

## 2.2 Symmetrieeigenschaften der Kristalle

### Symmetrieeoperationen

1. Translation

2. Rotation um  $2\pi$ ,  $\frac{2\pi}{2}$ ,  $\frac{2\pi}{3}$ ,  $\frac{2\pi}{4}$ ,  $\frac{2\pi}{6}$   
„Zähligkeit“ der Achse: 1, 2, 3, 4, 6

3. Spiegelung  $m$

4. Inversion, Inversionszentrum  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$   
(= Rot. um  $180^\circ$  und Spiegelung an Ebene  $\perp$  Drehachse)

5. Drehinversion  $\bar{2}$ ,  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$ ,  $\bar{6}$ .

Einzeloperation nicht notwendigerweise  
Symmetrieelement

6. Schraubung

7. Gleitspiegelung

} kein Punkt bleibt fest

Def Die Gesamtheit der Symmetrieeoperationen, die  
gegebene Anordnung von Gitterpunkten des  $\infty$  ausgedehnten  
Gitters oder Atoms (eins Molekül, eine Basis)  
invariant lassen und bei denen mind. ein Punkt  
fest bleibt, heißt Punktgruppe


Beim Basis hat meist andere Symmetrie als Gitter,  
deshalb Unterscheidung wichtig!

Die Menge aller SymOp. 2-5 für gegebenes Gitter  
oder Basis erfüllt die Def. einer Mathematis.

Gruppe (abgeschlossen, inverses Element, Assoz.-Gesetz,  
neutrales Element)

nicht notwendig kommutativ

Berechnung der Punktgruppen durch erzeugende Elemente der "Schönflies - Notation"

Bsp  Punktgruppe  $3m$  bzw. " $C_{3v}$ "

Def. Die Raumgruppe ist die volle Symmetriegruppe einschl. Translation, Schraubung und Gleitspiegelung

### 2.3 fundamentale Gittertypen

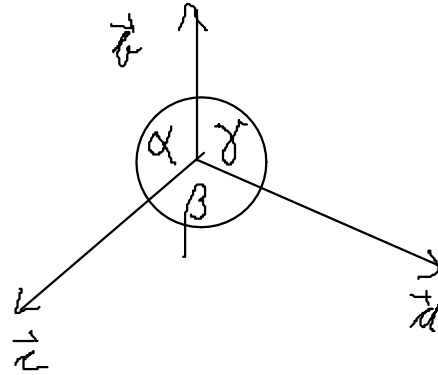
"Bravais - Gitter" (Bravais 1845)

7 Gitterpunktgruppen

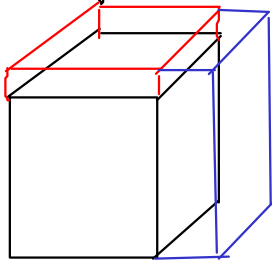
"Kristallsysteme"

14 Gitterraumgruppen

"Bravais - Gitter"



Kristallsystem höchste Symmetrie: **Würfel** (Kubisches System)



kubisch (Würfel)

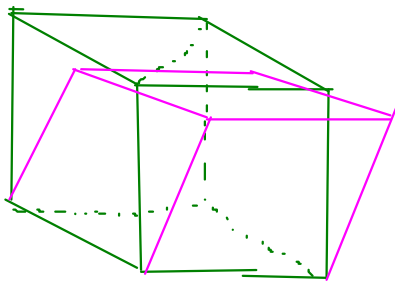
tetragonal ← hexagonal → trigonal

orthorombisch (Quader)

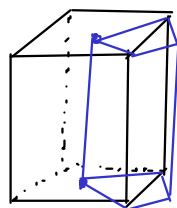
Verzerrung  
Längs  
Raumdehnung

monoklin

triklin



Fehler in vielen Büchern



← Basiszentrierte lässt sich in einfachere überführen

## 2.4 Kristallographische Punktgruppe

Kristallstruktur = Gitter + Basis

Zu jeder Gitterpunktgruppe gibt es versch. kristallographische Punktgruppen oder "Kristallklassen"

Bsp Kubische System hat 5 kristallographische Punktgruppen  
Kristallographische Punktgruppen erhält man durch sukzessive Erniedrigung der Symmetrie, solange noch Symmetrioperationen übrigbleiben, die nicht in die nächst niedrigere Gitterpunktgruppe fallen.

Insgesamt 32 kristallographische Punktgruppen - kombiniert mit den Gitterraumgruppen gibt es 230 Raumgruppen und Kristallstrukturen

## 2.5 Einfache Kristallstrukturen

Die meisten Elemente kristallisieren in einer dieser Strukturen:

kubisch - flächenzentriert (fcc face-central-cubic)

kubisch - raumzentriert (bcc body " " )

hex. dichteste Packung (hcp hex. close packing)

### Kubisch flächenzentriert

4 Atome pro Einheitszelle

(prim. Einheitszelle wäre rhomboedrisch)

mit Vol.  $\frac{a^3}{4}$

Abstand nächste Nachbarn  $a\sqrt{2}$

Anzahl " " (Koordinationszahl) 12

Dichtest gepackte Ebenen ( $\perp$  Raumdiagonale)

Stapelfolge  $abcabc$



Symmetrien: Spiegelung  $m$

Yachsenzentriert, Drehachsen  $4, 3, 2$

$\Rightarrow$  Punktgruppe  $\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$ , oder  $O_h$  (Oktaeder)

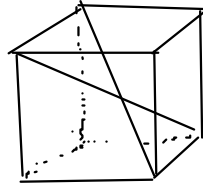
Bsp: Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al, ...

Kubisch raumzentriertes Gitter

2 Atome pro Elementarzelle

(primitive Zelle:

Rhomboeder mit Vol.  $\frac{a^3}{2}$ )



Abstand nächster Nachbarn  $N: \frac{1}{2} \sqrt{3}$

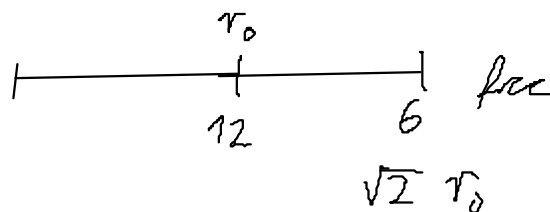
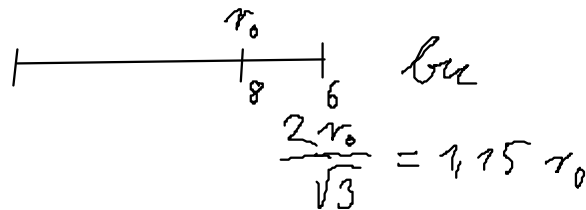
Koord. Zahl 8

Bsp. Alkalimetalle, Ba, V, Nb, Ta, W, Fe,

Warum kristallisieren viele Metalle mit ungerichtetem

Bindungen in bcc und nicht in fcc

Betrachte Abstand übernächster Nachbarn



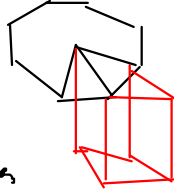
$\Rightarrow$  „effektive Koordinationszahl“  $\approx 14$

Wigner-Seitz-Zelle (Folie)

# Hexagonal dichte Packung $hcp$

Dichtest gepackte Ebenen, über Stapelung  $ABAB$

Kein Bravais-Gitter,  
Basis besteht aus 2 Atomen



Bsp: Zn, Al, Be, Mg, Ru, Os

Koord. Zahl 12