

11. Kristallstrukturen

- Welt ist räumlich (3D)
- Kampf mit Geometrie
- viele Definitionen

11.1 Punktgitter, Elementarzelle, Basis

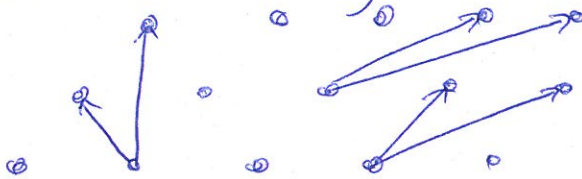
Def: Das 3D Bravais-Gitter besteht aus allen Punkten mit Ortsvektoren (Gittervektoren)

$$\vec{R}_{[n_1 n_2 n_3]} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z} \quad (11.1)$$

$\vec{a}_i$ sind die fundamentalen Gittervektoren und linear unabhängig. Sie spannen das Gitter auf (Punktgitter)



- Die Wahl der fundamentalen Gittervektoren ist nicht eindeutig



- auf jeden Gitterpunkt $\vec{R}_{[n_1 n_2 n_3]}$ ist die Umgebung identisch = Translationssymmetrie
- die fundamentale Atomgruppe (Basis) wird an jeden Gitterpunkt $\vec{R}_{[n_1 n_2 n_3]}$ angebracht



Kristallstruktur =
= Gitter + Basis

Lageparameter der Atome in der Basis:
für jedes Atom α

$$\vec{r}_\alpha = \lambda_\alpha \vec{a}_1 + \mu_\alpha \vec{a}_2 + \nu_\alpha \vec{a}_3 \quad 0 \leq \lambda_\alpha, \mu_\alpha, \nu_\alpha < 1$$

$$\vec{R}_{[n_1 n_2 n_3]} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 + \vec{r}_\alpha \quad (11.2)$$

auch $[uvw] = u \vec{a}_1 + v \vec{a}_2 + w \vec{a}_3 \quad u, v, w \in \mathbb{Z} \quad (11.3)$

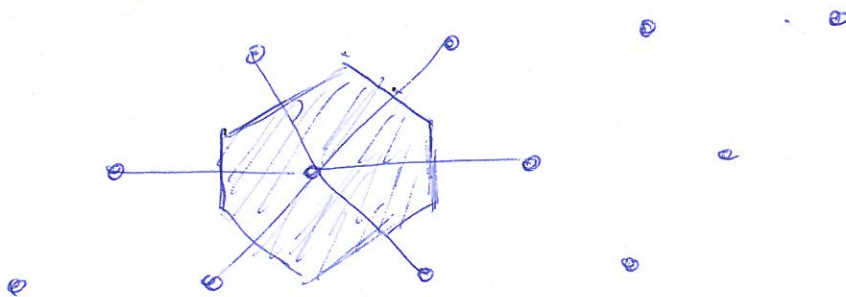
- man kann jeden Gitterpunkt ein Volumen zuordnen, so daß das Gitter lückenlos überdeckt wird
Dieser Bereich wird Einheitsvolumen, Einheitszelle oder Elementarzelle genannt

- ist die Einheitszelle so gewählt, daß sie das kleinstmögliche Volumen abdeckt, so nennt man sie primitive Einheitszelle
⇒ sie hat nur einen Gitterpunkt



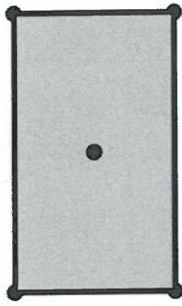
Volumen $V_E = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| \quad (11.4)$

Def: Wigner-Seitz-Zelle



- 1) Verbindungsgeraden von gegebenem Gitterpunkt zu Nachbarpunkten einzeichnen
- 2) Mittel senkrechte oder Mittelebene auf jeder Geraden einfügen
- 3) kleinster eingeschlossenes Volumen der Senkrechten oder Ebenen definiert die Wigner-Seitz-Zelle

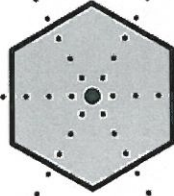
A conventional
unit cell



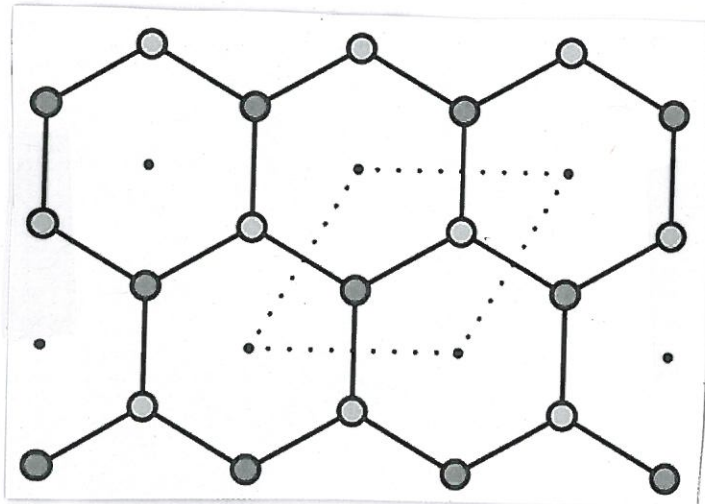
A primitive
unit cell



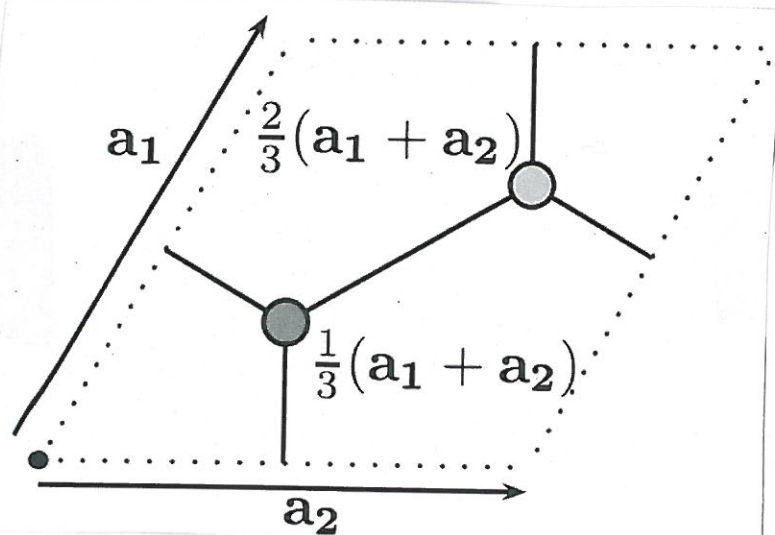
Wigner-Seitz
unit cell



- konventionelle Einheitszelle zur einfacheren Handhabung - orthogonales Achsen



Bienenwaben sind kein Gitter da die Umgebungen von Punkt R und P verschieden sind



→ Wenn man die Anzahl der Gitterpunkte in der Elementarzelle bestimmen will, dann zählt man die Punkte an den Ecken oder Rand nur einen Bruchteil

(Elementarzelle einfach ein bisschen verschieben, um einfacher zu zählen)

11.2 Symmetrieeigenschaften der Kristalle

Symmetrioperationen

(1) Translation

C_3

(2) Rotation um $\frac{2\pi}{n}$, Zähligkeit $n = 1, 2, 3, \dots$ der Drehachse

(3) Spiegelung an Spiegelebene $\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$

(4) Inversion $\bar{1}, i$ (Rotation um 180° und Spiegelung an Ebene senkrecht zur Drehachse)

"durch den Inversionspunkt spiegeln"

(5) Drehinversion $\bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ entsprechen Drehung verknüpft mit Inversion (Einzeloperationen müssen nicht Symmetrieelemente sein)

(6) Schraubung } bleibt kein Punkt des Gitters fest

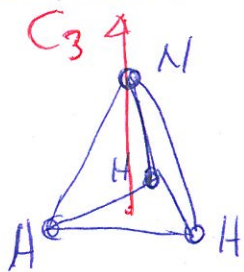
(7) Gleitspiegelung }

Def: Punktgruppe

Die Gesamtheit der Symmetrioperationen, welche die Anordnung von Gitterpunkten (oder Atomen in der Basis) invariant lassen und bei denen mindestens ein Punkt fest bleibt, nennt man Punktgruppe der Gitterpunkte (oder Atome in einer Basis)

- Basis hat meist eine andere Symmetrie als das Gitter
- Menge aller Symmetrioperationen 2-5 ergeben eine mathematische Gruppe (Einheitsvektor, inverses Element, Assoziativgesetz und abgeschlossen), welche aber nicht notwendig kommutativ ist

Beispiel für eine Punktgruppe: NH_3 - Molekül



3-zählige Rotation um z-Achse

σ_v - Spiegelung: Ebene durch z-Achse und H-Atome

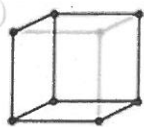
$\Rightarrow C_{3v}$ (nach Schönflies)

Def: Raumgruppe

Die volle Symmetriegruppe, bei denen das Gitter wieder in sich selbst überführt wird

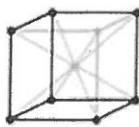
11.3 Fundamentale Gittertypen (14 Bravais-Gitter)

- Bilder:
- Hierarchie der Gitterstrukturen

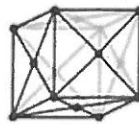


cubic:

simple

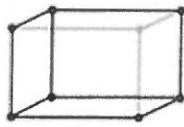


body
centered

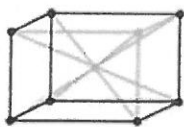


face
centered

cubic:
all sides equal
all angles 90°



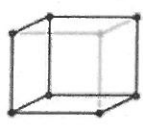
simple



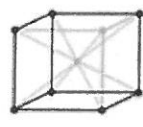
body
centered

tetragonal:

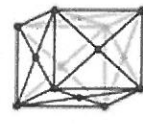
only two of three side lengths equal
all angles 90°



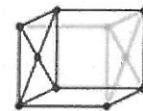
simple



body
centered



face
centered



base
centered

orthorhombic:
no two sides equal
all angles 90°

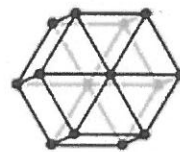


simple
monoclinic



base
centered
monoclinic

monoclinic:
angles between primitive
lattice vectors :
 $\alpha = 90^\circ$ $\beta = 90^\circ$
 $\alpha \neq 90^\circ$
only two right angles



hexagonal



rhombohedral:
all side lengths equal.
all angles equal, but not right angles.



triclinic:
no right angles
no two sides equal

14 Bravais - Gitter

Kristallsystem	Nr.	Gittersymbol	Kristallachsen und -winkel
kubisch	3	P (sc), I (bcc), F (fcc)	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonal	2	P, I	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
orthorhombisch	4	P, C, I, F	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
monoklin	2	P, I	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
triklin	1	P	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$
trigonal (rhomboedisch)	1	R	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
hexagonal	1	P	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

P = primitiv

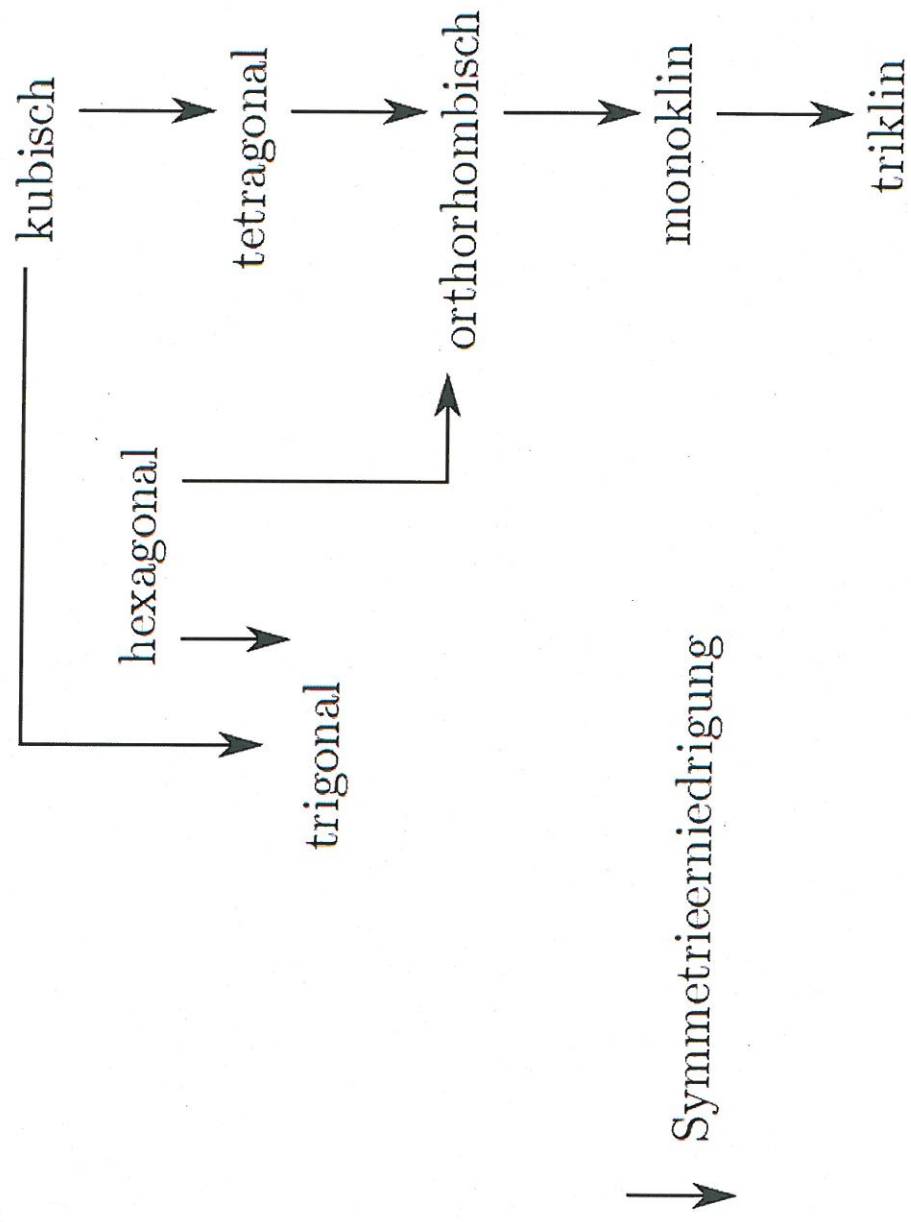
I = innen zentriert

F = flächen zentriert

C = basis zentriert

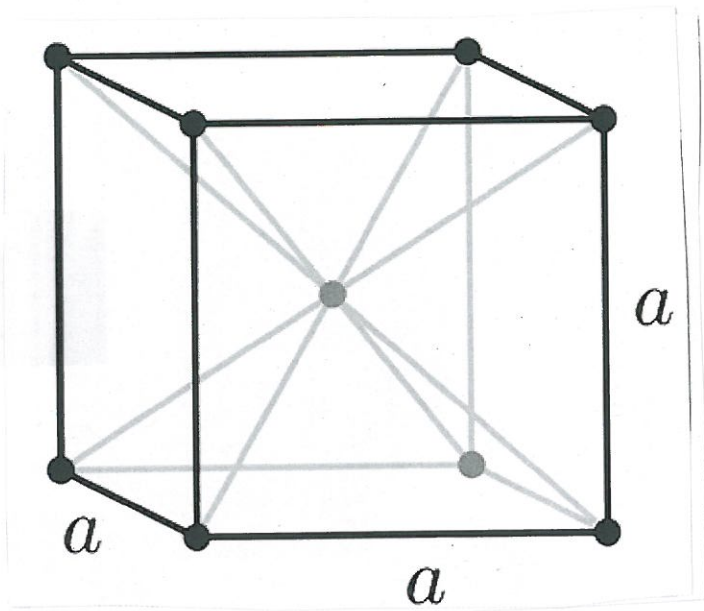
R = rhomboedrisch

Hierarchie der Gitterstrukturen



11.4 Wichtige Beispiele

11.4.1 bcc-Gitter (body-centered cubic)



- einfaches kubisches Gitter mit einem zentralen Gitterpunkt

$$- 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$$

Gitterpunkte pro Einheitszelle

- Basis

$$\vec{R}_{\text{corner}} = (n_1, n_2, n_3) a$$

$$\vec{R}_{\text{center}} = (n_1, n_2, n_3) a + \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$$

$\Rightarrow$ zwei "verschachtelte" kubische Gitter

- primitive Gittervektoren

$$\vec{a}_1 = (a, 0, 0)$$

$$\vec{a}_2 = (0, a, 0)$$

$$\vec{a}_3 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$$

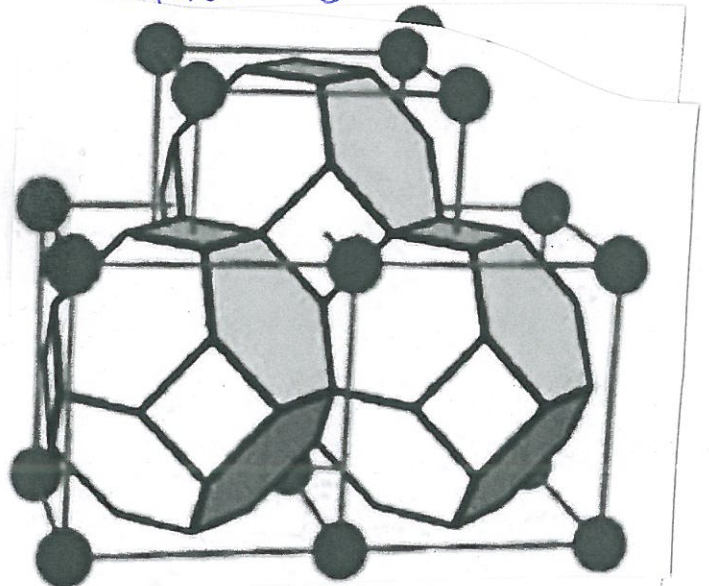
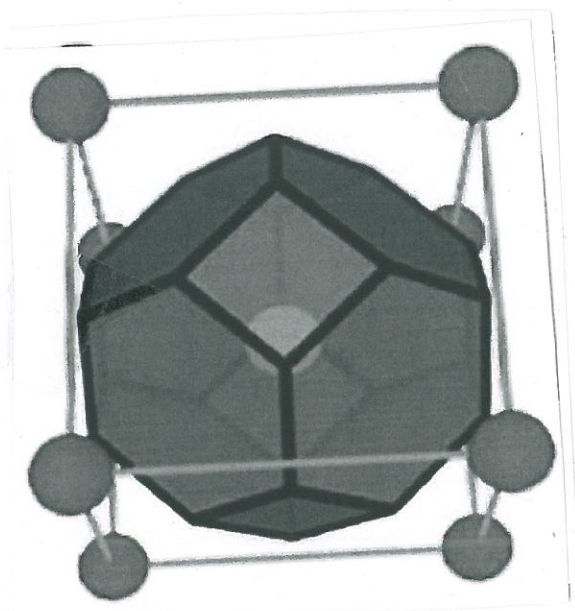
$$\Rightarrow \vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z} \quad (11.5)$$

- Die lokale Umgebung von jedem Gitterpunkt ist gleich

- jeder Gitterpunkt hat 8 Nachbarn

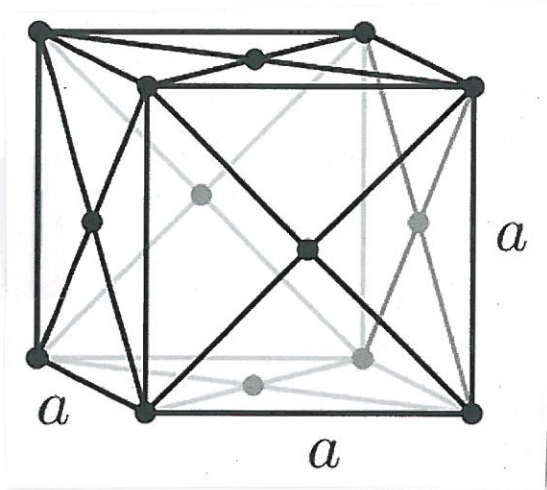
$\Rightarrow$ Koordinationsnummer $Z = 8$ (primitiv)

Wigner-Seitz-Zelle



11.4.2 fcc - Gitter (face-centered cubic)

- einfaches kubisches Gitter mit zusätzlichen Gitterpunkten in jeder Fläche



$$- 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{4} = 4 \text{ Gitterpunkte pro Einheitszelle}$$

- einfaches kubisches Gitter mit einer Basis von 4 Atomen

$$\vec{R}_{\text{corner}} = (n_1, n_2, n_3)a \quad (11.6)$$

$$\vec{R}_{\text{face-xy}} = (n_1, n_2, n_3)a + \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right)$$

$$\vec{R}_{\text{face-xz}} = (\quad)a + \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right)$$

$$\vec{R}_{\text{face-yz}} = (\quad)a + \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$$

$\Rightarrow$ 4 "verschachtelte" kubische Gitter

- primitive Gittervektoren

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right)$$

$$\vec{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right)$$

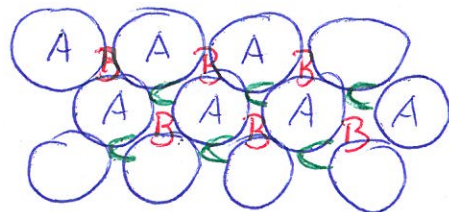
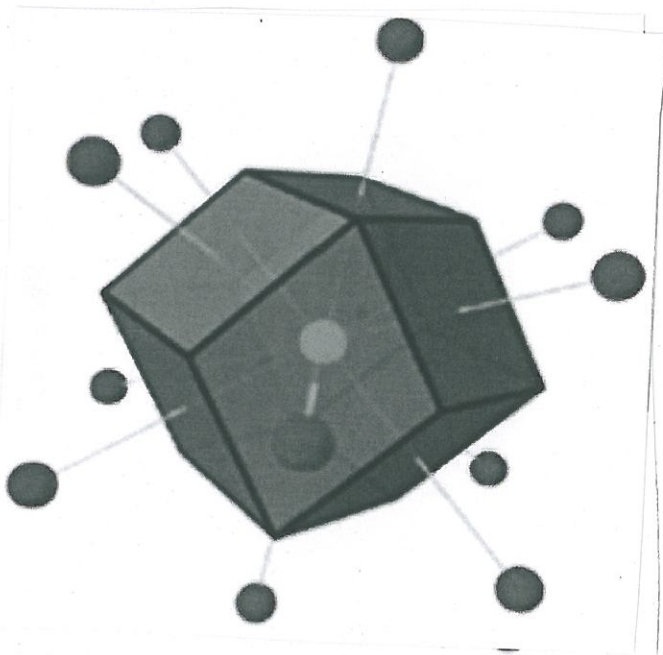
$$\vec{a}_3 = \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$$

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

$$n_i \in \mathbb{Z}$$

- Wigner-Seitz-Zelle

- Stapelfolge von Kugeln
ABCABC



11.4.3 hcp - Gitter (hexagonal close packed)

wie fcc, aber Stapelfolge ABAB

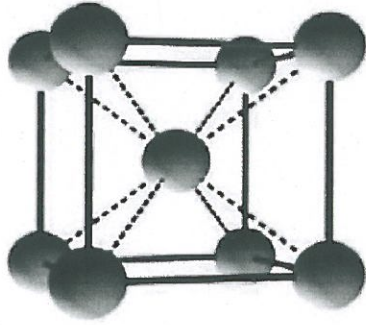
11.4.4 Beispiele

Sodium (Na)

innenzentriert

Lattice = Cubic-I (bcc)

Basis = Na at [000]



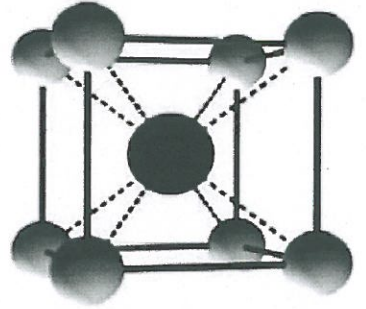
Caesium chloride (CsCl)

Lattice = Cubic-P

← primitiv

Basis = Cs at [000]

and Cl at $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$

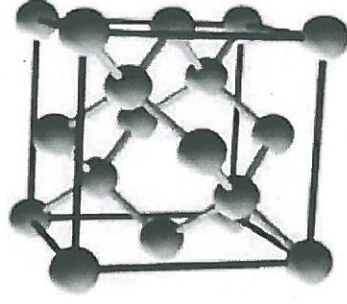


Copper (Cu)

fächern

Lattice = Cubic-F (fcc)

Basis = Cu at [000]

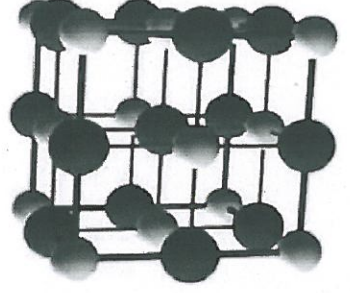


Sodium Chloride (NaCl)

Lattice = Cubic-F (fcc)

Basis = Na at [000]

and Cl at $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$



Diamond (C); also Si and Ge

Lattice = Cubic-F (fcc)

Basis = C at [000]

and C at $[\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}]$

