b>Symmetrie in Kristallen</b> . . . . .	<b>45</b>
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	<b>Experimentelle Methoden</b> . . . . .	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	<b>Strukturlösung</b> . . . . .	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 Triplet-Beziehungen . . . . .	118
8.3.5 Nullpunktswahl . . . . .	121
8.3.6 Strategien zur Phasenbestimmung . . . . .	122
8.3.7 Alternative Direkte Methoden . . . . .	125
<b>9 Strukturverfeinerung . . . . .</b>	<b>127</b>
9.1 Methode der kleinsten Fehlerquadrate . . . . .	128
9.1.1 Verfeinerung gegen $F_0$ - oder $F^2$ -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
<b>10 Spezielle Effekte . . . . .</b>	<b>145</b>
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
<b>11 Fehler und Fallen . . . . .</b>	<b>167</b>
11.1 Falsche Atomzuordnung . . . . .	168
11.2 Verzwillingung . . . . .	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
<b>12 Interpretation der Ergebnisse . . . . .</b>	<b>185</b>
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
<b>13 Kristallographische Datenbanken . . . . .</b>	<b>195</b>
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
<b>14 Gang einer Kristallstrukturbestimmung . . . . .</b>	<b>203</b>
<b>15 Beispiel einer Strukturbestimmung . . . . .</b>	<b>207</b>
<b>Anhang: Kristallographische Lehrbücher und Programme . . . . .</b>	<b>229</b>
<b>Literatur . . . . .</b>	<b>233</b>
<b>Sachverzeichnis . . . . .</b>	<b>237</b>