

# Moderne Röntgenbeugung

Röntgendiffraktometrie für Materialwissenschaftler, Physiker und Chemiker

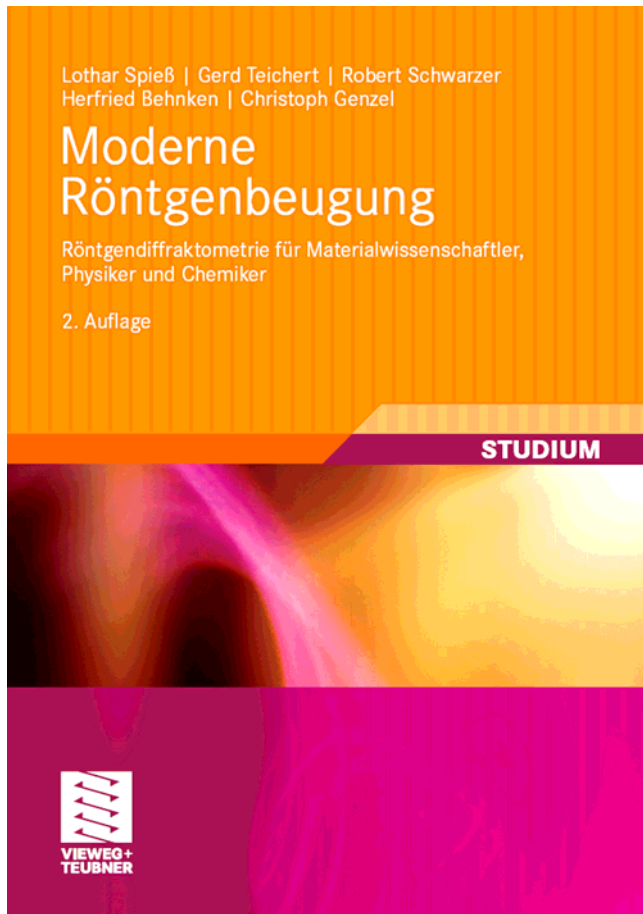
Autoren: Spieß, Lothar / Teichert, Gerd / Schwarzer, Robert / Behnken, Herfried / Genzel, Christoph

**Vieweg Teubner Verlag 2009**, 2. korrigierte und erweiterte Auflage, 339 Bilder, 82 Tabellen, 197 Literaturstellen  
Erscheinungstermin: 20.02.2009 in 2. Auflage  
XIV, 564 S., 17 x 24 cm, Paperback

**ISBN:** 978-3-8351-0166-1

**EUR:** 29,90

## **Röntgenbeugung in Theorie und Praxis: Das Praxislehrbuch für Studium und Beruf**



Das Buch bietet einen umfassenden Überblick über die Anwendungen der Röntgenbeugung in Gebieten wie Werkstofftechnik, Metallurgie, Elektrotechnik, Maschinenbau sowie Mikro- und Nanotechnik. Die nötigen Grundkenntnisse der Röntgenbeugung werden fundiert und anschaulich vermittelt. Dabei werden neue Techniken und Auswerteverfahren ebenso dargestellt wie altbekannte Methoden.

### **Aus dem Inhalt:**

- Erzeugung und Eigenschaften von Röntgenstrahlung
- Beugung von Röntgenstrahlung
- Hardware für die Röntgenbeugung
- Methoden der Röntgenbeugung
- Zellparameterbestimmung
- Qualitative Phasenanalyse
- Quantitative Phasenanalyse
- Röntgenprofilanalyse
- Kristallstrukturanalyse
- Röntgenographische Profilanalyse
- Fundamentalparameteranalyse
- Röntgenografische Spannungsanalyse
- Röntgenografische Texturanalyse
- Kristallorientierungsbestimmung
- Besonderheiten bei dünnen Schichten
- Spezielle Verfahren (energie-dispersive Verfahren, Synchrotron, Kikichi- und Kosseltechnik)
- 26 komplexe Aufgaben und Lösungen

### **Zielgruppe:**

Studierende der Materialwissenschaft, der Physik und Chemie an Universitäten, Hochschulen und Fachschulen, Anwender in der Industrie

### **Über die Autoren:**

Prof. Dr. Lothar Spieß, TU Ilmenau

Dr. Gerd Teichert, MFPA Weimar

Prof. Dr. Robert Schwarzer, TU Clausthal

Privatdozent Dr. Herfried Behnken, RWTH-Aachen

Prof. Dr. Christoph Genzel, Helmholtz Zentrum Berlin

Vieweg Teubner Verlag  
Abraham-Lincoln-Str. 46  
65189 Wiesbaden  
Fax: 0611 7878 420

[www.viewegteubner.de](http://www.viewegteubner.de)

Leseprobe: <http://www.tu-ilmenau.de/fakei/Buch-Moderne-Roentge.7741.0.html>

Lothar Spieß | Gerd Teichert | Robert Schwarzer  
Herfried Behnken | Christoph Genzel

# Moderne Röntgenbeugung

Röntgendiffraktometrie für Materialwissenschaftler,  
Physiker und Chemiker

2. Auflage

**STUDIUM**



**VIEWEG+  
TEUBNER**

## Vorwort zur zweiten Auflage

Nach der sehr erfreulichen Resonanz, die die erste Auflage des Buches gefunden hat, sind mit dieser zweiten Auflage einige Überarbeitungen bezüglich der Einheitlichkeit von Formeln und Bezeichnungen vorgenommen worden. Kleinere inhaltliche Fehler, Schreibfehler, Satzfehler und einige Bilder wurden korrigiert.

In den Kapiteln 2, 3, 4, 5, 6, 11 und 13 wurden kleinere Umstellungen und Ergänzungen vorgenommen. Die Übungsaufgaben wurden erweitert. Das ursprüngliche Kapitel 14 (Kleinwinkelstreuung) erhielt eine völlig neue Struktur. In diesem Kapitel werden nun mehrere Sonderverfahren der (Röntgen)beugung vorgestellt.

Es existieren natürlich weitere Anwendungen, die auch in dieser zweiten Auflage keine Erwähnung finden. Hier sei auf die dann meist englische Spezialliteratur verwiesen. Dies sind überwiegend Gebiete, die den Materialwissenschaftler nicht vorrangig tangieren bzw. eigene Erfahrungen der Autoren fehlen (z. B. Röntgenbeugung an Polymeren). Parallel zu diesem Buch ist jetzt in zweiter Auflage das englischsprachige Buch von PECHARSKY et. al. [134] erschienen. Der Schwerpunkt dieses Buches ist die Kristallstrukturanalyse.

Die Autoren haben sich das Ziel gestellt, weitestgehend nur die Methoden und Verfahren ausführlich zu beschreiben, die sie selbst aktiv vertreten.

Auf dem Gebiet der Spannungsmessung ist kurz vor Drucklegung die Norm DIN EN 15305 [16] verabschiedet worden, welche die schlechter zugängliche AWT-Anleitung [157] ablöst.

Das Literaturverzeichnis wurde um Firmenprospekte, interne Berichte und Studienarbeiten gekürzt.

In dieser Auflage wurde wiederum bewusst auf Abbildungen konkreter Geräte, Apparaturen und Bauteile verzichtet, um eine Neutralität gegenüber den Firmen zu gewährleisten. Ebenso wurde darauf verzichtet, Internetadressen und Rechenprogramme konkret anzugeben, da hier die Aktualität im Zeitraum der Buchaufgabe nicht gewährleistet ist.

Herrn Dr. Th. Kups wird hiermit für seine kritische und finale Durchsicht des Manuskripts dieser Auflage gedankt.

Auch diese zweite Auflage wird nicht fehlerlos sein. Die Autoren sind allen Lesern dankbar, die Hinweise auf Fehler, mangelhafte Darstellung oder notwendige sachliche Ergänzungen geben (lotharspiess@web.de).

Die erneut gute Zusammenarbeit mit dem Vieweg+Teubner-Verlag und den Lektoren Frau K. Hoffmann und Herrn U. Sandten sei hiermit erwähnt.

Ilmenau, im Dezember 2008

L. Spieß, G. Teichert, R. Schwarzer, H. Behnken und Ch. Genzel

## Vorwort zur ersten Auflage

Die Röntgentechnik ist mehr als 100 Jahre alt. Sie hat sich in dieser Zeit zu einer festen Größe in der Technik entwickelt.

Seit dem Nachweis der Röntgenbeugung am Kristall durch M. VON LAUE, W. FRIEDRICH und P. KNIPPING im Jahr 1912 hat die Röntgenbeugung sehr schnell Eingang in die Natur- und Ingenieurwissenschaften gefunden. Zunächst war sie primär Hilfsmittel in der Grundlagenforschung, dann kam sehr schnell auch die praktische Anwendung in Forschung und Industrie zum Zuge. Die Strukturaufklärung mit Röntgenstrahlung ist heute weltweit ein etabliertes Verfahren und Beispiel für die Synergie aus Gebieten der Physik, der Kristallographie, der Materialwissenschaft, der Ingenieurwissenschaft und zunehmend auch der Mathematik und Informatik. Heute ist die Röntgenbeugung als Untersuchungsmethode aus der modernen Materialwissenschaft und Werkstofftechnik nicht mehr wegzudenken. Die Eigenschaften der unterschiedlichen Materialien hängen immer von der Struktur, also der jeweiligen konkreten Atomanordnung, ab. Die Röntgenbeugung ist ein elegantes Verfahren zur zerstörungsfreien Aufklärung der Struktur bzw. zur Bestimmung von Abweichungen vom idealen Strukturzustand und für die Aufklärung und Untersuchung des grundlegenden Zusammenhangs:

### *Struktur – Gefüge – Eigenschaften*

Die Aufklärung dieser einfach aussehenden, aber sehr komplexen Beziehung bildet das tägliche Arbeitsfeld der Materialwissenschaftler. Bereits aus den frühesten röntgenographischen Untersuchungen an Festkörpern ist bekannt, dass die große Mehrzahl aller uns umgebenden anorganischen Festkörper aus Kristallen aufgebaut sind. Das gilt für technisch hergestellte Werkstoffe (Metalle, Keramiken, Polymere) genauso wie für biologische Naturstoffe (Knochen, Zähne, Wolle, Holz, Muscheln, ..) und auch für die Minerale, Erze und Gesteine, welche die Erdkruste bilden. Selbst viele organische Substanzen befinden sich im kristallinen oder teilkristallinen Zustand. Die Kristalle in diesen Stoffen sind klein und haben nicht die schönen regelmäßigen Formen, wie wir sie aus der Kristallographie und Mineralogie kennen. Diese auch Kristallite oder Körner genannten Gefügebestandteile zu untersuchen ist die Aufgabe von Materialwissenschaftlern.

Das Erlernen dieser Methode erfordert eine breit angelegte Ausbildung, die es an einigen deutschen Hochschulen/Universitäten und Fachschulen gibt.

So wird bei der Ausbildung von Ingenieuren in den Studiengängen Werkstoffwissenschaft, Technische Physik, Elektrotechnik und Maschinenbau an den Technischen Universitäten der Autoren diese Technik seit vielen Jahrzehnten in unterschiedlichem Umfang und unterschiedlichen Schwerpunkten vermittelt und praktisch angewendet.

Unsere hochverehrten Lehrer, die Professoren K. NITZSCHE (Ilmenau), P. PAUFLER (Leipzig) bzw. V. HAUKE (Aachen) haben die Röntgenbeugungsverfahren immer angewendet und weiterentwickelt und uns diese Techniken gelehrt.

Das Angebot an aktuellem, deutschsprachigem Lehrmaterial ist derzeit nicht befriedigend. Bücher, wie HANKE/NITZSCHE(1961) [71], NEEF (1965) [123] und GLOCKER (1985) [66] gibt es nur noch in den Antiquariaten und vereinzelt in den Universitätsbibliotheken. Die Lehrbriefe für das Hochschulstudium [68, 129] sind deutschlandweit nicht zugänglich.

Die vorhandene Spezialliteratur beschäftigt sich entweder intensiv mit der Theorie der Röntgenbeugung oder der Kristallstrukturbestimmung, dem Hauptarbeitsfeld der Kristallographen, oder mit Spezialgebieten wie der Spannungsmessung oder Texturanalyse.

Dieses Lehrbuch richtet sich in erster Linie an Studenten und Absolventen der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, jedoch auch an Studenten und Absolventen der Physik, Chemie, Kristallographie, Mineralogie und weiterer werkstoffwissenschaftlich orientierter Ingenieurstudiengänge.

Aus dem Inhalt mehrerer Vorlesungsreihen, Praktikumsanleitungen und durch Anwendung dieser Technik seit mehr als 23 Jahren ist das nachfolgende Buch unter Mitwirkung von Spezialisten aus anderen Einrichtungen entstanden. Ziel dieses Buches soll es sein, die Röntgenbeugung mit all ihren modernen und vielfältigen Modifizierungen aus den vergangenen 20 Jahren als Anwender aus der Ingenieurwissenschaft zu verstehen und so Praxisaufgaben besser lösen zu können.

Neue Techniken und Auswerteverfahren sollen ebenso wie schon altbekannte Methoden in diesem Buch geschlossen und mit der notwendigen Tiefe und Diskussion von Einzelergebnissen dargestellt werden. Die mathematische Durchdringung der Arbeitsgebiete ist auf das notwendige Maß beschränkt worden. Bei manchen Gegebenheiten wird auf eine ausführliche Herleitung und Begründung aus didaktischen Gründen verzichtet. Andererseits werden an einigen Stellen gerade die Dinge besprochen und Lösungen vorgestellt, die in der Praxis vorkommen.

Ziel des Buches ist es, ein »Praxislehrbuch« zur Verfügung zu stellen und eine doch bedeutende Lücke im deutschen ingenieurtechnischen Lehrbuchmarkt zu schließen. Es wird versucht, die Literaturangaben auf das Notwendigste zu beschränken. Es werden einige ältere Lehrbücher, Dissertationen und einige grundlegende Übersichts- und Spezialartikel zitiert. Das vorliegende Literaturverzeichnis ist bei weitem nicht vollständig und alle nicht aufgeführten Autoren mögen dies verzeihen.

Um den Charakter eines Lehrbuchs zu erhalten, sind verschiedene Aufgaben gestellt. Die ausführlichen Lösungen sind in einem Extrakapitel zusammengefasst. Die Aufgaben haben jedoch auch das Ziel, ab und an ausführliche und komplexe Zusammenfassungen eines Problems darzustellen.

Für die Durchführung von Beugungsaufnahmen seien J. Schawohl (Ilmenau), zahlreichen Diplomanden und Doktoranden und für die wertvollen Hinweise und Überlassung von Firmenschriften und ausgewählten Messdaten den Firmen (alphabetische Reihenfolge) AXO Dresden, Bruker AXS Karlsruhe, General Electric – ND-Testing Systems Ahrensburg, Panalytical Kassel und Stoe & CIE Darmstadt gedankt.

Die Autoren bedanken sich ebenfalls für die gute Zusammenarbeit mit dem BG-Teubner-Verlag und den Lektoren Frau K. Hoffmann und Herrn U. Sandten.

# Inhaltsverzeichnis

|          |                                                                                      |           |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>                                                                    | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Erzeugung und Eigenschaften von Röntgenstrahlung</b>                              | <b>5</b>  |
| 2.1      | Erzeugung von Röntgenstrahlung . . . . .                                             | 5         |
| 2.2      | Das Röntgenspektrum . . . . .                                                        | 7         |
| 2.2.1    | Das Bremsspektrum . . . . .                                                          | 8         |
| 2.2.2    | Das charakteristische Spektrum . . . . .                                             | 10        |
| 2.2.3    | Optimierung der Wahl der Betriebsparameter . . . . .                                 | 16        |
| 2.3      | Wechselwirkung mit Materie . . . . .                                                 | 19        |
| 2.4      | Filterung von Röntgenstrahlung . . . . .                                             | 24        |
| 2.5      | Detektion von Röntgenstrahlung . . . . .                                             | 27        |
| 2.6      | Energie des Röntgenspektrums und Strahlenschutzaspekte . . . . .                     | 30        |
| 2.6.1    | Quantifizierung der Strahlung . . . . .                                              | 30        |
| 2.6.2    | Gefährdungspotential von Röntgenquellen . . . . .                                    | 32        |
| 2.6.3    | Regeln beim Umgang mit Röntgenstrahlern . . . . .                                    | 39        |
| <b>3</b> | <b>Beugung von Röntgenstrahlung</b>                                                  | <b>41</b> |
| 3.1      | Grundlagen der Kristallographie und des reziproken Gitters . . . . .                 | 41        |
| 3.1.1    | Die Kristallstruktur und seine Darstellung . . . . .                                 | 41        |
| 3.1.2    | Bezeichnung von Punkten, Geraden und Ebenen im Kristall . . . . .                    | 46        |
| 3.1.3    | Netzebenenabstand $d_{hkl}$ . . . . .                                                | 48        |
| 3.1.4    | Symmetrioperationen . . . . .                                                        | 49        |
| 3.1.5    | Kombination von Symmetrieelementen . . . . .                                         | 52        |
| 3.1.6    | LAUE-Klassen . . . . .                                                               | 54        |
| 3.1.7    | Kristallsysteme . . . . .                                                            | 54        |
| 3.1.8    | Hexagonales Kristallsystem . . . . .                                                 | 57        |
| 3.1.9    | Trigonales Kristallsystem . . . . .                                                  | 58        |
| 3.1.10   | Reziprokes Gitter . . . . .                                                          | 58        |
| 3.1.11   | Packungsdichte in der Elementarzelle - Das Prinzip der Kugelpackung . . . . .        | 62        |
| 3.1.12   | Aperiodische Kristalle . . . . .                                                     | 64        |
| 3.2      | Kinematische Beugungstheorie . . . . .                                               | 65        |
| 3.2.1    | Die elastische Streuung von Röntgenstrahlen am Elektron – THOMSON-Streuung . . . . . | 66        |
| 3.2.2    | Streuung der Röntgenstrahlen an Materie . . . . .                                    | 68        |
| 3.2.3    | Streubeitrag der Elektronenhülle eines Atoms – Atomformfaktor $f_a$ . . . . .        | 69        |
| 3.2.4    | Thermische Schwingungen . . . . .                                                    | 71        |
| 3.2.5    | Streubeitrag einer Elementarzelle . . . . .                                          | 72        |
| 3.2.6    | Beugung der Röntgenstrahlen am Kristall . . . . .                                    | 73        |
| 3.2.7    | Schärfe der Beugungsbedingungen . . . . .                                            | 75        |

|          |                                                                                 |            |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 3.2.8    | Eindringtiefe der Röntgenstrahlung . . . . .                                    | 78         |
| 3.2.9    | Integrale Intensität der gebeugten Strahlung . . . . .                          | 79         |
| 3.2.10   | Strukturfaktor – Kristallsymmetrie – Auslöschungsregeln . . . . .               | 81         |
| 3.3      | Geometrische Veranschaulichung der Beugungsbedingungen . . . . .                | 89         |
| 3.3.1    | LAUE-Gleichung . . . . .                                                        | 89         |
| 3.3.2    | BRAGGSche-Gleichung . . . . .                                                   | 90         |
| 3.3.3    | EWALD-Konstruktion . . . . .                                                    | 91         |
| <b>4</b> | <b>Hardware für die Röntgenbeugung</b>                                          | <b>95</b>  |
| 4.1      | Strahlerzeuger . . . . .                                                        | 96         |
| 4.1.1    | Röntgenröhren und Generatoren . . . . .                                         | 96         |
| 4.1.2    | Mikrofokusröhren . . . . .                                                      | 100        |
| 4.1.3    | Synchrotron- und Neutronenstrahlquellen . . . . .                               | 101        |
| 4.2      | Monochromatisierung der Strahlung und ausgewählte Monochromatoren . . . . .     | 104        |
| 4.2.1    | Monochromatisierung auf rechnerischem Weg – RACHINGER-Trennung . . . . .        | 104        |
| 4.2.2    | Einkristall-Monochromatoren . . . . .                                           | 109        |
| 4.2.3    | Multilayer-Sandwichschichtsysteme . . . . .                                     | 114        |
| 4.3      | Strahlformer . . . . .                                                          | 118        |
| 4.3.1    | Blenden und SOLLER-Kollimatoren . . . . .                                       | 118        |
| 4.3.2    | Strahlformer unter Einsatz von Kristallen . . . . .                             | 123        |
| 4.4      | Glasfaseroptiken . . . . .                                                      | 123        |
| 4.5      | Detektoren . . . . .                                                            | 126        |
| 4.5.1    | Punkt-detektoren . . . . .                                                      | 128        |
| 4.5.2    | Lineare Detektoren . . . . .                                                    | 134        |
| 4.5.3    | Flächendetektoren . . . . .                                                     | 138        |
| 4.5.4    | Energiedispersive Detektoren . . . . .                                          | 142        |
| 4.5.5    | Zählstatistik . . . . .                                                         | 144        |
| 4.6      | Goniometer . . . . .                                                            | 148        |
| 4.7      | Probenhalter . . . . .                                                          | 151        |
| 4.8      | Besonderes Zubehör . . . . .                                                    | 153        |
| <b>5</b> | <b>Methoden der Röntgenbeugung</b>                                              | <b>155</b> |
| 5.1      | Fokussierende Geometrie . . . . .                                               | 157        |
| 5.1.1    | BRAGG-BRENTANO-Anordnung . . . . .                                              | 157        |
| 5.1.2    | Justage des BRAGG-BRENTANO-Goniometers . . . . .                                | 168        |
| 5.1.3    | Weitere fokussierende Anordnungen . . . . .                                     | 171        |
| 5.2      | Systematische Fehler der BRAGG-BRENTANO-Anordnung . . . . .                     | 172        |
| 5.2.1    | Einfluss der Ebenheit der Probeoberfläche und der Horizontaldivergenz . . . . . | 173        |
| 5.2.2    | Endliche Eindringtiefe in das Probeninnere – Absorptionseinfluss . . . . .      | 174        |
| 5.2.3    | Endliche Höhe des Fokus und der Zählerblende – axiale Divergenz . . . . .       | 174        |
| 5.2.4    | Exzentrische Probenpositionierung . . . . .                                     | 175        |
| 5.2.5    | Falsche Nullpunktjustierung . . . . .                                           | 175        |
| 5.2.6    | Zusammenfassung der Fehlereinflüsse und Vorschläge für Messstrategien . . . . . | 176        |
| 5.3      | Kristallitverteilung und Zahl der beugenden Kristalle . . . . .                 | 177        |
| 5.4      | Parallelstrahlgeometrie . . . . .                                               | 178        |

|           |                                                                           |            |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------|------------|
| 5.4.1     | DEBYE-SCHERRER Verfahren . . . . .                                        | 178        |
| 5.4.2     | Parallelstrahl-Anordnungen (PS) mit Multilayerspiegel . . . . .           | 186        |
| 5.5       | Beugung bei streifenden Einfall – GID . . . . .                           | 195        |
| 5.6       | Höhenabhängigkeit der Probenlage in Diffraktogrammen . . . . .            | 199        |
| 5.7       | Kapillaranordnung . . . . .                                               | 201        |
| 5.8       | Diffraktometer mit Flächendetektor . . . . .                              | 202        |
| 5.9       | Einkristallverfahren . . . . .                                            | 209        |
| 5.9.1     | LAUE-Verfahren . . . . .                                                  | 210        |
| 5.9.2     | Drehkristall-, Schwenk- und WEISSENBERG-Verfahren . . . . .               | 213        |
| 5.9.3     | Vier-Kreis-Einkristalldiffraktometer . . . . .                            | 215        |
| <b>6</b>  | <b>Phasenanalyse</b> . . . . .                                            | <b>217</b> |
| 6.1       | Qualitative Phasenanalyse . . . . .                                       | 217        |
| 6.2       | PDF-Datei der ICDD . . . . .                                              | 220        |
| 6.3       | Identifizierung von Beugungsdiagrammen mit der PDF-Datei . . . . .        | 223        |
| 6.3.1     | Arbeit mit dem Diffraktogramm . . . . .                                   | 224        |
| 6.3.2     | Vorgehensweise bei der Phasenbestimmung . . . . .                         | 230        |
| 6.3.3     | Polytyp-Bestimmung . . . . .                                              | 233        |
| 6.4       | Einflüsse Probe – Strahlung – Diffraktometeranordnung . . . . .           | 235        |
| 6.5       | Quantitative Phasenanalyse . . . . .                                      | 240        |
| 6.5.1     | Auswertung der Intensität ausgewählter Beugungslinien . . . . .           | 241        |
| 6.5.2     | RIETVELD-Verfahren zur quantitativen Phasenanalyse . . . . .              | 248        |
| <b>7</b>  | <b>Zellparameterbestimmung (Gitterkonstantenbestimmung)</b> . . . . .     | <b>257</b> |
| 7.1       | Indizierung auf rechnerischem Weg . . . . .                               | 257        |
| 7.2       | Präzisionszellparameterverfeinerung . . . . .                             | 264        |
| 7.2.1     | Lineare Regression . . . . .                                              | 264        |
| 7.2.2     | Ermittlung der Konzentration von Mischkristallen . . . . .                | 269        |
| 7.3       | Anwendungsbeispiel NiO-Schichten . . . . .                                | 271        |
| <b>8</b>  | <b>Mathematische Beschreibung von Röntgenbeugungsdiagrammen</b> . . . . . | <b>273</b> |
| 8.1       | Röntgenprofilanalyse . . . . .                                            | 273        |
| 8.2       | Approximationsmethoden . . . . .                                          | 278        |
| 8.3       | FOURIER-Analyse . . . . .                                                 | 281        |
| 8.4       | LAGRANGE-Analyse . . . . .                                                | 284        |
| 8.5       | Fundamentalparameteranalyse . . . . .                                     | 286        |
| 8.6       | Rockingkurven und Versetzungsdichten . . . . .                            | 292        |
| <b>9</b>  | <b>Kristallstrukturanalyse</b> . . . . .                                  | <b>295</b> |
| 9.1       | Nachweis der Existenz eines Inversionszentrums . . . . .                  | 296        |
| 9.2       | Kristallstrukturanalyse aus Einkristalldaten . . . . .                    | 297        |
| 9.3       | Strukturverfeinerung . . . . .                                            | 303        |
| 9.4       | Kristallstrukturanalyse aus Polykristalldaten . . . . .                   | 303        |
| <b>10</b> | <b>Röntgenographische Spannungsanalyse</b> . . . . .                      | <b>305</b> |
| 10.1      | Spannungsempfindliche Materialeigenschaften und Messgrößen . . . . .      | 305        |

|         |                                                                           |     |
|---------|---------------------------------------------------------------------------|-----|
| 10.1.1  | Netzebenenabstände, Beugungswinkel, Halbwertsbreiten . . . . .            | 306 |
| 10.1.2  | Makroskopische Oberflächendehnung . . . . .                               | 306 |
| 10.1.3  | Ultraschallgeschwindigkeit . . . . .                                      | 307 |
| 10.1.4  | Magnetische Kenngrößen . . . . .                                          | 308 |
| 10.1.5  | Übersicht der Messgrößen und Verfahren . . . . .                          | 309 |
| 10.2    | Elastizitätstheoretische Grundlagen . . . . .                             | 311 |
| 10.2.1  | Spannung und Dehnung . . . . .                                            | 311 |
| 10.2.2  | Elastische Materialeigenschaften . . . . .                                | 314 |
| 10.2.3  | Bezugssysteme und Tensortransformation . . . . .                          | 319 |
| 10.3    | Einteilung der Spannungen innerhalb vielkristalliner Werkstoffe . . . . . | 322 |
| 10.3.1  | Der Eigenspannungsbegriff . . . . .                                       | 322 |
| 10.3.2  | Eigenspannungen I., II. und III. Art . . . . .                            | 326 |
| 10.3.3  | Mittelwerte und Streuungen von Eigenspannungen . . . . .                  | 328 |
| 10.3.4  | Ursachen und Kompensation der Eigenspannungsarten . . . . .               | 329 |
| 10.3.5  | Übertragungsfaktoren . . . . .                                            | 330 |
| 10.4    | Röntgenographische Ermittlung von Eigenspannungen . . . . .               | 332 |
| 10.4.1  | Dehnung in Messrichtung . . . . .                                         | 332 |
| 10.4.2  | Röntgenographische Mittelung über Kristallorientierungen . . . . .        | 334 |
| 10.4.3  | Mittelung über die Eindringtiefe . . . . .                                | 335 |
| 10.4.4  | $d(\sin^2 \psi)$ -Verteilungen . . . . .                                  | 337 |
| 10.4.5  | Elastisch isotrope Werkstoffe . . . . .                                   | 339 |
| 10.4.6  | Die Grundgleichung der röntgenographischen Spannungsanalyse . . . . .     | 340 |
| 10.4.7  | Auswerteverfahren für quasiisotrope Materialien . . . . .                 | 342 |
| 10.4.8  | Allgemeiner dreiachsiger Spannungszustand . . . . .                       | 342 |
| 10.4.9  | Dreiachsiger Zustand mit $\sigma_{33} = 0$ . . . . .                      | 346 |
| 10.4.10 | Dreiachsiger Hauptspannungszustand . . . . .                              | 346 |
| 10.4.11 | Vollständiger zweiachsiger Spannungszustand . . . . .                     | 348 |
| 10.5    | Röntgenographische Elastizitätskonstanten (REK) . . . . .                 | 350 |
| 10.5.1  | Experimentelle Bestimmung der REK . . . . .                               | 350 |
| 10.5.2  | Berechnung der REK aus den Einkristalldaten . . . . .                     | 353 |
| 10.5.3  | Zur Verwendung der REK . . . . .                                          | 355 |
| 10.5.4  | Vergleich experimenteller Ergebnisse mit REK-Berechnungen . . . . .       | 357 |
| 10.6    | Experimentelles Vorgehen bei der Spannungsbestimmung . . . . .            | 358 |
| 10.6.1  | Messanordnungen . . . . .                                                 | 358 |
| 10.6.2  | Justierung . . . . .                                                      | 361 |
| 10.6.3  | Mess- und Auswerteparameter . . . . .                                     | 361 |
| 10.6.4  | Fehlerangaben . . . . .                                                   | 368 |
| 10.6.5  | Beispiel einer Spannungsauswertung . . . . .                              | 369 |
| 10.7    | Einflüsse auf die Dehnungsverteilungen . . . . .                          | 370 |
| 10.7.1  | Einfluss der kristallographischen Textur . . . . .                        | 370 |
| 10.7.2  | Einfluss von Spannungs- und $d_0$ -Gradienten . . . . .                   | 373 |
| 10.7.3  | Effekte plastisch induzierter Mikroeigenspannungen . . . . .              | 374 |
| 10.8    | Ermittlung von Tiefenverteilungen . . . . .                               | 376 |
| 10.9    | Trennung experimentell bestimmter Spannungen . . . . .                    | 377 |
| 10.10   | Spannungsmessung mit 2D-Detektoren . . . . .                              | 381 |

|                                                                                     |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>11 Röntgenographische Texturanalyse</b>                                          | <b>383</b> |
| 11.1 Einführung in die Begriffswelt der Textur . . . . .                            | 383        |
| 11.2 Übersicht über die Bedeutung der Kristalltextur . . . . .                      | 383        |
| 11.3 Der Anfang der Texturanalyse: Polfiguren . . . . .                             | 387        |
| 11.4 Die röntgenographische Polfigurmessung . . . . .                               | 392        |
| 11.4.1 Grundlagen . . . . .                                                         | 392        |
| 11.4.2 Die apparative Realisierung von Texturgoniometern . . . . .                  | 396        |
| 11.4.3 Vollautomatische Texturmessanlagen . . . . .                                 | 400        |
| 11.4.4 Probenrotation und Messstatistik . . . . .                                   | 401        |
| 11.4.5 Vollständige Polfiguren . . . . .                                            | 403        |
| 11.4.6 Detektoren für die Texturmessung . . . . .                                   | 405        |
| 11.4.7 Das Polfigurfenster und die Winkelauflösung in der Polfigurmessung . . . . . | 407        |
| 11.5 Tiefenaufgelöste Polfigurmessung . . . . .                                     | 408        |
| 11.5.1 Inhomogene Texturen und Gradientenwerkstoffe . . . . .                       | 408        |
| 11.5.2 Messung von Polfiguren mit konstanter Informationstiefe . . . . .            | 409        |
| 11.5.3 Messung der Textur in verdeckten Schichten unter der Oberfläche . . . . .    | 411        |
| 11.6 Ortsaufgelöste Texturanalyse . . . . .                                         | 412        |
| 11.7 Die quantitative Texturanalyse . . . . .                                       | 416        |
| 11.7.1 Die Orientierungs-Dichte-Funktion (ODF) . . . . .                            | 416        |
| 11.7.2 Symmetrien in der Texturanalyse . . . . .                                    | 416        |
| 11.7.3 Parameterdarstellungen der Kristallorientierung . . . . .                    | 418        |
| 11.7.4 Der Orientierungsraum – EULER-Raum . . . . .                                 | 423        |
| 11.7.5 Polfigurinversion und Berechnung der Orientierungs-Dichte-Funktion . . . . . | 426        |
| 11.8 Die Orientierungsstereologie . . . . .                                         | 436        |
| 11.9 Die Kristalltextur und anisotrope Materialeigenschaften . . . . .              | 440        |
| <b>12 Bestimmung der Kristallorientierung</b>                                       | <b>443</b> |
| 12.1 Orientierungsverteilung bei Einkristallen . . . . .                            | 443        |
| 12.2 Orientierungsbestimmung mit Polfiguraufnahme . . . . .                         | 448        |
| 12.3 Bestimmung der Fehlorientierung . . . . .                                      | 449        |
| <b>13 Untersuchungen an dünnen Schichten</b>                                        | <b>453</b> |
| 13.1 Untersuchungen an Wolframsilizidschichten . . . . .                            | 455        |
| 13.2 Reflektometrie – XRR . . . . .                                                 | 459        |
| 13.3 Texturbestimmung an dünnen Schichten . . . . .                                 | 468        |
| 13.4 Hochauflösende Röntgendiffraktometrie (HRXRD) . . . . .                        | 470        |
| 13.4.1 Epitaktische Schichten . . . . .                                             | 471        |
| 13.4.2 Hochauflösungs-Diffraktometer – Anforderungen und Aufbau . . . . .           | 474        |
| 13.4.3 Diffraktometrie an epitaktischen Schichten . . . . .                         | 476        |
| 13.4.4 Reziproke Spacemaps – RSM . . . . .                                          | 478        |
| 13.4.5 Supergitter (Superlattice) . . . . .                                         | 482        |
| 13.5 Zusammenfassung: Messung an dünnen Schichten . . . . .                         | 485        |
| <b>14 Spezielle Verfahren</b>                                                       | <b>487</b> |
| 14.1 Energiedispersive Röntgenbeugung . . . . .                                     | 487        |

|           |                                                                       |            |
|-----------|-----------------------------------------------------------------------|------------|
| 14.1.1    | Grundlegende Beziehungen . . . . .                                    | 487        |
| 14.1.2    | Einflussfaktoren auf das Energiedispersive-Sekundärspektrum . . . . . | 489        |
| 14.1.3    | Einsatz von Synchrotronquellen . . . . .                              | 492        |
| 14.1.4    | Anwendungen der energiedispersiven Beugung in der Materialforschung   | 494        |
| 14.1.5    | Energiedispersive Eigenspannungsanalyse . . . . .                     | 499        |
| 14.2      | KIKUCHI- und Channeling-Diagramme . . . . .                           | 500        |
| 14.2.1    | Die Elektronenbeugung im Rasterelektronenmikroskop . . . . .          | 503        |
| 14.2.2    | Messstrategien und Charakterisierung des Werkstoffes . . . . .        | 507        |
| 14.2.3    | Anwendungen von EBSD im REM in der Werkstoffwissenschaft . . . . .    | 511        |
| 14.3      | KOSSEL-Interferenzen . . . . .                                        | 512        |
| 14.3.1    | Einsatzbereiche der KOSSEL-Technik . . . . .                          | 515        |
| 14.3.2    | Geräteausführungen . . . . .                                          | 516        |
| 14.4      | Kleinwinkelstreuung . . . . .                                         | 517        |
| <b>15</b> | <b>Zusammenfassung</b>                                                | <b>519</b> |
| <b>16</b> | <b>Lösung der Aufgaben</b>                                            | <b>521</b> |
|           | <b>Literaturverzeichnis</b>                                           | <b>543</b> |
|           | <b>Formelzeichenverzeichnis</b>                                       | <b>555</b> |
|           | Skalare . . . . .                                                     | 555        |
|           | Vektoren . . . . .                                                    | 556        |
|           | <b>Stichwortverzeichnis</b>                                           | <b>557</b> |

Hinweise auf DIN-Normen in diesem Werk entsprechen dem Stand der Normung bei Abschluss des Manuskripts. Maßgebend sind die jeweils neuesten Ausgaben der Normschriften des DIN Deutsches Institut für Normung e.V. im Format A4, die durch den Beuth-Verlag GmbH, Berlin Wien Zürich, zu beziehen sind. Sinngemäß gilt das Gleiche für alle in diesem Buche zitierten amtlichen Bestimmungen, Richtlinien, Verordnungen und Gesetze.