

II. Kristallstruktur

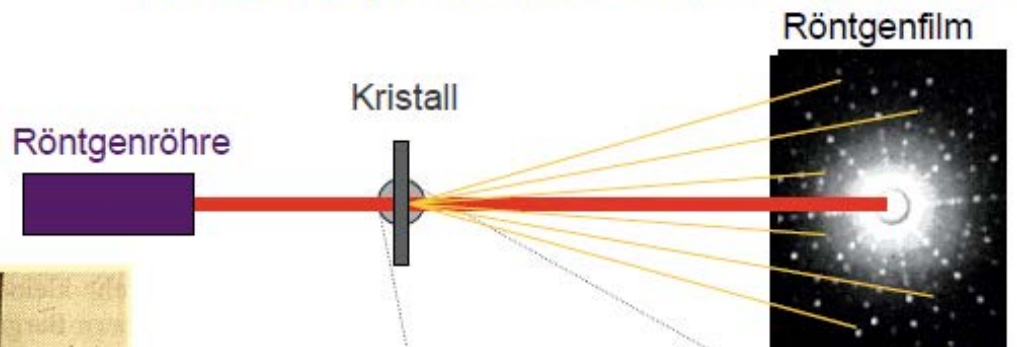
II.1	Periodisches Gitter	Punktgitter = Raster Basis = Atome mathematische Beschreibung
II.2	Gittertypen, Bravaisgitter	kubisch, hexagonal etc.
II.3	Miller-Indizes	Kristallebenen, - Richtungen
II.4	Einfache Kristallstrukturen	Diamant, NaCl etc.
II.5	Gitterfehler	
II.6	Polykristallinität, amorphe Festkörper	

II.1 Periodisches Gitter

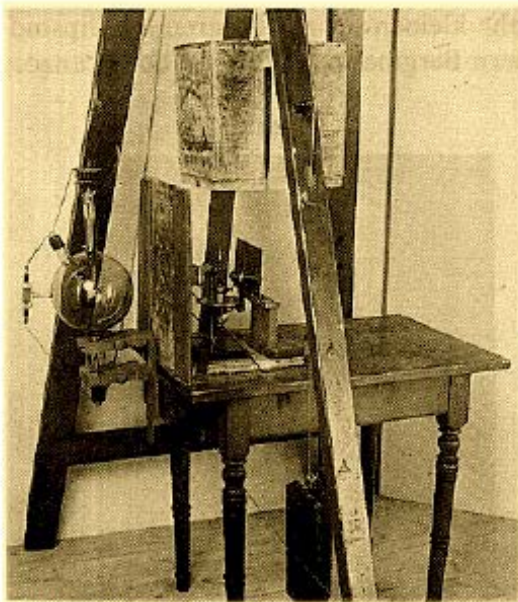
II.1.a historisch: - regelmäßige äußere Form
von natürlichen Kristallen

Quarz, Edelsteine, Halbedelsteine

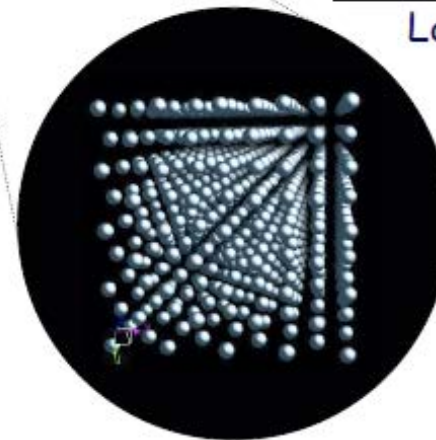
- 1912: Röntgenbeugungsexperimente:
Beweis für periodische Anordnung der Atome



von Laue (1912)



Univ. München, 1912



Laue-Bild

Kristall =
Periodische Anordnung
> Beugungsgitter

Details siehe Kapitel III.2

Entwicklung der Röntgenstrukturanalyse



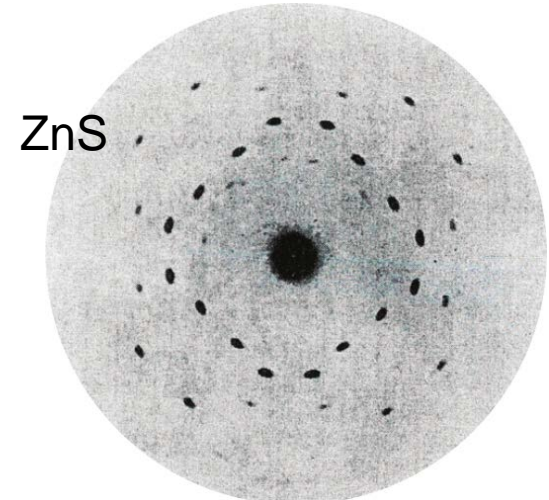
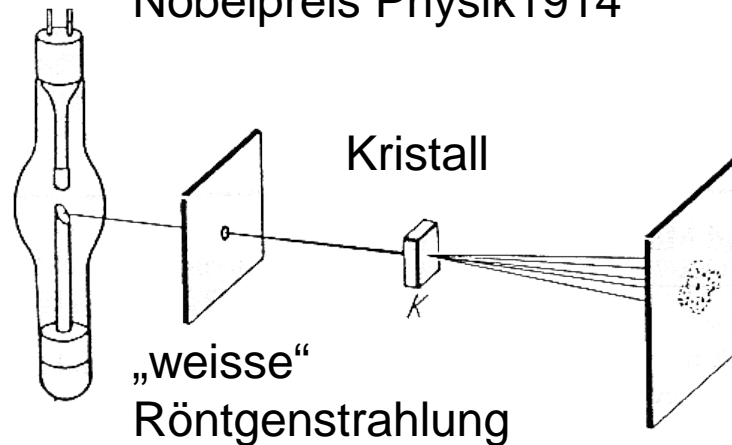
Wilhelm Conrad Röntgen
Nobelpreis Physik 1901



Max von Laue
Nobelpreis Physik 1914

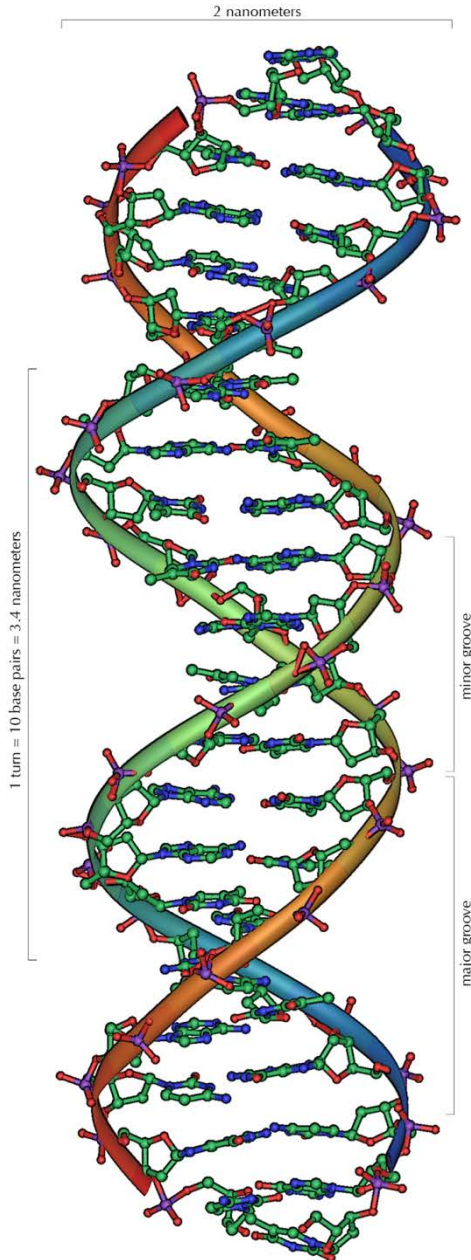


Dorothy Crowfoot Hodgkin
Nobelpreis Chemie 1964



DNA Röntgenstrukturanalyse

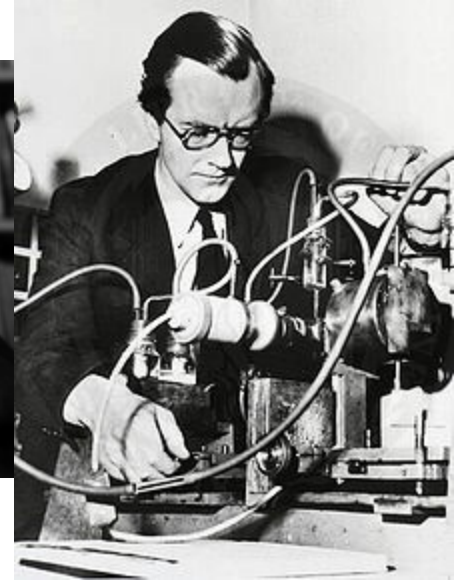
Nobelpreis für Medizin 1962



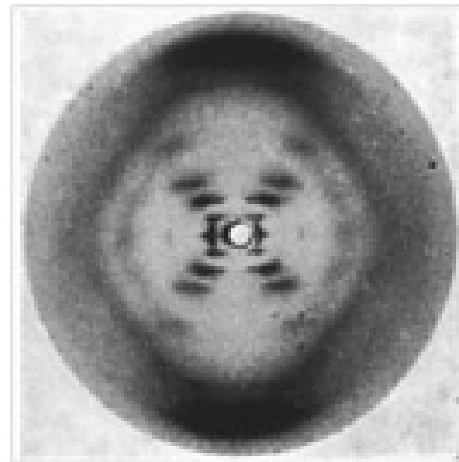
James Watson



Francis Crick



Maurice Wilkins



Röntgenbeugungsbild
DNA Natriumsalz

Rosalind
Franklin
(1953)



II.1.b Kristallstruktur

„unendliche“ periodische Wiederholung identischer Struktureinheiten im (zwei- oder) dreidimensionalen Raum

Beschreibung: periodisches Gitter (= Zellen)
mit Basis (= Zelleninhalt)

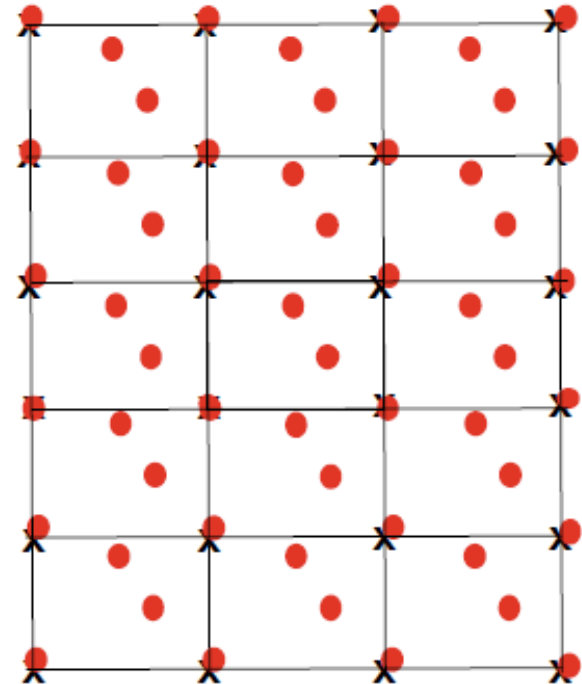
Kristallstruktur = Gitter + Basis

Gitter: regelmäßige Anordnung
von (math.) Punkten

beschreibbar durch Vektoren mit
ganzzahligen Koordinaten.

Basis: einzelnes oder mehrere Atome
bzw. Moleküle

in Biokristallen:
teilw. mehr als 1000 Atome
in der Basis.



II.1.c Beschreibung des Gitters

beliebiger Gitterpunkt r :

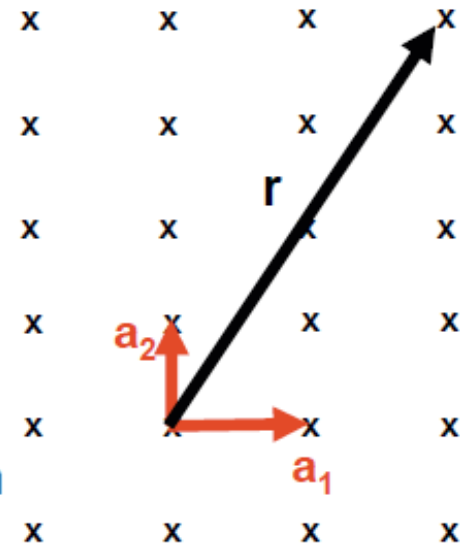
$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

\uparrow
Referenzpunkt (Ursprung, oft weggelassen)

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$: Basisvektoren

n_1, n_2, n_3 : ganze Zahlen

Jeder Gitterpunkt ist darstellbar als eine Linearkombination der Basisvektoren mit ganzzahligen Koeffizienten



Def.: **Translationsvektor** $\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$

Gitter kommt nach Translation vollständig mit sich zur Deckung:

TRANSLATIONSINVARIANZ

TRANSLATIONSSYMMETRIE

2 beliebige Gitterpunkte können mit \mathbf{T} verknüpft werden!

TRANSLATIONSINVARIANZ ist eine definierende Eigenschaft eines Gitters.

II.1.d Beschreibung der Basis

(= Zelleninhalt)

Atom j in der Gitterzelle:

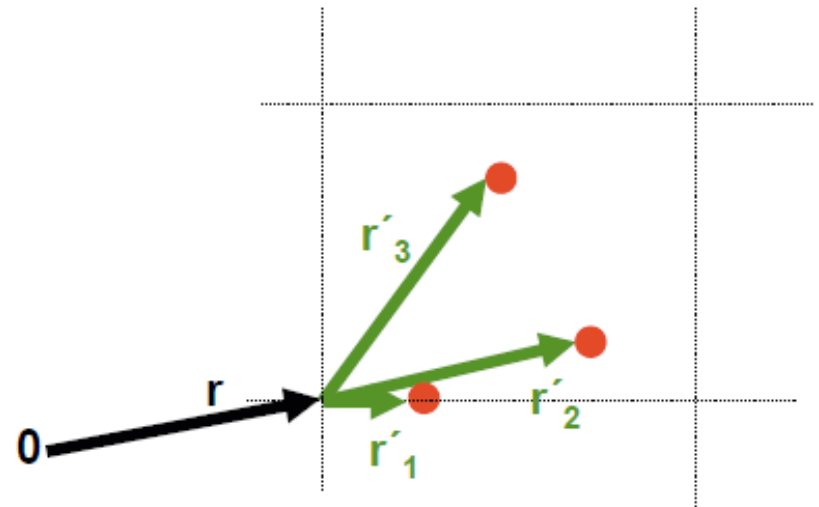
$$\mathbf{r}'_j = x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3$$

$$0 \leq x_j, y_j, z_j < 1$$

Atom j im Kristall:

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{r} + x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3$$

Gittervektor \mathbf{r} + Koordinatenvektor in Zelle



I.1.e Symmetrieoperationen (des Gitters):

führen das Gitter in sich selbst über (Invarianz des Gitters)

(i) Translationen	Translationssymmetrie !	
(ii) <u>Punktoperationen</u>	Drehung	um Achse
↑	Spiegelung	an Ebene
Festpunkt(e)	Drehspiegelung	Drehung + Spiegelung
	Inversion	Spiegelung an Punkt.
(iii) Kombinationen	Schraubenachse	Spiegelung + Translation
	Gleitspiegelung	Drehung + Translation

Symmetrieoperationen spielen zentrale Rolle in der Kristallographie

Mathematisch: Symmetrieoperationen = Gruppe

Beschreibung & Symbole aus Gruppentheorie

Drehung um

$180^\circ = 2\pi / 2$:

C_2

zweifache Drehung

$120^\circ = 2\pi / 3$:

C_3

dreifache Drehung

$90^\circ = 2\pi / 4$:

C_4

vierfache Drehung

$60^\circ = 2\pi / 6$:

C_6

sechsfache Drehung



Symmetrieoperationen spielen zentrale Rolle in der Kristallographie

Mathematisch: Symmetrieoperationen = Gruppe

Beschreibung & Symbole aus Gruppentheorie

Drehung um

$180^\circ = 2\pi / 2$:

C_2

zweifache Drehung

$120^\circ = 2\pi / 3$:

C_3

dreifache Drehung

$90^\circ = 2\pi / 4$:

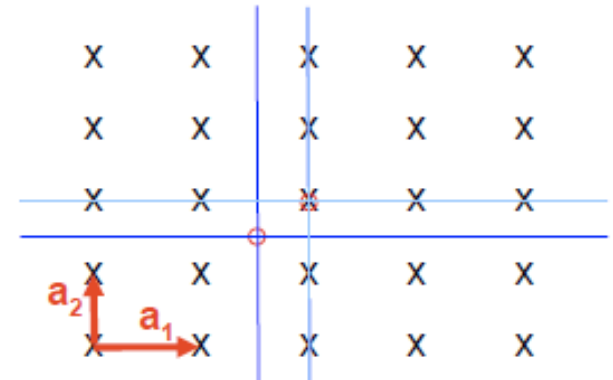
C_4

vierfache Drehung

$60^\circ = 2\pi / 6$:

C_6

sechsfache Drehung



zweifache Drehung

+ 2 Spiegelebenen

Spiegelung an Ebene:

σ_h

an horizontaler Ebene (d.h. \perp Drehachse)

σ_v

an vertikaler Ebene (d.h. \parallel „)

Drehspiegelung:

S_j

j-fache Drehung + Spiegelung

Punktspiegelung:

i

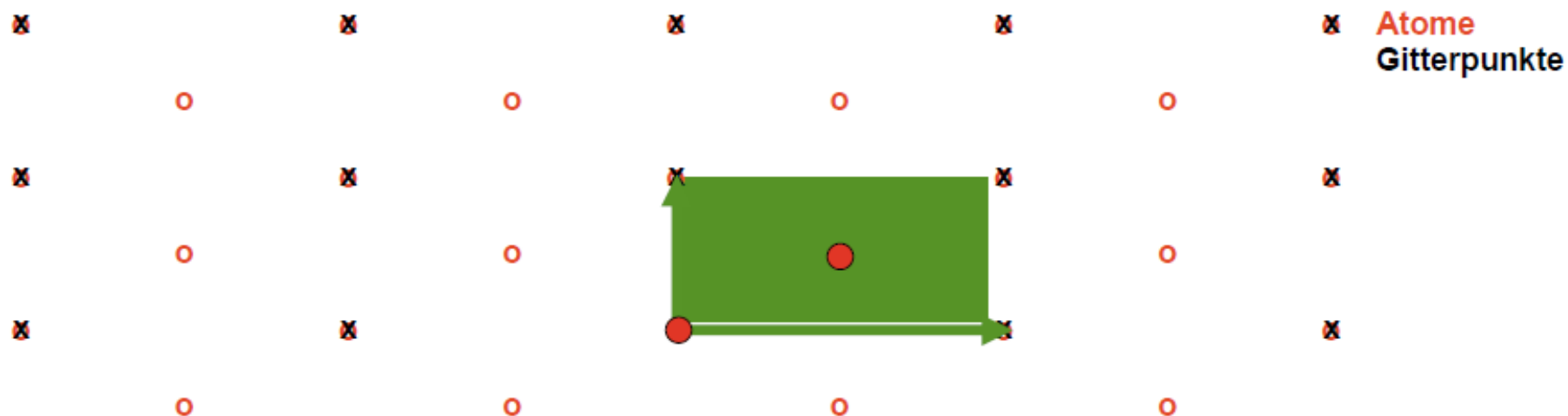
Inversionszentrum

II.1.f Einheitszelle und primitive Elementarzelle

Gittervektoren \vec{a}_i spannen eine Zelle auf: Parallelepipid = Einheitszelle

Volumen der Zelle: $V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ Spatprodukt

Rechtwinklige Zelle: zugehörige Basis enthält 2 Atome (in diesem Beispiel)



II.1.f Einheitszelle und primitive Elementarzelle

Gittervektoren \vec{a}_i spannen eine Zelle auf: Parallelepipiped = Einheitszelle

Volumen der Zelle: $V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$ Spatprodukt

Rechtwinklige Zelle: zugehörige Basis enthält 2 Atome (in diesem Beispiel)

Schiefwinklige Zelle: Basis mit nur 1 Atom

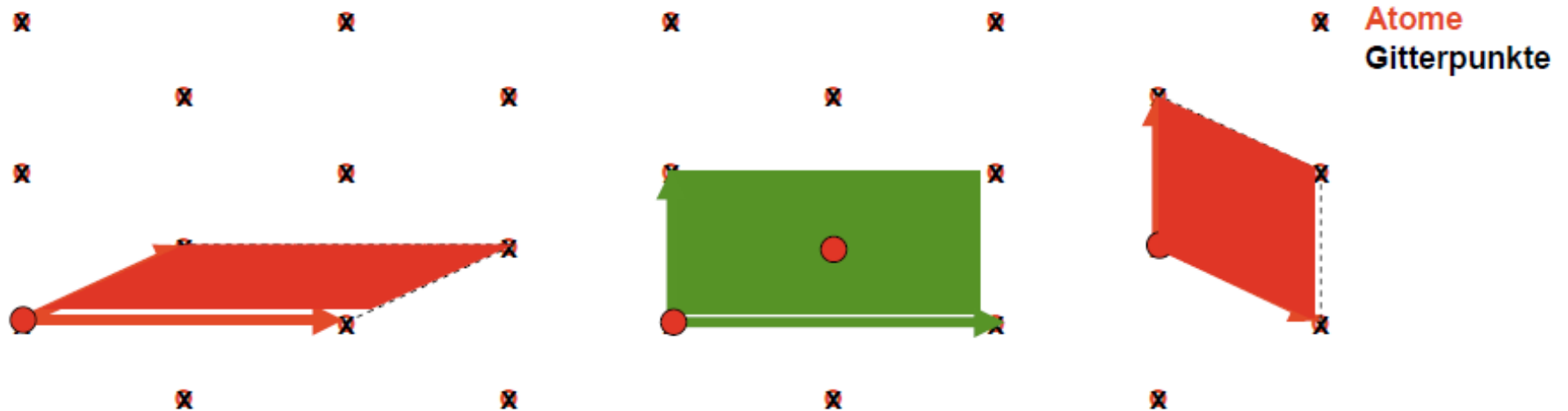
Definition:

primitive Elementarzelle = Zelle mit dem kleinstmöglichen Volumen =
(= Zelle mit genau einem Gitterpunkt)

primitive Basisvektoren = zugehörige Basisvektoren

primitive Basis = zugeh. atomare Basis (kleinstmögliche Atomzahl)

Primitive Elementarzelle ist nicht eindeutig



II.2 Gittertypen, Bravaisgitter

II.2.a 2-dimensionale Gittertypen

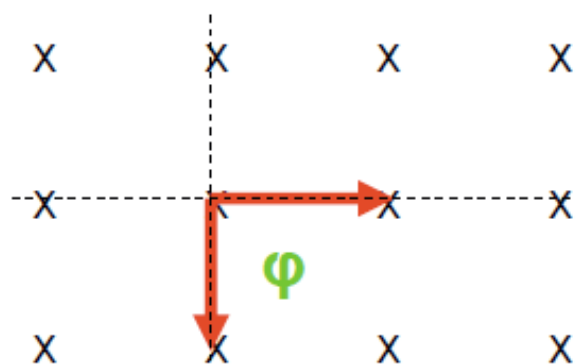
Zahl der möglichen Gitter unbegrenzt wg. beliebiger Längen und Winkel

Unterteilung in Gittertypen

Für jeden Gittertyp: charakteristische Menge von Symmetrieeoperationen, die das Gitter invariant lassen

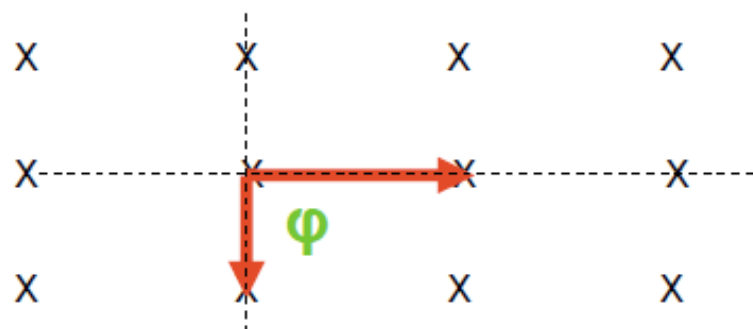
2-dim: 5 verschiedene Gittertypen:

5 zweidimensionale Bravaisgitter



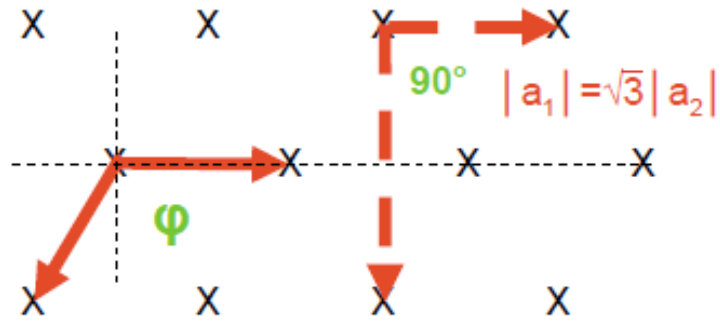
1.) quadratisch

$$|a_1| = |a_2| \quad \varphi = 90^\circ$$



2.) rechtwinkelig

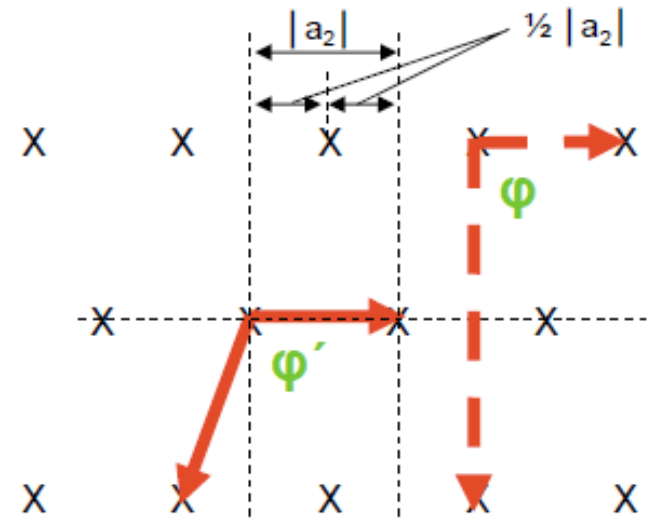
$$|a_1| \neq |a_2| \quad \varphi = 90^\circ$$



3.) hexagonal

$$|a_1| = |a_2| \quad \varphi = 120^\circ$$

Konvention: wähle $\varphi = 120^\circ$, nicht $\varphi = 60^\circ$



4.) zentriert rechteckig

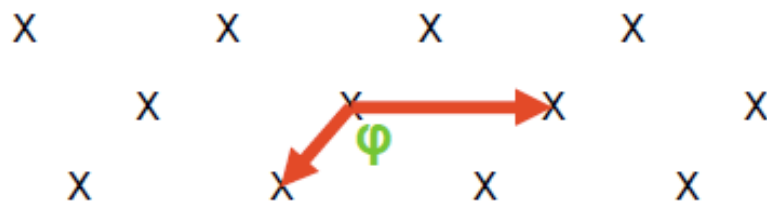
$$|a_1| \neq |a_2| \quad \varphi' \neq 120^\circ, 90^\circ$$

$$\varphi = 90^\circ$$

Zwei mögliche Beschreibungen:

a) zentriert rechteckig mit
Basis: $(0,0)$, $(0.5, 0.5)$

b) primitiv schiefwinkelig



5.) schiefwinkelig

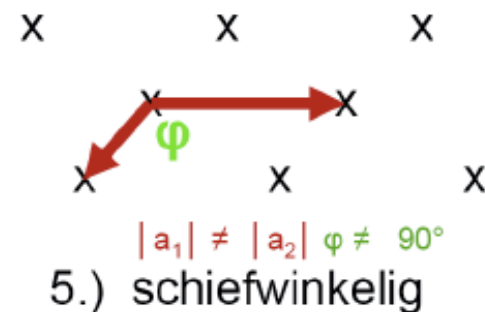
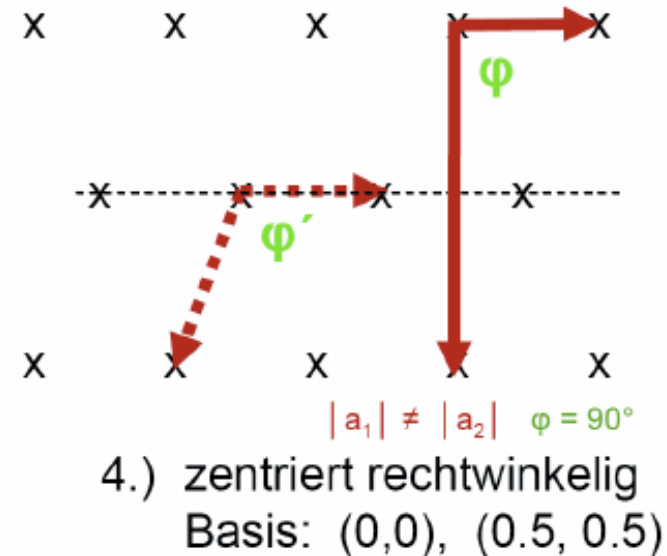
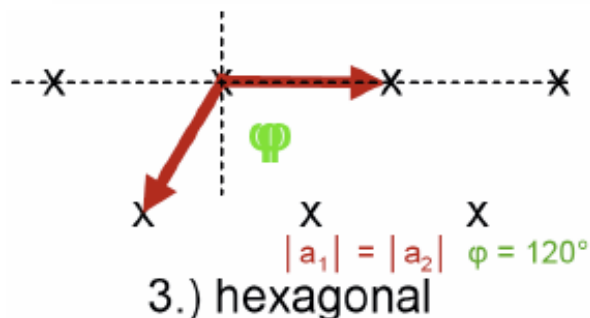
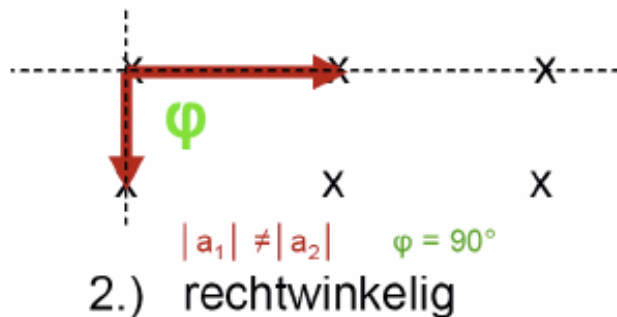
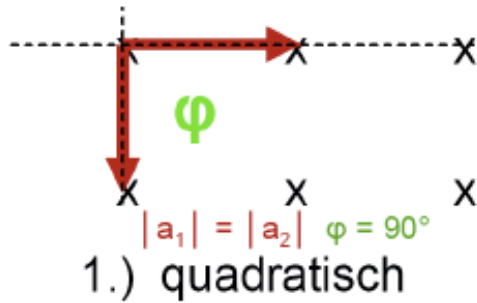
$$|a_1| \neq |a_2| \quad \varphi \neq 90^\circ$$

II.2 Gittertypen, Bravaisgitter

II.2.a 2-dimensionale Gittertypen

2-dim: 5 verschiedene Gittertypen:

5 zweidimensionale Bravaisgitter



II.2.b Dreidimensionale Gittertypen

Im dreidimensionalen:

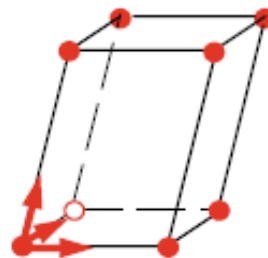
14 Bravaisgitter

niedrigste Symmetrie:

triklines Gitter

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



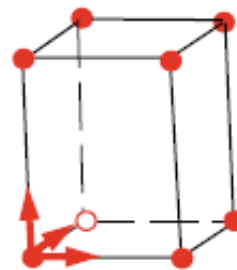
Gittervektoren, rechtshändig (!)

nächsthöhere Symmetrie:

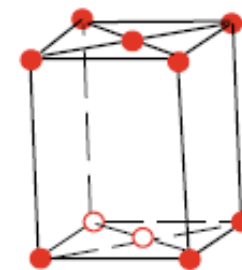
monoklines Gitter

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



primitiv



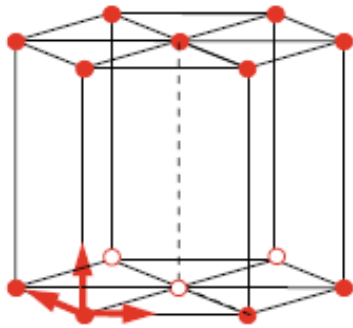
basiszentriert

nichtprimitives Gitter

hexagonal

$$a_1 = a_2 \neq a_3$$

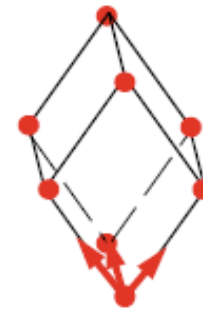
$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$



rhomboedrisch (trigonal)

$$a_1 = a_2 = a_3$$

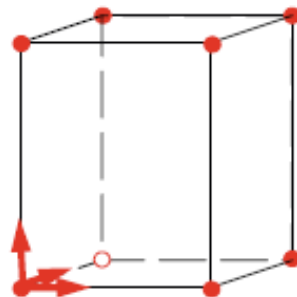
$$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ, (\neq 109^\circ 28')$$



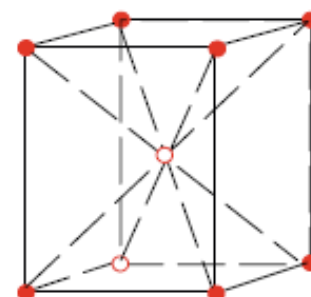
tetragonal

$$a_1 = a_2 \neq a_3$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



primitiv



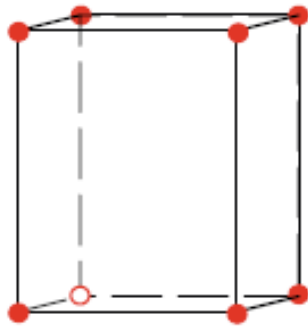
raumzentriert

nichtprimitives Gitter

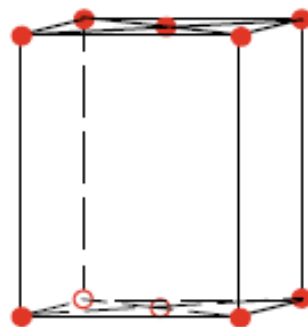
Orthorhombisch

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

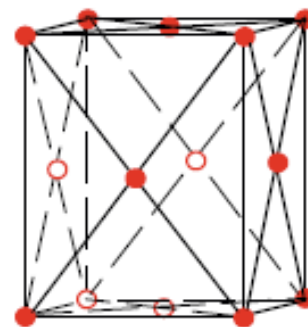
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



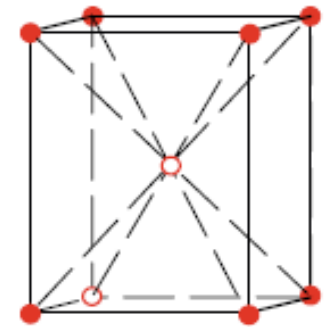
primitiv



basiszentriert



flächenzentriert

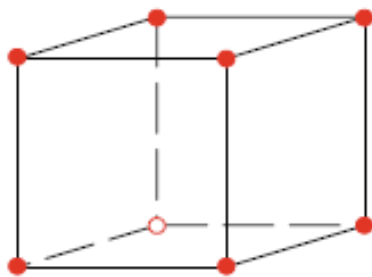


raumzentriert

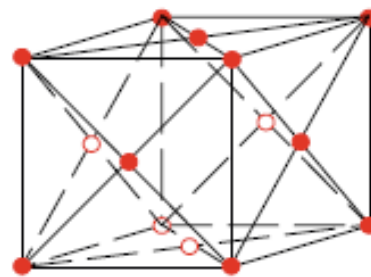
kubisch

$$a_1 = a_2 = a_3$$

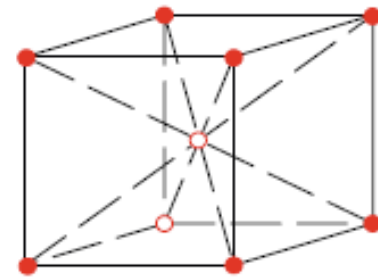
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



primitiv

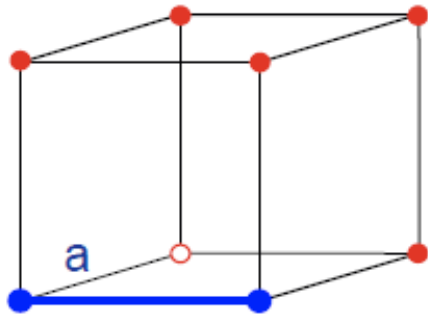


flächenzentriert



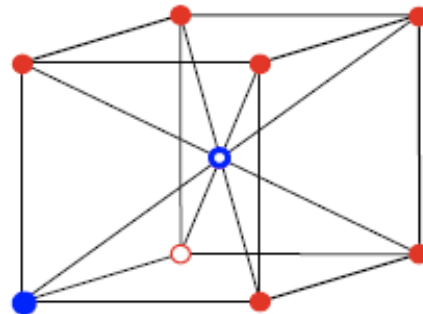
raumzentriert

II.2.c Kubische Raumgitter



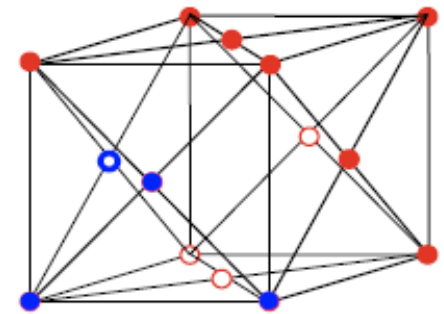
kubisch primitiv
simple cubic

sc



kubisch raumzentriert
body centered cubic

bcc



kubisch flächenzentriert
face centered cubic

fcc

	sc	bcc	fcc
Vol. üblicher Einheitszelle	a^3	a^3	a^3
# Gitterpunkte / Einheitszelle	1	2	4
Volumen d. primitiven Zelle	a^3	$\frac{1}{2} a^3$	$\frac{1}{4} a^3$
# Gitterpunkte / Volumen	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
# nächste Nachbarn	6	8	12
Abstand nächster Nachbarn	a	$\frac{1}{2}\sqrt{3} \cdot a \approx 0,87a$	$\frac{1}{2}\sqrt{2} \cdot a \approx 0,71a$
Raumfüllungsfaktor (siehe Übungen)	$\frac{1}{6} \pi$ $= 0,524$	$\frac{1}{8} \pi \cdot \sqrt{3}$ $= 0,680$	$\frac{1}{6} \pi \cdot \sqrt{2}$ $= 0,740$

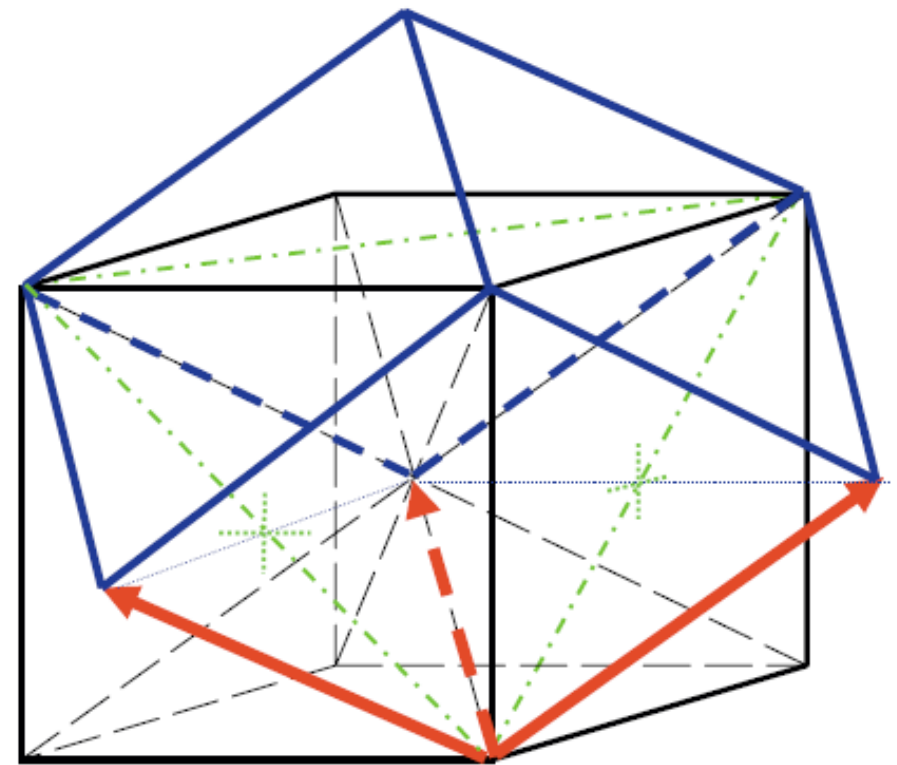
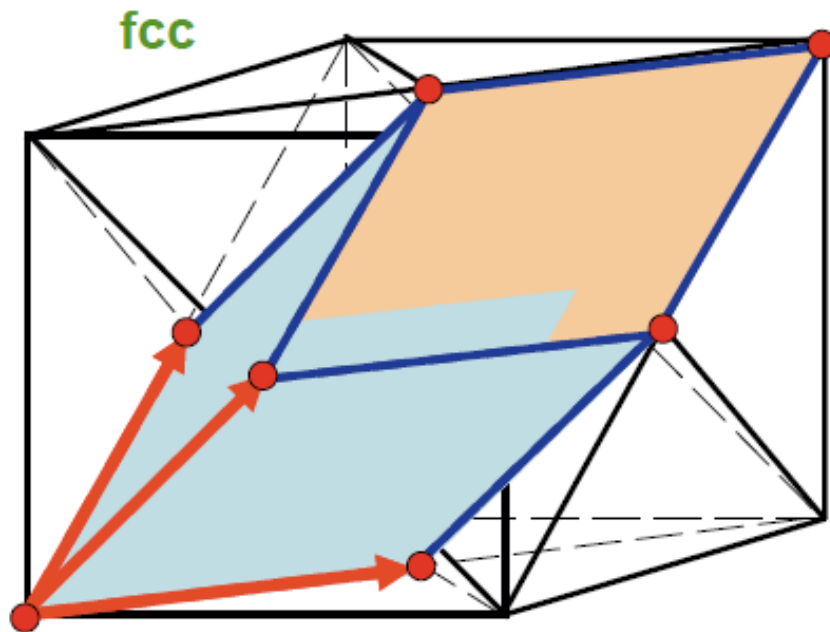
II.2.d Kubische Einheitszelle vs. Primitive Elementarzelle

Primitive Elementarzelle:

kleinste Zelle

Kubische Einheitszelle:

praktische Beschreibung

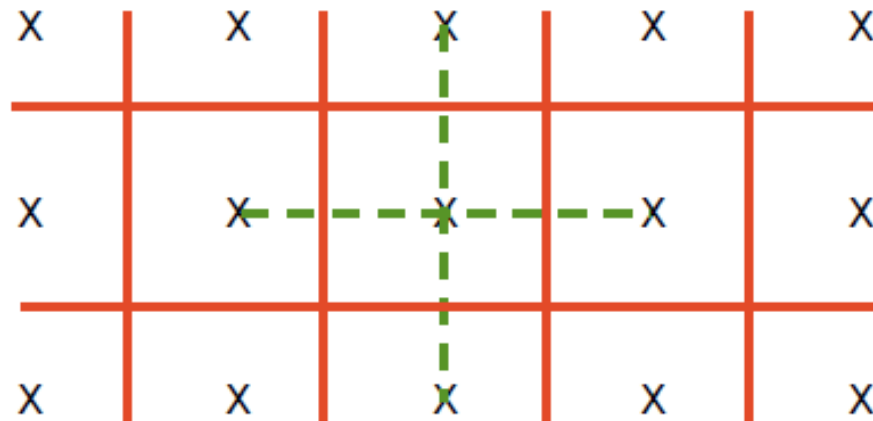


bcc

Rhomboeder

Primitive Elementarzelle:

Wigner-Seitz-Zelle

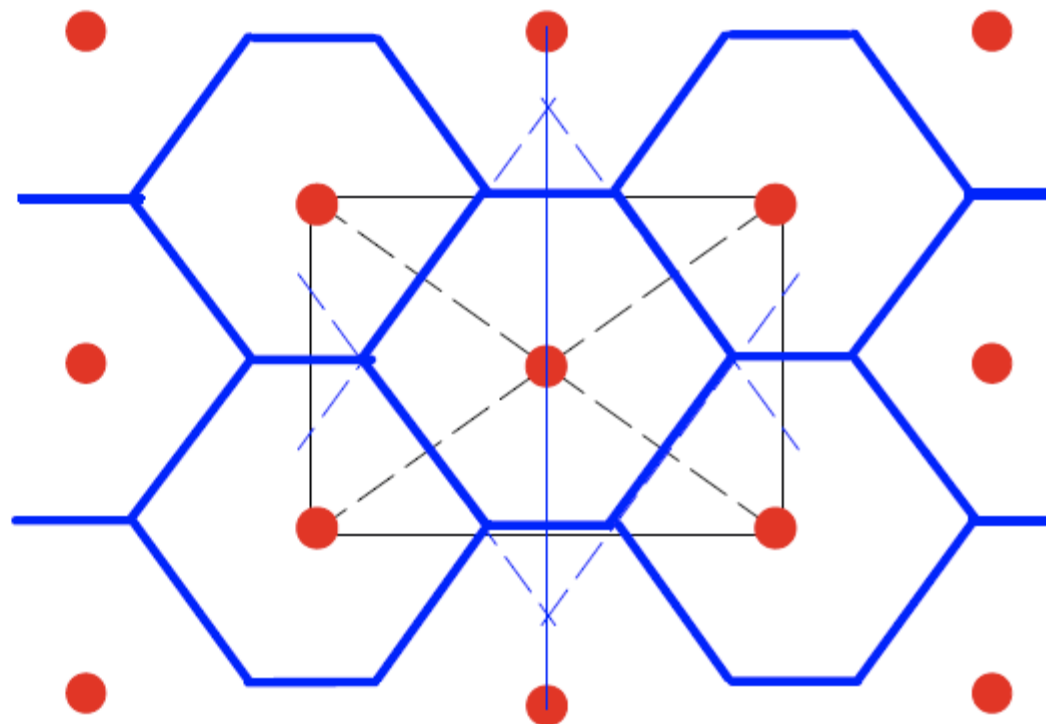
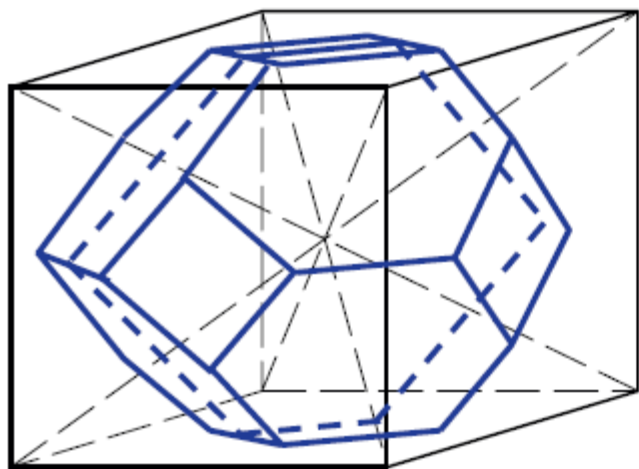
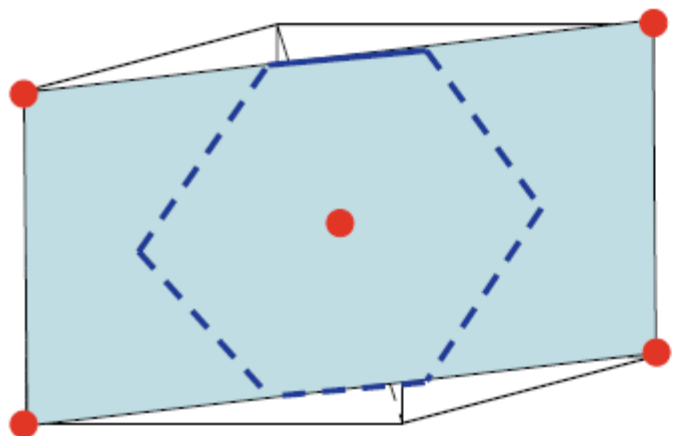


Konstruktionsverfahren:

Mittelsenkrechten der Verbindungsgeraden
der Gitterpunkte bilden Einhüllende
der **Wigner-Seitz-Zelle**

Relevanz z.B. beim reziproken Gitter (später)

Wigner-Seitz-Zelle des raumzentrierten Gitters (bcc)



flächendiagonale Ebene

= (110)-Ebene (s.u.)

Zusammenfassung der Dreidimensionale Gittertypen

Im dreidimensionalen:

14 Bravaisgitter

<u>Triklin</u>	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	P
<u>Monoklin</u>	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	P, C
<u>Hexagonal</u>	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	P
<u>Rhomboedrisch</u> (Trigonal)	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	P
<u>Tetraogonal</u>	$a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, I
<u>Orthorhombisch</u>	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, C, F, I
<u>Kubisch</u>	$a_1 = a_2 = a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P, F, I

P = primitiv (keine Zentrierung), F = flächenzentriert, I = (innen-), raumzentriert
C = Basiszentriert (C = die von a_1 und a_2 aufgespannte Ebene)

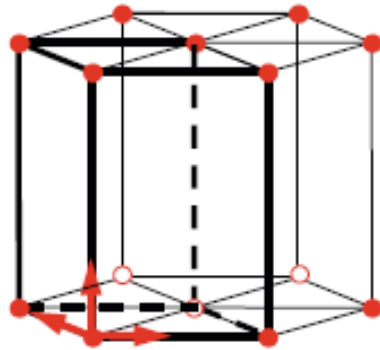
Allen zentrierten Bravaisgitter können auch als primitive Gitter „aufgestellt“ werden,
deren Einheitszellen haben aber eine niedrigere Symmetrie.

Die wichtigsten der **14 Bravaisgitter** sind:

Hexagonal

$$a_1 = a_2 \neq a_3$$

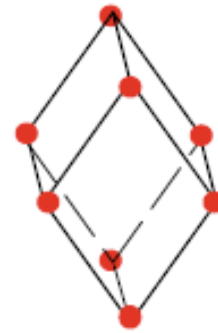
$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$



Rhomboedrisch (Trigonal)

$$a_1 = a_2 = a_3$$

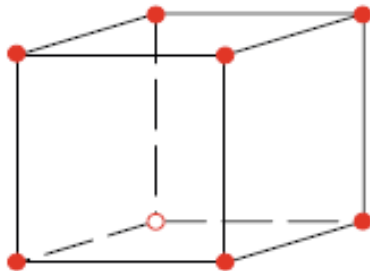
$$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$$



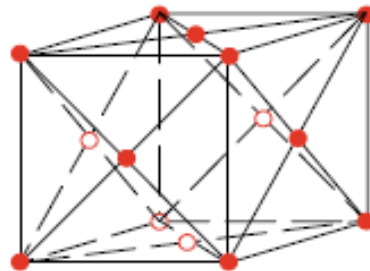
Kubisch

$$a_1 = a_2 = a_3$$

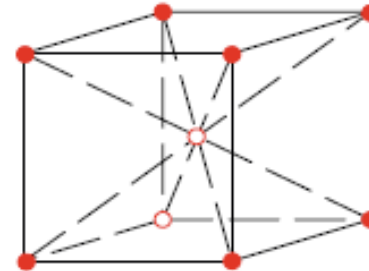
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



primitiv



flächenzentriert



raumzentriert

II.3 Miller-Indizes

Indizierung für (i) Kristallebenen, (ii) Kristallrichtungen, (iii) Beugungsreflexe (später)

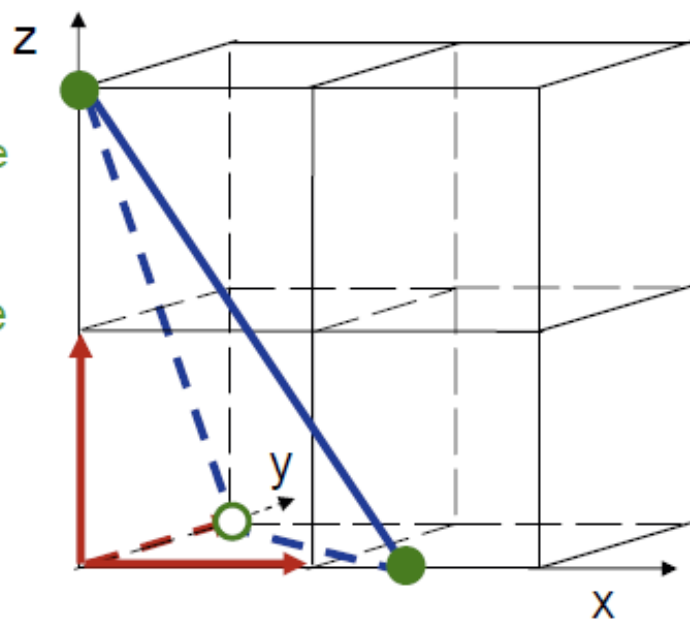
II.3.a Kristallebenen

Festlegung einer Ebene durch 3 nicht-kollineare Punkte

geeignete Auswahl: Schnittpunkte der Ebene mit Achsen der Einheitszelle

formelle Vorgehensweise:

1. Bestimme die 3 Schnittpunkte der Ebene mit Gitterachsen a_1, a_2, a_3
 2. Gebe Ergebnisse an in Einheiten der Gittervektoren
 3. Bilde Kehrwerte dieser Zahlen
 4. Suche die 3 kleinsten ganzen Zahlen h, k, l , deren Verhältnis dem der Kehrwerte gleich.
- **(h,k,l)-Ebene** (runde Klammern)



→ $3/2, 1, 2$

→ $2/3, 1, 1/2$

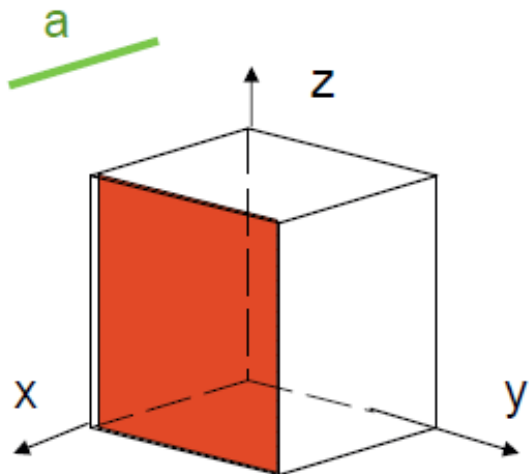
→ $4, 6, 3$

→ **(4, 6, 3)-Ebene**

Motivation: Indizierung von Gitterebenen (sog. Netzebenen) in Kristallen

Beispiel: Miller-Indizes

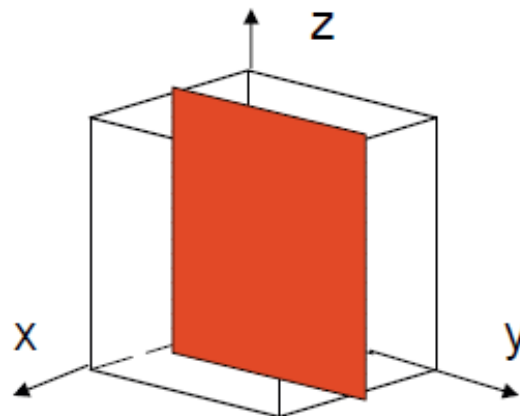
hochsymmetrische Ebenen



- x-Schnittpkt = $1 \cdot a$
- Ebene parallel zu y- und z-Achse

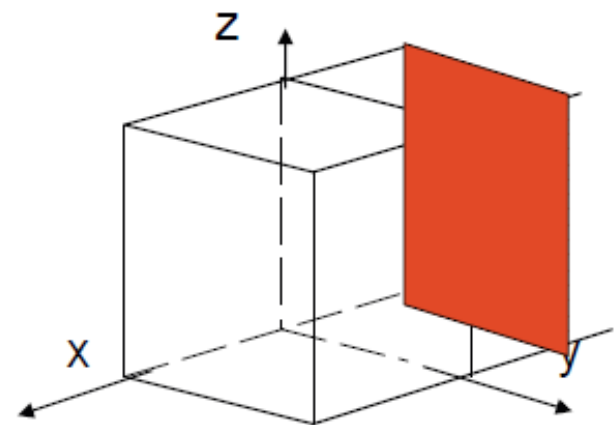
y,z - Schnittpunkte: $\infty = 1/0$
d.h. y- und z-Index = 0

(100)- Ebene



- x-Schnittpkt = $a/2$
d.h. Kehrwert = 2
- y- und z-Schnitt:
 $\infty = 1/0$

(200)-Ebene



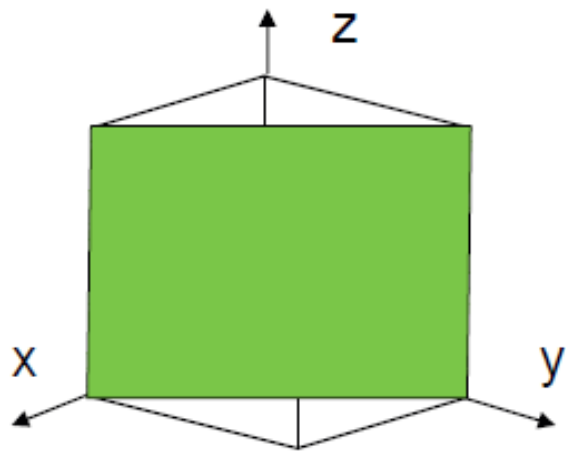
- x-Schnittpkt: $-a/2$
d.h. Kehrwert = -2

Konvention:

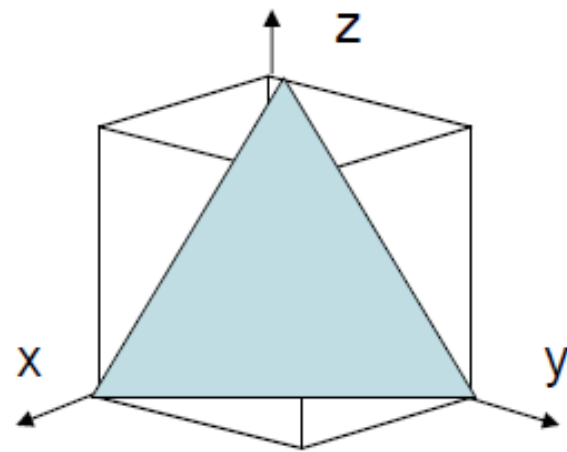
Schreibweise $\bar{2}$

$\bar{2}$ 00)- Ebene

Beispiel: Miller-Indizes hochsymmetrische Ebenen (ii)



(110)- Ebene



(111) - Ebene

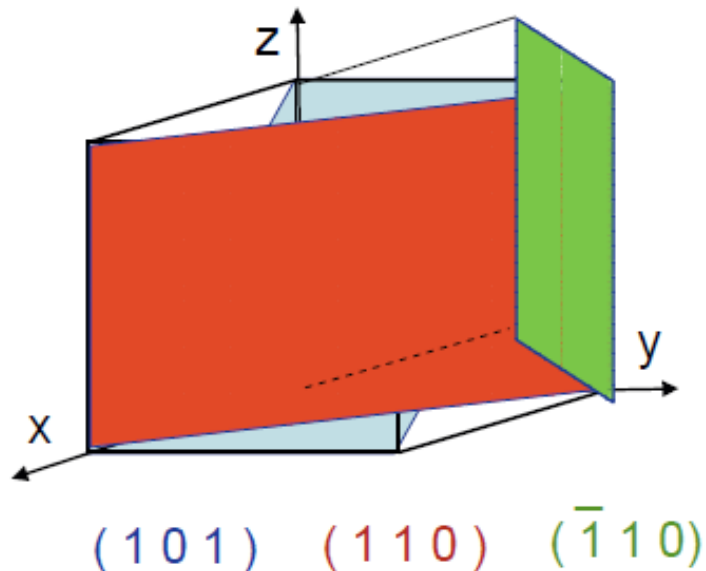
II.3.b Scharen von Ebenen

wegen Kristallsymmetrie:

Äquivalente Richtungen und äquivalente Ebenen

äquivalent = nach Symmetrioperationen deckungsgleich

Bsp: einfach kubisches Gitter



Nomenklatur:

$\{110\}$ = Schar äquivalenter Ebenen

(101), (110), $(\bar{1}10)$, (011) etc.

Allg:

$\{h k l\}$ -Ebenen = alle Permutationen
von h, k, l, -h, -k, -l.

II.3.c Kristallrichtungen

$[u\ v\ w]$ beschreibt **Richtung** (nicht Länge)

\uparrow \uparrow
eckige Klammern

u, v, w: 3 kleinste ganze Zahlen,
die das gleiche Verhältnis haben
wie die x-, y-, und z-Komponenten
eines Vektors dieser Richtung

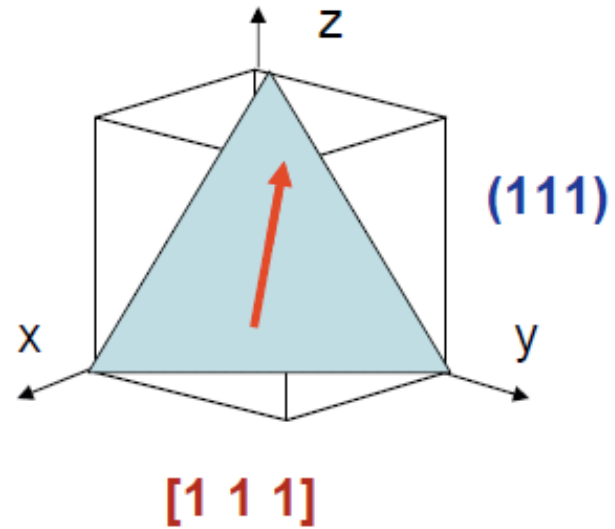
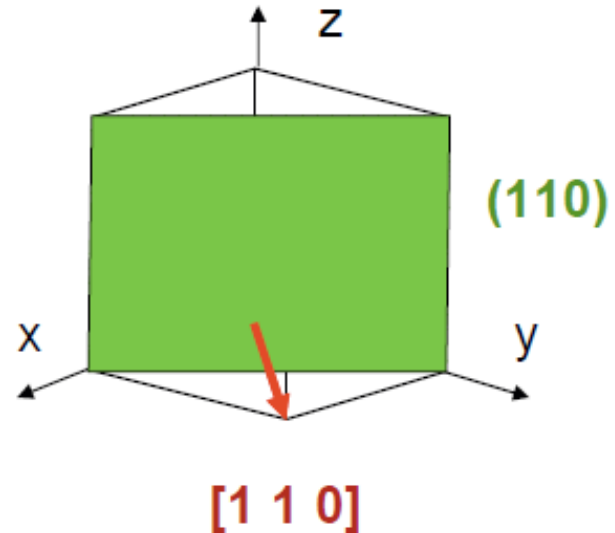
In kubischen Kristallen:

$[n_1\ n_2\ n_3]$ - Richtung \perp $(n_1\ n_2\ n_3)$ - Ebene

d.h. Richtungsvektor = Oberflächennormale

Äquivalente Richtungen (analog zu Ebenen):

$\langle u\ v\ w \rangle$ - Richtungen = alle Permutationen
von u, v, w, -u, -v, -w.



II.4 Einfache Kristallstrukturen

Warum gibt es verschiedene Kristallstrukturen ??

- Kriterien:
- (i) **Raumauffüllung** (insbes.: Metalle)
 - (ii) **Ausrichtung** der elektronischen **Bindungen** (Nichtmetalle, z.B. Diamant)
 - (iii) **Anziehung / Abstoßung** von **Ladungen** (ionische Verbindungen, z.B. NaCl)

genauere Betrachtung: Kap. 4

II.4.1	dichteste Kugelpackungen	(i) hexagonal: hex.dicht gepackt hcp (ii) kubisch: kubisch flächenzentriert fcc	} Elemente
II.4.2	kubisch raumzentriert		
II.4.3	Diamantstruktur	kubisch Bsp: C, Si, Ge	
II.4.4	Zinkblendestructur	kubisch Bsp: III-V: GaAs, InP etc. II-VI: ZnSe, ZnTe	} Verbindungen.
II.4.5	Wurtzitstruktur	hexagon. Bsp: II-VI: CdS, CdSe etc.	
II.4.6	NaCl - Struktur	kubisch Bsp: I-VII: NaCl, KBr etc.	
II.4.7	CsCl - Struktur	kubisch Bsp: CsCl, NH ₄ Cl etc.	

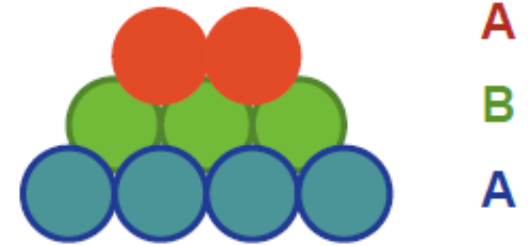
II.4.1 Dichteste Kugelpackungen

fcc oder hcp, je nach Stapelfolge

Schicht 3

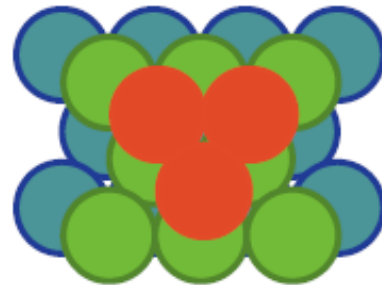
Schicht 2

Schicht 1



Identische Schichten, lateral gegeneinander verschoben, liegen „auf Lücke“

Draufsicht



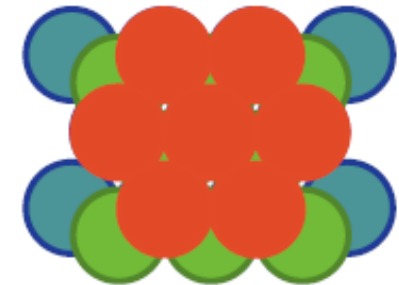
Schicht 3 \neq Schicht 1

Abfolge **A B C A B C**

= kubisch flächenzentriert

fcc

Bsp: Cu, Ag, Au, Pt



Schicht 3 = Schicht 1

Abfolge **A B A B A B**....

= hexagonal dichteste Packung

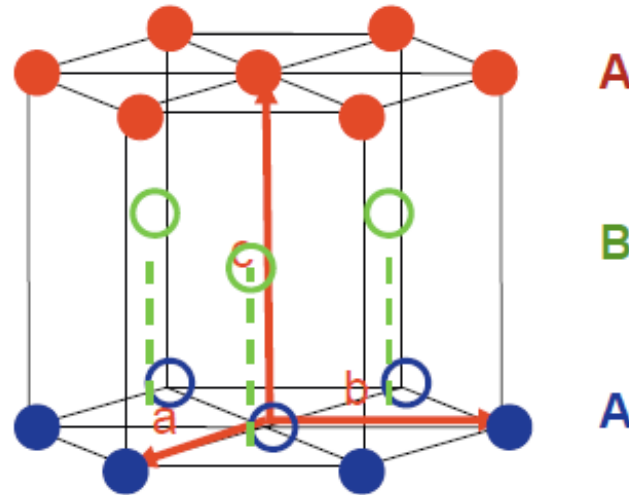
hcp (hex.close packed)

Bsp: Mg, Zn, Cd

für jedes Atom: 12 nächste Nachbarn

Raumausfüllung = 0,74.

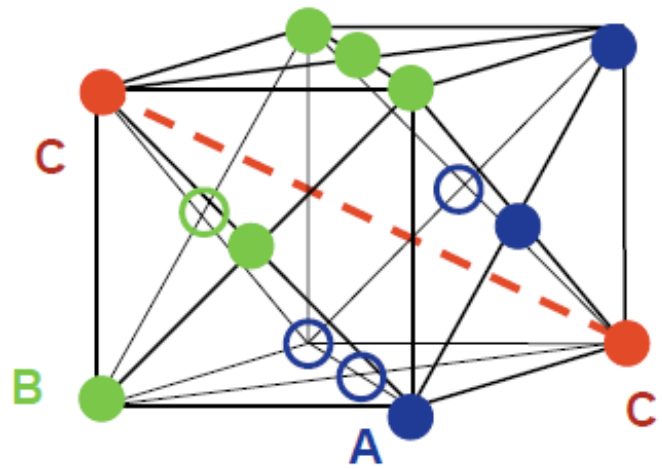
II.4.1 (i) Schichtfolge **ABAB...** = hexagonale dichteste Packung



hcp =
hexagonales Gitter
mit zwei-atomiger Basis:
 $(0, 0, 0), (2/3, 1/3, 1/2)$

Gittervektoren:
 $c/a = 1,633$

II.4.1 (ii) Schichtfolge **ABC..** = kubisch flächenzentriert

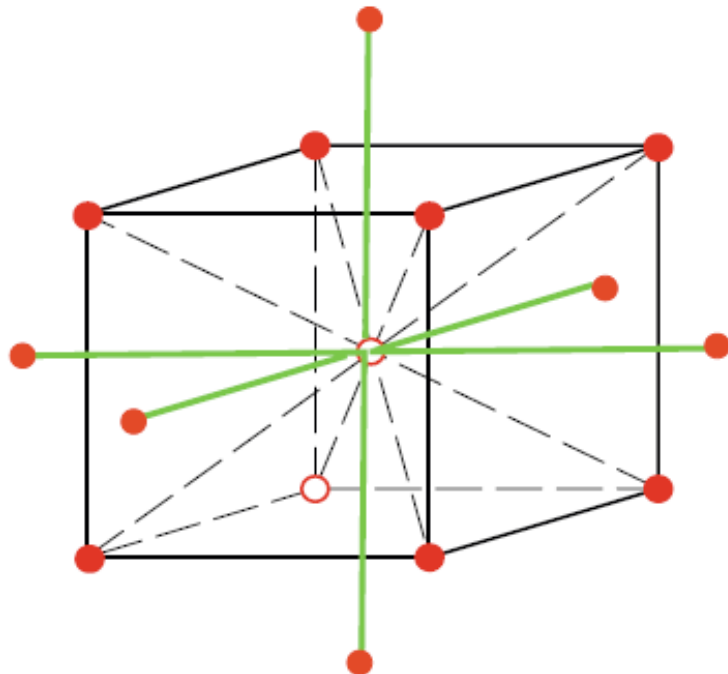


Raumdiagonale ist
die Normale zu den
Kugelebenen A, B, C.

fcc in kubischer Aufstellung
 $(0,0,0), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2)$
oder
primitiv in rhomboedrischer
Aufstellung
 $(0,0,0)$

II.4.2 kubisch raumzentriertes Gitter

body centered cubic: b c c



Stabilität der Bindung?

Kriterium: Zahl nächster Nachbarn (NN)
(= Koordinationszahl)

bcc: 8 NN (Vgl. fcc: 12 NN)

aber: in bcc sind übernächste
und drittnächste
Nachbarn näher

$d_{\text{ÜNN}}(\text{bcc}) / d_{\text{ÜNN}}(\text{fcc}) = 2/3$
(bezogen auf NN)
=> Übungsaufgaben

Bsp: Metalle

- Alkali: Li, Na, K, Rb, Cs
- Cr, Fe, W, Nb, Ta etc.

(Viele andere Metalle sind fcc:
Cu, Ag, Au, etc.)

II.4.3 Diamantstruktur

Diamant: Kohlenstoff mit sp^3 -Hybridisierung der 4 Valenzelektronen

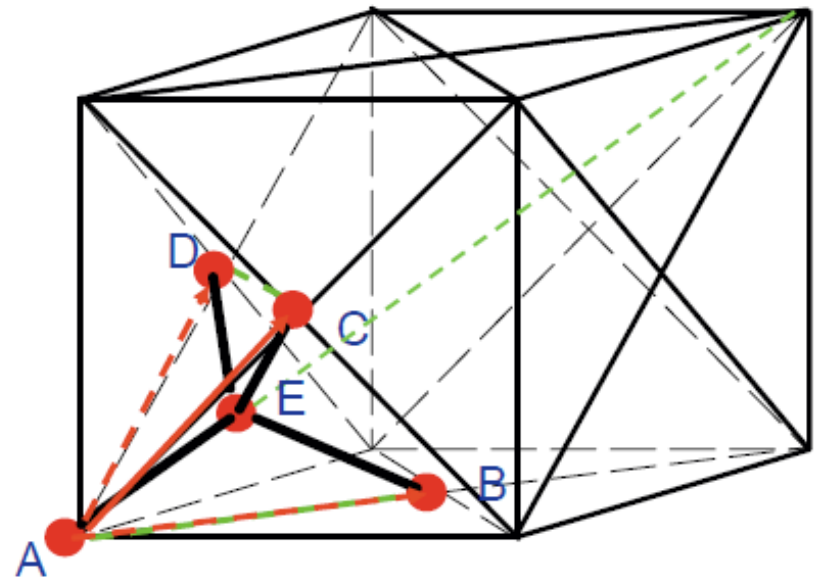
→ 4 äquivalente Bindungselektronen pro Atom

Folge: **lokale Umgebung**
=
Tetraeder

Vektoren AB, AC, AD:
primitive Einheitsvektoren
des flächenzentrierten Gitters

Rhomboeder, $\varphi = 60^\circ$

Vektor AE:
Richtung = Raumdiagonale
Länge = $\frac{1}{4}$ Raumdiagonale

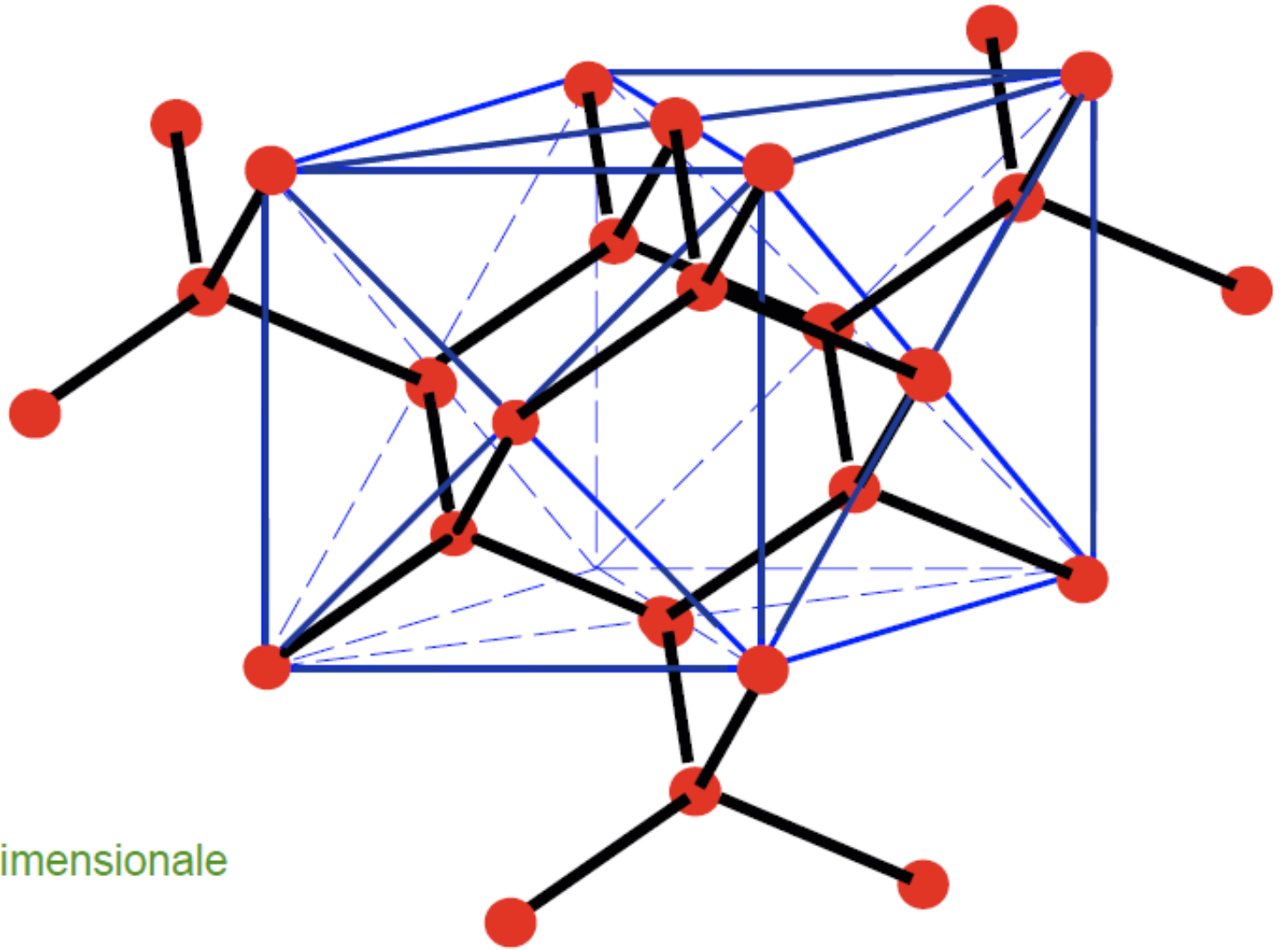


bei Darstellung mittels kubischer Basisvektoren:

Diamantstruktur = fcc-Gitter

mit **2-atomiger Basis**: $(0,0,0)$ und $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

Aufbau der Diamantstruktur aus Tetraedern



Starke dreidimensionale
Vernetzung

→ sehr stabile Struktur

Bsp: C (Diamant), Si, Ge, α -Sn.

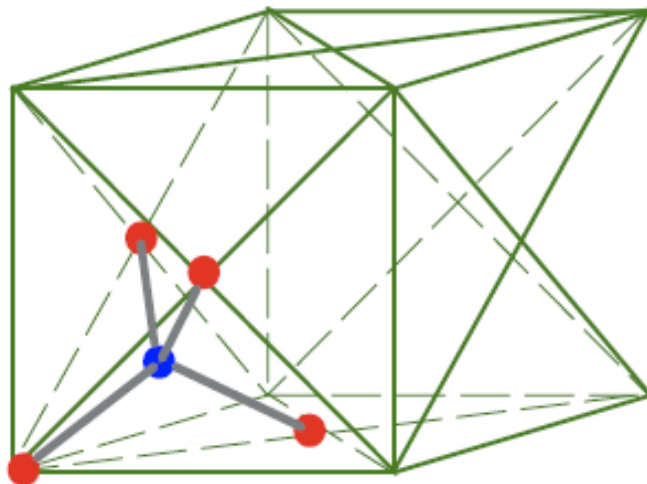
II.4.4 Zinkblendestruktur

Benannt nach dem Mineral Zinkblende = ZnS

Viele III-V- und II-VI-Verbindungen:

kovalente Bindungen (wie Gruppe IV),
aber unterschiedliche Atomsorten,
deshalb teilweise ionische Bindung (Kap. 4)

Bindung: **tetraedrisch**
aber mit **2 Atomsorten**

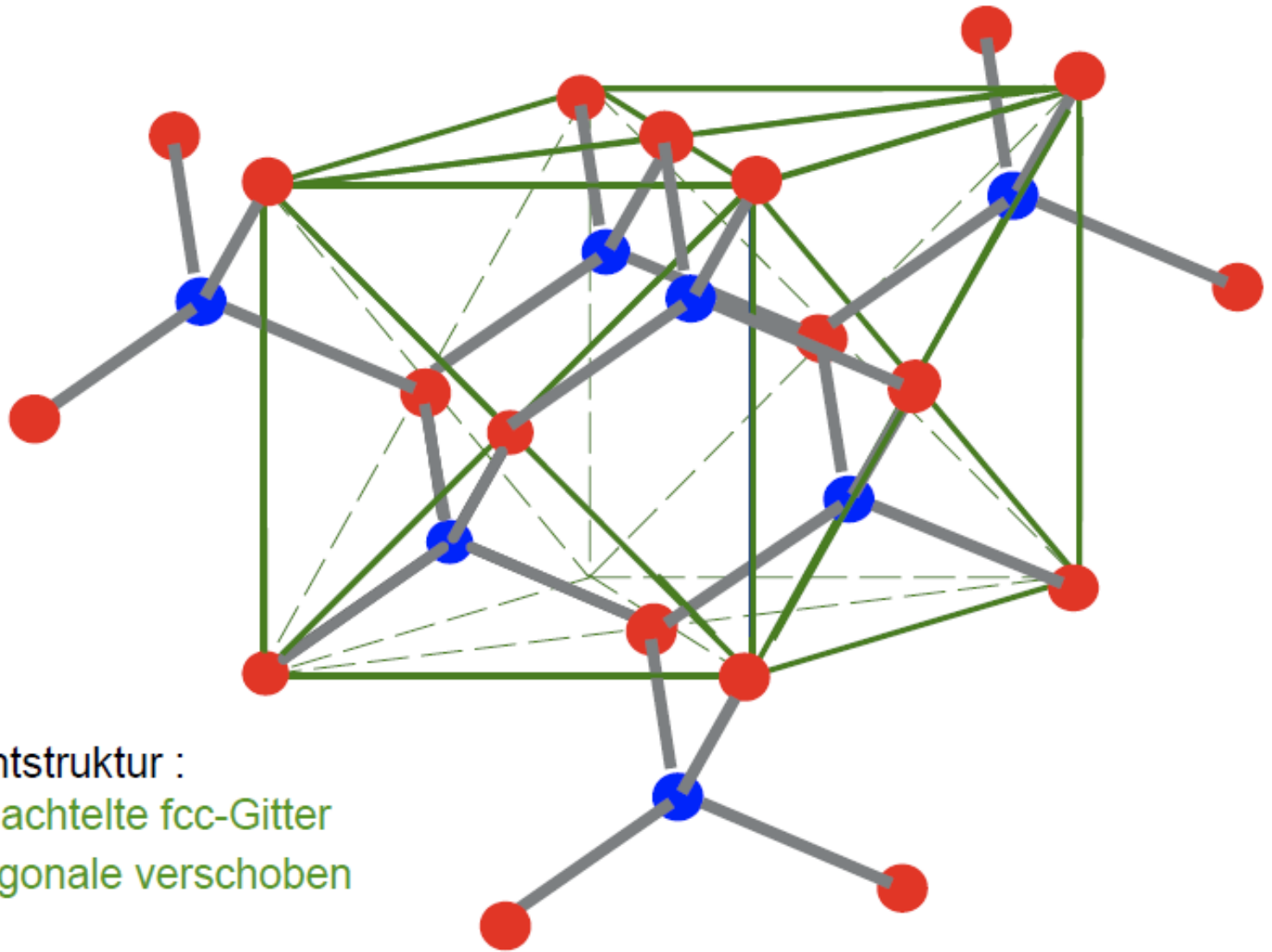


	II	III	IV	V	VI
		B	C	N	O
		Al	Si	P	S
Zn		Ga	Ge	As	Se
Cd		In	Sn	Sb	Te

Gitter: **kubisch**
flächenzentriert fcc

Basis: **(0, 0, 0) Atomsorte A**
($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$) Atomsorte B

Aufbau der Zinkblendestruktur aus Tetraedern



Wie Diamantstruktur :
zwei verschachtelte fcc-Gitter
 $\frac{1}{4}$ Raumdiagonale verschoben

Aber:

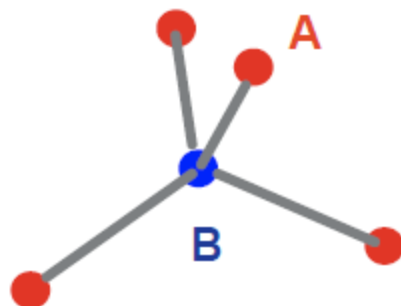
Gitter 1: Atomsorte A

Gitter 2: Atomsorte B.

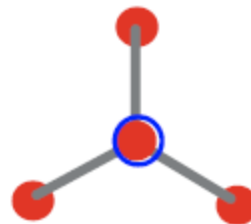
II.4.5 Wurtzitstruktur= hexagonale Zinkblendestructur

Bsp: II-VI: ZnO, ZnSe, CdS, CdSe etc.

Tetraedrische
Bindungsanordnung



in Blickrichtung AB:



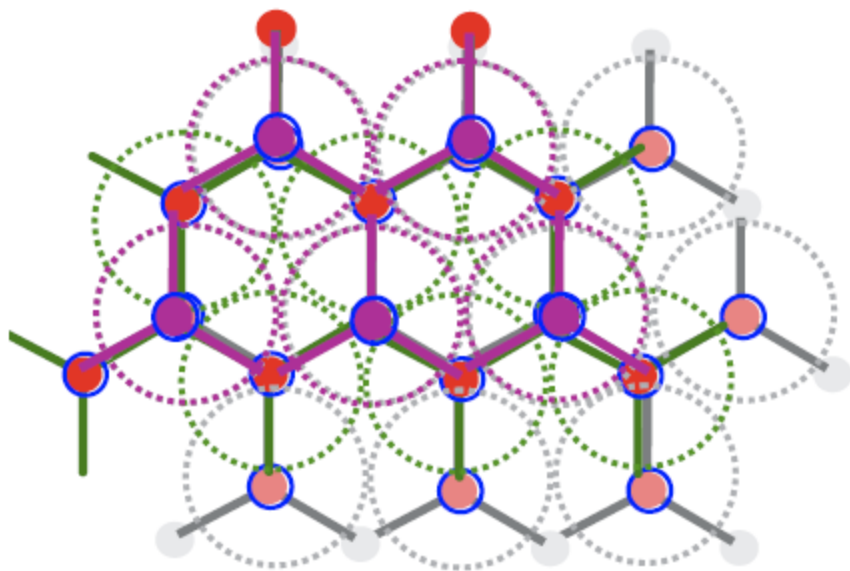
entscheidend:

Ausrichtung der Tetraeder zueinander

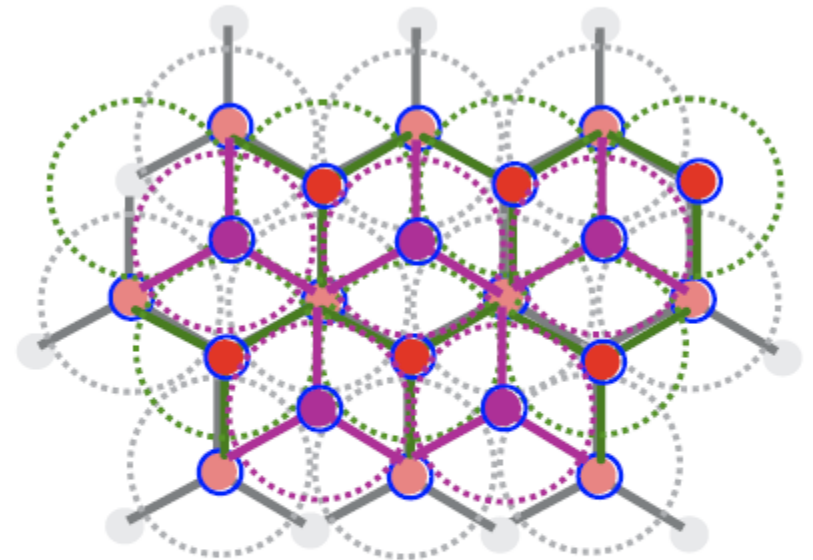
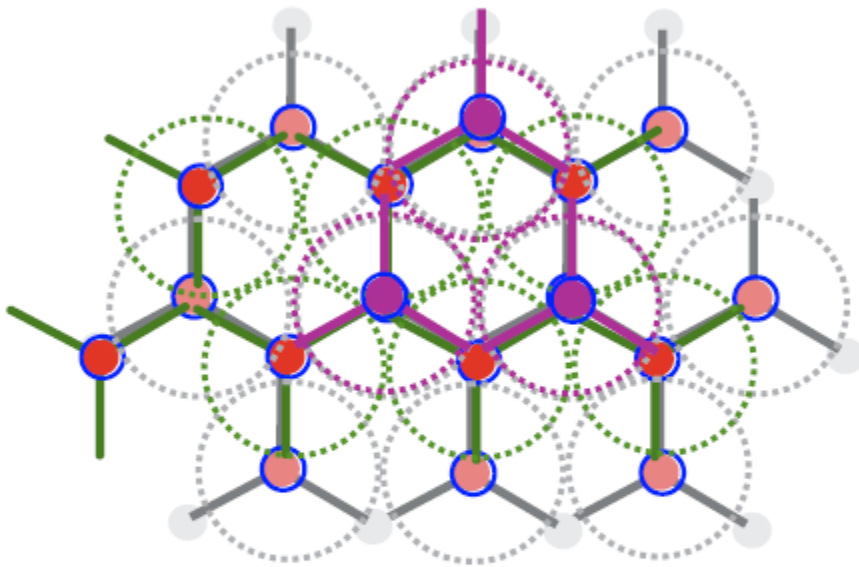
Tetraederschicht 1

Tetraederschicht 2

Tetraederschicht 3 = Schicht 1



Vergleich von Wurtzit – und Zinkblendestructur

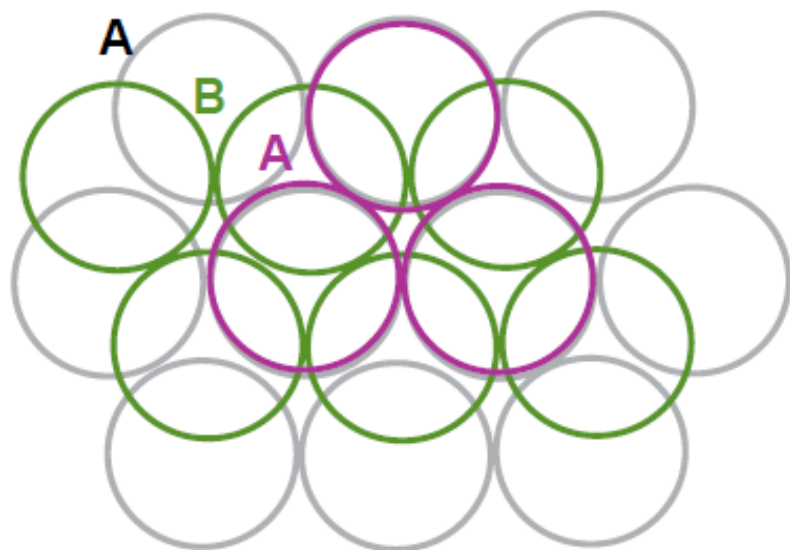


Tetraederschicht 1

Tetraederschicht 2

Tetraederschicht 3

Vergleich von Wurtzit – und Zinkblendestructur



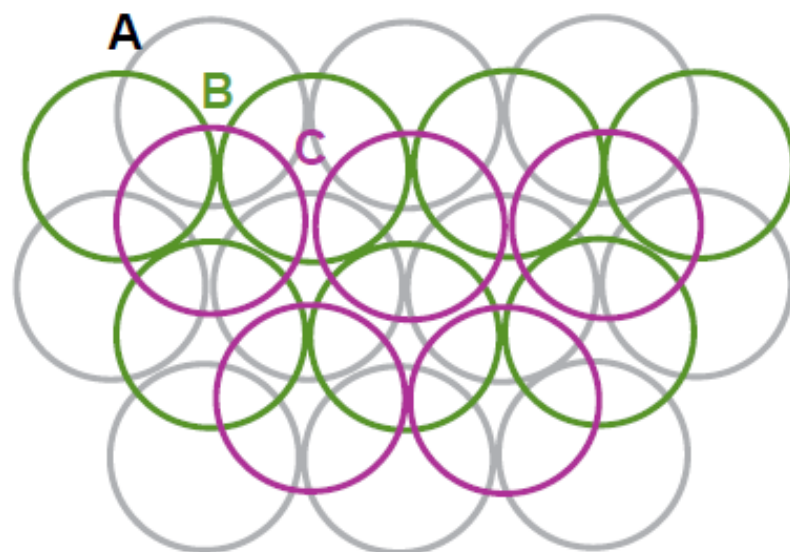
Tetraederschicht 1

Wurtzit (hexagonal)

Tetraederschicht 2

Tetraederschicht 3 = Schicht 1

Abfolge **ABAB.....**
Vgl. hcp



Zinkblende (kubisch)

Tetraederschicht 3 ≠ Schicht 1

Abfolge **ABCABC....**
Vgl. fcc

I.4 Einfache Kristallstrukturen

- Kriterien: (i) **Raumausfüllung** (insbes.: Metalle)
(ii) **Ausrichtung** der elektronischen **Bindungen** (Nichtmetalle, z.B. Diamant)
(iii) **Anziehung / Abstoßung** von **Ladungen** (ionische Verbindungen, z.B. NaCl)

genauere Betrachtung: Kap. 4

I.4.1	dichteste Kugelpackungen	(i) hexagonal: hex.dicht gepackt hcp (ii) kubisch: kubisch flächenzentriert fcc	} Elemente
I.4.2	kubisch raumzentriert		
I.4.3	Diamantstruktur	kubisch Bsp: C, Si, Ge	
I.4.4	Zinkblendestructur	kubisch Bsp: III-V: GaAs, InP etc. II-VI: ZnSe, ZnTe	} Verbindungen.
I.4.5	Wurtzitstruktur	hexagon. Bsp: II-VI: CdS, CdSe etc.	
I.4.6	NaCl - Struktur	kubisch Bsp: I-VII: NaCl, KBr etc.	
I.4.7	CsCl - Struktur	kubisch Bsp: CsCl, NH ₄ Cl etc.	

II.4.6 NaCl - Struktur

kubisch

Bsp: I-VII: NaCl, KBr etc

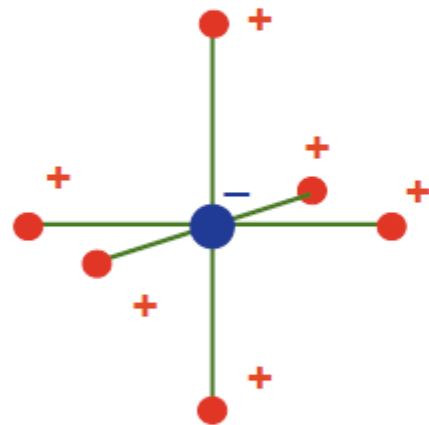
I-VII-Verbindungen = Alkali-Halogenide

stark unterschiedliche Elektronegativität

zwischen Gruppe I und Gruppe VII

→ **Ionenkristalle** - Anziehung Anion – Kation
- Abstoßung Anion - Anion
und Kation - Kation

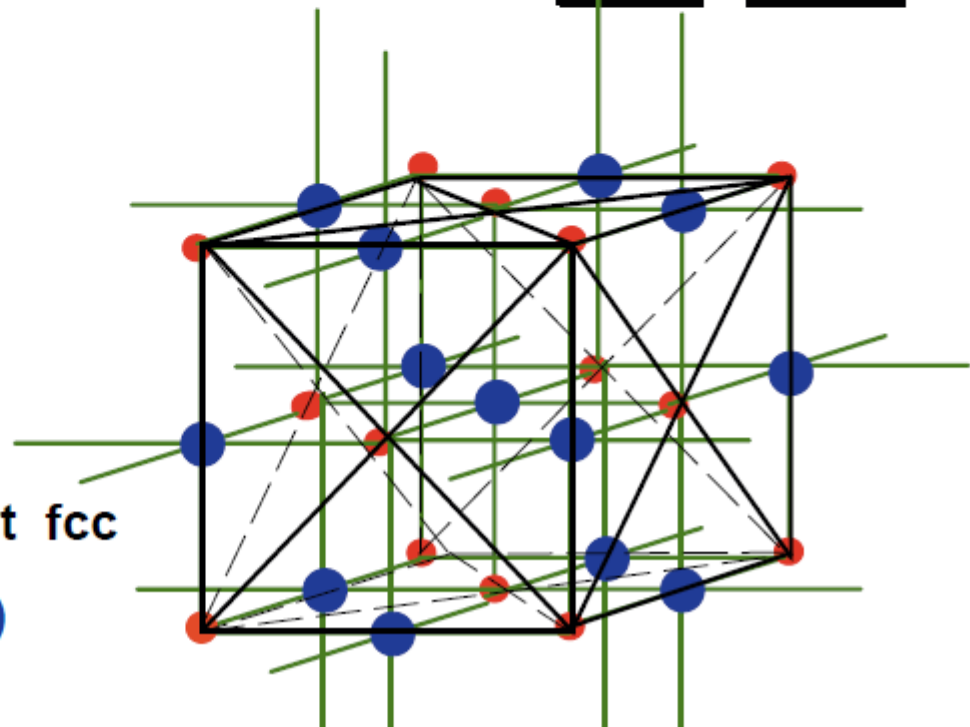
I	VII
Li	F
Na	Cl
K	Br
Rb	I
Cs	



Koordinationszahl = 6

Gitter: **kubisch flächenzentriert fcc**

Basis: $(0\ 0\ 0)$ und $(\frac{1}{2}\ 0\ 0)$



II.4.7 CsCl - Struktur

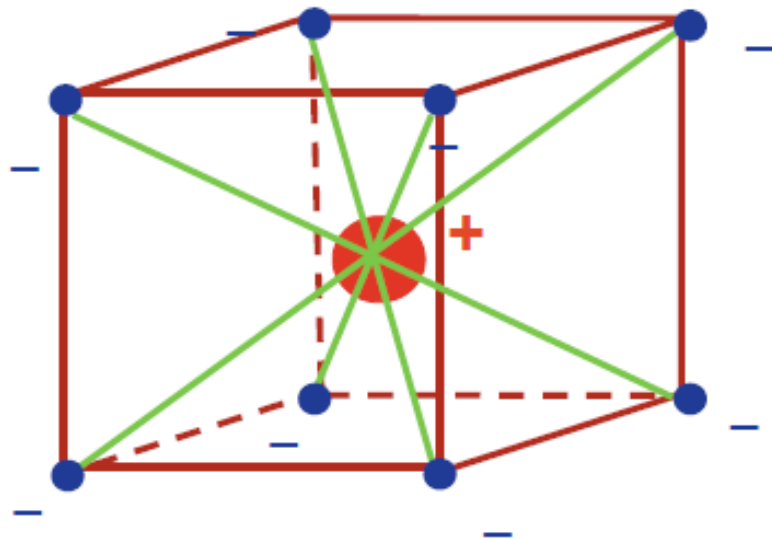
kubisch

Bsp: CsCl, NH₄Cl etc.

Cs: größter Radius

der Alkali-Ionen

→ CsCl hat spezielle Gitterstruktur



Koordinationszahl = 8

vgl. NaCl: Koordinationszahl = 6

dennoch ist NaCl häufiger

weil begünstigt durch Verhältnis der Ionenradien:

$$\text{i.a. } R_{\text{Kation}} < R_{\text{Anion}}$$

Gitter: **kubisch primitiv**

Basis: $(0 \ 0 \ 0)$

und

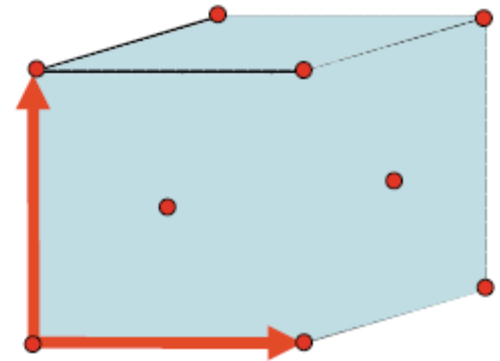
$(\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2})$

Kristallstruktur = Gitter + Basis

Kupfer: („fcc-Struktur“)

fcc Gitter + einatomige Basis

Cu (0 0 0)

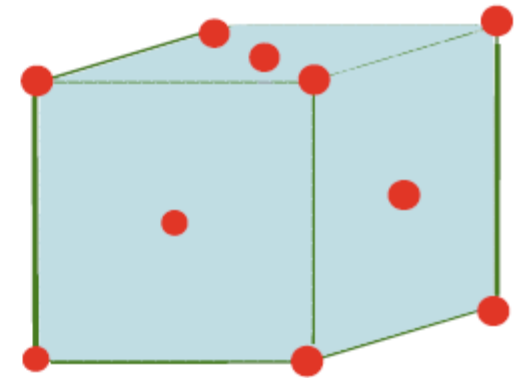


Silizium: (Diamantstruktur)

fcc Gitter + zweiatomige Basis

Si (0 0 0)

Si ($\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$)

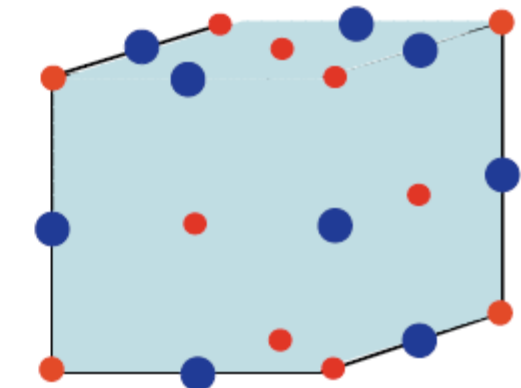


GaAs: (Zinkblendestruktur)

fcc Gitter + zweiatomige Basis

Ga (0 0 0)

As ($\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$)



NaCl: (Kochsalzstruktur)

fcc Gitter + zweiatomige Basis

Na (0 0 0)

Cl ($\frac{1}{2}$ 0 0)

Wigner-Seitz-Zelle:

definiert für Gitter, nicht für Struktur