

## Diamantgitter

darstellbar als zwei ineinandergeschichtete fcc-Gitter, die entlang der Raumdiagonalen verschoben sind.

Ursprung  $(000)$  bzw.  $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$

Koordinationszahl: 4

Beispiele: Diamant, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn

## Zinkblende-Struktur

entsteht aus Diamantgitter, wenn die beiden fcc-Gitter mit unterschiedlichen Atomsorten besetzt werden:

Beispiel: II-V-Verbindungen, z.B. GaAs, GaP, InSb, ...

II-VI-Verbindungen, ZnS (Zn existiert auch in hex. Struktur)

## NaCl-Struktur

zwei ineinandergeschichtete fcc-Gitter, ein mit  $\text{Na}^+$ , das andere mit  $\text{Cl}^-$  besetzt. Ursprung  $(000)$  bzw.  $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$

Einheitszelle enthält 4  $\text{Na}^+$  und 4  $\text{Cl}^-$  Ionen

Koordinationszahl: 6

## CsCl-Struktur

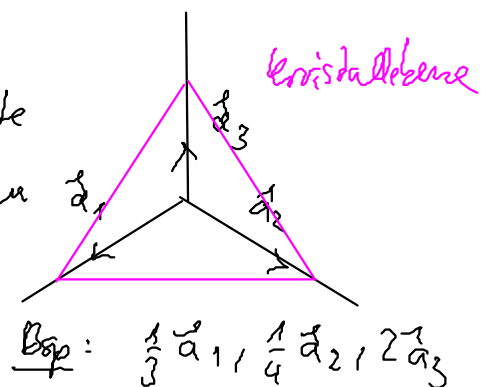
Sann man sich vorstellen als bcc-Gitter, bei dem die raumzentrierte Position mit anderen Ionen besetzt ist. eigentlich: ein einfaches kubisches Gitter mit einer Basis aus  $\text{Cs}^+$  und  $\text{Cl}^-$

Koordinationszahl: 8

## 2.6 Indizierung von Kristallebenen und Kristallrichtungen

Kristallebenen ("Netzebenen"):

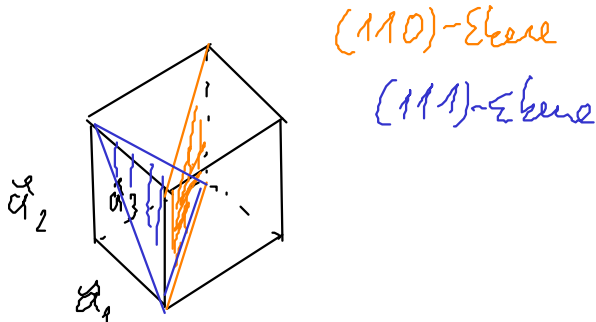
ein den  $h$  festgelegt durch die 3 Durchstoßpunkte der Gitterachsen in Einheiten des fundamentalen Gittervektors  $\vec{a}_i$



## Millersche Indizes

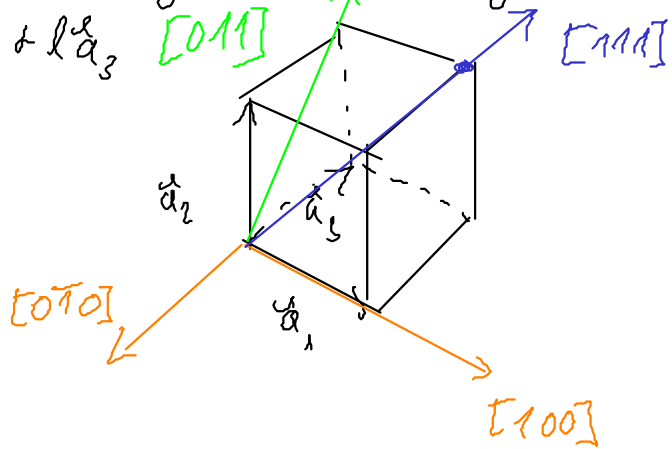
- ① Sachre Schnittpunkte des Kristallachsen,  $(\frac{1}{3} \frac{1}{4} 2)$
  - ② Bilde Kehrwert und sachre kleinste ganze Zahlen im gleichen Verhältnis wie Kehrwerte,  $(3 \ 4 \ \frac{1}{2}) \rightarrow (6 \ 8 \ 2)$
- Die so gewonnenen Zahlen heißen Millersche Indizes  $hkl$

$(hkl)$  bezeichnet die ganze Schaar paralleler Ebenen  
 Jedes Punkt des Gitters liegt auf einer Ebene der  $(hkl)$ -Schaar  
 Für Ebene parallel zu einem fundamentalen Gittervektor:  
 der entsprechende Miller-Index = 0  
 statt  $(-100)$  schreibt man  $(\bar{1}00)$



Kristalrichtungen 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 Ebenenschaar  $(hkl)$  mit gleichen Index  
 i.A. gilt dies nicht



## 2.7 Komplexe Kristallstrukturen

- Anorganische "Elektronenbeindungen", Einkristalle mit großer Elementarzelle, Basen mit mehreren 100-1000 Atomen
- Protein-Einkristalle: zur Bestimmung von Molekülstrukturen  
 Proteinen: Kristallisation notwendig.
- "Quasikristalle": 5-zählige Symmetriegruppen sind nicht möglich

in  $\infty$ -ausgedehntem Gitter, aber eine quasiperiodische Anordnung

Theorie von Penrose

Experimente 1984

komplexe atommetallische Verbindungen

## 3. Beugung und reziprokes Gitter

Beugung an einer periodischen Struktur

- optisches Gitter: dort meist Gitterkonst. geg.,  $n$  zu bestimmen
- Kristall: periodische Anordnung von Atomen als Streuzentren  
z.B.  $n$  geg., Gitterkonst. gesucht  
es muss gelten  $n \lesssim$  Gitterkonst., deshalb Röntgenstrahlen  
oder auch Materiewellen (Elektronen, Neutronen, Atome)

### 3.1 Allgemein zur Beugung

Voraussetzungen: (1) Einfallstrahlung: einfallende Wellen trifft streuende Materie zur Emission von Kugelwellen an, diese werden dann nicht mehr gestreut

(2) Strahlungsquelle  $Q$  und Detektor  $B$  beide so weit von streuender Materie entfernt, dass einlaufende und auslaufende Wellen als ebene Wellen betrachtet werden können

- Jeder Punkt der streuenden Materie: „Streufläche“  $\rho(\vec{r})$ , ist komplex
- Amplitude und Phase der Streuwelle wird beschrieben durch  $g(\vec{r})$

gesamte Streuamplitude am Ort  $B$

$$A_B \sim \exp[-i\omega t] \int \rho(\vec{r}) \exp[-i(\vec{e} - \vec{e}_0) \cdot \vec{r}] d\vec{r}$$

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

Bem:

- (1) Setze Streuung an starrem Gitter voraus, d.h.  $\rho(\vec{r})$  zeitunabhängig.  
Zeitabhängigkeit von  $A_B$  nur über Phasenfaktor mit festem

Frequenz  $\omega_0$ : Energieerhaltung  $\rightarrow$  elastische Streuung

Wenn  $p(\vec{r}, t)$ : Sturwellen mit  $\omega \neq \omega_0 \rightarrow$  inelastische Streuung

$\Rightarrow$  Gylerdynamik (Kapitel 4)

② Im Experiment wird i.A nicht die Amplitude sondern Intensität

beobachtet  $I(k) \sim |A_B|^2 \sim \left| \int p(\vec{r}) \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}] d\vec{r} \right|^2$

$A_B$  ist Fourier transformierte der stochastischen

Ortlichen Verteilung von  $p(\vec{r})$  aus  $I(k)$  nicht eindeutig

(„Phasenprobleme“) Lösung: z.B. Vielfachstreuung