

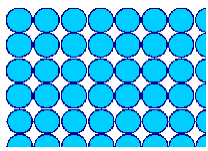
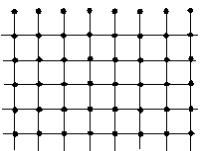

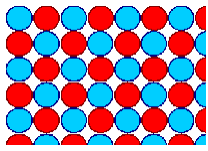
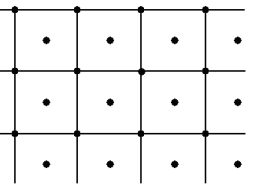


### 3.1.2 Kristall = Gitter + Basis

#### Allgemeine Bemerkungen

- Kristallstrukturen sind mathematisch erfaßbar. Das Vorgehen dabei ist wie folgt:

  - Zuerst betrachten wir eine *rein mathematische* Konstruktion: Das **Punktgitter**. In ihm sind mathematische Punkte so angeordnet, daß sie eine Translationssymmetrie besitzen. Das Punktgitter ist kein Kristall; denn ein Kristall ist ein physikalisches Objekt, er bedarf der Atome!
  - Vom Punktgitter zum Kristall kommt man, indem jedem Punkt des Punktgitters ein Baustein des Kristall zugeordnet wird, die sogenannte **Basis**. Das kann ein einziges Atom sein, aber auch Verbände oder Moleküle von hunderten von Atomen.
- Das war eine wörtliche Wiederholung des vorhergehenden Unterkapitels. Denn erfahrungsgemäß fällt es schwer, die Begriffe "(Punkt)*gitter*" und "*Kristall*" auseinanderzuhalten; sie werden leider auch im Sprachgebrauch und in der Literatur oft (fälschlich) synonym verwendet.

  - Bevor die formale Beschreibung näher erläutert wird, schauen wir ein einfaches Beispiel an, das verdeutlicht was beachtet werden muß.

Kristall	=	Gitter	+	Basis
	=		+	
	=		+	 oder 

Die *Gitterpunkte* sind hier wie in den folgenden Darstellungen als *kleine Kreise* dargestellt, die zur besseren Visualisierung teilweise durch durch *Gitterlinien* verbundenen sind.

- Die Versuchung den zweiten Kristall zu erzeugen, indem man auf das engmaschige Gitter der obigen Reihe abwechselnd blaue und rote Kugeln legt ist groß - *und das ist falsch*, denn wir hätten dann die *falsche Gitterkonstante* zum richtigen Kristall!

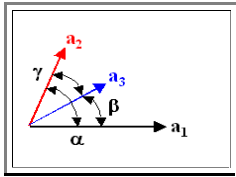
  - Wir haben aber *zwei verschiedene Gitter*; sie unterscheiden sich in ihren **Gitterkonstanten**, den Abständen zwischen den Gitterpunkten.
  - Das zweite Beispiel zeigt auch schon, daß in der Kristallographie manchmal Situationen vorliegen, die nicht eindeutig sind - die Basis des Kristalls kann auf mehrere Weisen gewählt werden. Befestigt man sie aber in immer gleicher Weise an den Gitterpunkten, entsteht jedesmal derselbe Kristall.
  - Als Faustregel merken wir uns: Kompliziert aussehende *Kristalle* haben in der Regel eine komplizierte *Basis* - das *Gitter* kann ganz einfach sein. Der Link [illustriert dies recht drastisch](#).
- Dazu eine kleine Übungsaufgabe:

## Übung 3.1-1

Identifikation von Gitter und Basis

## Mathematische Beschreibung des Gitters

Jedes dreidimensionale **Gitter** ist eine Folge von **Parallelepipeden**, das durch drei elementare Translationsvektoren  $\underline{a}_1$ ,  $\underline{a}_2$ ,  $\underline{a}_3$  gegeben wird. Man nennt diese Vektoren oft auch die **Basisvektoren** des Gitters; das Wort "Basis" hat in diesem Zusammenhang jedoch nichts mit der **Basis**, d.h. dem Arrangement der Atome wie oben eingeführt, zu tun

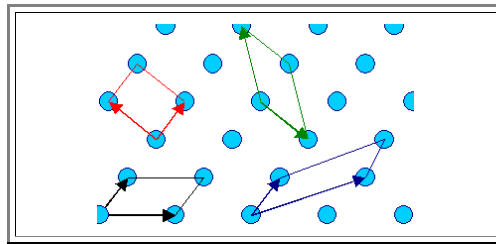


- Es ist wichtig zu beachten, daß zwischen den drei Basisvektoren  $\underline{a}_i$  beliebige Winkel  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  vorliegen können.

- Jeder Gitterpunkt eines mathematischen Gitters ist damit durch einen **Vektor  $\underline{T}$**  erreichbar, der gegeben ist durch

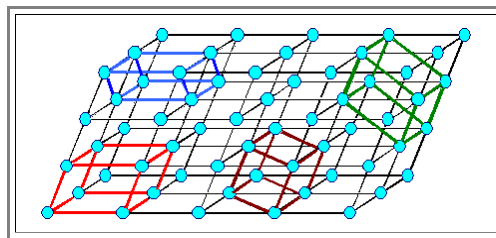
$$\underline{T} = u \cdot \underline{a}_1 + v \cdot \underline{a}_2 + w \cdot \underline{a}_3$$

- Wobei die  $u, v, w$  **ganze Zahlen** sind, z.B.  $(u, v, w) = (0, 17, -352)$
- Der Vektor  $\underline{T}$  heißt **Translationsvektor** oder auch **Gittervektor** des Gitters.
- Die Basisvektoren  $\underline{a}_1$ ,  $\underline{a}_2$ ,  $\underline{a}_3$  sind **per Definitionem** auch Translationsvektoren des betrachteten Gitters; das von ihnen aufgespannte Parallelepiped heißt **Einheitszelle** oder **Elementarzelle** des Gitters, abgekürzt **EZ**.
- Mit **einer** geeignet gewählten **EZ** kann damit ganz offenbar jeder beliebige Gittertyp beschrieben werden.
- Die Umkehrung dieses Satzes gilt aber nicht: Ein **gegebenes** Gitter kann immer mit **mehr als einer** EZ beschrieben werden. Ein-und-dasselbe Gitter kann durch **verschiedene** EZ generiert werden. Wir machen uns das an dem zweidimensionalen Gitter mit der folgenden Graphik klar. Zur Abwechslung ist das Gitter mal mit kleinen blauen Kreisen statt mit (schwer erkennbaren) Punkten dargestellt.



Die 4 eingezeichneten Einheitszellen mit ihren jeweiligen Basisvektoren spannen **alle** dasselbe Gitter auf.

Im Dreidimensionalen ist das nicht anders, nur schwerer darzustellen. Im folgenden Beispiel sind vier Einheitszellen eingezeichnet; weitere Einheitszellen wären möglich.



Wir brauchen ein Kriterium, um **eine** definierte Einheitszelle wählen zu können. Wir machen es uns einfach und definieren:

- Die Einheitszelle mit dem **kleinsten Volumen** heißt **primitive Einheitszelle**
- Wobei das Volumen  $V$  einer Einheitszelle durch das **Spatprodukt** der Basisvektoren gegeben ist:

$$V = \underline{a}_1 \cdot (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)$$

- Wie man für ein gegebenes Gitter die kleinste Einheitszelle findet, und ob es möglicherweise mehrere mit demselben kleinsten Volumen gibt, soll uns nicht weiter interessieren, denn letztlich haben die mathematischen Einheitszellen keine allzugroße Bedeutung wie wir gleich sehen werden.

Eigentlich sind wir fertig. Wir haben eine Methodik um alle denkbaren Gitter zu generieren. Aber so wie es sinnvoll war, die große Klasse der Tiere noch weiter zu unterteilen, ist es auch sinnvoll die Menge aller möglichen Gitter in Gruppen zu unterteilen.

Dabei bietet es sich an, die einem Gitter innewohnende **Symmetrie** als Kriterium zu nehmen. Wir unterscheiden die Symmetrieeoperationen.

- **Translation** um einen beliebigen Gittervektor. Dies läßt per Definitionem das Gitter unverändert, d.h. überführt das Ausgangsgitter bei Anwendung der Symmetrieeoperation in sich selbst. Alle Gitter haben Translationssymmetrie.
- **Spiegelungen** an Ebenen (die durch **2** Translationsvektoren aufgespannt wird). Nicht alle Gitter sind spiegelsymmetrisch.
- **Inversionen** bzgl. eines Gitterpunktes, d.h. der Ersatz aller **R** die vom Gitterpunkt ausgehen durch **-R**
- **Rotation** mit einem Gittervektor als **Drehachse**. Erlaubt sind **2-, 3-, 4-** und **6-** zählige Drehachsen, d.h. Drehungen um **360°, 180°, 120°, 90°** und natürlich die ganzzahligen Vielfachen. Alle Gitter haben mindesten eine Rotationssymmetrie.
- Es gibt **keine 5-** oder **7-** zählige Drehachsen für Gitter, wohl aber für die Basis (Vergleiche [Übungsaufgabe 3-1](#))!

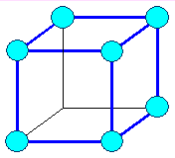
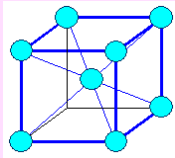
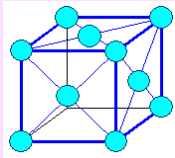
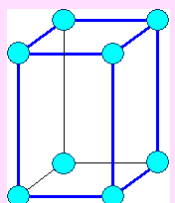
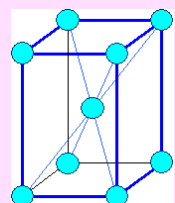
Drehungen wurden absichtlich an das Ende der Aufzählung gestellt, denn hier muß einfach eine der faszinierendsten Entwicklungen der Materialwissenschaft in den letzten Jahren kurz erwähnt werden: Die **Quasikristalle**.

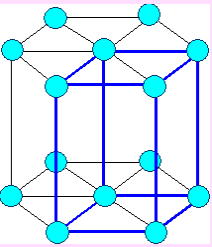
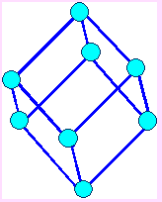
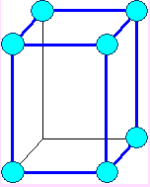
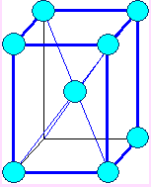
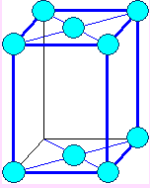
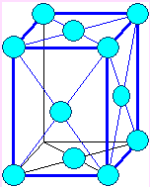
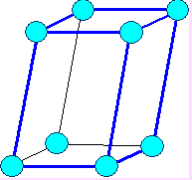
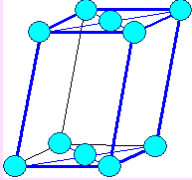
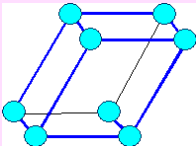
In jedem Textbuch der Kristallographie oder Festkörperphysik, das etwas näher auf die Symmetrien in Kristallen eingeht, wird prominent hervorgehoben, daß es zwar **1-, 2-, 3-, 4-** und **6-** zählige Drehachsen gibt, aber keine **5-** zähligen, da es **unmöglich ist die Ebene mit gleichseitigen Fünfecken vollständig zu bedecken**.

- Das ist nach wie vor richtig. Richtig ist es aber auch, daß **1984** ein Material gefunden wurde, das sich in vielen Experimenten wie ein Kristall mit einer **5-** zähligen Symmetrie benahm. Da es ein echter Kristall nicht sein kann, wurde die Bezeichnung **Quasikristall** gewählt.
- Quasikristalle haben nicht nur ungewöhnliche Eigenschaften, sondern sind auch als mathematische Objekte hochinteressant. Beispielsweise kann ein (realer und anfaßbarer) Quasikristall aus der Projektion eines (mathematischen) **6-** dimensionalen Gitters auf einen geeignet gewählten normalen dreidimensionalen Raum gewonnen werden - mit unmittelbaren Konsequenzen auf die realen Quasikristalle, z.B. bei der Definition von Defekten in Quasikristallen!
- Mehr dazu im Link "[Quasikristalle](#)".

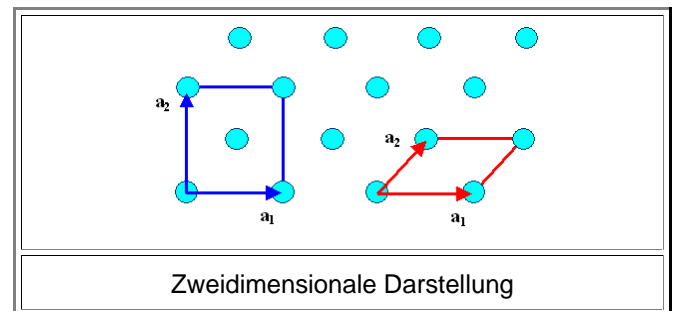
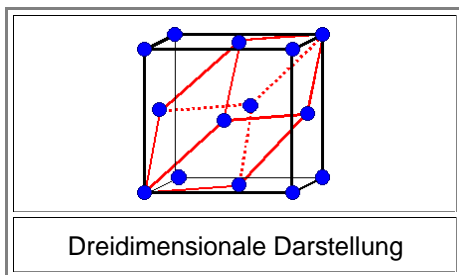
Sortiert man alle möglichen (und nicht notwendigerweise primitiven) Einheitszellen nach abnehmender Symmetrie, erhält man genau **14** Gittertypen, die sogenannten **Bravais - Gitter**, mit denen alle überhaupt vorkommenden Fälle abgedeckt werden können.

- Warum gerade **14** Bravaisgitter existieren, und warum es gerade die sind, die in der untenstehenden Tabelle gezeigt werden, ist nur aus nicht ganz trivialen Betrachtungen der Gruppentheorie erschließbar; wir werden das hier aber nicht weiter begründen.
- Die **14 Bravaisgitter** lassen sich wiederum in **7 Kristallsysteme** zusammenfassen (die alle einen Namen haben), und die sich nur durch die Länge der Basisvektoren und den Winkeln zwischen ihnen unterscheiden.
- Achtung! Eigentlich müßte es **Gittersysteme** heißen - wir sind noch beim mathematischen Gitter - aber die Konvention ist leider anders
- Die nachfolgende Tabelle zeigt eine Gesamtschau.

Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Achsenwinkel	Zugehörige Bravaisgitter (gelegentlich sind nur "sichtbare" Gitterpunkte (= blaue Kreise) eingezeichnet)		
<b>Kubisch</b> $a_1 = a_2 = a_3 = a$ = Gitterkonstante	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 kubisch-primitiv	 kubisch-raumzentriert	 kubisch-flächenzentriert
<b>Tetragonal</b> $a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$			

		Tetragonal-primitiv	Tetragonal-raumzentriert	
<b>Hexagonal</b> $a_1 = a_2 \neq a_3$ Üblich: $a_3 = c$ Hex. Ebene = <b>Basisebene</b>	$\alpha = \beta = 90^\circ,$ $\gamma = 120^\circ$	 Hexagonal (EZ ist ergänzt um hex. Symmetrie zu zeigen)		
<b>Rhomboedrisch</b> oder <b>Trigonal</b> $a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	 Rhomboedrisch		
<b>Orthorhombisch</b> $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 Orthorhombisch-primitiv	 Orthorhombisch-raumzentriert	 Orthorhombisch-basisflächenzentriert  Orthorhombisch-flächenzentriert
<b>Monoklin</b> $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ,$ $\gamma \neq 90^\circ$	 Monoklin-primitiv		 Monoklin-basisflächenzentriert
<b>Triklin</b> $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	 Triklin		

- Mir diesen **14 Gittern** lassen sich **alle Kristalle** darstellen, indem man auf **jeden** Gitterpunkt die Basis aus dem jeweiligen Atomen setzt.
  - Die "fehlenden" Gittertypen, z.B. das tetragonal-raumzentrierte Gitter, haben eine Symmetrie, die in einem der **14** Bravaisgittern schon abgedeckt ist.
  - Der **Vorteil** der Bravaisgitter ist, daß sie die jeweils größtmögliche Symmetrie unmittelbar erkennen lassen.
  - Der **Nachteil** der Bravaisgitter ist, daß sie nicht immer primitive Einheitszellen sind. Das ist aber nur in seltenen Fällen ein Problem. In der Regel ist das Erkennen der Symmetrien wichtiger und hilfreicher - und **wir** benutzen von jetzt an Bravaisgitter!
- Nehmen wir als Beispiel das **kubisch-flächenzentrierte** Bravaisgitter, abgekürzt **fcc** ( für das englische "face centered cubic").
  - Es ist die Grundlage für viele der **Elementkristalle**, die man erhält, indem auf einen **Gitterpunkt** des **fcc** - Gitters als Basis **ein** Atom des betreffenden Elementes setzt. Die hohe Symmetrie des kubischen Gitters ist unmittelbar erkennbar.
  - Würde man die zugehörige **primitive** Einheitszelle wählen - die natürlich mit derselben Basis denselben Kristall ergeben muß - sähe das so aus:



- Der primitiven **EZ** des **fcc** - Gitters sieht man die einfache kubische Symmetrie des Gitters nicht an; sie wird deshalb kaum verwendet.
- Es gibt aber noch weitere Möglichkeiten, sich **EZ** für ein gegebenes Gitter zu konstruieren. Später werden wir noch mit der sogenannten **Wigner - Seitz Elementarzelle** zu tun haben, für alle Zwecke der Materialwissenschaft I genügt es aber, die (wichtigsten der) **14** Bravais Gitter zu kennen.
- Im nächsten Abschnitt werden wir die Bezeichnungen für **Richtungen** und **Ebenen** in einem Gitter kennenlernen.
  - Vorher machen wir aber noch die Übungen:

**Fragebogen**

**Multiple Choice Fragen zu 3.1.2**