

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Röntgenbeugung</b>	<b>1</b>
1.1. Kristallstruktur, Kristallsymmetrie und kristallographische Orientierung . . . . .	1
1.2. Orientierungs- und Poldichte . . . . .	4
1.3. Erzeugung von Röntgenstrahlung . . . . .	7
1.4. Wechselwirkung mit Materie . . . . .	9
1.4.1. Schwächung und Absorption . . . . .	9
1.4.2. Streuung und Beugung . . . . .	10
1.5. Detektion von Röntgenstrahlung . . . . .	14
<b>2. Beugungsgeometrie</b>	<b>19</b>
2.1. Die Vier-Kreis-Eulerwiege . . . . .	19
2.2. Beugungsraum- und Probenkoordinaten . . . . .	22
2.3. Beugungsraum- und Detektorkoordinaten . . . . .	26
2.4. Sichtbarer Ausschnitt eines Beugungsringes . . . . .	30
2.4.1. Rechteckiges Detektorfenster . . . . .	31
2.4.2. Kreisförmiges Detektorfenster . . . . .	33
2.4.3. Abschattung . . . . .	35
2.5. Strahlweg . . . . .	37
2.5.1. Absorption . . . . .	39
2.5.2. Querschnittsfläche . . . . .	40
<b>3. Erzeugung von Messschemata</b>	<b>43</b>
3.1. Sichtbarer $\gamma$ -Ausschnitt eines Beugungsringes auf der Polsphäre . .	43
3.2. Erzeugung von Messrastern . . . . .	47
3.3. Optimale Detektorposition . . . . .	52
3.4. Optimale Zerlegung . . . . .	56
3.4.1. Formulierung als binäres ganzzahliges lineares Programm	57
3.4.2. Approximativer Algorithmus . . . . .	61
3.5. Optimale Messreihenfolge . . . . .	66
3.5.1. Naive Rundreise . . . . .	68
3.5.2. Problem des Handlungsreisenden . . . . .	70
3.6. Messschemata für winkelauflösende Messungen . . . . .	75

3.7. Messschemata für energieauflösende Messungen . . . . .	76
<b>4. Texturbestimmung aus Beugungsbildern</b>	<b>79</b>
4.1. Gemessene integrale Polintensität . . . . .	79
4.2. Schätzung der Orientierungsdichte . . . . .	93
4.2.1. Gewichtete Kerndichteschätzung . . . . .	94
4.2.2. Sukzessive gewichtete Kerndichteschätzung . . . . .	97
4.3. Dehnungspolfiguren . . . . .	103
<b>5. Automatisierter Messbetrieb</b>	<b>107</b>
5.1. $2\theta$ -Beugungsdiagramm . . . . .	107
5.2. Darstellung von Beugungsbildern . . . . .	112
5.2.1. Debye-Scherrer Beugungsbild . . . . .	112
5.2.2. Rotationssymmetrisches reziprokes Beugungsraumbild . .	115
5.3. Identifizierung der Kristallstruktur . . . . .	117
5.4. Schätzung von Parametern zur Erzeugung von Messschemata . .	118
5.5. Automatisierter Messablauf . . . . .	125
5.6. Orientierungsdichtenabhängiger adaptiver Messablauf . . . . .	127
5.6.1. Erzeugung von mehrstufigen Messrastern . . . . .	128
5.6.2. Adaptives heuristisches Auswahlkriterium . . . . .	131
5.6.3. Schätzung der Orientierungsdichte . . . . .	140
5.6.4. Abbruchkriterium . . . . .	141
5.6.5. Automatisierter orientierungsdichtenabhängiger adaptiver Messablauf . . . . .	143
<b>6. Anwendungen</b>	<b>147</b>
6.1. Verfahren zur Ausrichtung der Strahlquelle . . . . .	147
6.1.1. Regressionsmodell . . . . .	148
6.1.2. Ausrichtung der Strahlquelle . . . . .	150
6.1.3. Beispiel . . . . .	152
6.2. Beispiel für den automatisierten Messablauf . . . . .	159
6.3. Beispiel für den orientierungsdichtenabhängigen adaptiven Messab- lauf . . . . .	163
6.3.1. Konventioneller Messablauf . . . . .	164
6.3.2. Adaptiver Messablauf . . . . .	175
6.4. Optimierung der Detektorgröße . . . . .	179
<b>7. Zusammenfassung</b>	<b>187</b>

---

<b>A. Beugungsraumkoordinaten</b>	<b>189</b>
A.1. Beugungsraum– und Detektorkoordinaten . . . . .	189
A.2. Sichtbarer Ausschnitt eines Beugungsringes . . . . .	190
A.3. Strahlweg . . . . .	191
<b>Literatur</b>	<b>193</b>

Optimierung der Goniometrie zur Texturbestimmung aus  
Röntgenbeugungsbildern

Bachmann, F.

2016, XI, 209 S. 46 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-658-14940-6