

## Two-Dimensional X-Ray Diffraction

Das vorliegende Buch beschreibt die Grundlagen und Anwendungen der Röntgendiffraktometrie unter dem Aspekt der zweidimensionalen Erfassung von Beugungsbildern. Einer detaillierten Betrachtung ist voranzustellen, dass die Röntgendiffraktometrie in den letzten 15 Jahren einem grundlegenden technologischen Wandel unterlegen ist. Seit Einführung der Flächenzähler in den neunziger Jahren können Beugungsbilder nicht nur in zwei Dimensionen erfasst werden, sondern auch direkt elektronisch ausgewertet werden. Während im Bereich der Einkristalldiffraktometrie diese neue Technologie innerhalb weniger Jahre zu einem nahezu vollständigen Ersatz der Punktzähler geführt hat, ist das Szenario im Bereich der Pulverdiffraktometrie und Kleinwinkelstreuung noch uneinheitlich. *Two-Dimensional X-Ray Diffraction* befasst sich deshalb auch vorwiegend mit dem letzteren Themenbereich.

Der Autor ist Direktor für Forschung und Entwicklung bei einem führenden Hersteller röntgenanalytischer Apparate und verfügt über jahrzehntelange Erfahrung bei der Entwicklung neuer Diffraktometertechnologien. Diese Erfahrung kommt in der sehr ausführlichen Darstellung der grundlegenden mathematischen und physikalischen Konzepte dieser neuen Detektortechnologie und ihrer Anwendung in der Kristallographie zum Ausdruck.

Das Buch selbst ist in 13 Kapitel unterteilt, die sich auf einen kristallographisch-theoretischen Teil (Kapitel 1 und 2), die eigentlichen Messinstrumente (Kapitel 3 bis 5) sowie unterschiedlichste Anwendungen der zweidimensionalen Röntgendiffraktometrie beziehen. Die Einführung in die kristallographischen Grundlagen ist sehr knapp bemessen und leider nicht immer korrekt. Die Unterschiede zwischen der primitiven trigonalen Elementarzelle und der R-zentrierten Elementarzelle mit hexagonalen oder rhomboedrischen Achsen werden allerdings auch andernorts falsch wiedergegeben. Quereinsteiger in die Materie werden nicht auf ein Lehrbuch der Kristallographie verzichten können, Experten können dieses Kapitel überblättern.

Im zweiten Kapitel findet sich eine Zusammenstellung der geometrischen Grundlagen der Röntgenbeugung unter Berücksichtigung der Besonderheiten zweidimensionaler Detektoren. Die zahlreichen mathematischen Gleichungen und Ausdrücke gestatten es jederzeit, die angestellten Überlegungen auch anzuwenden. Diese Art der Gestaltung ist meiner Ansicht nach ein großer Vorteil des Buches. Es dürfte mit erheblichem

Zeitaufwand verbunden sein, eine analoge Sammlung an Grundlagen aus der Primärliteratur zusammenzutragen.

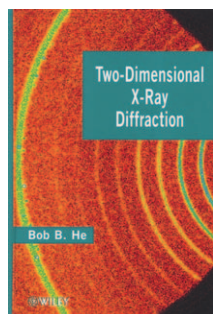
Die darauffolgenden Kapitel beschäftigen sich kurz mit Röntgenquellen (vor allem Röntgenröhren) und anschließend ausführlicher mit Röntgenoptiken. Aufbau und Arbeitsweise sowohl der einfachen optischen Elemente (Soller-Schlitze und „Pinholes“) als auch der fokussierenden Röntgenspiegel werden erläutert und alternative Technologien einander gegenübergestellt (Kapitel 3). Die Detektoren, die das Herzstück der zweidimensionalen Röntgendiffraktometrie darstellen, werden ausführlich in Kapitel 4 besprochen. Der einleitende historische Rückblick stellt den Zusammenhang mit der neueren technologischen Entwicklung her und gibt dem Leser einen Einblick in die häufig als „Black Box“ behandelte Detektortechnologie. Das Kapitel über Goniometer, Probenhalter und Probenumgebungen rundet den Instrumentierungsteil ab.

Kapitel 6 birgt wieder eine Fülle an physikalischer und mathematischer Information über die Aufbereitung der gesammelten Beugungsdaten. Hier gilt, wie schon für Kapitel 2 gesagt, es dürfte kaum eine andere Quelle geben, die dermaßen anwendungsorientiert die Grundlagen der zweidimensionalen Röntgendiffraktometrie darstellt.

Der Anwendungsteil nimmt die zweite Hälfte des Buches ein. Die einzelnen Kapitel folgen alle in etwa dem gleichen Schema. Auf eine kurze Einführung in die Thematik folgen die theoretischen Grundlagen, die Besprechung der Mess-Strategie und die Datenauswertung. Den Abschluss jedes Kapitels bilden konkrete Anwendungsbeispiele für den Einsatz der zweidimensionalen Datensammlung. Im Einzelnen werden Phasenidentifizierung, Texturanalyse, Spannungsmessungen, Kleinwinkelstreuung, Hochdurchsatzverfahren und quantitative Analyse behandelt. Zu den meisten Anwendungsgebieten gibt es zwar bereits Monographien, teilweise auch mit besonderem Augenmerk auf die zweidimensionale Datensammlung und -auswertung, dennoch ist dieser Teil als Ergänzung zu den theoretischen und instrumentellen Ausführungen des ersten Teils lesenswert.

Das abschließende Kapitel 13 ist ein Ausblick auf künftige Entwicklungen auf dem Gebiet der zweidimensionalen Röntgenbeugung. Welche der angesprochenen Entwicklungen, zum Beispiel hochauflösende Liniendetektoren, die senkrecht zur Diffraktometerebene rasternd messen, oder auch 3D-Detektoren, die den Weg des Röntgenphotons entlang einer Trajektorie verfolgen, kurz- oder auch mittelfristig realisiert werden, bleibt abzuwarten.

Das Buch ist vor allem ein erstklassiges Nachschlagewerk für Wissenschaftler, die sich intensiver mit der Flächenzählertechnologie auseinandersetzen



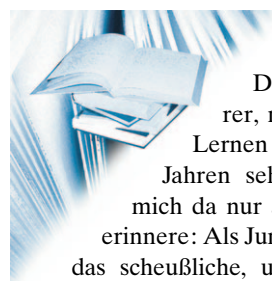
Two-Dimensional X-Ray Diffraction

Von Bob B. He. John Wiley & Sons, Hoboken 2009. 426 S., geb., 97,90 €. ISBN 978-0470227220

zen wollen oder die für die Entwicklung neuer Experimente auf den mathematischen und geometrischen Zusammenhängen der zweidimensionalen Röntgendiffraktometrie aufbauen wollen. Anwender von „eindimensionaler“ Röntgendiffraktometrie und -streuung finden überzeugende Beispiele und interessante Denkanstöße für den Einsatz der zweidimensionalen Technologien. Eine ausführliche, allerdings nicht erschöpfende Literatursammlung am Ende jedes Kapitels und ein umfangreiches Register erschließen den Zugang zu den einzelnen Kapiteln.

Christian W. Lehmann  
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung  
Mülheim an der Ruhr

DOI: 10.1002/ange.200906208



### Giant Molecules

Die Entwicklung gut lesbarer, moderner Bücher hat das Lernen in den vergangenen Jahren sehr erleichtert. Wenn ich mich da nur an meine Jugend zurückerinnere: Als Junge musste ich mich durch das scheußliche, ungebildete und in Zeitungstypografie gedruckte *Hugo's German Simplified* quälen. Da drangen Wörter wie Dativ, Genitiv und Akkusativ auf einen ein – plus sechs verschiedene Arten, „the“ zu sagen – alles auf der ersten Seite! Heutige Studenten können sich glücklich schätzen, dass ihnen Bücher wie *Giant Molecules* von Walter Gratzer zu Gebote stehen. Auf gerade einmal 250 Seiten beschreibt der Autor natürliche und synthetische Polymere, ohne dass Langeweile aufkommt. Die lustige Seite der Polymerwissenschaften, aufgepeppt durch historische Anekdoten, umfasst unter anderem Themen wie Muskelkontraktion, Graphen, Dendrimere, DNA-Computer und -Maschinen, Polymerasekettenreaktion, Photonik, Mikroarrays, künstliche Organe, Proteoglycane, Nafion, Mucopolysaccharide, Biometrik, elastische Kunststoffe, supramolekulare Polymere, Kosmetika, Entsalzungsverfahren oder Klebstoffe.

Stellt sich natürlich die Frage nach der Zielgruppe des Buchs. Der Autor schreibt hierzu: „The narrative demands no advanced or specialized knowledge and is meant to be accessible to the layman. Chemistry at a basic level would of course be helpful.“ Aus meiner Sicht wird er aber seiner Direktive, Laien anzusprechen, nur halbwegs gerecht, denn die riesige Menge an Stoff, die in dem kleinen Buch abgehandelt wird, führt unweigerlich hier und da zu einer hohen „Informationsdichte“. Dieses Problem wird dadurch noch verschärft, dass

an manchen Stellen dringend notwendige Schaubilder fehlen. Hier ein willkürlich ausgewähltes Zitat aus dem Abschnitt „Photonics“, das ohne begleitende Illustration verstanden sein will:

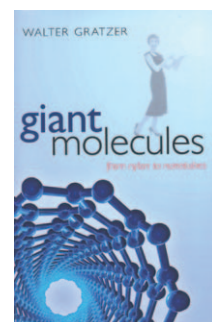
„In the photoreactive device, stacks of polymer sheets with alternating higher and lower refractive index stripes can produce, by virtue of constructive interference (intensity reinforcement wherever two light rays oscillate in phase—the peaks of the waves exactly coinciding), a very high reflectivity for light of a chosen wavelength, determined only by the thickness of the layers. The refractive index is controlled by ‚doping‘—in short contaminating—the polymer sheets with a suitable material. This is commonly a collection of tiny beads, a few ten thousandth of a centimeter across; they are generally made of silica (quartz), but block polymers have also been synthesized in which the blocks spontaneously fold on themselves to form sub-microscopic crystal-like cubes, to produce a similar effect. With such devices holographic images can be repeatedly created, expunged, and replaced. Other geometrical forms should inspire new developments.“

Dass ein Laie mit diesem Abschnitt etwas anfangen kann, ist kaum vorstellbar – schon eher sein verduzt-verzweifelter Gesichtsausdruck. Aber dieses Beispiel wird dem ansonsten weithin klar und unterhaltsam geschriebenen Buch mitnichten gerecht. Eine besonders gelungene Passage:

„A remarkable example of a composite, illustrated as it proved, was pykrete, developed during World War II by the eccentric inventor Geoffrey Pyke. The plan was to construct floating airstrips in the North Atlantic on which aircraft flying between America and Britain with war materials could refuel. Ice is highly brittle—a block of ice struck with a hammer will shatter—but Pyke found that if packed with wood-pulp fibers it was transformed into a medium, pykrete, of enormous toughness. When Pyke demonstrated the properties of his invention before a group of dignitaries by firing a revolver at the block of material, the bullet ricocheted around the room, narrowly missing several spectators.“

Wenn ich das nächste Mal meinen naturwissenschaftlich-technischen Kurs für Geisteswissenschaftler abhalte, werde ich in der Stunde über Polymere und Composite dieses Geschichtlein zum Besten geben, das ich, wie zahlreiche weitere Anekdoten, aus *Giant Molecules* von Walter Gratzer gelernt habe.

Fredric M. Menger  
Department of Chemistry  
Emory University, Atlanta (USA)



**Giant Molecules**  
From Nylon to Nanotubes.  
Von Walter Gratzer. Oxford  
University Press, Oxford  
2009. 254 S., geb.  
14.99 €, ISBN 978-  
0199550029