

## 2. Kristallstrukturen

2-1

Nach der Diskussion der Bindungstypen soll nun die räuml. Anordnung der Atome + Moleküle im FK sowie die Best. dieser Strukturen diskutiert werden.

Man unterscheidet bei FK:

- Kristalle mit geordneter, regelm. Aufbau (\*)
- amorphe FK (z.B. Gläser) bei denen eine Fernordnung fehlt.

(\*) Bei Erstarrung aus einer Schmelze entstehen in der Regel polykristalline FK, bestehend aus vielen kleinen Einkristallen. Die Herstellung von größeren Einkristallen ist meist aufwendig: Es existieren unterschiedliche techn. Verfahren mit denen Einkristalle aus der Schmelze "gezogen" werden (Bsp. Zonenschmelzverfahren).

Polykristalline FK = i.d. Regel isotrop, d.h. ohne ausgezeichnete Kristallachsen wie bei Einkristallen.

### 2.1 Beschreibung von Kristallstrukturen

Jeder Kristall besteht aus identischen gleich orientierten Atomgruppen, die in 3dim. streng periodischer Anordnung "unendlich" aneinander gereiht sind:

$$\text{Kristall} = \text{Punktgitter} \times \text{Basis} \quad \text{Fig. 2.1 \& 2.2}$$

Basis (= Struktureinheit, Gruppe von Atomen) = <sup>meist</sup> "was an jedem Gitterplatz sitzt": in Metallen <sup>erzähltes</sup> Atom, ausgedehnte Strukturen möglich (Bsp. Proteine  $O(10^4)$  Atome)

Punktgitter = räumliche Anordnung

Wird durch Gittervektoren od. fundamentale Translationsvektoren definiert:  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

Gitterpunkt:  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad n_i \in \mathbb{Z}$

Translations-symmetrie des Gitters:

Umgebung  $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$

Elementarzelle EZ =

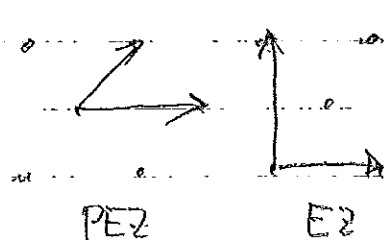
- Parallelepiped, durch Parallelverschiebung kann ganzer Raum abgedeckt werden.
- typ. mehr als 1 Gitterpunkt pro EZ.

Primitive EZ: enthält nur 1 Gitterpunkt

Fig 2.3

Bem: Häufig verwendet man zur Kristallbeschreibung keine primitive EZ, da diese häufig die Gittersymmetrie nicht gut zum Ausdruck bringen (vor allem Punkt-symmetrien).

Bsp



Spiegel und Inversionssymmetrie des Gitters bei EZ (2 Atome/V) besser sichtbar.

Wigner-Seitz Zelle = (PEZ)

Wähle Gitterpunkt als Zentrum der EZ  $\rightarrow$  Breche Mittel-sehrecht auf Verbindung zu nächster Nachbar.

Siehe Abb. Fig. 2.4

Wigner-Seitz-Zellen spielen für Reziprokes Gitter wichtige Rolle! z.B. Brillouinzone.

## a) Bravais-Gitter

Perth Gitter lassen sich unter Verwendung von Einheitszellen aufgrund ihrer Symmetrie-Eigenschaften klassifizieren:

→ Bravais-Gitter.

⊗ Punktgruppen:  
Drehung, Spiegelung, Inversion

2-dim Perth Gitter:

(1) schiefwinkeliges Gitter + (2) ... (5) 4 Spezialfälle Fig 2.5

3-dim Perth Gitter:

allg. triklinus Gitter + 13 verschiedene Spezialfälle = 14 Gitter

→ 7 verschiedene Kristallsysteme (Gitter Typen): u.a. kubische Gitter

Fig. 2.6

## b) Kubische Kristallgitter: Fig 2.7

• Kubisch primitiv (simple cubic = sc):

1 Gitterplatz / EZ, Raumerfüllung <sup>⊗</sup> nur 52% (für harte Kugel)

Kommt wg. geringe Raumerfüllung mit Elementarbasis in Natur nicht vor.

(CsCl: 2 atomige basis in sc:  $(0,0,0) + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  eigentl. aber bcc)

• Kubisch raumzentriert (body centered cubic = bcc)

2 Gitterplätze / EZ, Raumerfüllung 68%

→ Alkalimetalle; Fe, Cr, Mo, V, W

• Kubisch flächenzentriert (face-centered cubic = fcc)

4 Gitterplätze / EZ, größt mögliche Packungsdichte 74%

→ Edelgase, viele Metalle: Cu, Ni, Ag, Au

\*) Raumerfüllung lässt sich unter Annahme harter Kugeln

mit Radius R berechnen: 
$$\rho_{fcc} = \frac{N_{\text{Atome}} \cdot V_{\text{Atom}}}{V_{EZ}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{(2\sqrt{2} R)^3} = 0,74$$

NaCl  
fcc mit  
2 atomiger  
Basis

Neben fcc-Gitter mit der höchsten Packungsdichte gibt es eine zweite Anordnung mit gleich hoher Dichte: hexagonale Dichtepackung (hexagonal close-packed = hcp)

### Hexagonale Struktur (hcp) Fig 2.8

EZ ist hexagonal primitive Gitterzelle mit einer 2-atomigen Basis:  $(0, 0, 0) + (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$   
(Ebenfalls sehr viele Metalle  $\rightarrow$  Übergangsmetalle)

fcc und hcp sind die dichtesten Packungen, die durch „Kugelstapel“ mit unterschiedlicher Stapelfolge realisiert werden:

fcc: A B C A B C

hcp: A B A B A B

In beiden Kristallstrukturen hat ein Atom 12 nächste Nachbarn. Für hcp Struktur muss  $c/a$  Verhältnis ( $c$  = Höhe Prisma,  $a$  = Seitenlänge Sechseck)  $c/a = 2 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} = 1,633$  sein  $\rightarrow$  legt die Elemente fest.

Daneben auch noch „double hexagonal close-packed“ mit Stapelfolge ABACABAC... (Raumgruppe  $m\bar{3}c$  Doppelhex.)

### Diamant Struktur Fig 2.9

kubisches Gitter fcc mit 2-atomiger Basis:  $(0, 0, 0) + (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$   
(Si, C, Ge,  $\alpha$ -Sn)

Zinkblende Struktur wie Diamant aber  $Z_1 = (0, 0, 0)$ ,  $S = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

### Benennung Kristallstrukturen

Zahl nächste Nachbarn und Packungsdichte beeinflussen Benennung

Fig 2.9