Scriptum

# Moderne Experimentalphysik II

gelesen von Martin Wegener WS2013/14

GeTEXt von J. Müller

# Inhaltsverzeichnis

**1 Kristalline, quasikristalline und amorphe Festkörper 2**

1.1 Das periodische Gitter im Ortraum . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 2

1.1.1 Einführung . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 2

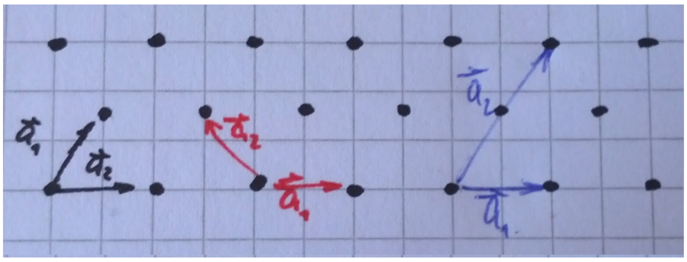
1.1.2 Einfache Kristallstrukturen und ihre Bindung . . . . . . . . . . 4

22.10.2013

# 1 Kristalline, quasikristalline und amorphe Festkörper

## 1.1 Das periodische Gitter im Ortraum

### 1.1.1 Einführung



24.10.2013

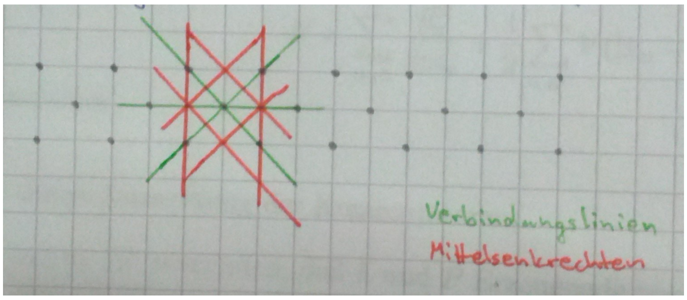
d.h. von den Punkten $\vec{r}$, $\vec{r}\,'$ sieht das Gitter gleich aus wenn gilt

$$\boxed{\vec{r}\,' = \underbrace{\vec{r} + u\vec{a_1} + v\vec{a_2} + w\vec{a_3}}_{\textit{Gittertranslation } \vec{T}};\ u, v, w \in \mathbb{Z}}$$

Die Wahl von $\vec{a_1}$, $\vec{a_2}$ und $\vec{a_3}$ ist *nicht* eindeutig. Man bezeichnet die Wahl als *primitiv*, wenn durch $\vec{T}$ *alle* gleichartigen Punkte dargestellt werden können. Eine *primitive Elementarzelle* hat das kleinste Volumen des aufgespannten Parallelepipels

$$V = |(\vec{a_1} \times \vec{a_2}) \cdot \vec{a_3}|$$

Die *Wiegner-Seitz-Zelle* ist eine spezielle primitive Elementarzelle. Sie hat folgende Konstruktionsvorschrift




Jeder Gitterpunkt kann mit einer Basis von Atomen besetzt werden.

$$\boxed{\text{Kristallstruktur} = \text{Gitter} + \text{Basis}}$$


Ein Kristall zeichnet sich durch seine *Symmetrien* aus:

- Translationen (s.o.)
- Spiegelungen
- Drehsymmetrien

*Definition*: Eine Drehachse, bei der der Kristall nach Drehung um den Winkel $^{2\pi}/_{n}$ ($n \in \mathbb{N}$) in sich selbst übergeht, heißt *n-zählige Drehachse*
*Behauptung*: $n = 1, 2, 3, 4, 6$; sonst keine Werte möglich
*Beweis*:


$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ ist Translationsvektor}$$

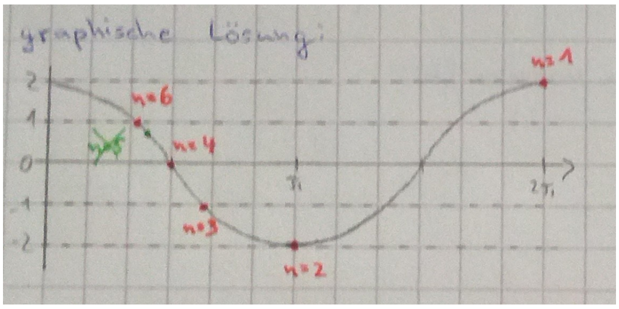
$$\left.\begin{aligned} a_+ &= \begin{pmatrix} \cos(^{2\pi}/_{n}) \\ \sin(^{2\pi}/_{n}) \end{pmatrix} \\ a_- &= \begin{pmatrix} \cos(^{2\pi}/_{n}) \\ -\sin(^{2\pi}/_{n}) \end{pmatrix} \end{aligned}\right\} \begin{array}{l} \text{ist ein blablabla} \\ \text{aber auch ein blablabla} \end{array}$$

$\Rightarrow$ auch $\vec{a_+} + \vec{a_-}$ ist ein Gittervektor $= a \begin{pmatrix} \cos(^{2\pi}/_{n}) \\ 0 \end{pmatrix}$. Wenn $\vec{a}$ kleinster Translationsvektor ist, muss gelten

$$\vec{a_+} + \vec{a_-} = m\vec{a}; m \in \mathbb{Z}$$

$$\Rightarrow \boxed{\underbrace{2\cos(^{2\pi}/_{n})}_{\text{Wann ist dies eine ganze Zahl?}} \quad = m}$$

*graphisch*:




| $n$ | $2\cos(^{2\pi}/_{n})$ |
|---|---|
| 1 | 2 |
| 2 | -2 |
| 3 | -1 |
| 4 | 0 |
| 5 | 0,61 |
| 6 | 1 |
| 7 | 1,25 |
| ⋮ | ⋮ |

$\Rightarrow n \in 1, 2, 3, 4, 6$ q.e.d.

In 3D existieren 14 verschiedene Raumgitter, die man als *Bravais-Gitter* bezeichnet. Diese können in sieben verschiedene *Kristallsysteme* eingeordnet werden.

29.10.2013 BILD POWERPOINTFOLIE

Häuufig möchte man Netzebenen bzw. Netzebenenscharen kennen. $\Rightarrow$ Miller'sche Indizes

*Definition*: Gegeben seien die Kristallachsen $\vec{a_1}$, $\vec{a_2}$, $\vec{a_3}$ (nicht unbedingt kartesisch, nich unbedingt primitiv). Die Ebene sei aufgespannt durch die drei Vektoren $n_1\vec{a_1}$, $n_2\vec{a_2}$, $n_3\vec{a_3}$; $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}$

BILD

Die (kleinsten) ganzen Zahlen, die sich verhalten wie die Kehrwerte von n1, n2, n3 bilden die Miller'schen Indizes. *Beispiel*: $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{1}\right) \Rightarrow (3, 2, 6)$ FEHLT WAS Meist lässt man die Kommata weg, also "(326)". Negative Werte werden druch Balken dargestellt, also z.B $(32\overline{6})$. Wird eine Achse nicht geschnitten (ist also der Achsenabschnitt = inf), so ist der zugehörige Miller'sche Index = 0. *Beispiel*:

BILD BILD

### 1.1.2 Einfache Kristallstrukturen und ihre Bindung

Natriumchloridstruktur:

*Beispiel*: NaCl, KCl, MnO, KBr, ...

*Bravais-Gitter*: kubisch flächenzentriert (fcc)

*Basis*: ein Na und ein Cl (beim NaCl) *Bindung*: ionisch

Na hat die $e^-$-Konfiguration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ Cl $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ $\Rightarrow$ gibt das Na ein Elektron an das Cl ab, so weisen beide abgeschlossene Schalen auf. Es entsteht ein $Na^+$ und $Cl^-$ Ion, die sich auf Grund der Coulombkraft anziehen

Wir betrachten $N = N_A$ Ionenpaare. Es v die Coulombenergie

$$U^c = N \sum_{j,j\not{i}} \frac{\pm e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

$$+\text{entspricht}$$

$$-\text{entspricht}$$