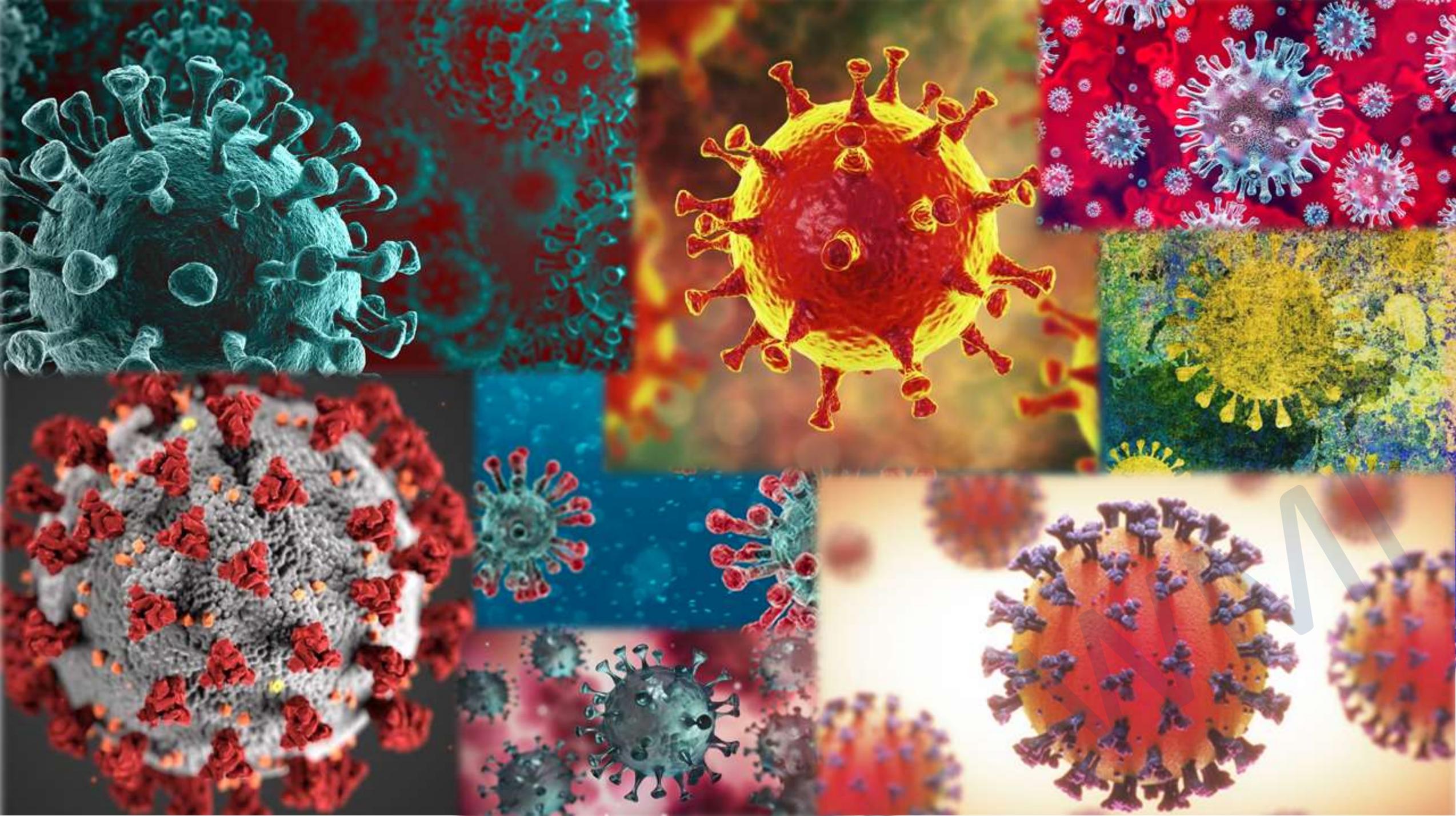




Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021**



WS 2020/2012 – Corona

Vorlesung: asynchrones E-Learning

**26 Doppelstunden
ein File pro Doppelstunde**

Tutorium: synchrones E-Learning

**Zoom-Meeting
(Link wird via Email zugeschickt)**

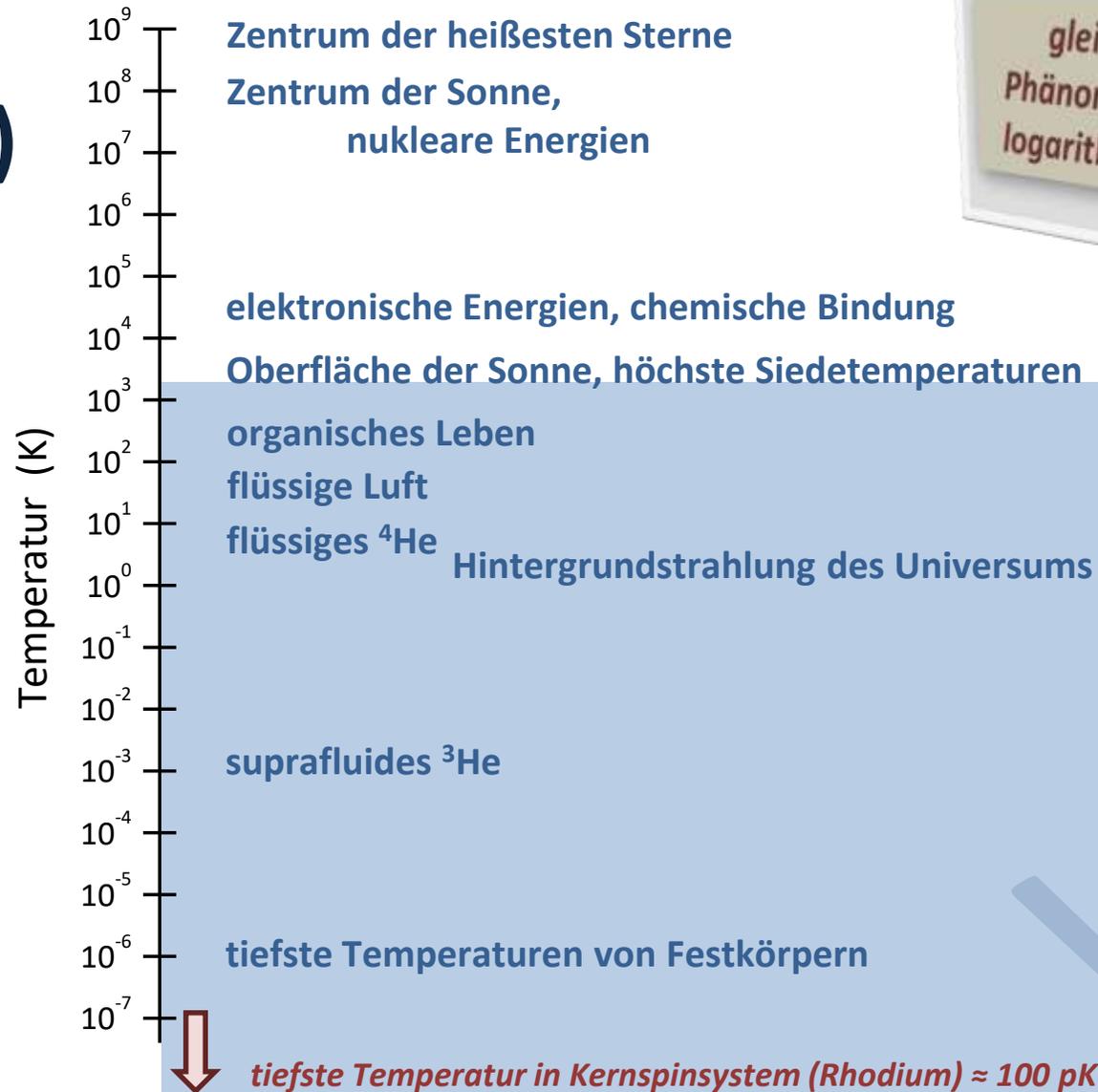


Physik der Kondensierten Materie 1

**Rudolf Gross
WS 2020/2021
Teil 1**

Vorlesungsstunde: 03.11.2020

Energieskalen (1 eV \approx 10 000 K)



gleiche Zahl physikalischer Phänomene auf jeder Dekade der logarithmischen Temperaturskala

Nobelpreise für Physik im Bereich Tieftemperaturphysik

year	name	discovery
1913	Heike Kamerlingh Onnes	"For his investigations on the properties of matter at low temperatures which led, inter alia, to the production of liquid helium "
1972	John Bardeen , Leon Neil Cooper und Robert Schrieffer	"for their jointly developed theory of superconductivity , usually called the BCS-theory "
1973	Brian David Josephson	"for his theoretical predictions of the properties of a supercurrent through a tunnel barrier, in particular those phenomena which are generally known as the Josephson effect "
1978	Pjotr Kapiza	"for his basic inventions and discoveries in the area of low-temperature physics"
1985	Klaus von Klitzing	"for the discovery of the quantized Hall effect "
1987	Johannes Georg Bednorz und Karl Alex Müller	"for their important break-through in the discovery of superconductivity in ceramic materials "
1996	David M. Lee , Douglas D. Osheroff und Robert C. Richardson	"for their discovery of superfluidity in helium-3 "
1997	Steven Chu , Claude Cohen-Tannoudji und William D. Phillips	"for development of methods to cool and trap atoms with laser light" See Laser cooling .
1998	Robert B. Laughlin , Horst Ludwig Störmer und Daniel Chee Tsui	"for their discovery of a new form of quantum fluid with fractionally charged excitations". See Quantum Hall effect .
2001	Eric A. Cornell , Wolfgang Ketterle und Carl E. Wieman	"for the achievement of Bose-Einstein condensation in dilute gases of alkali atoms, and for early fundamental studies of the properties of the condensates"
2003	Alexei Abrikosov , Witali Ginsburg und Anthony James Leggett	"for pioneering contributions to the theory of superconductors and superfluids"

"for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene"

**Nobelpreis
für Physik
2010**



Andre Geim

Born: 1958, Sochi, Russia
Affiliation at the time of the award:
University of Manchester, UK

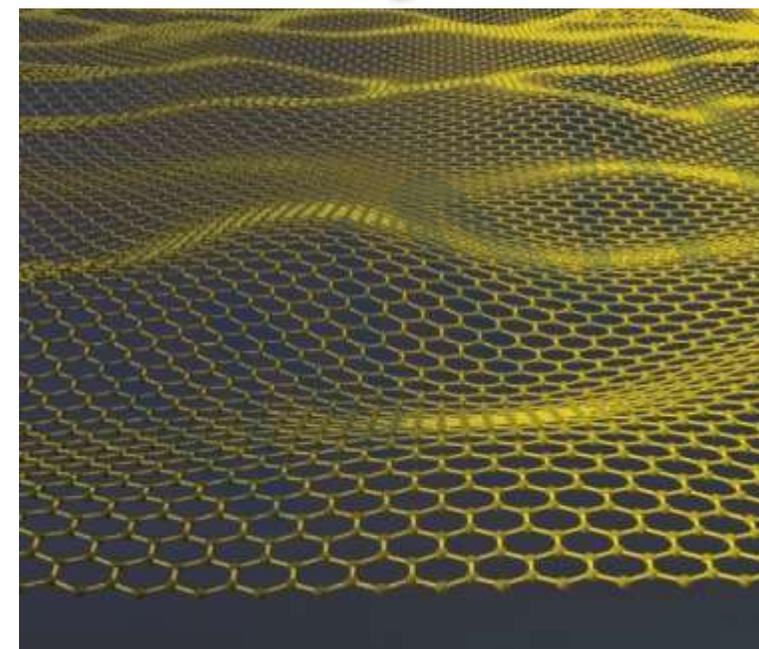
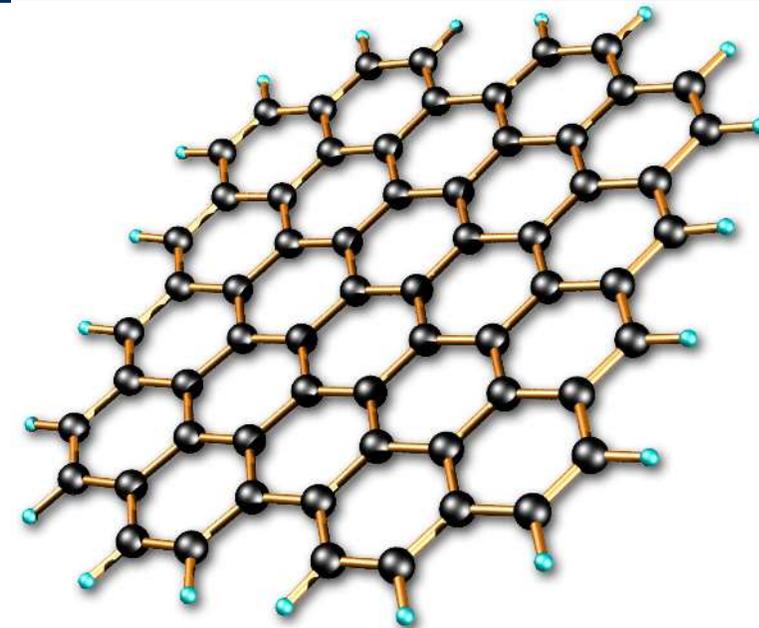
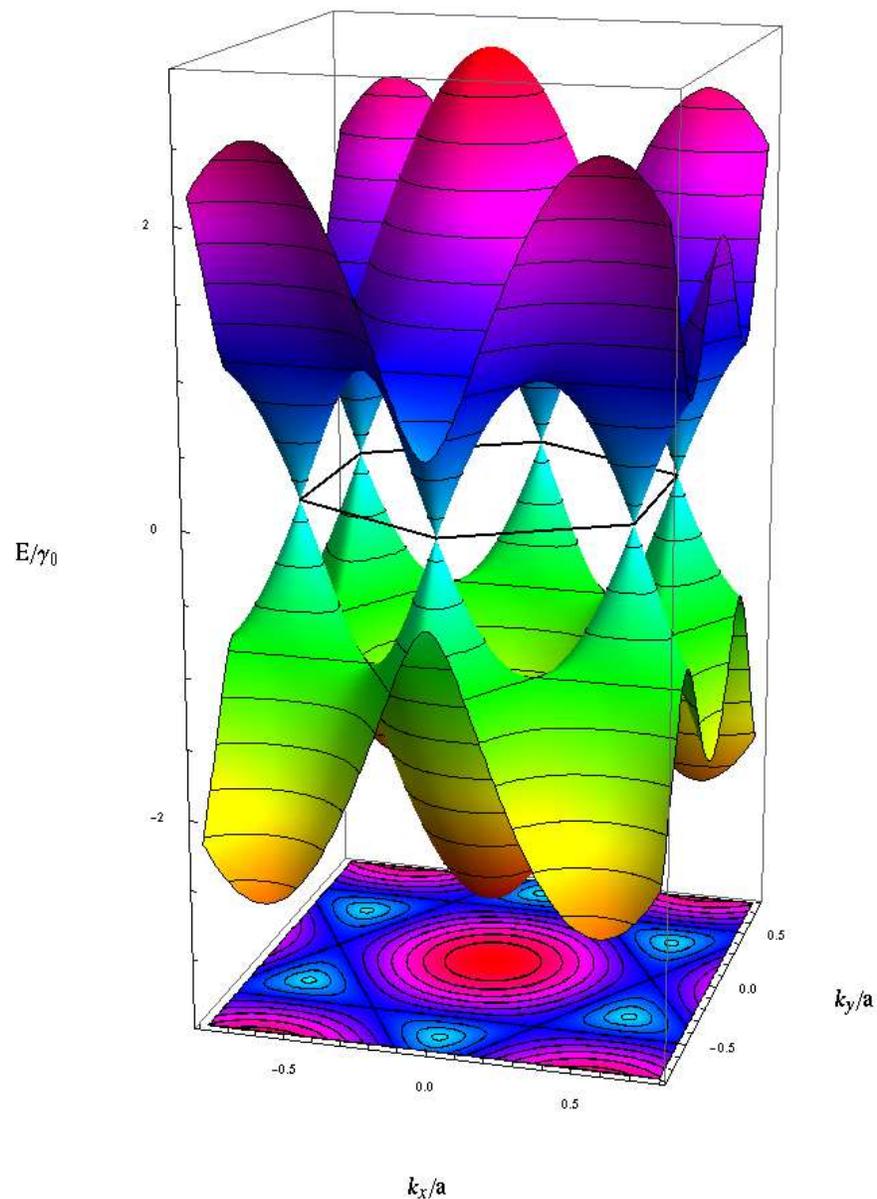


Konstantin Novoselov

Born: 1974, Nizhny Tagil, Russia
Affiliation at the time of the award:
University of Manchester, UK

Graphen:

**Relativistische
Physik mit
Kohlenstoff**

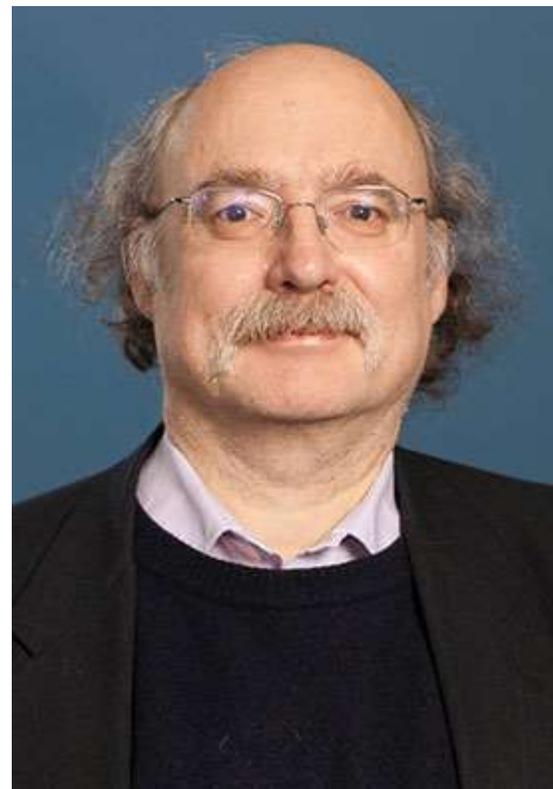


"for theoretical discoveries of topological phase transitions and topological phases of matter"

**Nobelpreis
für Physik
2016**



David J. Thouless
Born: 21 September 1934,
Bearsden, United Kingdom



F. Duncan M. Haldane
Born: 14 September 1951,
London, United Kingdom



J. Michael Kosterlitz
Born: 22 June 1942,
Aberdeen, United Kingdom

- *kondensierte Materie besteht aus wechselwirkenden Kernen/Atomen/Molekülen*

Kondensierte Materie

Gase, Plasmen
 $\approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Flüssigkeiten
 $\approx 10^{20} - 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

Festkörper
 $\approx 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

Atomkerne
 $\approx 10^{45} \text{ cm}^{-3}$

Thema der Festkörperphysik

- *dominierende Wechselwirkung für Festkörpereigenschaften:*
 - *elektromagnetische WW*
 - *Größenordnung: \leq einige eV*

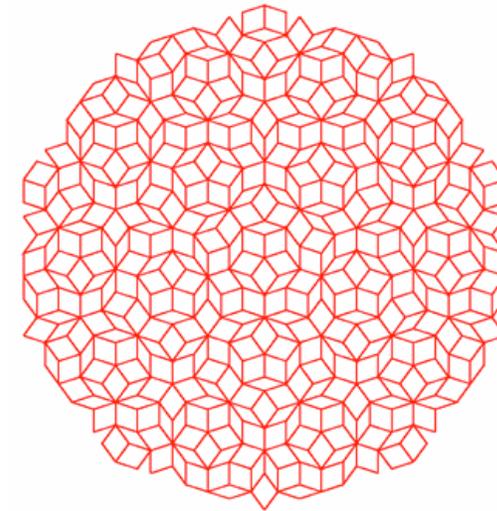
Längenskalen

- **Struktur:**
Atomdurchmesser $\approx \text{Å}$
- **kollektive Anregungen:**
nm bis Größe des Festkörpers

WMI

Aggregatzustände

- **kristallin:**
dreidimensionale, periodische Anordnung von Atomen
- **quasikristallin:**
nur Ordnung in Bezug auf Orientierung (Penrose Tiling)



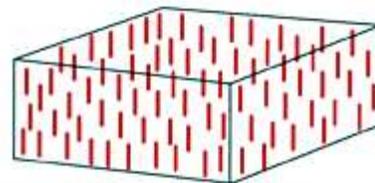
- **amorph:**
eingefrorene Flüssigkeiten

Kriterium: Viskosität ($1 \text{ poise} = 0.1 \text{ Nsm}^{-2}$):

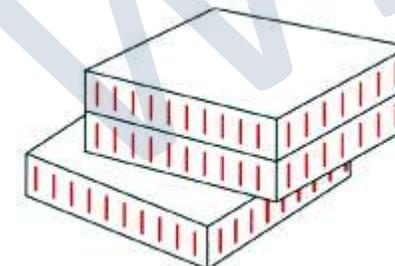
Wasser: 10^{-3} Nsm^{-2} , Öl: 1 Nsm^{-2} , Honig: 10^3 Nsm^{-2} , Fensterglas: $>10^{21} \text{ Nsm}^{-2}$

<http://www.youtube.com/watch?v=f2XQ97XHjVw>

- **Flüssigkristalle, Polymere:**



nematisch



smektisch

Anwendungsgebiete

- **Informations- und Kommunikationstechnologie**
- **Energietechnik**
- **Transport- und Verkehrstechnik**
- **Luft- und Raumfahrttechnik**
- **Maschinen- und Werkzeugbau**
- **Gebäudetechnik**
- **Sensorik**
- **.....**

WMI

Kapitel 1

Kristallstruktur

WZL

1. Kristallstruktur



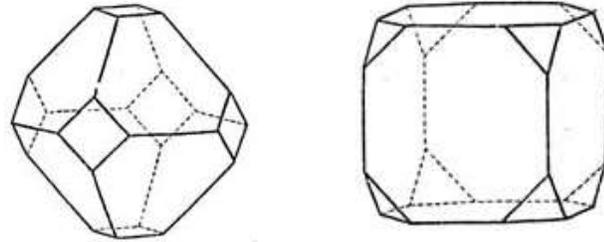
Glas: ungeordnete Anordnung von Atomen

Kristall: periodische Anordnung von Atomen



1. Kristallstruktur

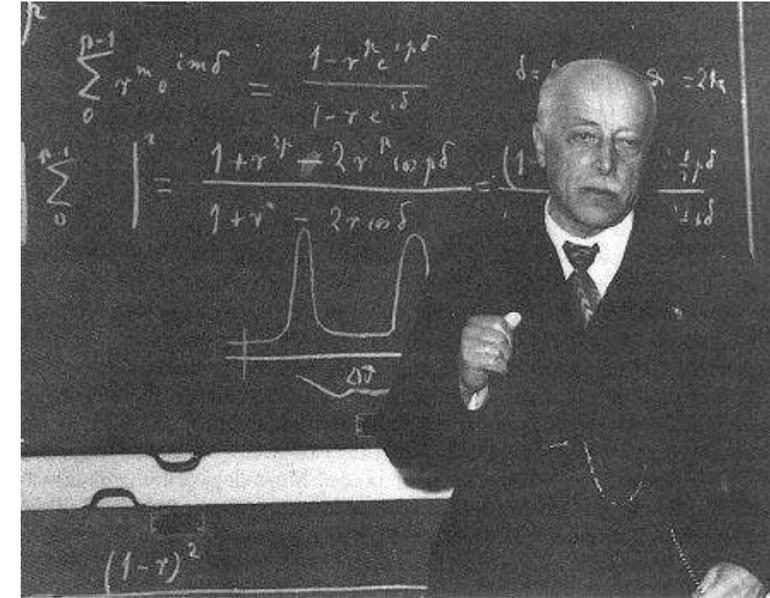
- **Kristalliner Festkörper:**
dreidimensionale periodische Anordnung von identischen Blöcken
- **Vorstellung entwickelt im 18. Jahrhundert**
beruht auf Beobachtung, dass Indexzahlen aller Kristallflächen ganze Zahlen sind



- **Bestätigung durch Max von Laue vor BAdW** (Vortrag vor BAdW am 08. Juni 1912)
 - Arbeit „Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen“
 - experimentelle Bestätigung von Friedrich und Knipping

Kristall = periodische Anordnung von Atomen

- **Erster Schritt:**
Einführung von **Nomenklatur zur Beschreibung von Kristallen und Klassifizierung von Kristallen**

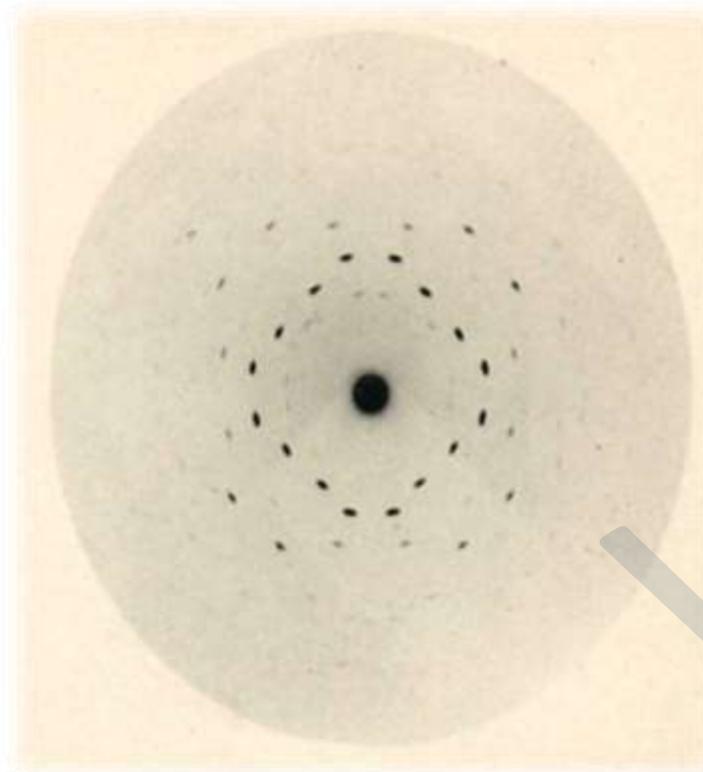


Max von Laue (1879 – 1960)
Nobelpreis für Physik: 1914
„Für seine Entdeckung der Röntgendiffraktion durch Kristalle“

1. Kristallstruktur



Apparatur von Friedrich und Knipping
(Quelle: Deutsches Museum).



erste Röntgenaufnahme von
Friedrich, Knipping und Laue
an (001) orientiertem ZnS-
Plättchen

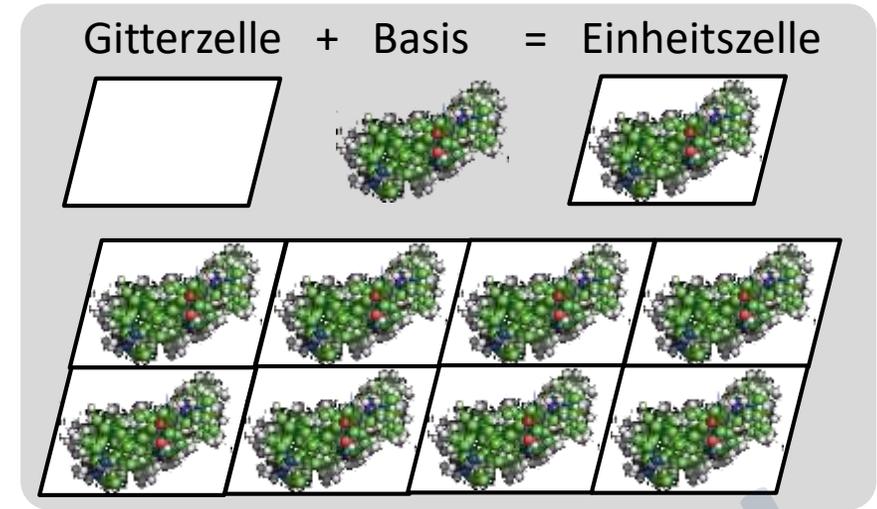
1.1 Periodische Strukturen

- **idealer Kristall:** idealer Kristall = unendliche, periodische Wiederholung von identischen Strukturelementen

- **Beschreibung von Kristall durch Angabe der**

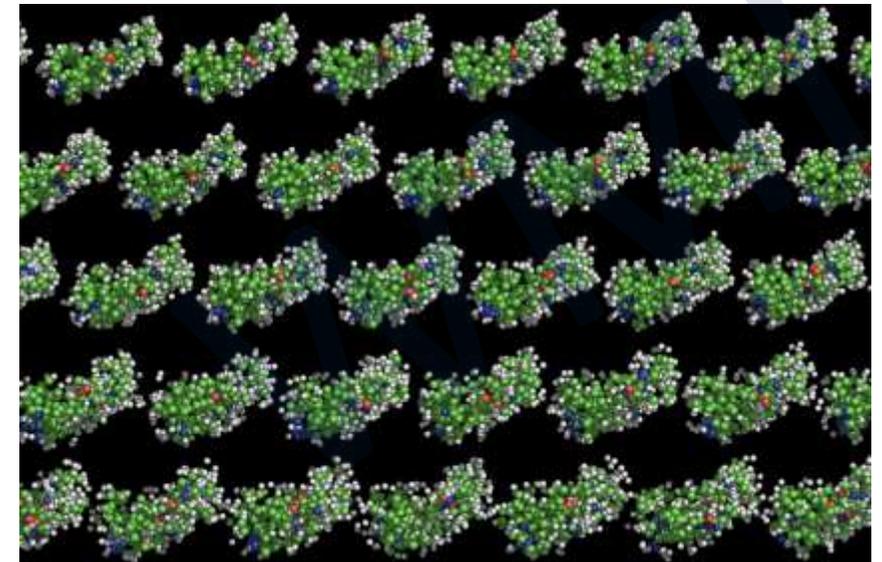
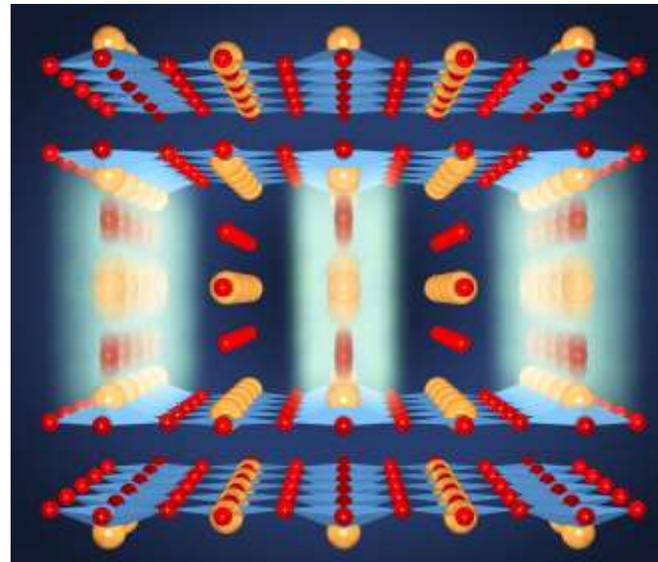
- **Struktureinheit** → **Basis**
- **Vorschrift für die Aneinanderreihung** → **Raumgitter**

Kristall = Gitter + Basis



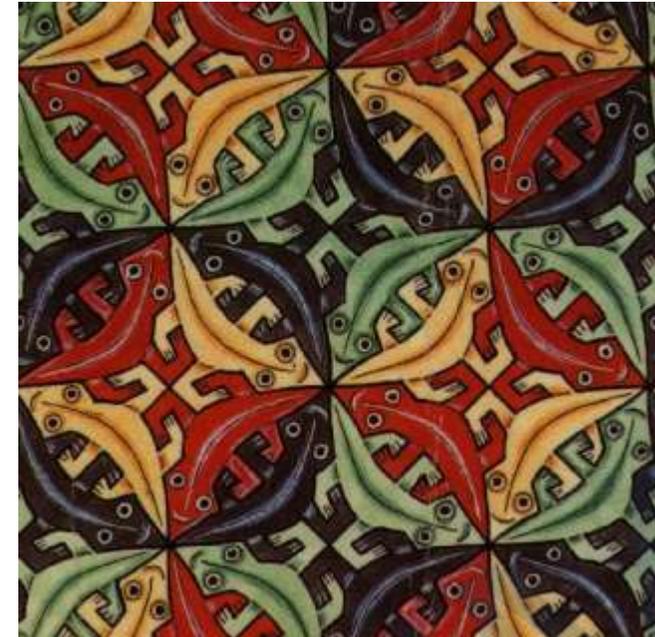
- **Basis kann sehr komplex sein**

- **Hochtemperatur-Supraleiter**
(Größenordnung von 10 Atomen)
- **Protein-Kristall**
(tausende von Atomen)
-



1.1 Periodische Strukturen

- zweidimensionale Pflasterungen



M. C. Escher

Wichtig: Symmetrie des Gitters und der Basis können sich stark unterscheiden

1.1.1 Bravais-Gitter (BG)

- **mathematische Beschreibung von Kristallgitter**
 - fundamentales Konzept des **Bravais-Gitters (BG)** (um 1850)
 - Bravais-Gitter gibt Raumgitter (Punktgitter) an, auf dem Basiseinheiten angeordnet werden
 - Bravais-Gitter beinhaltet **nur die Geometrie des Raumgitters** unabhängig von Basis (Basis kann andere Symmetrie besitzen)



Auguste Bravais

* 23. August 1811 in Annonay, Frankreich

† 30. März 1863 in Le Chesnay)

französischer Physiker und Mitbegründer der Kristallographie

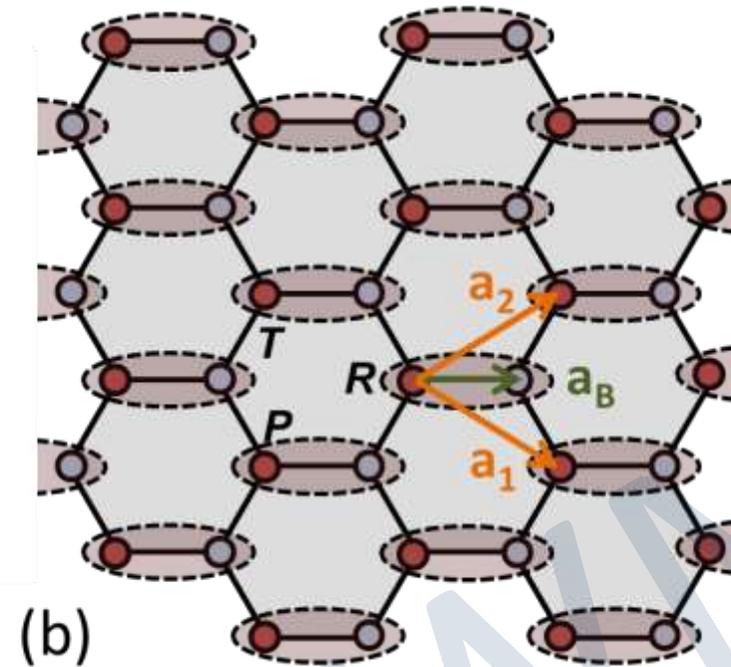
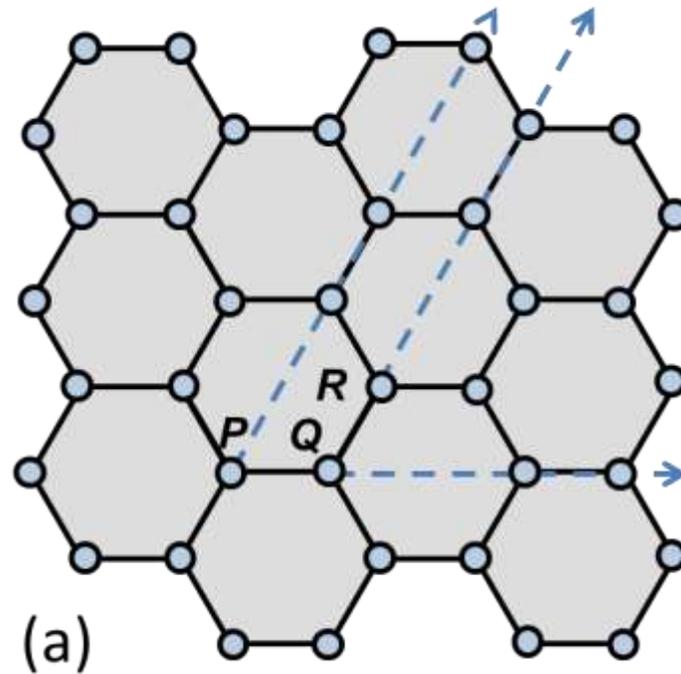
WMI

1.1.1 Bravais-Gitter (BG) - Definition

- Definition 1:

BG = unendliches Gitter von Raumpunkten mit Anordnung und Orientierung, die gleich aussieht, egal von welchem Gitterpunkt aus wir das Gitter betrachten

Beispiel Graphen:



Schnittpunkte des Bienenwabenmusters
Bilden kein Bravais-Gitter

- Ansicht von P und R aus ist identisch
- Ansicht von Q aus ist um 60° gedreht

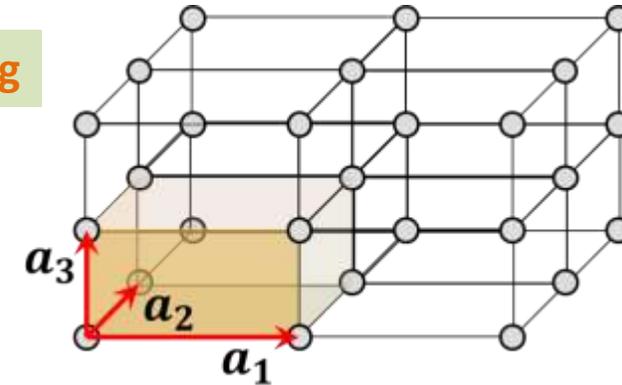
- nur die roten (oder blauen) Punkte bilden ein Bravais-Gitter
- Basis besteht aus 2 Atomen

1.1.1 Bravais-Gitter (BG) - Definition

- Definition 2:

BG besteht aus allen Punkten $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ $n_1, n_2, n_3 = \text{ganzzahlig}$

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$: primitive Gittervektoren, Länge = Gitterkonstanten



- Definition 1 und Definition 2 sind äquivalent (ohne Beweis)

- andere Formulierung von Definition 2:

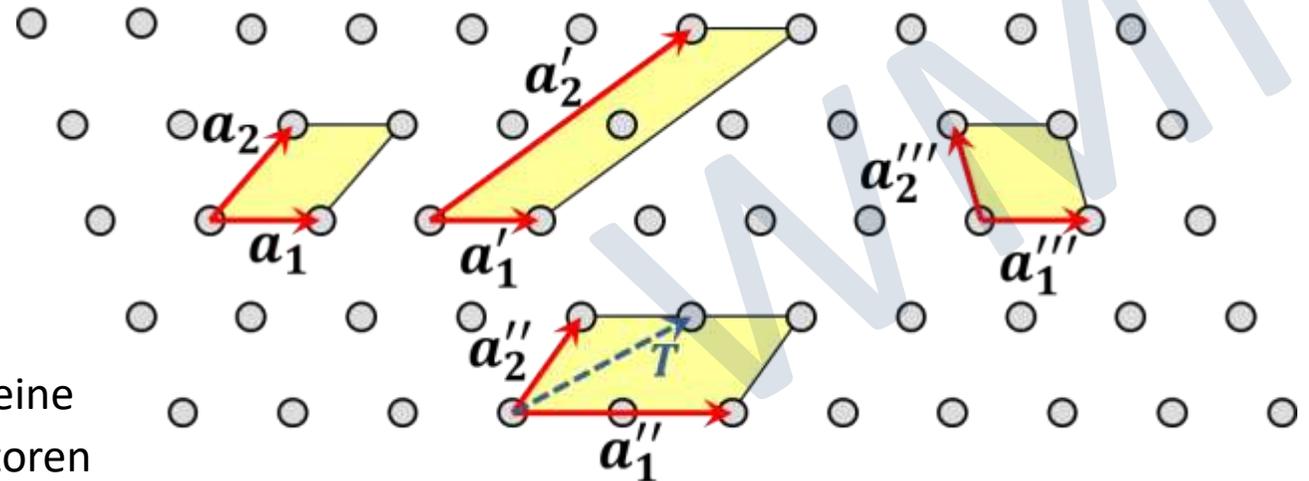
BG ist invariant gegenüber diskreten Translationen um Translationsvektoren

$$\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad n_1, n_2, n_3 = \text{ganzzahlig}$$

→ zwei Gitterpunkte sind immer durch Translationsvektor \mathbf{T} verbunden

- Nachteil von Definition 2:

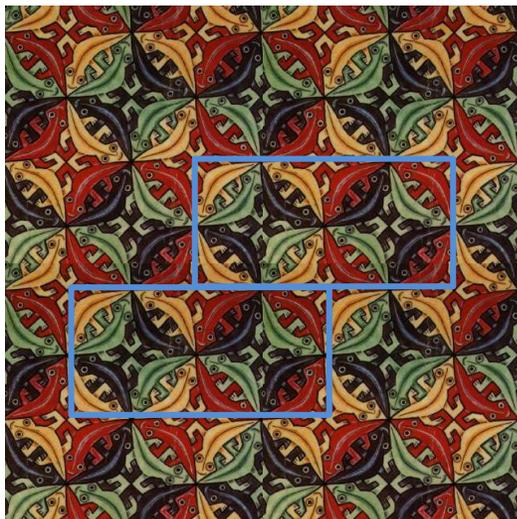
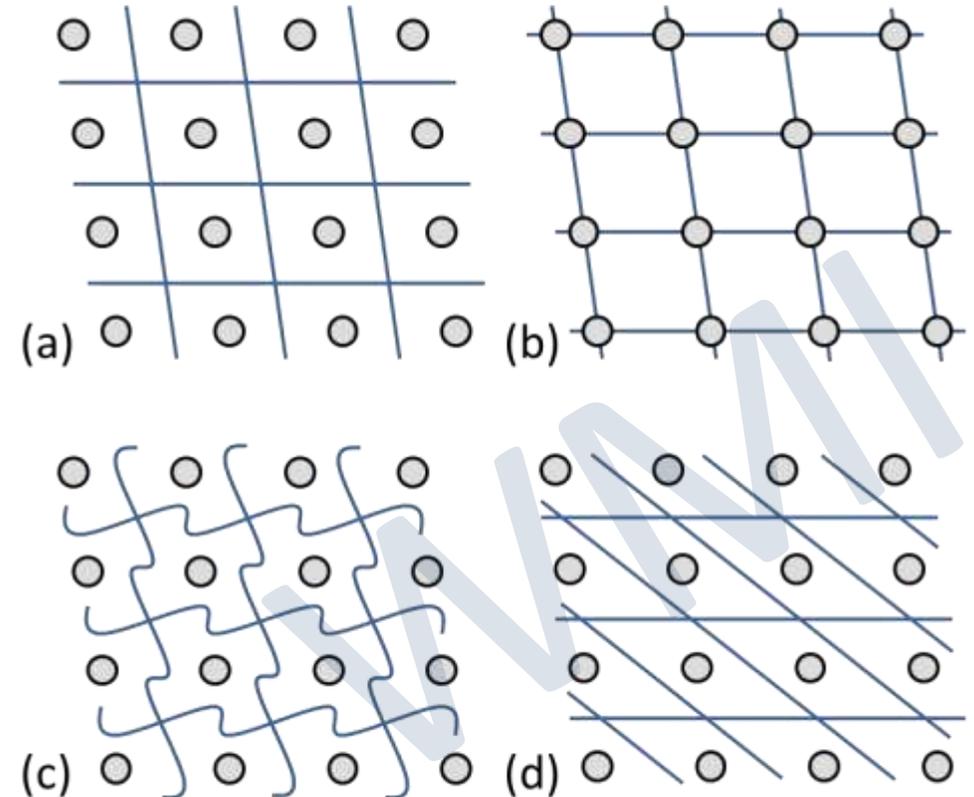
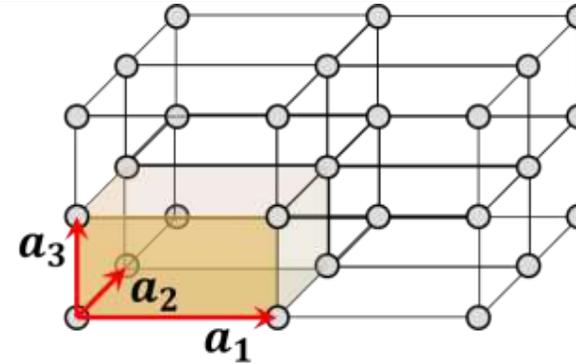
primitive Gittervektoren sind nicht eindeutig



$\mathbf{a}'_{1,2}$ und $\mathbf{a}''_{1,2}$ sind keine primitiven Gittervektoren

1.1.1 Bravais-Gitter – Primitive Gitterzelle

- **primitive Gitterzelle**
wird von primitiven Gittervektoren $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ aufgespannt
 - Parallelepiped
 - **Volumen = Spatprodukt** $V_c = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3$
- es gibt eine Vielzahl von Möglichkeiten für Wahl der primitiven Gitterzelle,
- alle primitiven Zellen besitzen das **gleiche Volumen** und genau **einen Gitterpunkt**
man beachte: manche Gitterpunkte werden mit Nachbarzellen geteilt



M. C. Escher

1.1.1 Bravais-Gitter – Wigner-Seitz-Zelle

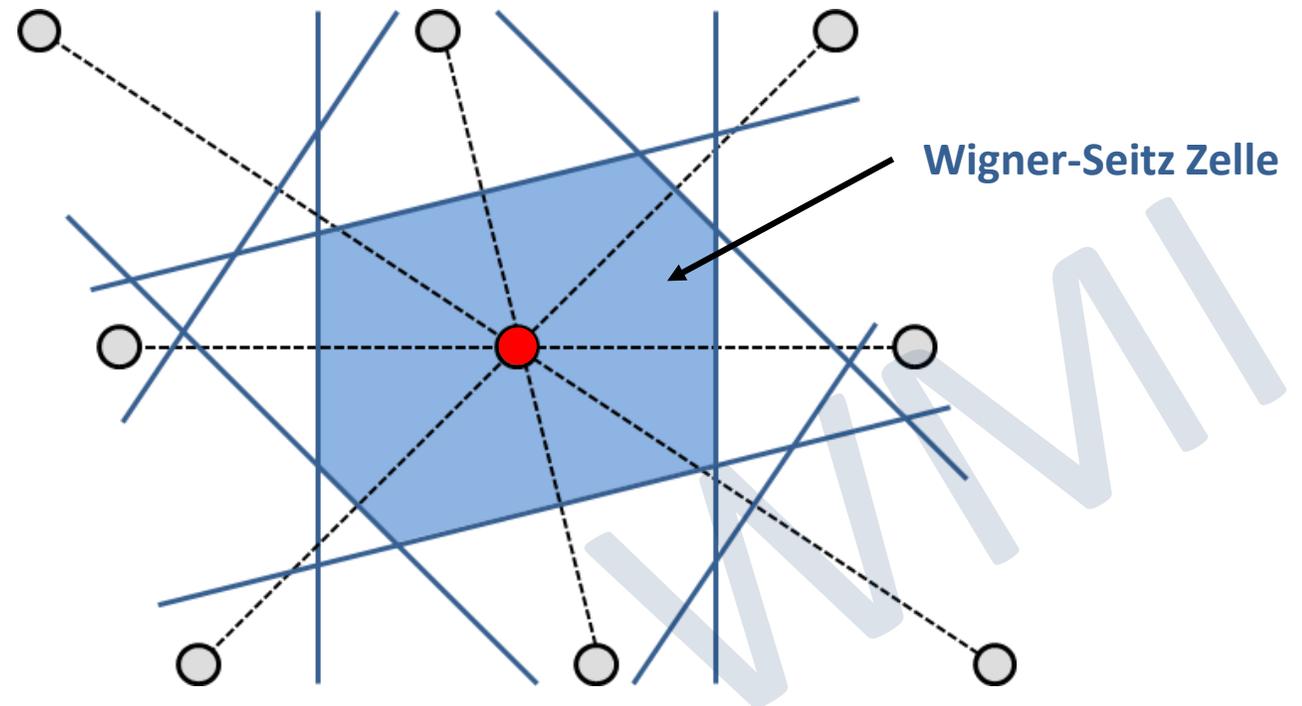
- **Wigner-Seitz-Zelle**

ausgezeichnete primitive Gitterzelle mit voller Symmetrie des Bravais-Gitters

oder Bereich um Gitterpunkt, der diesem näher ist als allen anderen Gitterpunkten

Konstruktionsvorschrift:

- ziehe Verbindungslinien von ausgewähltem Gitterpunkt zu seinen Nachbarn
- zeichne Geraden (3D: Ebenen) durch die Mittelpunkte der Verbindungslinien senkrecht zu den Verbindungslinien
- die kleinste umschlossene Fläche (3D: Volumen) ist die Wigner-Seitz-Zelle



1.1.1 Bravais-Gitter – Konventionelle Zelle

- konventionelle Zelle

nicht-primitive Zellen, mit der Raum ausgefüllt werden kann

Volumen der konventionelle Zelle $>$ Volumen der primitiven Zelle

→ Verschiebung durch Untergruppe aller Translationsvektoren

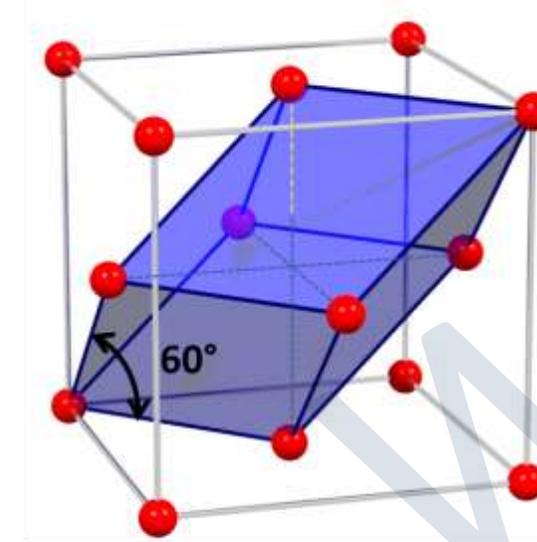
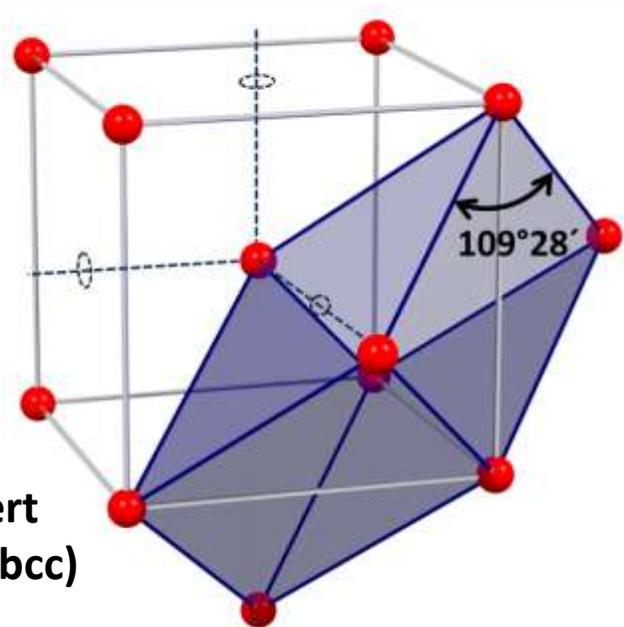
→ enthält **mehr als einen Gitterpunkt**

Wieso verwenden wir konventionelle Zellen? → **Form der konventionellen Zelle ist an Symmetrie des Gitters angepasst!**

- Beispiel: kubische Gitter

$V_{\text{konv}} = 2 V_{\text{prim}}$
2 Gitterpunkte

kubisch-raumzentriert
(body centered cubic: bcc)



$V_{\text{konv}} = 4 V_{\text{prim}}$
4 Gitterpunkte

kubisch-flächenzentriert
(face centered cubic: fcc)

1.1.2 Klassifizierung von Kristallgittern

- **Es gibt unendlich viele Kristallgitter** → Länge und Winkel zwischen primitiven Gittervektoren sind beliebig wählbar
- **Frage:** Können wir Kristallgitter in Klassen einteilen?
- **Antwort:** Ja, wir können Kristallgitter hinsichtlich ihrer **Symmetrieeigenschaften** klassifizieren

Kristallgitter ist durch alle **Symmetrieeoperationen** klassifiziert, die es in sich selbst überführen

Kristallographie

- **Einteilung der Symmetrieeoperationen**
 - Translationsgruppe:** kein ortsfester Punkt
 - Punktgruppe:** mindestens ein ortsfester Punkt

Punktgruppe und **Translationsgruppe** bilden **Raumgruppe**

z.B. Translation um $\mathbf{T} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$

z.B. Drehungen, Spiegelungen, Inversion



- **Symmetrieelemente**
 - gehören zu jeder Symmetrieeoperation
 - Menge aller Punkte, die bei Symmetrieeoperation unverändert bleibt
z.B. Drehachse, Spiegelebene, ...

1.1.2 Klassifizierung von Kristallgittern

- **Symmetrieoperationen der Punktgruppe** (3D: es gibt genau 10 Operationen der Punktgruppe)

a) Drehung um Achse:

- nur 1-, 2-, 3-, 4-, 6-zählige Drehachse möglich
- alle andere inkompatibel mit Translationssymmetrie
- **Symbole: 1, 2, 3, 4, 6**

b) Inversion:

- Koordinatentransformation:
 $x' = -x, y' = -y, z' = -z$
- \equiv Punktspiegelung an einem Inversionszentrum
- **Symbole: $\bar{1}$** (entspricht $\bar{1}$)

c) Spiegelung an einer Ebene:

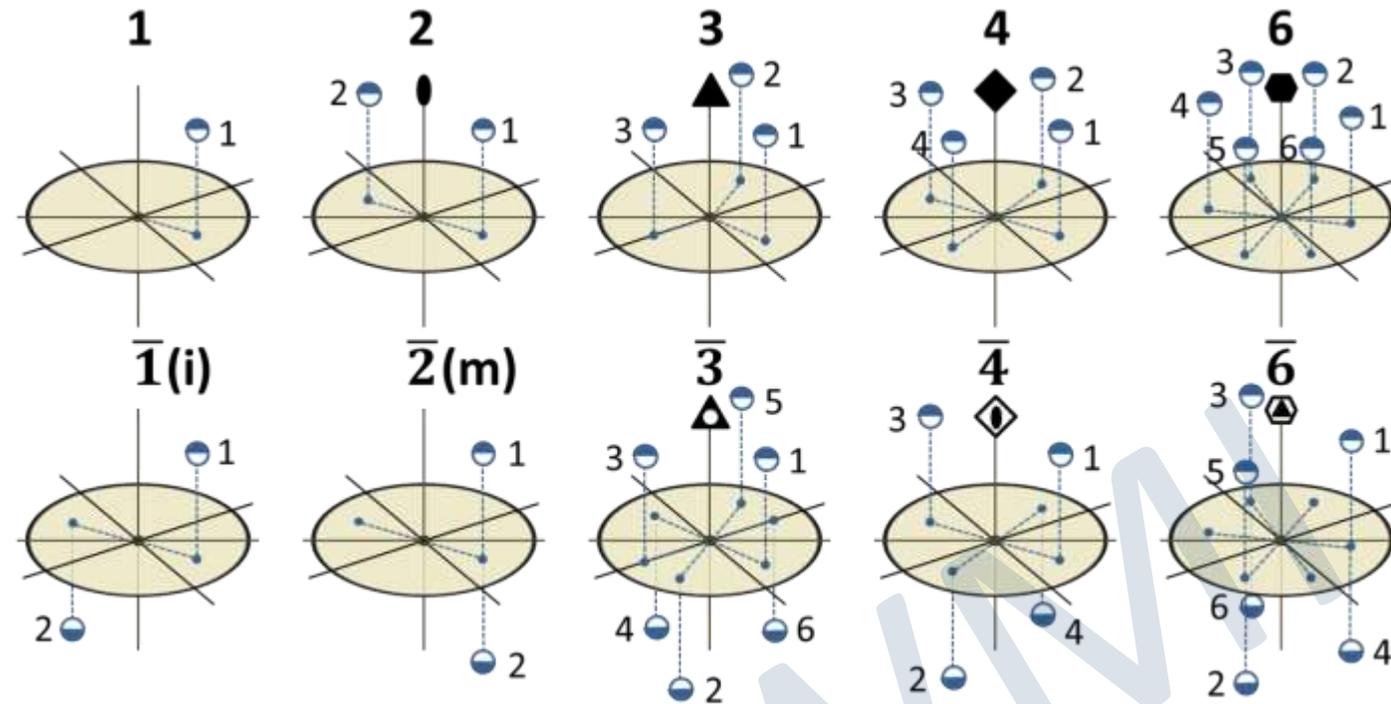
- Koordinatentransformation:
 $x' = -x, y' = y, z' = z$
- entspricht Spiegelung an Ebene (z.B. yz-Ebene)
- **Symbole: $\bar{2}$** (entspricht $\bar{2}$)

d) Drehinversion (= Inversion und Drehung um Achse):

- **Symbole: $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$**
- man beachte: $\bar{1} \equiv \bar{1}$, $\bar{2} \equiv \bar{2}$

e) Drehspiegelung (= Drehung plus Spiegelung an Ebene senkrecht zu Drehachse):

- Drehung um 2π plus Spiegelung \equiv einfache Spiegelung
- Drehung um π plus Spiegelung \equiv Inversion
- Drehung um $2\pi/3$ plus Spiegelung \equiv 3-zählige Drehachse, auf der Spiegelebene senkrecht steht



1.1.2 Klassifizierung von Kristallgittern

- **Symmetrioperationen der Translationsgruppe** (→ Vielzahl neuer Symmetriegruppen)

Punktgruppe + Translationsgruppe: Raumgruppe

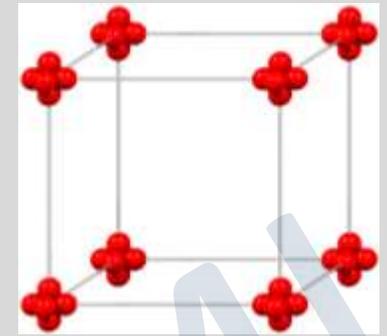
- in einem Kristall liegen meist mehrere Symmetrioperationen gleichzeitig vor
- **Gruppentheorie:** Menge aller möglichen Symmetrioperationen bildet Gruppe

- **Ergebnis der gruppentheoretischen Analyse** (Beweis sehr schwierig)

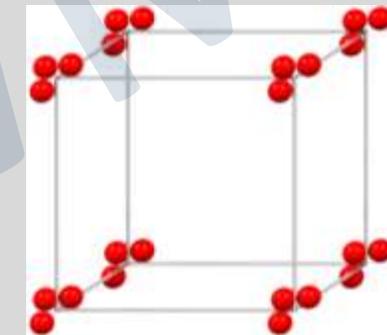
3D	Bravais-Gitter (kugelsymmetrische Basis)	Kristallstrukturen (Basis mit beliebiger Symmetrie)
Punktgruppen	7 Kristallsysteme	32 Kristallklassen
Raumgruppen	14 Bravais-Gitter	230 Raumgruppen

2D	Bravais-Gitter (kugelsymmetrische Basis)	Kristallstrukturen (Basis mit beliebiger Symmetrie)
Punktgruppen	4 Kristallsysteme	10 Kristallklassen
Raumgruppen	5 Bravais-Gitter	17 Raumgruppen

Basis hat **volle Symmetrie des Gitters:**
vier 3-zählige Drehachsen plus weiter



Basis hat **nicht volle Symmetrie des Gitters:**
nur vier 3-zählige Drehachsen



1.1.2 Klassifizierung von Kristallgittern

- die 7 Kristallsysteme (3D, Punktgruppe, kugelsym. Basis)

Kristallsystem	Anzahl der Gitter	Achsen und Winkel	Achsen-zähligkeit
kubisch	3	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3 (vier)
tetragonal	2	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	4
rhombisch	4	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2 (zwei)
hexagonal	1	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	6
trigonal (rhomboedrische Aufstellung)	1	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	3
monoklin	2	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	2
triklin	1	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	1

- die 32 Kristallklassen (3D, Punktgruppe, bel. Basis)

#	Kristallsystem	Hermann und Mauguin		Schoenflies
		Kurzsymbol	Langsymbol	
1	triklin	$\bar{1}$	$\bar{1}$	C_1
2		$\bar{1}$	$\bar{1}$	C_i
3	monoklin	2	121	C_2
4		m	1m1	C_2v
5		2/m	1 2/m 1	C_2h
6	orthorhombisch	222	222	D_2
7		mm2	mm2	C_{2v}
8		mmm	2/m 2/m 2/m	D_{2h}
9	tetragonal	$\bar{4}$	411	C_4
10		$\bar{4}$	$\bar{4}$	S_4
11		4/m	4/m	C_{4h}
12		422	422	D_4
13		$\bar{4}mm$	$\bar{4}mm$	C_{4v}
14		$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	D_{2d}
15		4/mmm	4/m 2/m 2/m	D_{4h}
16	trigonal	$\bar{3}$	$\bar{3}$	C_3
17		$\bar{3}$	$\bar{3}$	C_{3i}
18		32	32	D_3
19		$\bar{3}m$	$\bar{3}m$	C_{3v}
20	hexagonal	$\bar{3}m$	$\bar{3} 2/m$	D_{3d}
21		$\bar{6}$	$\bar{6}$	C_6
22		$\bar{6}$	$\bar{6}$	C_{3h}
23	hexagonal	6/m	6/m	C_{6h}
24		622	622	D_6
25		$\bar{6}mm$	$\bar{6}mm$	C_6
26		$\bar{6}2m$	$\bar{6}2m$	D_{3h}
27		6/mmm	6/m 2/m 2/m	D_{6h}
28		kubisch	23	23
29	$m\bar{3}$		$m\bar{3}$	T_h
30	$\bar{4}32$		$\bar{4}32$	O
31	$\bar{4}3m$		$\bar{4}3m$	T_d
32	$m\bar{3}m$		4/m $\bar{3} 2/m$	O_h

1.1.2 Klassifizierung von Kristallgittern

- die 7 Kristallsysteme (3D, Punktgruppe, kugelsym. Basis)

Kristallsystem	Anzahl der Gitter	Achsen und Winkel	Achsen-zähligkeit
kubisch	3	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3 (vier)
tetragonal	2	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	4
rhombisch	4	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3
hexagonal	1	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 120^\circ, \gamma = 90^\circ$	6
trigonal (rhomboedrische Aufstellung)	1	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	3
monoklin	2	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	2
triklin	1	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	1

n/m:
n-zählige Drehachse mit
Spiegelebene parallel zur
Hauptdrehachse

- die 32 Kristallklassen (3D, Punktgruppe, bel. Basis)

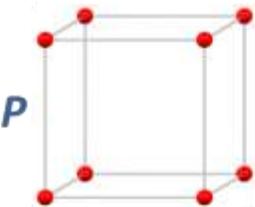
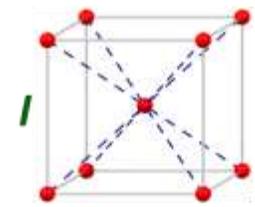
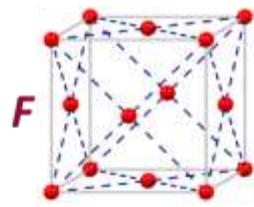
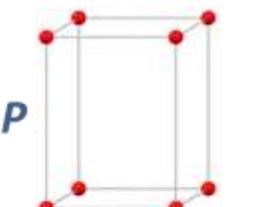
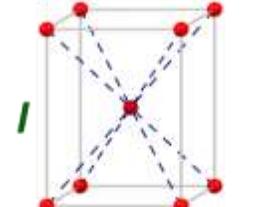
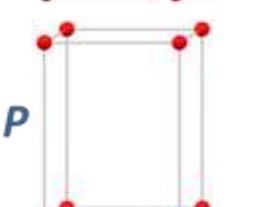
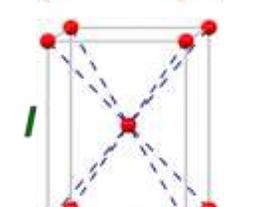
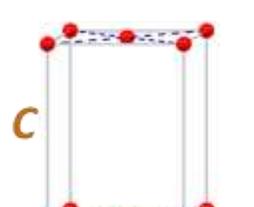
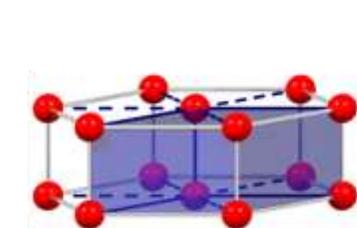
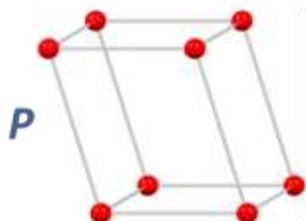
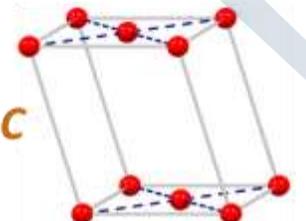
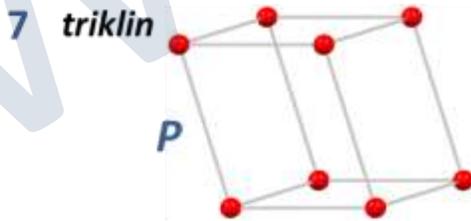
#	Kristallsystem	Hermann und Mauguin		Schoenflies
		Kurzsymbol	Langsymbol	
1	triklin	$\bar{1}$	$\bar{1}$	C_1
2		$\bar{1}$	$\bar{1}$	C_i
3	monoklin	2	121	C_2
4		m	1m1	C_2
5		2/m	1 2/m 1	C_2
6	orthorhombisch	222	222	D_2
7		mm2	mm2	C_{2v}
8		mmm	2/m 2/m 2/m	D_{2h}
9	tetragonal	$\bar{4}$	411	C_4
10		$\bar{4}$	$\bar{4}$	S_4
11		4/m	4/m	C_{4h}
12		422	422	D_4
13		$\bar{4}mm$	$\bar{4}mm$	C_{4v}
14		$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	D_{2d}
15	4/mmm	4/m 2/m 2/m	D_{4h}	
16	trigonal	$\bar{3}$	$\bar{3}$	C_3
17		$\bar{3}$	$\bar{3}$	C_{3i}
18		32	32	D_3
19		$\bar{3}m$	$\bar{3}m$	C_{3v}
20	$\bar{3}m$	$\bar{3} 2/m$	D_{3d}	
21	hexagonal	$\bar{6}$	$\bar{6}$	C_6
22		$\bar{6}$	$\bar{6}$	C_{3h}
23		6/m	6/m	C_{6h}
24		622	622	D_6
25		$\bar{6}mm$	$\bar{6}mm$	C_6
26		$\bar{6}2m$	$\bar{6}2m$	D_{3h}
27		6/mmm	6/m 2/m 2/m	D_{6h}
28	kubisch	$\bar{2}3$	$\bar{2}3$	T
29		$\bar{m}\bar{3}$	$\bar{m}\bar{3}$	T_h
30		$\bar{4}32$	$\bar{4}32$	O
31		$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	T_d
32		$\bar{m}\bar{3}m$	4/m $\bar{3}$ 2/m	O_h

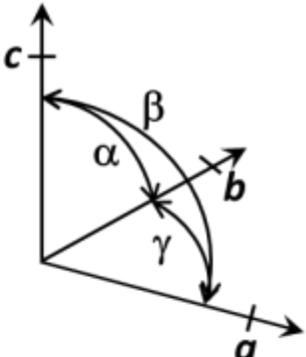
1.1.2 Klassifizierung von Kristallgittern

- die 14 Bravais-Gitter (1845)
(3D, Raumgruppe, kugelsym. Basis))

zentrierte Gitter:

- enthalten im Inneren der Einheitszelle zusätzliche Gitterpunkte
→ keine primitive Gitter
- Verwendung sinnvoll, weil in vielen Fällen die primitiven Elementarzellen nicht die Symmetrie der Punktgruppe zum Ausdruck bringen
- Nomenklatur:
 - einseitig flächen- oder **basiszentriert: A, B, C**
 - allseitig **flächenzentriert: F**
 - **innenzentriert: I**

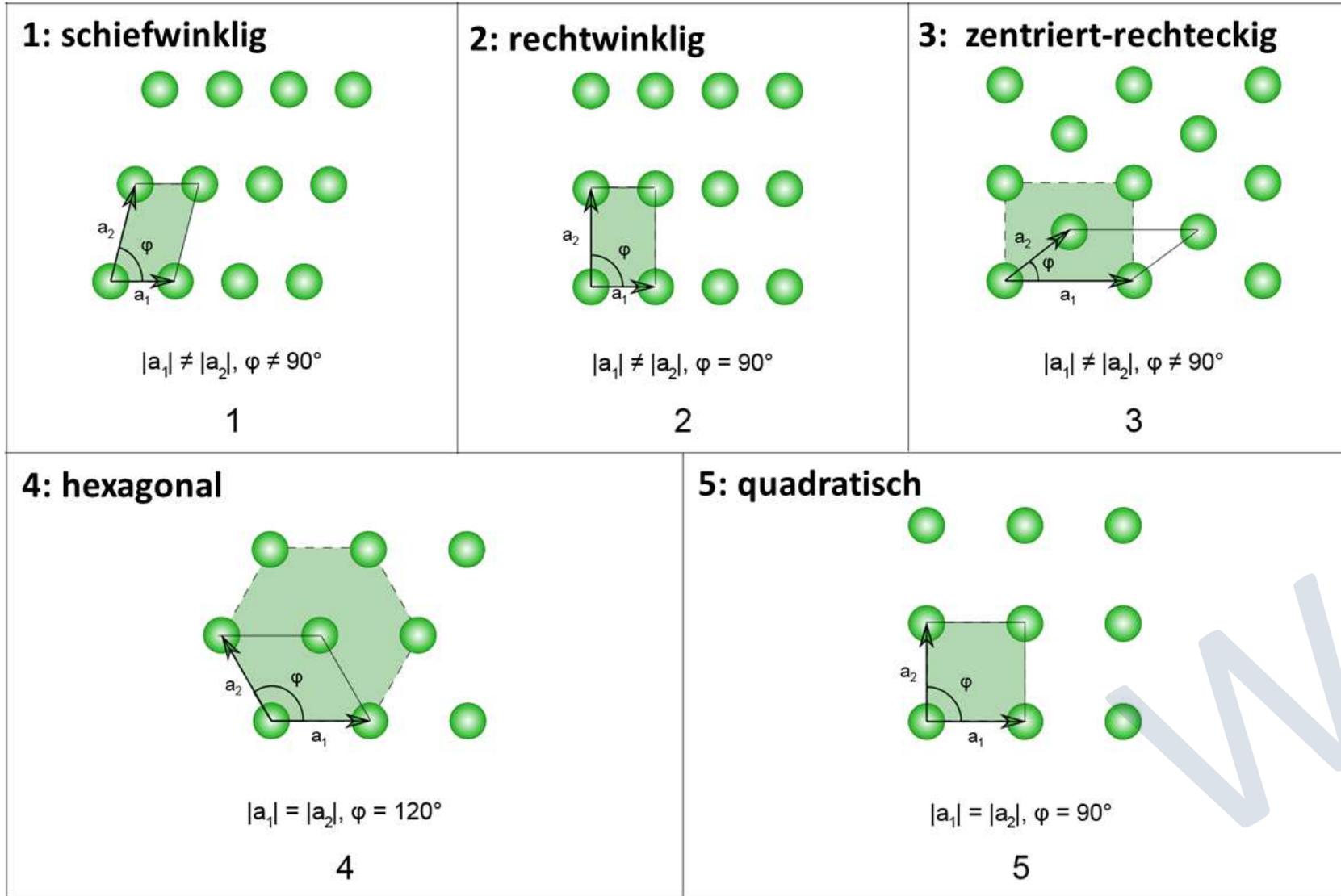
Kristallsystem	zugehörige Bravais-Gitter		
1 kubisch			
2 tetragonal			
3 rhombisch			
4 hexagonal		5 trigonal	
6 monoklin			7 triklin
			



4 Arten von Einheitszellen:
P = primitiv
I = raumzentriert
F = flächenzentriert
C = basiszentriert

1.1.2 Klassifizierung von Kristallgittern

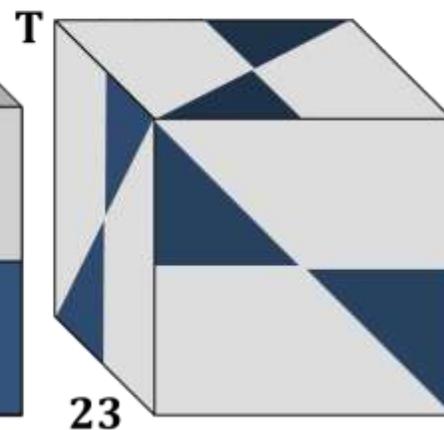
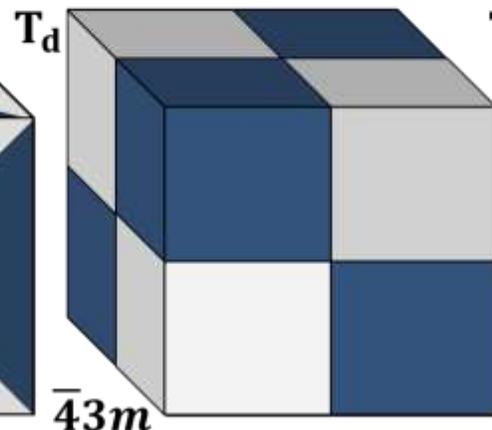
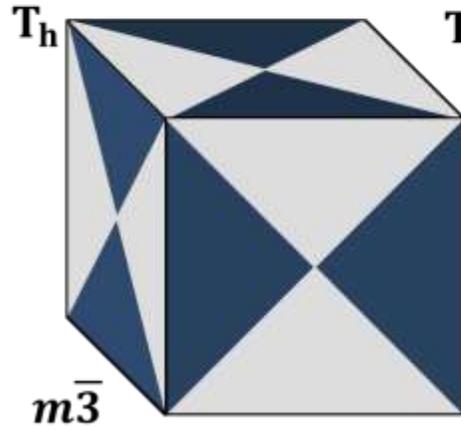
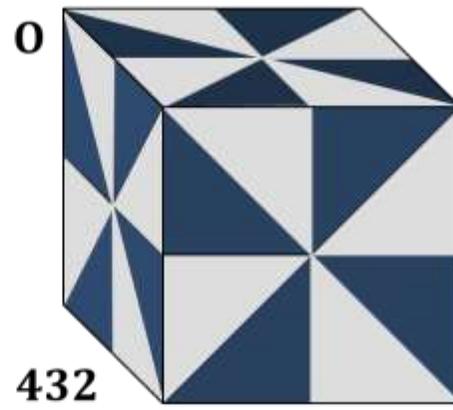
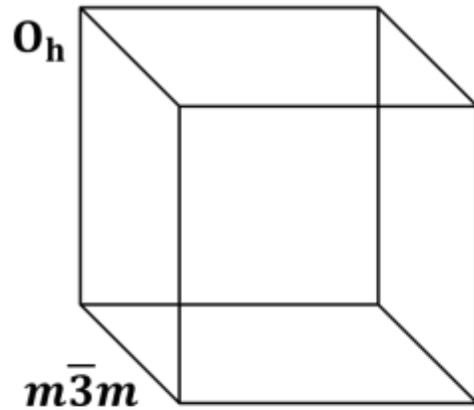
- die 5 Bravais-Gitter im zweidimensionalen Raum (Raumgruppe, kugelsymmetrische Basis)



1.1.2 Klassifizierung von Kristallgittern

- die 32 Kristallklassen (3D, Punktgruppe, kugelsym. Basis)

Beispiel: die 5 kubischen Punktgruppen



#	Kristallsystem	Hermann und Mauguin	
		Kurzsymbol	Langsymbol
28	kubisch	23	23
29		$m\bar{3}$	$m\bar{3}$
30		432	432
31		$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$
32		$m\bar{3}m$	$4/m\bar{3}2/m$



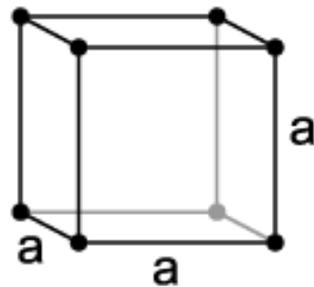
1.1.2 Die 7 Kristallsysteme

Kubisches Kristallsystem

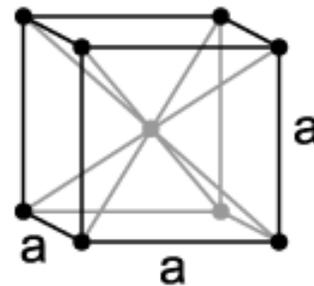
- höchste Symmetrie
- drei gleichlange Achsen im 90° -Winkel

$$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

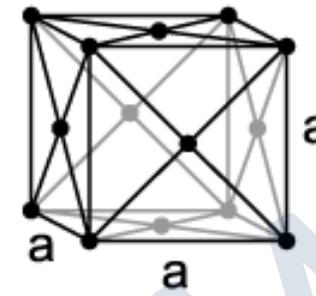
Kubisch-Primitives Gitter (sc)



Kubisch-Raumzentriertes Gitter (bcc)



Kubisch-Flächenzentriertes Gitter (fcc)



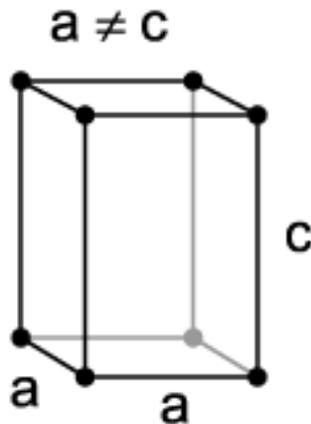
1.1.2 Die 7 Kristallsysteme

Tetragonales Kristallsystem

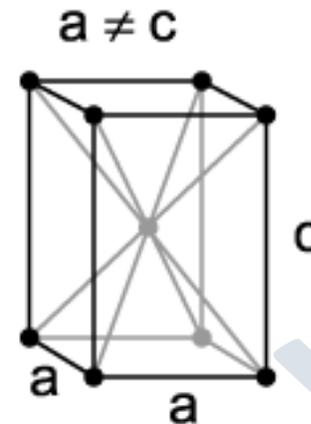
- zwei gleichlange Achsen, drei 90°-Winkel

$$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Tetragonal-Primitives Gitter



Tetragonal-Raumzentriertes Gitter

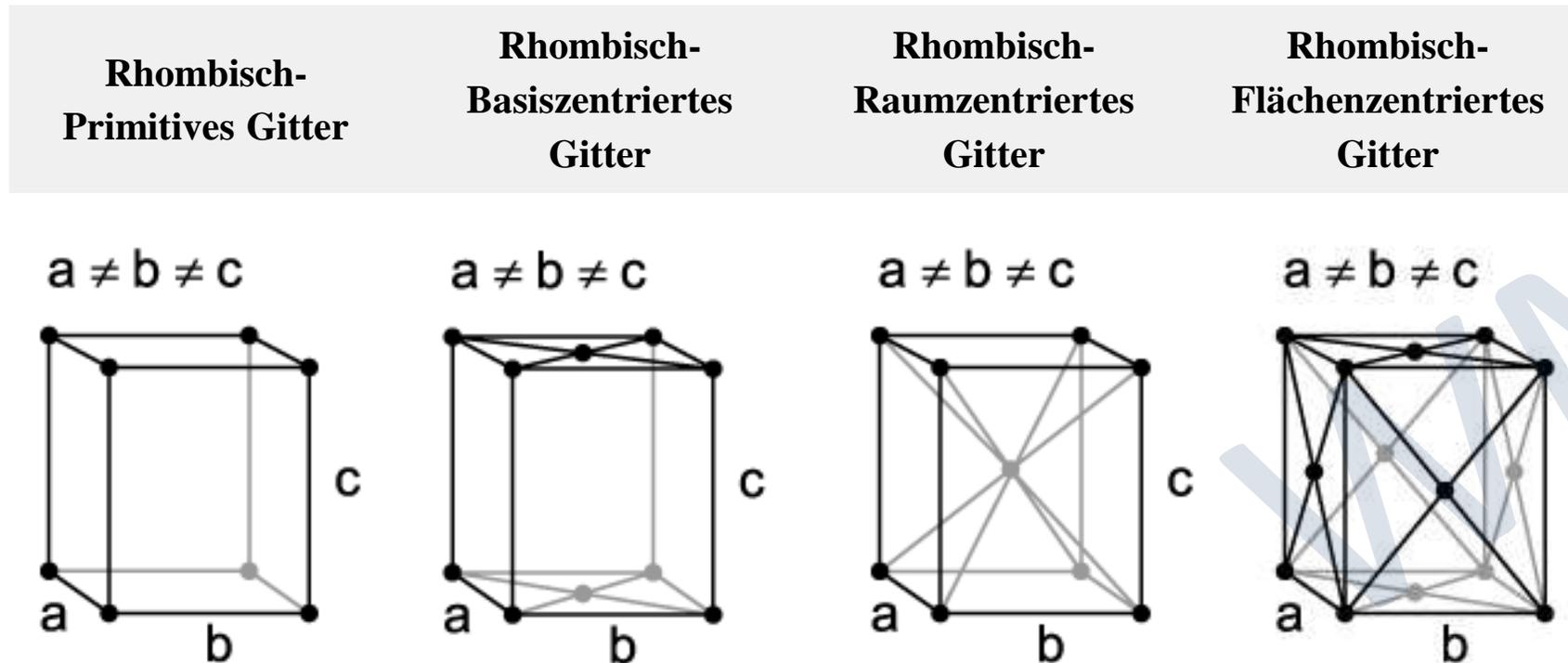


1.1.2 Die 7 Kristallsysteme

Rhombisches Kristallsystem

- auch orthorhombisches Kristallsystem
- drei 90° -Winkel, keine gleichlangen Achsen

$$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



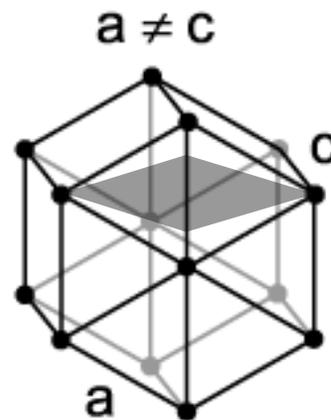
1.1.2 Die 7 Kristallsysteme

Hexagonales Kristallsystem

- zwei gleichlange Achsen in einer Ebene im 120° -Winkel, die dritte Achse senkrecht dazu:

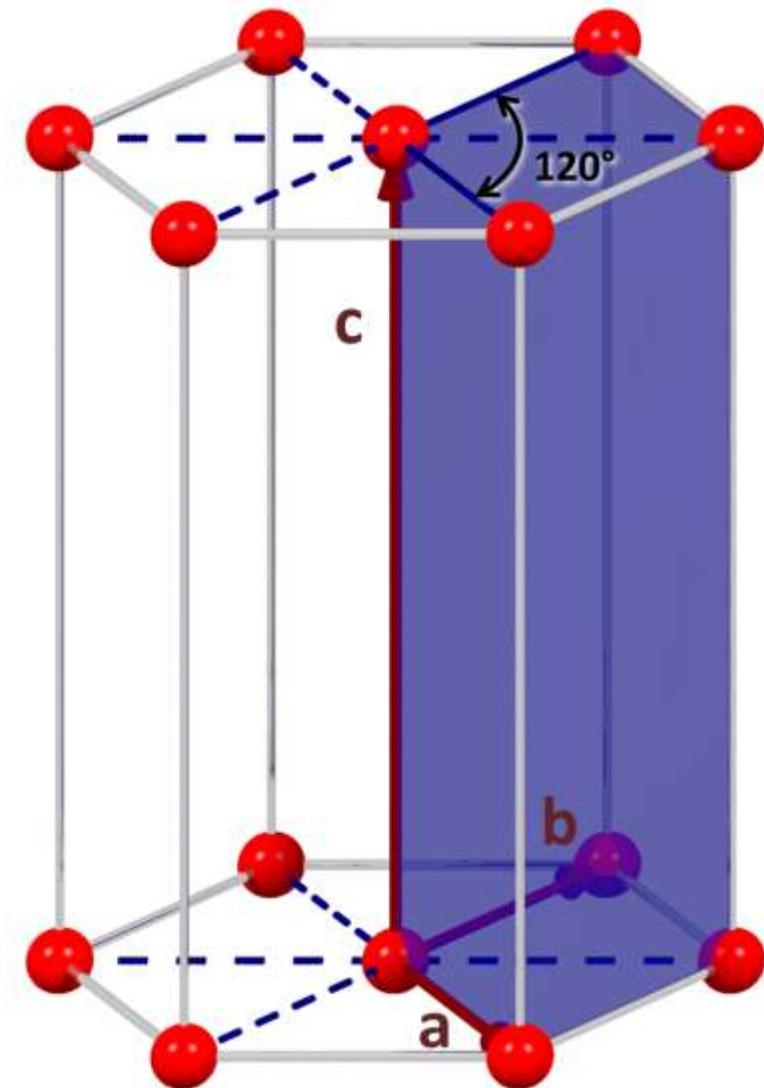
$$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

Hexagonal-Primitives Gitter



WMI

1.1.2 Die 7 Kristallsysteme



Das hexagonale Kristallgitter:

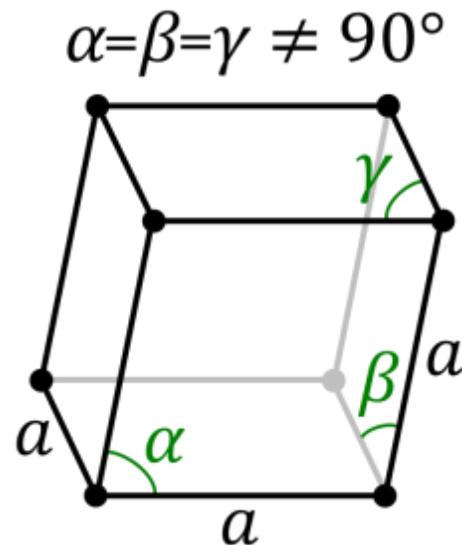
Die Verbindungslinien benachbarter Gitterpunkte bilden einen Körper mit sechseckiger Grundfläche und Deckfläche. Die primitive Gitterzelle ist blau markiert.



1.1.2 Die 7 Kristallsysteme

Trigonales oder rhomboedrisches Kristallsystem

- Dehnung von Würfel entlang von Raumdiagonalen, nur noch eine 3-zählige Drehachse (im Gegensatz zu kubischem System)
- eng verwandt mit hexagonalem System (Unterscheidung nur durch die auftretenden Symmetrieelemente)
- zwei mögliche Koordinatenaufstellungen:
 - **rhomboedrische Aufstellung:** $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
 - **hexagonale Aufstellung:** $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- nicht mit dem orthorhombischen Kristallsystem zu verwechseln



Rhomboedrisches Gitter

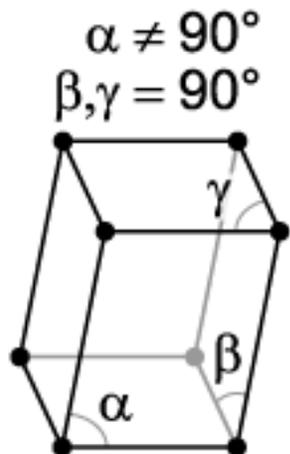
1.1.2 Die 7 Kristallsysteme

Monoklines Kristallsystem

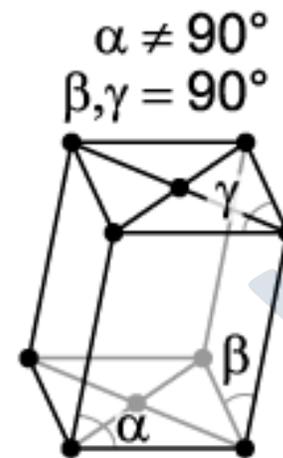
- zwei 90° -Winkel, keine gleichlangen Achsen

$$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta = \gamma = 90^\circ$$

Monoklin-Primitives Gitter



Monoklin-Basiszentriertes Gitter

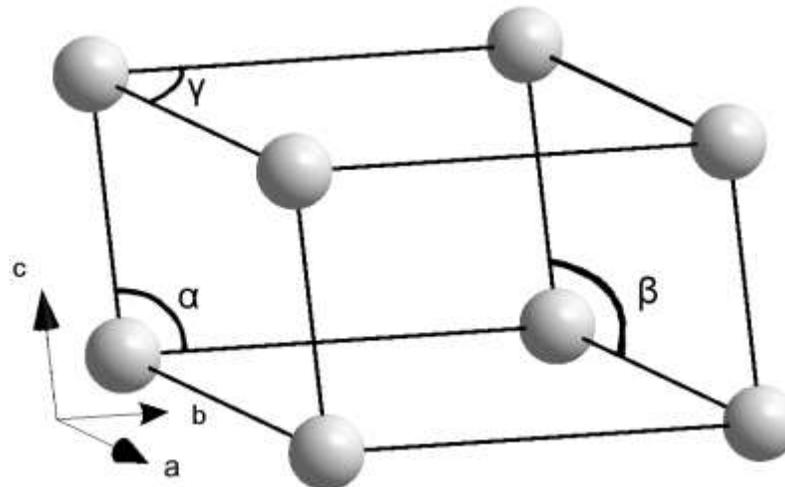


Triklines Kristallsystem

- geringste Symmetrie aller Gitter
- keine gleichen Winkel, keine gleichlangen Achsen

$$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$$

Triklin-Primitives Gitter



WMI

1.1.3 Richtungen und Ebenen in Kristallen

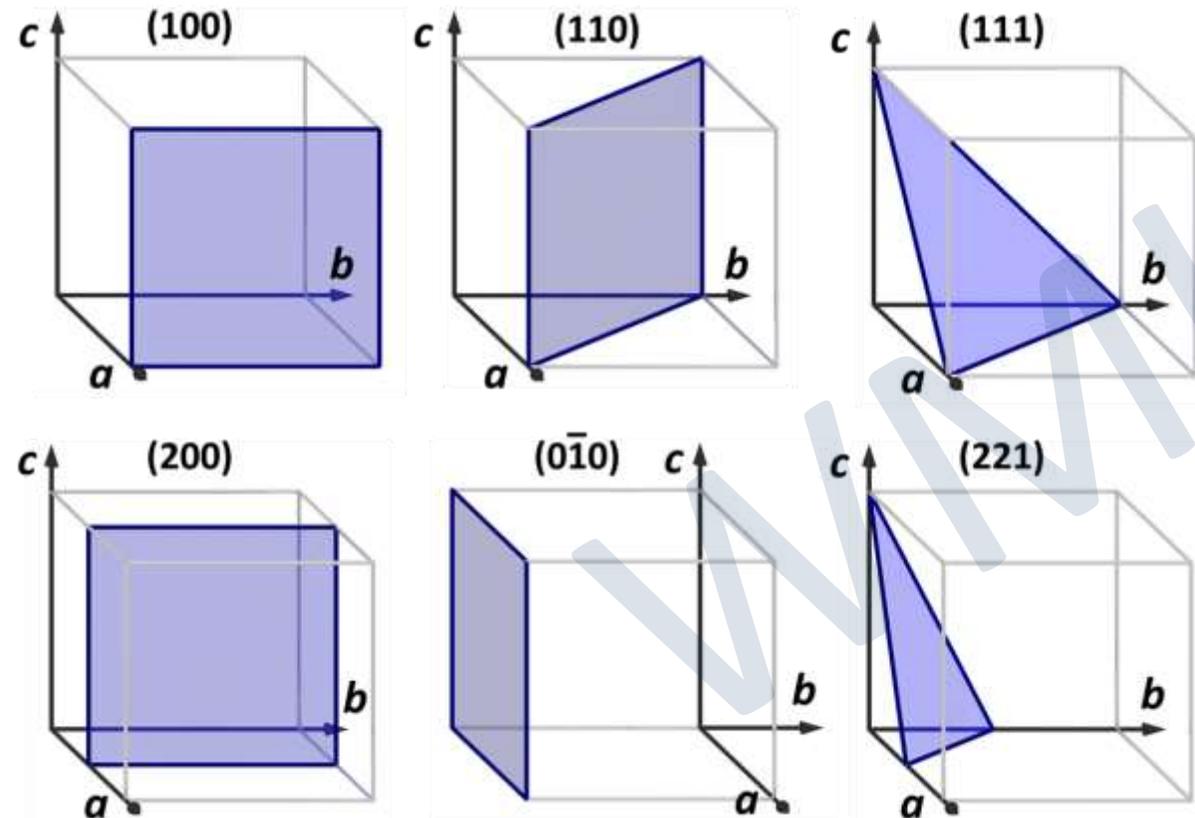
- **Netzebenen**

Netzebenen = Kristallebenen, die mit Gitterpunkten besetzt sind

- Angabe der Orientierung von Netzebenen durch ihre Schnittpunkte mit den Kristallachsen
 - jede **Ebene ist durch Zahlentripel** eindeutig festgelegt
- Nachteil: äquivalente Ebenen unterscheiden sich nur um ganzzahligen Faktor
 - Bezeichnung von parallelen Ebenen mit gleichem Zahlentripel → **Millersche Indizes** (hkl)

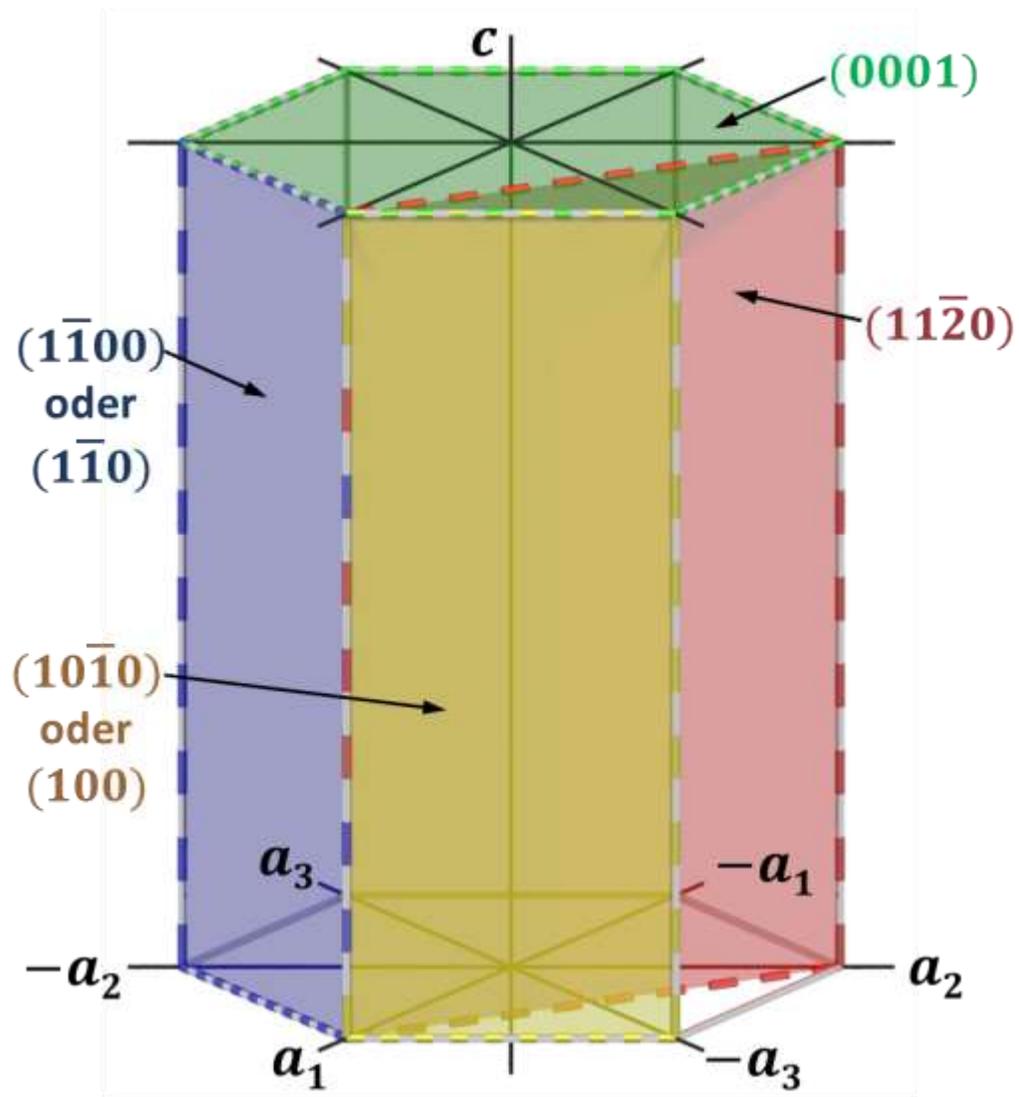
- **Bestimmung der Millerschen Indizes**

- Bestimme die Schnittpunkte der Ebene mit den Kristallachsen in Einheiten der Gitterkonstanten a , b und c
- Bilde den Kehrwert dieser Zahlen und reduziere diese Brüche zu drei ganzen Zahlen (und zwar den kleinstmöglichen) mit dem gleichen Verhältnis.



1.1.3 Richtungen und Ebenen in Kristallen

- Netzebenen und Millersche Indizes in hexagonalem Kristallgitter



Verwendung von 3 Gittervektoren a_1, a_2, a_3 in Basisebene

Indizierung der Netzebenen in einem hexagonalen Gitter mit 4 Indizes $(hki\ell)$

nur 3 Indizes sind unabhängig voneinander:
 $i = -(h + k)$

WMI

1.1.3 Richtungen und Ebenen in Kristallen

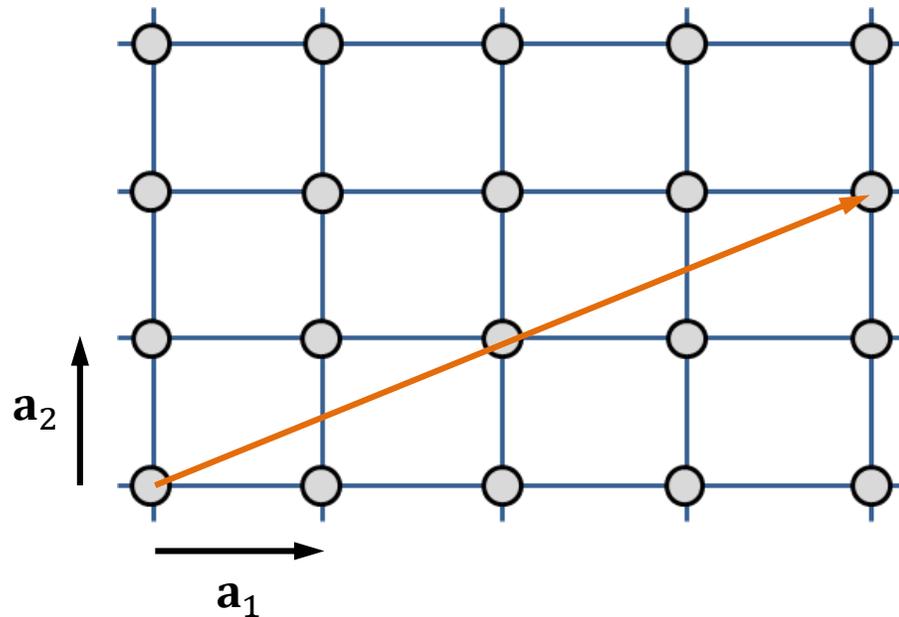
- Richtungen in Kristallen

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad n_1, n_2, n_3 = \text{ganzzahlig}$$

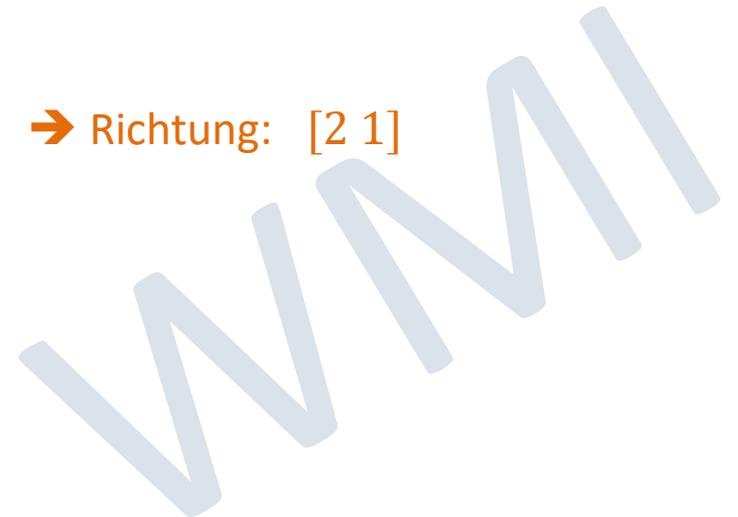
Angabe von Kristallrichtung durch kleinstes Zahlentripel $[u \ v \ w]$ mit gleichem Verhältnis wie n_1, n_2, n_3

Beispiel: $\mathbf{R} = 8\mathbf{a}_1 + 4\mathbf{a}_2 + 2\mathbf{a}_3 \rightarrow$ Richtung angegeben durch Zahlentripel $[421]$

Beispiel (2D):



$$\mathbf{R} = 4\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2 \rightarrow \text{Richtung: } [2 \ 1]$$



- **Kristall:** - unendliche Wiederholung von identischen Strukturelementen

Kristall = Gitter + Basis

(Basis kann sehr komplex sein)

- **Kristallgitter:** - besteht aus allen Punkten ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ = elementare Gittervektoren)

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad n_1, n_2, n_3 \text{ ganzzahlig}$$

- ist invariant gegenüber diskreten Translationen

$$\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad n_1, n_2, n_3 \text{ ganzzahlig}$$

- **Gitterzellen:**
 - **primitive Gitterzelle:** $V_{\text{prim}} = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3$, enthält **genau einen Gitterpunkt**
 - **konventionelle Zelle:** $V_{\text{konv}} > V_{\text{prim}}$, enthält **mehrere Gitterpunkte**
 - **Wigner-Seitz-Zelle:** primitive Zelle mit voller Gittersymmetrie

- **Klassifizierung von Kristallgittern durch ihre Symmetrieeigenschaften:**

benutzen von Symmetrieoperationen

(i) **Translationsgruppe** (kein ortsfester Punkt)

(ii) **Punktgruppe** (mindestens ein ortsfester Punkt)

→ z.B. *Drehung, Inversion, Spiegelung, Drehinversion, Drehspiegelung*

Punktgruppe + Translationsgruppe: Raumgruppe

- die Kristallsymmetrie ist meist mit mehreren Symmetrieoperationen kompatibel
- **Gruppentheorie:** Menge aller möglichen Symmetrieoperationen bildet Gruppe

• *Ergebnis der gruppentheoretischen Analyse:*

3D	Bravais-Gitter (kugelsymmetrische Basis)	Kristallstrukturen (Basis mit beliebiger Symmetrie)
Punktgruppen	7 Kristallsysteme	32 Kristallklassen
Raumgruppen	14 Bravais-Gitter	230 Raumgruppen

2D	Bravais-Gitter (kugelsymmetrische Basis)	Kristallstrukturen (Basis mit beliebiger Symmetrie)
Punktgruppen	4 Kristallsysteme	10 Kristallklassen
Raumgruppen	5 Bravais-Gitter	17 Raumgruppen

dreidimensionaler Raum,
kugelsymmetrische Basis

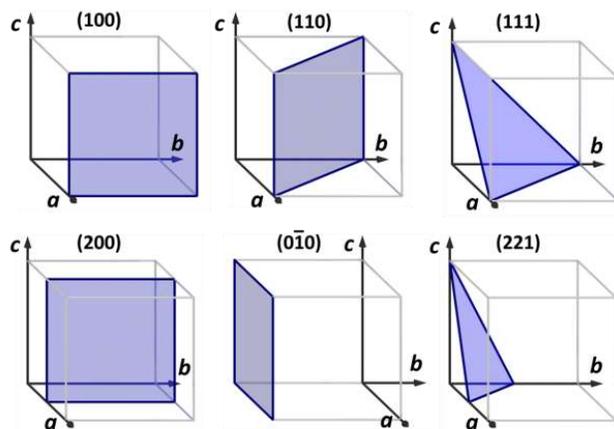
7 Kristallsysteme:

→ *kubisch, tetragonal, rhombisch, hexagonal, trigonal, monoklin, triklin*

+ **7 zentrierte Gitter**

→ **14 Bravais-Gitter**

• *Richtungen und Ebenen*



Millersche Indizes (hkl)

- Bestimme die Schnittpunkte der Ebene mit den Kristallachsen in Einheiten der Gitterkonstanten a , b und c .
- Bilde den Kehrwert dieser Zahlen und reduziere diese Brüche zu drei ganzen Zahlen (und zwar den kleinstmöglichen) mit dem gleichen Verhältnis.

Richtungen $[u v w]$

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

Richtungsangabe durch kleinstmögliches Zahlentripel $[uvw]$ mit gleichem Verhältnis wie n_1, n_2, n_3