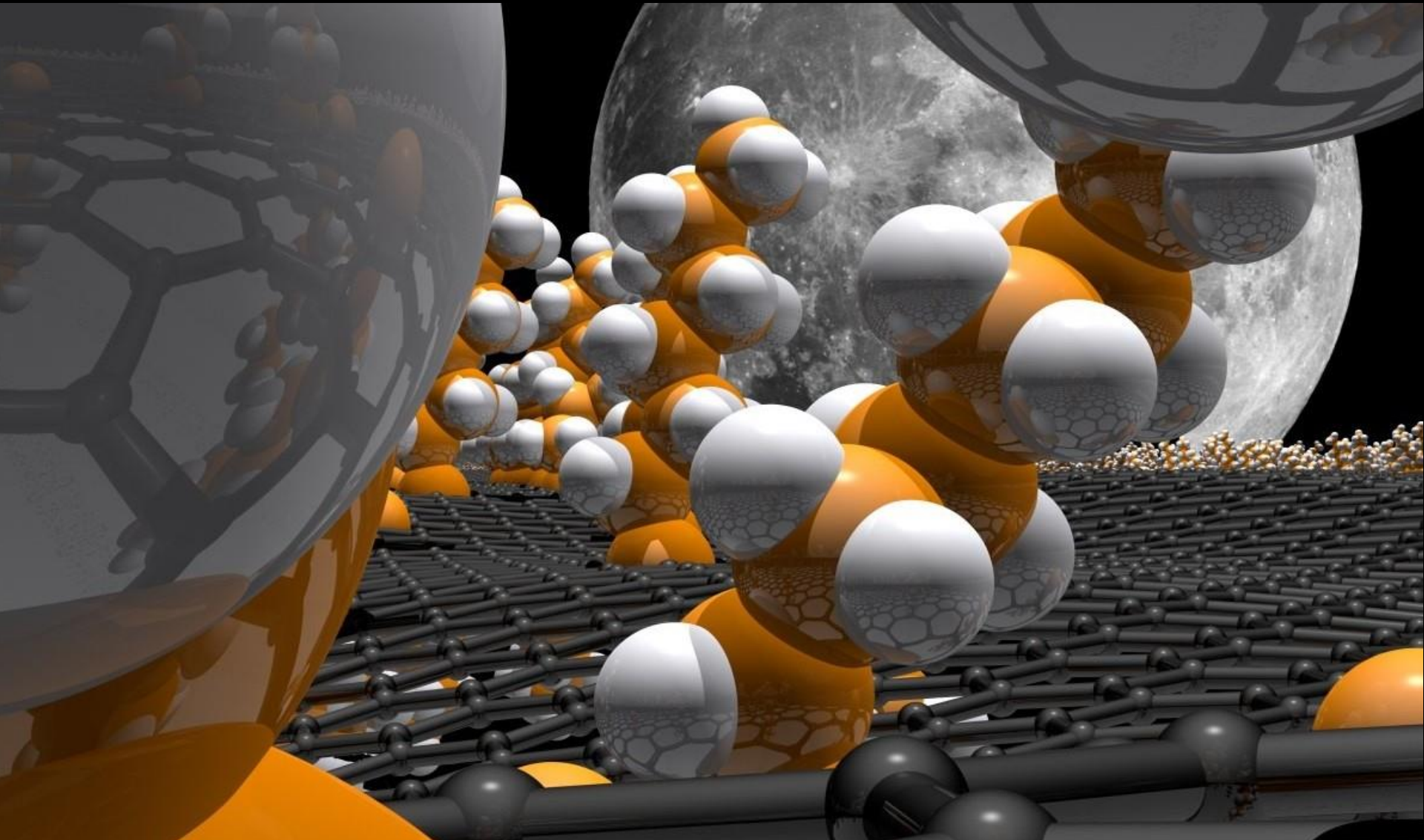


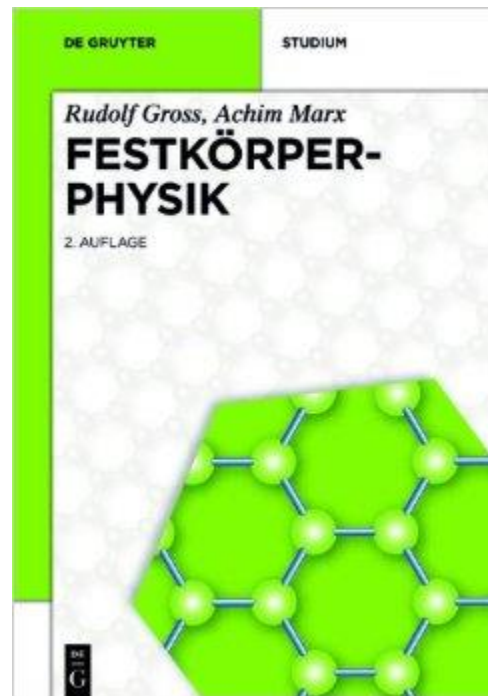
# Moleküle, Kerne, Teilchen, **Festkörper** - Physik IV

Prof. Dr. Michael Oestreich

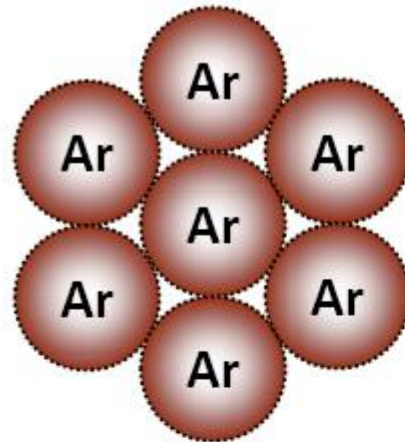


<b>0</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>	<b>Dynamik von Atomen in Kristallen</b>
<b>1</b>	<b>Bindungskräfte</b>	<b>5</b>	<b>Thermische Eigenschaften</b>
1.1	Van-der-Waals Bindung	<b>6</b>	<b>“Freie Elektronen im Festkörper</b>
1.2	Ionenbindung	<b>7</b>	<b>Elektronische Bänder</b>
1.3	Kovalente Bindung	<b>8</b>	<b>Halbleiter</b>
1.4	Metallische Bindung	<b>9</b>	<b>Dielektrische Eigenschaften</b>
1.5	Wasserstoffbrückenbindung	<b>10</b>	<b>Magnetismus</b>
<b>2</b>	<b>Kristallstruktur</b>	<b>11</b>	<b>Supraleitung</b>
2.1	Periodische Strukturen		
2.2	Einfache Kristallstrukturen		
2.3	Reale Kristalle		
2.4	Nicht-kristalline Festkörper		
2.5	Direkte Abbildung von Kristallstrukturen		
<b>3</b>	<b>Strukturanalyse</b>		
3.1	Reziproke Gitter		
3.2	Beugung		
3.3	Experimentelle Methoden		
			...

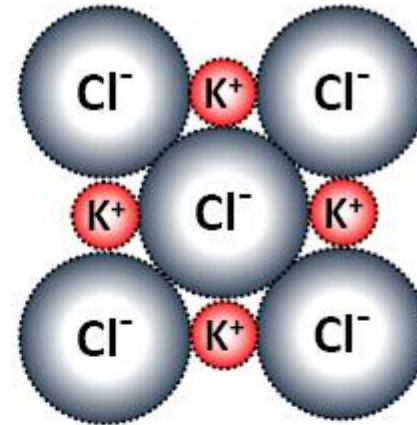
Rudolf Gross / Achim Marx  
„Festkörperphysik“  
De Gruyter, 2. Auflage  
54,95 € oder kostenfrei elektronisch bei der TIB



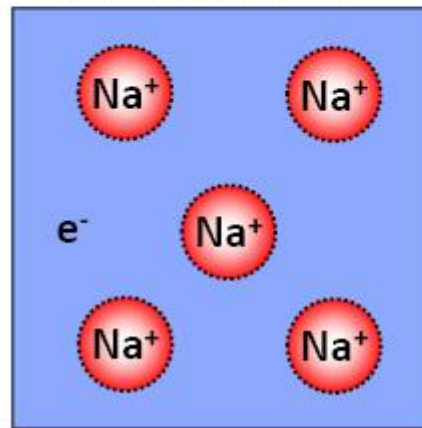
- Ibach / Lüth  
„Festkörperphysik“  
Springer, 7. Auflage, 49,95 €  
<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-85795-2>  
**knapp, modern, nicht fehlerfrei, preiswert**
- Siegfried Hunklinger  
„Festkörperphysik“  
Oldenbourg, 2. Auflage, 44,80 €  
**ausreichend ausführlicher, modern**
- Ch. Kittel  
„Einführung in die Festkörperphysik“  
Oldenbourg, 14. Auflage, 64,80 €  
**Klassiker mit Ergänzungen der modernen Festkörperphysik**
- Ashcroft / Mermin  
„Festkörperphysik“  
Oldenbourg, 3. Auflage, 74,80 €  
**ausführlich, Klassiker, anspruchsvoll, keine SI Einheiten**
- K. Kopitzki  
„Einführung in die Festkörperphysik“  
Teubner, Stuttgart, 6. Auflage, 46 €  
**kompakt**



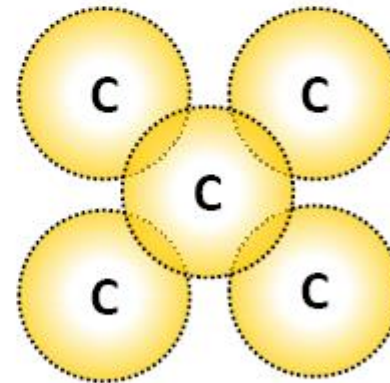
*Ar-Kristall  
(Van der Waals)*



*NaCl-Kristall  
(ionisch)*



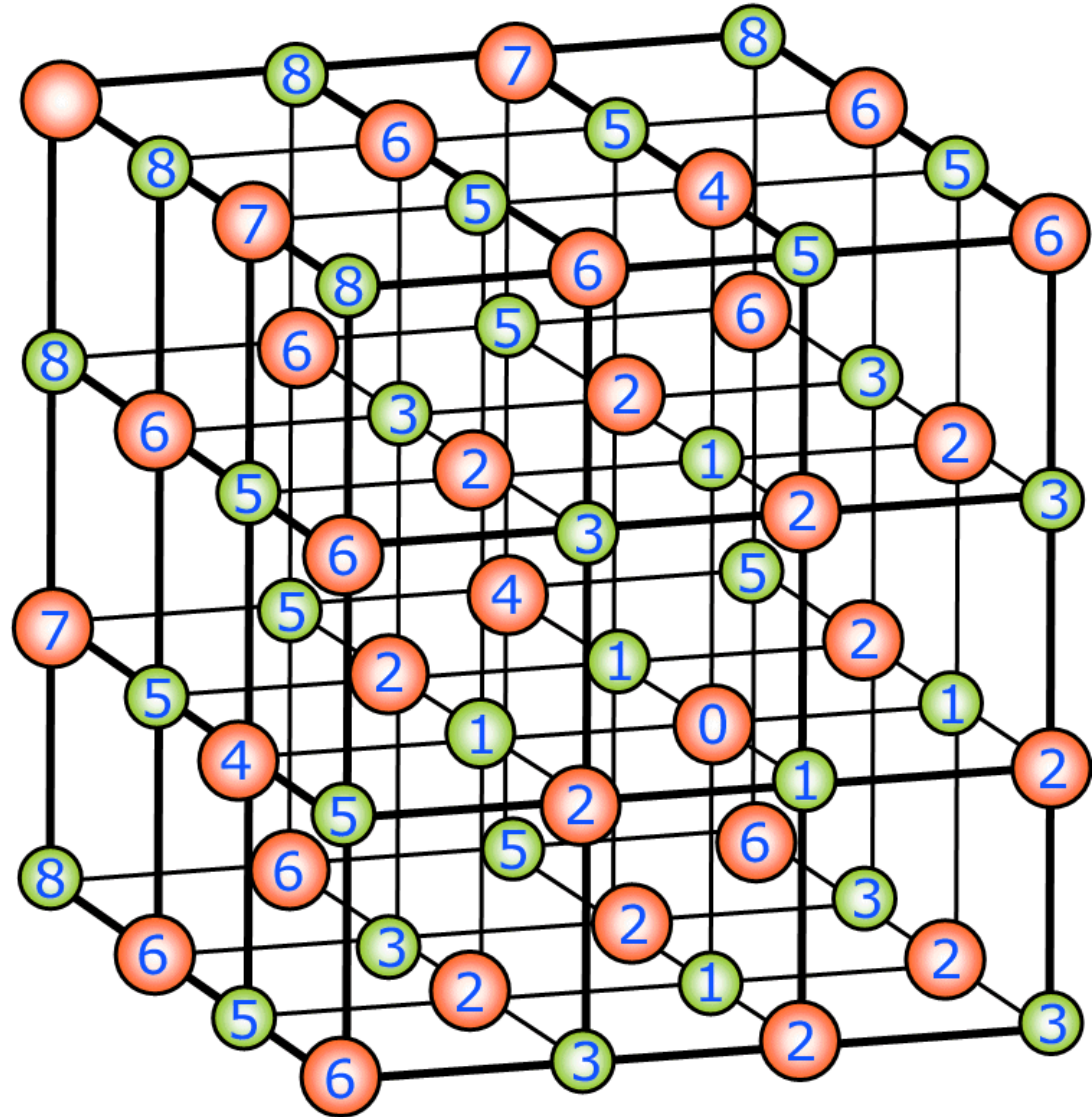
*Natrium  
(metallisch)*



*Diamant  
(kovalent)*



$$U_{\text{tot}} = \frac{N}{2} \sum_{i \neq j} \left[ \mp \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \lambda e^{-r_{ij}/\rho} \right]$$



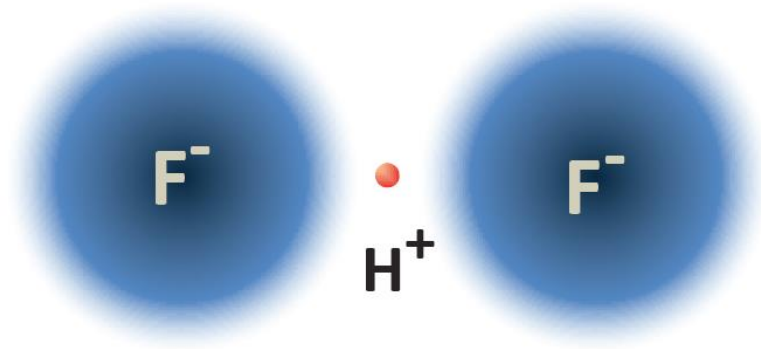


Abb. 3.23: Schematische Darstellung zur Wasserstoffbrückenbindung. Das Wasserstoffatom ist ohne Elektronenhülle als reines Proton gezeichnet.

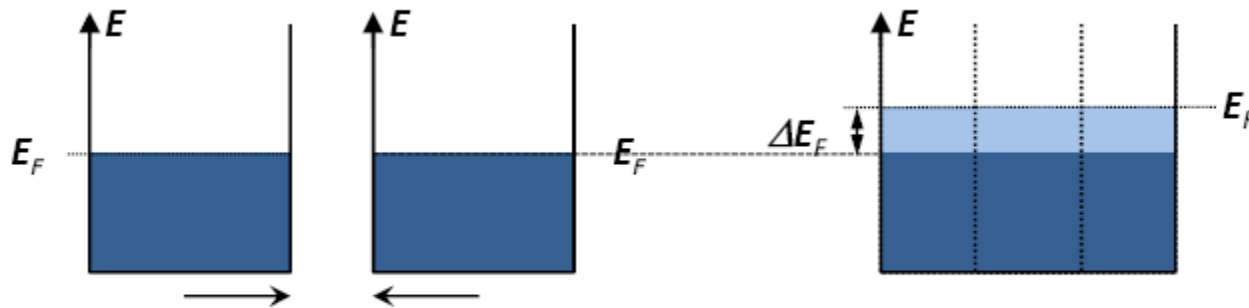


Abbildung 3.6: Zur Veranschaulichung des Pauli-Prinzips.

## Lennard-Jones-Potential

$$E_{\text{pot}}(R) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

	Ne	Ar	Kr	Xe
$\varepsilon$ (eV)	0.0031	0.0104	0.0104	0.0200
$\sigma$ (Å)	2.74	3.40	3.65	3.98
$R_0/\sigma$	1.14	1.11	1.10	1.09



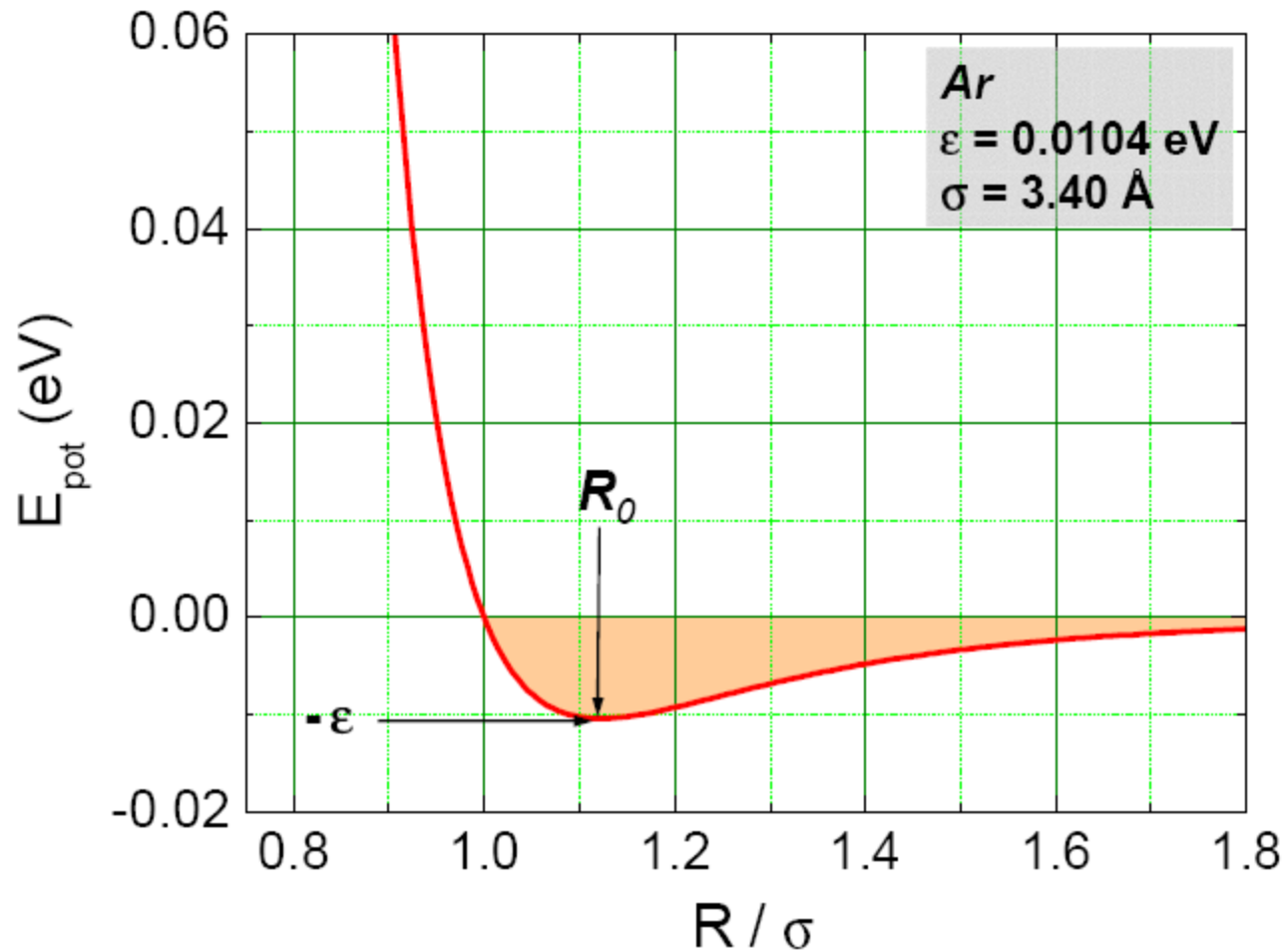
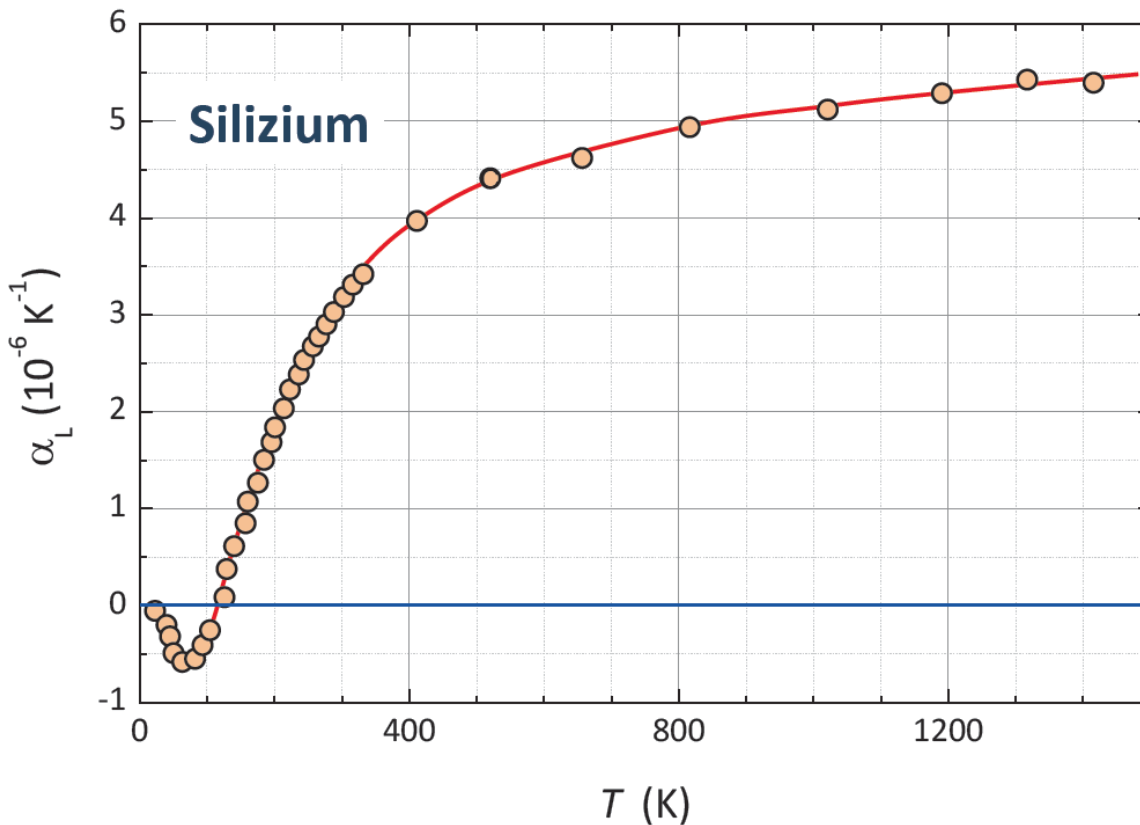


Abbildung 3.7: Das Lennard-Jones-Potenzial berechnet für  $\epsilon$  und  $\sigma$  von Argon.



**Abb. 6.13:** Temperaturabhängigkeit des Längenausdehnungskoeffizienten von Silizium (nach Y. Okada, Y. Tokumaru, J. Appl. Phys. 56, 314 (1984)).

Ein idealer Kristall ist eine unendliche Wiederholung von identischen Strukturelementen

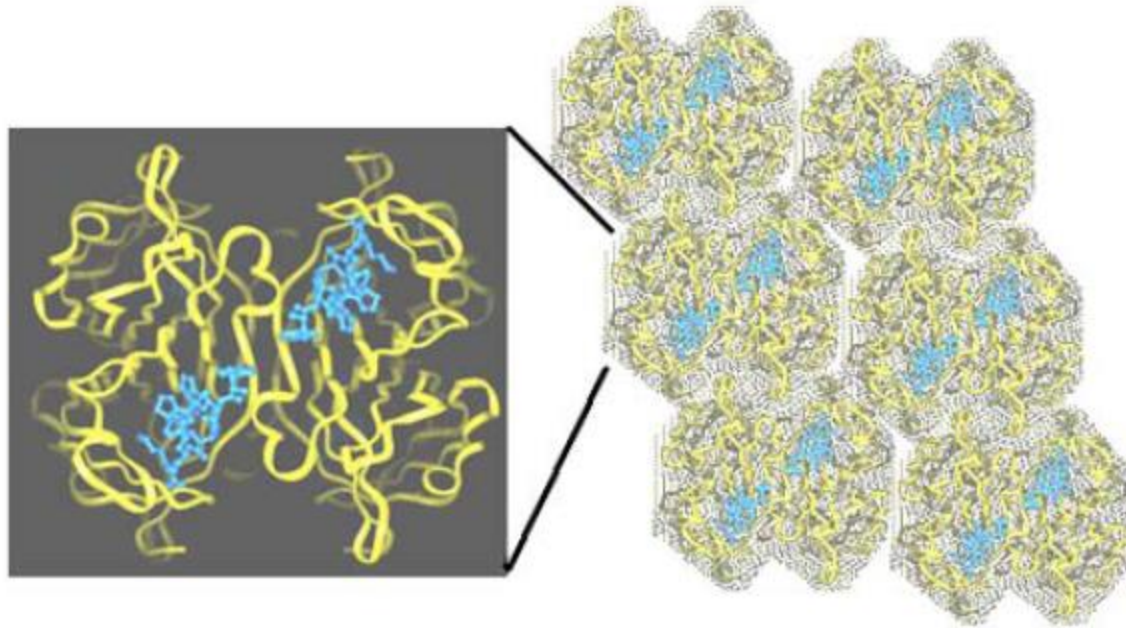
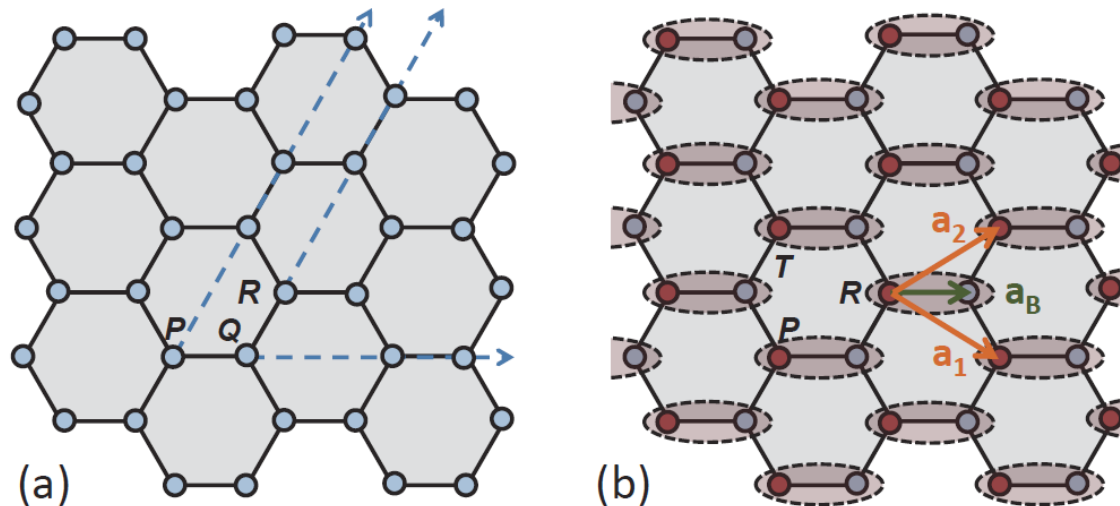


Abbildung 1.1: Die Basis eines Proteinkristalls (links) und deren Anordnung auf dem Gitter (rechts).

Ein idealer Kristall ist eine unendliche Wiederholung von identischen Strukturelementen



**Abb. 1.1:** (a) Die Schnittpunkte der Linien eines Bienenwabenmusters bilden kein Bravais-Gitter, da das Kristallgitter von Punkt  $P$  und  $Q$  aus betrachtet anders aussieht. (b) Nur die rot oder blau markierten Punkte bilden ein Bravais-Gitter. Auf diese muss man dann eine zweiatomige Basis bestehend aus jeweils einem roten und blauen Atom setzen. Die Vektoren  $a_1$  und  $a_2$  sind die primitiven Gittervektoren, der Vektor  $a_B$  gibt die Verschiebung der beiden Untergitter aus roten und blauen Kohlenstoffatomen an.

- Ein Bravais-Gitter ist ein unendliches Gitter von Raumpunkten mit einer Anordnung und Orientierung, die exakt gleich aussieht, egal von welchem Gitterpunkt wir das Gitter betrachten.
- Ein dreidimensionales Bravais-Gitter besteht aus allen Punkten

$$\vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$$\text{mit } |n_1|, |n_2|, |n_3| \in \mathbb{N}$$

- Bravais-Gitter beinhalten nur die Geometrie des Raumgitters

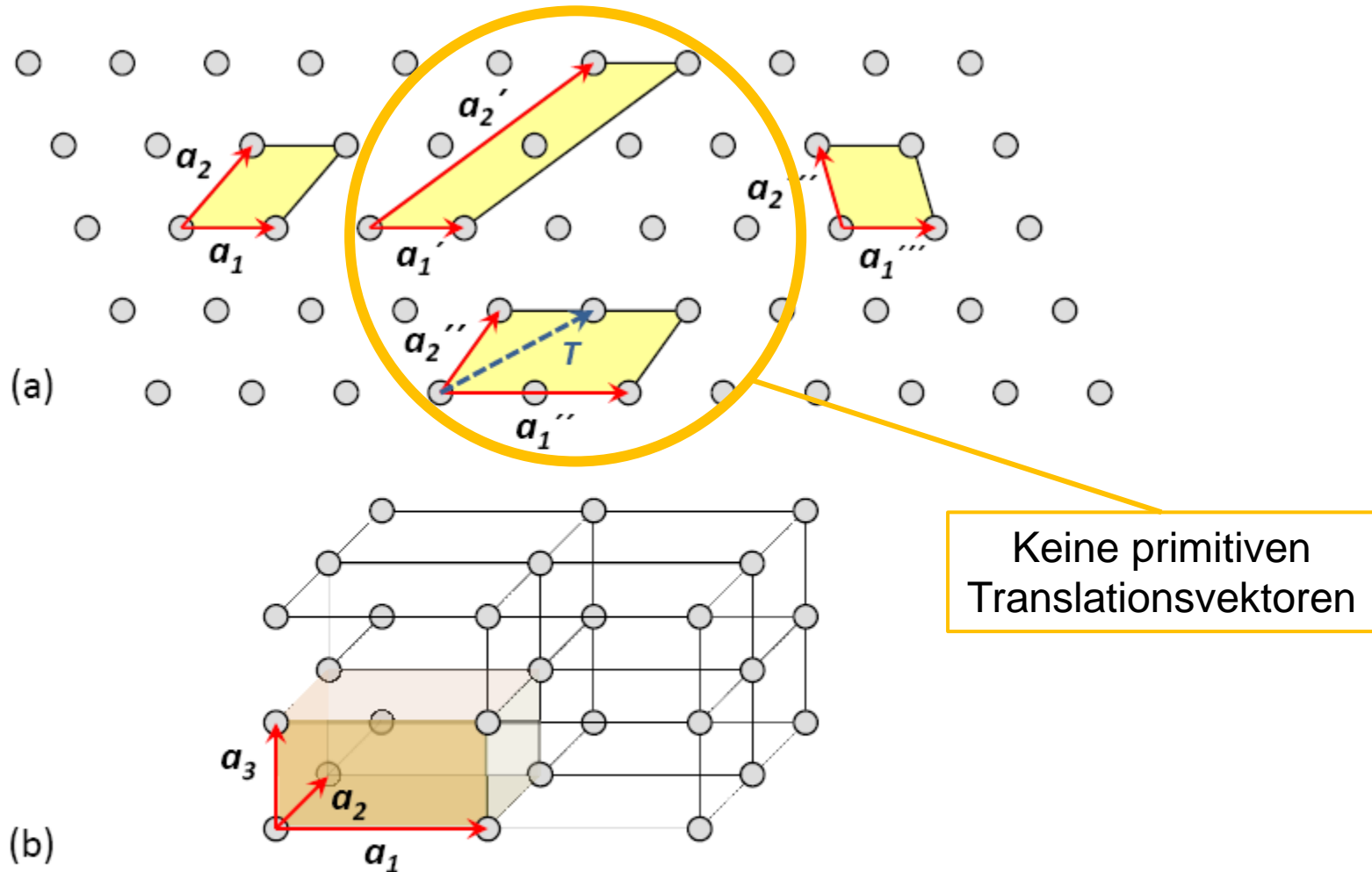


Abbildung 1.3: Gitterpunkte eines zweidimensionalen (a) und eines dreidimensionalen (b) Bravais-Gitters und



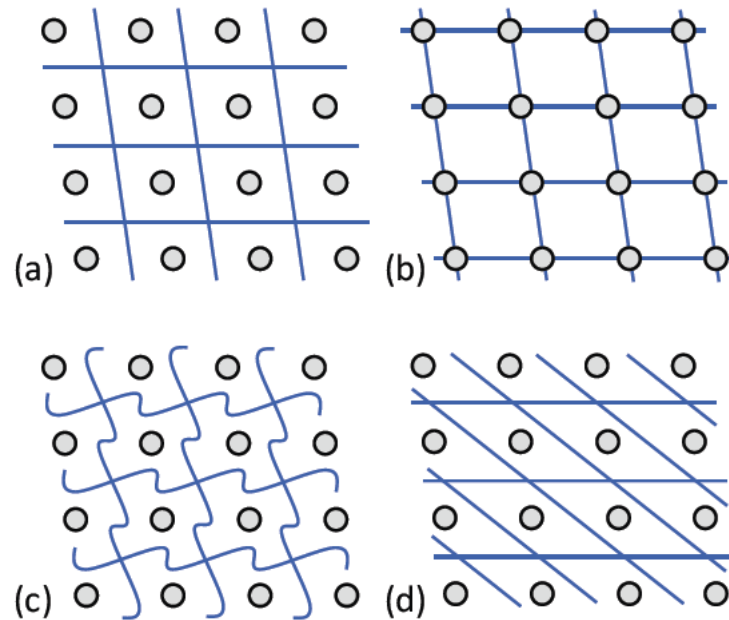
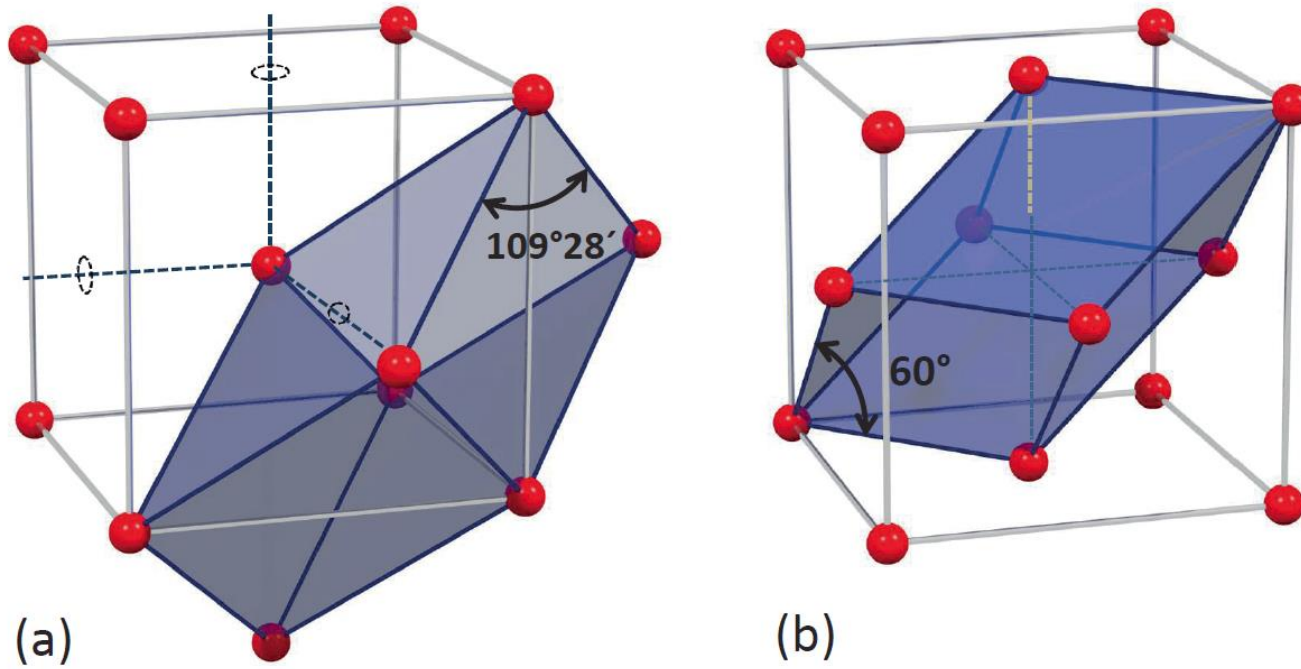


Abb. 1.3: Einige mögliche primitive Gitterzellen für ein zweidimensionales Bravais-Gitter.



**Abb. 1.4:** Primitive (Blautöne) und konventionelle Zelle (Würfel) für ein kubisch raumzentriertes (a) und ein kubisch flächenzentriertes (b) Bravais-Gitter.

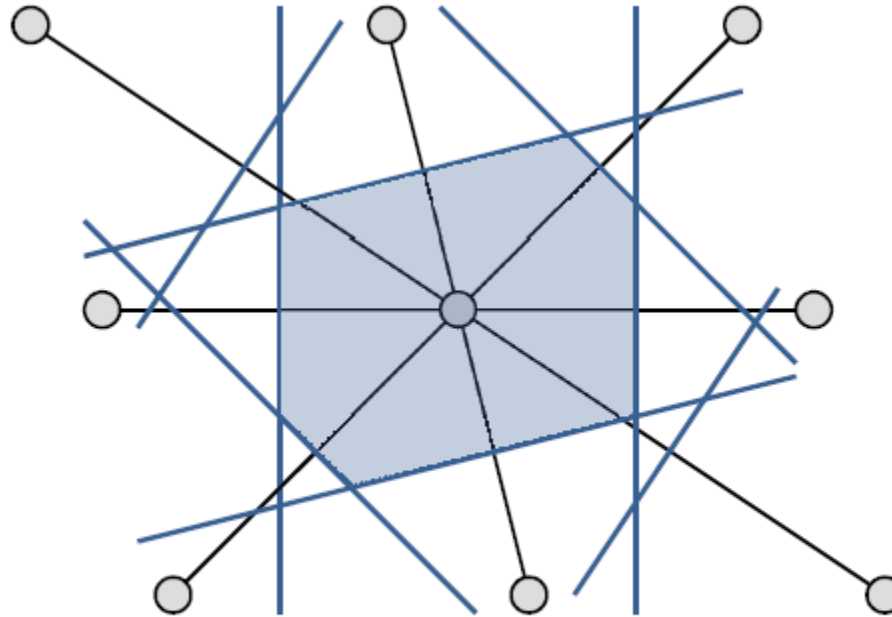


Abbildung 1.6: Die Wigner-Seitz-Zelle.



Abb. 1.6: Symmetrieoperationen in einem ein-dimensionalen Gitter.

1. die *Translationsgruppe*, die alle Symmetrieoperationen beinhaltet, bei denen kein ortsfester Punkt existiert, und
2. die *Punktgruppe*, die alle Symmetrieoperationen beinhaltet, bei denen mindestens ein Punkt ortsfest bleibt,

### 1. *Drehung um eine Achse:*

Rotationssymmetrie ist vorhanden, wenn Drehungen um eine bestimmte Achse die Kristallstruktur in sich überführen. Der triviale Fall ist eine Rotation um  $2\pi$ , er wird als Identität bezeichnet und mit dem Symbol 1 charakterisiert. Wir haben aber bereits diskutiert, dass Drehungen um  $2\pi/2$ ,  $2\pi/3$ ,  $2\pi/4$  und  $2\pi/6$  möglich sind. Wir sprechen dann von 2-, 3-, 4- und 6-zähligen Drehachsen, die wir mit den Symbolen 2, 3, 4 und 6 bezeichnen. Es kann streng bewiesen werden, dass für einen periodischen Kristall nur 2-, 3-, 4- und 6-zähligen Drehachsen möglich sind. Alle anderen Ordnungen von Drehachsen sind inkompatibel mit der Translationssymmetrie.

### 2. *Inversion:*

Die Inversionssymmetrie wird durch die Koordinatentransformation  $x' = -x$ ,  $y' = -y$ ,  $z' = -z$  beschrieben. Dies kann als eine **Punktspiegelung** an einem **Inversions-** oder **Symmetriezentrum** verstanden werden. Das Vorhandensein eines Inversionszentrums wird mit dem Symbol  $\bar{1}$  oder  $i$  charakterisiert.

### 3. *Spiegelung an einer Ebene:*

Bei der Spiegelung werden im Gegensatz zu einer Drehung nicht nur die Punkte auf einer Achse, sondern die Punkte auf einer ganzen Ebene festgehalten. Diese Symmetrioperation kann mathematisch durch eine Koordinatentransformation ausgedrückt werden. Für die Spiegelung an der  $yz$ -Ebene gilt zum Beispiel die Transformation:  $x' = -x$ ,  $y' = y$ ,  $z' = z$ . Das Vorhandensein einer Spiegelebene in einer Kristallstruktur wird durch das Symbol  $\bar{2}$  oder  $m$  charakterisiert.

## Weitere Operationen können aus 1. – 3. abgeleitet werden, z.B.

### 4. *Drehinversion*:

Wir können die Inversion mit einer Drehung um eine Achse durch das Inversionszentrum verknüpfen, um die neue Symmetrieoperation der Drehinversion zu erhalten. Sie wird charakterisiert durch die Symbole  $\bar{1}$ ,  $\bar{2}$ ,  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$  und  $\bar{6}$ . Da das Vorhandensein eines Inversionszentrums immer mit einer einzähligen Drehinversionsachse zusammenfällt, das heißt  $i = \bar{1}$  gilt, wird das Symbol  $i$  meist nicht verwendet. Ferner kann die Spiegelung an einer Ebene durch eine *Drehinversion* um  $180^\circ$ , d. h. durch eine Drehung um  $2\pi/2$  und anschließende Inversion, realisiert werden. Da also  $m = \bar{2}$  gilt, wird auch das Symbol  $m$  oft nicht verwendet.

### 5. *Drehspiegelung*:

Wir können eine Drehung mit anschließender Spiegelung an einer Ebene senkrecht zur Drehachse verknüpfen.  $S_1$ , d. h.  $n = 1$ , entspricht einer Drehung um  $2\pi$ , die von einer Spiegelung gefolgt wird. Dies ist natürlich identisch mit einer einfachen Spiegelung, wobei die Spiegelebene senkrecht zur Drehspiegelachse erläuft.  $S_1$  ist also kein neues Symmetrieelement sondern die altbekannte Spiegelung. Bei  $S_2$ , d. h.  $n = 2$ , folgt die Spiegelung auf eine Drehung um  $\pi$ , woraus wiederum ein schon bekanntes Symmetrieelement, nämlich die Inversion resultiert.  $S_3$  bedeutet eine Drehung um  $2\pi/3$ , die von einer Spiegelung gefolgt wird. Das Ergebnis entspricht einer 3-zähligen Achse, auf der eine Spiegelebene senkrecht steht. Bei  $S_4$  erfolgt die Drehung um  $2\pi/4$  gefolgt von einer Spiegelung. Hieraus ergibt sich ein neues Symmetrieelement, das z. B. bei einem Tetraeder vorliegt.  $S_6$  (Drehung um  $2\pi/6$  und Spiegelung) entspricht zwar dem Vorliegen einer dreizähligen Drehachse mit zusätzlichem Inversionszentrum, wird aber trotzdem als eigenes Symbol eingeführt und verwendet. Es ist ein sehr wichtiges Symmetrieelement der anorganischen Chemie, das bei Oktaedern vorliegt.



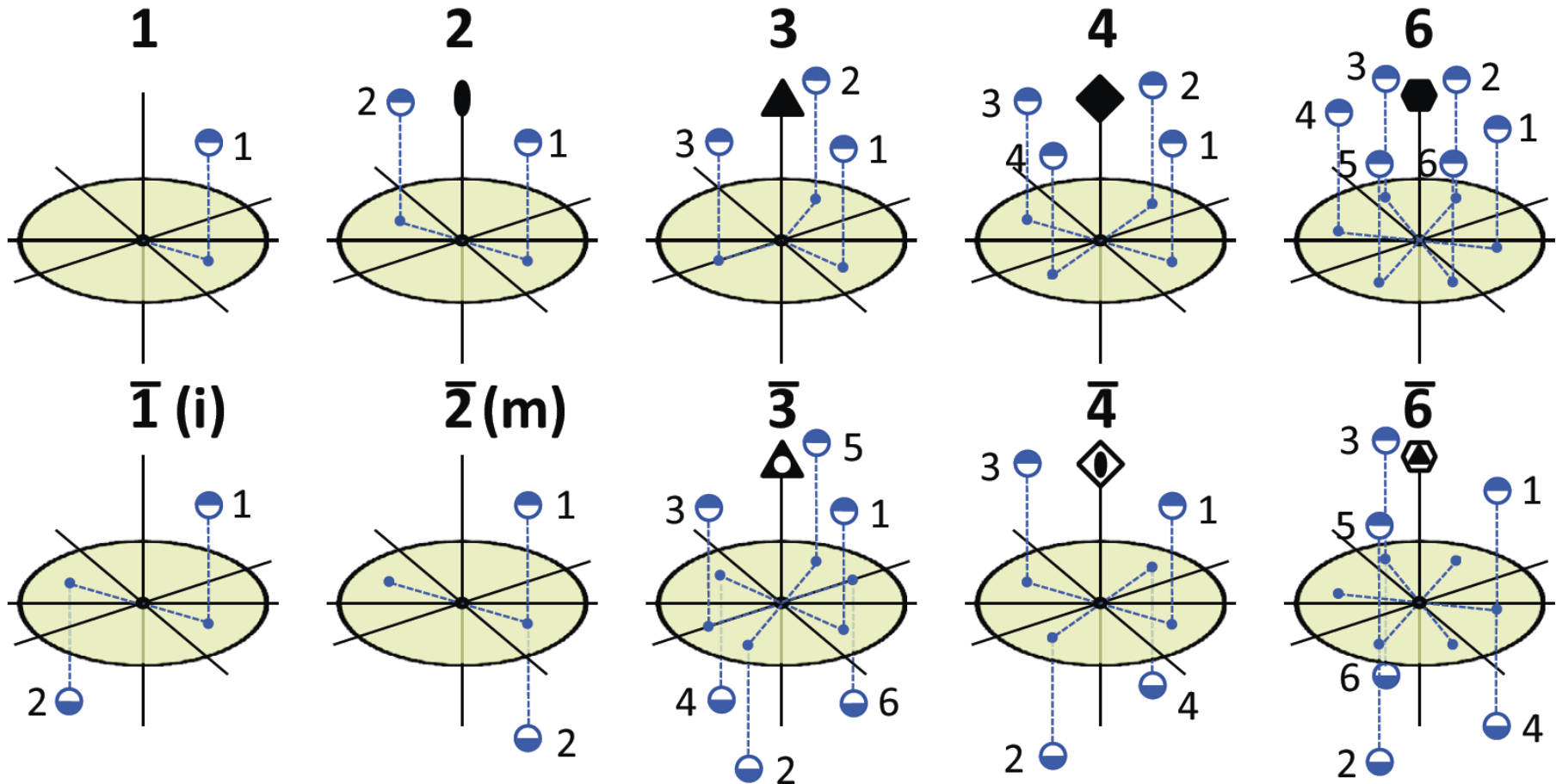


Abb. 1.7: Zur Veranschaulichung der zehn Symmetrioperationen der Punktgruppe für ein dreidimensionales System. Es wird die in der Kristallographie übliche Symbolik verwendet.

Für dreidimensionale Gitter ist die Bildung von Symmetriegruppen aus den 10 Symmetrieoperationen der Punktgruppe genau auf 32 Möglichkeiten beschränkt.

**Man sagt, es existieren 32 Kristallklassen**

**Tabelle 1.1:** Zusammenstellung der 32 Kristallklassen. Für die Symbolik wird sowohl die Nomenklatur nach Hermann und Mauguin sowie nach Schoenflies verwendet.

#	Kristallsystem	Hermann und Mauguin		Schoenflies
		Kurzsymbol	Langsymbol	
1 2	triklin	$\frac{1}{1}$	$\frac{1}{1}$	$C_1 C_i$
3 4 5	monoklin	2 m 2/m	121 1m1 1 2/m 1	$C_2 C_s C_{2h}$
6 7 8	orthorhombisch	222 mm2 mmm	222 mm2 2/m 2/m 2/m	$D_2 C_{2v} D_{2h}$
9 10 11 12 13 14 15	tetragonal	$\frac{4}{4}$ 4/m 422 4mm $\frac{4}{2}m$ 4/mmm	411 $\frac{4}{4}$ 4/m 422 4mm $\frac{4}{2}m$ 4/m 2/m 2/m	$C_4 S_4 C_{4h} D_4 C_{4v} D_{2d} D_{4h}$
16 17 18 19 20	trigonal	$\frac{3}{3}$ 32 3m $\frac{3}{3}m$	$\frac{3}{3}$ 32 3m $\frac{3}{3} 2/m$	$C_3 C_{3i} D_3 C_{3v} D_{3d}$
21 22 23 24 25 26 27	hexagonal	$\frac{6}{6}$ 6/m 622 6mm $\frac{6}{2}m$ 6/mmm	$\frac{6}{6}$ 6/m 622 6mm $\frac{6}{2}m$ 6/m 2/m 2/m	$C_6 C_{3h} C_{6h} D_6 C_{6v} D_{3h} D_{6h}$
28 29 30 31 32	kubisch	23 $m\bar{3}$ 432 $\frac{4}{3}m$ $m\bar{3}m$	23 $m\bar{3}$ 432 $\frac{4}{3}m$ 4/m $\bar{3}$ 2/m	$T T_h O T_d O_h$

	Symbol	Bedeutung
Klassifizierung nach Hauptdrehachsen und Spiegelebenen	$C_n$	$(n = 2, 3, 4, 6)$ , $n$ -zählige Drehachse
	$S_n$	$n$ -zählige Drehinversionsachse
	$D_n$	$n$ -zählige Drehachse senkrecht zu einer Hauptdrehachse
	$T$	4 drei- und 3 zweizählige Drehachsen wie beim Tetraeder
	$O$	3 vier- und 4 dreizählige Drehachsen wie beim Oktaeder
	$C_i$	Inversionszentrum
	$C_s$	Spiegelebene
zusätzliche Symbole für Spiegelebenen	$h$	horizontal = senkrecht zur Drehachse
	$v$	vertikal = parallel zur Drehachse
	$d$	diagonal = parallel zur Hauptdrehachse in der Ebene, die die zweifachen Drehachsen halbiert

Tabelle 1.2: Die Schoenflies Notation für die Punktgruppen ( $C$  steht für "cyclic",  $D$  für "dihedral" und  $S$  für "Spiegel").

	Bravais-Gitter (kugelsymmetrische Basis)	Kristallstrukturen (Basis mit beliebiger Symmetrie)
Punktgruppe	7	32
Raumgruppe	14	230

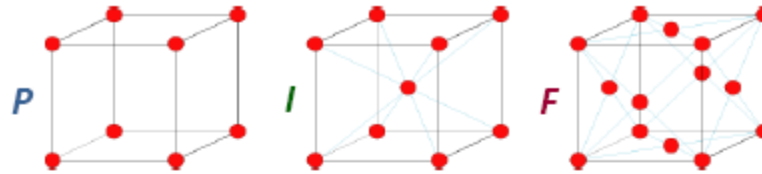
Abbildung 1.12: Die kristallographischen Punkt- und Raumgruppen.

Ein Festkörperphysiker lernt nicht alle 230 Raumgruppen auswendig,  
er muss nur von ihrer Existenz wissen!

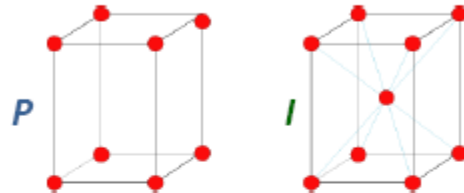
## Kristallsystem

## zugehörige Bravais-Gitter

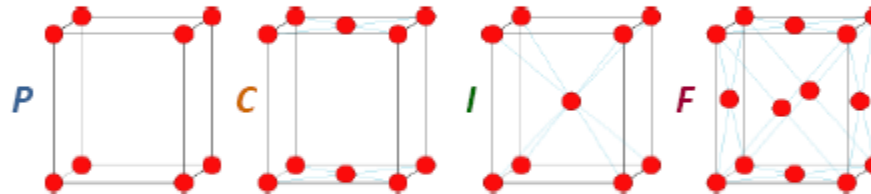
### 1 kubisch



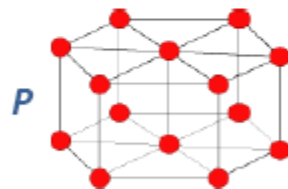
### 2 tetragonal



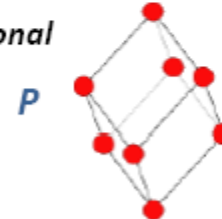
### 3 rhombisch



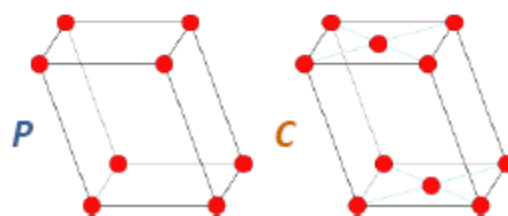
### 4 hexagonal



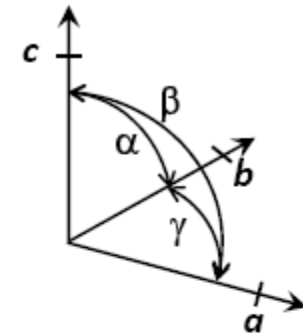
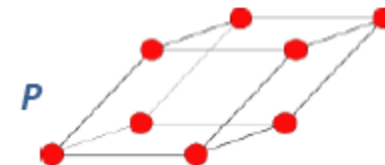
### 5 trigonal



### 6 monoklin



### 7 triklin



4 Arten von Einheitszellen:

- $P$  = primitiv
- $I$  = raumzentriert
- $F$  = flächenzentriert
- $C$  = basiszentriert

Abbildung 1.10: Die 14 Bravais-Gitter.

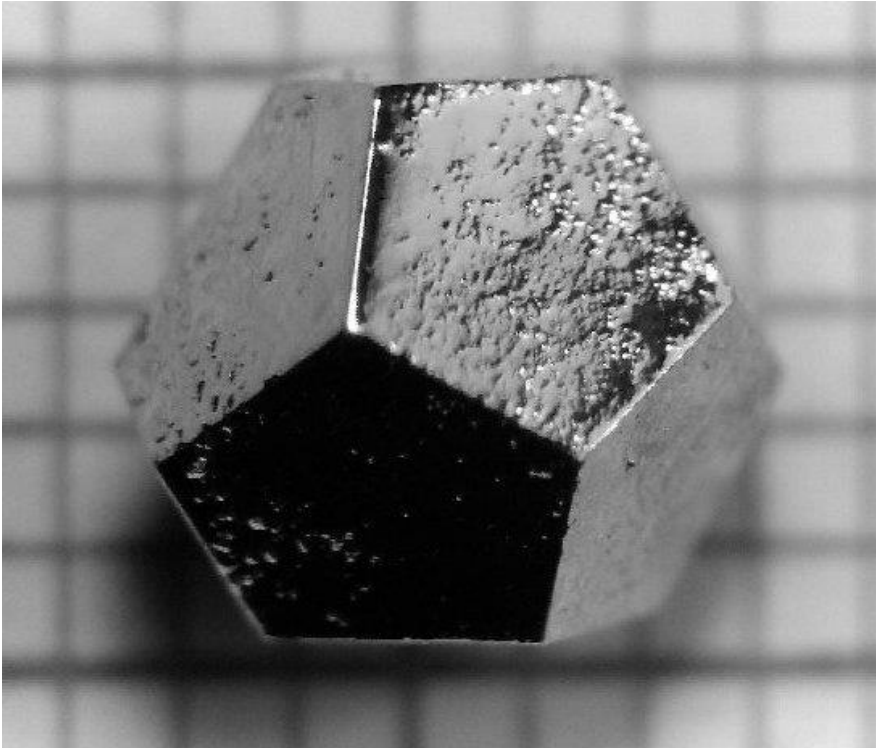
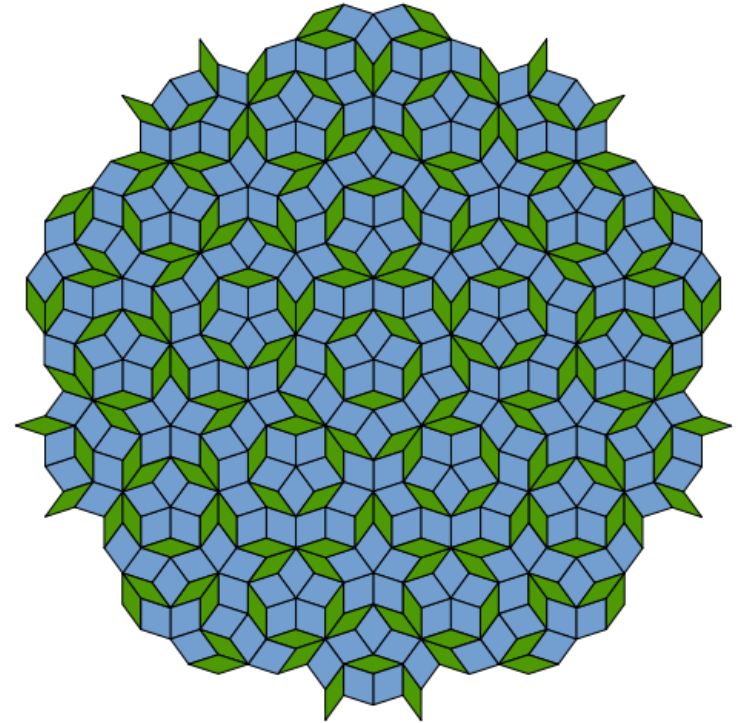


Foto eines Ho-Mg-Zn-Quasikristalls



Eine sog. Penrose-Parkettierung