

## Anhang II

### Ergänzende Datentabellen

## Anhang II - Ergänzende Datentabellen

Tabelle A.II.1	Verwendete Massenabsorptionskoeffizienten und Informationstiefen für relevante Übergänge.
Tabelle A.II.2	Vergleich von Syntheseparametern, Analysetechniken und strukturellen Ergebnissen für kupferarme Phasen in den Stoffsystemen Cu-Ga-Se und Cu-In-Se.
Tabelle A.II.3	Charakteristika der mittels CCSVT hergestellten Schichtproben, deren Untersuchungsergebnisse in Kapitel 4 vorgestellt worden sind.
Tabelle A.II.4	Struktur- und Profilparameter aus den Rietveld-Verfeinerungen der Neutronendiffraktogramme der Kompaktmaterialproben $\text{CuGaSe}_2$ und $\text{CuGa}_{1.12}\text{Se}_{2.18}$ .
Tabelle A.II.5	Struktur- und Profilparameter aus den Rietveld-Verfeinerungen der Neutronendiffraktogramme der Kompaktmaterialprobe $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$ unter Verwendung der unterschiedlichen, vorgestellten Strukturmodelle.
Tabelle A.II.6	Struktur- und Profilparameter aus den Rietveld-Verfeinerungen der Neutronendiffraktogramme der Kompaktmaterialprobe $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$ unter Verwendung der unterschiedlichen, vorgestellten Strukturmodelle.
Tabelle A.II.7	Struktur- und Profilparameter für die parallele Rietveld-Verfeinerung der Neutronen- und Röntgendifraktogramme, aufgenommen von den Kompaktmaterialproben $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$ und $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$ .
Tabelle A.II.8	Struktur- und Profilparameter aus den Rietveld-Verfeinerungen der Neutronendiffraktogramme der Kompaktmaterialprobe $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$ , aufgenommen bei $685^\circ\text{C}$ und $710^\circ\text{C}$ , der Schichtmaterialprobe $\text{CuGa}_{5.2}\text{Se}_8$ , aufgenommen bei Raumtemperatur und der Kompaktmaterialprobe $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$ (getempert bei $750^\circ\text{C}$ ), aufgenommen bei Raumtemperatur.
Tabelle A.II.9	Gemessenen und berechnete Daten der Pulverdiffraktogramme, aufgenommen mittels Neutronen- ( $\lambda = 1.794 \text{ \AA}$ ) und Röntgenbeugung ( $\lambda = 0.13888 \text{ \AA}$ ), von der Kompaktmaterialprobe $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$ .
Tabelle A.II.10	Gemessenen und berechnete Daten der Pulverdiffraktogramme, aufgenommen mittels Neutronen- ( $\lambda = 1.794 \text{ \AA}$ ) und Röntgenbeugung ( $\lambda = 0.13888 \text{ \AA}$ ), von der Kompaktmaterialprobe $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$ .

Anhang II - Ergänzende Datentabellen

Tabelle A.II.1 Verwendete Massenabsorptionskoeffizienten und Informationstiefen für relevante Übergänge.

Material	Dichte [g/cm <sup>3</sup> ]	Übergang	Emission			Anregung			$\alpha_{att}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\mu' (56.4^\circ, 33.6^\circ)$ [cm <sup>2</sup> /g]	$d_{thick} [I = 0.01I_0]$ [ $\mu\text{m}$ ]	$d_{thick} [I = 0.05I_0]$ [ $\mu\text{m}$ ]
			Energie [eV]	$\alpha_{att,emmi.}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\mu_{emmi.}$ [cm <sup>2</sup> /g]	Energie [eV]	$\alpha_{att,exci.}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\mu_{exci.}$ [cm <sup>2</sup> /g]				
CuGaSe <sub>2</sub>	5.61	Cu L <sub>3</sub> M <sub>4/5</sub>	929.7	0.772	2310	1200	0.419	4253	0.192	9281	0.885	0.576
		Cu L <sub>2</sub> M <sub>4</sub>	949.8	0.388	4592	1200	0.419	4253	0.133	13403	0.612	0.399
		Ga L <sub>3</sub> M <sub>1</sub>	957.2	0.396	4497	1200	0.419	4253	0.135	13233	0.620	0.404
		Ga L <sub>2</sub> M <sub>1</sub>	984.2	0.427	4176	1200	0.419	4253	0.141	12652	0.649	0.423
		Ga L <sub>3</sub> M <sub>4/5</sub>	1098.0	0.550	3239	1200	0.419	4253	0.163	10958	0.749	0.488
		Ga L <sub>2</sub> M <sub>4</sub>	1124.8	0.373	4780	1200	0.419	4253	0.130	13743	0.597	0.389
CuGa <sub>1.5</sub> Se <sub>2.75</sub>	5.50	Cu L <sub>3</sub> M <sub>4/5</sub>	929.7	0.774	2350	1200	0.441	4125	0.198	9199	0.910	0.593
		Cu L <sub>2</sub> M <sub>4</sub>	949.8	0.450	4045	1200	0.441	4125	0.148	12261	0.683	0.445
		Ga L <sub>3</sub> M <sub>1</sub>	957.2	0.459	3963	1200	0.441	4125	0.150	12114	0.691	0.450
		Ga L <sub>2</sub> M <sub>1</sub>	984.2	0.494	3684	1200	0.441	4125	0.157	11610	0.721	0.470
		Ga L <sub>3</sub> M <sub>4/5</sub>	1098.0	0.637	2856	1200	0.441	4125	0.180	10114	0.828	0.539
		Ga L <sub>2</sub> M <sub>4</sub>	1124.8	0.392	4638	1200	0.441	4125	0.136	13334	0.628	0.409
CuGa <sub>3</sub> Se <sub>5</sub>	5.36	Cu L <sub>3</sub> M <sub>4/5</sub>	929.7	0.777	2402	1200	0.471	3958	0.205	9093	0.945	0.616
		Cu L <sub>2</sub> M <sub>4</sub>	949.8	0.560	3329	1200	0.471	3958	0.173	10767	0.798	0.520
		Ga L <sub>3</sub> M <sub>1</sub>	957.2	0.572	3264	1200	0.471	3958	0.175	10650	0.807	0.526
		Ga L <sub>2</sub> M <sub>1</sub>	984.2	0.614	3041	1200	0.471	3958	0.182	10247	0.838	0.546
		Ga L <sub>3</sub> M <sub>4/5</sub>	1098.0	0.792	2356	1200	0.471	3958	0.207	9010	0.954	0.621
		Ga L <sub>2</sub> M <sub>4</sub>	1124.8	0.419	4453	1200	0.471	3958	0.146	12798	0.671	0.437
CuGa <sub>5</sub> Se <sub>8</sub>	5.29	Cu L <sub>3</sub> M <sub>4/5</sub>	929.7	0.779	2427	1200	0.488	3876	0.209	9040	0.963	0.627
		Cu L <sub>2</sub> M <sub>4</sub>	949.8	0.635	2976	1200	0.488	3876	0.188	10032	0.868	0.565
		Ga L <sub>3</sub> M <sub>1</sub>	957.2	0.648	2919	1200	0.488	3876	0.190	9929	0.877	0.571
		Ga L <sub>2</sub> M <sub>1</sub>	984.2	0.694	2725	1200	0.488	3876	0.197	9579	0.909	0.592
		Ga L <sub>3</sub> M <sub>4/5</sub>	1098.0	0.896	2110	1200	0.488	3876	0.223	8467	1.028	0.670
		Ga L <sub>2</sub> M <sub>4</sub>	1124.8	0.433	4361	1200	0.488	3876	0.151	12535	0.695	0.452

Anhang II - Ergänzende Datentabellen

Tabelle A.II.2 Vergleich von Syntheseparametern, Analysetechniken und strukturellen Ergebnissen für kupferarme Phasen in den Stoffsystemen Cu-Ga-Se und Cu-In-Se.

Referenz	Proben	Synthesebedingungen	Kristallographische Daten / Ergebnisse	Methode
<b>Cu-Ga-Se Materialsystem</b>				
[Mikk81]	Cu <sub>2</sub> Se - Ga <sub>2</sub> Se <sub>3</sub>	- hergestellt aus den Elementen (5N), getempert und abgeschreckt	Phasendiagramm	DTA, XRD
[Pala67]	CuGaSe <sub>2</sub> - Ga <sub>2</sub> Se <sub>3</sub>	- synthetisiert aus den Elementen, in evakuierten Quarzampullen - geheizt bis auf T=1050°C (5h gehalten) - über 15h auf Raumtemperatur abgekühlt	Phasendiagramm	DTA, XRD
[Mari98]	CuGa <sub>3</sub> Se <sub>5</sub>	- aus den Elementen hergestellt (5N), in evakuierten Quarzampullen - Temp.-reg.: 1.) ↑ RT - 300°C 10K/h (12h halten) 2.) ↑ 300°C - 1150°C (10K/h) 3.) → 24h periodisch aufheizen und abkühlen um 1150°C 4.) ↓ 1150°C - 1050°C (10K/h) 5.) ↓ 1050°C - 980°C (5K/h) 6.) → 5h bei 980°C 7.) ↓ 980°C - 660°C (30K/h) 8.) → 48h bei 660°C 9.) ↓ 660°C - RT (40K/h)	$P\bar{4}2c$ [Hönl88]	Röntgenbeugung mit Auswertung (NBS*AIDS83 Programm (Ref. in [Mari98]))
[Mari04]	CuGa <sub>5</sub> Se <sub>8</sub>	- wie in beschrieben [Mari98]	$P\bar{4}2c$ [Hönl88]	Röntgenbeugung mit Rietveld Verfeinerung
<b>Cu-In-Se Materialsystem</b>				
[Mano79]	CuIn <sub>5</sub> Se <sub>8</sub>	- aus den Elementen hergestellt (5N), in evakuierten Quarzampullen - Temp.-reg.: 1.) ↑ RT - T <sub>M</sub> (aufgeschmolzen) 2.) ↓ T <sub>M</sub> - RT (langsames Abkühlen durch T <sub>M</sub> )	$I\bar{4}$ mit Domänen unterschiedlicher Strukturen	Elektronenbeugung im TEM
	CuIn <sub>5</sub> Se <sub>8</sub>	- Probe auf 700°C erhitzt und abgeschreckt	$I\bar{4} \rightarrow F\bar{4}3m$	
	CuIn <sub>2.5</sub> Se <sub>4.4</sub> (δ-Phase)	- aus den Elementen hergestellt (5N) - Temp.-reg.: 1.) ↑ RT - 1100°C (aufgeschmolzen) 2.) ↓ 1050°C - 750°C 3.) → 480h bei 750°C	$F\bar{4}3m$	Röntgeneinkristall-strukturanalyse
[Hönl88]	CuIn <sub>3</sub> Se <sub>5</sub> (β-Phase)	4.) ↓ 700°C - RT abgeschreckt in H <sub>2</sub> O	$P\bar{4}2c$	Röntgenbeugung mit „full matrix least square“ Verfeinerung

Anhang II - Ergänzende Datentabellen

[Hana97]	CuIn <sub>3</sub> Se <sub>5</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Einwaage der binären Verbindungen Cu<sub>2</sub>Se und In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> in evakuierten Quarzampullen</li> <li>- Temp.-reg.: 1.) ↑ RT - 1150°C (aufgeschmolzen)</li> <li>2.) → 2h bei 1050°C</li> <li>3.) ↓ 1050°C - RT (luftgekühlt)</li> <li>4.) gemörsert und neu eingeschweißt in evakuierter Quarzglasampulle</li> <li>5.) → 24h - 168h bei 700°C</li> <li>6.) ↓ 700°C - RT (??K/h)</li> </ul>	$I\bar{4}2m$	Elektronen- und Röntgenbeugung
[Pasz04]	CuIn <sub>3</sub> Se <sub>5</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- aus den Elementen hergestellt (5-6N) (Bridgeman Methode)</li> <li>- Temp.-reg.: 1.) ↓ 1080°C - 750°C (1K/h)</li> <li>2.) ↓ 750°C - 500°C (5K/h)</li> </ul>	$I\bar{4}2m$	Röntgenbeugung mit anschließender Rietveld Verfeinerung
[Meri00]	CuIn <sub>2</sub> Se <sub>3.5</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- hergestellt aus den Elementen (5N), in evakuierten Quarzglas ampullen</li> </ul>	$P\bar{4}2c$ [Hönl88]	Röntgenbeugung mit anschließender Rietveld Verfeinerung
	CuIn <sub>3</sub> Se <sub>5</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Temp.-reg.: 1.) ↑ RT - 1130°C (10K/h)</li> <li>2.) ↓ 1130°C - 900°C (10K/h)</li> </ul>	$P\bar{4}2c$ [Hönl88]	
	CuIn <sub>5</sub> Se <sub>8</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>3.) ↓ 900°C - 600°C (5K/h)</li> <li>4.) ↓ 600°C - RT (??K/h)</li> </ul>	hexagonal oder trigonal	
[Tsen89]	CuIn <sub>3</sub> Se <sub>5.3</sub> CuIn <sub>5</sub> Se <sub>8</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- CVT-Einkristalle (T<sub>Quelle</sub> = 806°C, T<sub>Kristall</sub> = 760°C, t = 168h)</li> <li>- nach dem Wachstum abgekühlt auf RT</li> </ul>	$I\bar{4}$ $I\bar{4}$ mit 7-,14-Stapelsequenzen in [221]	Elektronenbeugung im TEM, TEM-EDX und HRTEM
[Chan03]	CuIn <sub>3</sub> Se <sub>5</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Einwaage der binären Verbindungen Cu<sub>2</sub>Se und In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> in Bornitrit (BN) beschichteten evakuierten Quarzampullen</li> <li>- Temp.-reg.: 1.) ↑ RT - T<sub>M</sub> („langsam“ K/h)</li> <li>2.) ↓ T<sub>M</sub> - 700°C („graduell“ K/h)</li> <li>3.) → 168h bei 700°C</li> <li>4.) ↓ von 700°C abgeschreckt in flüssigem N<sub>2</sub></li> </ul>	Verschiedene Nahordnungen in unterschiedlichen Selen-Koordinationspolyedern	Röntgenabsorptionsfeinstrukturanalyse (EXAFS)

Tabelle A.II.3 Charakteristika der mittels CCSVT hergestellten Schichtproben, deren Untersuchungsergebnisse in Kapitel 4 vorgestellt worden sind.

Integrale Komposition	Kupfer [mol%]	Gallium [mol%]	Selen [mol%]	mittlere Schichtdicke [nm]	Depositionszeiten 1 und 2 (t <sub>1</sub> , t <sub>2</sub> ) [min:sek]		d <sub>Kupfer</sub> [nm]
					t <sub>1</sub>	t <sub>2</sub>	
Probenserie 1 (Regime 1)							
CuGa <sub>1.7</sub> Se <sub>3.0</sub>	17.76	29.82	52.42	≈ 1220	10:00	10:00	≈ 125
CuGa <sub>2.6</sub> Se <sub>4.4</sub>	12.50	32.00	55.51	≈ 1740	15:00	15:00	≈ 125
CuGa <sub>3.1</sub> Se <sub>5.3</sub>	10.70	33.01	56.29	≈ 2050	17:30	17:30	≈ 125
Probenserie 2 (Regime 2)							
CuGa <sub>1.5</sub> Se <sub>2.9</sub>	18.48	27.37	54.16	≈ 1120	2:30	10:00	≈ 125
CuGa <sub>2.0</sub> Se <sub>3.7</sub>	15.09	29.74	55.17	≈ 1390	2:30	20:00	≈ 125
CuGa <sub>2.8</sub> Se <sub>4.9</sub>	11.58	32.17	56.26	≈ 1790	2:30	40:00	≈ 125
CuGa <sub>3.4</sub> Se <sub>5.8</sub>	9.83	33.68	56.49	≈ 2160	2:30	60:00	≈ 125
CuGa <sub>5.0</sub> Se <sub>8.1</sub>	7.09	35.73	57.18	≈ 3020	2:30	120:00	≈ 125
Probenserie 3 (Regime 2)							
CuGa <sub>1.2</sub> Se <sub>2.3</sub>	-	-	-	≈ 930	2:30	2:30	≈ 125
CuGa <sub>1.6</sub> Se <sub>3.2</sub>	17.13	27.62	55.25	≈ 1250	2:30	10:00	≈ 125
CuGa <sub>2.1</sub> Se <sub>3.9</sub>	14.30	30.44	55.26	≈ 1580	2:30	20:00	≈ 125
CuGa <sub>2.9</sub> Se <sub>5.1</sub>	11.18	32.35	56.48	≈ 1910	2:30	40:00	≈ 125
CuGa <sub>4.2</sub> Se <sub>7.0</sub>	8.15	34.57	57.28	≈ 2430	2:30	60:00	≈ 125
CuGa <sub>5.1</sub> Se <sub>8.0</sub>	7.07	36.32	56.61	≈ 3130	2:30	120:00	≈ 125
CuGa <sub>6.7</sub> Se <sub>10.3</sub>	5.54	37.24	57.22	≈ 3970	2:30	210:00	≈ 125
Probenserie 4 (Regime 2)							
CuGa <sub>1.1</sub> Se <sub>2.2</sub>	23.26	26.12	50.62	≈ 203	0:30	0:30	≈ 32
CuGa <sub>1.2</sub> Se <sub>2.4</sub>	21.90	26.75	51.35	≈ 207	0:30	0:40	≈ 32
CuGa <sub>1.8</sub> Se <sub>3.2</sub>	16.56	30.03	53.42	≈ 253	0:30	3:00	≈ 32
CuGa <sub>2.0</sub> Se <sub>3.4</sub>	15.61	30.88	53.50	≈ 308	0:30	4:35	≈ 32
CuGa <sub>2.4</sub> Se <sub>4.0</sub>	13.56	32.03	54.40	≈ 326	0:30	5:00	≈ 32
CuGa <sub>2.4</sub> Se <sub>4.1</sub>	13.42	32.06	54.52	≈ 369	0:30	7:00	≈ 32
CuGa <sub>2.5</sub> Se <sub>4.2</sub>	13.12	32.37	54.50	≈ 376	0:30	8:15	≈ 32
CuGa <sub>3.0</sub> Se <sub>4.9</sub>	11.28	33.51	55.23	≈ 441	0:30	9:45	≈ 32
CuGa <sub>3.7</sub> Se <sub>5.9</sub>	9.48	34.67	55.85	≈ 521	0:30	11:30	≈ 32
CuGa <sub>4.1</sub> Se <sub>6.5</sub>	8.66	35.13	56.21	≈ 573	0:30	15:00	≈ 32
CuGa <sub>4.2</sub> Se <sub>6.6</sub>	8.50	35.24	56.27	≈ 572	0:30	15:00	≈ 32

Tabelle A.II.4 Struktur- und Profilparameter aus den Rietveld-Verfeinerungen der Neutronendiffraktogramme der Kompaktmaterialproben CuGaSe<sub>2</sub> und CuGa<sub>1.12</sub>Se<sub>2.18</sub>.

Parameter für CuGaSe <sub>2</sub> nach Rietveld-Verfeinerung						
a <sub>0</sub> [Å]	c <sub>0</sub> [Å]	u [°2θ]	v [°2θ]	w [°2θ]		
5.6170(1)	11.024(1)	0.048	-0.025	0.071		
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]	
12.5	12.1	8.05	2.3	1.86	4.8	
Wyckoff-Lage (Besetzung)		x	y	z	B <sub>iso</sub>	Occu.
4a	Cu	0	0	0	0.91(17)	4 (nicht variiert)
4b	Ga	0	0	0.5	0.76(17)	4 (nicht variiert)
8d	Se	0.2571(7)	0.25	0.125	0.69(8)	8 (nicht variiert)
Parameter für CuGa <sub>1.12</sub> Se <sub>2.18</sub> nach Rietveld-Verfeinerung						
a <sub>0</sub> [Å]	c <sub>0</sub> [Å]	u [°2θ]	v [°2θ]	w [°2θ]		
5.6085(1)	11.014(1)	0.093	0.030	0.053		
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]	
Wyckoff-Lage (Besetzung)		x	y	z	B <sub>iso</sub>	Occu.
4a	Cu	0	0	0	0.63(20)	3.67(nicht variiert)
	Ga					0.11(nicht variiert)
4b	Cu	0	0	0.5	1.05(22)	0(nicht variiert)
	Ga					4.0(nicht variiert)
8d	Se	0.2593(8)	0.25	0.125	0.83(12)	8.0(nicht variiert)

Tabelle A.II.5 Struktur- und Profilparameter aus den Rietveld-Verfeinerungen der Neutronendiffraktogramme der Kompaktmaterialprobe  $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$  unter Verwendung der unterschiedlichen, vorgestellten Strukturmodelle.Parameter für  $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$  nach Rietveld-Verfeinerung für Chalkopyrit-Strukturmodell

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	u [°2 $\theta$ ]	v [°2 $\theta$ ]	w [°2 $\theta$ ]	
5.5161(1)	10.945(2)	0.073	-0.052	0.095	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
16.0	17.8	8.5	4.44	1.87	9.3
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
4a	0	0	0	0.24(23)	4(1)
Cu					0(1)
4b	0	0	0.5	2.07(30)	0(1)
Cu					4(1)
8d	0.270(1)	0.25	0.125	1.26(14)	9.7(3)

Parameter für  $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$  nach Rietveld-Verfeinerung für Stannit-Strukturmodell

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	u [°2 $\theta$ ]	v [°2 $\theta$ ]	w [°2 $\theta$ ]	
5.5160(1)	10.945(1)	0.072	-0.043	0.092	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
13.1	13.6	8.8	2.39	1.88	6.6
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
2a	0	0	0	2.24(90)	0.49(82)
2b	0	0	0.5	1.42(18)	2(1)
4d	0	0.5	0.25	1.03(12)	4(1)
8i	0.2384(4)	0.2384(4)	0.1197(3)	0.97(7)	8(1)

Parameter für  $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$  nach Rietveld-Verfeinerung für modifiziertes Stannit-Strukturmodell

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	u [°2 $\theta$ ]	v [°2 $\theta$ ]	w [°2 $\theta$ ]	
5.5161(1)	10.945(1)	0.072	-0.048	0.092	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
12.8	13.5	8.7	2.4	1.88	6.6
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
2a	0	0	0	2.25(90)	0.49(3)
2b	0	0	0.5	1.42(18)	2.00(5)
4d	0	0.5	0.25	1.03(12)	1.11(10)
Cu					2.80(8)
8i	0.2383(4)	0.2383(4)	0.1197(3)	0.97(7)	7.73(22)

Parameter für CuGa<sub>3</sub>Se<sub>5</sub> nach Rietveld-Verfeinerung für P-Chalkopyrit-Strukturmodell

a <sub>0</sub> [Å]	c <sub>0</sub> [Å]	u [°2θ]	v [°2θ]	w [°2θ]	
5.5160(1)	10.945(1)	0.071	-0.041	0.092	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
13.7	14.2	8.7	2.7	1.88	7.6
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
2b	0.5	0	0.25	0.75(13)	0.7(1.0)
Cu					2(1)
	0	0.5	0.25	1.20(30)	1.26(15)
2d					Ga
2e	0	0	0	1.7(1.0)	1.22(30)
	0.5	0.5	0	3.3(1.0)	0(1)
2f					Cu
	0.5	0.5	0	3.3(1.0)	3(1)
2f					Ga
8n	0.242(2)	0.263(2)	0.1204(3)	1.02(8)	7.8(1.0)

Parameter für CuGa<sub>3</sub>Se<sub>5</sub> nach Rietveld-Verfeinerung für Thioallat - Strukturmodell

a <sub>0</sub> [Å]	c <sub>0</sub> [Å]	u [°2θ]	v [°2θ]	w [°2θ]	
5.5161(1)	10.945(1)	0.072	-0.047	0.092	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
13.4	13.7	8.8	2.45	1.88	6.8
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
2a	0	0	0	0.34(53)	1.34(20)
					Cu
	0	0	0.5	1.82(54)	2.42(42)
2b					Cu
2c	0	0.5	0.25	1.40(48)	2.08(20)
2d	0	0.5	0.75	2.7(1.0)	0.54(18)
8g	0.264(7)	0.240(8)	0.1303(3)	0.98(8)	8.02(23)

Parameter für CuGa<sub>3</sub>Se<sub>5</sub> nach Rietveld-Verfeinerung für P $\bar{4}$  - Strukturmodell

a <sub>0</sub> [Å]	c <sub>0</sub> [Å]	u [°2θ]	v [°2θ]	w [°2θ]	
5.5160(1)	10.945(1)	0.071	-0.044	0.092	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
13.9	14.1	8.9	2.52	1.89	8.0
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
1a	0	0	0	2.8(1.0)	1.09(9)
1b	0	0	0.5	0.1(1.0)	0.86(13)
1c	0.5	0.5	0	2.0(1.0)	1.02(20)
1d	0.5	0.5	0.5	1.7(1.0)	1.16(24)
2g	0	0.5	0.26(11)	2.4(1.0)	0.53(8)
2g	0	0.5	0.750(3)	1.36(26)	2.00(10)
4h	0.236(5)	0.267(4)	0.101(2)	1.02(46)	3.85(26)
4h	0.246(4)	0.740(5)	0.370(2)	1.01(46)	3.98(26)

Tabelle A.II.6 Struktur- und Profilparameter aus den Rietveld-Verfeinerungen der Neutronendiffraktogramme der Kompaktmaterialprobe  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$  unter Verwendung der unterschiedlichen, vorgestellten Strukturmodelle.Parameter für  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$  nach Rietveld-Verfeinerung für Chalkopyrit - Strukturmodell

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	u [°2 $\theta$ ]	v [°2 $\theta$ ]	w [°2 $\theta$ ]	
5.4819(1)	10.925(1)	0.092	-0.06	0.100	
$R_P$ [%]	$R_{WP}$ [%]	$R_{Exp}$ [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	$R_{Bragg}$ [%]
19.3	20.4	8.6	6.10	1.88	11.4
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{iso}$	Besetzung
4a	0	0	0	0.0(3)	4(1)
Cu					0(1)
4b	0	0	0.5	2.42(33)	0(1)
Cu					4(1)
8d	0.2759(6)	0.25	0.125	1.30(11)	11.03(33)

Parameter für  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$  nach Rietveld-Verfeinerung für Stannit - Strukturmodell

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	u [°2 $\theta$ ]	v [°2 $\theta$ ]	w [°2 $\theta$ ]	
5.4815(1)	10.924(1)	0.087	-0.052	0.096	
$R_P$ [%]	$R_{WP}$ [%]	$R_{Exp}$ [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	$R_{Bragg}$ [%]
18.1	17.2	8.9	3.78	1.88s	8.5
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{iso}$	Besetzung
2a	0	0	0	3.2(1.0)	0.10(44)
2b	0	0	0.5	0.77(21)	0.6(1.0)
4d	0	0.5	0.25	0.90(14)	1.3(1.0)
8i	0.2369(6)	0.2369(6)	0.1182(3)	1.00(80)	2.7(1.0)

Parameter für  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$  nach Rietveld-Verfeinerung für modifiziertes Stannit - Strukturmodell

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	u [°2 $\theta$ ]	v [°2 $\theta$ ]	w [°2 $\theta$ ]	
5.4815(1)	10.924(1)	0.090	-0.057	0.098	
$R_P$ [%]	$R_{WP}$ [%]	$R_{Exp}$ [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	$R_{Bragg}$ [%]
13.6	14.0	8.9	2.51	1.88	6.8
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{iso}$	Besetzung
2a	0	0	0	4.2(1.0)	0.16(3)
2b	0	0	0.5	0.79(17)	1.95(5)
4d	0	0.5	0.25	0.90(11)	0.84(10)
Cu					3.05(8)
8i	0.2366(5)	0.2366(5)	0.1181(3)	0.99(6)	8.17(24)

Parameter für CuGa<sub>5</sub>Se<sub>8</sub> nach Rietveld-Verfeinerung für P-Chalkopyrit - Strukturmodell

a <sub>0</sub> [Å]	c <sub>0</sub> [Å]	u [°2θ]	v [°2θ]	w [°2θ]	
5.4815(1)	10.924(1)	0.092	-0.049	0.099	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
18.3	18.3	9.0	4.17	1.88	9.3
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
2b	0.5	0	0.25	1.83(43)	0.0(1.0)
Cu					2.0(1.0)
	0	0.5	0.25	0.30(18)	2.81(27)
2d					Ga
2e	0	0	0	1.8(1.0)	0.84(13)
	0.5	0.5	0	2.2(1.0)	0.0(1.0)
2f					Cu
	0.5	0.5	0	2.2(1.0)	2.0(1.0)
2f					Ga
8n	0.258(2)	0.235(2)	0.120(1)	1.12(10)	8.27(80)

Parameter für CuGa<sub>5</sub>Se<sub>8</sub> nach Rietveld-Verfeinerung für Thioallat - Strukturmodell

a <sub>0</sub> [Å]	c <sub>0</sub> [Å]	u [°2θ]	v [°2θ]	w [°2θ]	
5.4815(1)	10.924(1)	0.083	-0.021	0.090	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
14.5	14.7	8.9	2.73	1.88	7.1
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
2a	0	0	0	1.0(1.0)	0.83(11)
Cu					0.96(24)
	0	0	0.5	1.44(91)	2.14(28)
2b					Cu
2c	0	0.5	0.25	0.73(20)	1.94(7)
2d	0	0.5	0.75	4.0(1.0)	0.18(6)
8g	0.266(5)	0.239(5)	0.1318(3)	1.01(1)	8.22(24)

Parameter für CuGa<sub>5</sub>Se<sub>8</sub> nach Rietveld-Verfeinerung für P $\bar{4}$  - Strukturmodell

a <sub>0</sub> [Å]	c <sub>0</sub> [Å]	u [°2θ]	v [°2θ]	w [°2θ]	
5.4815(1)	10.924(1)	0.090	-0.054	0.097	
R <sub>P</sub> [%]	R <sub>WP</sub> [%]	R <sub>Exp</sub> [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	R <sub>Bragg</sub> [%]
14.4	14.7	9.0	2.70	1.89	7.7
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	B <sub>iso</sub>	Besetzung
1a	0	0	0	0.4(1.0)	0.84(10)
1b	0	0	0.5	1.0(1.0)	0.88(14)
1c	0.5	0.5	0	1.6(1.0)	1.03(19)
1d	0.5	0.5	0.5	2.2(1.0)	1.13(19)
2g	0	0.5	0.25	4.0(1.0)	0.22(5)
2g	0	0.5	0.75	0.73(21)	1.98(8)
4h	0.239(4)	0.261(6)	0.129(1)	1.05(38)	4.18(26)
4h	0.239(5)	0.731(4)	0.366(1)	0.93(39)	4.13(25)

Tabelle A.II.7 Struktur- und Profilparameter für die parallele Rietveld-Verfeinerung der Neutronen- und Röntgendiffraktogramme, aufgenommen von den Kompaktmaterialproben  $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$  und  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$ .

Parameter für parallele Rietveld-Verfeinerung von $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$ (Neutronen- und Röntgendiffraktogramme)						
$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	u [°2 $\theta$ ]	v [°2 $\theta$ ]	w [°2 $\theta$ ]		
5.5160(1)	10.945(1)	0.071/0.119	-0.048/-0.007	0.093/0.001		
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{\text{iso}}$	Besetzung	
2a Cu	0	0	0	1.77(88)	0.47(2)	
2b Ga	0	0	0.5	1.45(19)	2.00(5)	
4d	Cu	0	0.5	1.06(12)	1.15(9)	
	Ga				2.79(8)	
8i Se	0.2385(4)	0.2385(4)	0.1197(3)	1.09(7)	7.94(21)	
Neutronendaten						
$R_{\text{P}}$ [%]	$R_{\text{WP}}$ [%]	$R_{\text{Exp}}$ [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	$R_{\text{Bragg}}$ [%]	
12.9	13.3	8.7	2.33	1.88	6.8	
Synchrotrondaten						
$R_{\text{P}}$ [%]	$R_{\text{WP}}$ [%]	$R_{\text{Exp}}$ [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	$R_{\text{Bragg}}$ [%]	
8.4	8.5	4.5	2.61	1.86	5.3	
Parameter für parallele Rietveld-Verfeinerung von $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$ (Neutronen- und Röntgendiffraktogramme)						
$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	u [°2 $\theta$ ]	v [°2 $\theta$ ]	w [°2 $\theta$ ]		
5.4814(1)	10.924(1)	0.090/0.263	-0.057/-0.023	0.098/0.001		
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{\text{iso}}$	Besetzung	
2a Cu	0	0	0	3.9(1.0)	0.16(3)	
2b Ga	0	0	0.5	0.81(20)	1.94(5)	
4d	Cu	0	0.5	0.93(13)	0.85(10)	
	Ga				3.05(8)	
8i Se	0.2367(5)	0.2367(5)	0.1182(3)	1.01(7)	8.18(24)	
Neutronendaten						
$R_{\text{P}}$ [%]	$R_{\text{WP}}$ [%]	$R_{\text{Exp}}$ [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	$R_{\text{Bragg}}$ [%]	
13.6	14.0	8.9	2.50	1.88	6.9	
Synchrotrondaten						
$R_{\text{P}}$ [%]	$R_{\text{WP}}$ [%]	$R_{\text{Exp}}$ [%]	Chi <sup>2</sup> [%]	D-W [%]	$R_{\text{Bragg}}$ [%]	
13.2	13.9	5.9	3.12	1.86	5.7	

Tabelle A.II.8 Struktur- und Profilparameter aus den Rietveld-Verfeinerungen der Neutronendiffraktogramme der Kompaktmaterialprobe  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$ , aufgenommen bei  $685^\circ\text{C}$  und  $710^\circ\text{C}$ , der Schichtmaterialprobe  $\text{CuGa}_{5.2}\text{Se}_8$ , aufgenommen bei Raumtemperatur und der Kompaktmaterialprobe  $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$  (getempert bei  $750^\circ\text{C}$ ), aufgenommen bei Raumtemperatur.

Parameter für  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$  nach Rietveld-Verfeinerung ( $T = 685^\circ\text{C}$ )

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	$u$ [ $^\circ 2\theta$ ]	$v$ [ $^\circ 2\theta$ ]	$w$ [ $^\circ 2\theta$ ]	
5.5222(1)	11.008(1)	0.047	0.033	0.051	
$R_P$ [%]	$R_{WP}$ [%]	$R_{Exp}$ [%]	$\text{Chi}^2$ [%]	D-W [%]	$R_{Bragg}$ [%]
28.5	19.8	10.7	3.48	1.88	13.8
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{iso}$	Besetzung
2a Cu	0	0	0	2.7(1.0)	0.33(4)
2b Ga	0	0	0.5	3.98(57)	1.94(6)
4d Cu	0	0.5	0.25	3.02(31)	0.66(10)
Ga					3.06(8)
8i Se	0.237(1)	0.237(1)	0.1192(8)	3.14(16)	7.50(27)

Parameter für  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$  nach Rietveld-Verfeinerung ( $T = 710^\circ\text{C}$ )

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	$u$ [ $^\circ 2\theta$ ]	$v$ [ $^\circ 2\theta$ ]	$w$ [ $^\circ 2\theta$ ]	
5.5240(1)	11.016(1)	0.048	0.033	0.049	
$R_P$ [%]	$R_{WP}$ [%]	$R_{Exp}$ [%]	$\text{Chi}^2$ [%]	D-W [%]	$R_{Bragg}$ [%]
31.0	20.9	11.0	3.71	1.88	13.5
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{iso}$	Besetzung
2a Cu	0	0	0	4.3(1.0)	0.52(5)
2b Ga	0	0	0.5	3.40(63)	1.85(6)
4d Cu	0	0.5	0.25	3.29(41)	0.47(10)
Ga					3.15(9)
8i Se	0.239(1)	0.239(1)	0.119(1)	3.45(19)	7.67(28)

Parameter für  $\text{CuGa}_{5.2}\text{Se}_8$ -CCSVT Probe nach Rietveld-Verfeinerung (RT)

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	$u$ [ $^\circ 2\theta$ ]	$v$ [ $^\circ 2\theta$ ]	$w$ [ $^\circ 2\theta$ ]	
5.4751(1)	10.915(1)	0.128	0.005	0.074	
$R_P$ [%]	$R_{WP}$ [%]	$R_{Exp}$ [%]	$\text{Chi}^2$ [%]	D-W [%]	$R_{Bragg}$ [%]
17.8	17.1	12.4	1.92	1.88	6.7
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{iso}$	Besetzung
2a Cu	0	0	0	5.1(1.0)	0.37(5)
2b Ga	0	0	0.5	1.35(28)	1.92(10)
4d Cu	0	0.5	0.25	0.91(16)	0.59(19)
Ga					3.07(16)
8i Se	0.2369(7)	0.2369(7)	0.1187(4)	0.79(8)	7.63(40)

Parameter für  $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$  (getempert bei 750°C) nach Rietveld-Verfeinerung (RT)

$a_0$ [Å]	$c_0$ [Å]	$u$ [°2 $\theta$ ]	$v$ [°2 $\theta$ ]	$w$ [°2 $\theta$ ]	
5.4955(1)	10.965(1)	0.060	-0.006	0.066	
$R_P$ [%]	$R_{WP}$ [%]	$R_{Exp}$ [%]	$\chi^2$ [%]	D-W [%]	$R_{Bragg}$ [%]
18.8	17.8	9.2	3.80	1.88	7.8
Wyckoff-Lage (Besetzung)	x	y	z	$B_{iso}$	Besetzung
2a Cu	0	0	0	2.06(98)	0.84(6)
2b Ga	0	0	0.5	1.16(37)	1.87(9)
4d Cu	0	0.5	0.25	1.30(24)	0.75(18)
Ga					2.92(16)
8i Se	0.242(1)	0.242(1)	0.1207(6)	1.10(9)	7.74(39)

Tabelle A.II.9 Gemessene und berechnete Daten der Pulverdiffraktogramme, aufgenommen mittels Neutronen- ( $\lambda = 1.794 \text{ \AA}$ ) und Röntgenbeugung ( $\lambda = 0.13888 \text{ \AA}$ ), von der Kompaktmaterialprobe  $\text{CuGa}_3\text{Se}_5$ .

$\text{CuGa}_3\text{Se}_5$							
hkl	$d_{\text{hkl}}$	Synchrotron			Neutronen		
		$2\theta_{\text{gemessen}} [^\circ]$	$I_{\text{berechnet}}$	$I_{\text{gemessen}}$	$2\theta_{\text{gemessen}} [^\circ]$	$I_{\text{berechnet}}$	$I_{\text{gemessen}}$
002	5.472	1.454	8.1	7.6	18.90	16.7	28
101	4.926	1.615	40.9	38.7	21.02	65.9	82.6
110	3.900	2.040	19.6	19.7	26.64	42.2	38.3
112	3.176	2.505	1335.5	1375.7	32.87	2948.3	2850.3
103	3.043	2.615	39.4	38.2	34.36	82.5	79.7
200	2.758	2.885	19.8	24.5	38.03	43.2	37.2
004	2.736	2.908	9.8	12.3	38.35	21.4	20.4
202	2.463	3.231	25.2	26.8	42.80	68.8	58.6
211	2.406	3.307	52	51.9	43.86	128.8	119.9
114	2.240	3.553	16.7	17.1	47.31	49	63
213	2.044	3.895	15.5	13.6	52.18	43.5	55.2
105	2.035	3.912	14.3	12.7	52.42	40.5	51.2
220	1.950	4.081	326	324.2	54.88	1055.9	1064.1
204	1.942	4.097	645.2	659.8	55.12	2113.3	2189.2
222	1.837	4.333	2.4	1.9	58.58	9.1	16.4
006	1.824	4.363	6.4	6.3	59.03	22.8	27.1
301	1.813	4.389	20	19.4	59.42	65.4	69.2
310	1.744	4.563	5.8	4.9	62.02	22.8	32.1
312	1.662	4.789	396.3	392.1	65.47	1541.1	1486.1
116	1.652	4.817	195.1	195.6	65.90	766.1	753.8
303	1.642	4.848	0.2	0.2	66.37	0.5	0.5
215	1.637	4.861	5.4	3.6	66.58	19.1	15.3
224	1.588	5.012	7.3	8.2	68.93	25.5	13
206	1.521	5.232	0	0.1	72.41	0	0
321	1.515	5.254	1.9	2.2	72.76	8	0
107	1.504	5.292	1.9	2.5	73.37	7.2	0
314	1.471	5.412	7.8	9	75.32	38.4	5.2
323	1.411	5.642	16.6	15.4	79.13	77.3	42.6
305	1.408	5.654	0	0	79.33	0	0
400	1.379	5.773	99.4	95.8	81.34	518.6	489.4
008	1.368	5.819	48.6	44.3	82.12	256.9	256.8
402	1.337	5.953	0.8	0.7	84.45	5.6	0
226	1.332	5.976	8.9	8.2	84.84	51.2	40
411	1.328	5.995	6.6	5.7	85.18	34.4	28.2
217	1.321	6.028	7.2	6.3	85.76	37.7	35.2
330	1.300	6.123	0.5	0	87.45	3.5	0
118	1.291	6.167	5.6	4.1	88.23	33.7	42.2
332	1.265	6.294	72.8	66.9	90.54	450.1	463.9
316	1.261	6.315	144.3	136	90.93	898.8	942.7
413	1.256	6.338	9.6	8.4	91.36	56.5	59.8
325	1.254	6.349	12.6	10.2	91.56	74.2	85.3
420	1.233	6.455	3.1	3.1	93.54	14.1	18.1
404	1.231	6.465	3.1	3.4	93.73	14.2	19.5

hkl	d <sub>hkl</sub>	Synchrotron			Neutronen		
		2 $\theta$ <sub>gemessen</sub> [°]	I <sub>berechnet</sub>	I <sub>gemessen</sub>	2 $\theta$ <sub>gemessen</sub> [°]	I <sub>berechnet</sub>	I <sub>gemessen</sub>
208	1.226	6.496	3.2	3.6	94.32	14.7	18.9
422	1.203	6.617	5.2	5.2	96.64	39.7	41.8
307	1.191	6.684	3.3	2.8	97.96	21.7	24.4
109	1.188	6.704	0.5	0.4	98.35	2.9	4.4
334	1.174	6.780	2.6	2.7	99.86	20.9	33.5
415	1.142	6.975	5.4	2.9	103.86	40.4	63.6
424	1.124	7.081	172.5	149.1	106.11	1466	1569.5
228	1.120	7.109	85.3	70.5	106.72	733.5	843.4
406	1.100	7.238	4.2	2.9	109.56	39.4	53.6
431	1.098	7.254	8.1	6.3	109.92	69	78.3
501	1.098	7.254	0.2	0.2	109.92	2.3	2.6
0010	1.094	7.275	0.2	0.1	110.39	1.1	1.8
327	1.093	7.282	1	0.9	110.54	8.7	14.6
219	1.091	7.300	3.3	2.8	110.95	28.5	49.6
510	1.082	7.361	0.7	0.3	112.35	7.9	18.7
318	1.076	7.397	5.7	4.2	113.19	57.3	79.1
512	1.061	7.503	68	55.3	115.73	700.8	738.7
336	1.059	7.521	33.4	27	116.17	348.6	390.8
433	1.056	7.541	2.4	1.8	116.65	23.7	26.2
503	1.056	7.541	3.8	2.9	116.65	37.3	41.3
1110	1.054	7.557	33.3	23.7	117.04	353.7	388.8
426	1.022	7.794	0.1	0.1	123.17	0.9	1.9
521	1.020	7.808	7.9	6.4	123.57	91.4	108
2010	1.017	7.828	5.5	4.7	124.11	70.5	84.8
417	1.017	7.834	3.2	2.8	124.27	37.3	47
309	1.014	7.851	2.6	2.3	124.75	31.1	42.5
514	1.006	7.916	2.4	1.7	126.58	34.7	42.6
523	0.986	8.076	0.5	0.4	131.36	7.4	7.6
435	0.985	8.084	1	0.7	131.62	13.5	11.4
505	0.985	8.084	3.7	2.6	131.62	52.4	44.5
1011	0.979	8.133	0.7	0.4	133.21	9.6	8.4
440	0.975	8.167	22	17.4	134.33	358.7	338.9
408	0.971	8.200	43.4	34.4	135.42	727.8	717.6
442	0.960	8.296	0.4	0	138.82	7.8	0
2210	0.954	8.344	0.3	0	140.63	3.8	0
329	0.952	8.366	0.2	0	141.47	2.9	0
530	0.946	8.419	1	0	143.60	24.3	9.2
338	0.942	8.451	1.2	0	144.94	28	19.7

Tabelle A.II.10 Gemessene und berechnete Daten der Pulverdiffraktogramme, aufgenommen mittels Neutronen- ( $\lambda = 1.794 \text{ \AA}$ ) und Röntgenbeugung ( $\lambda = 0.13888 \text{ \AA}$ ), von der Kompaktmaterialprobe  $\text{CuGa}_5\text{Se}_8$ .

$\text{CuGa}_5\text{Se}_8$							
hkl	$d_{\text{hkl}}$	Synchrotron			Neutronen		
		$2\theta_{\text{gemessen}} [^\circ]$	$I_{\text{berechnet}}$	$I_{\text{gemessen}}$	$2\theta_{\text{gemessen}} [^\circ]$	$I_{\text{berechnet}}$	$I_{\text{gemessen}}$
002	5.462	1.457	6.3	6	18.94	21	45.7
101	4.899	1.624	31.3	27.8	21.14	89.3	90.4
110	3.876	2.053	16.6	17.1	26.81	58	48
112	3.161	2.518	766.6	782.8	33.04	2788.9	2753.4
103	3.033	2.624	31.5	31.9	34.47	113	128.9
200	2.741	2.904	17.8	20.7	38.28	68.6	71.6
004	2.731	2.914	8.8	9.5	38.43	33.8	32
202	2.450	3.249	22	22.2	43.05	98.4	84
211	2.392	3.327	42.4	42.1	44.14	179.8	162.7
114	2.232	3.565	14.9	14.3	47.48	71.7	77.2
213	2.033	3.914	13.4	10.9	52.46	65.1	73.9
105	2.029	3.922	12.2	10.1	52.57	59.6	65.1
220	1.938	4.107	184.4	182.8	55.25	995.9	949.3
204	1.934	4.114	366.4	384.3	55.36	1958	1930
222	1.826	4.358	1.7	1.6	58.95	10.6	10.4
006	1.821	4.372	5.8	5.5	59.16	34.2	32.1
301	1.802	4.417	16.8	15	59.83	94	89.5
310	1.733	4.592	4.7	3.9	62.46	30.5	41
312	1.652	4.818	226.9	235.9	65.90	1458.9	1569.7
116	1.648	4.830	112.2	117.2	66.10	723.6	759.1
303	1.633	4.874	0.3	0.3	66.78	1.6	2.1
215	1.631	4.880	4.5	4.1	66.87	27.9	36.4
224	1.580	5.036	5.8	7.4	69.31	37.3	16.2
206	1.516	5.249	0.2	0.3	72.68	0.8	0
321	1.506	5.286	1.6	1.8	73.29	11.2	0
107	1.501	5.304	1.8	2	73.56	12.7	0
314	1.463	5.439	6.5	7.6	75.77	52.8	8.2
323	1.403	5.674	13.9	13.3	79.67	112	66.8
305	1.402	5.680	0	0	79.76	0	0
400	1.370	5.809	56.7	60.5	81.96	490.4	474.9
008	1.365	5.830	27.9	33	82.32	242.8	262.8
402	1.329	5.989	0.5	0.5	85.08	5.9	5.3
226	1.327	6.000	7.7	7.6	85.26	73.9	71.9
411	1.320	6.032	5.5	5.4	85.84	50.1	50.5
217	1.316	6.047	6.4	6.2	86.11	57.9	53.8
330	1.292	6.162	0.3	0.2	88.15	3.8	3
118	1.288	6.182	5.2	4.4	88.50	51.1	52.4
332	1.257	6.332	42	39.1	91.25	432.7	446.4
316	1.255	6.342	83.4	78.9	91.43	859.7	860
413	1.249	6.375	8.4	8	92.05	85.3	104.4
325	1.248	6.380	11.3	10.7	92.14	115.3	143.9
420	1.226	6.496	2.2	2.2	94.31	19	27.6
404	1.225	6.500	2.2	2.3	94.40	18.9	25.7

hkl	$d_{hkl}$	Synchrotron			Neutronen		
		$2\theta_{\text{gemessen}} [^\circ]$	$I_{\text{berechnet}}$	$I_{\text{gemessen}}$	$2\theta_{\text{gemessen}} [^\circ]$	$I_{\text{berechnet}}$	$I_{\text{gemessen}}$
208	1.222	6.514	2.1	2.3	94.67	18.4	25.3
422	1.196	6.657	4.1	4.5	97.43	52.3	48.8
307	1.187	6.710	2.7	2.6	98.46	31.9	31.4
109	1.185	6.719	0.5	0.5	98.64	5.6	5.4
334	1.168	6.817	2.2	2.8	100.62	28.7	51.2
415	1.136	7.011	4.7	1.6	104.61	61.4	71.1
424	1.118	7.121	99.3	84.8	106.96	1409	1555
228	1.116	7.133	49.2	45.2	107.24	700.2	757.4
406	1.095	7.273	3.5	2.3	110.33	55.2	68.4
431	1.092	7.289	0.2	0.2	110.71	2.8	3.4
501	1.091	7.300	7	5.5	110.95	105.7	126.1
0010	1.091	7.300	0.1	0.1	110.95	1.8	2.1
327	1.089	7.312	1.1	0.9	111.23	16.5	20.3
219	1.088	7.321	3.1	2.4	111.42	48	64.5
510	1.075	7.407	0.4	0.3	113.44	8.5	15.3
318	1.073	7.424	5.1	3.5	113.82	84.6	117.8
512	1.055	7.550	39.4	32.4	116.86	686	723.5
336	1.054	7.558	19.2	16.1	117.06	335.9	353.8
433	1.051	7.574	19.3	15.7	117.46	341	352.3
503	1.050	7.586	2.1	1.6	117.76	36.2	39.7
1110	1.050	7.586	3.3	2.5	117.76	57	62.4
426	1.017	7.832	0.1	0.1	124.23	1.8	2.1
521	1.015	7.848	4.8	3.8	124.66	102.9	112.9
2010	1.013	7.858	7.1	5.8	124.93	145.2	154.7
417	1.012	7.869	3	2.6	125.25	61.9	68.5
309	1.011	7.877	2.5	2.3	125.47	53.3	62.1
514	1.000	7.961	1.9	2	127.90	45.5	66.7
523	0.980	8.124	0.4	0.3	132.91	8.3	8.5
435	0.980	8.128	0.7	0.6	133.03	16.7	16.5
505	0.980	8.128	3.5	3.3	133.03	87.7	86.9
1011	0.977	8.150	0.6	0.6	133.76	17	13.4
440	0.969	8.219	12.8	10.3	136.08	358.7	363.3
408	0.967	8.234	25.2	21.5	136.59	718.9	733.6
442	0.954	8.348	0.2	0.2	140.75	9.1	6.7
2210	0.952	8.369	0.5	0.3	141.60	11.5	5.3
329	0.949	8.397	0.1	0	142.68	2.5	0
530	0.940	8.472	0.6	0.3	145.87	32.7	18.8
338	0.938	8.487	0.5	0.3	146.51	41.8	26.5