

VORLESUNG MATERIALWISSENSCHAFTEN

138.053

Ernst Bauer
Christoph Eisenmenger-Sittner
Josef Fidler

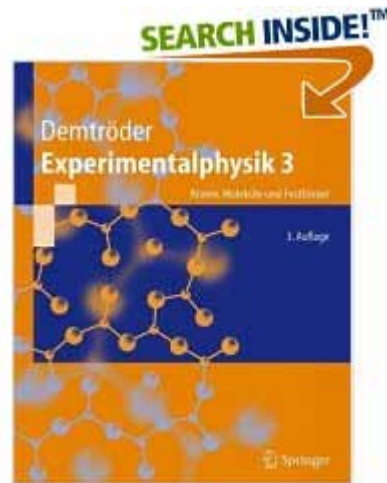
Institut für Festkörperphysik, TU Wien

SS 2010

Literaturhinweis

§ <http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/>

§ Demtröder, Bd.3



Inhalt der Vorlesung (08.03.2010)

1) **Kristallstrukturen**

Translationsgitter, Punktsymmetrien

Kristallklassen

Symmetrie

Einfache Kristallstrukturen, Bindungen

Defekte

Gefüge

2) **Beugung und Strukturbestimmung**

3) **Mehrstoffsysteme**

4) **Makroskopische Eigenschaften von Festkörpern, und Grenzflächen und ihre Bestimmung**

MATERIALWISSENSCHAFTEN



Wie können wir die Eigenschaften vorhersagen, berechnen, nutzen und gezielt modifizieren?

Vom makroskopischen Werkstoff zum Nano-WS!

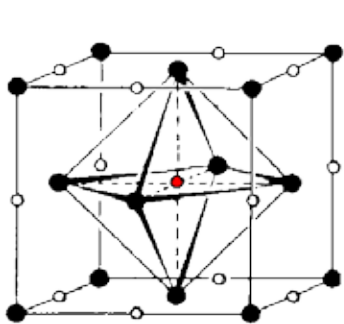


Was geschieht *im Detail*, wenn man mit dem Hammer auf ein beliebiges Material haut?
Warum *genau* sind Materialien weich oder hart, spröde oder verformbar?
Was bestimmt die *mechanischen* Eigenschaften?

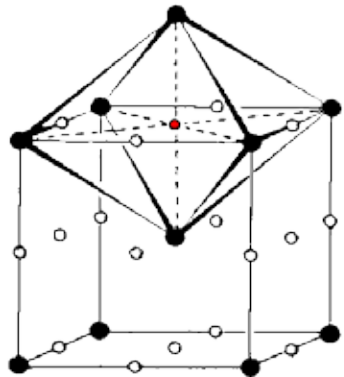
Ein aus *Poren* geformter *InP* Kristall mit vielen Defekten

Einkristalle (Beispiel: Diamant)

§ Wieso wohl sind es *Oktaeder* und keine *Würfel*, wo sie doch *kubische* Symmetrie haben?

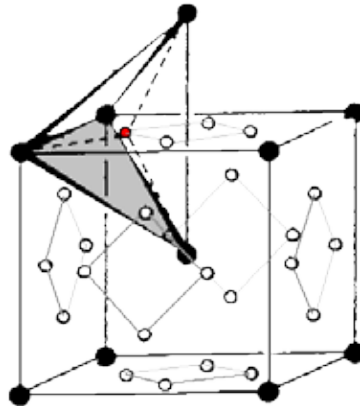
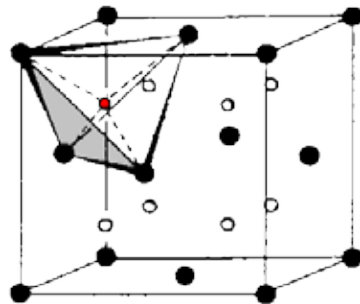


fcc

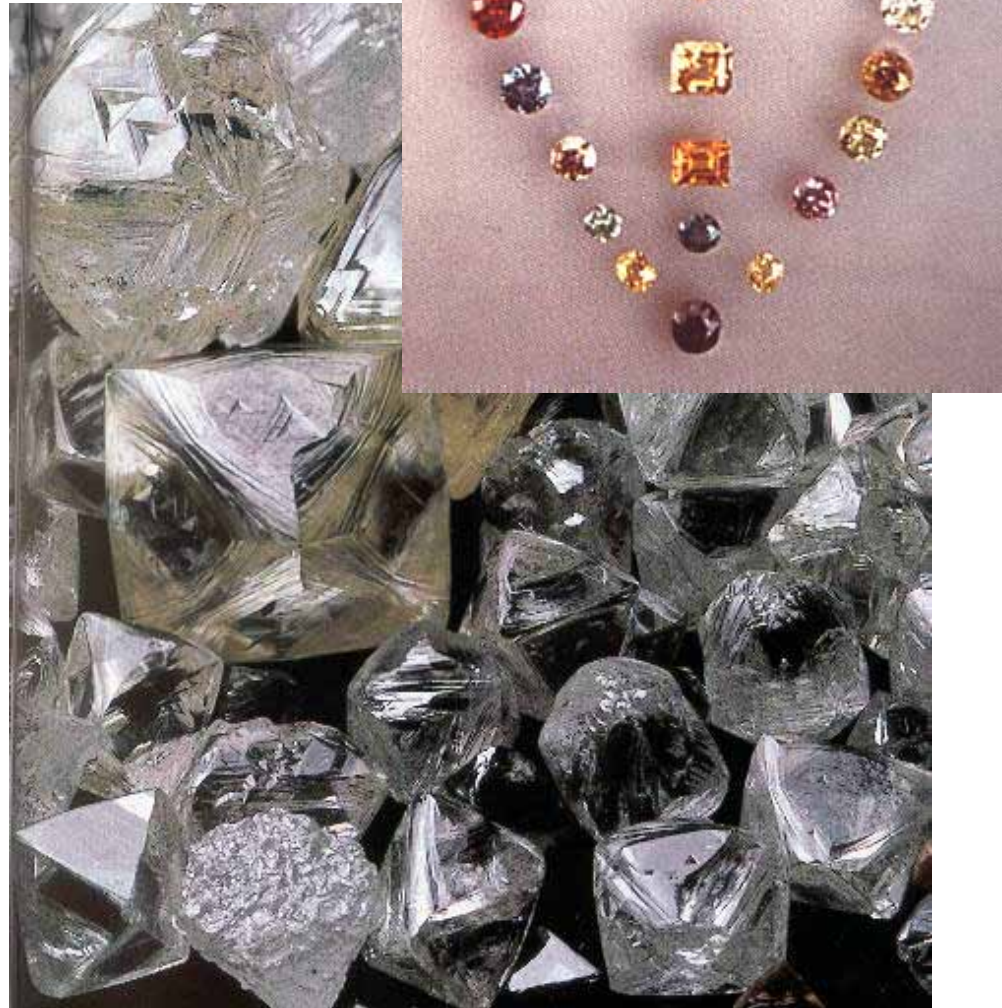


bcc

Octahedra



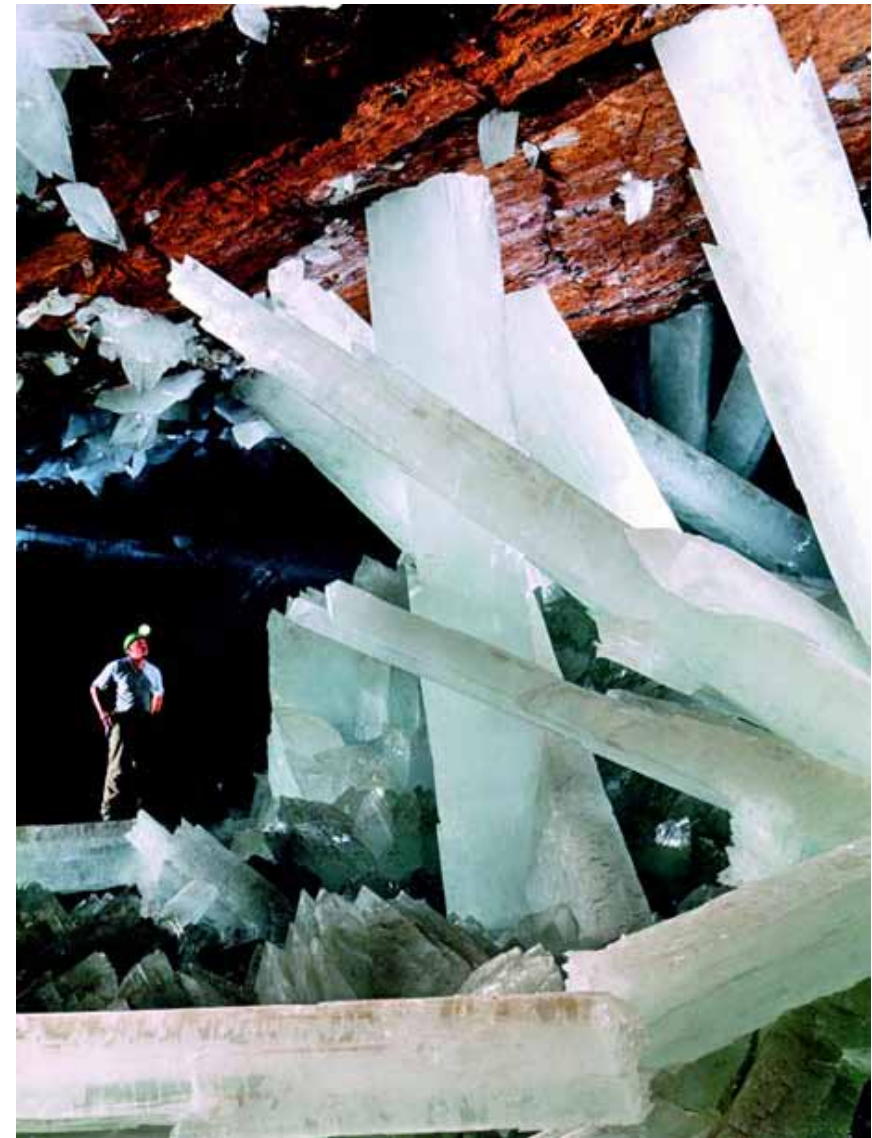
Tetrahedra



Einkristalle (Beispiel: Anhydrit)

- § Riesenkristalle in Mine von Naica (Chihuahua, Mexico). Entdeckt 2000.
- § CaSO_4 , orthorhombisch
- § ähnlich zu Gips

(<http://news.nationalgeographic.com/news/2007/04/photogalleries/giant-crystals-cave/index.html>)



Materialwissenschaft

ist die Wissenschaft von den

Eigenschaften der Materialien

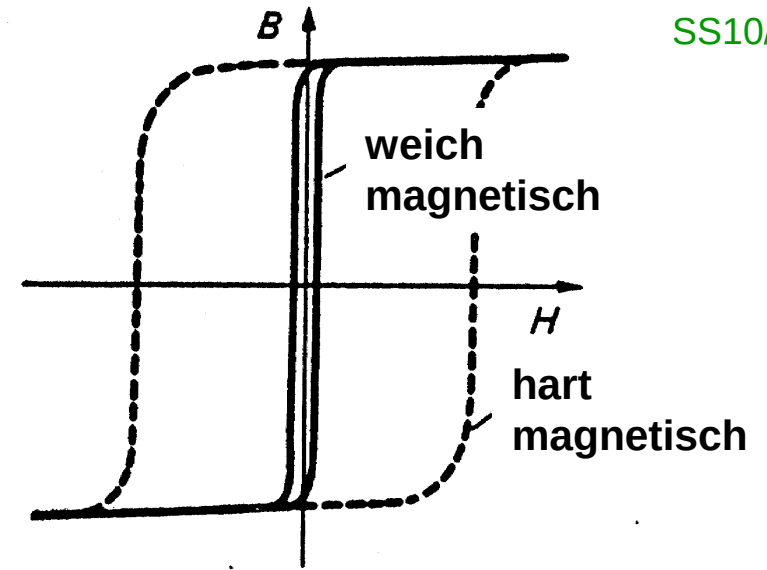
den **Ursachen** dieser Eigenschaften
(physikalischen, chemischen, wirtschaftlichen oder sonstigen),
und damit der wissenschaftlich begründeten

Materialauswahl (zBsp: SmCo_5 , $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, Fe-Si, Ni-Fe,)

Materialherstellung

und

Materialanalyse

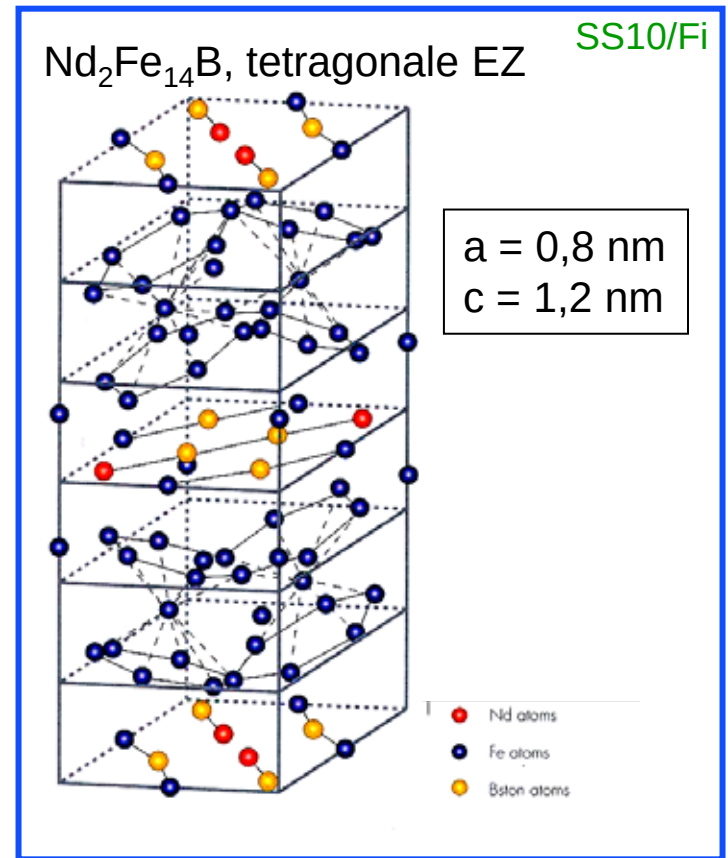


Materialphysik

Ein Teil von Materialwissenschaft ist die Frage nach den **Materialieigenschaften**:

mechanische
elektrische
magnetische
thermische

.....



Erklärt und verstanden aus dem **atomaren Aufbau**.

Daraus folgt das wichtige Ziel des Materialwissenschaftlers:
die **zeitliche Änderung der Eigenschaften**
(Materialermüdung, Korrosion, Auflösung von Materialverbünden,...)

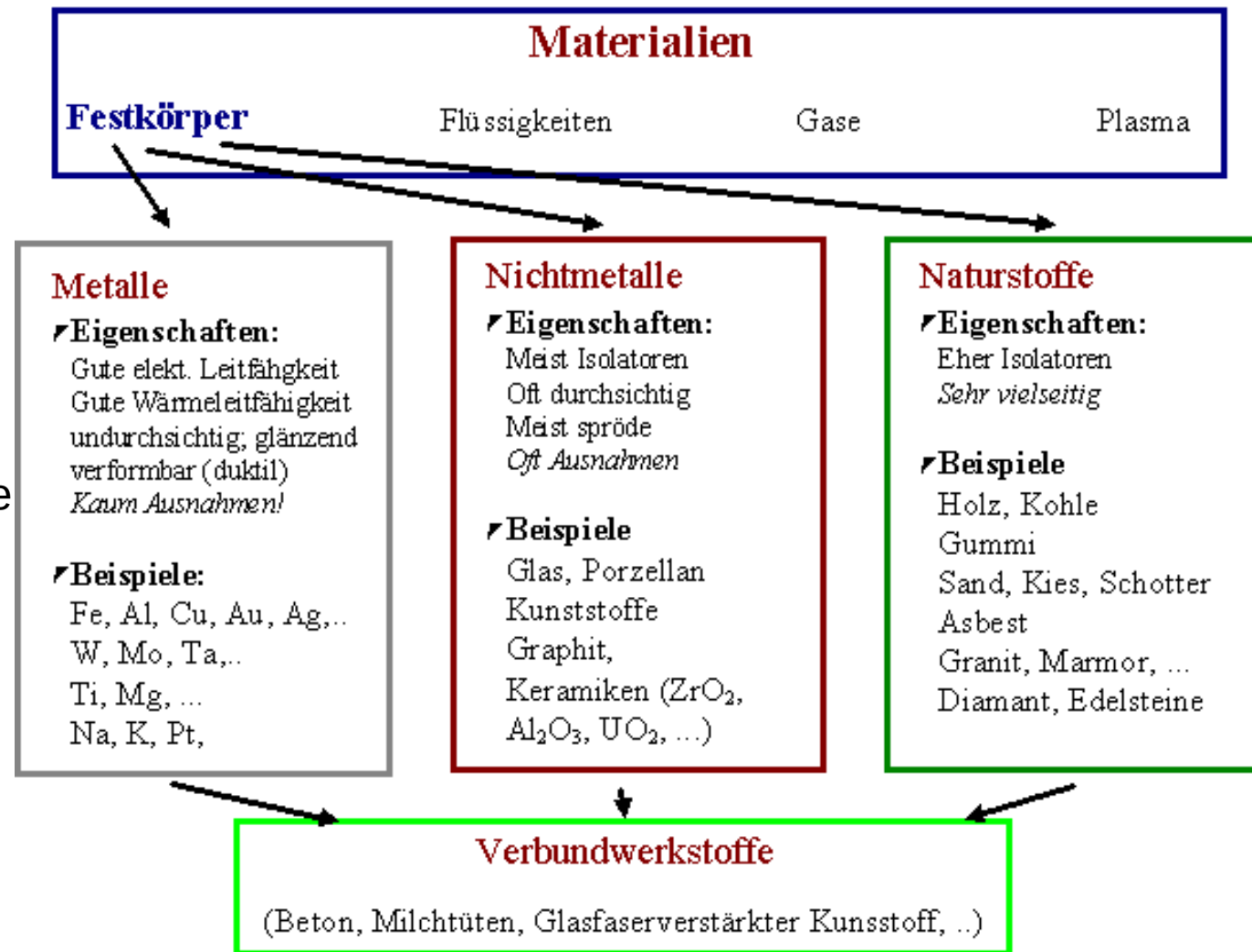
Materialialeigenschaften

Strukturmaterialien:

Materialien, bei denen die **mechanischen** Eigenschaften im Vordergrund stehen

Funktionsmaterialien:

Materialien, die zu einer bestimmten Funktionsgruppe gehören,
z.B. Halbleiter,
magnetischen Werkstoffe,
Sensormaterialien,
Ionenleiter,
Supraleiter,
....



Wichtige Fragen bei Materialeigenschaften

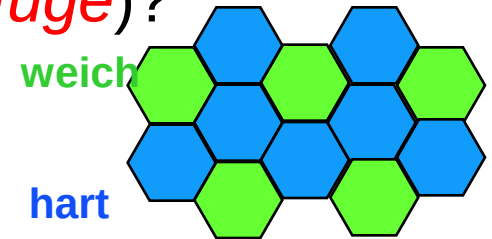
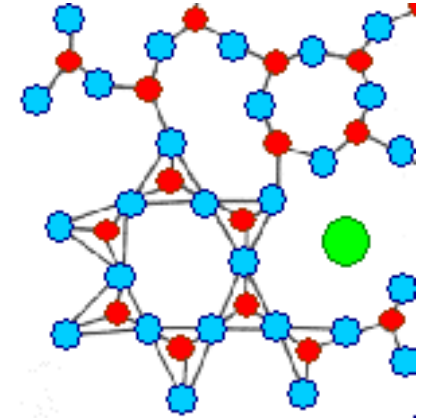
§ Welche *Atome* sind beteiligt (das "*Material*")?

§ Wie sind die Atome untereinander verbunden (die Natur der *chemischen Bindung*)?

§ Wie ist das Material atomar aufgebaut (das *Gefüge*)?

§ Welche *Temperatur* liegt vor?

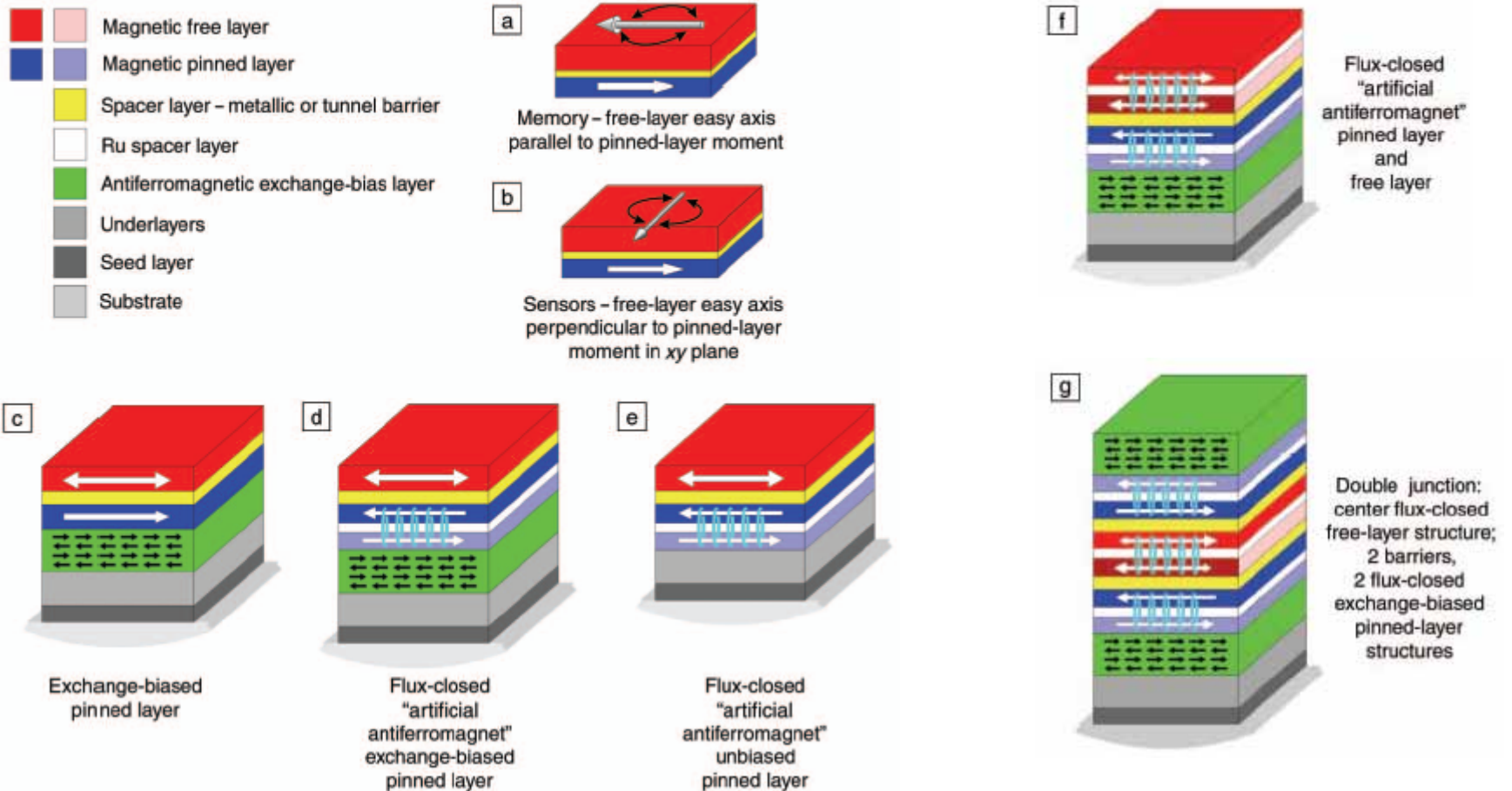
§ Welche weiteren *Parameter*, die wir noch gar nicht beachtet haben (z. Bsp. der Druck), könnten auch noch Einfluss haben?



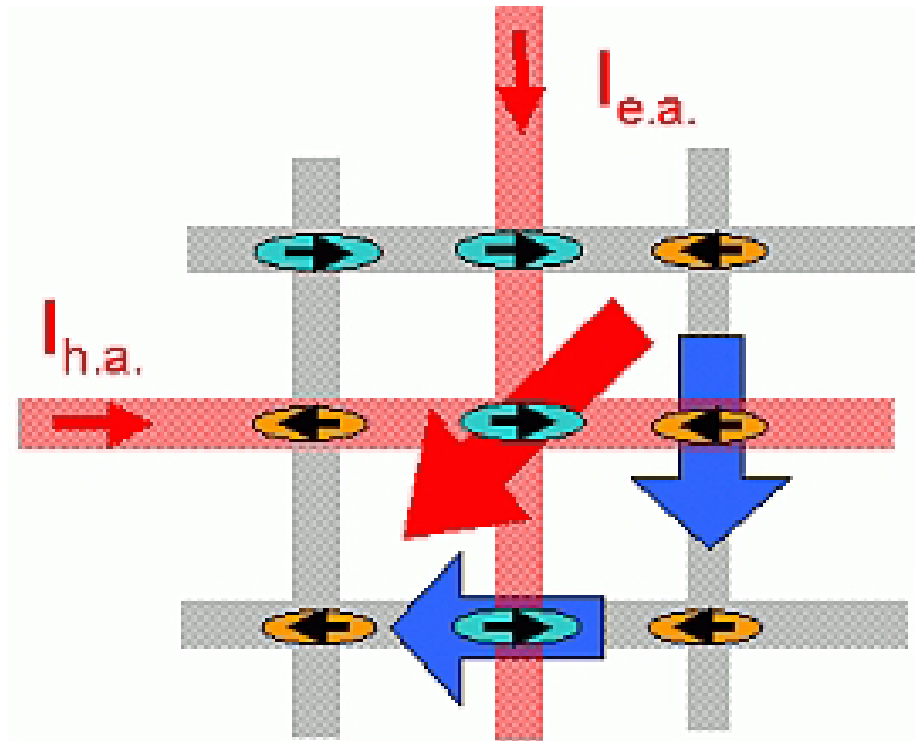
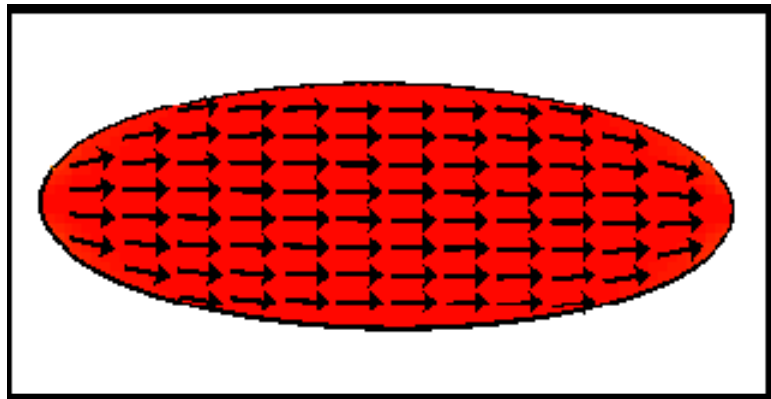
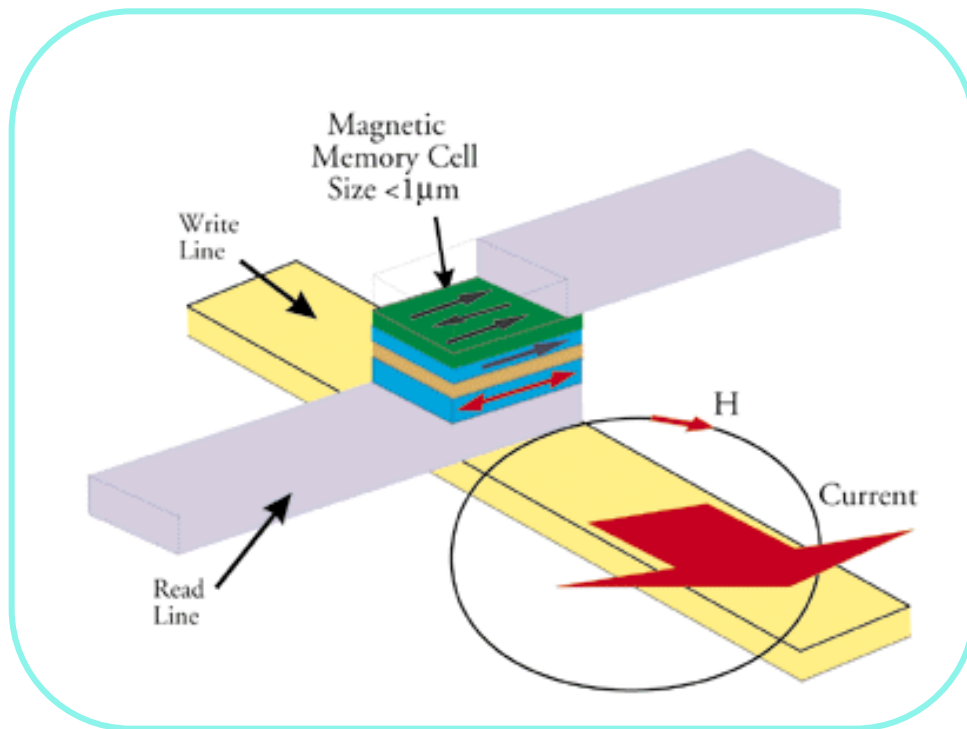
Funktionswerkstoff

„Spin-engineered magnetic devices“
S. Parkin, MRS Bulletin, Vol.31, May 2006, 389.

Spin-Polarized Current in Spin Valves and Magnetic Tunnel Junctions



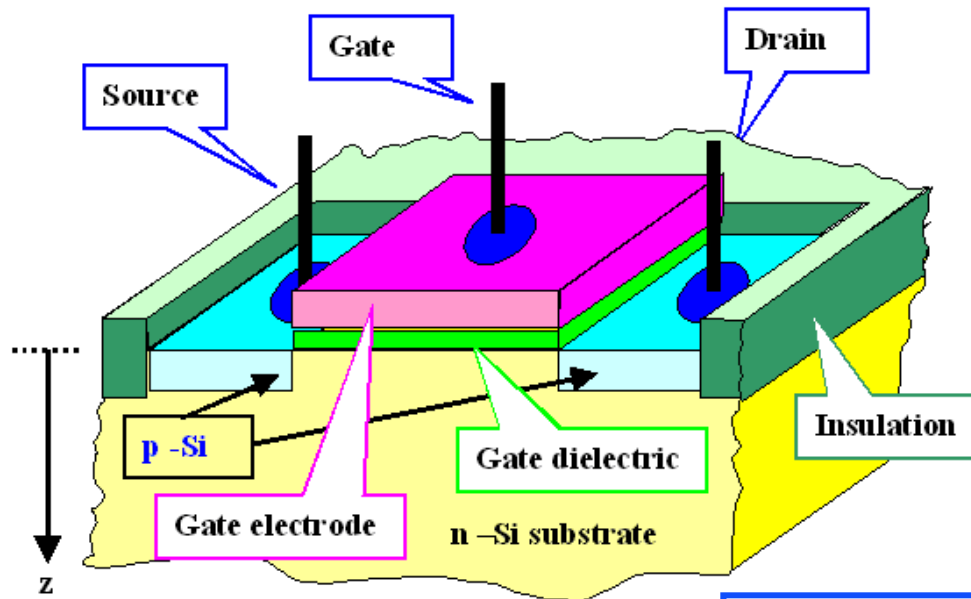
Beispiel: Magnetic Random Access Memory



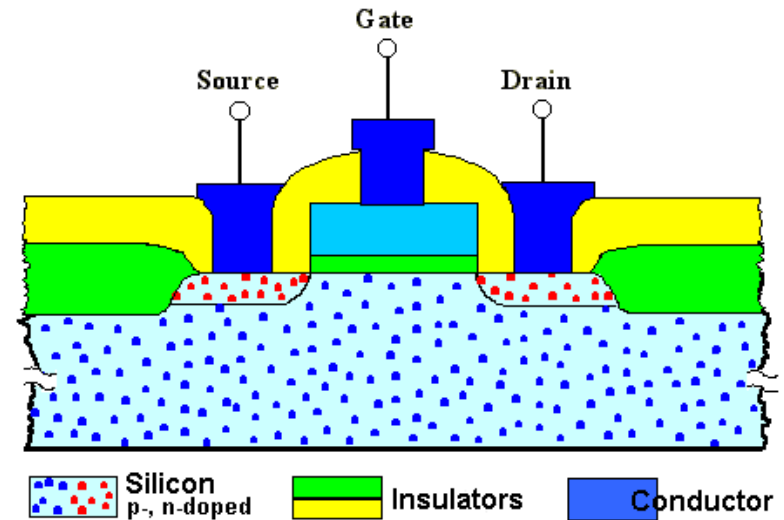
	45° field (strong enough to switch)
	Easy axis field (half selected cell)
	Hard axis field (half selected cell)

Beispiel:

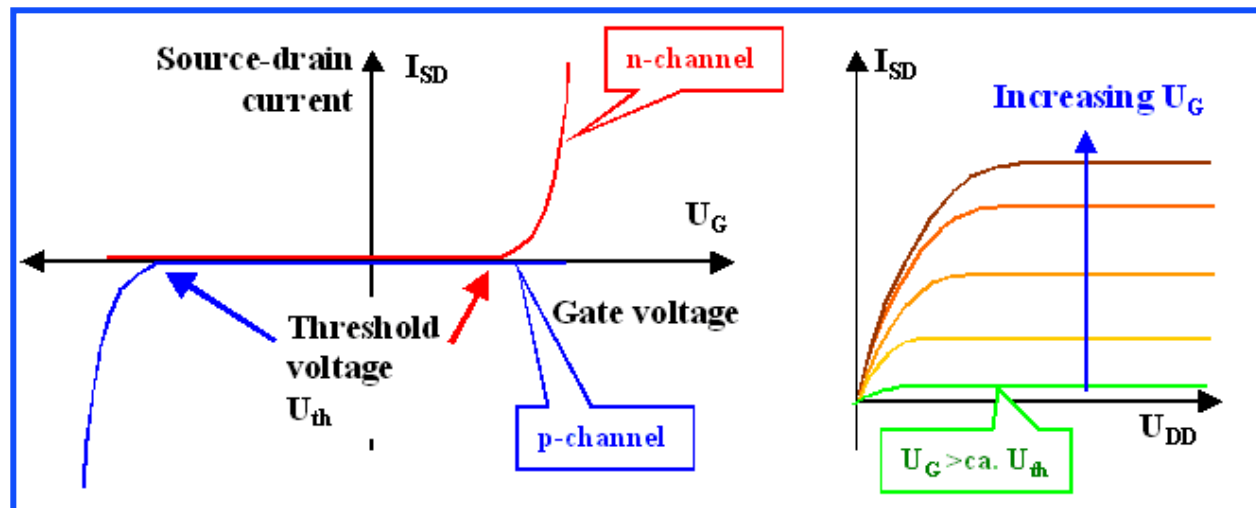
MOS Transistor



"p-channel MOS"



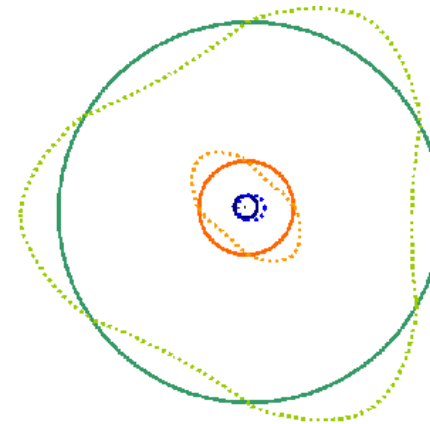
"n-channel MOS"



Bohr'sches Atommodell

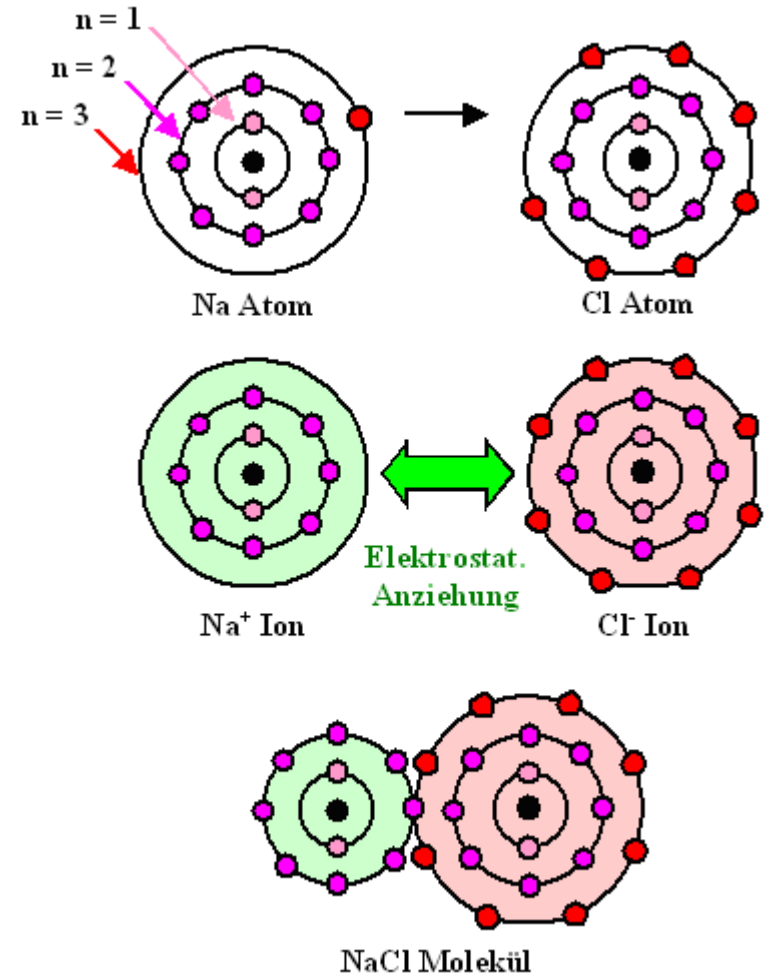
- § **Niels Bohr** postulierte **1913** ein "Axiom", das dazu führt, dass es einige wenige stabile Bahnen des Elektrons um den Atomkern gibt, d.h. Bahnen, auf denen das Elektron *keine* Energie verliert. Zu jeder dieser **erlaubten Bahnen** gehört eine bestimmte Energie, die sich als Summe der kinetischen und der potentiellen Energie des Elektrons ausdrücken lässt.
- § Die Energieabgabe oder Energieaufnahme der Elektronen eines Atoms kann nur noch in **Quanten** erfolgen, die der Differenz der Energie zweier erlaubten Bahnen entspricht.

$m \cdot v \cdot r = \frac{n \cdot h}{2\pi} = n \cdot h$	Drehimpuls
$\frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m \cdot v^2}{r}$	Energie



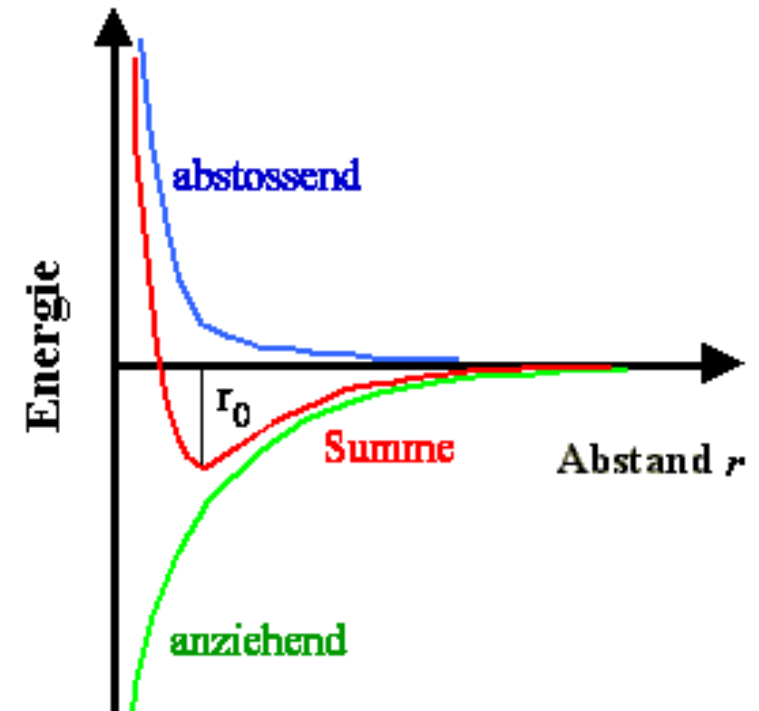
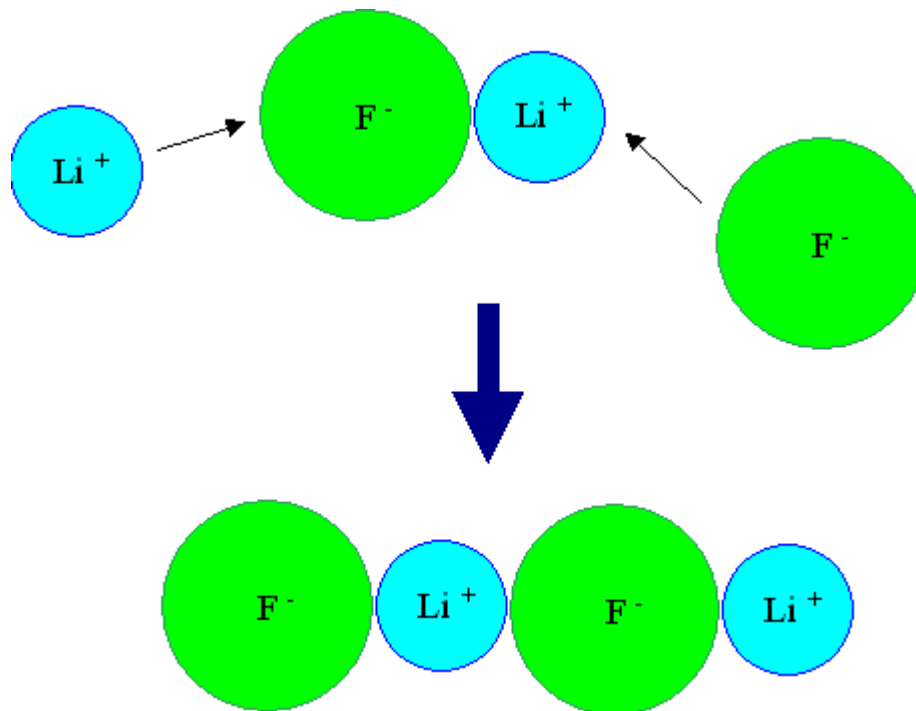
Bindungen / Ionenbindung

- § Die Ionenbindung ist die einfachste Bindungsart - sie lässt sich klassisch in guter Näherung durch die anziehende Wechselwirkung zweier ungleichnamig geladener "harter" Kugeln verstehen.
- § Die **anziehenden elektrostatischen Kräfte** sind dabei **ungerichtet**. Egal in welche Raumrichtung r man schaut, die Kräfte sind immer dieselben.



Vom Molekül zum Kristall - Potentialbild

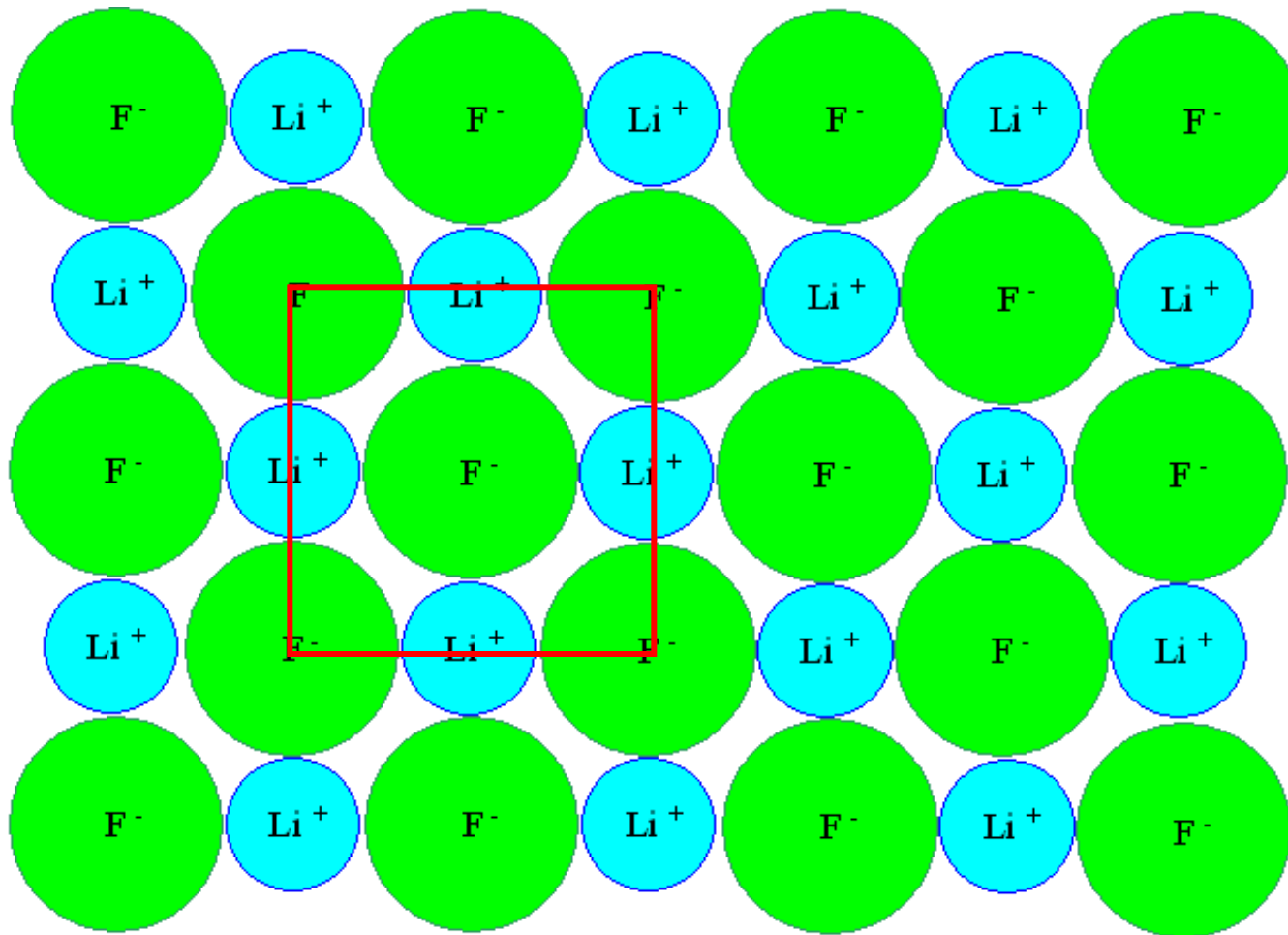
§ Im Falle der **Ionenbindung** ergibt sich ein *Energie - Abstands Diagramm*.



$$U_{\text{Bindung}} = -a_m \frac{A}{r} + \frac{B}{r^m}$$

a_m Madelungskonstante

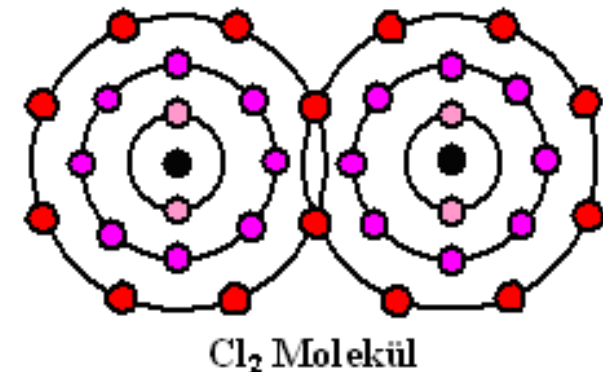
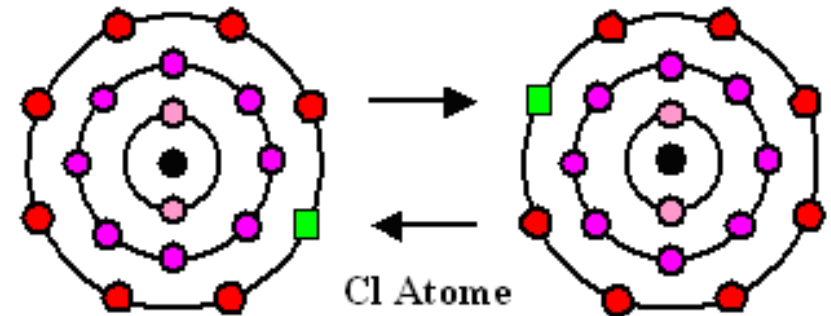
Vom Molekül zum Festkörper



Bindungen / Kovalente Bindung

§ **Kovalente Bindungen** in Reinkultur liegen vor, wenn zwei Atome, die beide *zu wenig* Elektronen haben, sich verbinden.

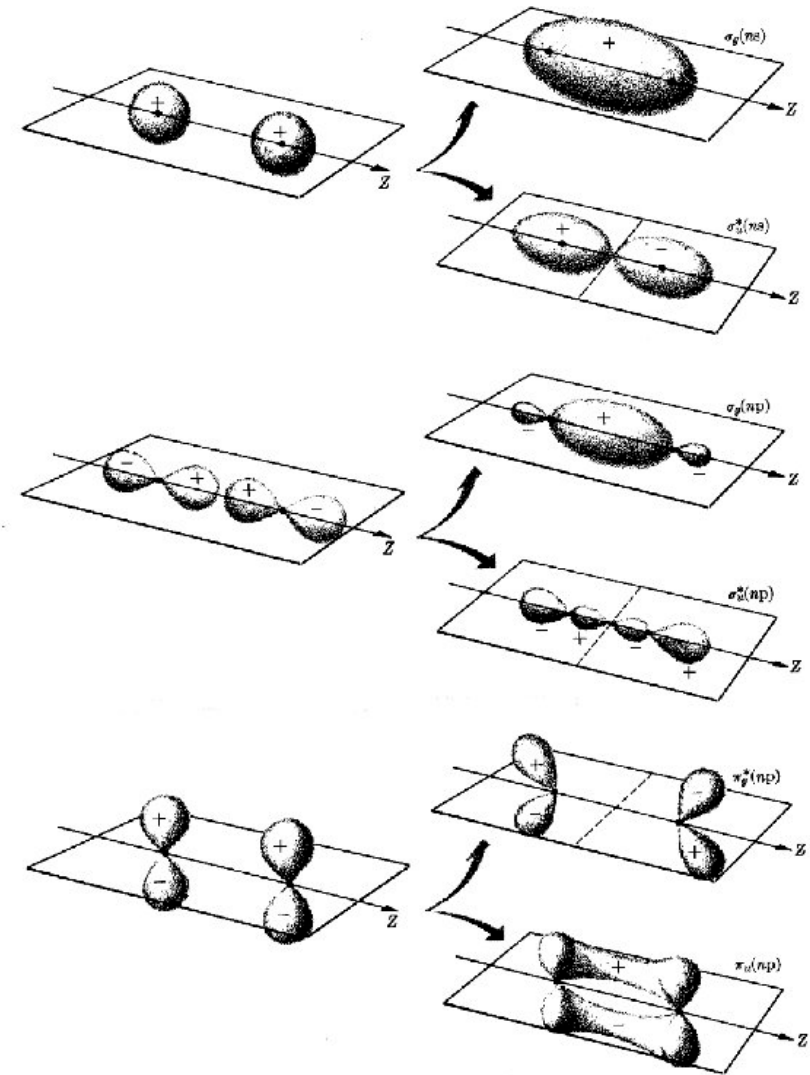
§ Beispiele sind:
 Die **Halogenide** in Gasform: **F₂**, **Cl₂**, **Br₂**, usw.
 Viele typischen Gase: **O₂**, **N₂**, **NH₃** (Ammoniak), **CO₂**, usw.
 Festkörper wie z.B. **Si**, **Ge**, **C** (in der Form des Diamanten), **GaAs** (Galliumarsenid) etc.



$$U_{\text{Bindung}} = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

Kovalente Bindung

§ Korrekt ausgedrückt bedeutet dies, dass sich Orbitale (in der Regel **p**-Orbitale), die nur teilweise besetzt sind, sich beim Näherkommen überlappen und, je nach Vorzeichen, **ein gemeinsames Orbital** bilden können, das gleichberechtigt zu beiden Atomen gehört, und das es in **zwei Varianten** gibt.

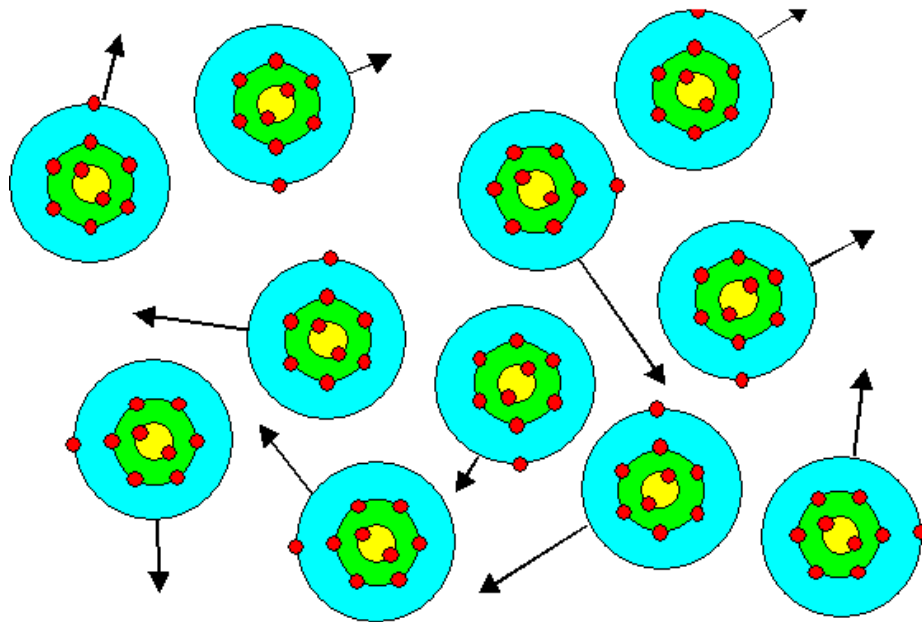


Gezeigt sind die bindenden und antibindenden Orbitale bei Überlappung von **s** - Orbitalen (keine Richtungsabhängigkeit der Bindung), **p** - Orbitale in Keulenrichtung und senkrecht dazu.

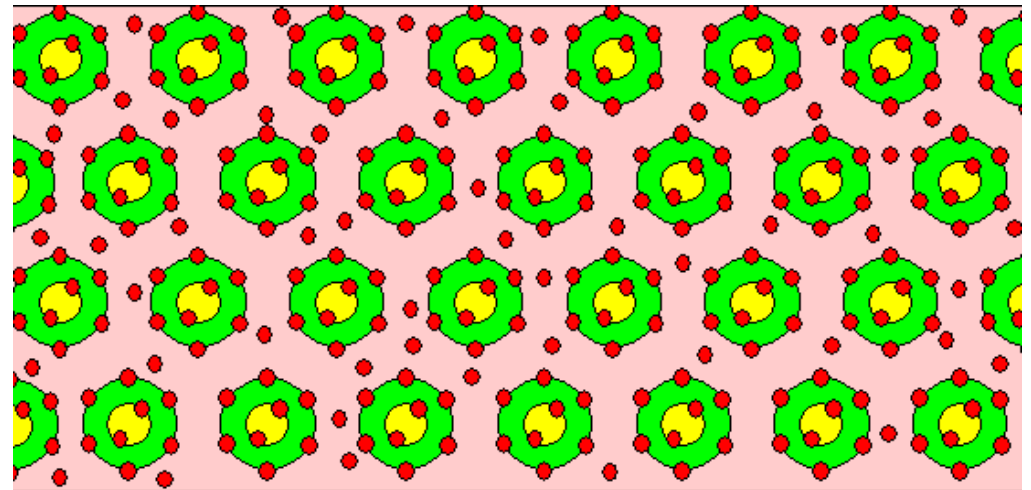
Bindungen / Metallbindung

- § Wir haben noch den Fall zu behandeln, dass die Atome, die sich verbinden wollen, **zuviel Elektronen** haben. Damit kommen wir zur **Metallbindung**.
- § Die Atome geben ihre überschüssigen Elektronen einfach an den entstehenden Festkörper ab; es entsteht in Art **Elektronengas** innerhalb des Körpers. In diesem negativ geladenen Elektronengas sitzen die positiv geladenen Ionen.
- § Obwohl sich die Ionen abstoßen, vermittelt das negativ geladenen Kontinuum des Elektronengases eine Bindungskraft.

$$U_{\text{Bindung}} = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$



Schalenbild von (großen) **Na** - Atomen im Dampf.
Die Atome befinden sich in lebhafter Bewegung;
angedeutet durch Pfeile.

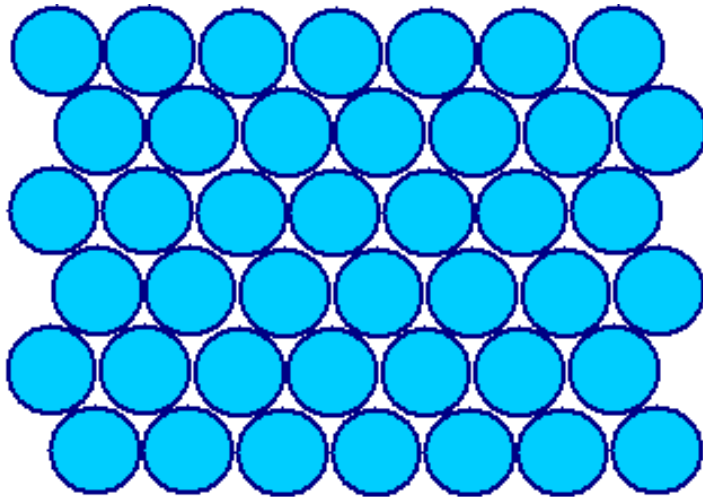


Kleine **Na⁺** - Ionenrümpfe eingebettet in das negativ geladene (rosa) Elektronengas.
Die Atome sitzen fest auf ihren Plätzen, allenfalls vibrieren sie ein wenig
um die Gleichgewichtslage.

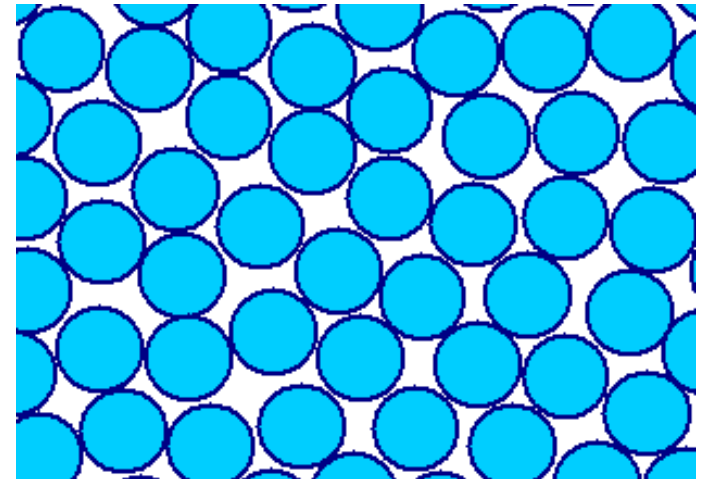
Die Elektronen sind frei beweglich und nicht mehr einzelnen Ionen zugeordnet.

Perfekte Kristalle und amorphe Festkörper

- § Im einfachsten Fall nur *einer* Atomsorte können wir uns den Festkörper - z.B. die elementaren Metalle, oder einen Diamanten - als **Anordnung von Kugeln** vorstellen, die sich berühren müssen, d.h. gegenseitige Bindungen aufweisen. Damit gibt es nur *zwei* Möglichkeiten einer raumfüllenden Anordnung:



Eine *streng regelmäßige* Struktur = **kristalliner Aufbau**,
wie hier schematisch und zweidimensional gezeigt



Eine *regellose* Struktur = **amorpher Aufbau**

Kristallstruktur einfacher Moleküle

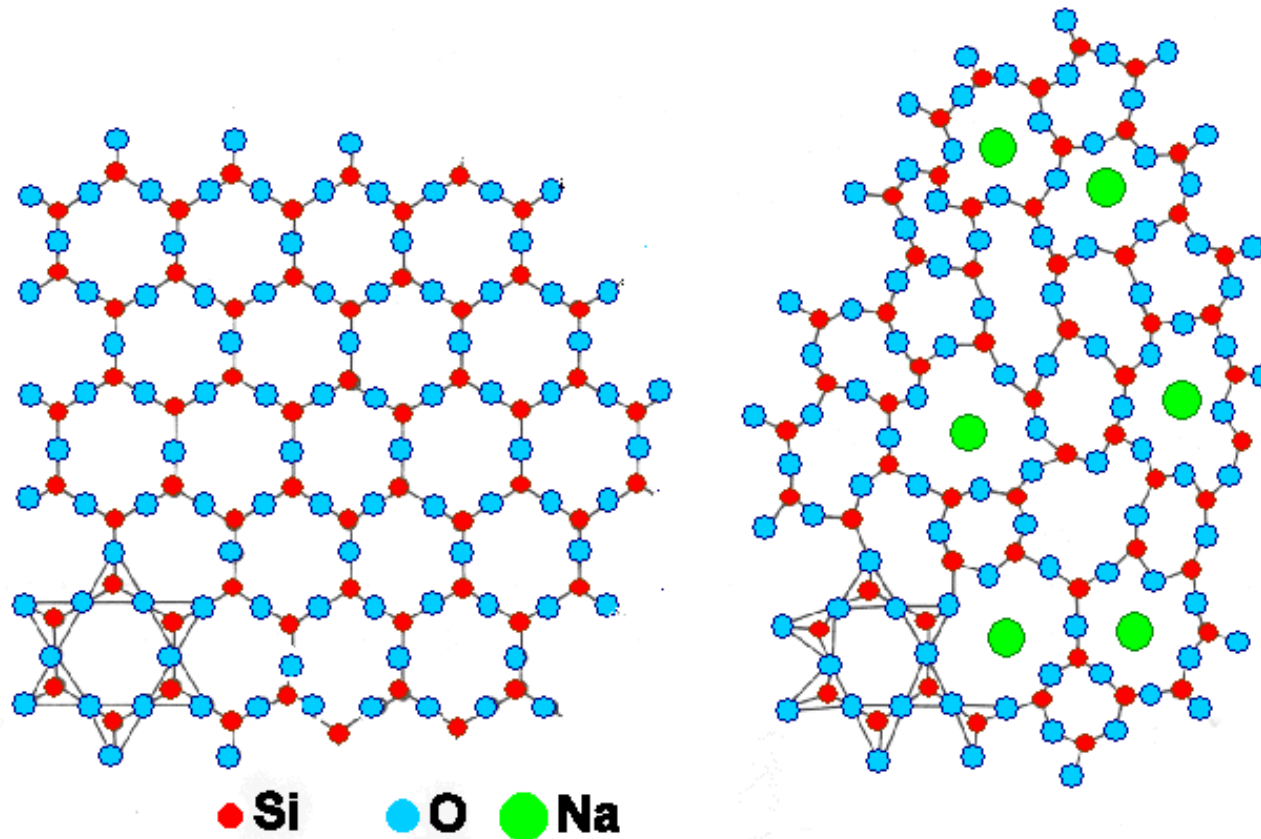
§ Bergkristall, also kristallines SiO_2 , kommt beispielsweise

kristallin

oder

amorph

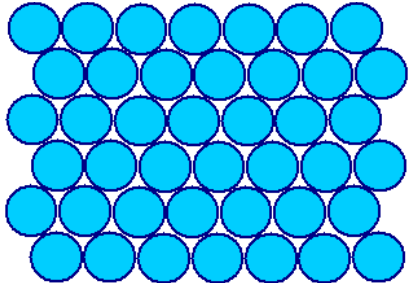
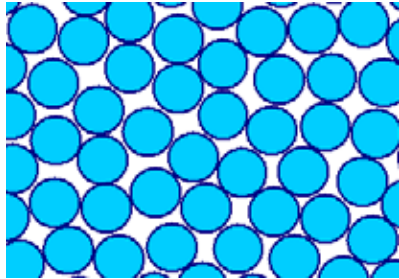
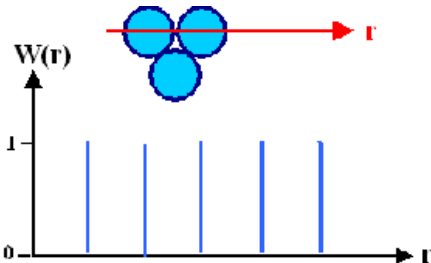
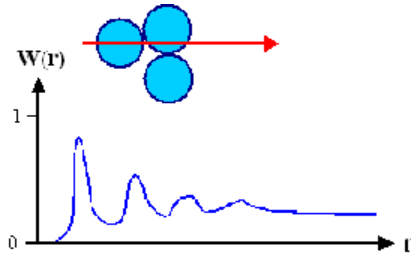
vor.



Wie kann man Kristalle *formal* beschreiben?

Was heißt "regelmäßiger Aufbau"?

SS10/Fi

Kristall	Amorph
	
Aus der <i>bekannten Position einiger Atome</i> lässt sich die Position <i>aller anderen Atome</i> berechnen	Aus der <i>bekannten Position einiger Atome</i> lässt sich die Position aller anderen Atome <i>nicht</i> berechnen
Die Wahrscheinlichkeit, bei einer beliebigen Position ein Atom zu finden, wird durch d - Funktionen angegeben	Die Wahrscheinlichkeit, bei einer beliebigen Position ein Atom zu finden, wird durch eine radiale Verteilungsfunktion angegeben, die bei kleinen Abständen vom Ursprung Maxima bei $n \cdot r_0$ hat und bei größeren Abständen vom Ursprung konstant wird
	
Es existiert eine Nah- und Fernordnung	Es existiert nur eine beschränkte Nahordnung
Es existiert eine Translationssymmetrie	Es existiert <i>keine</i> Translationssymmetrie

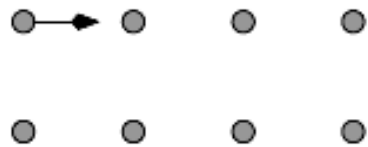
Symmetrie

- § Es bedeutet, dass sich Eigenschaften eines Systems unter bestimmten Operationen nicht ändern.
- § **Translationsymmetrie** heißt: Ein Kristall "ändert" sich nicht, wenn alle Atome um bestimmte Werte x_0 , y_0 , z_0 verschoben werden. In anderen Worten, es ist egal wo wir den Ursprung eines Koordinatensystems hinlegen, solange er an einem "Symmetriepunkt" sitzt.
- § Ein Kristall ändert sich möglicherweise auch nicht, wenn man ihn um bestimmte Winkel **dreht**, an bestimmten Ebenen **spiegelt** oder relativ zu einem gegebenen Punkt **invertiert** (d.h. alle Vektoren r vom Aufpunkt aus zu einem Atom durch $-r$ ersetzt). Wir erwarten damit noch weitere Symmetrien:

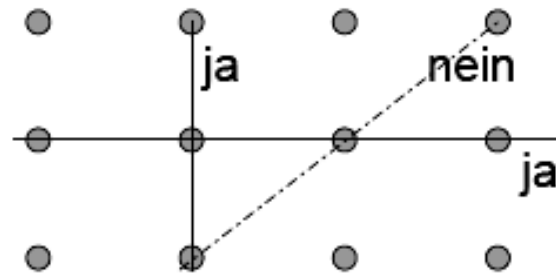
Rotationssymmetrie, Spiegelsymmetrie, Inversionssymmetrie.

Symmetrieoperationen

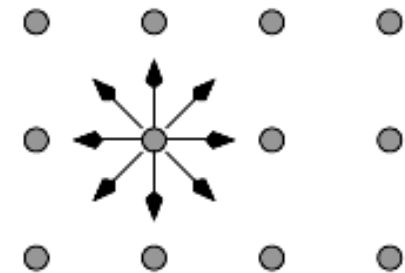
Translationssymmetrie



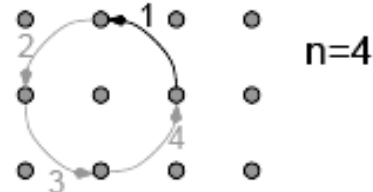
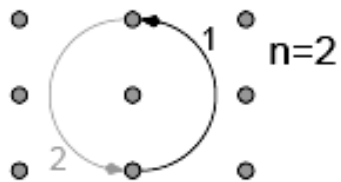
Spiegelsymmetrie



Inversionssymmetrie



Rotationssymmetrie



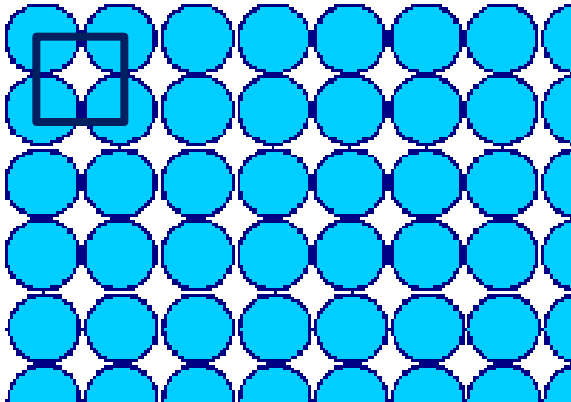
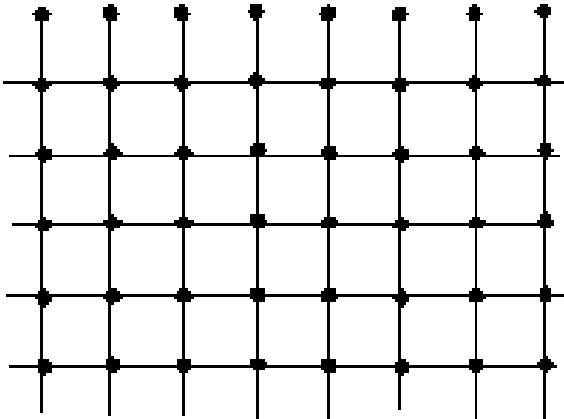
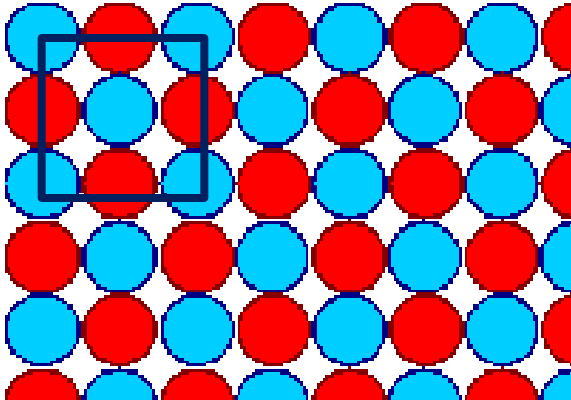
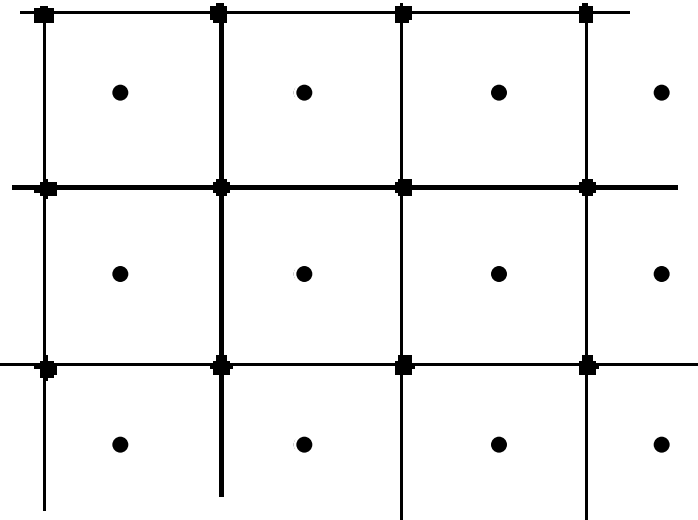
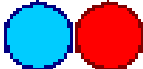
Symmetrioperationen

- § **Translation** um einen beliebigen Gittervektor. Dies lässt per Definitionem das Gitter unverändert, d.h. überführt das Ausgangsgitter bei Anwendung der Symmetrioperation in sich selbst. Alle Gitter haben Translationssymmetrie.
- § **Spiegelungen** an Ebenen (die durch **2** Translationsvektoren aufgespannt wird). Nicht alle Gitter sind spiegelsymmetrisch.
- § **Inversionen** bzgl. eines Gitterpunktes, d.h. der Ersatz aller $\underline{r}$ die vom Gitterpunkt ausgehen durch $-\underline{r}$
- § **Rotation** mit einem Gittervektor als **Drehachse**. Erlaubt sind **2-**, **3-**, **4-** und **6** - zählige Drehachsen, d.h. Drehungen um **360°**, **180°**, **120°**, **90°** und **60°** und natürlich die ganzzahligen Vielfachen. Alle Gitter haben mindesten eine Rotationssymmetrie.

Punktgitter

- § In einem **Punktgitter** oder kurz **Gitter** sind *mathematische Punkte* so angeordnet, dass sie zumindest eine Translationssymmetrie besitzen. Das Punktgitter ist ein mathematisches Objekt und damit *kein* Kristall; denn ein Kristall ist ein physikalisches Objekt, er bedarf der Atome.
- § Vom Punktgitter zum Kristall kommt man, indem jedem Punkt des Punktgitters ein *Baustein* des Kristall zugeordnet wird, die so genannte **Basis**. Das kann ein einziges Atom sein, aber auch Verbände oder Moleküle von hunderten von Atomen.
- § Damit folgt eine sehr wichtige Definition:

$$\textbf{\textit{Kristall}} = \textbf{\textit{Gitter}} + \textbf{\textit{Basis}}$$

Kristall	=	Gitter	+	Basis
	=		+	
	=		+	 oder 

Mathematische Beschreibung des Gitters

- § Jedes dreidimensionale *Gitter* ist eine Folge von *Parallelepipeden*, das durch drei **Basisvektoren** $\underline{a}_1$, $\underline{a}_2$, $\underline{a}_3$ gegeben wird.
- § Jeder Gitterpunkt eines mathematischen Gitters ist damit durch einen Vektor $\underline{I}$ erreichbar, der gegeben ist durch

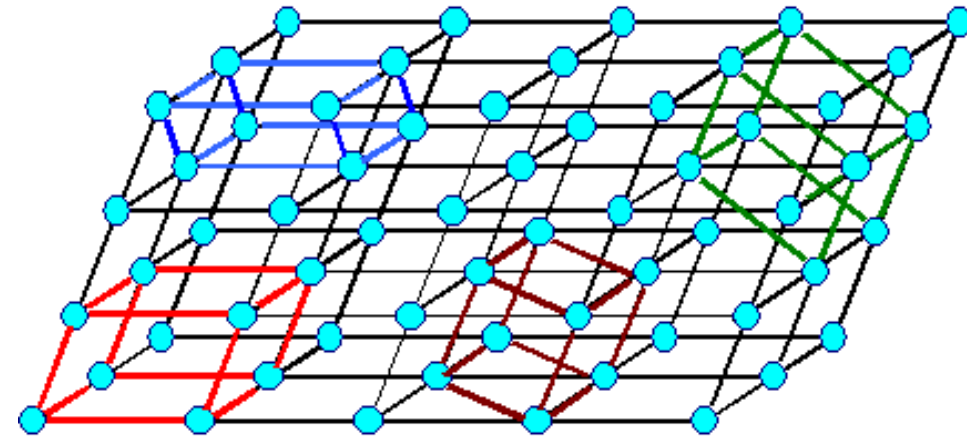
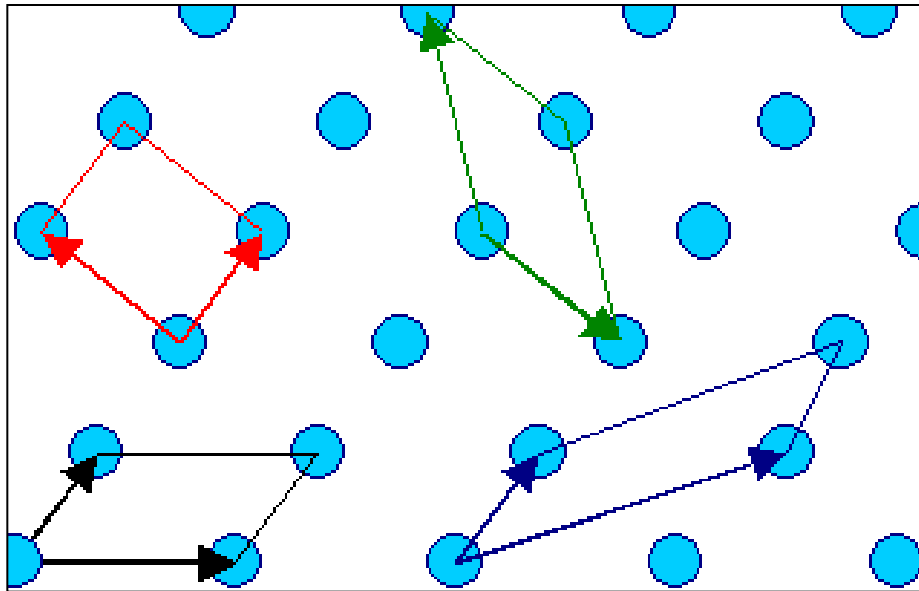
$$\underline{I} = u \cdot \underline{a}_1 + v \cdot \underline{a}_2 + w \cdot \underline{a}_3$$

u, v, w ganzzahlig

- § Die Basisvektoren $\underline{a}_1$, $\underline{a}_2$, $\underline{a}_3$ sind *per Definitionem* auch Translationsvektoren des betrachteten Gitters; das von ihnen aufgespannte Parallelepiped heißt **Einheitszelle** oder **Elementarzelle** des Gitters, abgekürzt **EZ**.

Einheitszelle oder Elementarzelle des Gitters

- § Mit *einer* geeignet gewählten **EZ** jeder beliebige Gittertyp beschrieben werden kann.
- § Die Umkehrung dieses Satzes gilt aber nicht: Ein gegebenes Gitter kann immer mit *mehr als einer* **EZ** beschrieben werden.

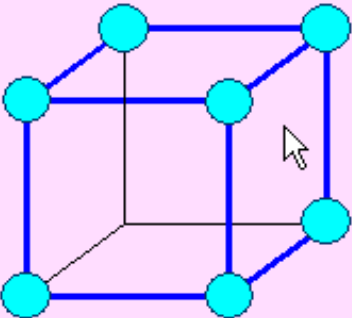
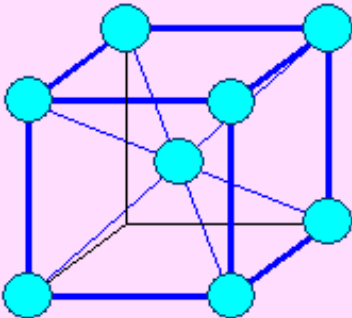
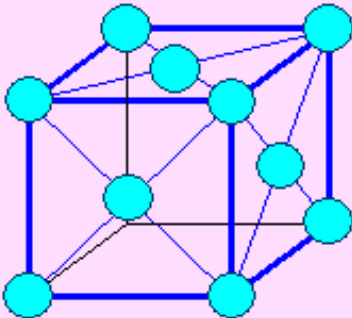
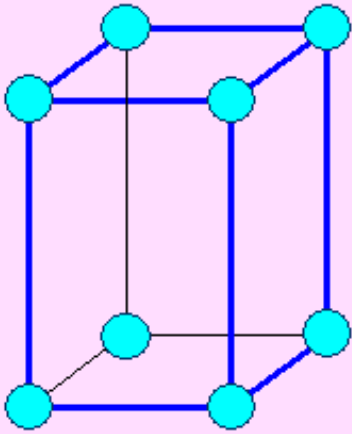
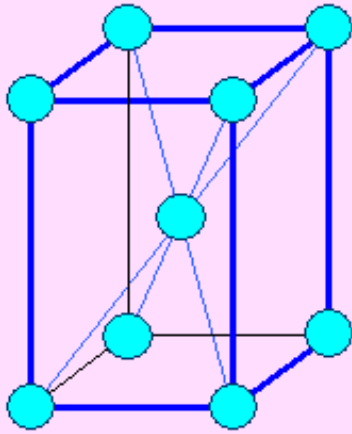


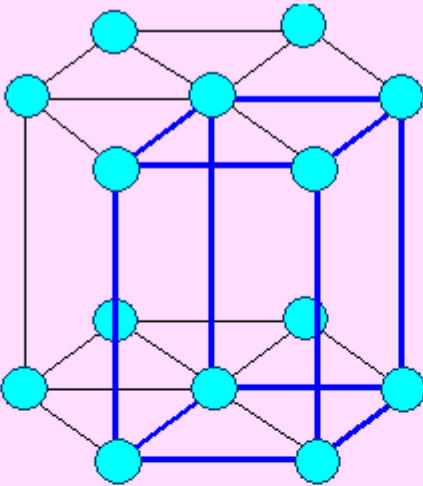
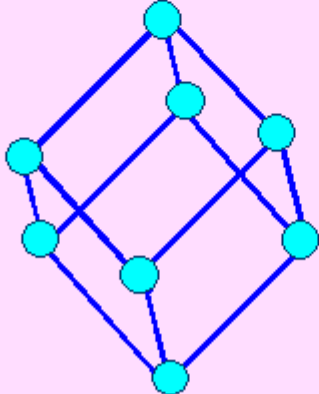
Die 4 eingezeichneten Einheitszellen mit ihren jeweiligen Basisvektoren spannen *alle* dasselbe Gitter auf.

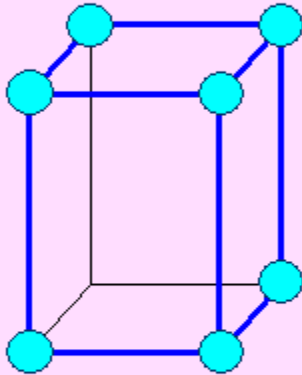
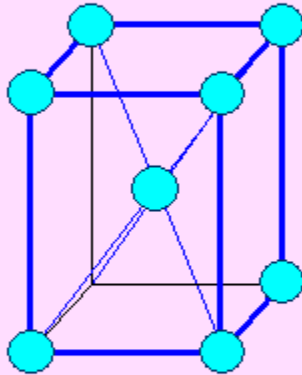
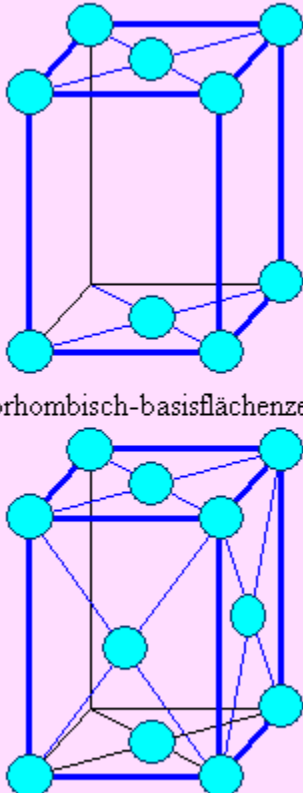
$$V = \underline{a}_1 \cdot (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)$$

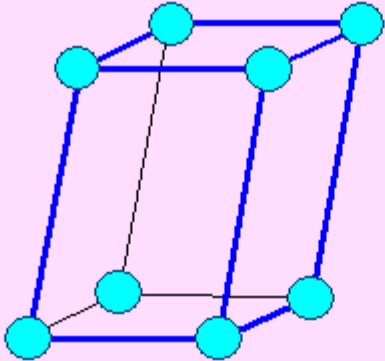
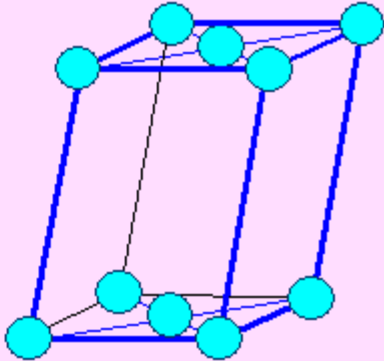
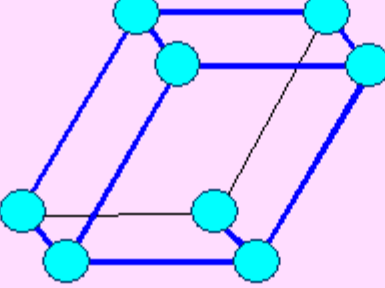
14 Gittertypen / Bravais - Gitter

- § Sortiert man alle möglichen (und nicht notwendigerweise primitiven) Einheitszellen nach abnehmender Symmetrie, erhält man genau **14** Gittertypen, die so genannten **Bravais - Gitter**, mit denen alle überhaupt vorkommenden Fälle abgedeckt werden können.
- § Warum gerade **14** Bravaisgitter existieren, und warum es gerade die sind, die in der untenstehenden Tabelle gezeigt werden, ist nur aus nicht ganz trivialen Betrachtungen der Gruppentheorie erschließbar; wir werden das hier aber nicht weiter begründen.
- § Die **14 Bravaisgitter** lassen sich wiederum in **7 Kristallsysteme** (**Gittersysteme**) zusammenfassen (die alle einen Namen haben), und die sich nur durch die Länge der Basisvektoren und den Winkeln zwischen ihnen unterscheiden.

Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Achsenwinkel	Zugehörige Bravaisgitter (gelegentlich sind nur "sichtbare" Gitterpunkte (= blaue Kreise) eingezeichnet)		
Kubisch $a_1 = a_2 = a_3$	$a = b = c = 90^\circ$	 kubisch-primitiv	 kubisch-raumzentriert	 kubisch-flächenzentriert
Tetragonal $a_1 = a_2 \neq a_3$	$a = b \neq c = 90^\circ$	 Tetragonal-primitiv	 Tetragonal-raumzentriert	

Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Achsenwinkel	Zugehörige Bravaisgitter (gelegentlich sind nur "sichtbare" Gitterpunkte (= blaue Kreise) eingezeichnet)		
Hexagonal $a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	 Hexagonal (EZ ist ergänzt um hex. Symmetrie zu zeigen)		
Rhombisch oder Trigonal $a_1 = a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	 Rhombisch		

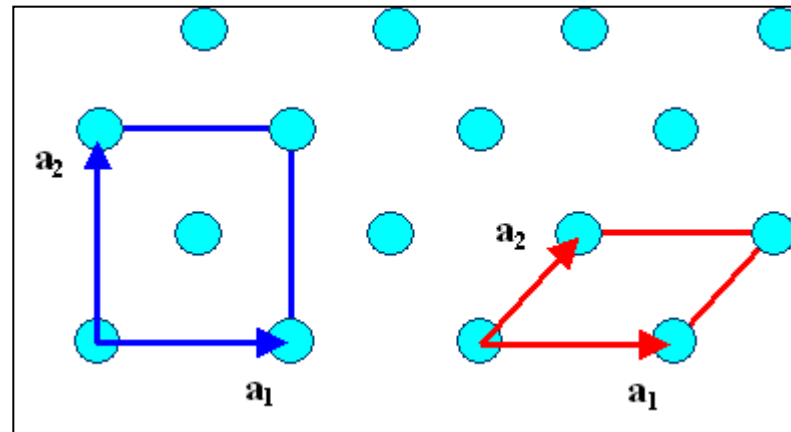
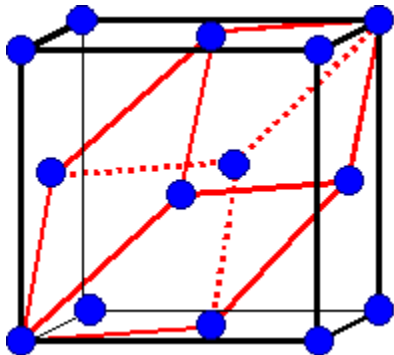
Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Achsenwinkel	Zugehörige Bravaisgitter (gelegentlich sind nur "sichtbare" Gitterpunkte (= blaue Kreise) eingezeichnet)		
Orthorhombisch $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 Orthorhombisch-primitiv	 Orthorhombisch-raumzentriert	 Orthorhombisch-basisflächenzentriert Orthorhombisch-flächenzentriert

Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Achsenwinkel	Zugehörige Bravaisgitter (gelegentlich sind nur "sichtbare" Gitterpunkte (= blaue Kreise) eingezeichnet)		
Monoklin $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$	 Monoklin-primitiv		 Monoklin-basisflächenzentriert
Triklin $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	 Triklin		

Beispiel: kubisch-flächenzentrierte Bravaisgitter, kfz, fcc ("face centered cubic")

SS10/Fi

- § Es ist die Grundlage für viele der *Elementkristalle*, die man erhält, indem auf einen *Gitterpunkt* des **fcc** - Gitters als Basis ein Atom des betreffenden Elementes setzt. Die hohe Symmetrie des kubischen Gitters ist unmittelbar erkennbar.
- § Würde man die zugehörige *primitive Einheitszelle* wählen - die natürlich mit derselben Basis denselben Kristall ergeben muss - sähe das so aus:



- § Der primitiven **EZ** des **fcc** - Gitters sieht man die einfache kubische Symmetrie des Gitters nicht an; sie wird deshalb kaum verwendet.

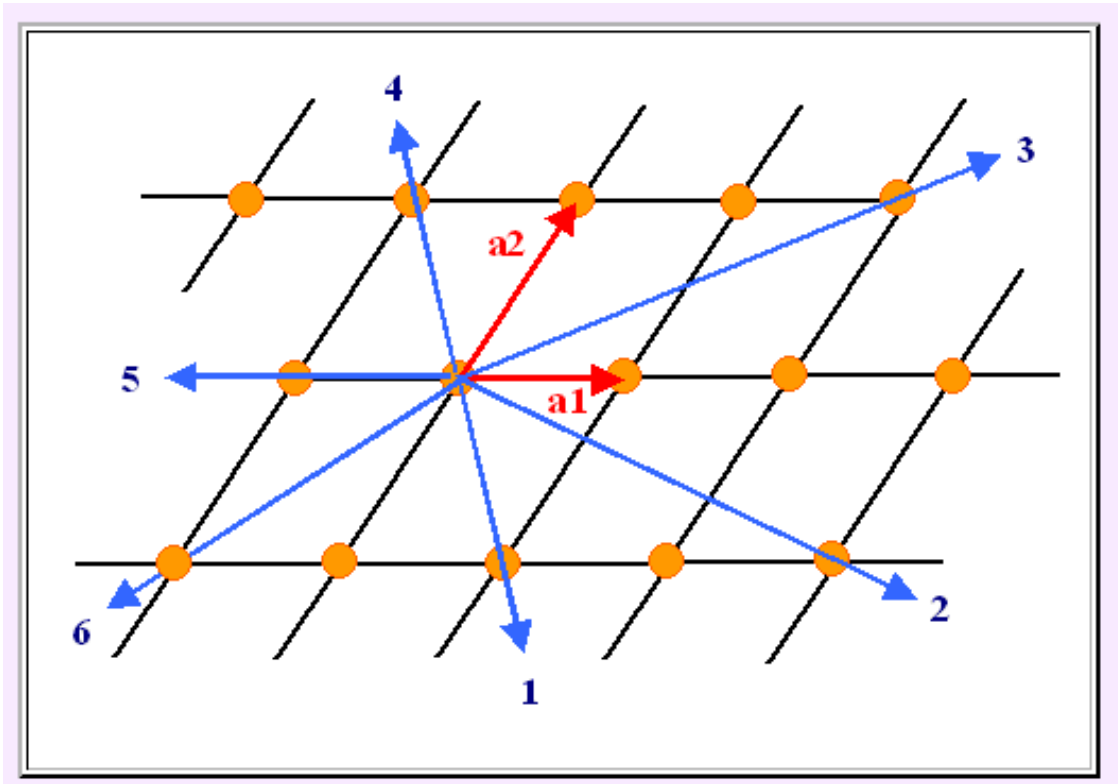
Richtungen und Ebenen im Gitter – *Miller Indizierung für Richtungen*

SS10/Fi

- § Eine *Richtung* in einem *Gitter* wird durch *drei ganze Zahlen* indiziert, indem:
- § Der Ursprung der **EZ** auf die gewünschte Richtung gelegt wird,
- § Ein Vektor in der gewünschten Richtung in kleinstmöglichen ganzzahligen Komponenten der Basisvektoren ausgedrückt wird
- § Das erhaltene Zahlentripel **uvw** in *eckige Klammern* **[uvw]** gesetzt wird wenn es sich um eine *spezifische* Richtung handelt, und in *spitze Klammern* **<uvw>**, wenn die *Gesamtheit aller kristallographisch gleichwertigen* Richtungen gemeint ist.

Richtungen und Ebenen im Gitter – *Miller Indizierung für Richtungen*

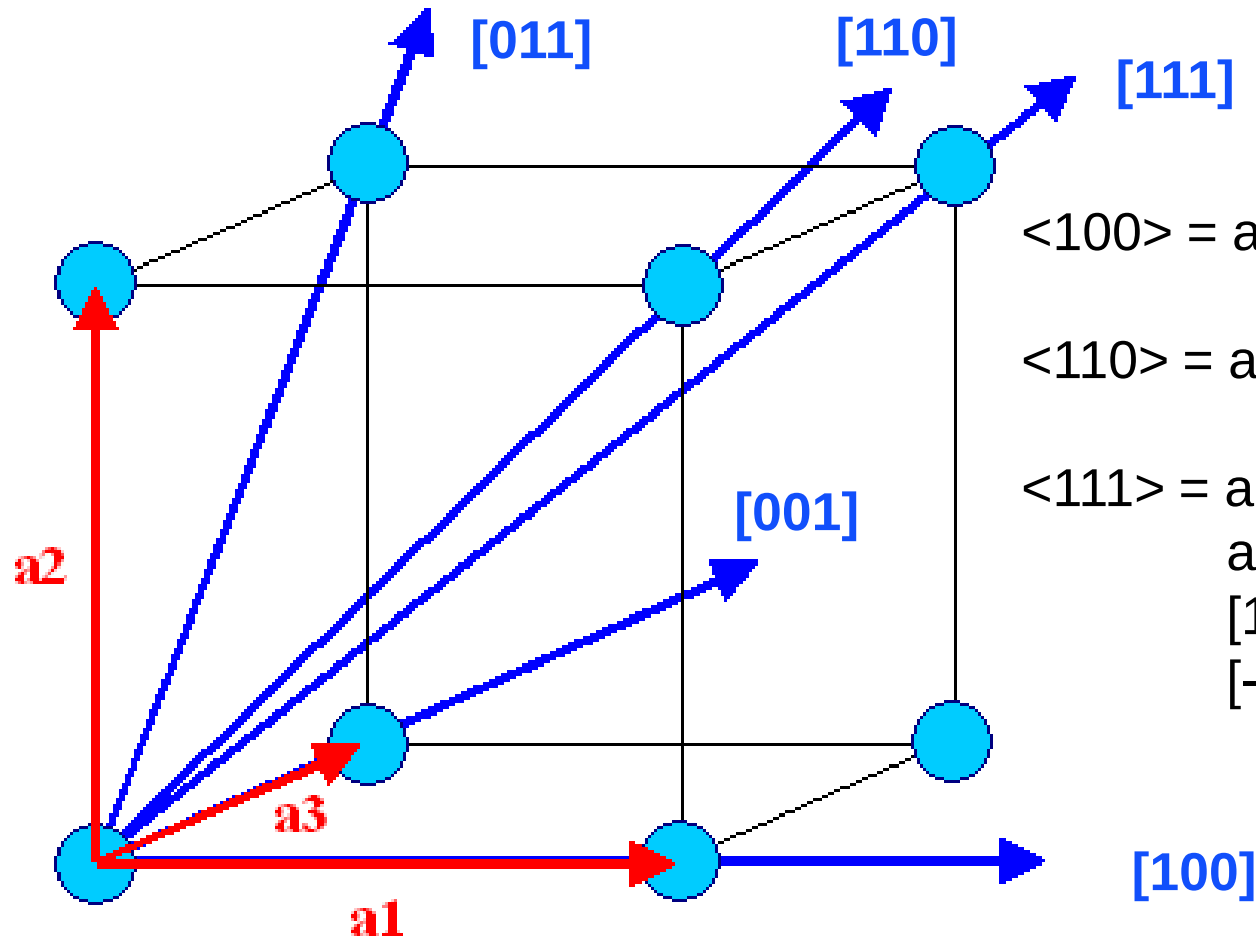
SS10/Fi



2-dimensionales Beispiel

Richtung 1	$[1,-1]$
Richtung 2	$[1,-1/3] = [3,-1]$
Richtung 3	$[1,1/2] = [2,1]$
Richtung 4	$[-1,1]$
Richtung 5	$[-1,0]$
Richtung 6	$[-1,-1]$

Beispiel: 3D kubisches Gitter



$\langle 100 \rangle$ = alle Würfelkanten

$\langle 110 \rangle$ = alle Flächendiagonalen

$\langle 111 \rangle$ = alle Raumdiagonalen, z.Bsp.
alle 8 Permutationen der Indizes:
[111], [11-1], [1-11], [-111],
[-1-11], [1-1-1], [-11-1], [-1-1-1],

Richtungen und Ebenen im Gitter –

Mathematische Beschreibung von Ebenen im Gitter

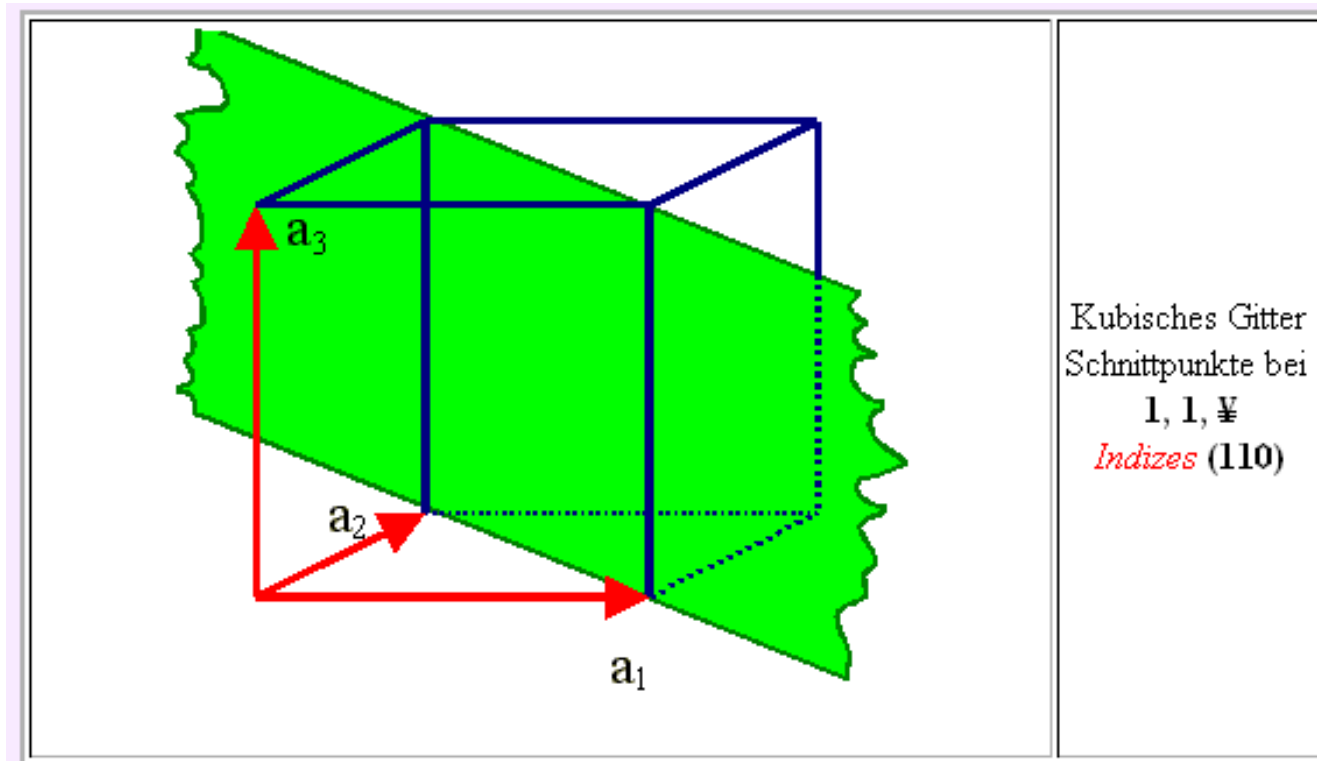
SS10/Fi

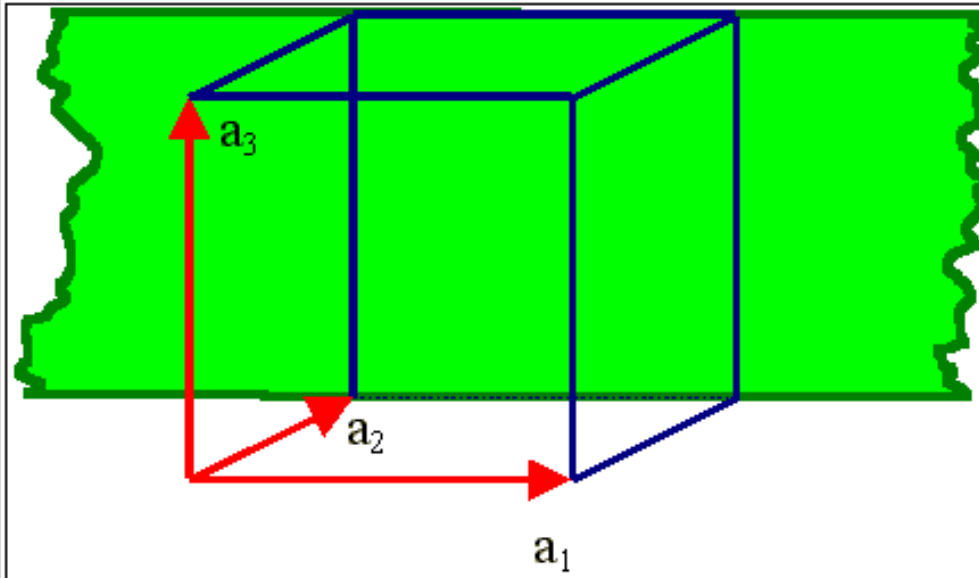
- § Eine *Ebene* in einem *Gitter* wird durch *drei ganze Zahlen* indiziert, indem
- § Der Ursprung der **EZ** *nicht* in die zu indizierende Ebene gelegt wird, sondern in eine *Nachbarebene*
- § Die *Schnittpunkte* der Ebene mit den Basisvektoren bestimmt werden (kein Schnittpunkt entspricht „ μ “)
- § Das erhaltene Zahlentripel *reziprok* dargestellt und die resultierenden Brüche durch Erweitern ganzzahlig gemacht werden; aus „ μ “ wird dadurch **0**.
Nicht erlaubt ist Kürzen, (Aus $1/2, 1/2, 1/2$ erhält man $2,2,2$ und nicht $1,1,1$).
- § Das Zahlentripel **hkl** wird in *runde* Klammern (**hkl**) gesetzt, wenn es sich um eine *spezifische* Ebene handelt, und in *geschweifte* Klammern {**hkl**}, wenn die Gesamtheit *aller kristallographisch gleichwertigen Ebenen* mit denselben Indizes gemeint ist.

Richtungen und Ebenen im Gitter – Mathematische Beschreibung von Ebenen im Gitter

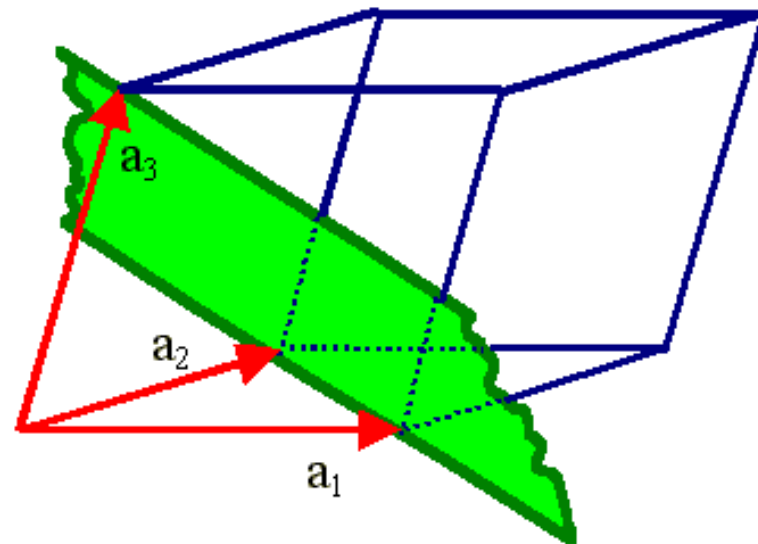
SS10/Fi

- § Alle äquivalente Ebenen haben die gleiche Indizierung. Das Kürzel **(112)** bezeichnet also nicht *eine* Ebene, sondern μ viele parallel laufende Ebenen; **{112}** mehrere Sätze μ vieler parallel laufender Ebenen





Kubisches Gitter
Schnittpunkte bei
 $\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}$
Indizes (010)



Triklines Gitter
Schnittpunkte bei
1, 1, 1
Indizes (111)

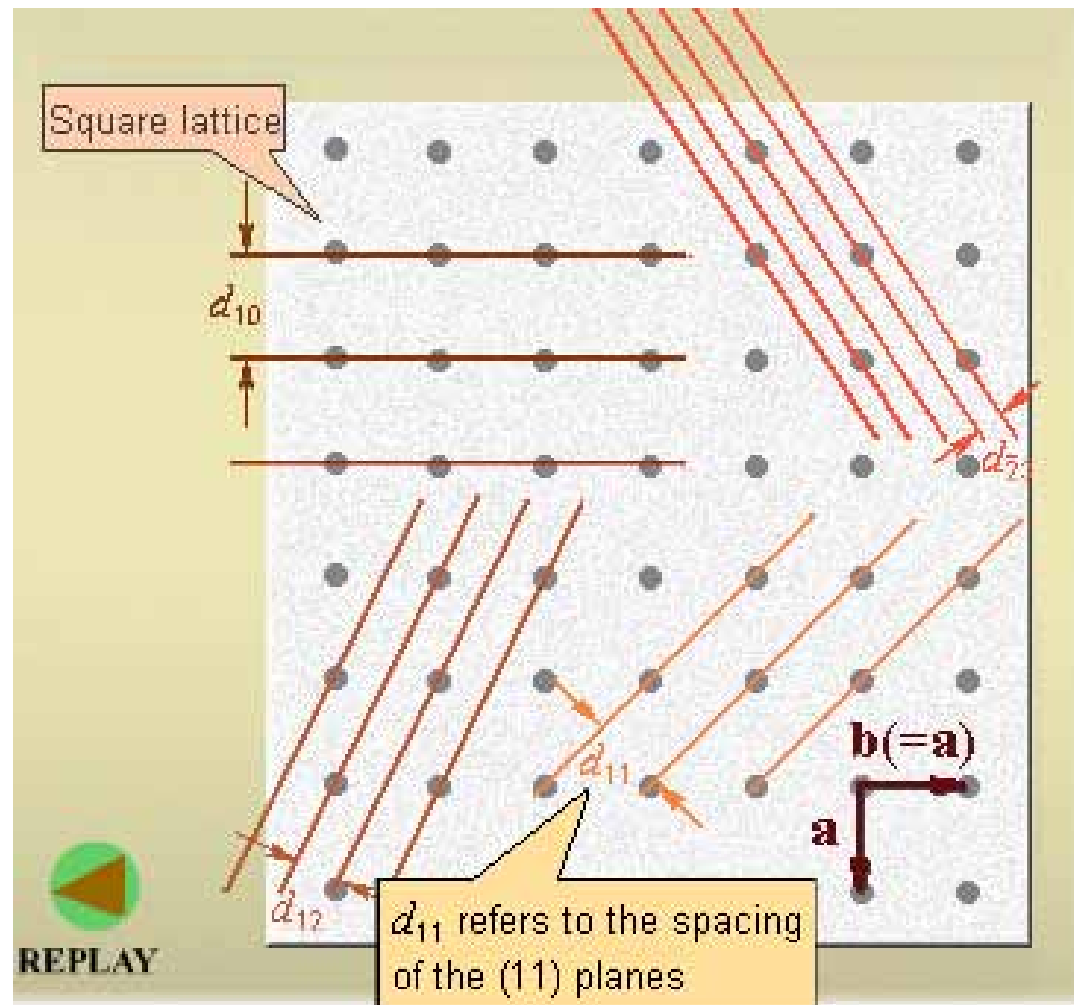
Rechnen mit Miller'schen Indizes

- § *Kristallographisch äquivalente* Richtungen und Ebenen haben immer den gleichen Satz an Miller Indizes.
- § Die Richtung **$\langle hkl \rangle$** steht immer **senkrecht** auf der Ebenen **(hkl)** . Die Abstände d_{hkl} zwischen zwei benachbarten Ebenen sind direkt aus den Indizes berechenbar.
- § Die Formeln für **nichtkubische Gittersysteme** können etwas kompliziert sein,
aber im kubischen Gittersystem gilt ganz einfach:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Rechnen mit Miller Indices

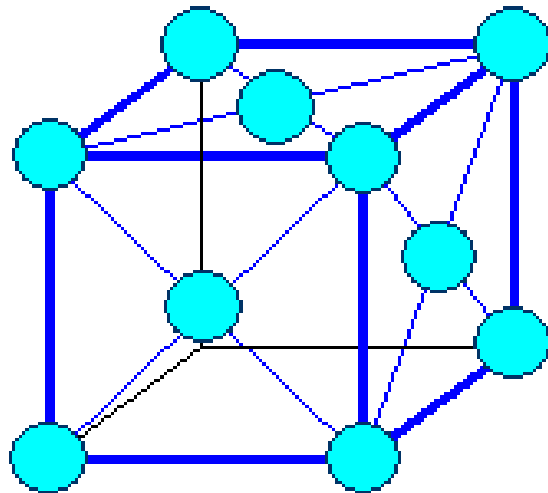
http://www.matter.org.uk/diffraction/geometry/planes_in_crystals.htm



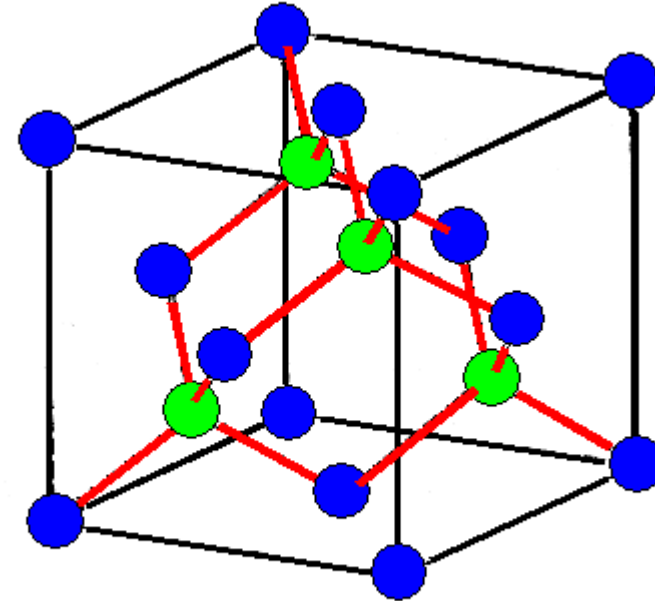
Die wichtigsten Gitter der Elementkristalle

fcc für "face centered cubic" oder kfz

SS10/Fi



fcc Bravais Gitter



Diamantstruktur

Wie immer, symbolisieren die Kugeln Atome, aber mit *viel zu kleinen* Durchmessern. Würde man die Durchmesser maßstabsgetreu zeichnen, wäre nicht mehr viel zu erkennen.

Die wichtigsten Gitter der Elementkristalle

fcc für "face centered cubic" oder kfz

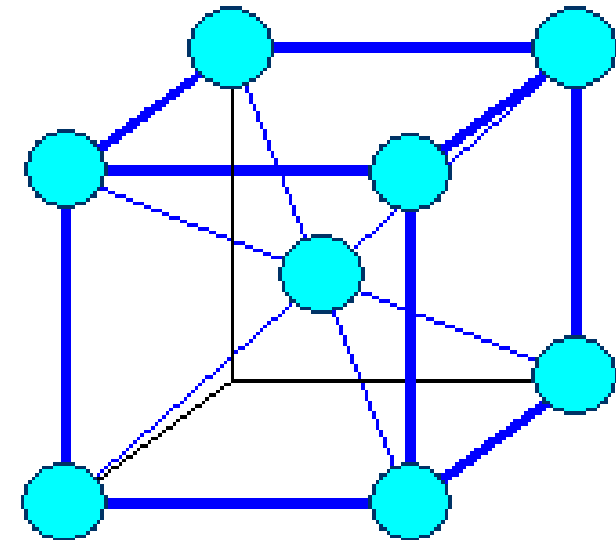
SS10/Fi

- § Mit *einem* Atom in der Basis, das dann auf den Ecken und Seitenmitten des Würfels sitzt,
z.B. **Al, Ni, Cu, Pd, Ag, Pt, Au**, sowie alle Edelgase
- § Mit *zwei* Atomen in der Basis, eines bei der Position **(0,0,0)** der Würfecke, das andere dann bei **(1/4, 1/4, 1/4)**,
Si, Ge, C (als Diamant) und **Sn** unterhalb von **13°C**.
Diese Kristallsorte hat einen eigenen Namen; man spricht vom "**Diamantgitter**" (obwohl man eigentlich "Diamantkristall" meint).
- § Etwa **30 %** aller Elemente kristallisieren in einem **fcc**-Gitter
- § Bei den Elementkristallen sind natürlich alle gezeigten Kugeln Atome derselben Sorte. Wir bekommen denselben Kristalltyp aber auch bei vielen technisch wichtigen Halbleitern, wenn wir die grünen oder blauen Kugeln als **Ga** oder **In**, und die jeweils anderen als **As, P** oder **Sb** betrachten.

Kubisch raumzentriertes Bravais-Gitter bcc ("*body centered cubic*") oder krz

SS10/Fi

- § Mit *einem* Atom in der Basis, das dann auf den Ecken und im Zentrum des Würfels sitzt, z.B. **K**, **Rb**, **Cs**, **V**, **Nb**, **Ta**, **Cr**, **Mo** und **W**.
- § Etwa **30 %** aller Elemente kristallisieren in einem **bcc**-Gitter



Eigenschaften der kubischen Gitter

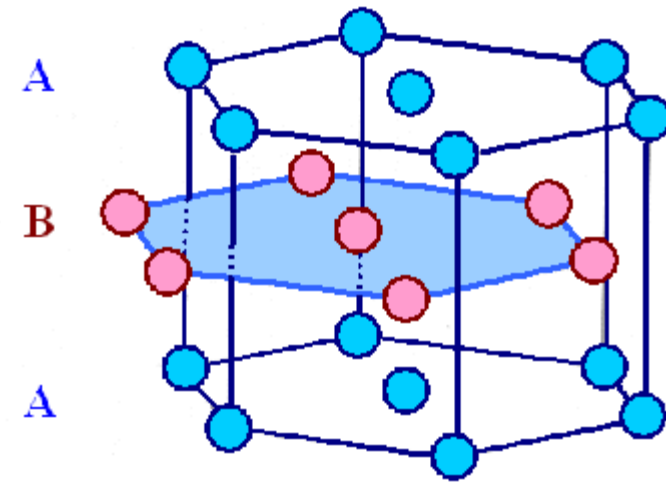
	einfach kubisch	raumzentriert	flächenzentriert
Volumen der gebräuchlichen Einheitszelle	a^3	a^3	a^3
Anzahl der Gitterpunkte pro Einheitszelle	1	2	4
Volumen der primitiven Zelle	a^3	$1/2 a^3$	$1/4 a^3$
Anzahl der Gitterpunkte pro Einheitsvolumen	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
Anzahl der nächsten Nachbarn	6	8	12
Abstand zweier nächster Nachbarn	a	$\sqrt{3}a/2 = 0.866a$	$a/\sqrt{2} = 0.707a$
Anzahl der übernächsten Nachbarn	12	6	6
Abstand zum übernächsten Nachbarn	$\sqrt{2}a$	a	a
Pakungsverhältnis	$1/6 \pi = 0,524$	$1/8 \pi \sqrt{3} = 0,68$	$1/6 \pi \sqrt{2} = 0,74$

Hexagonal dichteste Kugelpackung

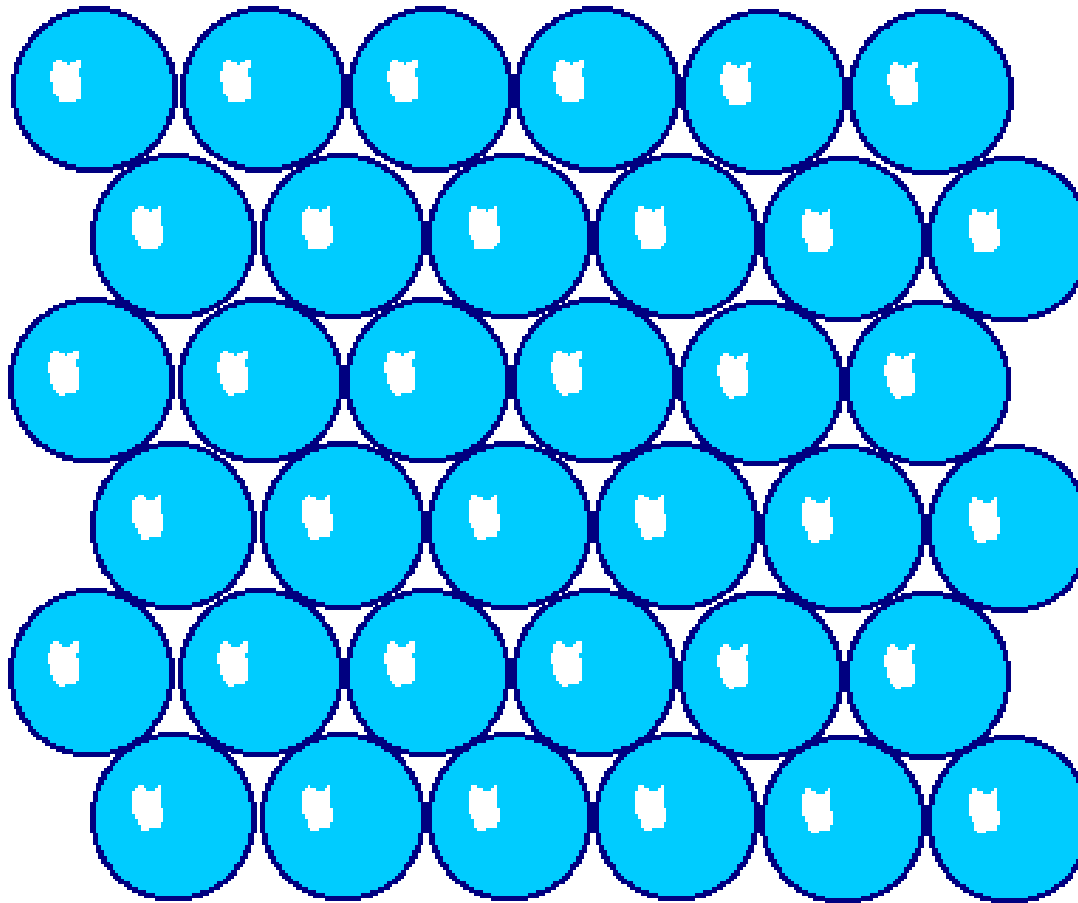
hcp für "hexagonal closed packed".

SS10/Fi

- § Die hexagonal dichteste *Kugelpackung* entsteht, wenn man auf ein hexagonales *Bravais-Gitter* mit einer Basis aus (mindestens) *zwei* gleichartigen Atomen kombiniert.
- § Das erste Atom sitzt bei $(0,0,0)$, das zweite bei $(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$; also auf halber *c*-Achsenhöhe im Zentrum eines Basisdreiecks.
- § Dass damit eine **dichteste Kugelpackung** entsteht, werden wir später sehen.
Im **hcp** - Gitter kristallisieren beispielsweise **Mg, Re, Co, Zn, Cd, C** (als Graphit) und **N**.
- § Etwa **35 %** aller Elemente kristallisieren in einem **hcp**-Gitter
- § Man erkennt: Der **hcp** - Kristall kann auch gebildet werden, wenn man identische **Atomebenen** oder auch **Kristallebenen** - aber nicht *Gitterebenen!* - in einer bestimmten Stapelfolge aufeinander packt.



Bravaisgitter und dichteste Kugelpackung

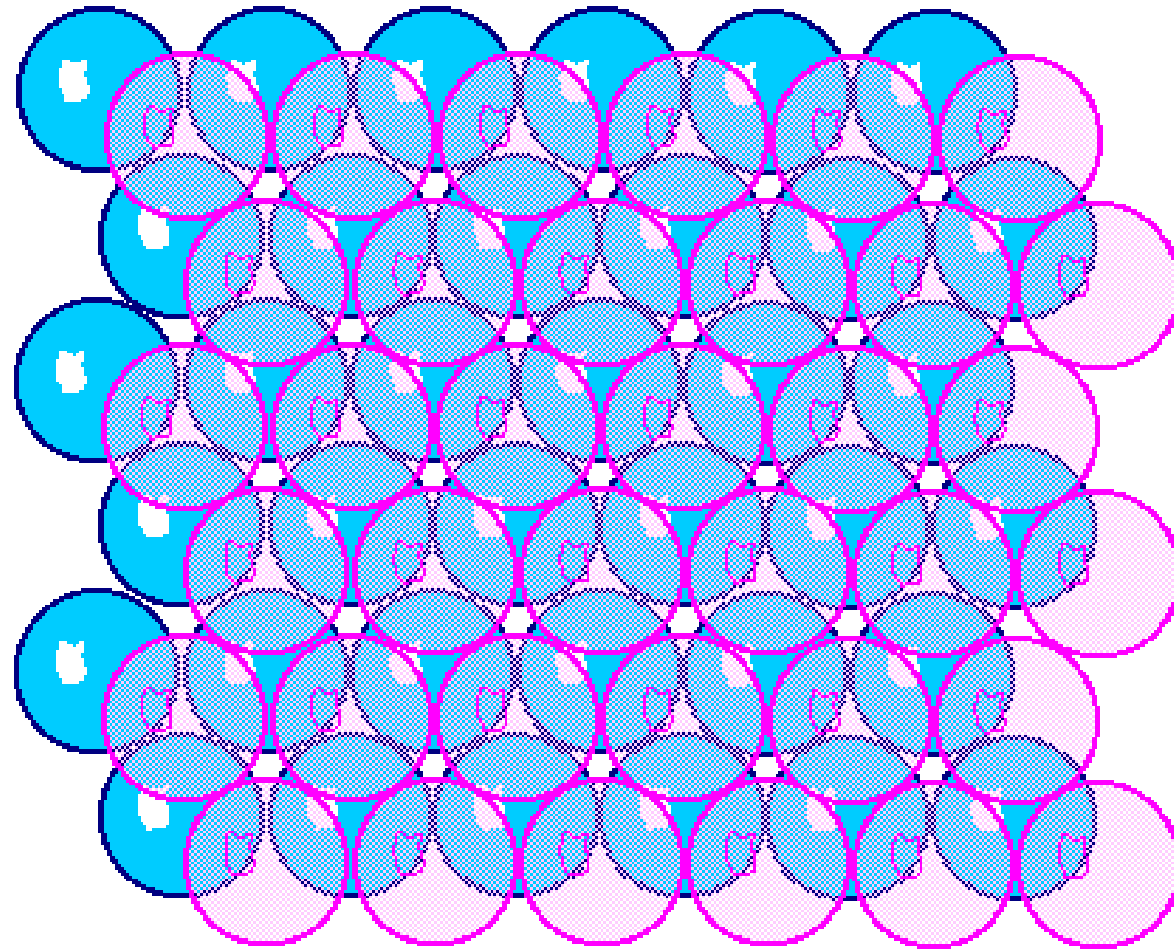


Dichteste Kugelpackung in der Ebene

Dichteste Kugelpackung mit zwei Ebenen SS19/Fi

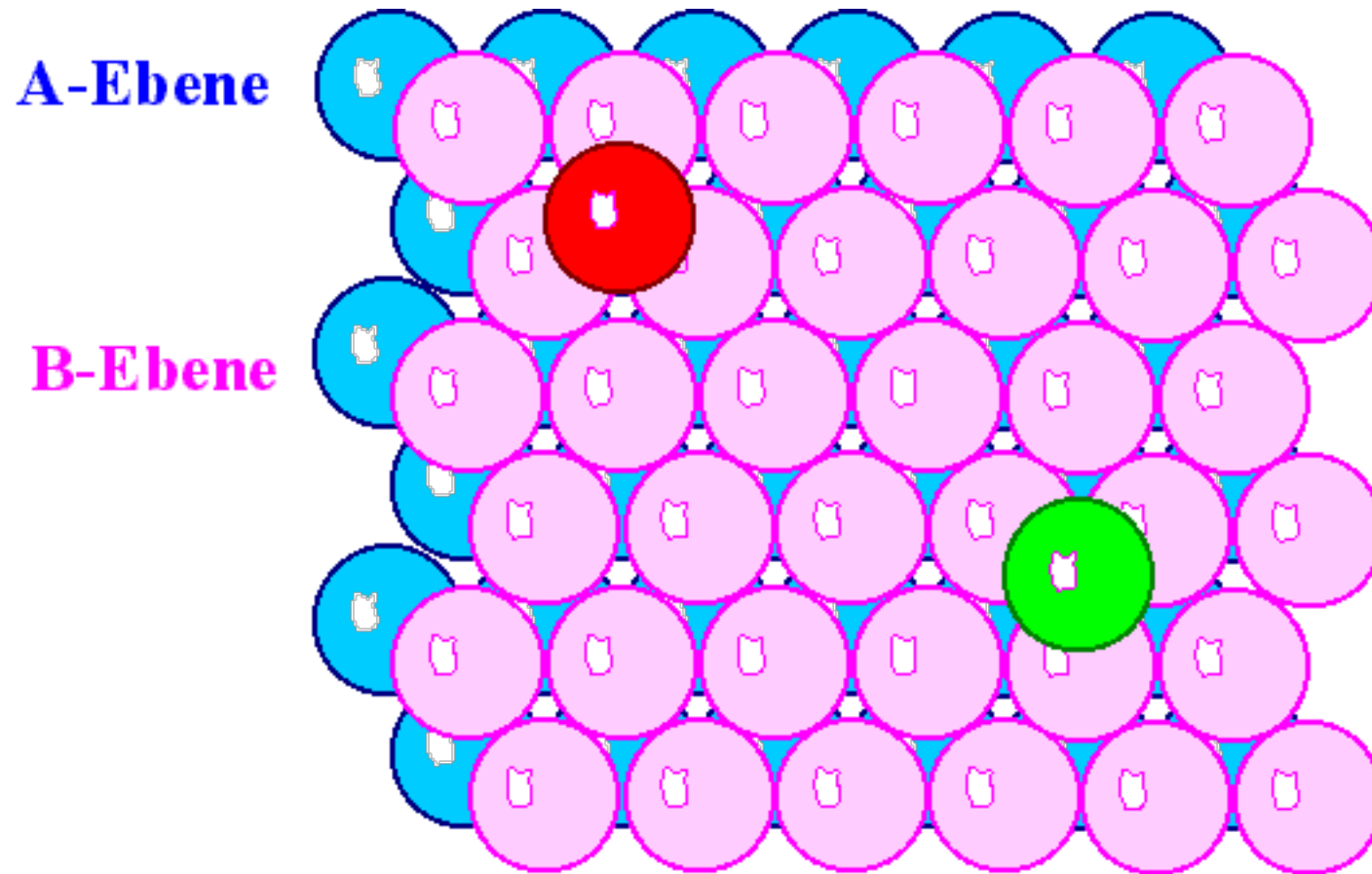
A-Ebene

B-Ebene



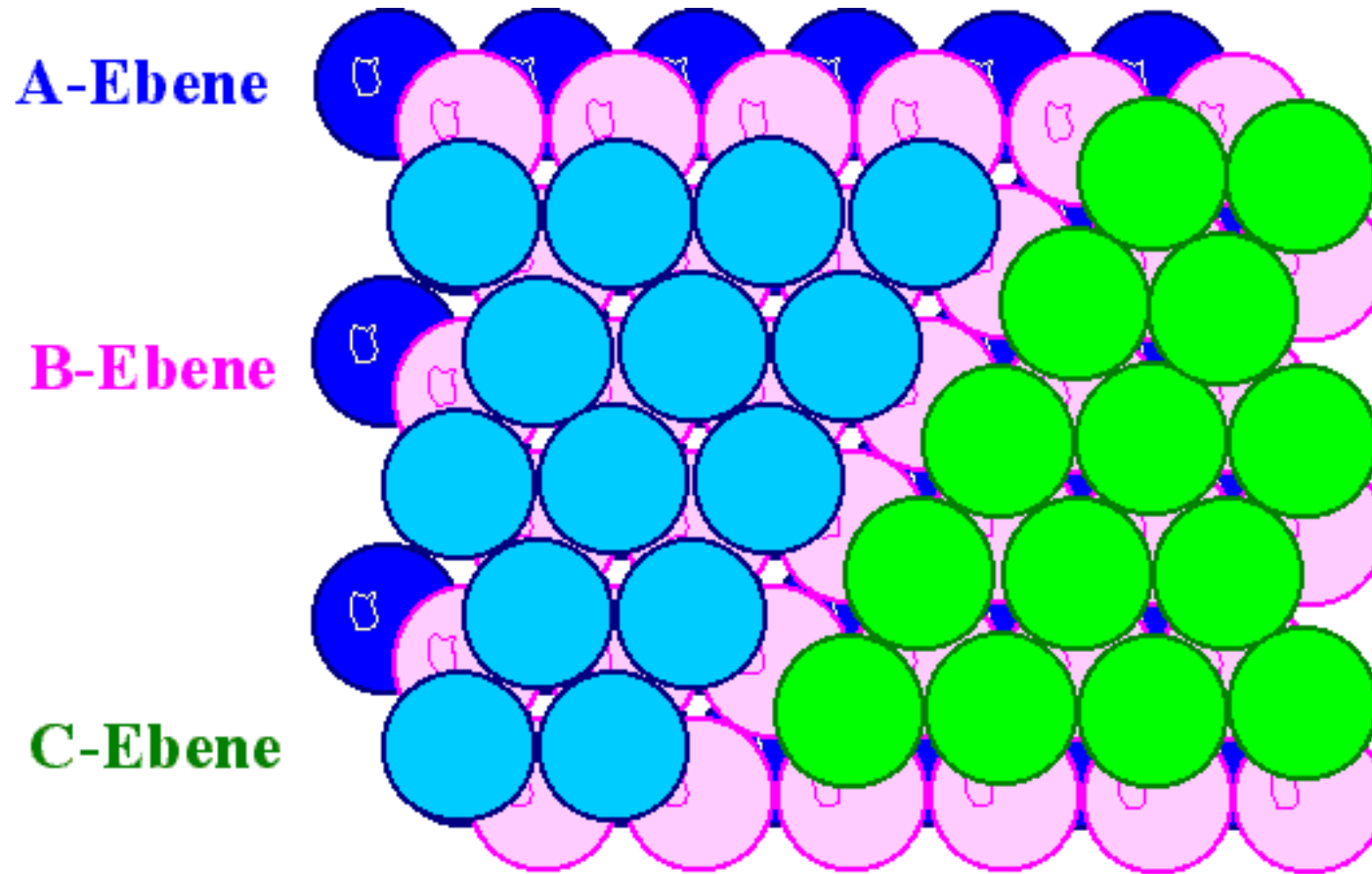
Wählen wir als *dritte Ebene wieder eine A-Ebene* und machen dann periodisch weiter, erhalten wir die **Stapelfolge: ABABABABA....**

Der Kristall den wir so erhalten, hat genau die vorher diskutierte hexagonal dichteste Kugelpackung (**hcp**),



Dichteste Kugelpackung mit zwei Ebenen und
mögliche Anfänge für eine dritte Ebene

Dichteste Kugelpackung mit den zwei möglichen Varianten der dritten Ebene



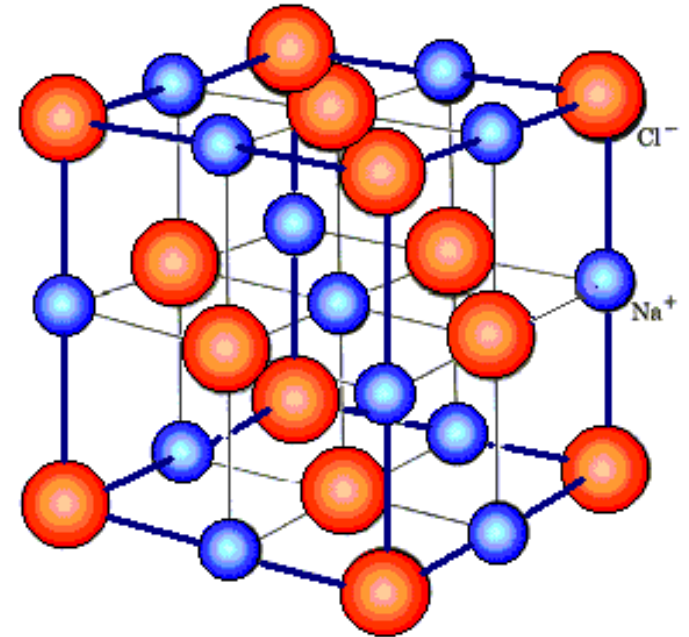
Wählen wir als *dritte Ebenen* aber eine **C-Ebene**, bekommen wir die Stapelfolge **ABC**.
Wenn wir diese Folge dann immer wieder wiederholen, erhalten wir **ABCABCABCABC...**,
- und dies ist genau das **fcc** Gitter wenn wir die Aufeinanderfolge der **{111}** Ebenen betrachten

Kristallstrukturen der Elemente

IA																		VIII			
1 H hcp																			2 He hcp		
IIA																IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	
3 Li bcc	4 Be hcp															5 B rhom.	6 C diam.	7 N kub.	8 O	9 F	10 Ne fcc
11 Na bcc	12 Mg hcp															13 Al fcc	14 Si diam.	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar fcc
		IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII		IB		IIB										
19 K bcc	20 Ca fcc	21 Sc hcp	22 Ti hcp	23 V bcc	24 Cr bcc	25 Mn kub.	26 Fe bcc	27 Co hcp	28 Ni fcc	29 Cu fcc	30 Zn hcp	31 Ga	32 Ge diam.	33 As rhom.	34 Se hex.	35 Br	36 Kr fcc				
37 Rb bcc	38 Sr fcc	39 Y hcp	40 Zr hcp	41 Nb bcc	42 Mo bcc	43 Tc hcp	44 Ru hcp	45 Rh fcc	46 Pd fcc	47 Ag fcc	48 Cd hcp	49 In tetr.	50 Sn diam.	51 Sb rhom.	52 Te hex.	53 I	54 Xe fcc				
55 Cs bcc	56 Ba bcc	57 La hex.	72 Hf hcp	73 Ta bcc	74 W bcc	75 Re hcp	76 Os hcp	77 Ir fcc	78 Pt fcc	79 Au fcc	80 Hg rhom.	81 Tl hcp	82 Pb fcc	83 Bi rhom.	84 Po sc	85 At	86 Rn				
87 Fr	88 Ra	89 Ac																			

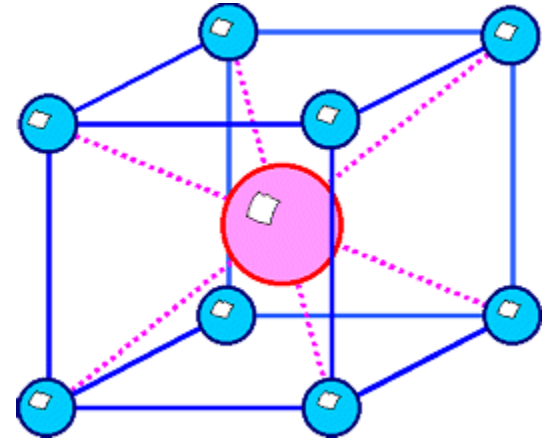
Die NaCl - Struktur

- § In der **Kochsalz** oder **NaCl**-Struktur kristallisieren viel Salze und Oxide, z.B. **KCl**, **AgBr**, **KBr**, **PbS**,... **MgO**, **FeO**, ...
- § Das Gitter ist *kubisch flächenzentriert*, mit *zwei* Atomen in der Basis; eines bei **(0,0,0)** und das andere bei **(1/2,0,0)**



Die CsCl - Struktur

- § In der Cäsiumchlorid -Struktur kristallisieren viele intermetallischen Verbindungen, aber auch Salze und andere zweiatomige Verbindungen, z.B. **CsCl**, **TlJ**, ... **AlNi**, **CuZn**, ...
- § Die **CsCl** - Struktur ist bemerkenswert, denn sie ist *kubisch primitiv*, aber mit zwei Atomen in der Basis: eines bei **(0,0,0)** und das andere bei **(1/2, 1/2, 1/2)**.
- § Ein beliebter Fehler ist, sie mit einem raumzentrierten Gitter zu verwechseln.



Die Diamant - Struktur

- § Wir kennen sie schon; das **fcc** - Gitter mit Atomen bei **(0,0,0)** und **(1/4, 1/4, 1/4)**.
- § Allgemein heißt dieser Kristalltyp auch **ZnS-** oder **Zinkblende Struktur** sowie (auf Englisch) gerne *Sphalerite Structure*.
- § Neben der Kohlenstoffform die man Diamant nennt, kristallisieren in dieser Struktur **Si** und **Ge**, aber auch technisch wichtige Kristalle wie **GaAs**, **InSb**, **GaP**, **GaAlAs** (mit **Ga** und **Al** beliebig austauschbar) Das folgende Bild zeigt die **ZnS Struktur**.
- § Die roten Atome könnten **In** sein, die blauen **Sb** - wir hätten Indiumantimonid. Die roten Atome könnten aber auch **Ga** oder **Al** sein, die blauen **As** - wir hätten **Ga_xAl_{1-x}As**.

