

# Inhalt

	Seite
<b>Einleitung</b> . . . . .	11
<b>I. Röntgenstrahlen</b> . . . . .	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 Bremsspektrum . . . . .	17
c) Monochromatisierung der Strahlung . . . . .	22
d) Gleichrichtung der Hochspannung: Ventilröhre. Beispiele von Röntgenröhren und sonstiger apparativer Einrichtungen . . . . .	23
<b>Kristallographie des Diskontinuums</b> . . . . .	28
<b>II. Einige Grundbegriffe aus der Gittergeometrie</b> . . . . .	28
a) Der Raumgitterbegriff. Punktnetz. Punktreihe . . . . .	28
b) Der Begriff „Elementarkörper“ . . . . .	35
c) Netzebenenabstand $d_{hkl}$ in den verschiedenen Systemen . . . . .	36
<b>III. Der Begriff der Translation</b> . . . . .	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 Translationsguppen . . . . .	52
d) Bravais-Gitter und Elementarkörper . . . . .	53
e) Beziehungen zwischen kubischer und hexagonaler Punktanordnung. Dichteste Kugelpackungen . . . . .	55
<b>IV. Die Weiterentwicklung der Strukturtheorie</b> . . . . .	59
a) Die Sohncke'schen Punktsysteme . . . . .	60
1. Grundgedanke der Sohncke'schen Konzeption . . . . .	60
2. Strukturparallelepipede: „Gitter mit Basis“ . . . . .	62
3. Erweiterung der ursprünglichen Konzeption . . . . .	63
b) Symmetrieelemente im Feinbau der Kristalle . . . . .	66
1. Schraubenachsen . . . . .	67
2. Gleitspielebenen . . . . .	71
c) Die Vollendung der klassischen Strukturtheorie . . . . .	73

	Seite
<b>V. Die Schoenflies'schen Raumgruppen. Symmetriegerüste einiger Raumgruppen als Beispiele . . . . .</b>	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
 <b>Das Interferenzphänomen am Kristallgitter und die Erschließung der Kristallstruktur . . . . .</b>	99
<b>VI. Das Laue-Verfahren . . . . .</b>	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
 <b>VII. Das Bragg'sche Spektrometerverfahren . . . . .</b>	142
a) Prinzip und experimentelle Durchführung . . . . .	142
b) Die Verifizierung der NaCl-Struktur . . . . .	146

	Seite
<b>Die gebräuchlichsten Methoden der Kristallstrukturanalyse . . . . .</b>	152
<b>VIII. Die Verfahren nach der Pulvermethode . . . . .</b>	152
a) Experimentelle Grundlagen . . . . .	152
1. Aufnahmeprinzip bei der Debye-Scherrer-Methode	152
2. Vermessungsvorgang und notwendige Korrekturen	157
a) Absorptionskorrektur . . . . .	157
b) Verwendung von Eichsubstanzen . . . . .	159
3. Die asymmetrische Methode nach Straumanis . .	161
4. Fokussierende Aufnahmeverfahren . . . . .	162
a) Das Seemann-Bohlin-Verfahren . . . . .	162
b) 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
<b>IX. Strukturfaktor und Intensitätsberechnung . . . . .</b>	179
a) Resultierende Strukturamplitude . . . . .	179
b) Weitere Intensitätsfaktoren . . . . .	187
<b>X. Die Auslöschungsgesetze . . . . .</b>	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
<b>XI. Drehkristallverfahren mit photographischer Registrierung der Reflexe . . . . .</b>	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
<b>XII. Allgemeiner Gang der Strukturanalyse in drei Etappen . . . . .</b>	<b>254</b>
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
<b>Literatur . . . . .</b>	<b>263</b>
<b>Sachverzeichnis . . . . .</b>	<b>266</b>
<b>Namenverzeichnis . . . . .</b>	<b>270</b>