

Contents

2	Struktur der Kristalle	2
2.0.1	Punktgruppen (min 1 Punkt fest)	2
2.1	Einfache Kristallgitter	3
2.2	Wigner-Seitz-Zelle	3

Chapter 2

Struktur der Kristalle

Kristalle entsprechen dem Grundzustand der Festkörper. Lehre – Kristallographie;

Symmetrie: alle Eigenschaften eines Systems, die nach einer bestimmten Änderung (Transformation) “unverändert erscheinen”

Gruppentheorie: Symmetriegruppen: ist eine Menge aller Kongruenzabbildungen die das Objekt auf sich selbst abbilden.

2.1 Punktgruppen (min 1 Punkt fest)

→ 32 Symmetriegruppen (Punktgruppen) z.B Drehung um eine Drehachse

pic

Spiegelung an einer Spiegelebene

pic

Punktspiegelung

pic

1,2,3,4,6 Drehachse; mspiegelung; $\bar{1}$ Punktspiegelung

pic

Inversion + Drehung

pic $\bar{2}$

Raumgruppen (translative Symmetrieeoperationen) → J.S. Fedorov

Gleitspiegelebene (retlection+translation)

pic

Schraubenachse (screw symmetry)

pic

Kristallstruktur: Gitter + Basis

Gitter als Umgebung

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$$

Translationsvektor (Gittervektor):

$$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ sind Basisvektoren. Gitterkonstanten: $|\vec{a}| = a, |\vec{b}| = b, |\vec{c}| = c$

pic

Die Vektoren spannen eine Elementarzelle auf. Das Volumen ergibt sich aus dem Spatprodukt

$$V = \vec{a}[\vec{b} \times \vec{c}]$$

Kleinstmögliche E.Z. → primitive Elementarzelle (Einheitszelle).

Bravais-Gitter → besteht nur aus einer Teilchensorte.

	Kristallstruktur	Bravais-G.
Anzahl von Punktgruppen	32(3D) 10(2D)	7 Kristallsyst.
Anzahl v. Raumricht	230(3D) 17(2D)	14 Bravais G.

Kristallsysteme: (Syngonien)

1. kubisches K.
2. tetragonales K.
3. rhombisches K.

4. Rechtwinklig ende
5. hexagonale
6. trigonale
7. monoklines
8. triklines
9. Schiefwinklig ende

2.2 Einfache Kristallgitter

(K_z = Koordinationszahl, zahl der nächsten Nachbarn) (p.V. Packungsverhältniss)

- **sc** \rightarrow "simple cubic" $p.V. \approx 0,52$; In der natur so gut wie nicht zu finden
2-Atom Basis (0,0,0) oder $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ CsCl
- **bcc** = "body centered cubic". Kubisch raumzentrierte Gitter; 30% aller Elemente; $p.V. \approx 0,68$
Metalle: Na, Fe, Cr, ... (0,0,0) oder $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
- **fcc** = "face centered cubic" = kubisch flächenzentrierte Gitter
Gitterpunkte (0,0,0) oder $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ oder $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ oder $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ $p.V. \approx 0,74$ Höchste Basisverhältniss 1
Atom Basis, z.B Metalle Cu, Ag, Au, Ni, ... 30% aller Elemente NaCl \rightarrow fcc mit 2-Atom. Basis (0,0,0)
oder $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ Diamant C \rightarrow fcc mit 2-At. Basis (0,0,0) oder $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ 2 unterschiedliche Atome z.B ZnS;
Strukt.v.Zinkblende; Mischung von Kovalenter Bindung und Ionenbindung.

d) Hexagonal dichteste Kugelpackung (hcp=hexagonal close packed) 35% aller Elemente; $p.V. \approx 0,74$

pic1 (folie: Kugelpackung: hexagonal oder kubisch? hcp und fcc)

z.B. Mg, Ti, Co, ...

pic2 (folie: Primitive Elementarzelle)

2.3 Wigner-Seitz-Zelle

pic3 (folie: Zur 2D Konstruktion einer Wigner-Seitz-Zelle)

E.Z. mit Gitterpunkt im Zentrum der Elementarzelle; lückenlose bedeckung der Fläche (2D) oder Volumen (3D); Polyeder mit dem kleinsten Volumen, das den Gitterpunkt ein schließt.

pic4 (folie: 3D Wigner-Seitz-Zellen)

Wigner-Seitz-Zelle ist wichtig für Reziprokes Gitter