

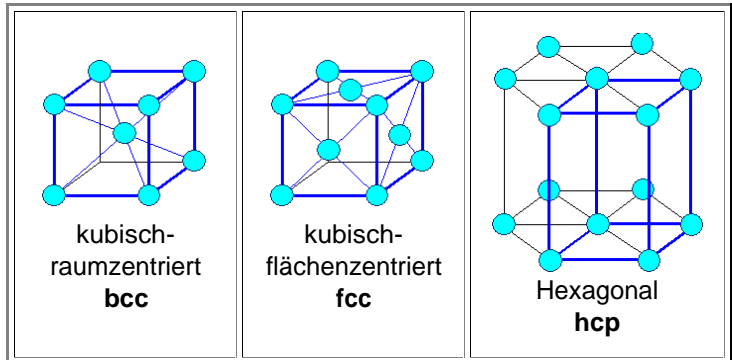
3.4 Zusammenfassung / Merkpunkte zu Kapitel 3: Perfekte Kristalle

- Ein Kristall hat eine regelmäßige (dreidimensionale - periodische) Struktur.
 - Ein Kristall besteht immer aus (mathematischem Punkt-) **Gitter** und (physikalischer) **Basis**
 - Das Punktgitter ist vollständig durch einen Satz dreier Vektoren \underline{a}_i beschrieben; jedem Gitterpunkt kann ein **Translationsvektor** \underline{T} zugeordnet werden
 - Die Basis ist i.a. ein Atom oder ein Molekül, dabei sind der Komplexität keine Grenzen gesetzt.

Kristall = Gitter + Basis

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

- Ein Gitter kann noch verschiedene Grade an **Symmetrie** aufweisen: Neben der immer vorhandenen Translationssymmetrie auch Rotations-, Spiegel- und Inversionssymmetrien.
 - Je nach dem "Grad" der Symmetrie kann man genau **14** verschiedene "Bravais"-Gitter unterscheiden.
 - Drei davon sind besonders wichtig: **fcc**, **bcc**, und **hcp**.
- Die Längen der Basisvektoren der Bravaisgitter heißen die **Gitterkonstanten** des Gitters.



- Richtungen werden in einem Koordinatensystem mit den drei Achsen des Bravaisgitters als kleinstmögliches ganzzahliges Tripel in **eckigen** Klammern beschrieben

$\langle uvw \rangle$ **Gesamtheit aller kristallographisch gleichwertigen Richtungen**

$[uvw]$ **Spezifische Richtung**

- Negative Indizes werden durch einen (in HTML nicht direkt darstellbaren) Überstrich markiert.

Merke:

Allgemeine Indizierung hat Klammern mit "Spitzen".

- Ebenen werden durch ein ganzzahliges Zahlentripel beschrieben und in **runde** Klammern gesetzt.

$\{hkl\}$ **Gesamtheit aller kristallographisch gleichwertigen Ebenen**

(hkl) **Spezifische Ebene**

- Die Indizes $\{hkl\}$ sind dabei die reziproken (und ganzzahlig gemachten) Schnittpunkte der betrachteten Ebenen mit den Bravaisgitter - Koordinatenachsen.

- Es gibt zahlreiche Fallstricke und Konfusionmöglichkeiten!

Für kubische Gitter gilt:

$[hkl]$ steht senkrecht auf (hkl)

$$d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$$

- Die so definierten **Miller-Indizes** sind aber außerordentlich nützlich, da man mit ihnen **rechnen kann!**
- Unmittelbar erhält man aus den Miller Indizes für **kubische** Gitter den Abstand d_{hkl} zweier Ebenen aus der Schar (hkl) für die Gitterkonstanten a .

Ungefähr **95%** aller Elementkristalle haben ein **fcc**, **bcc**, oder **hcp** Gitter

Auch bei Elementkristallen kann die Basis aus mehreren Atomen bestehen!

Wichtiges Beispiel: **C**(Diamant), **Si**, **Ge**: **fcc** mit **2** Atomen in der Basis.

fcc = "face centred cubic":	Au, Ag, Al, Fe(T > 720 °C), Ni, ...; Si, Ge, C(Diamant), ...
bcc = "body centered cubic":	Cs, Cr, K, Fe(RT), Ta, V, W,
hcp = "hexagonally close packed":	Co, Cd, Mg, Zn, ..; C(Graphit), ...

Wichtige Kenngrößen:

- Koordinationszahl **KZ** = Zahl nächster Nachbarn
- Packungsdichte **PD**
- Zahl Atome pro **EZ**

Ein Element kann mehrere metastabile und stabile (als Funktion der Temperatur) Gittertypen haben

Das **fcc** und **hcp** Gitter sind Varianten einer Kugelpackung mit *gleicher* und *maximaler* Packungsdichte. Die Stapelfolge ist:

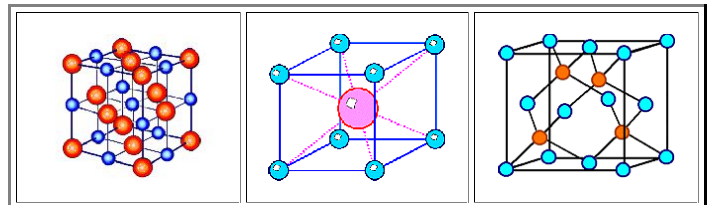
- **ABABA...** auf der Basisebene für **hcp**
- **ABCABCA...** auf der {111} Ebene für **fcc**

Dichteste Kugelpackungen sind bei ungerichteten Bindungen grundsätzlich zu erwarten.

Gittertyp	fcc	bcc	hcp
KZ	12	8	12
Atome pro EZ	4	2	2
PD	0,74	0,68	0,74
Für 1 - atomige Basis			

Weiter wichtige Kristalltypen haben i.a. mindestens zwei *verschiedene* Atome in der Basis.

Beispiele: **NaCl** Struktur: **fcc**, **2** Atome in der Basis; **CsCl** Struktur, **kub-prim.**, **2** Atome in der Basis; Zinkblende; **fcc**, **2** Atome in der Basis (die meisten Halbleiter)



Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu 3.