

Book Review

Röntgenpulverdiffraktometrie; Rechnergestützte Auswertung, Phasenanalyse und Strukturbestimmung

Allmann, Rudolf (unter Mitwirkung von Kern, Arnt)

Springer-Verlag, Heidelberg, 2002.
278 Seiten, EUR 29.95, ISBN 3-540-43967-6

Der „Allmann“, das m.W. einzige deutschsprachige Lehrbuch, das ausschließlich der Pulver-Röntgenographie gewidmet ist, liegt jetzt in zweiter, überarbeiteter Auflage vor. Das (Taschen-) Buch gliedert sich in sieben Hauptteile: Nach einer zweiseitigen Einleitung (A) mit einer kurzen Schilderung der Anfänge der Röntgenbeugung bis zur Formulierung der Bragg'schen Gleichung folgt das Kapitel Röntgenstrahlen (B), das Erzeugung, Monochromatisierung, Nachweis, Absorption, sowie (m.E. etwas zu früh und auch etwas zu kurz) grundlegende Aspekte der Beugung von Röntgenstrahlen an kristalliner Materie zum Inhalt hat. Im Abschnitt C (Kristalle) werden zunächst einige kristallographische Grundbegriffe eingeführt; überraschenderweise (angesichts der Kapitelüberschrift) ist dann seine zweite Hälfte der Indizierung von Röntgenpulverreflexen, der kleinste-Quadrate-Verfeinerung von Gitterkonstanten sowie systematischen Messfehlern bei der Produktion von Pulverdiffraktogrammen gewidmet (die Behandlung des letzteren dieser Themen hätte m.E. auch aus didaktischer Sicht weiter nach hinten platziert gehört). Abschnitt D befasst sich mit der technischen Seite der Messung von Pulverdiagrammen. Das Buch hält hier mehr als sein Titel verspricht, denn vor der Röntgenpulverdiffraktometrie werden auch die verschiedenen pulverröntgenographischen *Film*methoden besprochen. Die *Transmissions*-Diffraktometrie kommt insgesamt etwas kurz weg.

Die sich anschließende zweite Hälfte des Buches ist der Verarbeitung der diffraktometrisch gewonnenen Rohdaten (Diffraktogramme) gewidmet. Abschnitt E beschreibt den Weg von der Rohdatei zur Reflexdatei, also von der gemessenen Intensitätskurve zum Datensatz mit Reflexlagen, -halbhöhen -breiten und -intensitäten, und behandelt dabei Themen wie Kurvenglättung, $K\alpha_2$ -Eliminierung, Bestimmung von Reflexlagen und Korrektur systematischer Messfehler. Kapitel F beschreibt Möglichkeiten zum Einsatz der Reflexliste (DIF-Datei) (also ebendieses Datensatzes) hauptsächlich für die Phasenidentifizierung, aber auch für die Bestimmung von Kristallitgrößen und Textur. Das abschließende Kapitel G befasst sich mit dem Einsatz der Rohdatei, zunächst nochmals im Hinblick auf die Phasenidentifizierung; es folgen (wieder nicht ganz passend zur Kapitelüberschrift) Abschnitte zur Berechnung theoretischer Diffraktogramme aus Kristallstrukturdaten, die dann in die Besprechung der Rietveld-methode zur Verfeinerung von Kristallstrukturen münden. Dieser Abschnitt (G.4) entstand unter Mitwirkung von *A. Kern*, Autor des einschlägigen Programmsystems TOPAS. Folgerichtig und dankenswerterweise beschreibt der letzte Unterabschnitt (G.4.5) die erst seit relativ kurzer Zeit in der Praxis erprobte Fundamentalparametermethode zur Rietveldanalyse, für deren erfolgreiche Implementierung das genannte Programm bekannt ist.

Das über weite Strecken angenehm zu lesende Buch bietet einen weitgehend umfassenden Überblick über die Grundlagen und das wissenschaftliche Potential pulverröntgenographischer Methoden. Es enthält zahlreiche wertvolle praktische Tipps nicht nur für die Anwender dieser Methoden sondern auch für potentielle Designer neuer Auswertesoftware. Nicht immer ist der Text auf den neuesten Stand gebracht worden. So besitzen Labor-Röntgenröhren heute in der Regel einen *Keramik*körper (anstelle von Glas, S. 9); zu jüngeren Arbeiten über die ab-initio-Strukturbestimmung aus Pulverdaten mittels Direktraum-Methoden findet sich nichts. In formaler Hinsicht hätte man sich eine etwas liebevollere satztechnische Behandlung der zahlreichen mathematischen Formeln gewünscht. Die Zahl der Druckfehler ist relativ hoch; dies gilt vor allem für den letzten Unterabschnitt, der sich streckenweise liest, als sei er ohne Umwege aus der Tastatur direkt in den Satz gegangen.

Nun aber genug des Herummäkeln: Dieses Buch, das ich mit erheblichem Gewinn gelesen habe, kann aufgrund der umfassenden und kenntnisreichen Darstellung sowie der vielen praktischen Tipps und Hinweise auch in der neuen Fassung jedem an der Pulver-Röntgenographie Interessierten weiterempfohlen werden.

E. Keller