

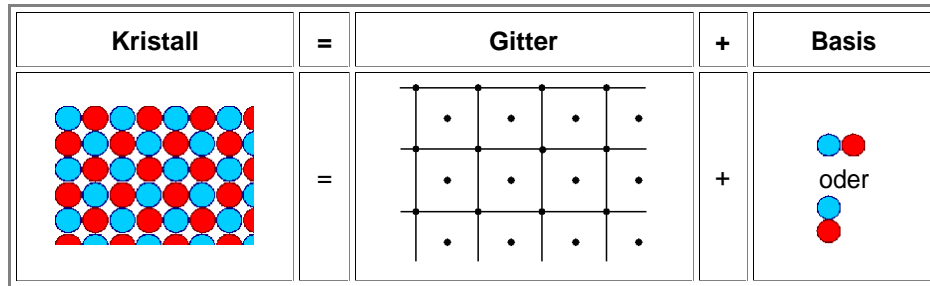
# 3. Struktur von Kristallen

## 3.1 Grundbegriffe

### 3.1.1 Wiederholung

- In diesem sehr kurzen Unterkapitel werden nur die wichtigsten Dinge aufgezählt (und verlinkt), die wir über Kristalle bereits gelernt haben.
- Betrachten wir zunächst den **Idealkristall**

Ein *Idealkristall* definiert sich über



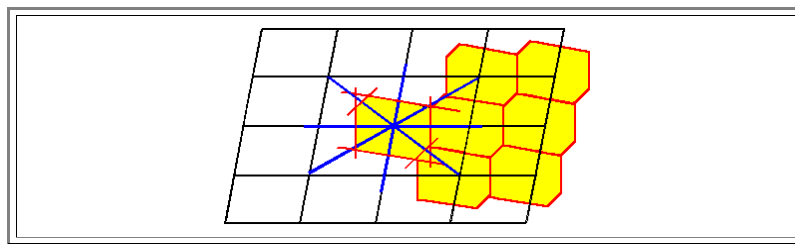
- Das **Gitter** ist ein mathematisches Konstrukt; eine sinnvolle Klassifizierung nach Symmetrien benutzt die **14 Bravais Gitter**

Jeder Vektor  $\underline{T}$  des Gitters lässt sich durch eine geeignete Kombination der im Ortsraum definierten Basisvektoren  $\underline{a}_i$  darstellen:

$$\underline{T} = n_1 \cdot \underline{a}_1 + n_2 \cdot \underline{a}_2 + n_3 \cdot \underline{a}_3$$

Dabei sind die  $n_i$  ganze Zahlen (inkl. der Null). Ein so definierter Vektor  $\underline{T}$  endet immer auf einem Gitterpunkt und heißt auch **Translationsvektor** des Gitters weil eine Verschiebung des Gitters um  $\underline{T}$  das ideale, d.h.  $\infty$  ausgedehnte Gitter unverändert lässt.

- Man muß aber zur Beschreibung eines Kristalls nicht unbedingt eine auf Bravaisgitter oder primitiven Gittern beruhende Elementarzelle nehmen, es gibt auch noch eine andere Optionen: Die **Wigner-Seitz Elementarzelle** wird hier wichtig werden; wir schauen sie mal kurz an.



Gegeben sei ein beliebiges Gitter (schwarz; hier zweidimensional). Von einem willkürlichen Gitterpunkt aus ziehen wir Strecken zu benachbarten Gitterpunkten (blau), auf denen wir Mittelhalbierende errichten (rot). Die Mittelhalbierenden bilden einen geschlossenen Polygonzug sobald wir genügend viele Strecken konstruiert haben.

Im Dreidimensionalen resultiert ein Polyeder - die **Wigner-Seitz Elementarzelle**. Das resultierende (etwas unelegante) Gitter ist zur Konstruktion eines Kristalls genau so gut geeignet wie das ursprüngliche Gitter, wir müssen nur vereinbaren, dass wir die Basis in das Zentrum der Wigner-Seitz Zelle setzen.

Die Konstruktion mag die vorhandenen Symmetrien verbergen und unelegant erscheinen - aber sie ist universell und wird sich als nützlich erweisen.

- Die **Basis** beschreibt die Konfiguration der Atome; d.h. ihre Art, Zahl und Anordnung im Raum.

Eine Basis kann sehr einfach sein, z.B ein Atom der Sorte  $i$  auf den Koordinaten  $(0\ 0\ 0)$  eines cartesischen KO-Systems.

Sie kann aber auch sehr kompliziert sein und viele Atome verschiedener Sorten umfassen. Wir haben dann  $j$  Sätze von Vektoren  $\underline{r}^j$  die zu den Atomen einer Atomsorten  $i$  führen; und soviel Sätze  $j$  wie Atomsorten.

- Im Gegensatz zum Idealkristall besteht ein **Realkristall** meist aus sehr vielen kleinen Kristalliten, die wiederum **Gitterdefekte** enthalten. Grob klassifiziert unterscheiden wir vier Defekttypen:

- **0-dimensionale Defekte**; z.B. Atomare Fehlstellen.
- **1-dimensionale Defekte**; das sind die Versetzungen.
- **2-dimensionale Defekte**; z.B. Korngrenzen oder Phasengrenzen.
- **3-dimensionale Defekte**; z.B. Ausscheidungen.

Beschreibung von **Richtungen** und **Ebenen** in Kristallen:

- Grundsätzlich wird im Koordinatensystem des durch die Basisvektoren definierten Gitters gearbeitet. In nicht-kubischen Kristallen (d.h. nicht-cartesischen Systemen) ist dann bei den vertrauten Formeln der Vektorrechnung **Vorsicht geboten!**

Grundsätzlich werden für die Beschreibung von Richtungen und Ebenen die **Miller-Indizes** verwendet. Die Beschreibung bezieht sich *immer* auf das Gitter. Die Zentren einzelner Atome müssen deshalb nicht auf Richtungen oder Ebenen liegen.

- Die Konvention für die **Richtungs-** und **Ebenen**indizierung ist:

$\langle u v w \rangle$	= Gesamtheit der kristallographisch gleichwertigen Richtungen.
$[u v w]$	= Spezifische Richtung.
$\{h k l\}$	= Gesamtheit der kristallographisch gleichwertigen Netzebenenscharen.
$(h k l)$	= Spezifische Netzebenenschar.

**Fragebogen / Questionnaire**

**Multiple Choice Fragen zu 3.1.1**