

**FORSCHUNGSBERICHTE
DES WIRTSCHAFTS- UND VERKEHRSMINISTERIUMS
NORDRHEIN-WESTFALEN**

Herausgegeben von Staatssekretär Prof. Leo Brandt

Nr. 173

**Prof. Dr. phil. nat. R. Hosemann
Dipl.-Phys. G. Schoknecht
vorgelegt von Prof. Dr. phil. nat. W. Kast**

**Lichtoptische Herstellung und Diskussion
der Faltungsquadrate parakristalliner Gitter**

Als Manuskript gedruckt



WESTDEUTSCHER VERLAG / KÖLN UND OPLADEN

1956

ISBN 978-3-663-03709-5

ISBN 978-3-663-04898-5 (eBook)

DOI 10.1007/978-3-663-04898-5

G l i e d e r u n g

Vorwort	S. 5
I. Einleitung und Problemstellung	S. 7
II. Mathematische Grundlagen	S. 9
1. Faltungsoperationen	S. 9
2. Beispiele	S. 10
3. Mehrfache Faltungen (Faltungspotenz)	S. 13
4. Faltungswurzel	S. 14
5. Punktfunktionen	S. 14
III. Optische Durchführung von Faltungsoperationen	S. 16
1. Über das Auftreten des Faltungsproduktes bei optischen Einrichtungen	S. 16
2. Die Faltungsapparatur	S. 21
a) Anordnung	S. 21
b) Die Photozelle	S. 22
c) Genauigkeit der Apparatur	S. 27
d) Modellherstellung	S. 30
IV. Beschreibung von Gitterwerken	S. 33
1. Ideale Kristalle	S. 33
2. Gitterstörungen 1. Art	S. 35
3. Gitterstörungen 2. Art	S. 38
4. Der Parakristall	S. 47
V. Das Faltungsquadrat parakristalliner Gitter	S. 48
1. Berechnung des Faltungsquadrates	S. 48
a) Idealer Kristall	S. 48
b) Parakristall	S. 49
2. Modellversuche	S. 51
VI. Quantitative Untersuchung der parakristallinen Gesamt- statistik an einem Modell	S. 70
VII. Weitere Möglichkeiten der lichtoptischen Untersuchungs- methode. Beugungsbilder von Modellstrukturen	S. 86
VIII. Zusammenfassung	S. 90
IX. Literaturverzeichnis	S. 93

Vorwort

Die Anwendung der Methode der Röntgeninterferenzen auf Stoffe, deren Kristallinität mit bloßen Augen nicht sichtbar ist, brachte in vielen Fällen überraschend eine kristalline Struktur zu Tage. Zu diesen Stoffen gehören auch die natürlichen Faserstoffe auf der Basis von Cellulose und von Eiweiß. Dabei fällt auf, daß diese, wie auch alle unterdessen bekannt gewordenen synthetischen Faserstoffe, verglichen mit den Röntgendiagrammen anorganischer, wie auch niedermolekularer organischer Stoffe, nur eine sehr kleine Zahl von Interferenzen zeigen, die sich auf einen Winkelbereich von nur etwa 45° um den primären Strahl beschränken. Das Auftreten größerer Abstände, wie sie den kleinen Winkeln entsprechen, ist bei organischen Stoffen nicht verwunderlich, weil die Moleküle hier untereinander größere Abstände haben als die Atome im Molekül oder im anorganischen Ion oder Metallgitter. Verwunderlich ist aber, daß die atomaren Abstände innerhalb der Moleküle, die von derselben Größenordnung sind wie in den anorganischen Gittern, hier weitgehend fehlen. Das hat seine Ursache darin, daß die Moleküle nicht streng periodisch gelagert sind, sondern merkliche Abweichungen von der regelmäßigen Lage zeigen.

Prof. HOSEMANN war es, der bei den makromolekularen Stoffen darauf hinwies, daß die Bestimmung ihres Molekülbaus mit den Methoden der röntgenographischen Kristallstrukturbestimmung nicht nur deswegen ungenau wäre, weil zu wenig Interferenzen existieren, um die Richtigkeit der Annahme einer Struktur aus ihrer Lage und Intensität mit Strenge zu beweisen. Vielmehr machten die Gitterstörungen durch die nicht streng regelmäßige Lage der Moleküle die Anwendung der üblichen Methoden überhaupt unmöglich, weil deren Gültigkeit sich auf Stoffe beschränkt, die in Form gut ausgebildeter Kristalle vorliegen. Dazu handelt es sich hier um eine besondere Art von Gitterstörungen, bei denen nicht jedes Molekül unabhängig gewisse Schwankungen seiner Lage zeigt, sondern um Störungen, die von einem beliebig herausgegriffenen Zentrum her fortschreiten und in größerer Entfernung die Ordnung völlig aufheben. Solche Vorgänge sind von der Struktur der Flüssigkeit her bekannt und haben dort zu dem Begriff der "Nahordnung" geführt, eine Ordnung also, die mit der Entfernung schnell abklingt und so im Gegensatz zu der "Fernordnung" steht, wie sie ein gut ausgebildeter Kristall aufweist.

Das Verhalten solcher Kristalle mit flüssigkeitsstatistischen Störungen ist so charakteristisch, daß HOSEMANN sie als "parakristallin" bezeichnet und eine allgemeine Interferenztheorie, die "Theorie des idealen Parakristalls", ausgearbeitet hat, die aus dem Dilemma herausführt, daß man bei den hochmolekularen Substanzen je nach der Anwendung der Kristalltheorie oder der Flüssigkeitstheorie auf ihre Röntgendiagramme ganz verschiedene Aussagen erhielt. Diese Theorie gestattet, die Struktur solcher parakristallinen Stoffe zu bestimmen und Angaben über die Schwankungen der Abstände und der Winkel in solchen Parakristallen zu machen. Diese Schwankungen stellen ein charakteristisches Kennzeichen der hochmolekularen Kristallgitter dar und bestimmen die Eigenschaften dieser Stoffe entscheidend mit. Er bediente sich dabei einer eleganten mathematischen Formulierung durch Anwendung der Faltungsoperation. Da diese trotz ihrer großen Bedeutung für alle Teile der Physik noch nicht die nötige Verbreitung gefunden hat, schien es wünschenswert, gerade bei der Bedeutung der parakristallinen Struktur für die hochmolekularen Stoffe auf ihre Grundlage einzugehen. Dem unterzieht sich die vorliegende Arbeit auf einem Wege, der durch die Verwendung von Modellen und ihrer optischen Abbildungen besonders anschaulich ist. Dabei war es klar, daß diese Untersuchungen unter der Leitung von Prof. HOSEMANN selbst durchgeführt werden mußten. Der Unterzeichnete dankt dem Wirtschaftsministerium deshalb dafür, daß es durch Zuverfügungstellung eines Betrages von DM 2.500,- die Durchführung der Arbeit unter seiner Leitung im Fritz Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin-Dahlem ermöglichte. Sie wurde von dem Kandidaten der Physik Günter Schoknecht durchgeführt und von der Freien Universität Berlin als Diplom-Arbeit angenommen.

W. KAST