



Diese Veranstaltung wird aufgezeichnet und als Medien-Cast über KIT - ILIAS bereit gestellt

Nur zur KIT-internen vorlesungsbegleitenden Nutzung, Weitergabe & anderweitige Verwendung ist untersagt

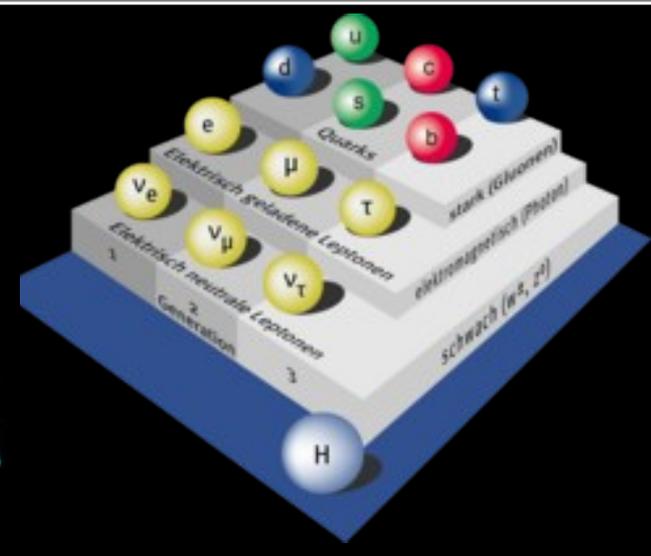
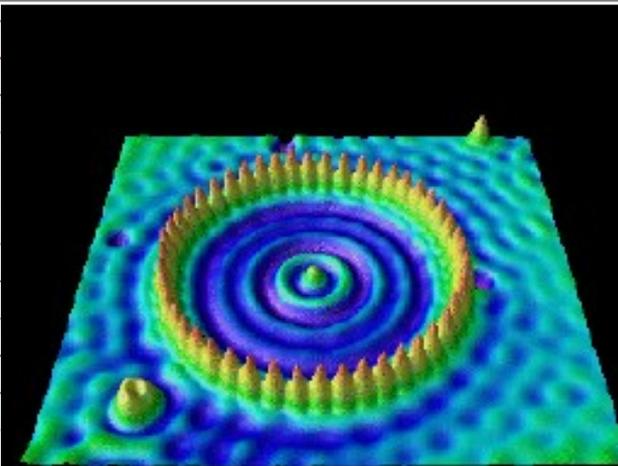
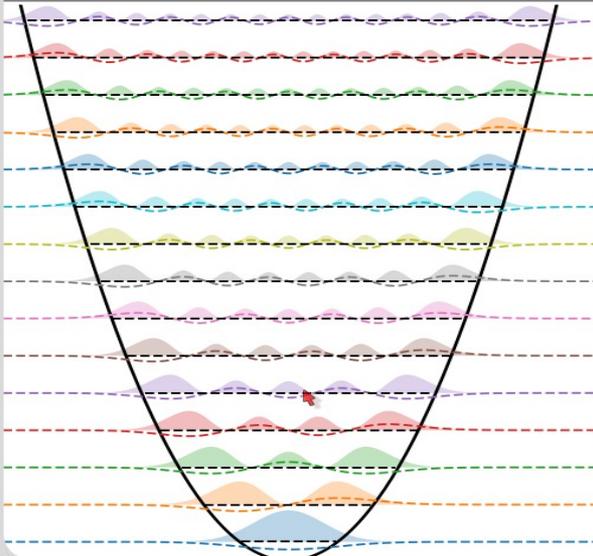
Vorlesung 15 b **Moderne Physik (L)**

Kristallstruktur

Günter Quast

Fakultät für Physik
Institut für Experimentelle Teilchenphysik

SS '20



Zustandsformen von Materie – Plasma, Gas, Flüssigkeit und Festkörper -
hängen von der Größe

- der Anziehungskräfte zwischen den Teilchen
- und ihrer thermischen Energie ab

Zustandsformen von Materie – Plasma, Gas, Flüssigkeit und Festkörper -
hängen von der Größe

- der Anziehungskräfte zwischen den Teilchen
- und ihrer thermischen Energie ab

Plasma

freie Elektronen und
Kerne; Bindungs-
energie $\ll k_B T$

Gas

Flüssigkeit

Festkörper

Zustandsformen von Materie – Plasma, Gas, Flüssigkeit und Festkörper -
hängen von der Größe

- der Anziehungskräfte zwischen den Teilchen
- und ihrer thermischen Energie ab

Plasma

freie Elektronen und
Kerne; Bindungs-
energie $\ll k_B T$

Gas

ungeordnete Bewegung
von Atomen und Molekülen,
deren gegenseitige
Anziehung $\ll k_B T$

Flüssigkeit

Festkörper

Zustandsformen von Materie – Plasma, Gas, Flüssigkeit und Festkörper -
hängen von der Größe

- der Anziehungskräfte zwischen den Teilchen
- und ihrer thermischen Energie ab

Plasma

freie Elektronen und Kerne; Bindungsenergie $\ll k_B T$

Gas

ungeordnete Bewegung von Atomen und Molekülen, deren gegenseitige Anziehung $\ll k_B T$

Flüssigkeit

Nahordnung, benachbarte Atome/Moleküle ziehen sich an, Anziehung $\sim k_B T$

Festkörper

Zustandsformen von Materie – Plasma, Gas, Flüssigkeit und Festkörper -
hängen von der Größe

- der Anziehungskräfte zwischen den Teilchen
- und ihrer thermischen Energie ab

Plasma

freie Elektronen und Kerne; Bindungsenergie $\ll k_B T$

Gas

ungeordnete Bewegung von Atomen und Molekülen, deren gegenseitige Anziehung $\ll k_B T$

Flüssigkeit

Nahordnung, benachbarte Atome/Moleküle ziehen sich an, Anziehung $\sim k_B T$

Festkörper

Nah- und Fernordnung, Anziehung $> k_B T$, Ausbildung von Kristallstrukturen

Zustandsformen von Materie – Plasma, Gas, Flüssigkeit und Festkörper -
hängen von der Größe

- der Anziehungskräfte zwischen den Teilchen
- und ihrer thermischen Energie ab

Plasma

freie Elektronen und Kerne; Bindungsenergie $\ll k_B T$

Gas

ungeordnete Bewegung von Atomen und Molekülen, deren gegenseitige Anziehung $\ll k_B T$

Flüssigkeit

Nahordnung, benachbarte Atome/Moleküle ziehen sich an, Anziehung $\sim k_B T$

Festkörper

Nah- und Fernordnung, Anziehung $> k_B T$, Ausbildung von Kristallstrukturen

Bei hinreichend niedrigen Temperaturen bilden Atome und Moleküle **Festkörper**.

Wenn der Abkühlungsprozess langsam geschieht, bildet sich die **maximale Anzahl chemischer Bindungen** und die **Gesamtenergie** wird **minimal**.

Zustandsformen von Materie – Plasma, Gas, Flüssigkeit und Festkörper -
hängen von der Größe

- der Anziehungskräfte zwischen den Teilchen
- und ihrer thermischen Energie ab

Plasma

freie Elektronen und Kerne; Bindungsenergie $\ll k_B T$

Gas

ungeordnete Bewegung von Atomen und Molekülen, deren gegenseitige Anziehung $\ll k_B T$

Flüssigkeit

Nahordnung, benachbarte Atome/Moleküle ziehen sich an, Anziehung $\sim k_B T$

Festkörper

Nah- und Fernordnung, Anziehung $> k_B T$, Ausbildung von Kristallstrukturen

Bei hinreichend niedrigen Temperaturen bilden Atome und Moleküle **Festkörper**.

Wenn der Abkühlungsprozess langsam geschieht, bildet sich die **maximale Anzahl chemischer Bindungen** und die **Gesamtenergie** wird **minimal**.

Es bilden sich geordnete **Kristall-Gitter**, deren Form durch die Struktur der chemischen Bindungen vorgegeben ist.

Zustandsformen von Materie – Plasma, Gas, Flüssigkeit und Festkörper -
hängen von der Größe

- der Anziehungskräfte zwischen den Teilchen
- und ihrer thermischen Energie ab

Plasma

freie Elektronen und Kerne; Bindungsenergie $\ll k_B T$

Gas

ungeordnete Bewegung von Atomen und Molekülen, deren gegenseitige Anziehung $\ll k_B T$

Flüssigkeit

Nahordnung, benachbarte Atome/Moleküle ziehen sich an, Anziehung $\sim k_B T$

Festkörper

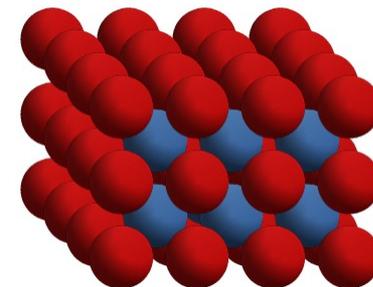
Nah- und Fernordnung, Anziehung $> k_B T$, Ausbildung von Kristallstrukturen

Bei hinreichend niedrigen Temperaturen bilden Atome und Moleküle **Festkörper**.

Wenn der Abkühlungsprozess langsam geschieht, bildet sich die **maximale Anzahl chemischer Bindungen** und die **Gesamtenergie** wird **minimal**.

Es bilden sich geordnete **Kristall-Gitter**, deren Form durch die Struktur der chemischen Bindungen vorgegeben ist.

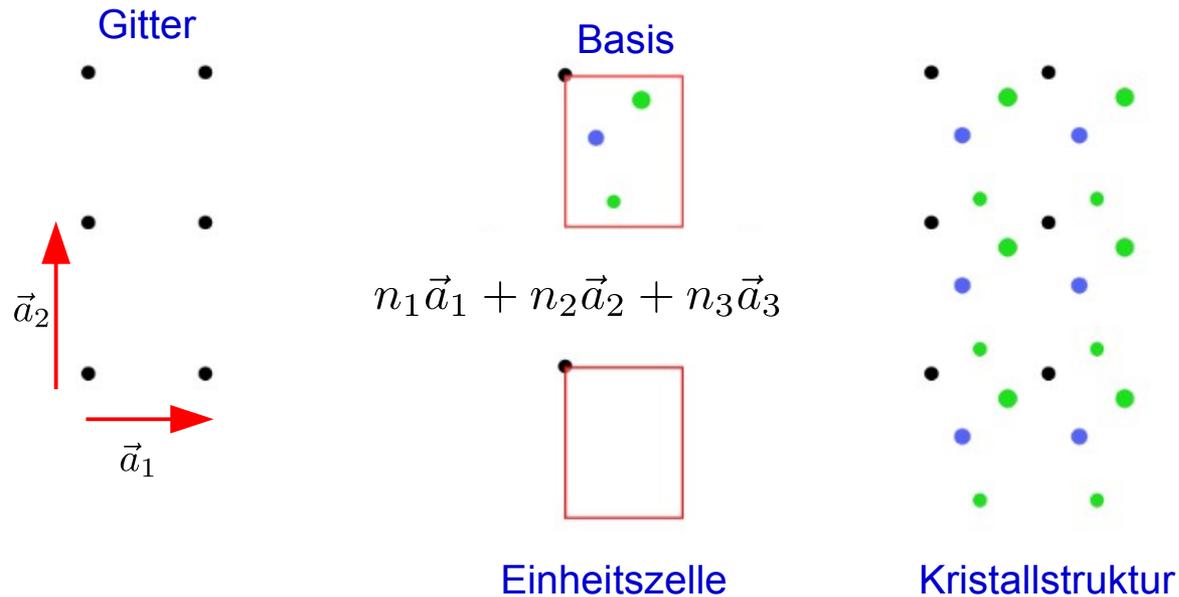
Gitter: periodische Anordnung von Punkten im 3-dimensionalen Raum



Kennzeichen von Kristallgittern: **Periodizität**

d.h. Symmetrie bei Translation

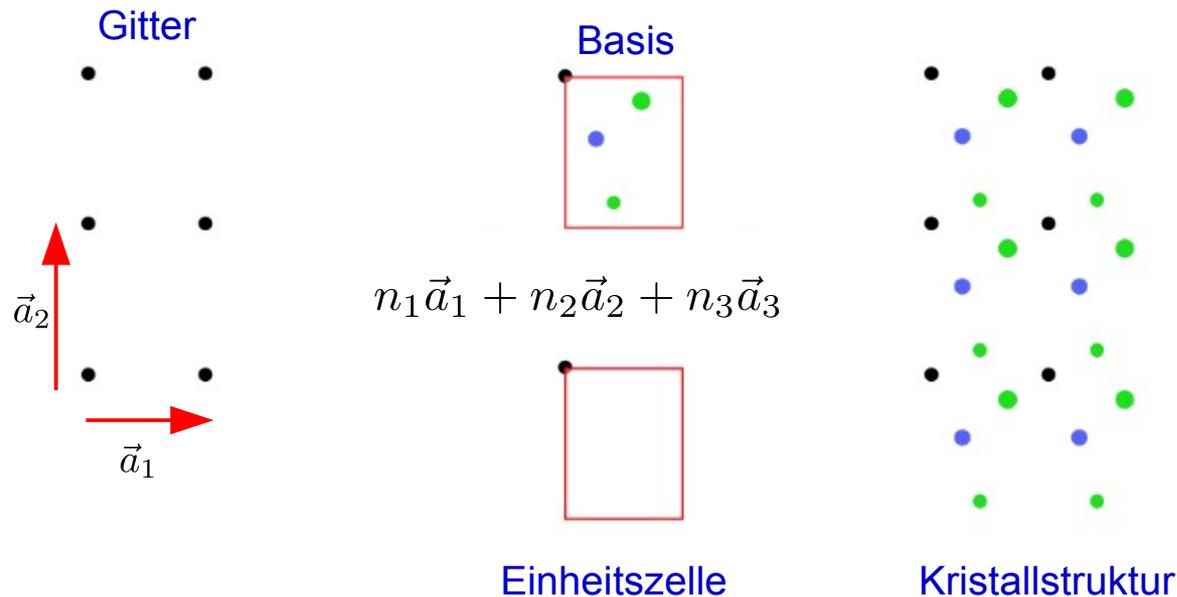
Symmetrie bestimmt die physikalische Eigenschaften



Kennzeichen von Kristallgittern: **Periodizität**

d.h. Symmetrie bei Translation

Symmetrie bestimmt die physikalische Eigenschaften



Kristall-Struktur

entsteht durch **Verschiebung der Einheitszelle**

mit einem oder mehreren Atomen als Basis

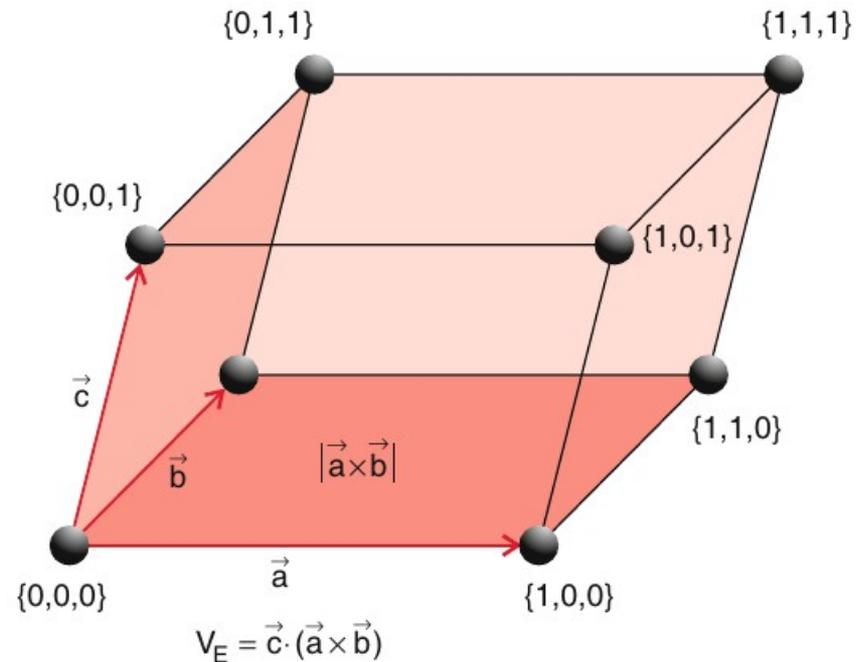
um Gittervektoren $\vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$

(bzw. $\vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ in drei Dimensionen)

- Definition von linear unabhängigen **Basisvektoren** (2 in 2d, 3 in 3d)
- Basisvektoren spannen **Elementarzelle** (auch **Einheitszelle**) auf
- **Primitive Elementarzelle** beinhaltet genau einen Gitterpunkt
- Einfachster Fall:

jeder Gitterpunkt entspricht einem einzigen Atom,
alle Atome vom selben Typ

Die Atome in der Elementarzelle
bilden die sog. **Basis**



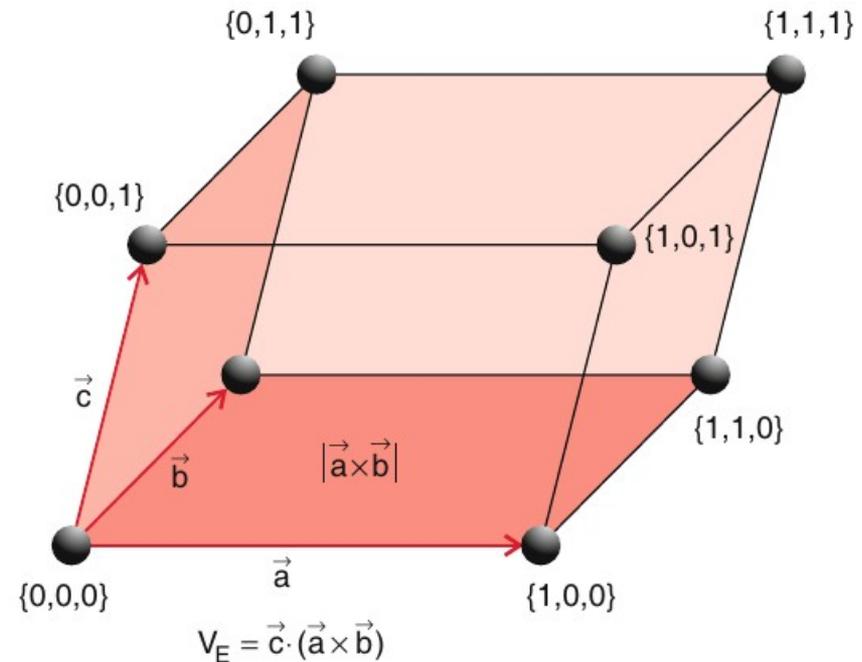
- Definition von linear unabhängigen **Basisvektoren** (2 in 2d, 3 in 3d)
- Basisvektoren spannen **Elementarzelle** (auch **Einheitszelle**) auf
- **Primitive Elementarzelle** beinhaltet genau einen Gitterpunkt
- Einfachster Fall:

jeder Gitterpunkt entspricht einem einzigen Atom,
alle Atome vom selben Typ

Die Atome in der Elementarzelle
bilden die sog. **Basis**

Periodizität

- Wiederholung der Elementarzellen
- Symmetrie bei Translationen um Gittervektor (und Rotationen um bestimmte Winkel)



- Definition von linear unabhängigen **Basisvektoren** (2 in 2d, 3 in 3d)
- Basisvektoren spannen **Elementarzelle** (auch **Einheitszelle**) auf
- **Primitive Elementarzelle** beinhaltet genau einen Gitterpunkt
- Einfachster Fall:

jeder Gitterpunkt entspricht einem einzigen Atom,
alle Atome vom selben Typ

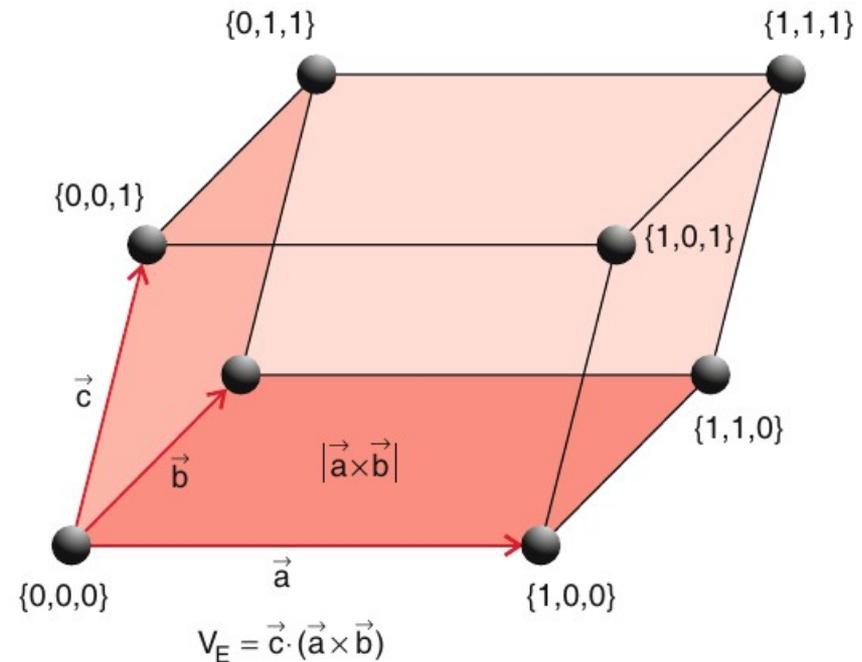
Die Atome in der Elementarzelle
bilden die sog. **Basis**

Periodizität

- Wiederholung der Elementarzellen
- Symmetrie bei Translationen um Gittervektor (und Rotationen um bestimmte Winkel)

Bindungen

- Metallische Bindung
- Ionen-Bindung
- kovalente Bindung



- Definition von linear unabhängigen **Basisvektoren** (2 in 2d, 3 in 3d)
- Basisvektoren spannen **Elementarzelle** (auch **Einheitszelle**) auf
- **Primitive Elementarzelle** beinhaltet genau einen Gitterpunkt
- Einfachster Fall:

jeder Gitterpunkt entspricht einem einzigen Atom,
alle Atome vom selben Typ

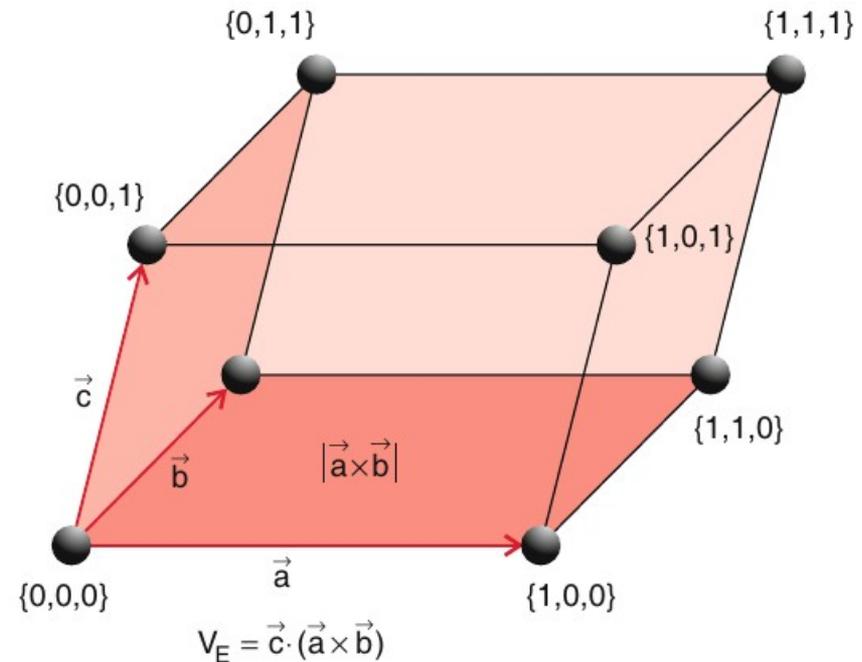
Die Atome in der Elementarzelle
bilden die sog. **Basis**

Periodizität

- Wiederholung der Elementarzellen
- Symmetrie bei Translationen um Gittervektor (und Rotationen um bestimmte Winkel)

Bindungen

- Metallische Bindung
- Ionen-Bindung
- kovalente Bindung



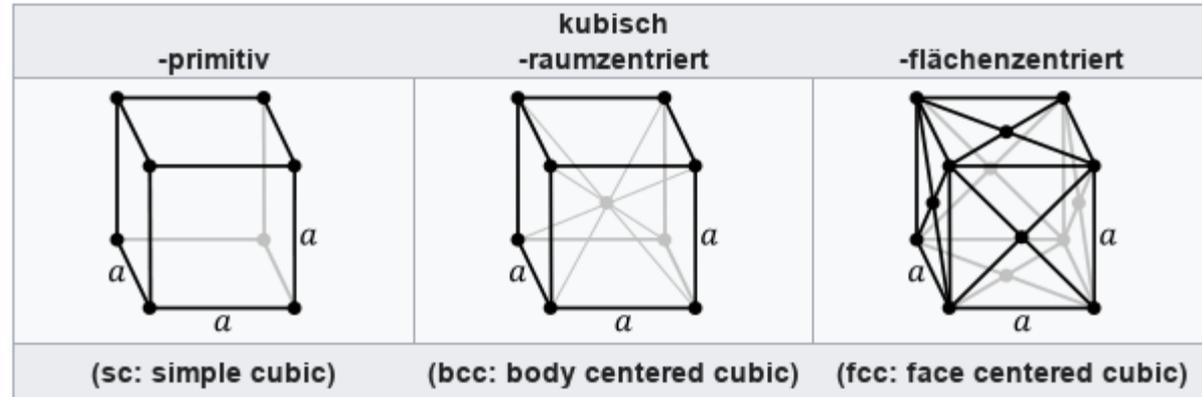
Kristall besteht aus Translationsgitter und Basis.

Gittertypen klassifiziert nach $|\vec{a}_i|$ und $\angle(\vec{a}_i, \vec{a}_j)$: die 14 **Bravais-Gitter**

Gittertypen klassifiziert nach $|\vec{a}_i|$ und $\angle(\vec{a}_i, \vec{a}_j)$: die 14 **Bravais-Gitter**

Kubisches Kristallsystem

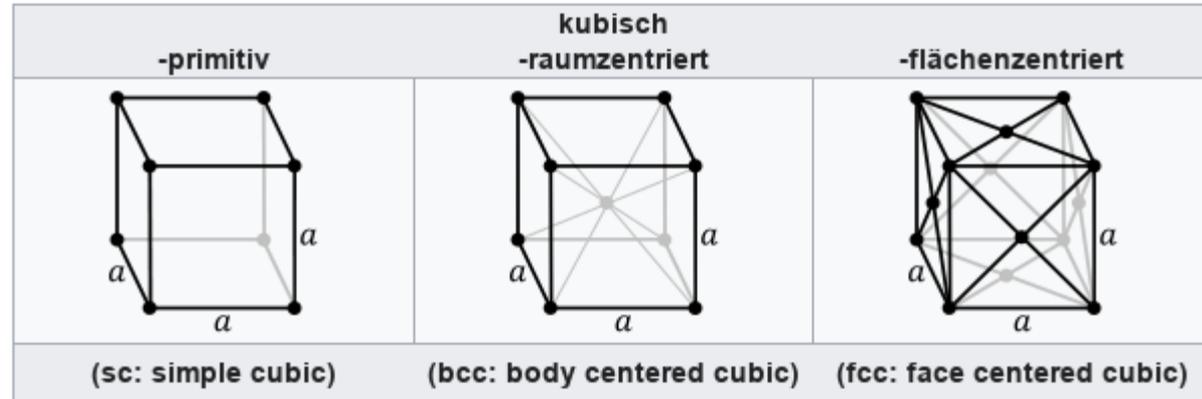
- höchste Symmetrie
- drei gleich lange Achsen im 90°-Winkel



Gittertypen klassifiziert nach $|\vec{a}_i|$ und $\angle(\vec{a}_i, \vec{a}_j)$: die 14 **Bravais-Gitter**

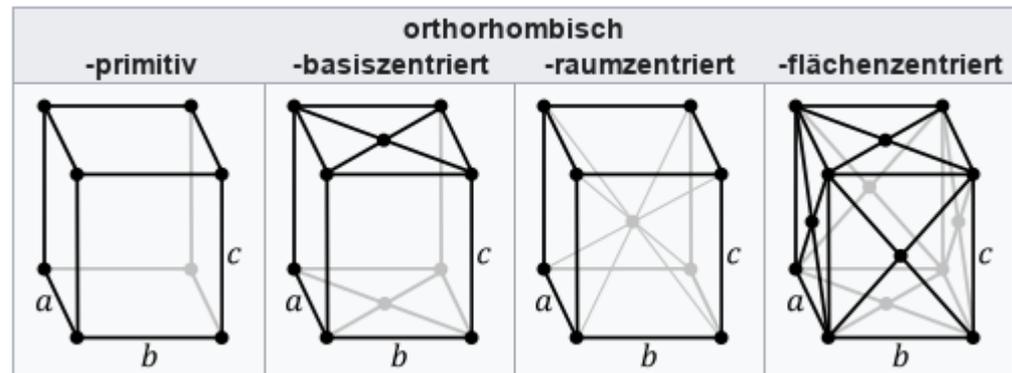
Kubisches Kristallsystem

- höchste Symmetrie
- drei gleich lange Achsen im 90° -Winkel



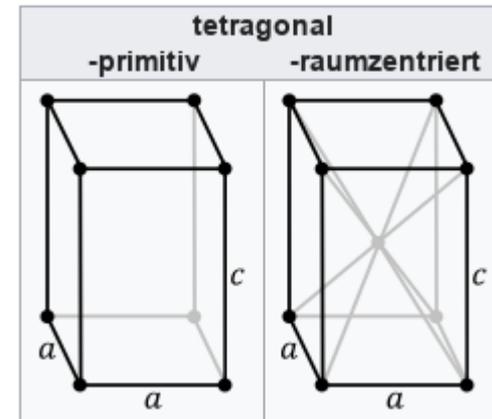
(Ortho-) Rhombisches System

- drei 90° -Winkel,
- verschiedene Achsenlängen



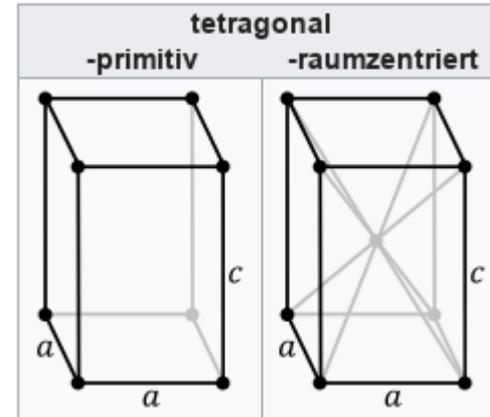
Tetragonales Kristallsystem

- zwei gleich lange Achsen im 90°-Winkel



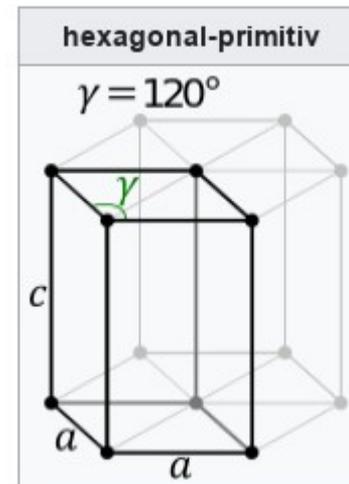
Tetragonales Kristallsystem

- zwei gleich lange Achsen im 90° -Winkel



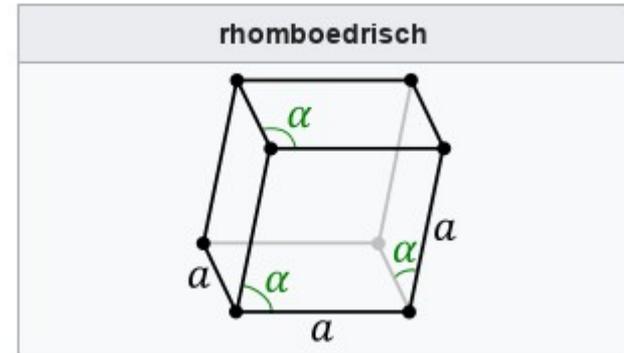
Hexagonales Kristallsystem

- zwei gleich lange Achsen in einer Ebene unter einem Winkel von 120°
- dritte Achse senkrecht dazu



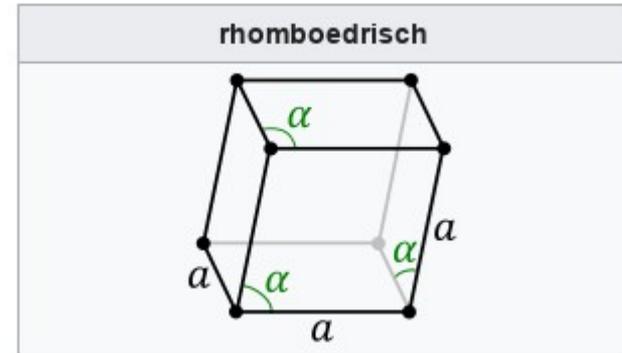
Trigonales, auch rhomboedrisches System

- drei gleich lange Achsen
- drei gleiche Winkel $\neq 90^\circ$



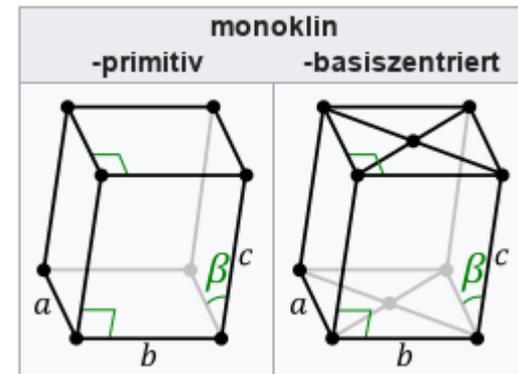
Trigonales, auch rhomboedrisches System

- drei gleich lange Achsen
- drei gleiche Winkel $\neq 90^\circ$



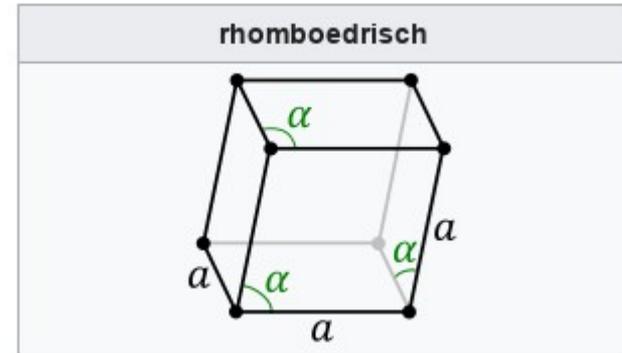
Monoklines System

- zwei 90° - Winkel
- keine gleich langen Achsen



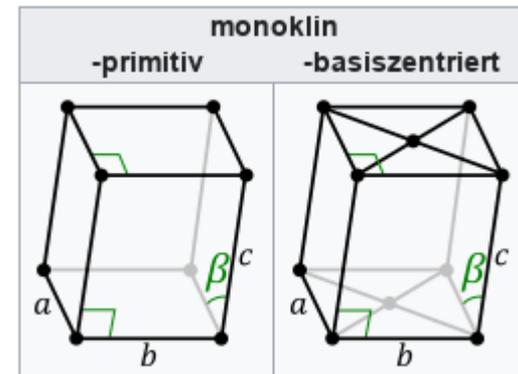
Trigonales, auch rhomboedrisches System

- drei gleich lange Achsen
- drei gleiche Winkel $\neq 90^\circ$



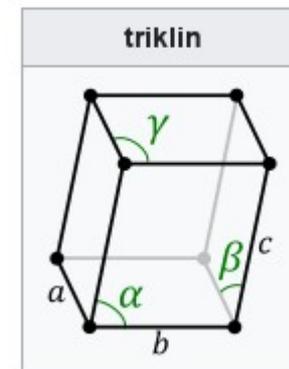
Monoklines System

- zwei 90° - Winkel
- keine gleich langen Achsen



Triklines System

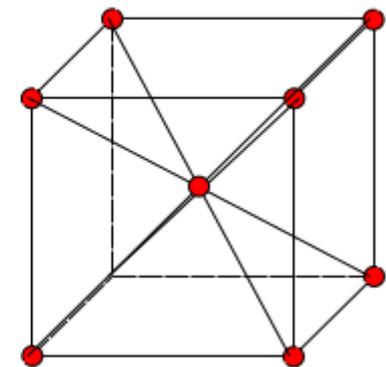
- geringste Symmetrie aller Gittertypen
- keine gleichen Winkel
- keine gleich langen Achsen



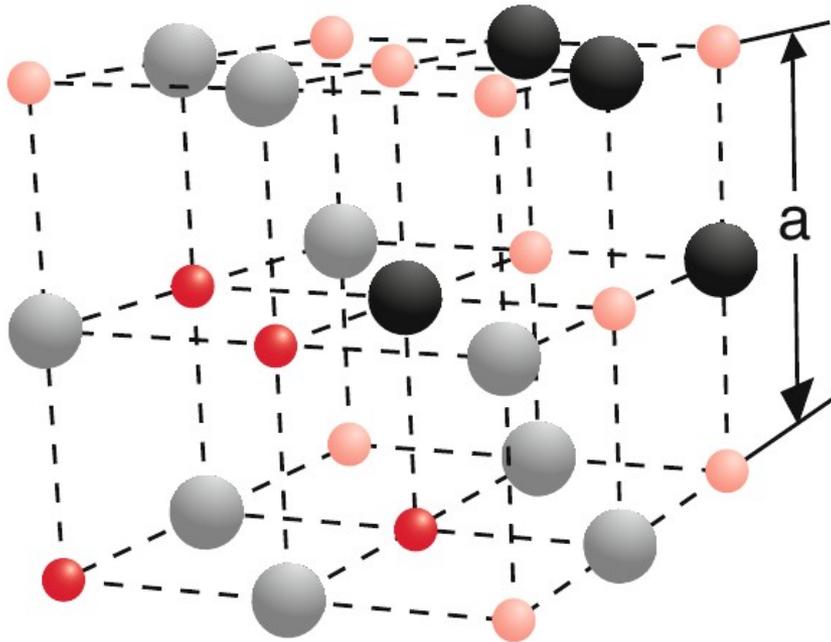
Atomium (Brüssel): Einheitszelle Fe



Atomium (Brüssel): Einheitszelle Fe

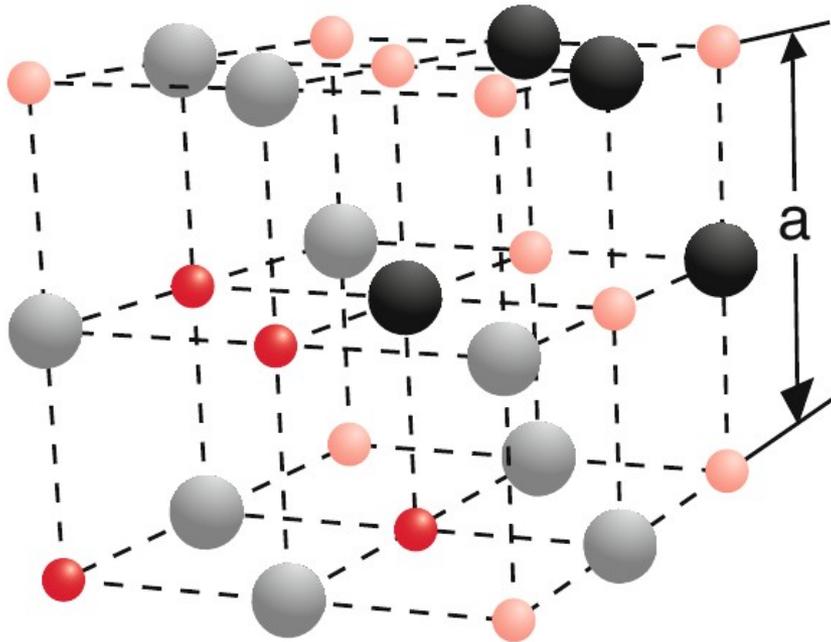


kubisch-raumzentriert



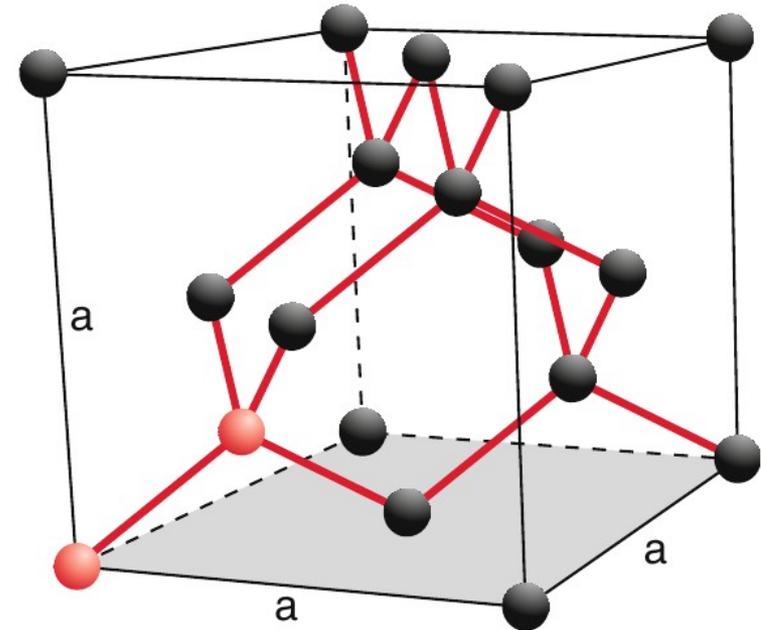
Natriumchlorid:

2 separate kubisch-flächenzentrierte Gitter für Na^+ und Cl^- , um eine halbe Raumdiagonale zueinander verschoben



Natriumchlorid:

2 separate kubisch-flächenzentrierte Gitter für Na^+ und Cl^- , um eine halbe Raumdiagonale zueinander verschoben



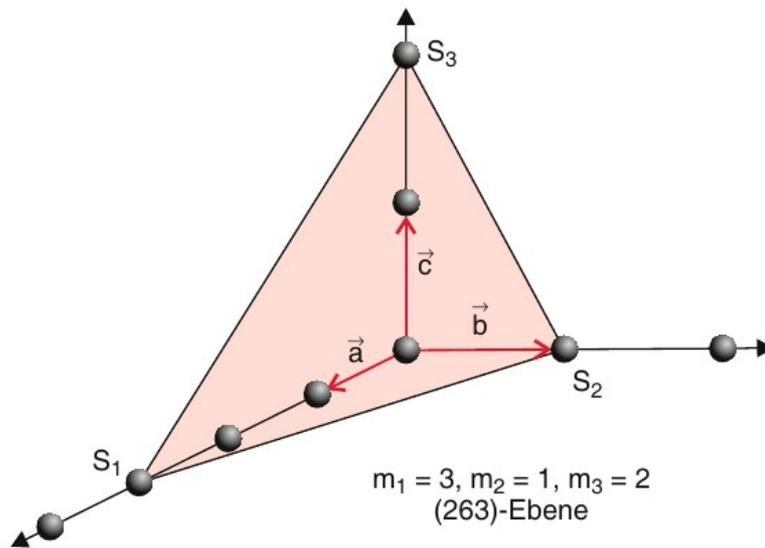
Diamant:

Kubisch-flächenzentriertes Gitter mit zweiatomiger Basis aus C-Atomen, 2. Atom um eine viertel Raumdiagonale verschoben

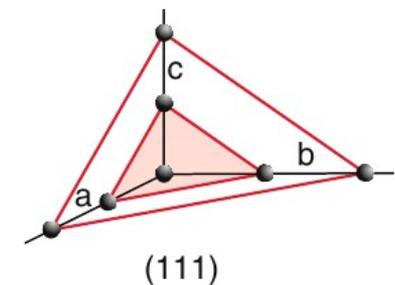
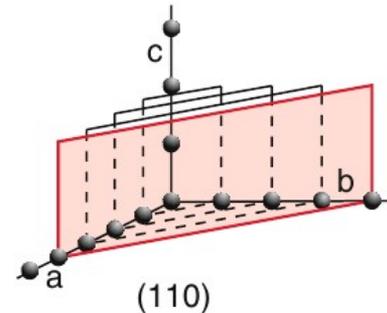
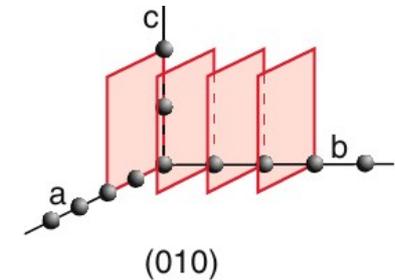
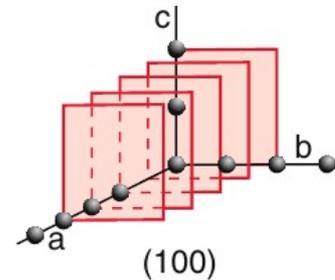
Die Orientierung von Ebenen im Gitter (auch „Netzebenen“) wird durch die **Miller'schen Indizes** angegeben

- Schnittpunkte mit Basisvektoren bestimmen: $S_i = n_i \vec{a}_i$
- Kehrwerte $1/n_i$ auf kleinst ganze Zahl erweitern

→ **Miller'sche Indizes m_1, m_2, m_3**



$$\left(\frac{1}{n_1}, \frac{1}{n_2}, \frac{1}{n_3} \right) = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{1}, \frac{1}{2} \right) \xrightarrow{\cdot 6} (263)$$



Physikalische und chemische Eigenschaften der Kristalloberfläche abhängig von **Orientierung**

- **Siliziumbauteile** (Chips, Teilchendetektoren): (100) oder (111)
→ mechanische und elektronische Eigenschaften
(z. B. Elastizitätsmodul, Mobilität der Ladungsträger, Kapazität, Oberflächenladungen)
- **Mineralogie**: eindeutige Beschreibung von Kristallflächen
- **Elektronen-** oder **Röntgenbeugung**: Beugung an Netzebenenschar(→ [Übungen](#))
- **Materialwissenschaften**: Gitterebenen und Gittervektoren zur Beschreibung von Gitterfehlern (Versetzungen usw.) in Werkstoffen.

Ein Ion in einem Ionen-Kristall hat eine negative potentielle Energie:

$$E_{\text{pot}}(r) = -\alpha c \cdot \frac{e^2}{r} + \frac{C}{r^n} \quad \text{mit } c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

- r ist dabei der Abstand zweier benachbarter Ionen
- der Faktor α ist die „**Madelung-Konstante**“; er berücksichtigt den Einfluss der weiter entfernten Ionen und die Struktur des Gitters; für kubisch-flächenzentrierte Gitter hat α den Wert 1.74
- der Abstoßungsterm wird als C / r^n parametrisiert

Ein Ion in einem Ionen-Kristall hat eine negative potentielle Energie:

$$E_{\text{pot}}(r) = -\alpha c \cdot \frac{e^2}{r} + \frac{C}{r^n} \quad \text{mit } c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

- r ist dabei der Abstand zweier benachbarter Ionen
- der Faktor α ist die „**Madelung-Konstante**“; er berücksichtigt den Einfluss der weiter entfernten Ionen und die Struktur des Gitters; für kubisch-flächenzentrierte Gitter hat α den Wert 1.74
- der Abstoßungsterm wird als C / r^n parametrisiert

für den Abstand r_0 am Minimum ergibt sich: $r_0^{n-1} = \frac{nC}{\alpha c e^2}$

Ein Ion in einem Ionen-Kristall hat eine negative potentielle Energie:

$$E_{\text{pot}}(r) = -\alpha c \cdot \frac{e^2}{r} + \frac{C}{r^n} \quad \text{mit } c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

- r ist dabei der Abstand zweier benachbarter Ionen
- der Faktor α ist die „**Madelung-Konstante**“; er berücksichtigt den Einfluss der weiter entfernten Ionen und die Struktur des Gitters; für kubisch-flächenzentrierte Gitter hat α den Wert 1.74
- der Abstoßungsterm wird als C / r^n parametrisiert

für den Abstand r_0 am Minimum ergibt sich: $r_0^{n-1} = \frac{nC}{\alpha c e^2}$

$$\rightarrow E_{\text{pot}}(r) = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(\frac{r_0}{r} - \frac{1}{n} \left(\frac{r_0}{r} \right)^n \right)$$

Ein Ion in einem Ionen-Kristall hat eine negative potentielle Energie:

$$E_{\text{pot}}(r) = -\alpha c \cdot \frac{e^2}{r} + \frac{C}{r^n} \quad \text{mit } c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

- r ist dabei der Abstand zweier benachbarter Ionen
- der Faktor α ist die „**Madelung-Konstante**“; er berücksichtigt den Einfluss der weiter entfernten Ionen und die Struktur des Gitters; für kubisch-flächenzentrierte Gitter hat α den Wert 1.74
- der Abstoßungsterm wird als C / r^n parametrisiert

für den Abstand r_0 am Minimum ergibt sich: $r_0^{n-1} = \frac{nC}{\alpha c e^2}$

$$\rightarrow E_{\text{pot}}(r) = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(\frac{r_0}{r} - \frac{1}{n} \left(\frac{r_0}{r} \right)^n \right)$$

$$E_{\text{pot}}(r_0) = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

Ein Ion in einem Ionen-Kristall hat eine negative potentielle Energie:

$$E_{\text{pot}}(r) = -\alpha c \cdot \frac{e^2}{r} + \frac{C}{r^n} \quad \text{mit } c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

- r ist dabei der Abstand zweier benachbarter Ionen
- der Faktor α ist die „**Madelung-Konstante**“; er berücksichtigt den Einfluss der weiter entfernten Ionen und die Struktur des Gitters; für kubisch-flächenzentrierte Gitter hat α den Wert 1.74
- der Abstoßungsterm wird als C / r^n parametrisiert

für den Abstand r_0 am Minimum ergibt sich: $r_0^{n-1} = \frac{nC}{\alpha c e^2}$

$$\rightarrow E_{\text{pot}}(r) = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(\frac{r_0}{r} - \frac{1}{n} \left(\frac{r_0}{r} \right)^n \right)$$

$$E_{\text{pot}}(r_0) = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

Durch Bestimmung der Energie, die zur Aufspaltung des Kristalls in einzelnen Atome notwendig ist („**Dissoziationsenergie**“) kann man den Werte des Parameters n bestimmen.

Beispiel NaCl: – Dissoziationsenergie 770 kJ/mol
→ $U(r_0) = -7.98 \text{ eV}$ (= Dissoziationsenergie pro Ionenpaar)

– r_0 kann man aus Dichte ρ und
Mol-Masse M bestimmen:

$$r_0^3 = \frac{M}{2N_A\rho}$$

mit $r_0 = 0.282 \text{ nm}$ → $n = 9.35$

Beispiel NaCl: – Dissoziationsenergie 770 kJ/mol
→ $U(r_0) = -7.98 \text{ eV}$ (= Dissoziationsenergie pro Ionenpaar)

– r_0 kann man aus Dichte ρ und
Mol-Masse M bestimmen:

$$r_0^3 = \frac{M}{2N_A\rho}$$

mit $r_0 = 0.282 \text{ nm}$ → $n = 9.35$

Üblich ist auch eine **andere Parametrisierung** des
Potentials, das **Morse-Potential**

$$U(r) = D \cdot (1 - \exp(-a(r - r_0)))$$

Beispiel NaCl: – Dissoziationsenergie 770 kJ/mol
→ $U(r_0) = -7.98 \text{ eV}$ (= Dissoziationsenergie pro Ionenpaar)

– r_0 kann man aus Dichte ρ und
Mol-Masse M bestimmen:

$$r_0^3 = \frac{M}{2N_A\rho}$$

mit $r_0 = 0.282 \text{ nm}$ → $n = 9.35$

Üblich ist auch eine **andere Parametrisierung** des
Potentials, das **Morse-Potential**

$$U(r) = D \cdot (1 - \exp(-a(r - r_0)))$$

Für dieses Potential ist die
Schrödingergleichung analytisch
lösbar; man erhält die Energien
von Vibrationsanregungen:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2\omega_0^2}{4D} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$

Beispiel NaCl: – Dissoziationsenergie 770 kJ/mol
 → $U(r_0) = -7.98 \text{ eV}$ (= Dissoziationsenergie pro Ionenpaar)

– r_0 kann man aus Dichte ρ und

Mol-Masse M bestimmen:

$$r_0^3 = \frac{M}{2N_A\rho}$$

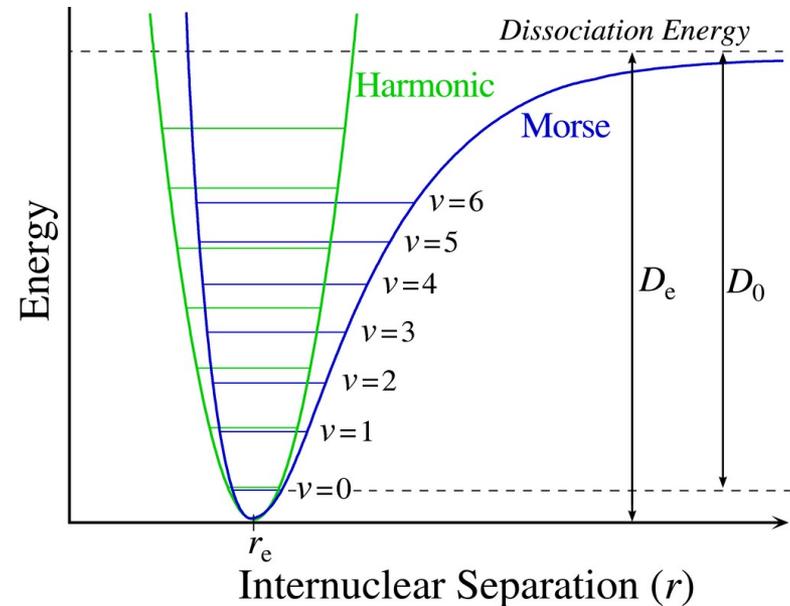
mit $r_0 = 0.282 \text{ nm}$ → $n = 9.35$

Üblich ist auch eine andere Parametrisierung des Potentials, das **Morse-Potential**

$$U(r) = D \cdot (1 - \exp(-a(r - r_0)))^2$$

Für dieses Potential ist die Schrödingergleichung analytisch lösbar; man erhält die Energien von Vibrationsanregungen:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2\omega_0^2}{4D} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$



Beispiel NaCl: – Dissoziationsenergie 770 kJ/mol
→ $U(r_0) = -7.98 \text{ eV}$ (= Dissoziationsenergie pro Ionenpaar)

– r_0 kann man aus Dichte ρ und

Mol-Masse M bestimmen:

$$r_0^3 = \frac{M}{2N_A\rho}$$

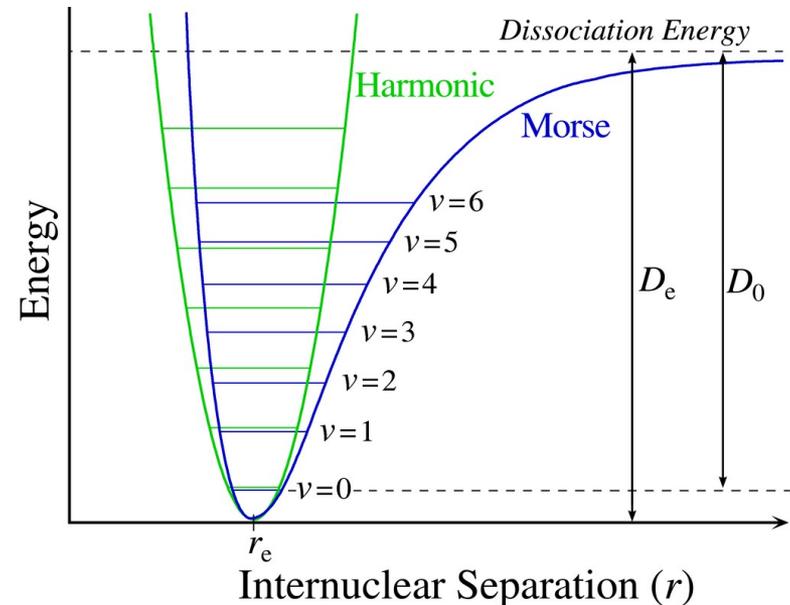
mit $r_0 = 0.282 \text{ nm}$ → $n = 9.35$

Üblich ist auch eine andere Parametrisierung des Potentials, das **Morse-Potential**

$$U(r) = D \cdot (1 - \exp(-a(r - r_0)))^2$$

Für dieses Potential ist die Schrödingergleichung analytisch lösbar; man erhält die Energien von Vibrationsanregungen:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2\omega_0^2}{4D} \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$



→ der Abstand der Gitterbausteine nimmt wegen des asymmetrischen Bindungspotentials zu, wenn Gitterschwingungen angeregt werden.
Ausdehnung von Körpern mit der Temperatur

Ende Vorlesung 15

und Zeit für Fragen ?