

Zitierte Literatur

- (1) L. Herbst, Bestimmung d. Lageänderung v. Molekülen durch Röntgendaten, Diplomarbeit, Inst. Prof. Kalus Uni Bayreuth 1982
- (2) R. Zallen. The Physics of Amorphous Solids, New York 1983, John Wiley & Sons
- (3) Betriebsanleitung: **Precision** Monochromator 611, Fa. Huber Diffraktometertechnik. Rimsting
- (4) Ashcroft Mermin, Solid State Physics. 1981 Tokyo, Holt-Saunders International, LDT
- (5) H. Heym, Herstellung u. Charakterisierung höchstreiner Mischkristalle für die Untersuchung von Energie- und Ladungstransport, Phys. Inst. Teil 3, Uni Stuttgart Prof. Karl 1980
- (6) L. & M. Amaoros Molecular Crystals: Their Transform? and Diffuse Stattering, 1968 New York, John Wiley & Sons
- (7) P. H. Dederichs. Diffuse Stattering from Defect Clusters near Bragg Reflections, Aug. 1971, Phys. Rev. B Vol. 4. No. 4 P. 1041
- (8) W. Sehmatz, Vacancies and Interstitials in Metals, North-Holland. Amsterdam 1969, P. 589
- (9) K. Kobashi, R. D. Etters, Theory of diffuse X-ray scattering due to orientational correlation in plastic molecular crystals. **Molecular** Physics, 1982, Vol. 46. No. 5. 1077-1083

weitere Literatur

- H.C. Alt, Röntgenpulverdiffraction an Naphthalin unter hydrostat. Druck bis 0.5 Gpa, Inst. Prof. Kalus Uni. Bayreuth, 1981
- A. Meresse, N.B. Chanh. J.R. Housty, H.&Y. Haget, Polymorphism of Beta-R-Substituted Naphthalene Derivates, J. Phys. Chem. Solids Vol. 47. No, 11. pp. 1019-1036, 1986
- Y. Takaki, K. Nakata, T. Taniguchi, K. Sakurai, Disordered crystal Structure of the gamma Form and Reversible Solid-Phase Transformations of P-Chlorobenzaraid, Acta Cryst. (1978). B34, 2579-2586
- M. A. Krivoglaz, Theory of X-Ray and Thermal-Neutron Scattering by Real Crystals. New York 1969, Plenum Press
- B. E. Warren, X-Ray Diffraction. Reading 1969. Addison-Wesley Publishing Company
- c. B. Walker, X-Ray Study of Lattice Vibrations in Aluminium, Physikal Review Vol.103 No 3, Aug. 1956
- Johann Peisl Lattice Distortion, Elastic Interaction, and Phase Transitions of Hydrogen in Metals, Festkörperprobleme XXIV (1984)
- N.H. Andersen, K.N. Clausen, J.K. Kjems, J. Schoonman, A study of the disorder in heavily doped $Ba(1-x)La(x)F(2+x)$ by neutron scattering, ionic conductivity and specific heat measurements J. Phys. C: solid State Phys. 19 (1986) 2377-2389
- G. H. W. Milburn, X-ray Crystallography, An Introduction to the Theory and Practice of Single-crystal Structure Analyse, London 1973, Butterworth & Co Ltd
- M.F.C. Ladd, R.A. Palmer, Structure Determination by X-Ray Crystallography, New York 1977, Plenum Press
- B. K. Vainshtein, Modern Crystallography I, Symmetry of Crystals Methods of Structural Crystallography, Heidelberg - New York 1981, Springer Verlag

- R. Becker, F. Sauter. Theorie der Elektrizität, Stuttgart 1973, B. G. Teubner
- B. D. Cullity, Elements of X-Ray Diffraction, Reading 1967, Addison-Wesley Publishing Company
- H. Jagodzinski, Allgemeine Gesichtspunkte **für** die Deutung diffuser Interferenzen von fehlgeordneten Kristallen, Advances in Structure Research by Diffraction Methods Vol. 1, Braunschweig Vieweg & Sohn, New York John Wiley & Sons
- P. H. Dederichs, The theory of diffuse x-ray scattering and its applications to the study of Point defects and their clusters, J. Phys. F: Metal Phys., Vol. 3. Feb, 1973
- J. Epstein, T.R. Welberry, R.D.G. Jones, Analysis of the Diffuse x-ray Scattering from Substitutionally Disordered **Molecular Crystals:** Monoclinic 9-Bromo-10-methylanthracene, Acta Cryst. (1982). A 38. 611-618
- G. Bauer, E. Seitz, w. Just, Elastic Diffuse Scattering of Neutrons as a Tool for Investigation of Non-magnetic Point Defects, J. Appl. Cryst. (1975). 8, 162

Zusammenfassung

ES wurde die diffuse Röntgenstreuung von 2,3-Dimethylnaphthalin in allen drei Hauptstrebeneben vermessend. Überblicksmessungen lassen zwei eindeutig zu unterscheidende Arten der diffusen Streuung erkennen. Zum einen handelt es sich um diffuse Streuung, die sich über weite Teile des reziproken Raums erstreckt. Sie hat ihren Ursprung im näherungsweise statistischen Einbau der Moleküle im Sinne von up/down. Durch Vergleich der Meßdaten mit umfangreichen gerechneten Streubildern wurde die mittlere statische Verkipfung der Moleküle ermittelt.

Zum anderen handelt es sich um diffuse Bereiche, die bei den Bragg-Peaks konzentriert sind. Durch eine Analyse dieser Bereiche war es möglich erste Aussagen über die Reichweite von lokalen Gitterverzerrungen zu erhalten. Die Ursache dieser lokalen Gitterverzerrungen ist der statistische Einbau der Moleküle. Messungen mit Röntgenstrahlen lassen keine Aussage darüber zu, ob die Strahlen elastisch oder inelastisch gebrochen werden. Elastische Streuung hängt mit statischen Auslenkungen, inelastische mit dynamischen Auslenkungen (Phononen), zusammen. Durch Vergleich mit diffus-elastischen Neutronenstreudaten, wie sie ein anderer Mitarbeiter des Instituts gewonnen hat, konnte die statische Natur der gemessenen Gitterverzerrungen und damit die wesentlichen Modellannahmen bestätigt werden.

Danksagung

An dieser Stelle danke ich Herrn Prof. Dr. J. Kalus für das interessante Thema und die sehr gute Betreuung meiner Diplomarbeit. Ein ganz besonderer Dank ergeht auch für die Möglichkeit, an Neutronenmessungen am Versuchsreaktor in Grenoble teilnehmen zu können.

Herrn Wörlen möchte ich ganz herzlich für die gute Zusammenarbeit danken. und dafür, daß er sich stets Zeit genommen hat mich bei meinen Fragen zu unterstützen.

Für die Einweisung in die Apparatur und für die Hilfe bei den Problemen, die zu Beginn der Arbeit aufgetreten sind, sei Herrn Ludwig Herbst sehr herzlich gedankt.

Mein weiterer Dank gilt Herrn Hurych. der stets mit viel Humor und Sachverstand bei der Behebung von auftretenden Problemen zur Seite stand.

Auch allen anderen Institutskollegen, die mich bei der Durchführung meiner Diplomarbeit unterstützt haben, sei an dieser Stelle sehr herzlich gedankt.

Erklärung

Hiermit erkläre ich eidestattlich, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Diffuse X-ray scattering on molecular crystals

Richard Schubert, diploma work, 84 pages, 51 figures, University of Bayreuth / Germany, Oct. 1987

Abstract

The diffuse X-ray scattering of 2,3-dimethyl-naphtalene has been measured in all three scattering planes. Overview measurements show two distinct kinds of diffuse scattering. First, there is a diffuse scattering which is observed over wide areas of the reciprocal lattice. It is caused by the practically statistical orientation of the molecules in the lattice (up/down). Comparing the measurement results with many calculated scattering diagrams an average statistical tilt of the molecules could be derived. The second kind of diffuse scattering is concentrated near the Bragg peaks. Analyzing these areas, it was possible to derive first values of the scale length of local lattice distortions. These local lattice distortions are caused by the statistical orientation of the molecules. X-ray measurements do not allow to determine, whether the scattering is elastic or inelastic. Elastic scattering is linked to static distortions, inelastic scattering to dynamic distortions (phonons). Comparing the results with diffuse-elastic neutron scattering measurements, which have been performed by another collaborator of the institute, the static nature of the lattice distortions could be verified. Thus, an essential assumption of the used model could be confirmed.

whole text, in German:

This PDF-file has been created by OCR. If you have any doubts about the correct conversions of indices etc. you might want to consult the original scanned paper also provided online in the publication list indicated below.

R. Schubert has started up his own business in Berlin in January 2002 and can currently be contacted at:

fon: +49 30 / 6120 1336

mobile: +49 172 / 3235121

www.schubertconsulting.de

rs@schubertconsulting.de

Further material relating to non-contact sensing and microwave measurement can be found in the publication list (papers: 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 18):

http://www.stereoscopicsscanning.de/Portrait/portrait_links.html

Some of the papers are available online others are available upon request.