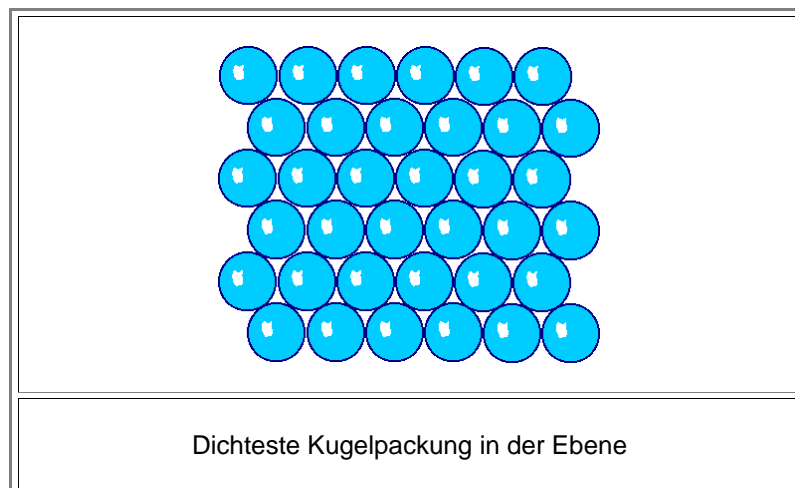
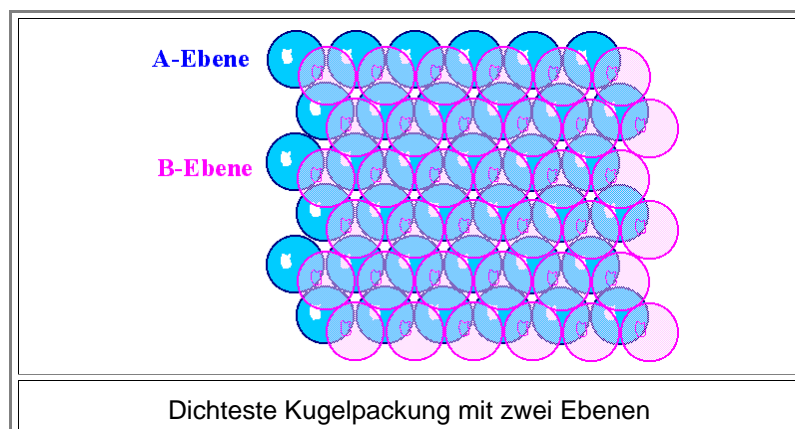


3.3.2 Bravaisgitter und dichteste Kugelpackung

- Die Beschreibung eines Kristalls mit *Bravaisgittern und Basis* ist nun geläufig. Wir haben aber auch schon gemerkt, daß dieser Formalismus bei einfachen Kristallen komplizierter ist als nötig.
- Es ist manchmal *einfacher*, sich einen gegebenen Kristall direkt aus Atomen oder Molekülen, die in *Ebenen* liegen, zu konstruieren, und nicht über die "Gitter + Basis" Regel.
 - Dabei hat man bei einfachen Kristallen noch den Vorteil der Anschaulichkeit und, wie wir gleich sehen werden, der direkten Einsicht in wichtige Eigenschaften, die sich aus dem Bravais-Gitter und der Basis nicht immer so direkt erschließen.
 - Letztlich ist dies das Vorgehen mit einem "*Kristallbaukasten*". Wir besorgen uns die Bauelemente und probieren, wie sie sich am besten zusammenpassen. Die Bauelemente sind dann z.B. simple Kugeln für alle Atome die ungerichtete Bindungen haben, Kugeln mit definierten "Ärmchen" falls kovalente Bindungen vorliegen, oder auch ganze Moleküle mit ihren noch verfügbaren Bindungsgeometrien, falls wir einen komplexen Kristall bauen wollen.
 - Zumindest ein Nobelpreis kam auf diese Art zustande; es ist also kein zu verachtendes Vorgehen.
- Hier wollen wir aber nur die beiden einfachsten Kristalle betrachten, die man beim "Spielen mit Kugeln" erhalten kann. Die Aufgabe ist, mit *einer* Kugelsorte einen Kristall zu formen, bei dem möglichst viele Kugeln in ein gegebenes Volumen gepackt sind - in anderen Worten, wir wollen die **dichteste Kugelpackung** realisieren.
- Das ist nicht nur für Kristalle interessant; die Menschheit hat sich auch z.B. auch ausführlich damit beschäftigt, wie man Kanonenkugeln möglichst dicht packen kann.
 - Obwohl es in mathematischer Strenge nicht einfach ist zu beweisen, daß die Lösung, die wir erhalten werden, die richtige ist, hat der "gesunde Menschenverstand" damit überhaupt kein Problem
- Wir beginnen, indem wir zunächst unsere Kugeln auf einer Ebene *zweidimensional* möglichst dicht packen.
- Wir erhalten automatisch einen zweidimensionalen Kristall - wer's nicht glaubt soll's (experimentell) beweisen!



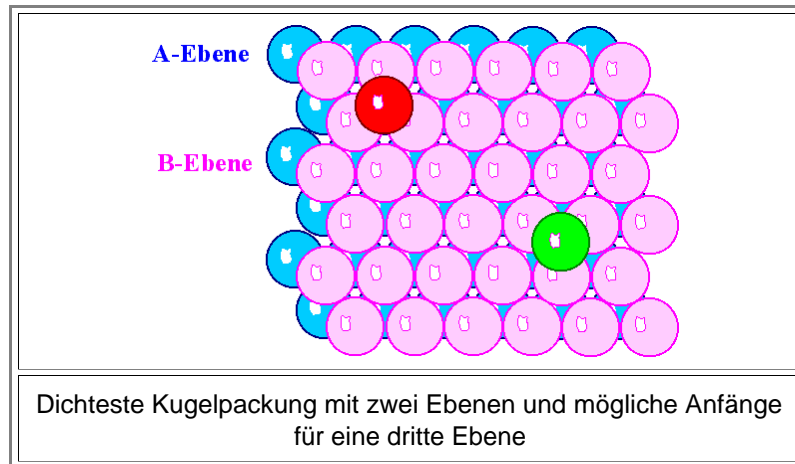
- Als nächstes legen wir eine neue Lagens von Kugeln auf die bereits vorhandene Ebene.
- Selbst wenn wir gedankenlos die Kugeln der **2. Ebene** irgendwo hinlegen, würden sie automatisch in die Kuhlen rutschen, d.h. das Zentrum einer Kugel der **2. Ebene** liegt exakt im Zentrum der leicht verbogenen projizierten Dreiecke, die zwischen den Kugeln der **1. Ebene** aufgespannt werden.
 - Wir erhalten das nachfolgende Bild (die **2. Ebene** ist halbrtransparent gewählt).



- Um beim Übergang zu vielen aufeinanderliegenden Ebenen eine einfache Bezeichnung zu haben, nennen wir die **blaue** Ebene und alle Ebenen, die bei senkrechter Projektion exakt über der blauen Ebene liegen, **A-Ebenen**, die rosa Ebene und alle die exakt über ihr liegen heißen **B-Ebenen**.

Wir legen nun eine dritte Ebene auf, so daß die Atome wieder in den Kehlen der 2. Ebene liegen. Dabei gibt es aber **zwei** unterscheidbare Möglichkeiten.

- Wir können die dritte Ebene so legen, wie mit dem **roten** Atom in der nachfolgenden Graphik begonnen,
- oder aber so wie mit dem **grünen** Atom gezeigt.

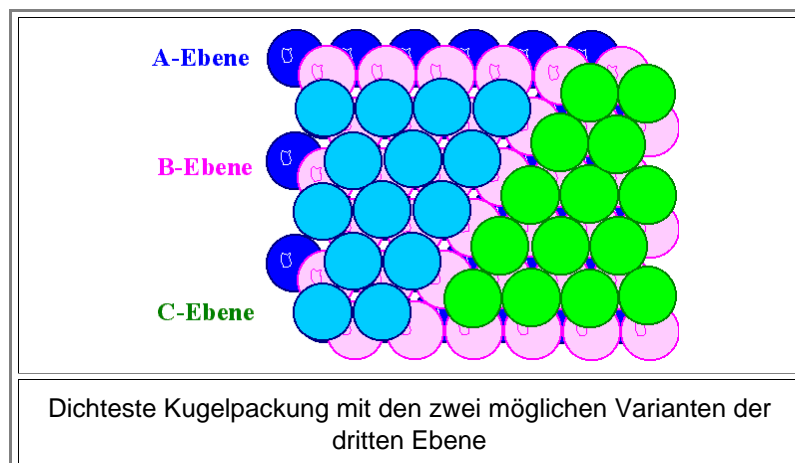


Das rote Atom liegt in der Projektion exakt über einem Atom der **A - Ebene**. Wenn wir ausgehend von diesem Atom die dritte Ebene bauen, erhalten wir also wieder eine **A - Ebene**.

Das grüne Atom aber liegt weder über der **A-** noch über der **B - Ebene**. Mit grünen Atomen erhalten wir also eine neue Ebene, die in unserer Nomenklatur konsequenterweise **C - Ebene** heißt.

Daß es sich wirklich um verschiedene Ebenen handelt, wenn wir ausgehend vom roten oder grünen Atom die Ebenen konstruieren, sieht man sofort: Die rote oder grüne Ebenen paßt nicht zusammen; es entsteht eine Linie entlang der sich ein **Passungsfehler** definieren läßt.

- Dies gibt uns eine erste Ahnung davon, was **Kristallbaufehler** sind und wie sie entstehen können.
- Denn wenn wir uns vorstellen, daß auch richtige Kristall so wachsen, daß sich auf **dichtest gepackten Ebenen** Atome in die Kehlen setzen, ist leicht vorstellbar, daß das manchmal falsch läuft. Wenn diese falsch besetzte Lage dann wächst, wird sie mit den anderen, unabhängig und "richtig" entstandenen Lagen nicht zusammenpassen; der Kristall enthält einen **Defekt**.



Wir haben also **zwei** Möglichkeiten, einen Kristall in dichtester Kugelpackung zu erzeugen:

- Wir starten mit einer hexagonalen zweidimensionalen **A-Ebene**; darauf kommt eine **B-Ebene**
- 1. Möglichkeit: Wählen wir als **dritte Ebene wieder eine A-Ebene** und machen dann periodisch weiter, erhalten wir die **Stapelfolge: ABABABABA....**
- Der Kristall den wir so erhalten, hat genau die vorher diskutierte **hexagonal dichteste Kugelpackung (hcp)**, das ist unmittelbar zu sehen.
- 2. Möglichkeit: Wählen wir als **dritte Ebenen aber eine C-Ebene**, bekommen wir die Stapelfolge **ABC**. Wenn wir diese Folge dann immer wieder wiederholen, erhalten wir **ABCABCABCABC....**,

- - und dies ist genau das **fcc** Gitter wenn wir die Aufeinanderfolge der **{111}** Ebenen betrachten - nur ist das nicht ganz so leicht zu sehen.

▶ Allgemein betrachtet haben wir jetzt einen Kristall erzeugt, indem wir nicht einzelne Atome auf durch Gitter und Basis definierte Plätze gesetzt haben, sondern ganze Ebenen von Atomen aufeinander stapeln.

- Da dies nicht immer so direkt einsichtig ist, wollen wir dazu eine kleine Übung machen.

Übung 3.3-2
Die (111) - Ebenen in der $\langle 110 \rangle$ Projektion

▶ Daß man mit dieser "Kristallbautechnik" nicht nur die bekannten dichtestgepackten Strukturen machen kann, ist klar. Wir könnten aber selbst innerhalb einer dicht gepackten Struktur noch Modifikationen einbringen:

- Es könnte z.B. folgendermaßen aussehen
ABCBABC B ABCB... oder **ABCBCABCBCABCBC ...**;
jedesmal produzieren wir einen (komplizierten) Kristall mit der jeweils farbig markierten Einheit der Stapelfolge.
- Es ist auch nicht prinzipiell verboten, **x** mal, z.B. **30** mal, **ABAB...** zu stapeln, und nach jedem **x**. Block eine **C**-Ebenen einzufügen:
ABAB...(30X) ... ABABCABAB...(30X)..ABC AB...
- So etwas in der Art kommt tatsächlich vor! Die wichtige Verbindung **SiC** (Siliziumcarbid) hat (aus technischer Sicht *leider*) viele Modifikationen mit den merkwürdigsten Stapelfolgen! Man nennt dies ganz allgemein **Polymorphismus**; für den Fall dass die diversen Morphologien sich nur in *einer* Dimension unterscheiden (wie hier beim Stapeln in einer Richtung) auch **Polytypismus**.
- Wir könnten auch beliebig stapeln, wobei wir nur darauf achten, daß keine Kopf - Kopf Stapelfolge (z.B. **AA**) entsteht; z.B.
ABCBACBACABCBCBA...
aber da wir keine Translationssymmetrie mehr haben, ist das eigentlich kein richtiger Kristall mehr.

▶ Unser Spiel mit Kugeln produziert also in simpelster Weise das hexagonale Bravaisgitter mit zwei Atomen in der Basis, das kubisch flächenzentrierte Bravaisgitter mit einem Atom in der Basis, aber auch kompliziertere Gitter. Wir beenden dieses Unterkapitel mit einer kleinen Übung, die uns sowohl hilft, die Geometrie des **fcc** - Gitters besser zu verstehen als auch - ein Kapitel später - die spezifischen Defekte dieses Gitters.

Übung 3.3-3
Die Basisvektoren der fcc - Stapelfolge

Fragebogen
Multiple Choice Fragen zu 3.3.2