

D. Schwarzenbach

# Kristallographie

Mit 139 Abbildungen und 21 Tabellen

Übersetzt von J. Glinnemann

Bibliothek Chemie / Materialwissenschaft  
Technische Universität Darmstadt



Springer

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Geometrische Kristallographie</b> .....	1
1.1 Einleitung .....	3
1.2 Analytische Geometrie schiefwinkliger Bezugssysteme .....	4
1.2.1 Koordinatensysteme .....	4
1.2.2 Reziproke Koordinatensysteme .....	5
1.2.3 Metrischer Tensor .....	8
1.3 Polyedergestalt der Kristalle .....	10
1.3.1 Konstanz der Flächenwinkel .....	10
1.3.2 Gesetz der rationalen Indizes .....	11
1.3.3 Zone .....	12
1.3.4 Stereographische Projektion .....	12
1.4 Periodische Parkettierungen und Kristallstrukturen .....	14
1.4.1 Translationengitter .....	14
1.4.2 Kanten, Flächen und Gitter .....	18
1.4.3 Reziprokes Gitter .....	19
1.5 Was ist ein Kristall? .....	20
1.5.1 Quasiperiodische und aperiodische Strukturen .....	20
1.5.2 Realstruktur, Ordnung und Unordnung .....	22
<b>2 Symmetrie</b> .....	25
2.1 Einleitung .....	27
2.2 Symmetrioperationen .....	27
2.2.1 Affine Transformationen .....	27
2.2.2 Gruppen .....	29
2.2.3 Drehung, Drehspiegelung, Drehinversion .....	30
2.2.4 Translationen .....	32
2.3 Symmetrieelemente .....	33
2.3.1 Fixpunkt, Drehachse und Spiegelebene .....	33
2.3.2 Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen .....	35
2.3.3 Symbole für Symmetrieelemente .....	39
2.4 Symmetrie und Metrik der Kristallgitter .....	42
2.4.1 Mit Translationen verträgliche Symmetrieelemente .....	42
2.4.2 Gittermetrik und Punktgruppensymmetrie .....	43
2.4.3 Punktgruppen und Raumgruppen .....	44
2.5 Kristallklassen und Kristallsysteme .....	46
2.5.1 Der Klassenbegriff .....	46
2.5.2 Erzeugende von Gruppen .....	46

2.5.3	Erzeugung von Punktgruppen .....	49
2.5.4	Die 32 Kristallklassen: Axiale Gruppen .....	51
2.5.5	Die 32 Kristallklassen: Tetraeder- und Oktaedergruppen .....	52
2.5.6	Nichtkristallographische Punktgruppen .....	59
2.5.7	Die 11 Laue-Klassen .....	60
2.5.8	Die sieben Kristallsysteme .....	61
2.5.9	Internationale Symbole für Punktgruppen .....	63
2.5.10	Symbole nach Schoenflies .....	65
2.5.11	Abstrakte Gruppen .....	66
2.6	Klassifizierung von Gittern .....	67
2.6.1	Die 14 Bravais-Gitter .....	67
2.6.2	Holoedrie und Meroedrie.....	71
2.7	Symmetrie periodischer Strukturen .....	73
2.7.1	Die 17 Ebenengruppen .....	73
2.7.2	Äquivalente Positionen .....	76
2.7.3	Die 230 Raumgruppen .....	78
2.7.4	Raumgruppen-Beispiele aus den <i>International Tables Vol. A</i> .....	80
2.7.5	Klassifizierung der Kristalle nach ihrer Symmetrie .....	88
2.8	Kristallstrukturen .....	89
2.9	Miller-Bravais-Indizes des hexagonalen Koordinatensystems .....	91
<b>3</b>	<b>Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen .....</b>	<b>93</b>
3.1	Einleitung .....	95
3.1.1	Röntgenstrahlenmikroskop .....	95
3.1.2	Interferenz ebener Wellen .....	97
3.1.3	Das optische Gitter .....	99
3.2	Streuung von Röntgenstrahlen durch ein Elektron .....	104
3.2.1	Klassisches Elektron nach Thomson .....	104
3.2.2	Polarisationsfaktor .....	105
3.3	Streuung von Röntgenstrahlen durch Materie .....	107
3.3.1	Fourier-Transformation und Phasenproblem .....	107
3.3.2	Primäre und sekundäre Extinktion .....	109
3.3.3	Atomistisches Modell: Der Atomformfaktor .....	110
3.3.4	Atomistisches Modell: Thermische Schwingungen im Kristall .....	113
3.4	Beugung durch eine periodische Struktur .....	116
3.4.1	Die Laue-Gleichungen .....	116
3.4.2	Das Bragg-Gesetz .....	120
3.4.3	Ewald-Konstruktion .....	122
3.4.4	Ein- und zweidimensionale periodische Strukturen .....	123
3.5	Beugungsmethoden .....	126
3.5.1	Laue-Methode .....	126
3.5.2	Drehkristallmethode .....	130
3.5.3	Pulvermethode .....	132
3.6	Physik der Röntgenstrahlung .....	134
3.6.1	Erzeugung von Röntgenstrahlung .....	134

3.6.2	Monochromatisierung von Röntgenstrahlung, Absorption .....	138
3.6.3	Synchrotronstrahlung .....	141
3.7	Intensität gebeugter Strahlung .....	142
3.7.1	Der Strukturfaktor .....	142
3.7.2	Integrale Intensität und Lorentz-Faktor .....	144
3.7.3	Das Friedel-Gesetz .....	146
3.8	Raumgruppenbestimmung .....	147
3.8.1	Kristallsystem und Laue-Klasse .....	147
3.8.2	Integrale Reflexionsbedingungen: Gitterzentrierungen .....	148
3.8.3	Zonale Reflexionsbedingungen: Gleitspiegelebenen .....	150
3.8.4	Serielle Reflexionsbedingungen: Schraubenachsen .....	151
3.8.5	Drehungen und Drehinversionen .....	152
3.8.6	Formale Ableitung der Reflexionsbedingungen .....	152
3.8.7	Beispiele .....	153
3.9	Bemerkungen zur Lösung des Phasenproblems .....	154
3.9.1	Fourier-Serien .....	154
3.9.2	Die Patterson-Funktion .....	155
<b>4</b>	<b>Tensoreigenschaften der Kristalle .....</b>	<b>163</b>
4.1	Anisotropie und Symmetrie .....	165
4.2	Tensoren .....	166
4.2.1	Ursache und Effekt .....	166
4.2.2	Tensorinvarianten bezüglich des Koordinatensystems .....	168
4.2.3	Neumannsches Prinzip .....	170
4.2.4	Polare und axiale Vektoren .....	172
4.2.5	Tensoren 2. Stufe: Bezugsfläche .....	173
4.3	Mechanische Spannung und Deformation .....	179
4.3.1	Mechanischer Spannungstensor .....	179
4.3.2	Deformationstensor .....	181
4.3.3	Voigt-Notation .....	185
4.4	Beispiele für Tensoreigenschaften .....	185
4.4.1	Elektrische Polarisierung: Tensor 2. Stufe .....	185
4.4.2	Elastizität: Tensor 4. Stufe .....	189
4.4.3	Elastische Wellen im Kristall .....	197
4.4.4	Pyroelektrizität: Tensor 1. Stufe .....	200
4.4.5	Piezoelektrizität: Tensor 3. Stufe .....	201
4.4.6	Allgemeine Beschreibung von Gleichgewichtseigenschaften .....	207
4.5	Kristalloptik .....	210
4.5.1	Doppelbrechung .....	210
4.5.2	Wellennormale und Lichtstrahl .....	211
4.5.3	Gesetz von Snellius .....	213
4.5.4	Die Fletcher-Indikatrix .....	216
4.5.5	Optische Achsen .....	219
4.5.6	Das Polarisationsmikroskop .....	222

---

<b>5 Übungen</b> .....	227
5.1 Übungen zu Kapitel 1 .....	229
5.2 Übungen zu Kapitel 2 .....	235
5.3 Übungen zu Kapitel 3 .....	239
5.4 Übungen zu Kapitel 4 .....	245
<b>Bibliographie</b> .....	251
<b>Sachwortverzeichnis</b> .....	253