

Inhalt

	Seite
Einleitung	11
I. Röntgenstrahlen	13
a) Entstehung und Eigenschaften. Grundtypen von Röntgenröhren	13
1. Die gashaltige Röntgenröhre	14
2. Die gasfreie Röntgenröhre (Elektronenröhre)	16
b) Spektrale Energieverteilung. Monochromatische Eigenstrahlung. Polychromatisches Bremspektrum	17
c) Monochromatisierung der Strahlung	22
d) Gleichrichtung der Hochspannung: Ventilröhre. Beispiele von Röntgenröhren und sonstiger apparativer Einrichtungen	23
Kristallographie des Diskontinuums	28
II. Einige Grundbegriffe aus der Gittergeometrie	28
a) Der Raumgitterbegriff. Punktnetz. Punktreihe	28
b) Der Begriff „Elementarkörper“	35
c) Netzebenenabstand d_{hkl} in den verschiedenen Systemen	36
III. Der Begriff der Translation	37
a) Allgemeines über Translationsgitter und die Verhältnisse bei kubischen Gittern	39
b) Die übrigen Bravais'schen Raumgitterarten	44
1. Die Gitter von Systemen niedriger Symmetrie	44
2. Die Gitter der wirteligen Kristallsysteme	47
c) Bezeichnungsweise der Translationsgruppen	52
d) Bravais-Gitter und Elementarkörper	53
e) Beziehungen zwischen kubischer und hexagonaler Punktanordnung. Dichteste Kugelpackungen	55
IV. Die Weiterentwicklung der Strukturtheorie	59
a) Die Sohncke'schen Punktsysteme	60
1. Grundgedanke der Sohncke'schen Konzeption	60
2. Strukturparallelepiped: „Gitter mit Basis“	62
3. Erweiterung der ursprünglichen Konzeption	63
b) Symmetrieelemente im Feinbau der Kristalle	66
1. Schraubenachsen	67
2. Gleitspiegelebenen	71
c) Die Vollendung der klassischen Strukturtheorie	73

	Seite
V. Die Schoenflies'schen Raumgruppen. Symmetriegerüste einiger Raumgruppen als Beispiele	75
a) Punktlagen: Zähligkeit und Eigensymmetrie. Freiheitsgrade	79
b) Beispiel einer Struktur	84
c) Bezeichnungsweise der Kristallklassen und Raumgruppen	88
1. Die Schoenflies'schen Symbole	89
2. Die Hermann-Mauguin'schen Symbole	89
d) Tabelle der 230 Raumgruppen	92
Das Interferenzphänomen am Kristallgitter und die Erschließung der Kristallstruktur	99
VI. Das Laue-Verfahren	99
a) Experimentelle Durchführung und Versinnbildlichung als Reflexion an inneren Strukturebenen	99
b) Die Interferenzbedingungen	104
1. Ableitung der drei Laue'schen Gleichungen	104
2. Zweidimensionale Kreuzgitterspektren und Übergang zur Raumgitter-Interferenz	113
c) Das Bragg'sche Beugungsgesetz	119
d) Die Bragg'sche Gleichung im Lichte der Laue'schen Betrachtungsweise	122
1. Deutung der Laue-Bilder nach Bragg'scher Auffassung	122
2. Überführung der Laue'schen Gleichungen in das Bragg'sche Gesetz	123
3. Strukturelle Bedeutung der Vervielfachung Miller'scher Indizes	125
e) Indizierung einer Laue-Aufnahme	128
1. Übertragung des Lauebildes in Gnomonische Projektion	128
2. Ermittlung des Achsenverhältnisses aus der Gnomonischen Projektion des Lauebildes	132
f) Die im Laue-Bild direkt erkennbaren kristallographischen Gesetzmäßigkeiten	134
1. Der Zonenverband	134
2. Die Symmetrie	137
g) Die Strukturermittlung der Alkalihalogenide und die Errechnung der Standard-Gitterkonstante von NaCl	138
VII. Das Bragg'sche Spektrometerverfahren	142
a) Prinzip und experimentelle Durchführung	142
b) Die Verifizierung der NaCl-Struktur	146

	Seite
Die gebräuchlichsten Methoden der Kristallstruktur-analyse	152
VIII. Die Verfahren nach der Pulvermethode	152
a) Experimentelle Grundlagen	152
1. Aufnahmeprinzip bei der Debye-Scherrer-Methode	152
2. Vermessungsvorgang und notwendige Korrekturen	157
a) Absorptionskorrektur	157
β) Verwendung von Eichsubstanzen	159
3. Die asymmetrische Methode nach Straumanis	161
4. Fokussierende Aufnahmeverfahren	162
a) Das Seemann-Bohlin-Verfahren	162
β) Die Verwendung der Guinier-Camera	163
5. Pulveraufnahmen unter Anwendung von Zählrohr-goniometern (Diffraktometermethode)	165
b) Rechnerische Auswertung von Debye-Scherrer-Diagrammen	167
c) Graphische Auswertung	174
1. Die Methode der Schiebestreifen	174
2. Indizierung von Debye-Diagrammen tetragonaler und hexagonaler Substanzen (Methode der Kurven-tafeln)	176
IX. Strukturfaktor und Intensitätsberechnung	179
a) Resultierende Strukturamplitude	179
b) Weitere Intensitätsfaktoren	187
X. Die Auslöschungsgesetze	195
a) Auslöschungen bei mehrfach-primitiven Bravais-Gittern: Allgemeine Auslöschungsgesetze	195
1. Körperzentriertes kubisches Gitter	195
2. Allseitig flächenzentrierte Gitter	196
3. Basiszentrierte Gitter	197
b) Die für die verschiedenen Raumgruppen charakteristi-schen Auslöschungen: Spezielle Auslöschungsgesetze	198
1. Gleitspiegelebenen	200
2. Schraubenachsen	200
XI. Drehkristallverfahren mit photographischer Registrierung der Reflexe	202
a) Schichtlinienaufnahmen	202
1. Prinzip und experimentelle Durchführung	202
2. Auswertung einer Schichtlinienaufnahme	207
3. Der Begriff des „Reziproken Gitters“	215
4. Diskussion der Möglichkeit eindeutiger Indizierung von Schichtlinienaufnahmen	219

	Seite
b) Geometrische Grundlagen des Drehkristallverfahrens .	221
1. Die Bernal'sche Konstruktion betreffend die Beugung der Röntgenstrahlen	221
2. Geometrische Entwicklung der für das Drehkristall- verfahren in Betracht kommenden Gleichungen . .	224
c) Schwenkaufnahmen	228
d) Röntgengoniometer-Verfahren	233
1. Weissenberg-Aufnahmen	233
2. Schiebold-Sauter-Methode	244
3. Unverzerrte Abbildung von Ebenen des Rezipro- ken Gitters: „Retigraph“-Konstruktionen	246
XII. Allgemeiner Gang der Strukturanalyse in drei Etappen .	254
a) Erste Etappe: Bestimmung von Größe, Inhalt und Gestalt des Elementarkörpers	254
1. Dimensionen des Elementarkörpers	254
2. Materieller Inhalt des Elementarkörpers	254
3. Ermittlung der Translationsgruppe	256
b) Zweite Etappe: Ermittlung der Raumgruppe	256
c) Dritte Etappe: Punktlagenbesetzung	257
1. Das Verfahren „Trial and error“	257
2. Fourier- und Patterson-Röntgenanalyse der Kristalle	259
Literatur	263
Sachverzeichnis	266
Namenverzeichnis	270