

repetition

binding in crystals

structure and symmetry in crystals

point groups: 7 / translational symmetry

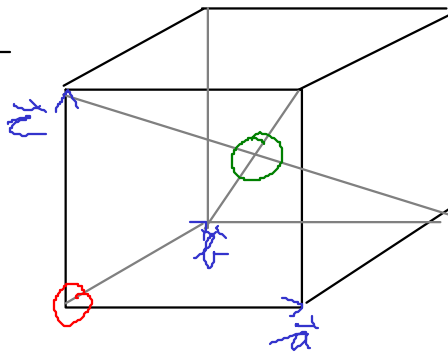
Bravais lattices: simple basis in lattice

Bravais - Gitter: für kugelsymmetrische Bausteine

2.3.7 Gitter

1) SC Simple Cubic

CCl

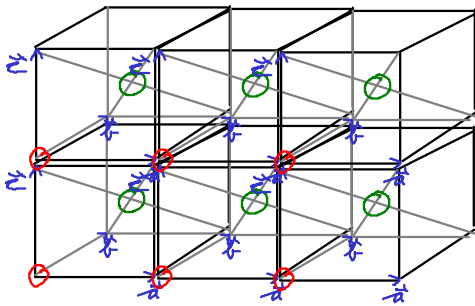


$$R = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

ist Symmetrioperation

Basis: Atom bei $(0, 0, 0)$

$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$



Basis enthält nur 2 Atome

Bsp CCl: C: $r_i = 1,65 \text{ \AA}$

Cl: $r_i = 1,87 \text{ \AA}$

Packungsverhältnis

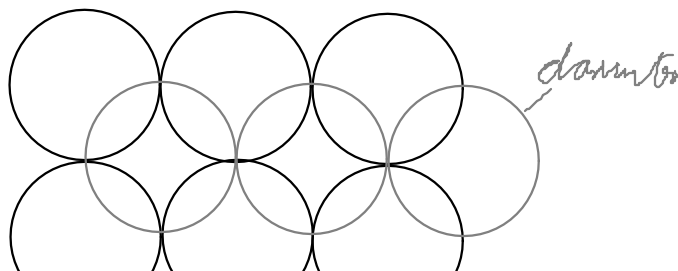
gefülltes Volumen wenn man Dichte Packung harter Kugeln annimmt

für sc: 0,52

für bcc: 0,68

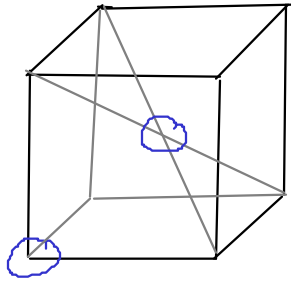
für gleich große Kugeln

Ansicht



2) bcc Body centered cubic

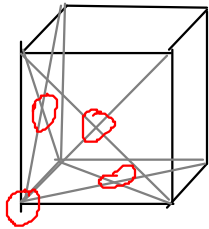
Metalle: Na, Fe, Cr



bcc macht ca. 30%
aller Kristalle aus

Basis auch hier $(0, 0, 0)$ und $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
aber nur eine Sorte

3) fcc face centered cubic



fcc macht noch einmal
30% aller Kristalle aus

4 Gitterpunkte: $(0, 0, 0)$ $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$
 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

NaCl:

Basis 2 Atome, verschieben um obige Vektoren ergibt
komplettes Gitter

Basis = $(0, 0, 0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

↳ vermeidet Verwirrung bei
der Richtung

2 Untergitter

Diamant

Basis $(0, 0, 0)$ $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ (beide C-Atome)
in fcc-Gitter

Zm 5 Zinkblende

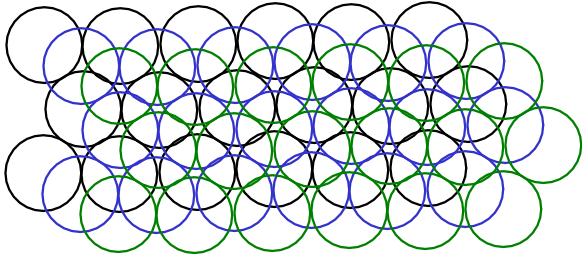
2 versch. Basiatome

$$z_n: (0, 0, 0)$$

$$S\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$$

4) hcp hexagonal close packing

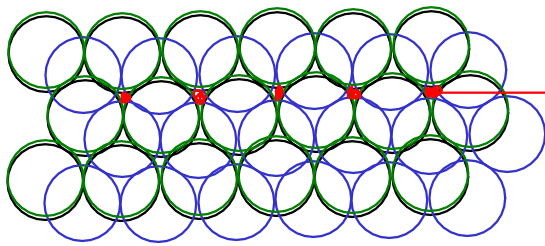
A-B-C-A-B-C



=> fcc

etwa 35% alle
Kristalle sind
hcp

beide haben 74%
Raumfüllung

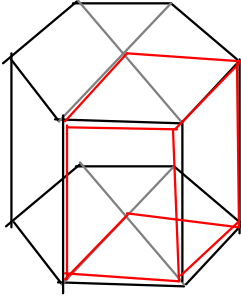


A-B-A-B

"löcher"

=> hcp

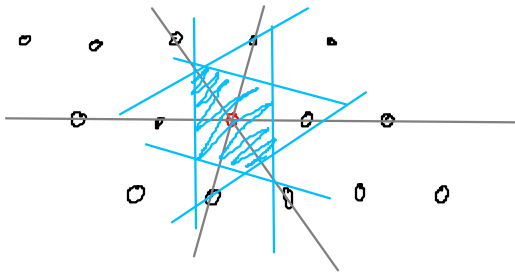
Basis



Elementarzelle

primitive Elementarzellen sind nicht eindeutig

2.4. Wigner-Seitz-Zelle



Elementarzelle mit Gitterpunkt

im Zentrum der Elem. Z.

Besteht aus Zellen, die den Kristall

lückenlos füllt

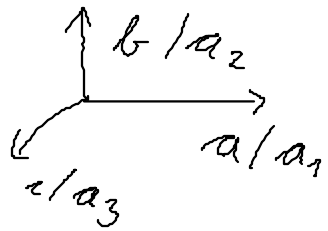
Konstruktion: Verbinde Mittelpunkt mit
umgebenden Punkten, zeichne Mittelsenkrechte

später: Wigner-Seitz-Zelle
dichter Raum

↔ Brillouin-Zone
reziproker Raum

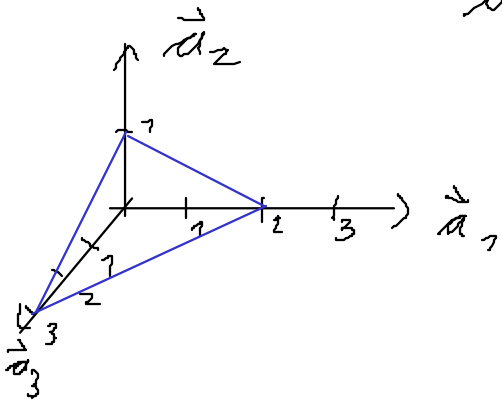
2.5 Millersche Indizes

(1839 William Miller)



3 ganzzahlige Indizes
(h, k, l)

bezeichnen eine Ebene im Kristall



Ebene geht durch $\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$

also $\frac{1}{h} \vec{a}_1$, $\frac{1}{k} \vec{a}_2$, $\frac{1}{l} \vec{a}_3$

$$2 \cdot a_1, 1 \cdot a_2, 3 \cdot a_3 \Leftrightarrow \frac{2}{3} a_1, \frac{2}{6} a_2, \frac{2}{2} a_3$$



$$2 a_1, 2 a_2, 3 a_3 \Leftrightarrow \frac{2}{3} a_1, \frac{2}{3} a_2, \frac{2}{2} a_3$$

negative Indizes $\bar{1} \Leftrightarrow -1$

2.7 Reziproke Gitter

Gitter: $\vec{A} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$



rez.-Gitter

$$\vec{B} = n_1 \vec{b}_1 + n_2 \vec{b}_2 + n_3 \vec{b}_3$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

Volumen der Elem. z. im direkten Raum

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_a}$$

Volumen

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_a}$$

$$V_a = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

für Rechtwinklige Kristallsysteme

$$\vec{b}_{1,2,3} = \frac{2\pi}{a_{123}} \vec{a}$$

Eigenschaften

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

<u>Beispiele</u>	<u>direkter</u>		<u>reziproker</u>	<u>Raum</u>
	sc	→	sc	
	bcc	→	fcc	
	fcc	→	bcc	