

Kristallographie

Johannes Hahn

Andrea Hanke

7. Mai 2019

1 Gruppentheorie

2 Kristalle

2.1 Definition (Kristalle):

Ein Kristall (auch Kristallgitter) ist eine Punktmenge $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^3$ (gedacht als die Menge aller Atome im Kristall), die ...

- a.) ... Translationssymmetrie hat, d.h. es gibt Vektoren $t_1, t_2, t_3 \in \mathbb{R}^3$ in drei unabhängige Richtungen, sodass immer, wenn $x \in \Lambda$ ein Punkt im Kristall ist, $x + k_1 t_1 + k_2 t_2 + k_3 t_3$ auch ein Punkt im Kristall ist für alle ganzen Zahlen $k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}$.
- b.) ... aus isolierten Punkten besteht, d.h. es gibt einen Mindestabstand $\delta > 0$, sodass sich keine zwei Punkte $x, y \in \Lambda$ näher als δ kommen: $x \neq y \implies \|x - y\| \geq \delta$.

2.2: Insbesondere bedeutet das, dass es nur abzählbar viele Punkte im Gitter gibt.

2.3 Definition:

Die Symmetriegruppe eines Kristallgitters Λ ist die Gruppe aller starren Bewegungen (=Isometrien), die das Gitter in sich selbst abbilden:

$$\text{Aut}(\Lambda) := \{ s \in \text{Isom}(\mathbb{R}^3) \mid s(\Lambda) = \Lambda \}$$

Nach Definition enthält $\text{Aut}(\Lambda)$ mindestens die drei Translationen $x \mapsto x + t_i$. Die Menge aller Translationen, die Λ in sich selbst abbilden, sind eine Untergruppe von $\text{Aut}(\Lambda)$.

2.4: Weil die Punkte in Λ einen Mindestabstand haben, ist die Translationsuntergruppe diskret, d.h. sie enthält eine Basis: Drei Translationen $\tau_1, \tau_2, \tau_3 \in \text{Aut}(\Lambda)$, sodass sich jede beliebige Translation $\tau \in \text{Aut}(\Lambda)$ auf eindeutige Weise als $\tau_1^{k_1} \circ \tau_2^{k_2} \circ \tau_3^{k_3}$ mit $k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}$ schreiben lässt.

Die Translationsuntergruppe ist also zur Gruppe $(\mathbb{Z}^3, +)$ isomorph.

2.5 Beispiel:

Umgekehrt: Wenn $v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{R}^3$ drei beliebige, linear unabhängige Vektoren sind, dann ist $\Lambda := \mathbb{Z}v_1 + \mathbb{Z}v_2 + \mathbb{Z}v_3 = \{k_1v_1 + k_2v_2 + k_3v_3 \mid k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}\}$ ein Gitter, dessen Translationsuntergruppe die drei Translationen $\tau_i := x \mapsto x + v_i$ als (eine mögliche von vielen) Basis hat.

2.6 Definition:

Es sei Λ ein Kristallgitter und T die Gruppe aller Translationen, die Λ invariant lassen. Eine Basiszelle von Λ (Z, A) ist ein (kompakter) Polyeder $Z \subseteq \mathbb{R}^3$ zusammen mit einer Punktmenge $A \subseteq Z$, sodass

- a.) ... die Translate von A ganz Λ überdecken, d.h. $\Lambda = \bigcup_{t \in T} tA$.
- b.) ... die Translate von Z ganz \mathbb{R}^3 überdecken, d.h. $\mathbb{R}^3 = \bigcup_{t \in T} tZ$.
- c.) ... die Translate von Z sind im wesentlichen disjunkt, d.h. $Z \cap tZ$ ist leer oder höchstens eine Seitenfläche von Z , wenn $t \in T \setminus \{1\}$ ist.

Eine Basiszelle des kleinstmöglichen Volumens heißt elementare Basiszelle des Gitters.

2.7: Da Z kompakt ist und Λ diskret, muss $A = Z \cap \Lambda$ endlich sein.