

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>I. Kristallographische Grundlagen</b> .....	<b>7</b>
1. Symmetrieelemente .....	7
2. Symmetrieabhängige Punktlagen .....	10
3. Hintereinanderschaltung von Symmetrieoperationen .....	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
<b>II. Beugung von Röntgenstrahlen in Kristallen</b> .....	<b>30</b>
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

<b>III. Die wichtigsten Aufnahmeverfahren</b> .....	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 De Jong-Bouman-Verfahren .....	90
5. Messung der Intensitäten der Röntgeninterferenzen .....	93
a) Photographische Verfahren .....	93
b) Diffraktometerverfahren .....	94
 <b>IV. Die Anwendung von Fourier-Reihen bei der Kristallstruktur-</b> <b>analyse</b> .....	98
1. Die Elektronendichte .....	98
2. Die Patterson-Funktion .....	103
 <b>V. Absolutbestimmung der Strukturamplituden und Symmetriezen-</b> <b>trumtest — Wilson Statistik</b> .....	109
 <b>VI. Phasenbestimmung der Strukturamplituden</b> .....	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 will-	
kürliche Wahl einiger Phasenwinkel .....	140
5. Anwendung der direkten Phasenbestimmung — Symbolische	
Additionsmethode .....	146
 <b>VII. Verfeinerung der Lage- und Schwingungsparameter der Atome</b> .....	149
 <b>Literaturverzeichnis zu den Kapiteln I—VII</b> .....	152

<b>VIII. Beispiele</b> .....	158
------------------------------	-----

<b>Einleitung</b> .....	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 <sub>2</sub> -Komplex .....	165
e) Diosgenin-jodacetat .....	167
f) Ergoflavin .....	168
g) Kreysiginin .....	170
h) Morphin · HJ · 2H <sub>2</sub> O .....	171
i) Samandarin .....	173
j) Der $\pi$ -Komplex Pikrinsäure / 1-Brom-2-aminonaphthalin .....	174
k) AgClO <sub>4</sub> /Benzol-Komplex .....	174
l) Vitamin B <sub>12</sub> .....	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) Samandaridin .....	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
 <b>Literaturverzeichnis zu Kapitel VIII .....</b>	 214
 <b>Mathematischer Anhang .....</b>	 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