

Diamantgitter

Darstellbar als 2 ineinander geschichtete fcc-Gitter,
die entlang der Raumdiagonalen verschoben sind

Ursprung $(0, 0, 0)$ bzw. $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

Koordinationszahl 4

Bsp: Diamant, Si, Ge, α -Zn

Zinkblende-Struktur

entsteht aus Diamantgitter, wenn die beiden
fcc-"Untergitter" mit verschiedenen Atomsorten
besetzt.

Bsp: III-V z.B. GaAs, GaP, InSb
(für Laser)

II-VI z.B. ZnS (existiert auch in hexagonaler
Struktur)

NaCl-Struktur

zwei ineinander geschichtete fcc Gitter

eins mit Na^+ , eins mit Cl^-

Ursprung $(0, 0, 0)$ und $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

Einheitszelle enthält 4 Na^+ und 4 Cl^- Ionen.

Koordinationszahl 6

Cs-Cl Struktur

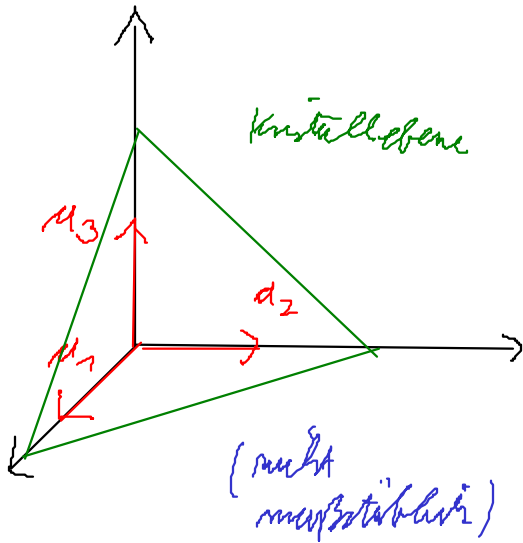
kann man sich vorstellen als bcc-Gitter,
bei dem die Raumszentrierte Position mit
einer anderen Ionensorte besetzt ist.

ergänzlich: einfach-kubische Gitter mit Cs^+ und
 Cl^-

Koordinationszahl 8

2.6 Indizierung von Kristallebenen und Richtungen

Kristallebenen („Netzebenen“)



Kristallebenen sind eindeutig festgelegt durch die 3 Durchstoßpunkte der Gitterachsen in Einheiten der fundamentalen Gittervektoren a_i

in diesem Bsp

$$2 \vec{a}_1, 2 \vec{a}_2, 3 \vec{a}_3$$

Millersche Indizes

1. suche Schnittpunkte der Kristallachsen in Einheiten
(hier 2, 2, 3)
2. bilde Kehrwert und suche kleinste ganze Zahlen im gleichen Verhältnis wie Kehrwerte

$$\text{also hier } \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3} \Rightarrow 3, 3, 2$$

Die so gewonnenen Zahlen heißen Millersche Indizes hkl

$\{hkl\}$ bezeichnet die ganze Schaar paralleler Netzebenen.

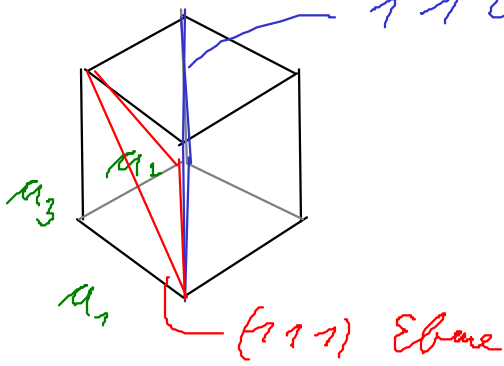
Jeder Punkt des Gitters liegt auf einer Ebene der $\{hkl\}$ Schaar

Für Ebenen parallel zu einem fund. Gittervektor

der orthogonale Miller Index = 0

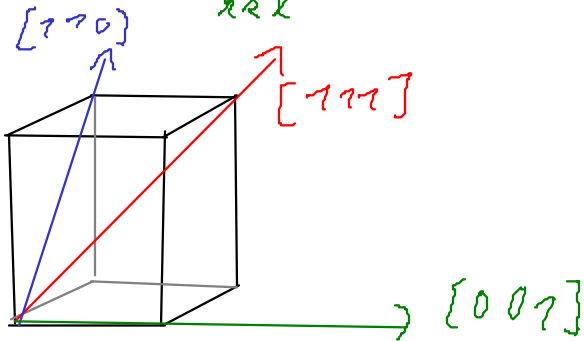
statt $(-1\ 0\ 0)$ schreibt man $(\bar{1}\ 0\ 0)$

Beip 110 Ebene



Kristallrichtungen: Die $[hkl]$ Richtung ist die Richtung des Gittervektors

$$\vec{R}_{hkl} = h\vec{a}_1 + k\vec{a}_2 + l\vec{a}_3$$



Für kubische Gitter gilt: Die $[hkl]$ Richtung steht senkrecht zur Ebenenschar (hkl) mit gleichem Index
Im allgemeinen (nicht-kubisch) gilt das nicht.

2.7 (Ausblick) Komplexe Kristallstrukturen

Anorganische "Clusterverbindungen"

Ein Kristalle mit großer Elementarzelle
(mehrere 100-1000 Atome in Basis)

Proteinkristalle

Zur Bestimmung von Molekülstruktur von Proteinen ist die Kristallisation notwendig.

Quasikristalle

5-zählige Translationssymmetrie ist nicht möglich,
aber eine quasi-periodische Anordnung ist möglich
(Theorie Penrose, exp. Shechtman 1984)
Komplizierte intermetallische Verbindungen

3 Beugung und reziprokes Gitter

Beugung an einer periodischen Struktur
optisches Gitter, dort meist Gitterkonst. gegeben
und λ zu bestimmen.

Beim Kristall: periodische Anordnung von Atomen,
Atom als Streuzentren.

z.B. λ gegeben, Gitterkonst. gesucht

Es muss gelten: $\lambda \leq$ Gitterkonst.

Daher verwendet man Röntgen- oder Materiewellen

z.B. Elektronen, Neutronen, Atome, ...

3-1 Allgemeines zur Beugung

Voraussetzungen: 1. Einfallstrahlung
einfallende Welle trifft streuende Materie
Zur Ermittlung von Kugelwellen an.
Diese werden nicht weiter gestreut.

2. Strahlungsquelle A und Detektor B
soll so weit von Streuzentren
entfernt sein, dass man ebene Wellen
annehmen kann.

3. Jeder Punkt der streuenden Materie emittiert Kugelwellen
"Streudichte" $\rho(\vec{r})$ i. a. komplex
Amplitude und Phase der Streuwelle wird beobachtet

durch $f(\vec{r}) \cdot (PO \neq)$

gesamte Streuamplitude am Ort B

$$A_B \sim e^{-i\omega_0 t} \int f(\vec{r}) e^{+i(\vec{k}_0 - \vec{k}) \cdot \vec{r}} dV$$

$\vec{k} - \vec{k}_0$ Streuvektor

Bem. 1) wir setzen Streuung von einem starren Gitter

voraus $\Rightarrow f(\vec{r})$ zeitunabhängig

Zeitabhängigkeit von A_B nur über Phasenfaktor

mit feste Frequenz

Energieerhaltung \Rightarrow elast. Streuung

Wenn $f(\vec{r}, t)$, Streuwellen mit $\omega \neq \omega_0$

inelastische Streuung

\Rightarrow Gitterdynamik (Kap 4)

2. Im experiment wird i. a. nicht

die Amplitude, sondern die Intensität

beobachtet.

$$\Rightarrow I(K) \sim |A_B|^2 \sim \left| \int f(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} dV \right|^2$$

$\Rightarrow A_B$ ist Fourier Transform der Streuchichte

Die Phaseninformation geht verloren, da

man $|A_B|^2$ gemessen wird.

\Rightarrow Phasenproblem

\Rightarrow Vielfachstreuung