

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
I. Kristallographische Grundlagen	7
1. Symmetrieelemente	7
2. Symmetriehängige Punktlagen	10
3. Hintereinanderschaltung von Symmetrieelementen	10
4. Kristallklassen, Kristallsysteme und Laue-Gruppen	14
5. Nomenklatur der Kristallklassen	14
6. Zusatzsymmetrieelemente und Raumgruppen	22
7. Wahl der Elementarzelle und Bravais-Gitter	24
II. Beugung von Röntgenstrahlen in Kristallen	30
1. Die kinematische Theorie	30
2. Reziprokes Gitter und Bragg'sche Gleichung	36
3. Der Einfluß der Kristallstruktur auf die Röntgeninterferenzen	42
4. Das integrale Reflexionsvermögen	43
5. Einfluß der Absorption	48
6. Einfluß der Temperatur auf die Intensität der Röntgeninterferenzen	50
7. Anisotrope Temperaturfaktoren	53
8. Die Symmetrie des reziproken Gitters	53
a) Symmetriezentrum	55
b) Drehachsen und Spiegelebenen	57
c) Drehachsen und Drehinversionsachsen	58
d) Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen	59
9. Basiszentrierte Raumzentrierte und Flächenzentrierte Gitter -- Integrale Auslöschungsgesetze	62

III. Die wichtigsten Aufnahmeverfahren	65
1. Das Drehkristallverfahren	66
2. Das Weissenberg-Verfahren	70
Die Weissenberg-Aufnahmen höherer Schichten (Normalstrahl-, Äqui-Inklinations- und Flat-Cone-Verfahren)	74
Der Lorentz-Faktor für das Weissenberg-Verfahren	78
3. Die Bürger-Präzessionsmethode	81
Der Lorentz-Faktor für die Präzessionsmethode	85
4. Das DeJong-Bouman-Verfahren	90
5. Messung der Intensitäten der Röntgeninterferenzen	93
a) Photographische Verfahren	93
b) Diffraktometerverfahren	94
IV. Die Anwendung von Fourier-Reihen bei der Kristallstrukturanalyse	98
1. Die Elektronendichte	98
2. Die Patterson-Funktion	103
V. Absolutbestimmung der Strukturamplituden und Symmetriezentrumtest — Wilson Statistik	109
VI. Phasenbestimmung der Strukturamplituden	115
1. Die Auswertung der Patterson-Funktion	116
a) Die Schweratommethode	116
b) Bildsuchfunktionen	117
c) Die Fourier-Transformations- und die Faltmolekülmethode	120
2. Experimentelle Phasenbestimmung	126
a) Anomale Streuung	126
b) Der isomorphe Ersatz	132
3. Die direkten Methoden der Phasenbestimmung	134
4. Festlegung des Nullpunktes der Elementarzelle durch willkürliche Wahl einiger Phasenwinkel	140
5. Anwendung der direkten Phasenbestimmung — Symbolische Additionsmethode	146
VII. Verfeinerung der Lage- und Schwingungsparameter der Atome	149
Literaturverzeichnis zu den Kapiteln I—VII	152

VIII. Beispiele	158
Einleitung	158
1. Strukturen, die mit der Schweratom-Methode bearbeitet wurden	158
a) Cholesterin	162
b) 1,8-Diaza-cyclotetradecan · 2 HBr	162
c) Carnosin-Cu(II)-Komplex	163
d) Testosteron-HgCl ₂ -Komplex	165
e) Diosgenin-jodacetat	167
f) Ergoflavin	168
g) Kreysiginin	170
h) Morphin · HJ · 2H ₂ O	171
i) Samandarin	173
j) Der π -Komplex Pikrinsäure / 1-Brom-2-aminonaphthalin	174
k) AgClO ₄ /Benzol-Komplex	174
l) Vitamin B ₁₂	175
m) Cephalosporin C	176
2. Strukturaufklärungen nach der Methode des isomorphen Ersatzes	180
a) Phthalocyanin	181
b) L-Ephedrin	182
c) Codein	183
d) Proteine	185
e) Hühnereiweiß-Lysozym	187
f) Ribonuclease	190
g) Myoglobin	192
h) Hämoglobin	194
3. Faltmolekülmethode	196
a) Bullvalen	196
b) Ecdyson	197
4. Bildsuchfunktionen und Vektorkonvergenzmethode	198
a) Samandarin	199
b) Annonitin	200
c) Rubidiumbenzyl-penicillin	200
d) Eisen(III)-benzhydroxamat-trihydrat	201
5. Direkte Methoden	203
a) Digitoxigenin	203
b) Reserpin	204

XII

c) Batrachotoxin	205
d) L-5-Carboxy-7-formyl-1,2,5,6-tetrahydro-3H-pyrrolo [1,2a] azepin-3-on	206
e) 6-Hydroxyerinamin	208
f) 4-Methyl-pentaleno [6.6a. 1.2-def] heptalen	210
g) 6,6-Dimethylamino-5-aza-azulen	212
Literaturverzeichnis zu Kapitel VIII	214
Mathematischer Anhang	219
1. Vektoren	221
1.1. Definition und Veranschaulichung von Vektoren	221
1.2. Skalarprodukt, Vektorprodukt, orthonormierte und schiefwinklige Basis	230
2. Komplexe Zahlen	240
2.1. Definition und Veranschaulichung der komplexen Zahlen	240
2.2. Die Eulersche Formel	244
3. Fourier-Reihen und Fourier-Integrale	254
3.1. Fourier-Reihen	254
3.2. Fourier-Integrale	261