

folgendermaßen: Man formt den Ausdruck für $\sin \vartheta_{hkl}$ unter Einsetzen von $r = V/J$ so um, daß nur die Verhältnisse der Achsen a/b und c/b vorkommen. Dies ist möglich, da $\sin \vartheta$ ein dimensionsloser echter Bruch und $h^2 + k^2 + l^2$ eine ganze Zahl ist. Dann berechnet man für die vermuteten Netzebenen (hkl) unter Annahme der einfachsten d -Werte (die man durch Abzählen gewinnt) die $\sin \vartheta$ -Werte und vergleicht sie mit den nach 1) gefundenen des Diagrammes. Lassen sich alle Spektren in dieser Weise eindeutig zuordnen, so ist

1. das Verhältnis der Achsen des Elementarparallelepipeds gleich dem Achsenverhältnis des makroskopischen Kristalls,

2. die Wahl der s -Werte und der Netzebenen richtig getroffen. Nunmehr ist es einfach, den Parameter T_{uvw} , d. i. die Fundamentalperiode, in Richtung der Drehachse zu bestimmen. Dazu werden in 4b) die beobachteten Werte von r_{hkl} , $\sin \vartheta_{hkl}$ und s eingesetzt, und T_{uvw} jeweils berechnet. Da sich dies für jede Netzebene ausführen läßt, kann T_{uvw} als Mittelwert mit Genauigkeit gefunden werden. Wählt man als Drehachsen die kristallographischen Achsen a , b , c , so erhält man sogleich die Kantenlängen des Elementarparallelepipeds als Identitätsperioden in diesen Richtungen.

Die weitere Verwendung der Indizes der ermittelten Netzebenen zur Strukturbestimmung erfolgt wie beim Bragg'schen und Debye-Scherrer-Verfahren mit Hilfe passender Tabellen für die 230 Raumgruppen. Durch Verwendung von Ebenen allgemeiner Lage werden die Fundamentalperioden a , b , c geprüft; durch passende Anordnung der Drehachse wird erreicht, daß spezielle Flächen zur Reflexion gelangen, für die besondere Kriterien gelten. In geeigneten Fällen kann schon aus einem Drehspektrogramm die Raumgruppe ermittelt werden.

20. Beispiele röntgenogrammetrisch ermittelter Kristallstrukturen.

Sehr einfach sind unter den bekannt gewordenen feinbaulichen Architekturen die der Metalle Aluminium, Kupfer, Silber, Gold, Blei. Sie besitzen einen Elementarkörper mit den Metallatomen an den Ecken und in den Flächenmitten eines Würfels (Fig. 532, 14 S. 209). Seine Kantenlänge a beträgt in 10^{-8} cm bei Al 4,07; Cu 3,61; Ag 4,06; Au 4,05; Pb 4,91.

Das Bragg'sche Steinsalzmodell zeigt Fig. 565, S. 230. Danach lagern die Na-Atome an den Ecken und auf den Flächenmitten des würfelförmigen Elementarkörpers, Cl-Atome in dessen Zentrum und auf den Kantenmitten. Entsprechendes gilt für LiF, KCl, KBr und Verwandte. Die Länge a der Würfelkante der Elementarkörper beträgt für LiF 4,20; NaCl 5,63; KCl 6,27; KBr $6,58 \cdot 10^{-8}$ cm.

Beim Flußspat, CaF_2 (Fig. 575), fand man einen flächenzentrierten Ca-Würfel, in welchem 8 F so angeordnet sind, daß sie im Mittelpunkt der

Ähnlich ist die Zinkblende ZnS (Fig. 576). Bei ihr bildet das Zink einen flächenzentrierten Würfel; seine acht Zellen sind aber nun abwechselnd in ihrer Mitte durch ein S-Atom besetzt. $a = 5,41 \cdot 10^{-8}$ cm.

Von derselben Architektur erwies sich der Diamant (Fig. 577). Sowohl an Stelle von Zn als S ist hier C zu setzen $a = 3,53 \cdot 10^{-8}$ cm. Es tritt bei ihm eine Tetraederstruktur (die aliphatische Verknüpfungsart der Kohlenstoffverbindungen) vortrefflich heraus, insbesondere wenn man die C-Figuration mittels eines anderen Ausschnittes aus dem Gitter nach Art der Fig. 578 zeichnet.

Als Gegenstück sei der Graphit, die zweite Modifikation von C, erwähnt und mit Diamant verglichen. Bringt man den Elementarkörper des letzteren mit einer seiner Diagonalen von Ecke zu Ecke in vertikale Stellung, so erscheint er als Rhomboeder $\{10\bar{1}1\}$ und das Tetraeder im C-Würfel als trigonale Pyramide $\{0221\}$ mit der Grundfläche $\{0001\}$. Den Graphitbau erhält man nach Debye und Scherrer durch Dilatation des Diamantmodells in Richtung der besagten Körperdiagonale. Die horizontalen Ausmaße bleiben dieselben. Wie am Würfel liegen die C-Atome an den Ecken und auf den Flächenmitten des nun schlank rhomboedrigen Elementarkörpers; die innere beim Diamanten tetraedrische Pyramide ist zu einer steileren trigonalen Pyramide geworden, und ihre Grundfläche und Spitze liegen nunmehr in den Ebenen, die man durch die Atome auf den Flächenmitten kennzeichnen kann. Die Ausmaße sind in Fig. 579 eingetragen.

21. Kristallographisch-chemische Deutung der Strukturmodelle¹⁾.

1. Die Elementarkörper stellen stereochemische Formeln vor. Man muß sich bei ihrer Deutung vorstellen, daß sich die Schemata in gleichbleibender Periode viele Tausende von Malen bis zur Größe des sichtbaren Kristalls fortsetzen. Somit gehört z. B. ein Eckenatom der Fig. 580 des Steinsalzes zu $\frac{1}{8}$, eins auf der Kante zu $\frac{1}{4}$ und auf einer Fläche zu $\frac{1}{2}$ seiner Interessensphäre dem fundamentalen Raumteil an, während eins im Innern voll zählt. Danach besagt z. B. die Formel Fig. 580 4 Na Cl , Fig. 575 S. 243 4 Ca F_2 , Fig. 576 4 Zn S , Fig. 577 8 C . Es bedeutet das indes nicht die Molekulargröße der Substanz; es handelt sich vielmehr lediglich um kristallographische Ausschnitte des Punktsystems. Die Kalkspatraumfigur läßt sich z. B. aufteilen, wie es in Fig. 582 geschehen ist, die dem Spaltkörper entspricht, oder auch wie in Fig. 581. Erstere enthält 4 Ca CO_3 , letztere 2 Ca CO_3 . Überdies hat diese den Charakter eines Primitiv-Raumgitters, d. h. es läßt sich aus ihm das ganze Raumgebilde durch Translation aufbauen.

Beim Kristallisieren haben die vorher freien Molekeln ihre Individualität eingebüßt; sie sind zu einer neuen Einheit der Aggregation,

¹⁾ Ausführlicheres in F. Rinne, Das feinbauliche Wesen der Materie nach dem Vorbilde der Kristalle, 2. u 3. Auflage, 1922, Gebr. Bornträger, Berlin.