

# V41 - Debye Scherrer

Kevin Heinicke  
kevin.heinicke@udo.edu

Markus Stabrin  
markus.stabrin@udo.edu

6. Juni 2016

1. Abgabe 2. August 2016

2. Abgabe 25. August 2016

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>2</b>
1.1	Beschreibung der Kristallstruktur . . . . .	2
1.2	Kubische Kristallstrukturen . . . . .	2
1.3	Netzebenen . . . . .	4
1.4	Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Aufbau und Durchführung</b>	<b>7</b>
<b>3</b>	<b>Messung</b>	<b>9</b>
3.1	Mögliche Werte für $h$ , $k$ und $l$ verschiedener Kristallstrukturen . . . . .	9
3.2	Messdaten . . . . .	10
3.3	Analyse der Probe 6 . . . . .	15
3.3.1	Bestimmung der Kristallstruktur . . . . .	15
3.3.2	Bestimmung der Gitterkonstanten $a$ . . . . .	17
3.4	Analyse des Salzes 1 . . . . .	20
3.4.1	Bestimmung der Kristallstruktur . . . . .	20
3.4.2	Bestimmung der Gitterkonstanten $a$ . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Diskussion</b>	<b>27</b>
	<b>Literatur</b>	<b>27</b>
<b>5</b>	<b>Anhang</b>	<b>28</b>

# 1 Theoretische Grundlagen

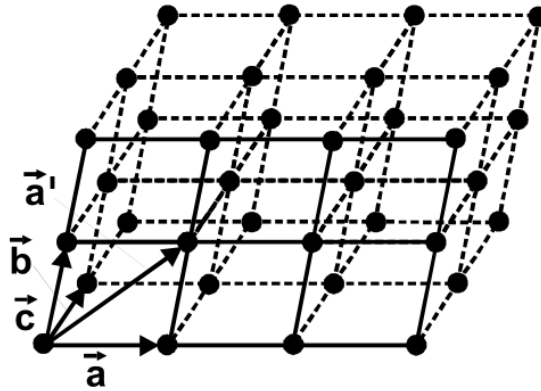
Bei dem Debye-Scherrer-Verfahren handelt es sich um eine Methode der Strukturaufklärung. Mithilfe eines monochromatischen Röntgenstrahls wird eine kristalline Probe bestrahlt, welche zu einer Beugung des Strahls führt. Aus dem entstehenden Interferenzmuster lässt sich nun die Struktur des Gitters und die Gitterkonstante berechnen. In diesem Versuch wird ein Metall, im Folgenden Probe 6 genannt, und ein Salz, im Folgenden Salz 1 genannt, untersucht.

## 1.1 Beschreibung der Kristallstruktur

Eine Kristallstruktur besteht aus einem Gitter und einer Basis. Dabei beschreibt diese die Faltung der beiden Bestandteile und ist somit vollständig bekannt, wenn das Gitter und die Gestalt der Basis bekannt ist. Das Gitter kann nun über die fundamentalen Translationen  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  aufgespannt werden, sodass jeder Punkt durch einen Vektor

$$\vec{t} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z},$$

beschrieben werden kann (Abb. 1).



**Abbildung 1:** Erzeugung eines Punktgitters mithilfe der fundamentalen Translation  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und  $\vec{c}$  [2].

Die kleinste Einheit der Struktur ist die Elementarzelle, welche durch das Parallelepiped des Vektors  $\vec{t}$  aufgespannt wird. Teilt möglichen Elementarzellen in ihre Symmetrieeigenschaften auf, so ergeben sich in 3 Dimensionen 14 verschiedene Möglichkeiten. Diese werden als Bravais-Gitter bezeichnet. In diesem Versuch werden nur kubische Systeme behandelt, welche sich in die FCC-, BCC-, und SC-Struktur unterteilen.

## 1.2 Kubische Kristallstrukturen

Wie in Kapitel 1.1 beschrieben, bestehen kubische Systeme aus der FCC-, BCC-, und SC-Struktur. Die kubisch-primitive Struktur (SC) besitzt die fundamentale Translation

$$(0, 0, 0) .$$

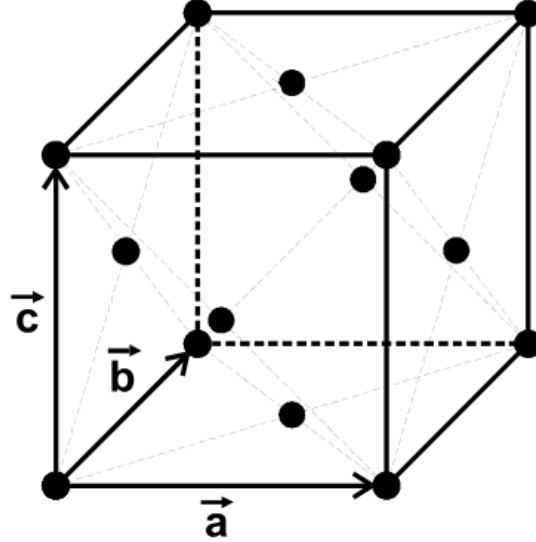
Die kubisch-raumzentrierte Struktur (BCC) hingegen hat die fundamentale Translation

$$(0, 0, 0) \text{ und } \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

und die kubisch-flächenzentrierte Struktur (FCC)

$$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \text{ und } \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right).$$

Ein Beispiel für eine kubisch-flächenzentrierte Elementarzelle mit fundamentale Translation ist in Abbildung 2 dargestellt.



**Abbildung 2:** Elementarzelle eines kubisch-flächenzentrierten Gitters [2].

Werden kubisch-flächenzentrierte Gitter kombiniert, so ergeben sich weitere Möglichkeiten. Die Diamant-Struktur besteht aus zwei kubisch-flächenzentrierten Gittern, welche um ein Viertel der Raumdiagonalen gegeneinander versetzt sind. Somit ergibt sich für die fundamentale Translation

$$(0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) \text{ und } \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right).$$

Werden die beiden Gitter durch verschiedene Atomarten besetzt, so wird von der Zinkblende-Struktur gesprochen mit den fundamentale Translation

$$\begin{aligned} A : & (0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \text{ und } \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \\ B : & \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) \text{ und } \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right). \end{aligned}$$

Sind die Gitter um eine halbe Raumdiagonale verschoben, so ergibt sich die Steinsalz Struktur mit den fundamentale Translation

$$\begin{aligned} A : & (0,0,0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \text{ und } \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \\ B : & \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(1, 1, \frac{1}{2}\right), \left(1, \frac{1}{2}, 1\right) \text{ und } \left(\frac{1}{2}, 1, 1\right). \end{aligned}$$

Werden anstelle von kubisch-flächenzentrierten Strukturen kubisch-primitive Gitter um eine halbe Raumdiagonale verschoben, so ergibt sich die Cäsiumchlorid-Struktur mit den

fundamentale Translation

$$\begin{aligned} A &: (0, 0, 0) , \\ B &: \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) . \end{aligned}$$

Abschließend wird hier noch die Fluorid-Struktur betrachtet, welche bei Verbindungen des Typs  $AB_2$  auftritt. Sie besteht aus drei kubisch-flächenzentrierten Gittern, welche um  $\frac{1}{4}$ , bzw.  $\frac{3}{4}$  der Raumdiagonalen verschoben sind. Die Elementarzelle hat somit die fundamentale Translation

$$\begin{aligned} A &: (0, 0, 0) , \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right) , \left( \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right) , \text{ und } \left( 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) , \\ B &: \left( \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right) , \left( \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4} \right) , \left( \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \right) , \left( \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4} \right) , \\ &\quad \left( \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4} \right) , \left( \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \right) , \left( \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4} \right) , \text{ und } \left( \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right) . \end{aligned}$$

### 1.3 Netzebenen

Als Netzebene in einem Kristall wird eine Ebene bezeichnet, in der die Schwerpunkte von Atomen liegen. Netzebenen sind daher äquidistante Netzebenen, welche parallel zueinander liegen. Beschrieben werden diese durch die Millerschen Indices  $(hkl)$ . Konstruiert werden diese, indem die Kehrwerte der relativen Achsenabschnitte mit einer geeigneten natürlichen Zahl multipliziert werden, sodass sich eine ganze Zahl ergibt. Negative Zahlen werden dabei mit einem Minuszeichen oberhalb der Ziffer angegeben und ist der Wert  $\infty$ , so ergibt sich eine 0.

Beschränkt man sich auf orthogonale Kristallsysteme, so lässt sich über die Beziehung

$$\begin{aligned} \overline{OA} &= \frac{1}{h}a , \\ \overline{OB} &= \frac{1}{k}b , \\ \overline{OC} &= \frac{1}{l}c , \end{aligned}$$

der Netzebenenabstand  $d$  über

$$d = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}} ,$$

herleiten. Kubische Systeme lassen sich weiter zu

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} ,$$

vereinfachen.

### 1.4 Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen

Die Wechselwirkung von Röntgenstrahlen mit den Elektronen und Atomen eines Kristalls kann als klassischer Streuprozess aufgefasst werden. Somit werden die geladenen Teilchen

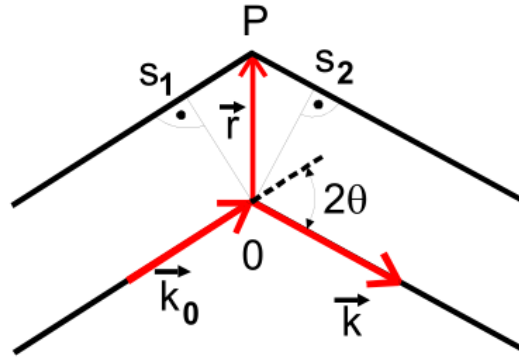
im elektrischen Wechselfeld zu erzwungenen Schwingungen angeregt. Die beschleunigten Teilchen emittieren ebenfalls Strahlung, welche aufgrund der periodischen Anordnung des Kristallgitters interferenzfähig ist. Es ergibt sich somit ein Zusammenhang zwischen den Streurichtungen und der Lage der Streuzentren. Da die Intensität der emittierten Strahlung proportional zu  $\frac{1}{m^2}$  ist, findet die Streuung fast ausschließlich an Elektronen statt.

Die Elektronenhülle besitzt eine Ausdehnung, sodass anschaulich gesprochen die Elektronen, die zuerst mit dem Strahl wechselwirken, nicht mit denen in Phase schwingen, welche erst später wechselwirken. Somit kommt es zu einer Verstärkung der gestreuten Intensität  $I_a$  gegenüber der Streuintensität des Einzelelektrons  $I_e$  um das Quadrat des Atomformfaktors  $f$

$$f\left(z, \frac{\sin \Theta}{\lambda}\right)^2 = \frac{I_a}{I_e},$$

welcher von der Ordnungszahl  $z$ , dem Streuwinkel  $\Theta$  und der Wellenlänge des einfallenden Strahls  $\lambda$  abhängt.

Die Berechnung des Phasenunterschieds zweier Wellen, die am Ursprung O und am Ort P der Elektronenhülle liegen, wird an dem schematischen Aufbau in Abbildung 3 deutlich.



**Abbildung 3:** Skizze zur Berechnung der Phasenunterschiedes zweier Wellen, die an den Punkten O und P gestreut werden [2].

Für den einfallenden Wellenzahlvektor  $\vec{k}_0$  und den Wellenzahlvektor  $\vec{k}$  der gestreuten Welle gilt

$$|\vec{k}| = |\vec{k}_0| = \frac{1}{\lambda},$$

woraus sich für den Gangunterschied  $\Delta s$

$$\Delta s = s_1 + s_2 = \vec{r} \cdot \left( \frac{\vec{k}}{k} - \frac{\vec{k}_0}{k_0} \right),$$

ergibt. Somit ist der Phasenunterschied  $\Delta\phi$

$$\Delta\phi = 2\pi \frac{\Delta s}{\lambda} = 2\pi \vec{r} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0),$$

womit sich der Atomformfaktor als Fouriertransformierte der Ladungsverteilung  $\rho$  durch

$$f = \int_{\text{Hülle}} e^{-i\Delta\phi} \rho(\vec{r}) d^3r = \int_{\text{Hülle}} e^{-i2\pi \vec{r} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)} \rho(\vec{r}) d^3r,$$

bestimmen lässt.

Wird nun die Streuung an mehreren Atomen einer Elementarzelle betrachtet, so treten auf Grund des festen Abstandes der Atome zueinander Interferenzeffekte auf. Die Berechnung des Phasenunterschieds erfolgt analog zu der Streuung an zwei Elektronen mit dem Abstand  $\vec{r}_j$  zwischen zwei Atomen

$$\Delta\phi = 2\pi\vec{r}_j \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) .$$

Für die Streuamplitude  $A$  der gesamten Elementarzelle muss nun über alle Atome innerhalb der Zelle phasenrichtig summiert werden

$$A = \sum_j f_j e^{-2\pi i \vec{r}_j \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)} I_e = \sum_j f_j e^{-2\pi i (x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c}) \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)} I_e := S .$$

$S$  beschreibt somit die Strukturamplitude der Elementarzelle. Der Streuwinkel berechnet sich über

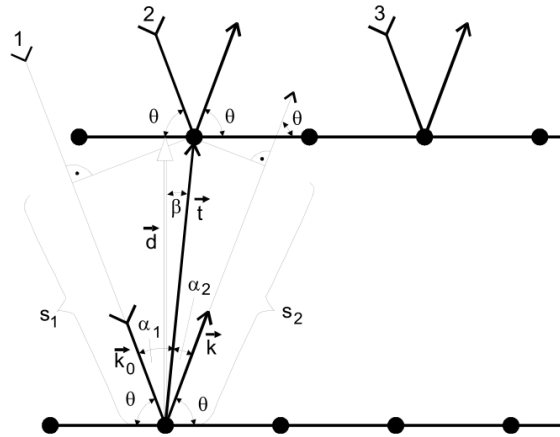
$$|\vec{k} - \vec{k}_0| = \frac{2 \sin \Theta}{\lambda} .$$

Trifft die einfallende Strahlung als ebene Welle auf den Kristall, treten konstruktive Interferenzen zwischen benachbarten Netzebenen nur dann auf, wenn ihr Gangunterschied  $\Delta s$  ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  ist. Mithilfe der Abbildung 4 und den Zusammenhängen

$$\begin{aligned} \alpha_1 + \alpha_2 &= \pi - 2\Theta , \\ \frac{\pi}{2} - \Theta &= \alpha_2 + \beta , \end{aligned}$$

folgt für

$$t \cdot (\cos \alpha_1 + \cos \alpha_2) = 2t \cos \beta \cos \Theta .$$



**Abbildung 4:** Skizze zur Ableitung der Braggschen Bedingung [2].

Somit ergibt sich die Braggsche Bedingung

$$n\lambda = 2d \sin \Theta \quad n \in \mathbb{N}_{>0} .$$

mit dem Netzebenenabstand  $d$ .

Betrachtet man die reziproken Gittervektoren

$$\begin{aligned}\vec{A} &= \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}, \\ \vec{B} &= \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}, \\ \vec{C} &= \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})},\end{aligned}$$

und den reziproken Gittervektor  $\vec{g}$

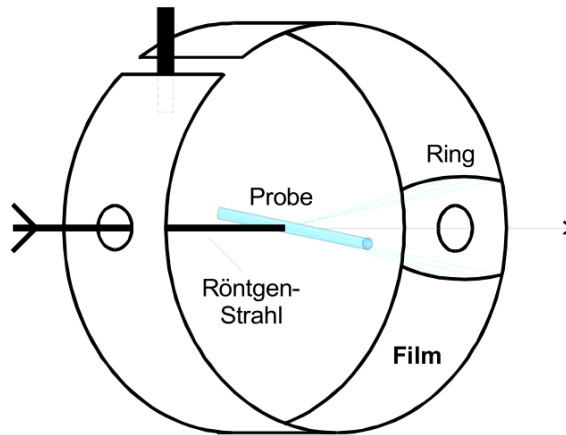
$$\vec{g} = \vec{k} - \vec{k}_0 = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C},$$

ergibt sich für die Streuamplitude  $S$

$$S = \sum_j f_j e^{-2\pi i \vec{r}_j \cdot \vec{g}} = \sum_j f_j e^{-2\pi i (x_j h + y_j k + z_j l)}.$$

Somit ist es möglich, dass kein Reflex stattfindet, obwohl sich ein Bragg'scher Winkel berechnen lässt.

## 2 Aufbau und Durchführung

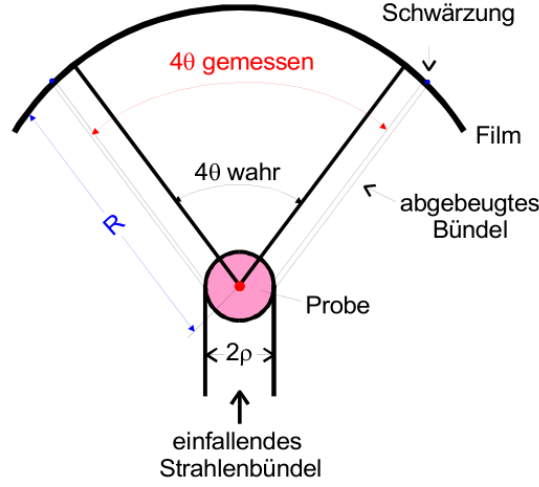


**Abbildung 5:** Schematischer Aufbau zur Herstellung einer Debye-Scherrer-Aufnahme [2].

In Abbildung 5 ist der Messaufbau schematisch dargestellt. Um die Größe und Gestalt der Elementarzelle des Probenmaterials zu bestimmen, wird die Probe mit monochromatischem Röntgenlicht bestrahlt und die Beugungswinkel  $\Theta$  der auftretenden Bragg-Reflexe gemessen. Um ein möglichst genaues Signal zu erhalten, wird das Debye-Scherrer-Verfahren verwendet. Bei diesem wird eine fein pulverisierte, kristalline Probe auf einen dünnen Zylinder aufgebracht, sodass die Orientierung der Mikrokristalle statistisch über den ganzen Raumwinkel verteilt sind. Somit ist die Wahrscheinlichkeit groß, einige Kristallite in Reflexionsstellung zu finden. Um die Wahrscheinlichkeit noch weiter zu vergrößern, wird die

Probe zudem während des Bestrahleins um die Längsachse gedreht.

Bei der Messung kommt es zu systematischen Fehlern. Dies hat zur Folge, dass die Gitterkonstante  $a$  eine scheinbare Abhängigkeit vom Winkel  $\Theta$  aufweist. Dies ist im wesentlichen auf zwei Effekte zurückzuführen. Wie in Abbildung 6 dargestellt, findet eine nahezu voll-



**Abbildung 6:** Auftretender systematischer Fehler bei der  $\Theta$  Bestimmung infolge der Absorption durch die Probe [2].

ständige Absorption des Strahls an der Probe statt, sodass nur an einem schmalen Streifen des Zylinders eine Beugung stattfindet. Somit wird der Winkel  $4\Theta$  zu groß gemessen, sodass an der Gitterkonstanten  $a$  die Korrektur  $\Delta a_A$  über

$$\frac{\Delta a_A}{a} = \frac{\rho}{2R} \left(1 - \frac{R}{F}\right) \frac{\cos^2 \Theta}{\Theta},$$

mit  $\rho$  als dem Probenradius,  $R = 57,3 \text{ mm}$  dem Kameraradius und  $F = 130 \text{ mm}$  dem Abstand Fokus-Probe, angewendet werden muss.

Weiterhin kann es passieren, dass die Probenachse nicht mit der Achse des Filmzylinders zusammenfällt. Wie in Abbildung 7 angedeutet, ergibt sich ein Winkelfehler von

$$\Delta\Theta = \frac{v}{R} \cos \Theta \sin \Theta,$$

mit  $v = \overline{MP}$ . Somit ist eine Korrektur der Form

$$\frac{\Delta a_V}{a} = \frac{v}{R} \cos^2 \Theta,$$

nötig.

Näherungsweise gilt

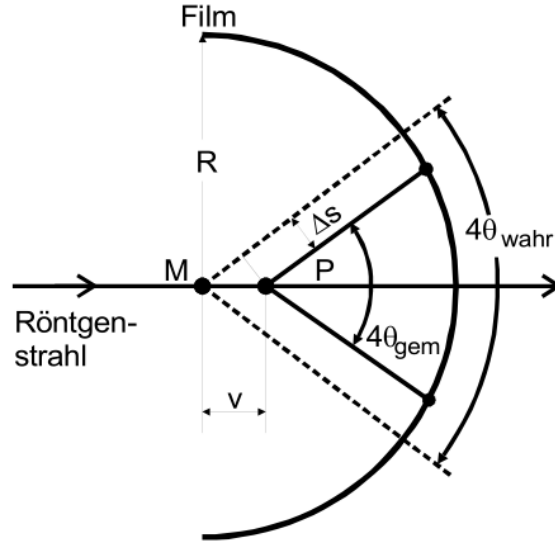
$$\Delta a_{\text{ges}} = \Delta a_V + \Delta a_A \propto \cos^2 \Theta,$$

sodass die Gitterkonstante  $a$  durch eine lineare Regression bestimmt werden kann.

Im ersten Teil des Versuchs wird durch Ausmessen der Radien der Beugungswinkel berechnet und der Netzebenenabstand  $d$  bestimmt.

Im zweiten Teil wird die Kristallstruktur den Reflexen zugeordnet und abschließend die Gitterkonstante der Struktur bestimmt.





**Abbildung 7:** Auftretender systematischer Fehler bei der  $\Theta$  Bestimmung infolge der Verschiebung der Probenachse gegen die Achse des Filmzylinders [2]. (M = Durchstoßpunkt der Filmzylinderachse durch die Zeichenebene, P = Durchstoßpunkt der Probenachse)

### 3 Messung

Zunächst wird berechnet, welche Kombinationen der Millerschen Indizes  $h$ ,  $k$  und  $l$  bei den betrachteten Kristallstrukturen möglich sind. Für diese wird anschließend der Wert  $m_i = h_i^2 + k_i^2 + l_i^2$  bestimmt und die Wurzel aus dem Quotienten  $m_i/m_1$  berechnet. Anschließend werden diese Werte mit den Gemessenen verglichen und so die Wahrscheinlichsten Kristallstrukturen bestimmt.

Abschließend können die Gitterkonstanten der Strukturen berechnet werden.

Zur Berechnung der Fehler wurde die uncertainties Bibliothek in python genutzt, wodurch der Fehler nach

$$\Delta f = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left( \left( \frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 \Delta f_{x_i}^2 \right)}$$

berechnet wird [1]. Dabei wurde ein Fehler auf die gemessene Länge  $s$  von

$$\Delta s = 0,01 \text{ mm}$$

angenommen. Sind bei Werten keine Fehler angegeben, so haben diese keine Aussagekraft, da der Wert mithilfe der durchgeführten Messung nicht so genau bestimmt werden kann.

#### 3.1 Mögliche Werte für $h$ , $k$ und $l$ verschiedener Kristallstrukturen

Zur Berechnung der nicht verschwindenden Netzebenen wird der Strukturfaktor nach

$$S = \sum_j f_j \exp(-2\pi i(x_j \cdot h + y_j \cdot k + z_j \cdot l)),$$

und den fundamentalen Translationen aus Kapitel 1.2 berechnet. Es wurden die Kristallgitter SC-Struktur, FCC-Struktur, BCC-Struktur, Diamant-Struktur, Zinkblende-Struktur,

Steinsalz-Struktur, Fluorid-Struktur und Caesiumchlorid-Struktur betrachtet. Die nicht verschwindenden Kombinationen der Werte  $h$ ,  $k$  und  $l$  sind in Tabelle 1 aufgelistet. Bei einer weiteren Betrachtung der Formfaktoren aus Tabelle 2 ergeben sich zusätzlich die in den Tabellen 47 bis 66 dargestellten Reflexe.

### 3.2 Messdaten

Um die Gitterstrukturen der gemessenen Probe 6 und dem Salz 1 zu bestimmen, werden zunächst die Streuwinkel aus den Ringen der Filmstreifen nach

$$\Theta' = \frac{s}{R},$$

mit  $R = 57,3 \text{ mm}$ , bestimmt.

Da die statistische Verteilung der Kristallorientierungen auf einen Kegelmantel mit dem Öffnungswinkel  $2\Theta$  abbildet ergibt sich für  $\Theta$

$$\Theta = \frac{\Theta'}{2},$$

woraus sich der Netzebenenabstand nach der Bragg'schen Bedingung

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin(\Theta)},$$

mit  $\lambda = 1,5417 \text{ \AA}$ , ergibt. Diese ist ein Mittelwert aus der  $\lambda_{K_{\alpha,1}} = 1,54093 \text{ \AA}$  und  $\lambda_{K_{\alpha,2}} = 1,54478 \text{ \AA}$  Wellenlänge der Röntgenstrahlung. Für die letzten vier Werte ist diese Näherung jedoch nicht gültig, da es zu einer Aufspaltung der Ringe gekommen ist. Somit wurde für diese Werte der Mittelwert nach

$$s_{\text{Mittel}} = \frac{s_i + s_{i+1}}{2}$$

gebildet. Zudem ist es zu einer Aufspaltung der ersten vier Werte gekommen, aufgrund des nicht perfekten herausfilterns der  $K_{\beta}$  Linie. Auch für diese ist der Mittelwert errechnet worden.

Die errechneten Ergebnisse sind in den Tabellen 3 bis 6 dargestellt. Da im Nachhinein keine Zuordnung von vorne und hinten auf dem Filmstreifen möglich ist, werden diese sowohl von rechts nach links ausgemessen, als auch von links nach rechts ausgemessen ausgewertet.

**Tabelle 1:** Kombinationen der Werte  $(hkl)$  für nicht verschwindende Reflexe verschiedener Kristallgitter. Für die Steinsalz-Struktur wurde eine Basis aus Chlor auf der fundamentalen Translation A und Calcium auf der fundamentalen Translation B und für die Caesiumchlorid-Struktur eine Basis aus Caesium auf der fundamentalen Translation A und Chlor auf der fundamentalen Translation B.

BCC	Diamant	FCC	SC	Steinsalz	Caesiumchlorid
(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(2 0 0)	(2 2 0)	(2 0 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)
(2 1 1)	(3 1 1)	(2 2 0)	(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)
(2 2 0)	(4 0 0)	(3 1 1)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 0 0)
(3 1 0)	(3 3 1)	(2 2 2)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 0)
(2 2 2)	(4 2 2)	(4 0 0)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 1)
(3 2 1)	(3 3 3)	(3 3 1)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 0)
(4 0 0)	(4 4 0)	(4 2 0)	(2 2 1)	(3 1 0)	(2 2 1)
(3 3 0)	(5 3 1)	(4 2 2)	(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 0)
(4 2 0)	(6 2 0)	(3 3 3)	(3 1 1)	(2 2 2)	(3 1 1)
(3 3 2)	(5 3 3)	(4 4 0)	(2 2 2)	(3 2 0)	(2 2 2)
(4 2 2)	(4 4 4)	(5 3 1)	(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 0)
(4 3 1)	(5 5 1)	(4 4 2)	(3 2 1)	(4 0 0)	(3 2 1)
(5 2 1)	(6 4 2)	(6 2 0)	(4 0 0)	(3 2 2)	(4 0 0)
(4 4 0)	(5 5 3)	(5 3 3)	(3 2 2)	(4 1 1)	(3 2 2)
(4 3 3)	(8 0 0)	(6 2 2)	(3 3 0)	(3 3 1)	(3 3 0)
(4 4 2)	(7 3 3)	(4 4 4)	(3 3 1)	(4 2 0)	(3 3 1)
(5 3 2)	(6 6 0)	(5 5 1)	(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 0)
(6 2 0)	(5 5 5)	(6 4 0)	(4 2 1)	(3 3 2)	(4 2 1)
(5 4 1)	(8 4 0)	(6 4 2)	(3 3 2)	(4 2 2)	(3 3 2)
(6 2 2)	(7 5 3)	(5 5 3)	(4 2 2)	(4 3 0)	(4 2 2)
(6 3 1)	(6 6 4)	(8 0 0)	(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 0)
(4 4 4)	(9 3 1)	(7 3 3)	(4 3 1)	(3 3 3)	(4 3 1)
(5 4 3)	(8 4 4)	(6 4 4)	(3 3 3)	(4 3 2)	(3 3 3)
(6 4 0)	(7 5 5)	(6 6 0)	(4 3 2)	(5 2 1)	(4 3 2)
(5 5 2)	(8 6 2)	(5 5 5)	(5 2 1)	(4 4 0)	(5 2 1)
(6 4 2)	(7 7 3)	(6 6 2)	(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 0)
(7 3 0)		(8 4 0)	(4 4 1)	(4 3 3)	(4 4 1)
(6 5 1)		(7 5 3)	(4 3 3)	(5 3 1)	(4 3 3)
(8 0 0)		(8 4 2)	(5 3 1)	(4 4 2)	(5 3 1)
(5 5 4)		(6 6 4)		(6 1 0)	
(6 4 4)		(9 3 1)		(5 3 2)	
(6 5 3)		(8 4 4)		(6 2 0)	
		(7 5 5)		(4 4 3)	
		(8 6 0)		(5 4 1)	
		(8 6 2)		(5 3 3)	
		(7 7 3)		(6 2 2)	
				(5 4 2)	
				(6 3 1)	
				(4 4 4)	
				(6 3 2)	
				(5 4 3)	
				(5 5 1)	

**Tabelle 2:** Verwendete Formfaktoren zur Berechnung der nicht verschwindenden Reflexe der Werte  $(h, k, l)$  [2].

$\frac{\sin \Theta}{\lambda} / 1/\text{\AA}$	$F^-$	$Cl^-$	$J^-$	$K^+$	$Ca^{2+}$	$Cu^+$	$Cs^+$
0,0	10,0	18,0	54,0	81,0	18,0	28,0	54,0
0,05	9,8	17,5		17,7	17,8	27,5	
0,1	9,1	16,0	50,8	16,7	17,1	26,2	50,9
0,15	8,2	14,1		15,3	16,1	24,4	
0,2	7,1	12,2	44,7	13,8	14,9	22,3	45,2
0,25	6,1	10,6		12,3	13,6	20,4	
0,3	5,2	9,4	38,9	11,0	12,3	18,7	39,6
0,35	4,4	8,6		9,9	11,2	17,3	
0,4	3,8	8,0	29,0	9,0	10,3	16,0	30,0
0,5	2,9	7,3	29,0	7,9	8,8	13,8	30,0
0,6	2,3	6,6	25,4	7,1	7,6	12,1	26,3
0,7	2,0	6,0	22,5	6,5	6,7	10,7	23,9

**Tabelle 3:** Gemessene und errechnete Werte der gemessenen Probe 6, wenn von rechts nach links gemessen wird.

$s / \text{mm}$	$\Theta' / ^\circ$	$\Theta / ^\circ$	$d / \text{\AA}$
$44,10 \pm 0,01$	$44,10 \pm 0,01$	$22,05 \pm 0,01$	2,05
$51,62 \pm 0,01$	$51,62 \pm 0,01$	$25,81 \pm 0,01$	1,77
$76,40 \pm 0,01$	$76,39 \pm 0,01$	$38,20 \pm 0,01$	1,25
$92,76 \pm 0,01$	$92,75 \pm 0,01$	$46,38 \pm 0,01$	1,06
$98,46 \pm 0,01$	$98,45 \pm 0,01$	$49,23 \pm 0,01$	1,02
$121,50 \pm 0,01$	$121,49 \pm 0,01$	$60,75 \pm 0,01$	0,88
$149,80 \pm 0,01$	$149,79 \pm 0,01$	$74,89 \pm 0,01$	0,80
$155,40 \pm 0,01$	$155,39 \pm 0,01$	$77,69 \pm 0,01$	0,79

**Tabelle 4:** Gemessene und errechnete Werte der gemessenen Probe 6, wenn von links nach rechts gemessen wird.

$s / \text{mm}$	$\Theta' / ^\circ$	$\Theta / ^\circ$	$d / \text{\AA}$
$24,60 \pm 0,01$	$24,60 \pm 0,01$	$12,30 \pm 0,01$	3,62
$30,20 \pm 0,01$	$30,20 \pm 0,01$	$15,10 \pm 0,01$	2,96
$58,50 \pm 0,01$	$58,50 \pm 0,01$	$29,25 \pm 0,01$	1,58
$81,54 \pm 0,01$	$81,53 \pm 0,01$	$40,77 \pm 0,01$	1,18
$87,24 \pm 0,01$	$87,23 \pm 0,01$	$43,62 \pm 0,01$	1,12
$103,60 \pm 0,01$	$103,59 \pm 0,01$	$51,80 \pm 0,01$	0,98
$128,38 \pm 0,01$	$128,37 \pm 0,01$	$64,19 \pm 0,01$	0,86
$135,90 \pm 0,01$	$135,89 \pm 0,01$	$67,94 \pm 0,01$	0,83

**Tabelle 5:** Gemessene und errechnete Werte des gemessenen Salz 1, wenn von rechts nach links gemessen wird.

$s / \text{mm}$	$\Theta' / ^\circ$	$\Theta / ^\circ$	$d / \text{\AA}$
$27,74 \pm 0,01$	$27,74 \pm 0,01$	$13,87 \pm 0,01$	3,22
$34,40 \pm 0,01$	$34,40 \pm 0,01$	$17,20 \pm 0,01$	2,61
$35,58 \pm 0,01$	$35,58 \pm 0,01$	$17,79 \pm 0,01$	2,52
$41,28 \pm 0,01$	$41,28 \pm 0,01$	$20,64 \pm 0,01$	2,19
$47,30 \pm 0,01$	$47,30 \pm 0,01$	$23,65 \pm 0,01$	1,92
$57,16 \pm 0,01$	$57,16 \pm 0,01$	$28,58 \pm 0,01$	1,61
$62,06 \pm 0,01$	$62,06 \pm 0,01$	$31,03 \pm 0,01$	1,50
$66,26 \pm 0,01$	$66,26 \pm 0,01$	$33,13 \pm 0,01$	1,41
$70,44 \pm 0,01$	$70,43 \pm 0,01$	$35,22 \pm 0,01$	1,34
$74,80 \pm 0,01$	$74,79 \pm 0,01$	$37,40 \pm 0,01$	1,27
$78,90 \pm 0,01$	$78,89 \pm 0,01$	$39,45 \pm 0,01$	1,21
$82,84 \pm 0,01$	$82,83 \pm 0,01$	$41,42 \pm 0,01$	1,17
$90,86 \pm 0,01$	$90,85 \pm 0,01$	$45,43 \pm 0,01$	1,08
$94,88 \pm 0,01$	$94,87 \pm 0,01$	$47,44 \pm 0,01$	1,05
$98,82 \pm 0,01$	$98,81 \pm 0,01$	$49,41 \pm 0,01$	1,02
$102,70 \pm 0,01$	$102,69 \pm 0,01$	$51,35 \pm 0,01$	0,99
$106,96 \pm 0,01$	$106,95 \pm 0,01$	$53,48 \pm 0,01$	0,96
$111,16 \pm 0,01$	$111,15 \pm 0,01$	$55,58 \pm 0,01$	0,93
$115,36 \pm 0,01$	$115,35 \pm 0,01$	$57,68 \pm 0,01$	0,91
$124,88 \pm 0,01$	$124,87 \pm 0,01$	$62,44 \pm 0,01$	0,87
$129,96 \pm 0,01$	$129,95 \pm 0,01$	$64,98 \pm 0,01$	0,85
$134,38 \pm 0,01$	$134,37 \pm 0,01$	$67,19 \pm 0,01$	0,84
$141,42 \pm 0,01$	$141,41 \pm 0,01$	$70,70 \pm 0,01$	0,82
$153,50 \pm 0,01$	$153,49 \pm 0,01$	$76,74 \pm 0,01$	0,79
$157,76 \pm 0,01$	$157,75 \pm 0,01$	$78,87 \pm 0,01$	0,79

**Tabelle 6:** Gemessene und errechnete Werte des gemessenen Salz 1, wenn von links nach rechts gemessen wird.

$s / \text{mm}$	$\Theta' / ^\circ$	$\Theta / ^\circ$	$d / \text{\AA}$
$22,24 \pm 0,01$	$22,24 \pm 0,01$	$11,12 \pm 0,01$	4,00
$26,50 \pm 0,01$	$26,50 \pm 0,01$	$13,25 \pm 0,01$	3,36
$38,58 \pm 0,01$	$38,58 \pm 0,01$	$19,29 \pm 0,01$	2,33
$45,62 \pm 0,01$	$45,62 \pm 0,01$	$22,81 \pm 0,01$	1,99
$50,04 \pm 0,01$	$50,04 \pm 0,01$	$25,02 \pm 0,01$	1,82
$55,12 \pm 0,01$	$55,12 \pm 0,01$	$27,56 \pm 0,01$	1,67
$64,64 \pm 0,01$	$64,64 \pm 0,01$	$32,32 \pm 0,01$	1,44
$68,84 \pm 0,01$	$68,83 \pm 0,01$	$34,42 \pm 0,01$	1,36
$73,04 \pm 0,01$	$73,03 \pm 0,01$	$36,52 \pm 0,01$	1,30
$77,30 \pm 0,01$	$77,29 \pm 0,01$	$38,65 \pm 0,01$	1,23
$81,18 \pm 0,01$	$81,17 \pm 0,01$	$40,59 \pm 0,01$	1,18
$85,12 \pm 0,01$	$85,11 \pm 0,01$	$42,56 \pm 0,01$	1,14
$89,14 \pm 0,01$	$89,13 \pm 0,01$	$44,57 \pm 0,01$	1,10
$97,16 \pm 0,01$	$97,15 \pm 0,01$	$48,58 \pm 0,01$	1,03
$101,10 \pm 0,01$	$101,09 \pm 0,01$	$50,55 \pm 0,01$	1,00
$105,20 \pm 0,01$	$105,19 \pm 0,01$	$52,60 \pm 0,01$	0,97
$109,56 \pm 0,01$	$109,55 \pm 0,01$	$54,78 \pm 0,01$	0,94
$113,74 \pm 0,01$	$113,73 \pm 0,01$	$56,87 \pm 0,01$	0,92
$117,94 \pm 0,01$	$117,93 \pm 0,01$	$58,97 \pm 0,01$	0,90
$122,84 \pm 0,01$	$122,83 \pm 0,01$	$61,42 \pm 0,01$	0,88
$132,70 \pm 0,01$	$132,69 \pm 0,01$	$66,35 \pm 0,01$	0,84
$138,72 \pm 0,01$	$138,71 \pm 0,01$	$69,35 \pm 0,01$	0,82
$144,42 \pm 0,01$	$144,41 \pm 0,01$	$72,20 \pm 0,01$	0,81
$145,60 \pm 0,01$	$145,59 \pm 0,01$	$72,79 \pm 0,01$	0,81
$152,26 \pm 0,01$	$152,25 \pm 0,01$	$76,12 \pm 0,01$	0,79

### 3.3 Analyse der Probe 6

#### 3.3.1 Bestimmung der Kristallstruktur

Da es sich bei der Probe 6 um ein Metall handeln soll, kommen für die Kristallgitter SC-Struktur, BCC-Struktur, FCC-Struktur und Diamant-Struktur infrage.

Da sich für die Gitterkonstante die Beziehung

$$a = d \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = d \cdot \sqrt{m} = d_i \cdot \sqrt{m_i},$$

ergibt, lassen sich die gemessenen Netzebenenabstände  $d_i$  mit den Kombinationen von  $(hkl)$  der möglichen Kristallgitter über die Beziehung

$$\frac{d_1}{d_i} = \sqrt{\frac{m_i}{m_1}},$$

vergleichen. Dabei ergeben sich die in den Tabellen 7 und 9 dargestellten Abweichungen. Eine genauere Betrachtung der wahrscheinlichsten Kristallgitter ist in den Tabellen 8 und 10 dargestellt.

Zum Vergleich sind die unwahrscheinlicheren Kristallgitter in den Tabellen 23 bis 28 abgebildet.

**Tabelle 7:** Mittlere Abweichung der verglichenen Werte der gemessenen Probe 6, wenn von rechts nach links gemessen wird.

Kristallstruktur	$\bar{\Delta} / \%$
FCC	$0,92 \pm 0,02$
BCC	$6,52 \pm 0,02$
SC	$7,96 \pm 0,02$
Diamant	$16,46 \pm 0,02$

**Tabelle 8:** Vergleich der Werte der gemessenen Probe 6 mit den Werten der FCC-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 1 1)	1,00	1,0	0,00
(2 0 0)	1,16	1,15	$0,44 \pm 0,03$
(2 2 0)	1,65	1,63	$0,87 \pm 0,03$
(3 1 1)	1,93	1,91	$0,71 \pm 0,03$
(2 2 2)	2,02	2,0	$0,87 \pm 0,03$
(4 0 0)	2,32	2,31	$0,64 \pm 0,03$
(3 3 1)	2,60	2,52	$3,42 \pm 0,03$
(4 2 0)	2,57	2,58	$0,39 \pm 0,02$

**Tabelle 9:** Mittlere Abweichung der verglichenen Werte der gemessenen Probe 6, wenn von links nach rechts gemessen wird.

Kristallstruktur	$\bar{\Delta} / \%$
FCC	$1,61 \pm 0,02$
SC	$2,83 \pm 0,02$
BCC	$2,94 \pm 0,01$
Diamant	$4,24 \pm 0,01$

**Tabelle 10:** Vergleich der Werte der gemessenen Probe 6 mit den Werten der FCC-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 1 1)	1,00	1,0	0,00
(2 0 0)	1,22	1,15	$5,90 \pm 0,05$
(2 2 0)			
(3 1 1)			
(2 2 2)			
(4 0 0)	2,29	2,31	$0,68 \pm 0,04$
(3 3 1)			
(4 2 0)			
(4 2 2)			
(3 3 3)	3,07	3,0	$2,18 \pm 0,04$
(4 4 0)	3,24	3,27	$0,84 \pm 0,04$
(5 3 1)			
(4 4 2)			
(6 2 0)	3,69	3,65	$1,03 \pm 0,05$
(5 3 3)			
(6 2 2)			
(4 4 4)			
(5 5 1)			
(6 4 0)	4,23	4,16	$1,51 \pm 0,05$
(6 4 2)	4,35	4,32	$0,71 \pm 0,05$



### 3.3.2 Bestimmung der Gitterkonstanten $a$

Zur Bestimmung der Gitterkonstanten wird der Zusammenhang

$$a = d_i \cdot \sqrt{m_i},$$

verwendet. Um die scheinbare Abhängigkeit zwischen der Gitterkonstanten  $a$  und dem Winkel  $\Theta$  auszugleichen, werden die errechnete Konstanten gegen  $\cos^2(\Theta)$  aufgetragen und mithilfe einer linearen Regression der Form  $f(x) = c_{\text{Probe}} \cdot x + b$  die Konstante  $a$  über die Beziehung

$$a = b,$$

bestimmt.

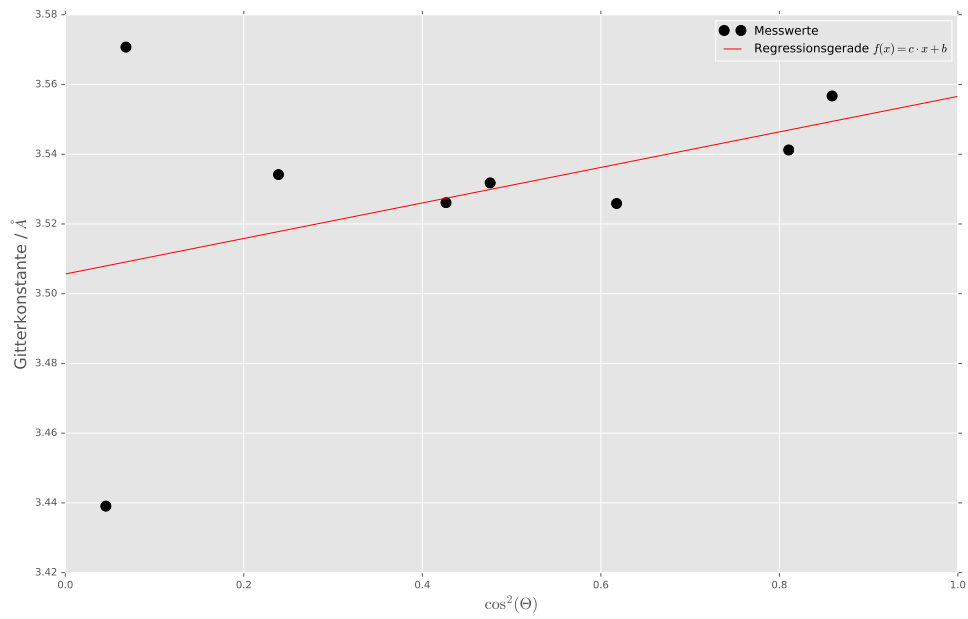
Die verwendeten Werte für die Regression der wahrscheinlichsten Kristallstruktur sind in den Tabellen 11 und 13 dargestellt. Die zugehörigen Graphen sind in den Abbildungen 8 und 9 abgebildet. Die Ergebnisse der Regression zeigen die Tabellen 12 und 14. Die Werte der unwahrscheinlicheren Kristallstrukturen zeigen die Tabellen 29 bis 34.

**Tabelle 11:** Werte der Probe 6, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von rechts nach links gemessen wird.

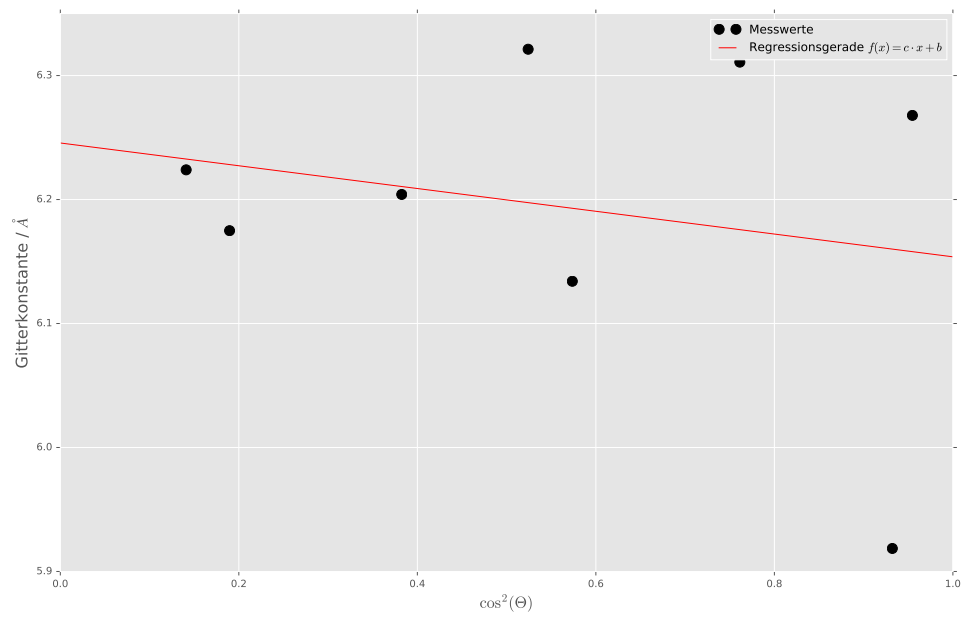
hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 1 1)	2,05	1,73	$22,05 \pm 0,01$	0,86	3,56
(2 0 0)	1,77	2,0	$25,81 \pm 0,01$	0,81	3,54
(2 2 0)	1,25	2,83	$38,20 \pm 0,01$	0,62	3,53
(3 1 1)	1,06	3,32	$46,38 \pm 0,01$	0,48	3,53
(2 2 2)	1,02	3,46	$49,23 \pm 0,01$	0,43	3,53
(4 0 0)	0,88	4,0	$60,75 \pm 0,01$	0,24	3,53
(3 3 1)	0,79	4,36	$77,69 \pm 0,01$	0,05	3,44
(4 2 0)	0,80	4,47	$74,89 \pm 0,01$	0,07	3,57

**Tabelle 12:** Ergebnisse der linearen Regression der Probe 6, wenn von rechts nach links gemessen wird.

	$c_{\text{Probe},1} / 1/\text{\AA}$	$b / \text{\AA}$	$a / \text{\AA}$
FCC	0,05	3,51	3,51
BCC	$0,14 \pm 0,06$	$3,05 \pm 0,02$	$3,05 \pm 0,02$
SC	$-0,06 \pm 0,04$	$2,27 \pm 0,01$	$2,27 \pm 0,01$
Diamant	$-0,14 \pm 0,28$	$4,35 \pm 0,08$	$4,35 \pm 0,08$



**Abbildung 8:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  der Probe 6 mit einer FCC-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von rechts nach links gemessen wird.



**Abbildung 9:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  der Probe 6 mit einer FCC-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von links nach rechts gemessen wird.

**Tabelle 13:** Werte der Probe 6, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 1 1)	3,62	1,73	$12,30 \pm 0,01$	0,95	6,27
(2 0 0)	2,96	2,0	$15,10 \pm 0,01$	0,93	5,92
(2 2 0)					
(3 1 1)					
(2 2 2)					
(4 0 0)	1,58	4,0	$29,25 \pm 0,01$	0,76	6,31
(3 3 1)					
(4 2 0)					
(4 2 2)					
(3 3 3)	1,18	5,20	$40,77 \pm 0,01$	0,57	6,13
(4 4 0)	1,12	5,66	$43,62 \pm 0,01$	0,52	6,32
(5 3 1)					
(4 4 2)					
(6 2 0)	0,98	6,32	$51,80 \pm 0,01$	0,38	6,20
(5 3 3)					
(6 2 2)					
(4 4 4)					
(5 5 1)					
(6 4 0)	0,86	7,21	$64,19 \pm 0,01$	0,19	6,17
(6 4 2)	0,83	7,48	$67,94 \pm 0,01$	0,14	6,22

**Tabelle 14:** Ergebnisse der linearen Regression der Probe 6, wenn von links nach rechts gemessen wird.

	$c_{\text{Probe},2} / 1/\text{\AA}$	$b / \text{\AA}$	$a / \text{\AA}$
FCC	$-0,09 \pm 0,03$	$6,25 \pm 0,01$	$6,25 \pm 0,01$
SC	$0,25 \pm 0,06$	$3,55 \pm 0,03$	$3,55 \pm 0,03$
BCC	$0,41 \pm 0,13$	$4,97 \pm 0,05$	$4,97 \pm 0,05$
Diamant	$1,0 \pm 0,8$	$5,98 \pm 0,30$	$5,98 \pm 0,30$

### 3.4 Analyse des Salzes 1

#### 3.4.1 Bestimmung der Kristallstruktur

Da es sich bei dem Salz 1 um ein Salz handeln soll, kommen für die Kristallgitter Zinkblende-Struktur, Steinsalz-Struktur, Fluorid-Struktur und Caesiumchlorid-Struktur infrage.

Wie bei in Abschnitt 3.3 bereits beschrieben werden die Kristallgitter über die Beziehung

$$\frac{d_1}{d_i} = \sqrt{\frac{m_i}{m_1}},$$

verglichen. Dabei ergaben sich die in den Tabellen 15 und 17 dargestellten Abweichungen der wahrscheinlichsten Kristallstrukturen. Eine genauere Betrachtung der wahrscheinlichsten Kristallgitter ist in den Tabellen 16 bis 18 dargestellt.

Zum Vergleich sind die unwahrscheinlicheren Kristallgitter in den Tabellen 35 bis 40 abgebildet.

**Tabelle 15:** Mittlere Abweichung der verglichenen Werte des gemessenen Salzes 1, wenn von rechts nach links gemessen wird.

Kristallstruktur	$\bar{\Delta} / \%$
Caesiumchlorid_Caesium_Chlor	$21,87 \pm 0,03$
Caesiumchlorid_Caesium_Fluor	$21,87 \pm 0,03$
Caesiumchlorid_Caesium_Jod	$21,87 \pm 0,03$
Caesiumchlorid_Calcium_Chlor	$21,87 \pm 0,03$

**Tabelle 16:** Vergleich der Werte des gemessenen Salzes 1 mit den Werten der Caesiumchlorid-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird. Dabei sitzen auf den Positionen A der fundamentalen Translation Caesium Atome und auf den Positionen B der fundamentalen Translation Chlor Atome.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,23	1,41	$12,77 \pm 0,04$
(1 1 1)	1,27	1,73	$26,42 \pm 0,03$
(2 0 0)	1,47	2,0	$26,48 \pm 0,03$
(2 1 0)	1,67	2,24	$25,16 \pm 0,03$
(2 1 1)	2,00	2,45	$18,53 \pm 0,03$
(2 2 0)	2,15	2,83	$23,97 \pm 0,03$
(2 2 1)	2,28	3,0	$24,00 \pm 0,03$
(3 1 0)	2,41	3,16	$23,92 \pm 0,03$
(3 1 1)	2,53	3,32	$23,61 \pm 0,03$
(2 2 2)	2,65	3,46	$23,48 \pm 0,03$
(3 2 0)	2,76	3,61	$23,46 \pm 0,03$
(3 2 1)	2,97	3,74	$20,57 \pm 0,03$
(4 0 0)	3,07	4,0	$23,18 \pm 0,03$
(3 2 2)	3,17	4,12	$23,17 \pm 0,03$
(3 3 0)	3,26	4,24	$23,21 \pm 0,03$
(3 3 1)	3,35	4,36	$23,09 \pm 0,03$
(4 2 0)	3,44	4,47	$23,05 \pm 0,03$
(4 2 1)	3,53	4,58	$23,07 \pm 0,03$
(3 3 2)	3,70	4,69	$21,15 \pm 0,03$
(4 2 2)	3,78	4,90	$22,84 \pm 0,03$
(4 3 0)	3,85	5,0	$23,09 \pm 0,03$
(4 3 1)	3,94	5,10	$22,78 \pm 0,03$
(3 3 3)	4,06	5,20	$21,85 \pm 0,03$
(4 3 2)	4,09	5,39	$23,99 \pm 0,03$

**Tabelle 17:** Mittlere Abweichung der verglichenen Werte des gemessenen Salzes 1, wenn von links nach rechts gemessen wird.

Kristallstruktur	$\bar{\Delta} / \%$
Caesiumchlorid_Caesium_Chlor	$3,18 \pm 0,04$
Caesiumchlorid_Caesium_Fluor	$3,18 \pm 0,04$
Caesiumchlorid_Caesium_Jod	$3,18 \pm 0,04$
Caesiumchlorid_Calcium_Chlor	$3,18 \pm 0,04$

**Tabelle 18:** Vergleich der Werte des gemessenen Salzes 1 mit den Werten der Caesiumchlorid-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird. Dabei sitzen auf den Positionen A der fundamentalen Translation Caesium Atome und auf den Positionen B der fundamentalen Translation Chlor Atome.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,19	1,41	$15,97 \pm 0,05$
(1 1 1)	1,71	1,73	$1,11 \pm 0,05$
(2 0 0)	2,01	2,0	$0,51 \pm 0,05$
(2 1 0)	2,19	2,24	$1,93 \pm 0,05$
(2 1 1)	2,40	2,45	$2,06 \pm 0,05$
(2 2 0)	2,77	2,83	$1,99 \pm 0,05$
(2 2 1)	2,93	3,0	$2,30 \pm 0,05$
(3 1 0)	3,09	3,16	$2,42 \pm 0,05$
(3 1 1)	3,24	3,32	$2,36 \pm 0,05$
(2 2 2)	3,37	3,46	$2,61 \pm 0,05$
(3 2 0)	3,51	3,61	$2,73 \pm 0,05$
(3 2 1)	3,64	3,74	$2,75 \pm 0,05$
(4 0 0)	3,89	4,0	$2,80 \pm 0,05$
(3 2 2)	4,00	4,12	$2,89 \pm 0,05$
(3 3 0)	4,12	4,24	$2,91 \pm 0,05$
(3 3 1)	4,24	4,36	$2,82 \pm 0,05$
(4 2 0)	4,34	4,47	$2,91 \pm 0,05$
(4 2 1)	4,44	4,58	$3,04 \pm 0,05$
(3 3 2)	4,55	4,69	$2,92 \pm 0,05$
(4 2 2)	4,75	4,90	$3,05 \pm 0,05$
(4 3 0)	4,85	5,0	$2,95 \pm 0,05$
(4 3 1)	4,94	5,10	$3,17 \pm 0,05$
(3 3 3)	4,95	5,20	$4,67 \pm 0,05$
(4 3 2)	5,03	5,39	$6,52 \pm 0,05$

### 3.4.2 Bestimmung der Gitterkonstanten $a$

Um die scheinbare Abhängigkeit zwischen der Gitterkonstanten  $a$  und dem Winkel  $\Theta$  auszugleichen, werden, wie in Abschnitt 3.3.2 beschrieben, die errechneten Konstanten gegen  $\cos^2(\Theta)$  aufgetragen und mithilfe einer linearen Regression der Form  $f(x) = c_{\text{Salz}} \cdot x + b$  die Konstante  $a$  über die Beziehung

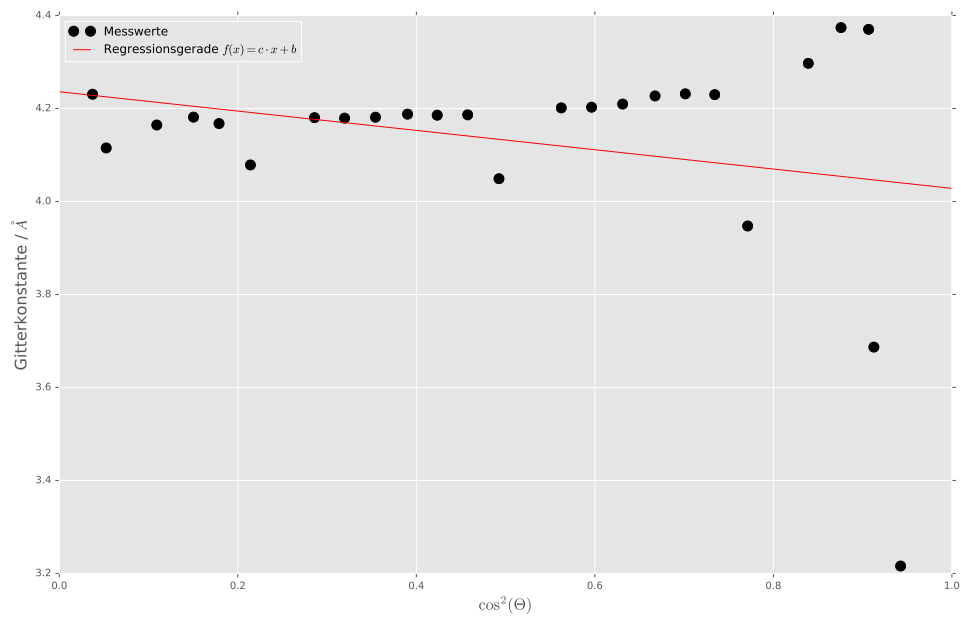
$$a = b,$$

bestimmt.

Die verwendeten Werte für die Regression der wahrscheinlichsten Kristallstruktur sind in den Tabellen 19 bis ?? dargestellt. Die zugehörigen Graphen sind in den Abbildungen 10 bis 11 abgebildet. Die Ergebnisse der Regression zeigen die Tabellen 20 bis 22. Die Werte der unwahrscheinlicheren Kristallstrukturen zeigen die Tabellen 41 bis 46.

**Tabelle 19:** Werte des Salzes 1 der Caesiumchlorid-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von rechts nach links gemessen wird. Dabei sitzen auf den Positionen A der fundamentalen Translation Caesium Atome und auf den Positionen B der fundamentalen Translation Chlor Atome.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	3,22	1,0	$13,87 \pm 0,01$	0,94	3,22
(1 1 0)	2,61	1,41	$17,20 \pm 0,01$	0,91	3,69
(1 1 1)	2,52	1,73	$17,79 \pm 0,01$	0,91	4,37
(2 0 0)	2,19	2,0	$20,64 \pm 0,01$	0,88	4,37
(2 1 0)	1,92	2,24	$23,65 \pm 0,01$	0,84	4,30
(2 1 1)	1,61	2,45	$28,58 \pm 0,01$	0,77	3,95
(2 2 0)	1,50	2,83	$31,03 \pm 0,01$	0,73	4,23
(2 2 1)	1,41	3,0	$33,13 \pm 0,01$	0,70	4,23
(3 1 0)	1,34	3,16	$35,22 \pm 0,01$	0,67	4,23
(3 1 1)	1,27	3,32	$37,40 \pm 0,01$	0,63	4,21
(2 2 2)	1,21	3,46	$39,45 \pm 0,01$	0,60	4,20
(3 2 0)	1,17	3,61	$41,42 \pm 0,01$	0,56	4,20
(3 2 1)	1,08	3,74	$45,43 \pm 0,01$	0,49	4,05
(4 0 0)	1,05	4,0	$47,44 \pm 0,01$	0,46	4,19
(3 2 2)	1,02	4,12	$49,41 \pm 0,01$	0,42	4,19
(3 3 0)	0,99	4,24	$51,35 \pm 0,01$	0,39	4,19
(3 3 1)	0,96	4,36	$53,48 \pm 0,01$	0,35	4,18
(4 2 0)	0,93	4,47	$55,58 \pm 0,01$	0,32	4,18
(4 2 1)	0,91	4,58	$57,68 \pm 0,01$	0,29	4,18
(3 3 2)	0,87	4,69	$62,44 \pm 0,01$	0,21	4,08
(4 2 2)	0,85	4,90	$64,98 \pm 0,01$	0,18	4,17
(4 3 0)	0,84	5,0	$67,19 \pm 0,01$	0,15	4,18
(4 3 1)	0,82	5,10	$70,70 \pm 0,01$	0,11	4,16
(3 3 3)	0,79	5,20	$76,74 \pm 0,01$	0,05	4,12
(4 3 2)	0,79	5,39	$78,87 \pm 0,01$	0,04	4,23



**Abbildung 10:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  des Salzes 1 mit einer Caesiumchlorid-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von rechts nach links gemessen wird. Dabei sitzen auf den Positionen A der fundamentalen Translation Caesium Atome und auf den Positionen B der fundamentalen Translation Chlor Atome.

**Tabelle 20:** Ergebnisse der linearen Regression des Salzes 1 der Caesiumchlorid-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird. Dabei sitzen auf den Positionen A der fundamentalen Translation Caesium Atome und auf den Positionen B der fundamentalen Translation Chlor Atome.

	$c_{\text{Salz},1} / 1/\text{\AA}$	$b / \text{\AA}$	$a / \text{\AA}$
Caesiumchlorid_Caesium_Chlor	$-0,21 \pm 0,03$	$4,24 \pm 0,01$	$4,24 \pm 0,01$
Caesiumchlorid_Caesium_Fluor	$-0,21 \pm 0,03$	$4,24 \pm 0,01$	$4,24 \pm 0,01$
Caesiumchlorid_Caesium_Jod	$-0,21 \pm 0,03$	$4,24 \pm 0,01$	$4,24 \pm 0,01$
Caesiumchlorid_Calcium_Chlor	$-0,21 \pm 0,03$	$4,24 \pm 0,01$	$4,24 \pm 0,01$

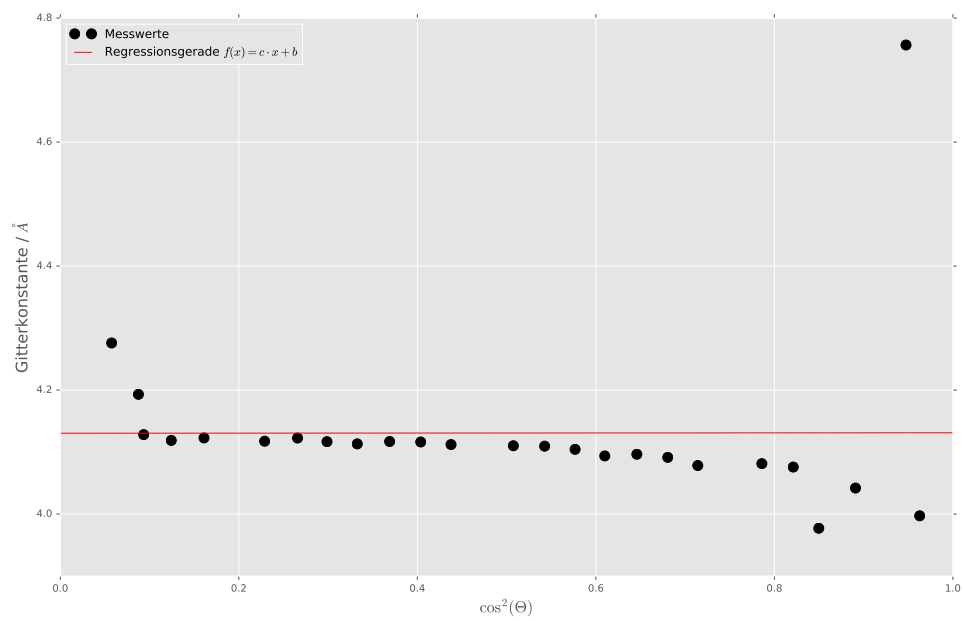


**Tabelle 21:** Werte des Salzes 1 der Caesiumchlorid-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von links nach rechts gemessen wird. Dabei sitzen auf den Positionen A der fundamentalen Translation Caesium Atome und auf den Positionen B der fundamentalen Translation Chlor Atome.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	4,00	1,0	$11,12 \pm 0,01$	0,96	4,00
(1 1 0)	3,36	1,41	$13,25 \pm 0,01$	0,95	4,76
(1 1 1)	2,33	1,73	$19,29 \pm 0,01$	0,89	4,04
(2 0 0)	1,99	2,0	$22,81 \pm 0,01$	0,85	3,98
(2 1 0)	1,82	2,24	$25,02 \pm 0,01$	0,82	4,08
(2 1 1)	1,67	2,45	$27,56 \pm 0,01$	0,79	4,08
(2 2 0)	1,44	2,83	$32,32 \pm 0,01$	0,71	4,08
(2 2 1)	1,36	3,0	$34,42 \pm 0,01$	0,68	4,09
(3 1 0)	1,30	3,16	$36,52 \pm 0,01$	0,65	4,10
(3 1 1)	1,23	3,32	$38,65 \pm 0,01$	0,61	4,09
(2 2 2)	1,18	3,46	$40,59 \pm 0,01$	0,58	4,10
(3 2 0)	1,14	3,61	$42,56 \pm 0,01$	0,54	4,11
(3 2 1)	1,10	3,74	$44,57 \pm 0,01$	0,51	4,11
(4 0 0)	1,03	4,0	$48,58 \pm 0,01$	0,44	4,11
(3 2 2)	1,00	4,12	$50,55 \pm 0,01$	0,40	4,12
(3 3 0)	0,97	4,24	$52,60 \pm 0,01$	0,37	4,12
(3 3 1)	0,94	4,36	$54,78 \pm 0,01$	0,33	4,11
(4 2 0)	0,92	4,47	$56,87 \pm 0,01$	0,30	4,12
(4 2 1)	0,90	4,58	$58,97 \pm 0,01$	0,27	4,12
(3 3 2)	0,88	4,69	$61,42 \pm 0,01$	0,23	4,12
(4 2 2)	0,84	4,90	$66,35 \pm 0,01$	0,16	4,12
(4 3 0)	0,82	5,0	$69,35 \pm 0,01$	0,12	4,12
(4 3 1)	0,81	5,10	$72,20 \pm 0,01$	0,09	4,13
(3 3 3)	0,81	5,20	$72,79 \pm 0,01$	0,09	4,19
(4 3 2)	0,79	5,39	$76,12 \pm 0,01$	0,06	4,28

**Tabelle 22:** Ergebnisse der linearen Regression des Salzes 1 der Caesiumchlorid-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird. Dabei sitzen auf den Positionen A der fundamentalen Translation Caesium Atome und auf den Positionen B der fundamentalen Translation Chlor Atome.

	$c_{\text{Salz},2} / 1/\text{\AA}$	$b / \text{\AA}$	$a / \text{\AA}$
Caesiumchlorid_Caesium_Chlor	0	4,13	4,13
Caesiumchlorid_Caesium_Fluor	0	4,13	4,13
Caesiumchlorid_Caesium_Jod	0	4,13	4,13
Caesiumchlorid_Calcium_Chlor	0	4,13	4,13



**Abbildung 11:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  des Salzes 1 mit einer Caesiumchlorid-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von links nach rechts gemessen wird. Dabei sitzen auf den Positionen A der fundamentalen Translation Caesium Atome und auf den Positionen B der fundamentalen Translation Chlor Atome.

## 4 Diskussion

Mithilfe des Versuchs ließ sich die Kristallstruktur der gemessenen Probe 6 und dem Salz 1 auf eine wahrscheinlichste Kristallstruktur einschränken. Aufgrund der geringeren Abweichung der Werte ist es wahrscheinlicher, dass bei der Probe 6 die von rechts nach links und bei dem Salz 1 die von rechts nach links gemessenen Streifen die richtige Ableserichtung darstellen.

Für die Probe 6 ergibt sich für das wahrscheinlichste Kristallgitter eine FCC-Struktur mit einer mittleren Abweichung von  $(0,92 \pm 0,02) \%$ . Obwohl die sichtbaren Ringe sehr deutlich sind, fehlen einige Reflexe der Kombinationen von  $h$ ,  $k$  und  $l$  für große  $m$ , welche sich durch eine längere Belichtung auf dem Filmstreifen zeigen könnten. Weiterhin kam es zu einer Aufspaltung in den letzten beiden und den ersten beiden Ringen. Dies ist auf die verschiedenen Wellenlängen der  $K_{\alpha,1}$ ,  $K_{\alpha,2}$  und  $K_{\beta}$  Linie der Kupfer Anode zurückzuführen. Dies musste durch Mittelung der jeweils zusammengehörigen Werte ausgeglichen werden. Für die Gitterkonstante der FCC-Struktur ergibt sich mithilfe einer linearen Regression der Wert  $(3,05 \pm 0,02) \text{ \AA}$ .

Beim gemessenen Salz 1 ist es hingegen am wahrscheinlichsten, dass es sich um eine Caesiumchlorid-Struktur handelt bei einer mittleren Abweichung von  $(3,18 \pm 0,04) \%$ . Die Ringe waren auf dem Streifen schwach bis deutlich zu erkennen, doch fehlten hierbei die Reflexe für größere  $m$ . Um die Reflexe zu verdeutlichen und die fehlenden Reflexe sichtbar zu machen, könnte eine längere Belichtungszeit gewählt werden. Die Gitterkonstante der Caesiumchlorid-Struktur ergibt sich somit mithilfe einer linearen Regression zu  $4,13 \text{ \AA}$ . Der Fehler ist nicht signifikant. Zudem erbringt eine Betrachtung verschiedener Formfaktoren keine Änderung im Ergebnis

Abweichungen der Quotienten von den theoretischen Werten könnten sich neben den Ablesefehlern durch Inhomogenitäten oder Fehler innerhalb der Elementarzellen ergeben haben. Aufgrund der gleichen Reflexe bei der Betrachtung verschiedener Formfaktoren innerhalb der Basis, ist es nicht möglich, auf die Atome, aus denen das Gitter aufgebaut ist, zurückzuschließen. Da jedoch Aluminium, Kupfer, Nickel, Blei, Gold, Platin, Silber, Rhodium und Palladium in natürlicher Weise in einer FCC-Struktur vorkommen, ist anzunehmen, dass sich eines dieser Stoffe hinter der Probe 6 verbirgt. Bei dem Salz 1 hingegen ist es wahrscheinlich dass die Caesiumchlorid-Struktur aus Caesium und Chlor aufgebaut ist, da dieses für diese Elemente charakteristisch ist.

## Literatur

- [1] Eric O. Lebigot. *Uncertainties: a Python package for calculations with uncertainties*.
- [2] Physikalisches Praktikum TU Dortmund. *Versuch 41: Debye-Scherrer-Aufnahmen*. <http://129.217.224.2/HOMEPAGE/PHYSIKER/MASTER/SKRIPT/V41.pdf>. aufgerufen 31.07.2016.

## 5 Anhang

**Tabelle 23:** Vergleich der Werte der gemessenen Probe 6 mit den Werten der BCC-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 1 0)	1,00	1,0	0,00
(2 0 0)	1,16	1,41	$17,99 \pm 0,02$
(2 1 1)	1,65	1,73	$4,89 \pm 0,02$
(2 2 0)	1,93	2,0	$3,58 \pm 0,03$
(3 1 0)	2,02	2,24	$9,78 \pm 0,02$
(2 2 2)	2,32	2,45	$5,12 \pm 0,02$
(3 2 1)	2,57	2,65	$2,79 \pm 0,02$
(4 0 0)	2,60	2,83	$7,98 \pm 0,02$

**Tabelle 24:** Vergleich der Werte der gemessenen Probe 6 mit den Werten der SC-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,16	1,41	$17,99 \pm 0,02$
(1 1 1)	1,65	1,73	$4,89 \pm 0,02$
(2 0 0)	1,93	2,0	$3,58 \pm 0,03$
(2 1 0)	2,02	2,24	$9,78 \pm 0,02$
(2 1 1)	2,32	2,45	$5,12 \pm 0,02$
(2 2 0)	2,57	2,83	$9,07 \pm 0,02$
(2 2 1)	2,60	3,0	$13,24 \pm 0,02$

**Tabelle 25:** Vergleich der Werte der gemessenen Probe 6 mit den Werten der Diamant-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 1 1)	1,00	1,0	0,00
(2 2 0)	1,16	1,63	$28,98 \pm 0,02$
(3 1 1)	1,65	1,91	$13,97 \pm 0,02$
(4 0 0)	1,93	2,31	$16,50 \pm 0,02$
(3 3 1)	2,02	2,52	$19,84 \pm 0,02$
(4 2 2)	2,32	2,83	$17,83 \pm 0,02$
(3 3 3)	2,57	3,0	$14,27 \pm 0,02$
(4 4 0)	2,60	3,27	$20,31 \pm 0,02$

**Tabelle 26:** Vergleich der Werte der gemessenen Probe 6 mit den Werten der SC-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,22	1,41	$13,53 \pm 0,04$
(1 1 1)			
(2 0 0)			
(2 1 0)	2,29	2,24	$2,58 \pm 0,05$
(2 1 1)			
(2 2 0)			
(2 2 1)	3,07	3,0	$2,18 \pm 0,04$
(3 1 0)			
(3 1 1)	3,24	3,32	$2,36 \pm 0,04$
(2 2 2)			
(3 2 0)			
(3 2 1)	3,69	3,74	$1,41 \pm 0,05$
(4 0 0)			
(3 2 2)			
(3 3 0)	4,23	4,24	$0,39 \pm 0,05$
(3 3 1)	4,35	4,36	$0,18 \pm 0,05$

**Tabelle 27:** Vergleich der Werte der gemessenen Probe 6 mit den Werten der BCC-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 1 0)	1,00	1,0	0,00
(2 0 0)	1,22	1,41	$13,53 \pm 0,04$
(2 1 1)			
(2 2 0)			
(3 1 0)	2,29	2,24	$2,58 \pm 0,05$
(2 2 2)			
(3 2 1)			
(4 0 0)			
(3 3 0)	3,07	3,0	$2,18 \pm 0,04$
(4 2 0)			
(3 3 2)	3,24	3,32	$2,36 \pm 0,04$
(4 2 2)			
(4 3 1)	3,69	3,61	$2,31 \pm 0,05$
(5 2 1)			
(4 4 0)			
(4 3 3)			
(4 4 2)	4,23	4,24	$0,39 \pm 0,05$
(5 3 2)	4,35	4,36	$0,18 \pm 0,05$

**Tabelle 28:** Vergleich der Werte der gemessenen Probe 6 mit den Werten der Diamant-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 1 1)	1,00	1,0	0,00
(2 2 0)	1,22	1,63	$25,12 \pm 0,04$
(3 1 1)			
(4 0 0)	2,29	2,31	$0,68 \pm 0,04$
(3 3 1)			
(4 2 2)			
(3 3 3)	3,07	3,0	$2,18 \pm 0,04$
(4 4 0)	3,24	3,27	$0,84 \pm 0,04$
(5 3 1)			
(6 2 0)	3,69	3,65	$1,03 \pm 0,05$
(5 3 3)			
(4 4 4)			
(5 5 1)			
(6 4 2)	4,23	4,32	$2,19 \pm 0,04$
(5 5 3)	4,35	4,43	$1,89 \pm 0,04$

**Tabelle 29:** Werte der Probe 6 der BCC-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 1 0)	2,05	1,41	$22,05 \pm 0,01$	0,86	2,90
(2 0 0)	1,77	2,0	$25,81 \pm 0,01$	0,81	3,54
(2 1 1)	1,25	2,45	$38,20 \pm 0,01$	0,62	3,05
(2 2 0)	1,06	2,83	$46,38 \pm 0,01$	0,48	3,01
(3 1 0)	1,02	3,16	$49,23 \pm 0,01$	0,43	3,22
(2 2 2)	0,88	3,46	$60,75 \pm 0,01$	0,24	3,06
(3 2 1)	0,80	3,74	$74,89 \pm 0,01$	0,07	2,99
(4 0 0)	0,79	4,0	$77,69 \pm 0,01$	0,05	3,16

**Tabelle 30:** Werte der Probe 6 der SC-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	2,05	1,0	$22,05 \pm 0,01$	0,86	2,05
(1 1 0)	1,77	1,41	$25,81 \pm 0,01$	0,81	2,50
(1 1 1)	1,25	1,73	$38,20 \pm 0,01$	0,62	2,16
(2 0 0)	1,06	2,0	$46,38 \pm 0,01$	0,48	2,13
(2 1 0)	1,02	2,24	$49,23 \pm 0,01$	0,43	2,28
(2 1 1)	0,88	2,45	$60,75 \pm 0,01$	0,24	2,16
(2 2 0)	0,80	2,83	$74,89 \pm 0,01$	0,07	2,26
(2 2 1)	0,79	3,0	$77,69 \pm 0,01$	0,05	2,37

**Tabelle 31:** Werte der Probe 6 der Diamant-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 1 1)	2,05	1,73	$22,05 \pm 0,01$	0,86	3,56
(2 2 0)	1,77	2,83	$25,81 \pm 0,01$	0,81	5,01
(3 1 1)	1,25	3,32	$38,20 \pm 0,01$	0,62	4,13
(4 0 0)	1,06	4,0	$46,38 \pm 0,01$	0,48	4,26
(3 3 1)	1,02	4,36	$49,23 \pm 0,01$	0,43	4,44
(4 2 2)	0,88	4,90	$60,75 \pm 0,01$	0,24	4,33
(3 3 3)	0,80	5,20	$74,89 \pm 0,01$	0,07	4,15
(4 4 0)	0,79	5,66	$77,69 \pm 0,01$	0,05	4,46

**Tabelle 32:** Werte der Probe 6 der SC-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	3,62	1,0	$12,30 \pm 0,01$	0,95	3,62
(1 1 0)	2,96	1,41	$15,10 \pm 0,01$	0,93	4,19
(1 1 1)					
(2 0 0)					
(2 1 0)	1,58	2,24	$29,25 \pm 0,01$	0,76	3,53
(2 1 1)					
(2 2 0)					
(2 2 1)	1,18	3,0	$40,77 \pm 0,01$	0,57	3,54
(3 1 0)					
(3 1 1)	1,12	3,32	$43,62 \pm 0,01$	0,52	3,71
(2 2 2)					
(3 2 0)					
(3 2 1)	0,98	3,74	$51,80 \pm 0,01$	0,38	3,67
(4 0 0)					
(3 2 2)					
(3 3 0)	0,86	4,24	$64,19 \pm 0,01$	0,19	3,63
(3 3 1)	0,83	4,36	$67,94 \pm 0,01$	0,14	3,63

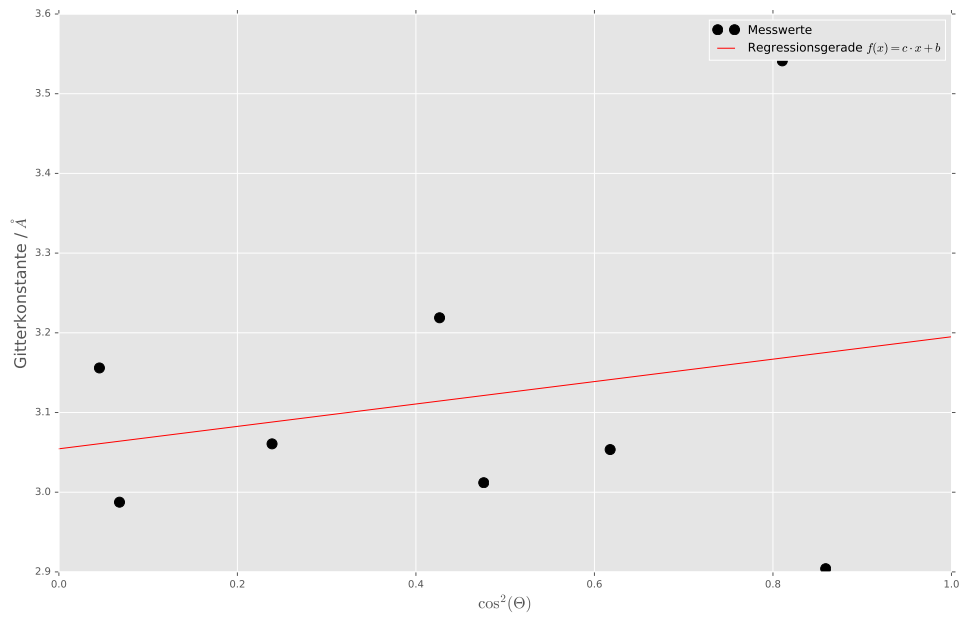
**Tabelle 33:** Werte der Probe 6 der BCC-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 1 0)	3,62	1,41	$12,30 \pm 0,01$	0,95	5,12
(2 0 0)	2,96	2,0	$15,10 \pm 0,01$	0,93	5,92
(2 1 1)					
(2 2 0)					
(3 1 0)	1,58	3,16	$29,25 \pm 0,01$	0,76	4,99
(2 2 2)					
(3 2 1)					
(4 0 0)					
(3 3 0)	1,18	4,24	$40,77 \pm 0,01$	0,57	5,01
(4 2 0)					
(3 3 2)	1,12	4,69	$43,62 \pm 0,01$	0,52	5,24
(4 2 2)					
(4 3 1)	0,98	5,10	$51,80 \pm 0,01$	0,38	5,00
(5 2 1)					
(4 4 0)					
(4 3 3)					
(4 4 2)	0,86	6,0	$64,19 \pm 0,01$	0,19	5,14
(5 3 2)	0,83	6,16	$67,94 \pm 0,01$	0,14	5,13

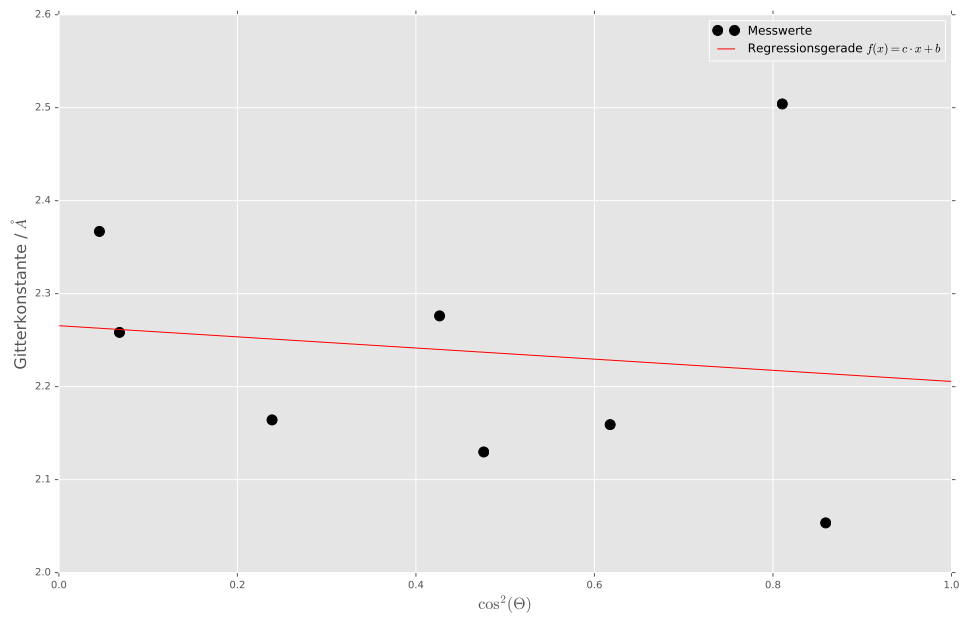
**Tabelle 34:** Werte der Probe 6 der Diamant-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 1 1)	3,62	1,73	$12,30 \pm 0,01$	0,95	6,27
(2 2 0)	2,96	2,83	$15,10 \pm 0,01$	0,93	8,37
(3 1 1)					
(4 0 0)	1,58	4,0	$29,25 \pm 0,01$	0,76	6,31
(3 3 1)					
(4 2 2)					
(3 3 3)	1,18	5,20	$40,77 \pm 0,01$	0,57	6,13
(4 4 0)	1,12	5,66	$43,62 \pm 0,01$	0,52	6,32
(5 3 1)					
(6 2 0)	0,98	6,32	$51,80 \pm 0,01$	0,38	6,20
(5 3 3)					
(4 4 4)					
(5 5 1)					
(6 4 2)	0,86	7,48	$64,19 \pm 0,01$	0,19	6,41
(5 5 3)	0,83	7,68	$67,94 \pm 0,01$	0,14	6,39

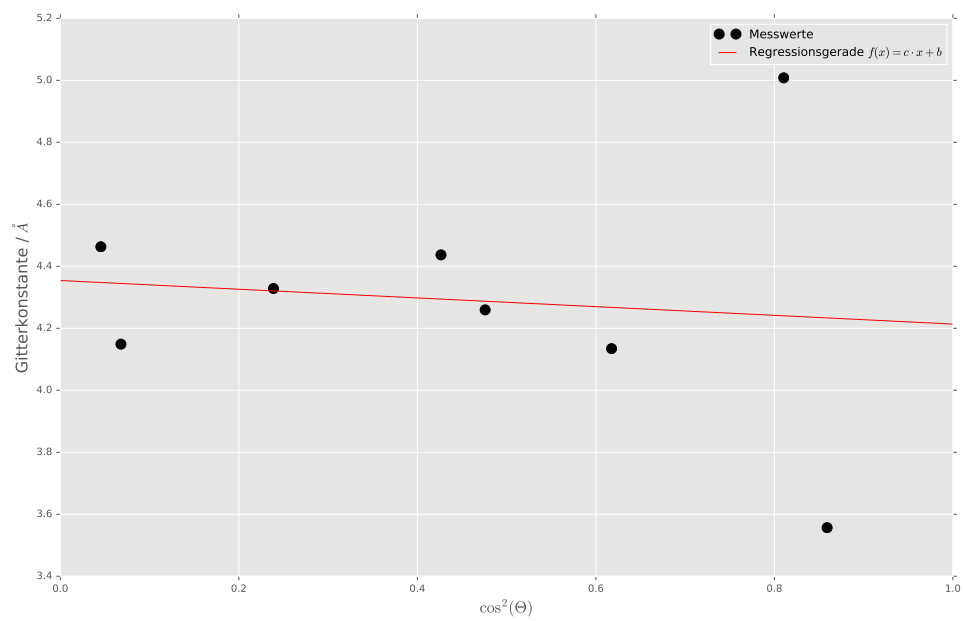




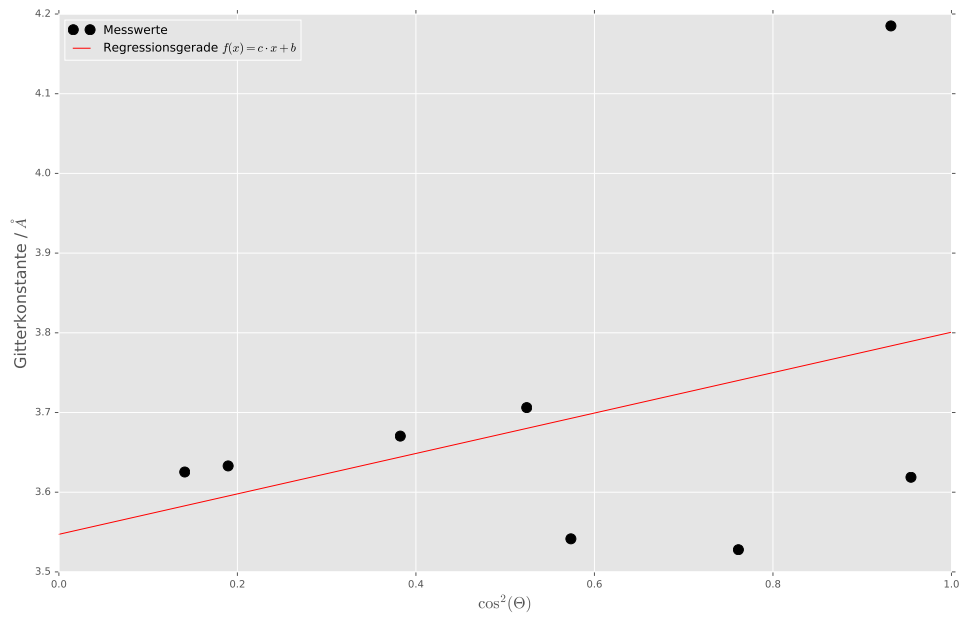
**Abbildung 12:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  der Probe 6 mit einer BCC-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von rechts nach links gemessen wird.



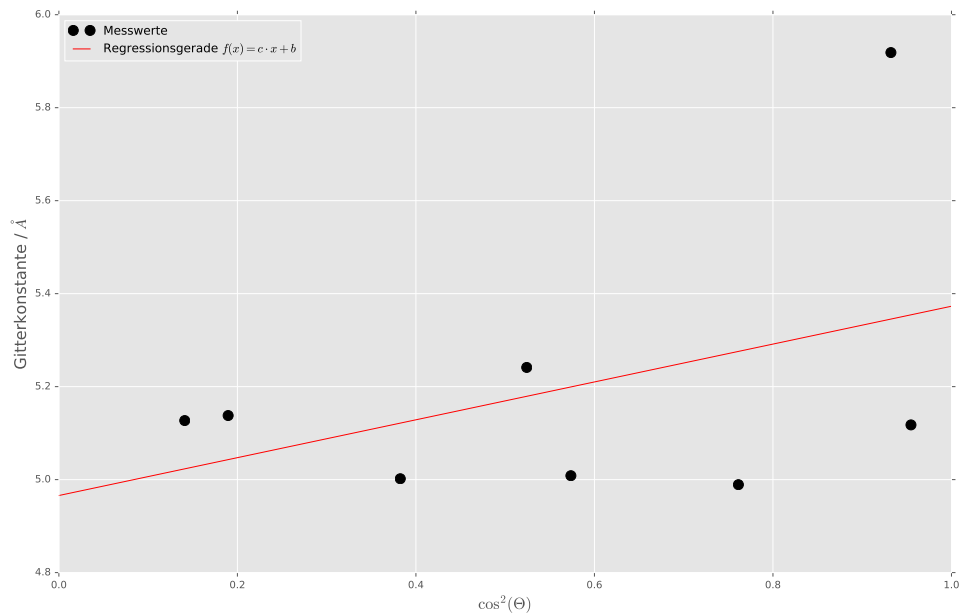
**Abbildung 13:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  der Probe 6 mit einer SC-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von rechts nach links gemessen wird.



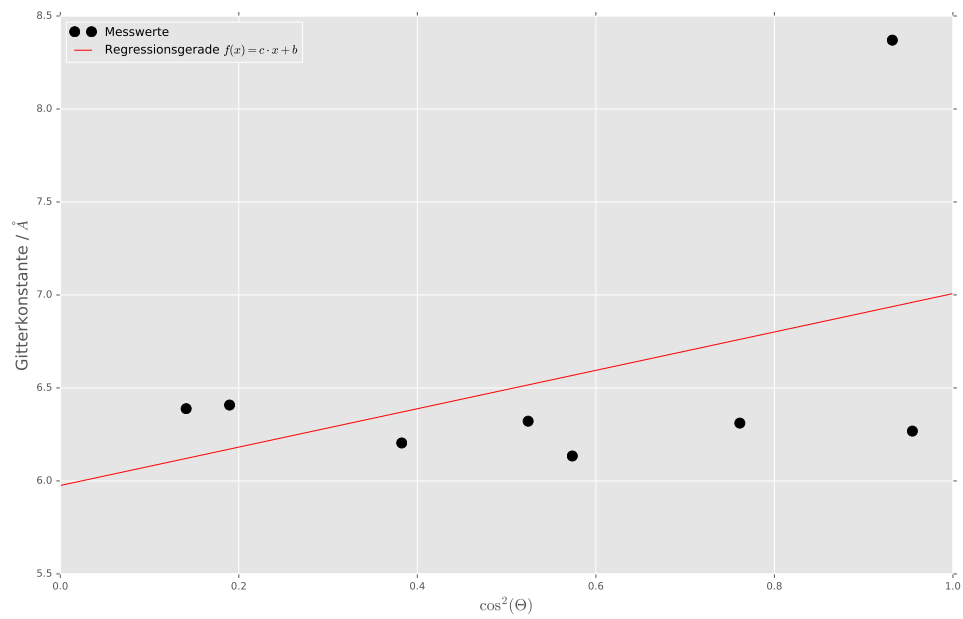
**Abbildung 14:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  der Probe 6 mit einer Diamant-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von rechts nach links gemessen wird.



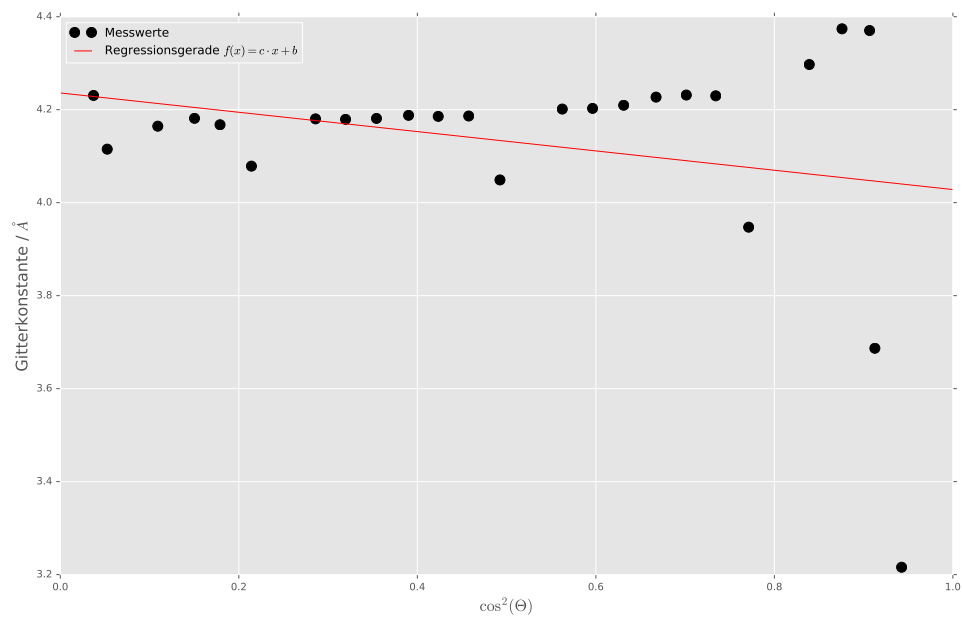
**Abbildung 15:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  der Probe 6 mit einer SC-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von links nach rechts gemessen wird.



**Abbildung 16:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  der Probe 6 mit einer BCC-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von links nach rechts gemessen wird.



**Abbildung 17:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  der Probe 6 mit einer Diamant-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von links nach rechts gemessen wird.



**Abbildung 18:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  des Salzes 1 mit einer Steinsalz-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von rechts nach links gemessen wird.

**Tabelle 35:** Vergleich der Werte des gemessenen Salzes 1 mit den Werten der Steinsalz-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,23	1,41	$12,77 \pm 0,04$
(1 1 1)	1,27	1,73	$26,42 \pm 0,03$
(2 0 0)	1,47	2,0	$26,48 \pm 0,03$
(2 1 0)	1,67	2,24	$25,16 \pm 0,03$
(2 1 1)	2,00	2,45	$18,53 \pm 0,03$
(2 2 0)	2,15	2,83	$23,97 \pm 0,03$
(2 2 1)	2,28	3,0	$24,00 \pm 0,03$
(3 1 0)	2,41	3,16	$23,92 \pm 0,03$
(3 1 1)	2,53	3,32	$23,61 \pm 0,03$
(2 2 2)	2,65	3,46	$23,48 \pm 0,03$
(3 2 0)	2,76	3,61	$23,46 \pm 0,03$
(3 2 1)	2,97	3,74	$20,57 \pm 0,03$
(4 0 0)	3,07	4,0	$23,18 \pm 0,03$
(3 2 2)	3,17	4,12	$23,17 \pm 0,03$
(3 3 0)	3,26	4,24	$23,21 \pm 0,03$
(3 3 1)	3,35	4,36	$23,09 \pm 0,03$
(4 2 0)	3,44	4,47	$23,05 \pm 0,03$
(4 2 1)	3,53	4,58	$23,07 \pm 0,03$
(3 3 2)	3,70	4,69	$21,15 \pm 0,03$
(4 2 2)	3,78	4,90	$22,84 \pm 0,03$
(4 3 0)	3,85	5,0	$23,09 \pm 0,03$
(4 3 1)	3,94	5,10	$22,78 \pm 0,03$
(3 3 3)	4,06	5,20	$21,85 \pm 0,03$
(4 3 2)	4,09	5,39	$23,99 \pm 0,03$

**Tabelle 36:** Vergleich der Werte des gemessenen Salzes 1 mit den Werten der Fluorid-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,23	1,41	$12,77 \pm 0,04$
(1 1 1)	1,27	1,73	$26,42 \pm 0,03$
(2 0 0)	1,47	2,0	$26,48 \pm 0,03$
(2 1 0)	1,67	2,24	$25,16 \pm 0,03$
(2 1 1)	2,00	2,45	$18,53 \pm 0,03$
(2 2 0)	2,15	2,83	$23,97 \pm 0,03$
(2 2 1)	2,28	3,0	$24,00 \pm 0,03$
(3 1 0)	2,41	3,16	$23,92 \pm 0,03$
(3 1 1)	2,53	3,32	$23,61 \pm 0,03$
(2 2 2)	2,65	3,46	$23,48 \pm 0,03$
(3 2 0)	2,76	3,61	$23,46 \pm 0,03$
(3 2 1)	2,97	3,74	$20,57 \pm 0,03$
(4 0 0)	3,07	4,0	$23,18 \pm 0,03$
(3 2 2)	3,17	4,12	$23,17 \pm 0,03$
(3 3 0)	3,26	4,24	$23,21 \pm 0,03$
(3 3 1)	3,35	4,36	$23,09 \pm 0,03$
(4 2 0)	3,44	4,47	$23,05 \pm 0,03$
(4 2 1)	3,53	4,58	$23,07 \pm 0,03$
(3 3 2)	3,70	4,69	$21,15 \pm 0,03$
(4 2 2)	3,78	4,90	$22,84 \pm 0,03$
(4 3 0)	3,85	5,0	$23,09 \pm 0,03$
(4 3 1)	3,94	5,10	$22,78 \pm 0,03$
(3 3 3)	4,06	5,20	$21,85 \pm 0,03$
(4 3 2)	4,09	5,39	$23,99 \pm 0,03$

**Tabelle 37:** Vergleich der Werte des gemessenen Salzes 1 mit den Werten der Zinkblende-Struktur, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,23	1,41	$12,77 \pm 0,04$
(1 1 1)	1,27	1,73	$26,42 \pm 0,03$
(2 0 0)	1,47	2,0	$26,48 \pm 0,03$
(2 1 0)	1,67	2,24	$25,16 \pm 0,03$
(2 1 1)	2,00	2,45	$18,53 \pm 0,03$
(2 2 0)	2,15	2,83	$23,97 \pm 0,03$
(2 2 1)	2,28	3,0	$24,00 \pm 0,03$
(3 1 0)	2,41	3,16	$23,92 \pm 0,03$
(3 1 1)	2,53	3,32	$23,61 \pm 0,03$
(2 2 2)	2,65	3,46	$23,48 \pm 0,03$
(3 2 0)	2,76	3,61	$23,46 \pm 0,03$
(3 2 1)	2,97	3,74	$20,57 \pm 0,03$
(4 0 0)	3,07	4,0	$23,18 \pm 0,03$
(3 2 2)	3,17	4,12	$23,17 \pm 0,03$
(3 3 0)	3,26	4,24	$23,21 \pm 0,03$
(3 3 1)	3,35	4,36	$23,09 \pm 0,03$
(4 2 0)	3,44	4,47	$23,05 \pm 0,03$
(4 2 1)	3,53	4,58	$23,07 \pm 0,03$
(3 3 2)	3,70	4,69	$21,15 \pm 0,03$
(4 2 2)	3,78	4,90	$22,84 \pm 0,03$
(4 3 0)	3,85	5,0	$23,09 \pm 0,03$
(4 3 1)	3,94	5,10	$22,78 \pm 0,03$
(3 3 3)	4,06	5,20	$21,85 \pm 0,03$
(4 3 2)	4,09	5,39	$23,99 \pm 0,03$

**Tabelle 38:** Vergleich der Werte des gemessenen Salzes 1 mit den Werten der Steinsalz-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,19	1,41	$15,97 \pm 0,05$
(1 1 1)	1,71	1,73	$1,11 \pm 0,05$
(2 0 0)	2,01	2,0	$0,51 \pm 0,05$
(2 1 0)	2,19	2,24	$1,93 \pm 0,05$
(2 1 1)	2,40	2,45	$2,06 \pm 0,05$
(2 2 0)	2,77	2,83	$1,99 \pm 0,05$
(2 2 1)	2,93	3,0	$2,30 \pm 0,05$
(3 1 0)	3,09	3,16	$2,42 \pm 0,05$
(3 1 1)	3,24	3,32	$2,36 \pm 0,05$
(2 2 2)	3,37	3,46	$2,61 \pm 0,05$
(3 2 0)	3,51	3,61	$2,73 \pm 0,05$
(3 2 1)	3,64	3,74	$2,75 \pm 0,05$
(4 0 0)	3,89	4,0	$2,80 \pm 0,05$
(3 2 2)	4,00	4,12	$2,89 \pm 0,05$
(3 3 0)	4,12	4,24	$2,91 \pm 0,05$
(3 3 1)	4,24	4,36	$2,82 \pm 0,05$
(4 2 0)	4,34	4,47	$2,91 \pm 0,05$
(4 2 1)	4,44	4,58	$3,04 \pm 0,05$
(3 3 2)	4,55	4,69	$2,92 \pm 0,05$
(4 2 2)	4,75	4,90	$3,05 \pm 0,05$
(4 3 0)	4,85	5,0	$2,95 \pm 0,05$
(4 3 1)	4,94	5,10	$3,17 \pm 0,05$
(3 3 3)	4,95	5,20	$4,67 \pm 0,05$
(4 3 2)	5,03	5,39	$6,52 \pm 0,05$



**Tabelle 39:** Vergleich der Werte des gemessenen Salzes 1 mit den Werten der Fluorid-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,19	1,41	$15,97 \pm 0,05$
(1 1 1)	1,71	1,73	$1,11 \pm 0,05$
(2 0 0)	2,01	2,0	$0,51 \pm 0,05$
(2 1 0)	2,19	2,24	$1,93 \pm 0,05$
(2 1 1)	2,40	2,45	$2,06 \pm 0,05$
(2 2 0)	2,77	2,83	$1,99 \pm 0,05$
(2 2 1)	2,93	3,0	$2,30 \pm 0,05$
(3 1 0)	3,09	3,16	$2,42 \pm 0,05$
(3 1 1)	3,24	3,32	$2,36 \pm 0,05$
(2 2 2)	3,37	3,46	$2,61 \pm 0,05$
(3 2 0)	3,51	3,61	$2,73 \pm 0,05$
(3 2 1)	3,64	3,74	$2,75 \pm 0,05$
(4 0 0)	3,89	4,0	$2,80 \pm 0,05$
(3 2 2)	4,00	4,12	$2,89 \pm 0,05$
(3 3 0)	4,12	4,24	$2,91 \pm 0,05$
(3 3 1)	4,24	4,36	$2,82 \pm 0,05$
(4 2 0)	4,34	4,47	$2,91 \pm 0,05$
(4 2 1)	4,44	4,58	$3,04 \pm 0,05$
(3 3 2)	4,55	4,69	$2,92 \pm 0,05$
(4 2 2)	4,75	4,90	$3,05 \pm 0,05$
(4 3 0)	4,85	5,0	$2,95 \pm 0,05$
(4 3 1)	4,94	5,10	$3,17 \pm 0,05$
(3 3 3)	4,95	5,20	$4,67 \pm 0,05$
(4 3 2)	5,03	5,39	$6,52 \pm 0,05$

**Tabelle 40:** Vergleich der Werte des gemessenen Salzes 1 mit den Werten der Zinkblende-Struktur, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$\frac{d_1}{d_i}$	$\sqrt{\frac{m_i}{m_1}}$	$\Delta / \%$
(1 0 0)	1,00	1,0	0,00
(1 1 0)	1,19	1,41	$15,97 \pm 0,05$
(1 1 1)	1,71	1,73	$1,11 \pm 0,05$
(2 0 0)	2,01	2,0	$0,51 \pm 0,05$
(2 1 0)	2,19	2,24	$1,93 \pm 0,05$
(2 1 1)	2,40	2,45	$2,06 \pm 0,05$
(2 2 0)	2,77	2,83	$1,99 \pm 0,05$
(2 2 1)	2,93	3,0	$2,30 \pm 0,05$
(3 1 0)	3,09	3,16	$2,42 \pm 0,05$
(3 1 1)	3,24	3,32	$2,36 \pm 0,05$
(2 2 2)	3,37	3,46	$2,61 \pm 0,05$
(3 2 0)	3,51	3,61	$2,73 \pm 0,05$
(3 2 1)	3,64	3,74	$2,75 \pm 0,05$
(4 0 0)	3,89	4,0	$2,80 \pm 0,05$
(3 2 2)	4,00	4,12	$2,89 \pm 0,05$
(3 3 0)	4,12	4,24	$2,91 \pm 0,05$
(3 3 1)	4,24	4,36	$2,82 \pm 0,05$
(4 2 0)	4,34	4,47	$2,91 \pm 0,05$
(4 2 1)	4,44	4,58	$3,04 \pm 0,05$
(3 3 2)	4,55	4,69	$2,92 \pm 0,05$
(4 2 2)	4,75	4,90	$3,05 \pm 0,05$
(4 3 0)	4,85	5,0	$2,95 \pm 0,05$
(4 3 1)	4,94	5,10	$3,17 \pm 0,05$
(3 3 3)	4,95	5,20	$4,67 \pm 0,05$
(4 3 2)	5,03	5,39	$6,52 \pm 0,05$

**Tabelle 41:** Werte des Salzes 1 der Steinsalz-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	3,22	1,0	$13,87 \pm 0,01$	0,94	3,22
(1 1 0)	2,61	1,41	$17,20 \pm 0,01$	0,91	3,69
(1 1 1)	2,52	1,73	$17,79 \pm 0,01$	0,91	4,37
(2 0 0)	2,19	2,0	$20,64 \pm 0,01$	0,88	4,37
(2 1 0)	1,92	2,24	$23,65 \pm 0,01$	0,84	4,30
(2 1 1)	1,61	2,45	$28,58 \pm 0,01$	0,77	3,95
(2 2 0)	1,50	2,83	$31,03 \pm 0,01$	0,73	4,23
(2 2 1)	1,41	3,0	$33,13 \pm 0,01$	0,70	4,23
(3 1 0)	1,34	3,16	$35,22 \pm 0,01$	0,67	4,23
(3 1 1)	1,27	3,32	$37,40 \pm 0,01$	0,63	4,21
(2 2 2)	1,21	3,46	$39,45 \pm 0,01$	0,60	4,20
(3 2 0)	1,17	3,61	$41,42 \pm 0,01$	0,56	4,20
(3 2 1)	1,08	3,74	$45,43 \pm 0,01$	0,49	4,05
(4 0 0)	1,05	4,0	$47,44 \pm 0,01$	0,46	4,19
(3 2 2)	1,02	4,12	$49,41 \pm 0,01$	0,42	4,19
(3 3 0)	0,99	4,24	$51,35 \pm 0,01$	0,39	4,19
(3 3 1)	0,96	4,36	$53,48 \pm 0,01$	0,35	4,18
(4 2 0)	0,93	4,47	$55,58 \pm 0,01$	0,32	4,18
(4 2 1)	0,91	4,58	$57,68 \pm 0,01$	0,29	4,18
(3 3 2)	0,87	4,69	$62,44 \pm 0,01$	0,21	4,08
(4 2 2)	0,85	4,90	$64,98 \pm 0,01$	0,18	4,17
(4 3 0)	0,84	5,0	$67,19 \pm 0,01$	0,15	4,18
(4 3 1)	0,82	5,10	$70,70 \pm 0,01$	0,11	4,16
(3 3 3)	0,79	5,20	$76,74 \pm 0,01$	0,05	4,12
(4 3 2)	0,79	5,39	$78,87 \pm 0,01$	0,04	4,23

**Tabelle 42:** Werte des Salzes 1 der Fluorid-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	3,22	1,0	$13,87 \pm 0,01$	0,94	3,22
(1 1 0)	2,61	1,41	$17,20 \pm 0,01$	0,91	3,69
(1 1 1)	2,52	1,73	$17,79 \pm 0,01$	0,91	4,37
(2 0 0)	2,19	2,0	$20,64 \pm 0,01$	0,88	4,37
(2 1 0)	1,92	2,24	$23,65 \pm 0,01$	0,84	4,30
(2 1 1)	1,61	2,45	$28,58 \pm 0,01$	0,77	3,95
(2 2 0)	1,50	2,83	$31,03 \pm 0,01$	0,73	4,23
(2 2 1)	1,41	3,0	$33,13 \pm 0,01$	0,70	4,23
(3 1 0)	1,34	3,16	$35,22 \pm 0,01$	0,67	4,23
(3 1 1)	1,27	3,32	$37,40 \pm 0,01$	0,63	4,21
(2 2 2)	1,21	3,46	$39,45 \pm 0,01$	0,60	4,20
(3 2 0)	1,17	3,61	$41,42 \pm 0,01$	0,56	4,20
(3 2 1)	1,08	3,74	$45,43 \pm 0,01$	0,49	4,05
(4 0 0)	1,05	4,0	$47,44 \pm 0,01$	0,46	4,19
(3 2 2)	1,02	4,12	$49,41 \pm 0,01$	0,42	4,19
(3 3 0)	0,99	4,24	$51,35 \pm 0,01$	0,39	4,19
(3 3 1)	0,96	4,36	$53,48 \pm 0,01$	0,35	4,18
(4 2 0)	0,93	4,47	$55,58 \pm 0,01$	0,32	4,18
(4 2 1)	0,91	4,58	$57,68 \pm 0,01$	0,29	4,18
(3 3 2)	0,87	4,69	$62,44 \pm 0,01$	0,21	4,08
(4 2 2)	0,85	4,90	$64,98 \pm 0,01$	0,18	4,17
(4 3 0)	0,84	5,0	$67,19 \pm 0,01$	0,15	4,18
(4 3 1)	0,82	5,10	$70,70 \pm 0,01$	0,11	4,16
(3 3 3)	0,79	5,20	$76,74 \pm 0,01$	0,05	4,12
(4 3 2)	0,79	5,39	$78,87 \pm 0,01$	0,04	4,23

**Tabelle 43:** Werte des Salzes 1 der Zinkblende-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von rechts nach links gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	3,22	1,0	$13,87 \pm 0,01$	0,94	3,22
(1 1 0)	2,61	1,41	$17,20 \pm 0,01$	0,91	3,69
(1 1 1)	2,52	1,73	$17,79 \pm 0,01$	0,91	4,37
(2 0 0)	2,19	2,0	$20,64 \pm 0,01$	0,88	4,37
(2 1 0)	1,92	2,24	$23,65 \pm 0,01$	0,84	4,30
(2 1 1)	1,61	2,45	$28,58 \pm 0,01$	0,77	3,95
(2 2 0)	1,50	2,83	$31,03 \pm 0,01$	0,73	4,23
(2 2 1)	1,41	3,0	$33,13 \pm 0,01$	0,70	4,23
(3 1 0)	1,34	3,16	$35,22 \pm 0,01$	0,67	4,23
(3 1 1)	1,27	3,32	$37,40 \pm 0,01$	0,63	4,21
(2 2 2)	1,21	3,46	$39,45 \pm 0,01$	0,60	4,20
(3 2 0)	1,17	3,61	$41,42 \pm 0,01$	0,56	4,20
(3 2 1)	1,08	3,74	$45,43 \pm 0,01$	0,49	4,05
(4 0 0)	1,05	4,0	$47,44 \pm 0,01$	0,46	4,19
(3 2 2)	1,02	4,12	$49,41 \pm 0,01$	0,42	4,19
(3 3 0)	0,99	4,24	$51,35 \pm 0,01$	0,39	4,19
(3 3 1)	0,96	4,36	$53,48 \pm 0,01$	0,35	4,18
(4 2 0)	0,93	4,47	$55,58 \pm 0,01$	0,32	4,18
(4 2 1)	0,91	4,58	$57,68 \pm 0,01$	0,29	4,18
(3 3 2)	0,87	4,69	$62,44 \pm 0,01$	0,21	4,08
(4 2 2)	0,85	4,90	$64,98 \pm 0,01$	0,18	4,17
(4 3 0)	0,84	5,0	$67,19 \pm 0,01$	0,15	4,18
(4 3 1)	0,82	5,10	$70,70 \pm 0,01$	0,11	4,16
(3 3 3)	0,79	5,20	$76,74 \pm 0,01$	0,05	4,12
(4 3 2)	0,79	5,39	$78,87 \pm 0,01$	0,04	4,23

**Tabelle 44:** Werte des Salzes 1 der Steinsalz-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	4,00	1,0	$11,12 \pm 0,01$	0,96	4,00
(1 1 0)	3,36	1,41	$13,25 \pm 0,01$	0,95	4,76
(1 1 1)	2,33	1,73	$19,29 \pm 0,01$	0,89	4,04
(2 0 0)	1,99	2,0	$22,81 \pm 0,01$	0,85	3,98
(2 1 0)	1,82	2,24	$25,02 \pm 0,01$	0,82	4,08
(2 1 1)	1,67	2,45	$27,56 \pm 0,01$	0,79	4,08
(2 2 0)	1,44	2,83	$32,32 \pm 0,01$	0,71	4,08
(2 2 1)	1,36	3,0	$34,42 \pm 0,01$	0,68	4,09
(3 1 0)	1,30	3,16	$36,52 \pm 0,01$	0,65	4,10
(3 1 1)	1,23	3,32	$38,65 \pm 0,01$	0,61	4,09
(2 2 2)	1,18	3,46	$40,59 \pm 0,01$	0,58	4,10
(3 2 0)	1,14	3,61	$42,56 \pm 0,01$	0,54	4,11
(3 2 1)	1,10	3,74	$44,57 \pm 0,01$	0,51	4,11
(4 0 0)	1,03	4,0	$48,58 \pm 0,01$	0,44	4,11
(3 2 2)	1,00	4,12	$50,55 \pm 0,01$	0,40	4,12
(3 3 0)	0,97	4,24	$52,60 \pm 0,01$	0,37	4,12
(3 3 1)	0,94	4,36	$54,78 \pm 0,01$	0,33	4,11
(4 2 0)	0,92	4,47	$56,87 \pm 0,01$	0,30	4,12
(4 2 1)	0,90	4,58	$58,97 \pm 0,01$	0,27	4,12
(3 3 2)	0,88	4,69	$61,42 \pm 0,01$	0,23	4,12
(4 2 2)	0,84	4,90	$66,35 \pm 0,01$	0,16	4,12
(4 3 0)	0,82	5,0	$69,35 \pm 0,01$	0,12	4,12
(4 3 1)	0,81	5,10	$72,20 \pm 0,01$	0,09	4,13
(3 3 3)	0,81	5,20	$72,79 \pm 0,01$	0,09	4,19
(4 3 2)	0,79	5,39	$76,12 \pm 0,01$	0,06	4,28

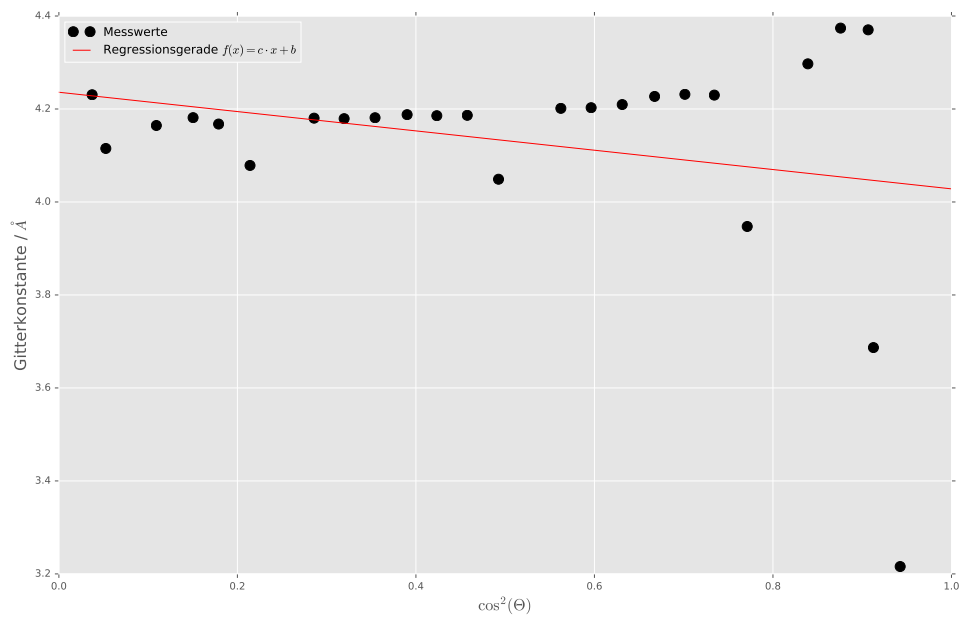
**Tabelle 45:** Werte des Salzes 1 der Fluorid-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	4,00	1,0	$11,12 \pm 0,01$	0,96	4,00
(1 1 0)	3,36	1,41	$13,25 \pm 0,01$	0,95	4,76
(1 1 1)	2,33	1,73	$19,29 \pm 0,01$	0,89	4,04
(2 0 0)	1,99	2,0	$22,81 \pm 0,01$	0,85	3,98
(2 1 0)	1,82	2,24	$25,02 \pm 0,01$	0,82	4,08
(2 1 1)	1,67	2,45	$27,56 \pm 0,01$	0,79	4,08
(2 2 0)	1,44	2,83	$32,32 \pm 0,01$	0,71	4,08
(2 2 1)	1,36	3,0	$34,42 \pm 0,01$	0,68	4,09
(3 1 0)	1,30	3,16	$36,52 \pm 0,01$	0,65	4,10
(3 1 1)	1,23	3,32	$38,65 \pm 0,01$	0,61	4,09
(2 2 2)	1,18	3,46	$40,59 \pm 0,01$	0,58	4,10
(3 2 0)	1,14	3,61	$42,56 \pm 0,01$	0,54	4,11
(3 2 1)	1,10	3,74	$44,57 \pm 0,01$	0,51	4,11
(4 0 0)	1,03	4,0	$48,58 \pm 0,01$	0,44	4,11
(3 2 2)	1,00	4,12	$50,55 \pm 0,01$	0,40	4,12
(3 3 0)	0,97	4,24	$52,60 \pm 0,01$	0,37	4,12
(3 3 1)	0,94	4,36	$54,78 \pm 0,01$	0,33	4,11
(4 2 0)	0,92	4,47	$56,87 \pm 0,01$	0,30	4,12
(4 2 1)	0,90	4,58	$58,97 \pm 0,01$	0,27	4,12
(3 3 2)	0,88	4,69	$61,42 \pm 0,01$	0,23	4,12
(4 2 2)	0,84	4,90	$66,35 \pm 0,01$	0,16	4,12
(4 3 0)	0,82	5,0	$69,35 \pm 0,01$	0,12	4,12
(4 3 1)	0,81	5,10	$72,20 \pm 0,01$	0,09	4,13
(3 3 3)	0,81	5,20	$72,79 \pm 0,01$	0,09	4,19
(4 3 2)	0,79	5,39	$76,12 \pm 0,01$	0,06	4,28

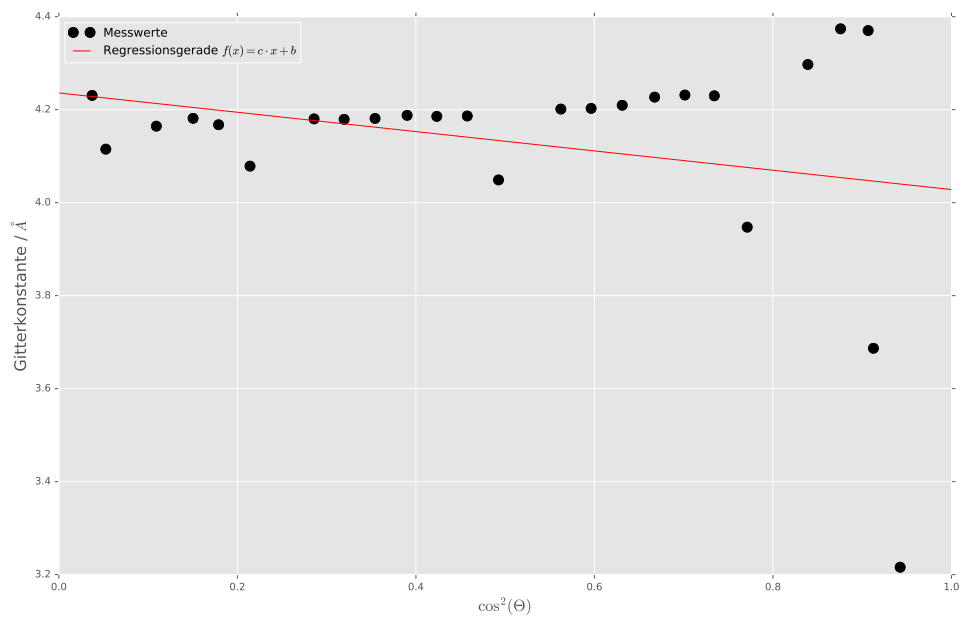
**Tabelle 46:** Werte des Salzes 1 der Zinkblende-Struktur, welche für die lineare Regression genutzt werden, wenn von links nach rechts gemessen wird.

hkl	$d_i / \text{\AA}$	$\sqrt{m}$	$\Theta / ^\circ$	$\cos^2(\Theta)$	$a / \text{\AA}$
(1 0 0)	4,00	1,0	$11,12 \pm 0,01$	0,96	4,00
(1 1 0)	3,36	1,41	$13,25 \pm 0,01$	0,95	4,76
(1 1 1)	2,33	1,73	$19,29 \pm 0,01$	0,89	4,04
(2 0 0)	1,99	2,0	$22,81 \pm 0,01$	0,85	3,98
(2 1 0)	1,82	2,24	$25,02 \pm 0,01$	0,82	4,08
(2 1 1)	1,67	2,45	$27,56 \pm 0,01$	0,79	4,08
(2 2 0)	1,44	2,83	$32,32 \pm 0,01$	0,71	4,08
(2 2 1)	1,36	3,0	$34,42 \pm 0,01$	0,68	4,09
(3 1 0)	1,30	3,16	$36,52 \pm 0,01$	0,65	4,10
(3 1 1)	1,23	3,32	$38,65 \pm 0,01$	0,61	4,09
(2 2 2)	1,18	3,46	$40,59 \pm 0,01$	0,58	4,10
(3 2 0)	1,14	3,61	$42,56 \pm 0,01$	0,54	4,11
(3 2 1)	1,10	3,74	$44,57 \pm 0,01$	0,51	4,11
(4 0 0)	1,03	4,0	$48,58 \pm 0,01$	0,44	4,11
(3 2 2)	1,00	4,12	$50,55 \pm 0,01$	0,40	4,12
(3 3 0)	0,97	4,24	$52,60 \pm 0,01$	0,37	4,12
(3 3 1)	0,94	4,36	$54,78 \pm 0,01$	0,33	4,11
(4 2 0)	0,92	4,47	$56,87 \pm 0,01$	0,30	4,12
(4 2 1)	0,90	4,58	$58,97 \pm 0,01$	0,27	4,12
(3 3 2)	0,88	4,69	$61,42 \pm 0,01$	0,23	4,12
(4 2 2)	0,84	4,90	$66,35 \pm 0,01$	0,16	4,12
(4 3 0)	0,82	5,0	$69,35 \pm 0,01$	0,12	4,12
(4 3 1)	0,81	5,10	$72,20 \pm 0,01$	0,09	4,13
(3 3 3)	0,81	5,20	$72,79 \pm 0,01$	0,09	4,19
(4 3 2)	0,79	5,39	$76,12 \pm 0,01$	0,06	4,28

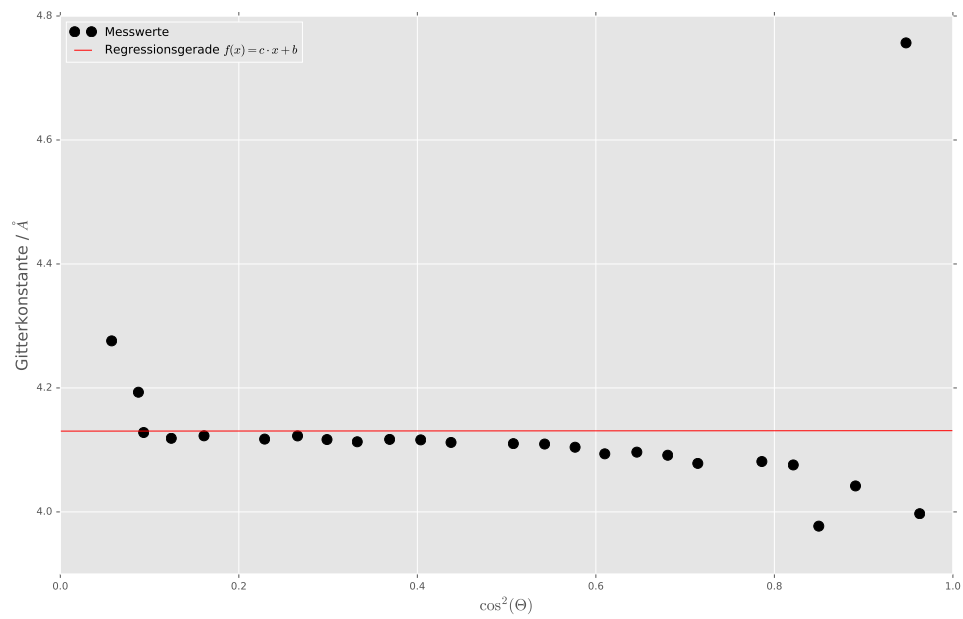




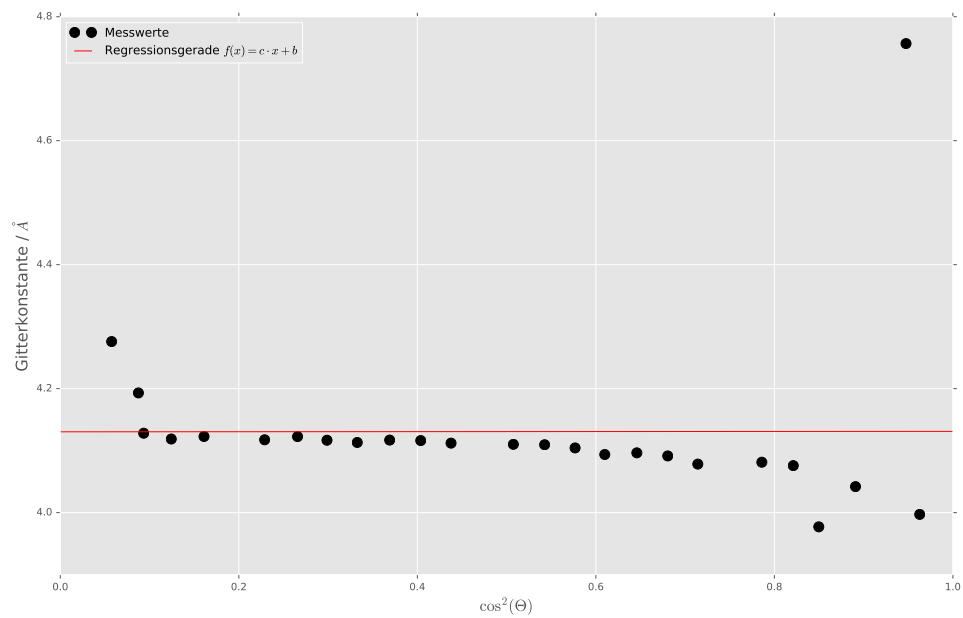
**Abbildung 19:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  des Salzes 1 mit einer Fluorid-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von rechts nach links gemessen wird.



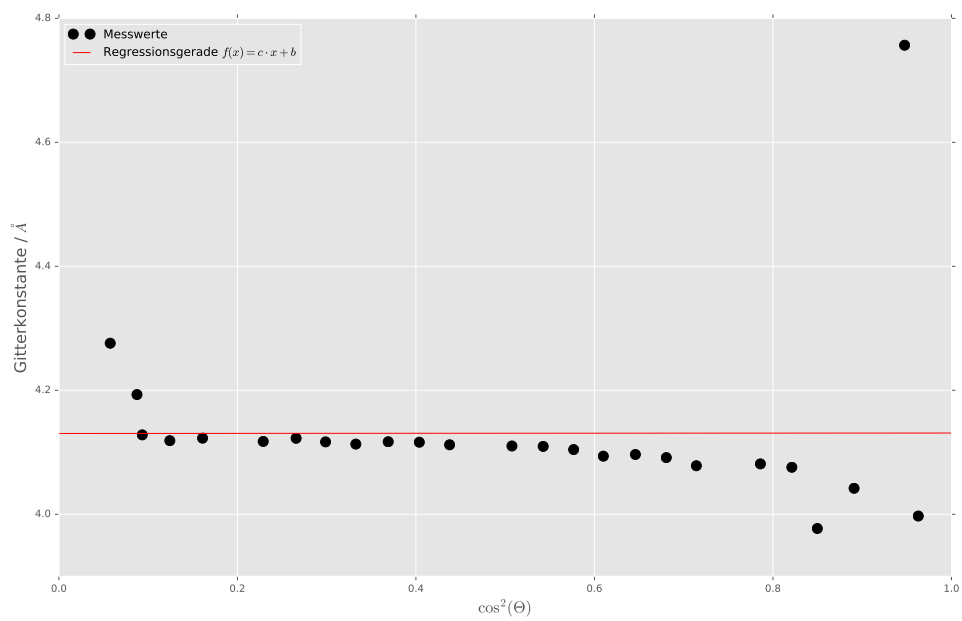
**Abbildung 20:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  des Salzes 1 mit einer Zinkblende-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von rechts nach links gemessen wird.



**Abbildung 21:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  des Salzes 1 mit einer Steinsalz-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von links nach rechts gemessen wird.



**Abbildung 22:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  des Salzes 1 mit einer Fluorid-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von links nach rechts gemessen wird.



**Abbildung 23:** Errechnete Werte der Gitterkonstanten  $a$  des Salzes 1 mit einer Zinkblende-Struktur und die dazugehörige Regressionsgerade, wenn von links nach rechts gemessen wird.

**Tabelle 47:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Steinsalz-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Steinsalz	Kalium/Jod	Kupfer/Chlor	Kupfer/Fluor	Kupfer/Jod
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(2 2 1)	(2 2 1)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(3 1 1)	(3 1 1)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(2 2 2)	(2 2 2)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(3 2 1)	(3 2 1)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 2 2)	(3 2 2)	(4 1 1)	(4 1 1)	(4 1 1)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(3 3 1)	(3 3 1)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(4 2 1)	(4 2 1)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(4 3 1)	(4 3 1)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(4 3 2)	(4 3 2)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(5 2 1)	(5 2 1)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(4 3 3)	(4 3 3)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)
(5 3 1)	(5 3 1)			

**Tabelle 48:** Kombinationen der Werte  $(hkl)$  für nicht verschwindende Reflexe der Steinsalz-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Steinsalz	Jod/Calcium	Jod/Kalium	Jod/Kupfer	Kalium/Chlor	Kalium/Fluor
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(3 1 0)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(2 2 2)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 2 0)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(4 0 0)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 2)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(4 1 1)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 1)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(4 2 0)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(3 3 2)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 3 0)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(3 3 3)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 2)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(5 2 1)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(4 4 0)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 3 3)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(5 3 1)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)		(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 49:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Steinsalz-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Steinsalz	Fluor/Caesium	Fluor/Calcium	Fluor/Kalium	Fluor/Kupfer	Jod/Caesium
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 1 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 1)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 1 1)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 2 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 2 0)	(3 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 2)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(3 1 1)	(3 2 0)
(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 0)	(2 2 2)	(3 2 1)
(3 1 1)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 1 1)	(3 2 0)	(4 0 0)
(2 2 2)	(3 2 0)	(3 2 0)	(2 2 2)	(3 2 1)	(3 2 2)
(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 0)	(4 0 0)	(3 3 0)
(3 2 1)	(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 1)	(3 2 2)	(3 3 1)
(4 0 0)	(3 2 2)	(3 2 2)	(4 0 0)	(4 1 1)	(4 2 0)
(3 2 2)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 2 2)	(3 3 1)	(4 2 1)
(3 3 0)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 0)	(4 2 0)	(3 3 2)
(3 3 1)	(4 2 0)	(4 2 0)	(3 3 1)	(4 2 1)	(4 2 2)
(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 0)	(3 3 2)	(4 3 0)
(4 2 1)	(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 1)	(4 2 2)	(4 3 1)
(3 3 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(3 3 2)	(4 3 0)	(3 3 3)
(4 2 2)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 2 2)	(4 3 1)	(4 3 2)
(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 0)	(3 3 3)	(5 2 1)
(4 3 1)	(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 1)	(4 3 2)	(4 4 0)
(3 3 3)	(4 3 2)	(4 3 2)	(3 3 3)	(5 2 1)	(4 4 1)
(4 3 2)	(5 2 1)	(5 2 1)	(4 3 2)	(4 4 0)	(4 3 3)
(5 2 1)	(4 4 0)	(4 4 0)	(5 2 1)	(4 4 1)	(5 3 1)
(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 0)	(4 3 3)	(4 4 2)
(4 4 1)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 4 1)	(5 3 1)	(6 1 0)
(4 3 3)	(5 3 1)	(5 3 1)	(4 3 3)		(5 3 2)
(5 3 1)			(5 3 1)		(6 2 0)
					(4 4 3)
					(5 4 1)
					(5 3 3)
					(6 2 2)
					(5 4 2)
					(6 3 1)
					(4 4 4)
					(6 3 2)
					(5 4 3)
					(5 5 1)
					(6 4 0)
					(6 4 1)
					(5 5 2)
					(6 4 2)
					(5 4 4)
					(7 3 0)
					(5 5 3)
					(6 4 3)
					(6 5 1)
					(8 0 0)
					(6 5 2)
					(5 5 4)
					(7 3 3)
					(6 4 4)

**Tabelle 50:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Steinsalz-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Steinsalz	Calcium/Jod	Chlor/Caesium	Chlor/Calcium	Chlor/Kalium	Chlor/Kupfer
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 1 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)	(1 1 1)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)	(2 0 0)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 1)	(2 0 0)	(2 1 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 2 0)	(2 1 0)	(2 1 1)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(3 0 0)	(2 1 1)	(2 2 0)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(3 1 1)	(2 2 0)	(2 2 1)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 2)	(2 2 1)	(3 1 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 1)	(3 2 1)	(3 1 0)	(2 2 2)
(3 1 1)	(3 1 1)	(2 2 2)	(4 0 0)	(3 1 1)	(3 2 0)
(2 2 2)	(2 2 2)	(3 2 0)	(3 2 2)	(2 2 2)	(3 2 1)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 1)	(3 3 0)	(3 2 0)	(4 0 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(4 0 0)	(3 3 1)	(3 2 1)	(3 2 2)
(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 2)	(4 2 0)	(4 0 0)	(4 1 1)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 3 0)	(4 2 1)	(3 2 2)	(3 3 1)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 1)	(3 3 2)	(3 3 0)	(4 2 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(4 2 0)	(4 2 2)	(3 3 1)	(4 2 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 1)	(4 3 0)	(4 2 0)	(3 3 2)
(4 2 1)	(4 2 1)	(3 3 2)	(4 3 1)	(4 2 1)	(4 2 2)
(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 2)	(3 3 3)	(3 3 2)	(4 3 0)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 3 0)	(4 3 2)	(4 2 2)	(4 3 1)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 1)	(5 2 1)	(4 3 0)	(3 3 3)
(4 3 1)	(4 3 1)	(3 3 3)	(4 4 0)	(4 3 1)	(4 3 2)
(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 2)	(4 4 1)	(3 3 3)	(5 2 1)
(4 3 2)	(4 3 2)	(5 2 1)	(4 3 3)	(4 3 2)	(4 4 0)
(5 2 1)	(5 2 1)	(4 4 0)	(5 3 1)	(5 2 1)	(4 4 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 2)	(4 4 0)	(4 3 3)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 3 3)	(6 1 0)	(4 4 1)	(5 3 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(5 3 1)	(5 3 2)	(4 3 3)	
(5 3 1)	(5 3 1)		(6 2 0)	(5 3 1)	
			(4 4 3)		
			(5 4 1)		
			(5 3 3)		
			(6 2 2)		
			(5 4 2)		
			(6 3 1)		
			(4 4 4)		
			(6 3 2)		
			(5 4 3)		
			(5 5 1)		
			(6 4 0)		
			(6 4 1)		
			(5 5 2)		
			(6 4 2)		
			(5 4 4)		
			(7 3 0)		
			(5 5 3)		
			(6 4 3)		
			(6 5 1)		
			(8 0 0)		
			(6 5 2)		
			(5 5 4)		
			(7 3 3)		
			(6 4 4)		

**Tabelle 51:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Steinsalz-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Steinsalz	Caesium/Chlor	Caesium/Fluor	Caesium/Jod	Calcium/Chlor	Calcium/Fluor
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(2 0 0)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 2 1)	(3 2 1)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(4 3 0)	(4 3 0)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(5 2 1)	(5 2 1)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 4 2)	(4 4 2)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(6 1 0)	(6 1 0)	(5 3 1)
			(5 3 2)	(5 3 2)	
			(6 2 0)	(6 2 0)	
			(4 4 3)	(4 4 3)	
			(5 4 1)	(5 4 1)	
			(5 3 3)	(5 3 3)	
			(6 2 2)	(6 2 2)	
			(5 4 2)	(5 4 2)	
			(6 3 1)	(6 3 1)	
			(4 4 4)	(4 4 4)	
			(6 3 2)	(6 3 2)	
			(5 4 3)	(5 4 3)	
			(5 5 1)	(5 5 1)	
			(6 4 0)	(6 4 0)	
			(6 4 1)	(6 4 1)	
			(5 5 2)	(5 5 2)	
			(6 4 2)	(6 4 2)	
			(5 4 4)	(5 4 4)	
			(7 3 0)	(7 3 0)	
			(5 5 3)	(5 5 3)	
			(6 4 3)	(6 4 3)	
			(6 5 1)	(6 5 1)	
			(8 0 0)	(8 0 0)	
			(6 5 2)	(6 5 2)	
			(5 5 4)	(5 5 4)	



**Tabelle 52:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Zinkblende-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Zinkblende	Kalium/Jod	Kupfer/Chlor	Kupfer/Fluor	Kupfer/Jod
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(3 1 0)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(3 2 0)	(3 2 0)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(3 2 2)	(3 2 2)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 1)	(3 3 1)	(4 1 1)	(3 3 0)
(3 3 1)	(4 2 0)	(4 2 0)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(4 3 2)	(4 3 2)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(5 2 1)	(5 2 1)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(4 4 0)	(4 4 0)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(5 3 1)	(5 3 1)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)			(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 53:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Zinkblende-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Zinkblende	Jod/Calcium	Jod/Kalium	Jod/Kupfer	Kalium/Chlor	Kalium/Fluor
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(3 1 0)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(2 2 2)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 2 0)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(4 0 0)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 2)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 3 0)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 1)	(4 1 1)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(4 2 0)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(3 3 2)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 3 0)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(3 3 3)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 2)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(5 2 1)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(4 4 0)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 3 3)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(5 3 1)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)		(5 3 1)

**Tabelle 54:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Zinkblende-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Zinkblende	Fluor/Caesium	Fluor/Calcium	Fluor/Kalium	Fluor/Kupfer	Jod/Caesium
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 1 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(3 1 0)	(2 2 1)	(3 1 0)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 0)
(3 1 1)	(2 2 2)	(3 1 1)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 1 1)
(2 2 2)	(3 2 0)	(2 2 2)	(3 2 0)	(3 2 0)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 0)
(3 2 1)	(4 0 0)	(3 2 1)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(4 0 0)	(3 2 2)	(4 0 0)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 2 2)	(4 1 1)	(3 2 2)	(4 1 1)	(4 1 1)	(3 3 0)
(3 3 0)	(3 3 1)	(4 1 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(3 3 1)	(4 2 0)	(3 3 1)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(4 2 1)	(3 3 2)	(4 2 1)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(3 3 2)	(4 2 2)	(3 3 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 2 2)	(4 3 0)	(4 2 2)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(4 3 1)	(3 3 3)	(4 3 1)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(3 3 3)	(4 3 2)	(3 3 3)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(4 3 2)	(5 2 1)	(4 3 2)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(5 2 1)	(4 4 0)	(5 2 1)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 4 1)	(4 3 3)	(4 4 1)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(4 3 3)	(5 3 1)	(4 3 3)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)
(5 3 1)		(5 3 1)			

**Tabelle 55:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Zinkblende-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Zinkblende	Calcium/Jod	Chlor/Caesium	Chlor/Calcium	Chlor/Kalium	Chlor/Kupfer
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(2 2 1)	(2 2 1)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(2 2 2)
(3 1 1)	(3 1 1)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 2 0)
(2 2 2)	(2 2 2)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 1)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(4 0 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 2)
(4 0 0)	(4 0 0)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 3 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(4 1 1)	(3 3 0)	(4 1 1)	(3 3 1)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(4 2 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(3 3 2)
(4 2 1)	(4 2 1)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 2)
(3 3 2)	(3 3 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 3 0)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 1)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(3 3 3)
(4 3 1)	(4 3 1)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 2)
(3 3 3)	(3 3 3)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(5 2 1)
(4 3 2)	(4 3 2)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(4 4 0)
(5 2 1)	(5 2 1)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 3 3)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(5 3 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	
(5 3 1)	(5 3 1)				

**Tabelle 56:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Zinkblende-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Zinkblende	Caesium/Chlor	Caesium/Fluor	Caesium/Jod	Calcium/Chlor	Calcium/Fluor
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 1)	(1 1 0)
(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)	(1 1 1)	(2 0 0)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 1 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 1 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 1)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 2 0)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 1)	(2 2 0)
(2 2 1)	(3 1 0)	(2 2 1)	(2 2 1)	(3 1 0)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 0)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 0)
(3 1 1)	(2 2 2)	(3 1 1)	(2 2 2)	(2 2 2)	(3 1 1)
(2 2 2)	(3 2 0)	(2 2 2)	(3 2 0)	(3 2 0)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 1)	(3 2 0)	(4 0 0)	(3 2 1)	(3 2 0)
(3 2 1)	(4 0 0)	(3 2 1)	(3 2 2)	(4 0 0)	(3 2 1)
(4 0 0)	(3 2 2)	(4 0 0)	(3 3 0)	(3 2 2)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 3 0)	(3 2 2)	(3 3 1)	(3 3 0)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 1)	(4 1 1)	(4 2 0)	(3 3 1)	(4 1 1)
(3 3 1)	(4 2 0)	(3 3 1)	(4 2 1)	(4 2 0)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 1)	(4 2 0)	(3 3 2)	(4 2 1)	(4 2 0)
(4 2 1)	(3 3 2)	(4 2 1)	(4 2 2)	(3 3 2)	(4 2 1)
(3 3 2)	(4 2 2)	(3 3 2)	(4 3 0)	(4 2 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 3 0)	(4 2 2)	(4 3 1)	(4 3 0)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 1)	(4 3 0)	(3 3 3)	(4 3 1)	(4 3 0)
(4 3 1)	(3 3 3)	(4 3 1)	(4 3 2)	(3 3 3)	(4 3 1)
(3 3 3)	(4 3 2)	(3 3 3)	(5 2 1)	(4 3 2)	(3 3 3)
(4 3 2)	(5 2 1)	(4 3 2)	(4 4 0)	(5 2 1)	(4 3 2)
(5 2 1)	(4 4 0)	(5 2 1)	(4 4 1)	(4 4 0)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 1)	(4 4 0)	(4 3 3)	(4 4 1)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 3 3)	(4 4 1)	(5 3 1)	(4 3 3)	(4 4 1)
(4 3 3)	(5 3 1)	(4 3 3)		(5 3 1)	(4 3 3)
(5 3 1)		(5 3 1)			(5 3 1)

**Tabelle 57:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Fluorid-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Fluorid	Kalium/Jod	Kupfer/Chlor	Kupfer/Fluor	Kupfer/Jod
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 58:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Fluorid-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Fluorid	Jod/Calcium	Jod/Kalium	Jod/Kupfer	Kalium/Chlor	Kalium/Fluor
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 59:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Fluorid-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Fluorid	Fluor/Caesium	Fluor/Calcium	Fluor/Kalium	Fluor/Kupfer	Jod/Caesium
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)



**Tabelle 60:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Fluorid-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Fluorid	Calcium/Jod	Chlor/Caesium	Chlor/Calcium	Chlor/Kalium	Chlor/Kupfer
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 61:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Fluorid-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Fluorid	Caesium/Chlor	Caesium/Fluor	Caesium/Jod	Calcium/Chlor	Calcium/Fluor
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 62:** Kombinationen der Werte  $(hkl)$  für nicht verschwindende Reflexe der Caesium-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Caesiumstruktur	Kalium/Jod	Kupfer/Chlor	Kupfer/Fluor	Kupfer/Jod
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 63:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Caesium-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Caesiumstruktur	Jod/Calcium	Jod/Kalium	Jod/Kupfer	Kalium/Chlor	Kalium/Fluor
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 64:** Kombinationen der Werte  $(hkl)$  für nicht verschwindende Reflexe der Caesium-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Caesiumstruktur	Fluor/Caesium	Fluor/Calcium	Fluor/Kalium	Fluor/Kupfer	Jod/Caesium
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 65:** Kombinationen der Werte ( $hkl$ ) für nicht verschwindende Reflexe der Caesium-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Caesiumstruktur	Calcium/Jod	Chlor/Caesium	Chlor/Calcium	Chlor/Kalium	Chlor/Kupfer
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)

**Tabelle 66:** Kombinationen der Werte  $(hkl)$  für nicht verschwindende Reflexe der Caesium-Struktur bei Betrachtung verschiedener Formfaktoren.

Caesiumstruktur	Caesium/Chlor	Caesium/Fluor	Caesium/Jod	Calcium/Chlor	Calcium/Fluor
(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)	(1 0 0)
(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)	(1 1 0)
(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)	(1 1 1)
(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)	(2 0 0)
(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)	(2 1 0)
(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)	(2 1 1)
(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)	(2 2 0)
(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)	(2 2 1)
(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)	(3 1 0)
(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)	(3 1 1)
(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)	(2 2 2)
(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)	(3 2 0)
(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)	(3 2 1)
(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)	(4 0 0)
(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)	(3 2 2)
(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)	(3 3 0)
(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)	(3 3 1)
(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)	(4 2 0)
(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)	(4 2 1)
(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)	(3 3 2)
(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)	(4 2 2)
(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)	(4 3 0)
(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)	(4 3 1)
(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)	(3 3 3)
(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)	(4 3 2)
(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)	(5 2 1)
(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)	(4 4 0)
(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)	(4 4 1)
(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)	(4 3 3)
(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)	(5 3 1)