

**Modulbezeichnung:** Struktur kristalliner Materie I (PW-SKM I) **5 ECTS**  
(Structure of Crystalline Matter I)

Modulverantwortliche/r: Rainer Hock

Lehrende: Rainer Hock

Startsemester: SS 2021

Dauer: 1 Semester

Turnus: jährlich (SS)

Präsenzzeit: 60 Std.

Eigenstudium: 90 Std.

Sprache: Deutsch

### Lehrveranstaltungen:

Struktur kristalliner Materie I (SS 2021, Vorlesung, 2 SWS, Rainer Hock)

Übungen zur Struktur kristalliner Materie I (SS 2021, Übung, 2 SWS, Rainer Hock)

### Inhalt:

- Einführung in die Symmetrietheorie kristallin geordneter Materie
- Zwei- und dreidimensionale Punktgruppen anhand von Beispielen, Gruppenmultiplikationstabellen
- Ein-, zwei- und dreidimensionale Raumgruppen mit Beispielen
- Röntgenbeugung am Kristall in der kinematischen Näherung, Thompson-Streuung am Elektron, Rayleigh Streuung am Atom, Streuung an der kristallographischen Elementarzelle, Beugung am dreidimensional periodischen Gitter, die Gittersumme
- Geometrie der Röntgenbeugung, skalare und vektorielle Beschreibung, Bragggleichung, Lauegleichungen und Ewaldkonstruktion
- Das Beugungsbild als Fouriertransformierte der Elektronendichteverteilung
- Informationsgehalt von Beugungsbildern an Beispielen
- Apparaturen zur Aufnahme von Röntgenbeugungsbildern

Die Studierenden erwerben Kenntnisse

- der Beschreibung kristalliner Materie
- der Punktgruppen und Raumgruppen
- der Physik der Beugung an gitterhaften Strukturen
- der Grundlagen der Röntgenbeugung vom Elementarprozess der Streuung am Elektron bis zur Beugung am dreidimensionalen Kristallgitter
- des Zusammenhangs zwischen Elektronendichte und Strukturfaktor
- der Informationsgehalte von Beugungsaufnahmen an Kristallen
- der verwendeten Messapparaturen für Röntgenbeugungsuntersuchungen

### Lernziele und Kompetenzen:

Die Studierenden

- erläutern die wesentlichen Inhalte der Vorlesung
- wenden die Methoden auf konkrete Beispiele an

### Literatur:

Liebe Studierende,

jeder Mensch hat einen unterschiedlichen Zugang zu den vermittelten Lehrinhalten. Dies gilt für alle Fächer. Das Buch von M. Julian, an dem ich mich im Teil ‚Symmetrietheorie‘ orientiere, muss nicht die für sie am besten geeignete Darstellung des Stoffes sein. Ich halte es allerdings für eine sehr gut gelungene Darstellung der Kristallsymmetrie mit hervorragender graphischer Aufbereitung.

- Maureen M. Julian, Foundations of Crystallography with Computer Applications, CRC Press, Second Edition 2015, Taylor & Francis Group

Wegen des unterschiedlichen Geschmacks gebe ich Ihnen hier eine Literaturliste an die Hand, - auch für den Teil ‚Röntgenbeugung‘ (hier reicht ein Studium des Buches von Julian sicher nicht aus) -, die Ihnen alternative Fachbücher nennt.

M. J. Buerger, ‚Kristallographie - Eine Einführung in die geometrische und röntgenographische Kristallkunde‘, de Gruyter Lehrbuch

W. Borchardt-Ott, ‚Kristallographie: Eine Einführung für Naturwissenschaftler, Springer Verlag Will Kleber, Hans-Joachim Bartsch, Joachim Böhm und Detlef Klimm, ‚Einführung in die Kristallographie‘, Oldenburg Verlag R. Borchardt & S. Turowski, ‚Symmetrietheorie der Kristallographie - Modelle der 32

Kristallklassen zum Selbstbau', Oldenburg Verlag (wenn Sie Zeit zum Basteln haben...) W. Massa, , Kristallstrukturbestimmung', Teubner Studienbücher Chemie

D. Schwarzenbach & J. Glinnemann, , Kristallographie', Springer Verlag (Die beiden Herren wissen genau, wovon sie schreiben ...)

B. E. Warren, , X-ray Diffraction', Dover Books on Physics (halte ich für eine sehr gute Darstellung der Grundlagen der Röntgenbeugung zu einem sehr guten Verhältnis Preis/Seite ...)

R. Allmann, Röntgenpulverdiffraktometrie, Springer Verlag (Mit dem Schwerpunkt auf der Beugung an polykristallinen Materialien vermittelt das Buch auch eine gute Einführung in die Grundlagen der Beugung)

C. Giacovazzo ed., 'Fundamentals of Crystallography', IUCR Texts on Crystallography 2 Oxford Science Publications

F. D. Bloss, 'Crystallography and Crystal Chemistry', Mineralogical Society of America (Kristallchemie kommt in ihrer Grundvorlesung nicht vor, der Grundlagenteil zur Kristallographie sehr wohl)

C. Hammond, , The Basics of Crystallography and Diffraction' IUCR Texts on Crystallography 12, Oxford Science Publications (Ein Dauerbrenner... , wenn Sie wissen, was drin steht und es verstanden haben, wissen Sie recht viel)

E. Zolotoyabko, 'Basic Concepts in Crystallography', Wiley-VCH

P. G. Radaelli, 'Symmetry in Crystallography' IUCR Texts on Crystallography 17, Oxford Science Publications

M. Ladd & R. Palmer, 'Structure Determination by X-Ray Crystallography', Kluwer Academic/Plenum Publishers (Ein sehr gutes Standardwerk bereits in der 4ten Auflage. In der 4ten Auflage bekommen Sie eine CD gratis dazu, mit allen Programmen, die sie für eine Strukturaufklärung benötigen.)

J. M. Cowley, , Diffraction Physics', North-Holland Personal Library (Für ihre Grundvorlesung zu umfangreich. Ich nenne das Buch trotzdem: Wenn Sie Beugungsphysik konsistent und detailliert abgehandelt finden wollen, dann dort)

J. Als-Nielsen & D. McMorrow, , Elements of Modern X-Ray Physics, Wiley

D. W. Bennett, 'Understanding Single-Crystal X-Ray Crystallography, Wiley-VCH (Ein dicker Schinken, viel Info für's Geld, sehr ansprechend gemacht, ein gutes Buch)

C. Suryanarayana & M. G. Norton, , X-Ray Diffraction - A practical Approach', Plenum Press New York and London ( - eigentlich eine Anleitung zu praktischem Arbeiten im Bereich der Pulverbeugungsmethoden)

U. Müller, 'Symmetriebeziehungen zwischen verwandten Kristallstrukturen: Anwendungen der kristallographischen Gruppentheorie in der Kristallchemie, Studienbücher Chemie, Teubner/Vieweg Verlag

Falls es interessiert, wie die Gruppentheorie in der Kristallographie Anwendungen findet, ist dieses Buch zu empfehlen. Ich kann das Thema leider immer nur punktuell ansprechen.

Kurzbeschreibung: In der Kristallchemie und Kristallphysik spielen die Beziehungen zwischen den Symmetriegruppen (Raumgruppen) kristalliner Feststoffe eine besondere Rolle. In Teil 1 dieses Buches von Müller sind die mathematischen Hilfsmittel zusammengestellt: die Grundbegriffe der Kristallographie, insbesondere der Symmetrielehre, die Theorie der kristallographischen Gruppen und die Formalismen der hier gebrauchten kristallographischen Berechnungen. In Teil 2 des Buches wird die Anwendung auf Probleme der Kristallchemie aufgezeigt. Zahlreiche Beispiele illustrieren, wie man die kristallographische Gruppentheorie heranziehen kann, um Verwandtschaften zwischen Kristallstrukturen aufzuzeigen, Ordnung in die Unmenge der Kristallstrukturen zu bringen, mögliche Kristallstrukturtypen vorherzusagen, Phasenumwandlungen zu analysieren, das Phänomen der Domänen- und Zwillingsbildung in Kristallen zu verstehen und Fehler bei der Kristallstrukturanalyse zu vermeiden.

---

### Verwendbarkeit des Moduls / Einpassung in den Musterstudienplan:

Das Modul ist im Kontext der folgenden Studienfächer/Vertiefungsrichtungen verwendbar:

#### [1] Physik (Bachelor of Science)

(Po-Vers. 2020w | NatFak | Physik (Bachelor of Science) | Gesamtkonto | Physikalische Wahlfächer | Struktur kristalliner Materie I)

Dieses Modul ist daneben auch in den Studienfächern "Physics (Master of Science)", "Physik (1. Staatsprüfung für das Lehramt an Gymnasien)", "Physik mit integriertem Doktorandenkolleg (Bachelor of Science)", "Physik

mit integriertem Doktorandenkolleg (Master of Science)" verwendbar.

---

**Studien-/Prüfungsleistungen:**

Struktur kristalliner Materie I (Prüfungsnummer: 483846)

(englische Bezeichnung: Structure of Crystalline Matter)

Prüfungsleistung, Klausur, Dauer (in Minuten): 90

Anteil an der Berechnung der Modulnote: 100%

Erstablingung: SS 2021, 1. Wdh.: SS 2021 (nur für Wiederholer)

1. Prüfer: Rainer Hock

---