

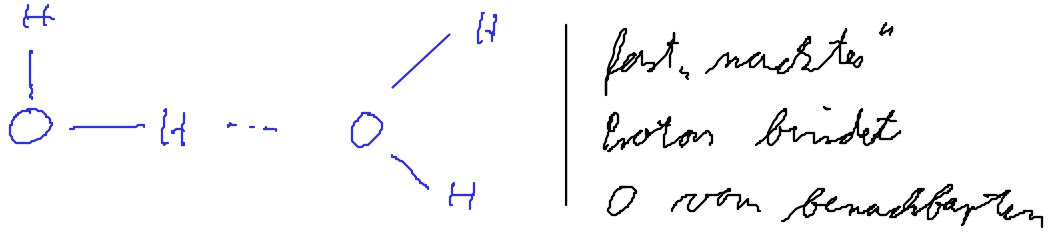
1.6 Wasserstoffbrückenbindung (H an F, N, O)

Kommt vor, wenn H an ein stark elektronegatives Atom gebunden wird (z.B. FON)

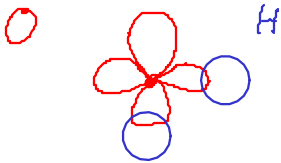
⇒ ionischer Anteil der Bindung

⇒ Anziehung zw. "H⁺-yon" und Nachbarmolekül

Bsp H₂O



H₂O über el. stat. Anziehung



2-fach besetztes p_z-Orbital

(viele versch. Eis-Formen)

H-Brückenbindung ist verantwortlich für die Anomalie des Wassers.

Festkörperphys: Eis interessant

H-Brückenbindung häufig in organischen Substanzen (in DNA - „Reißverschluss“ bei Doppelhelix)

1.7 Zusammenfassung

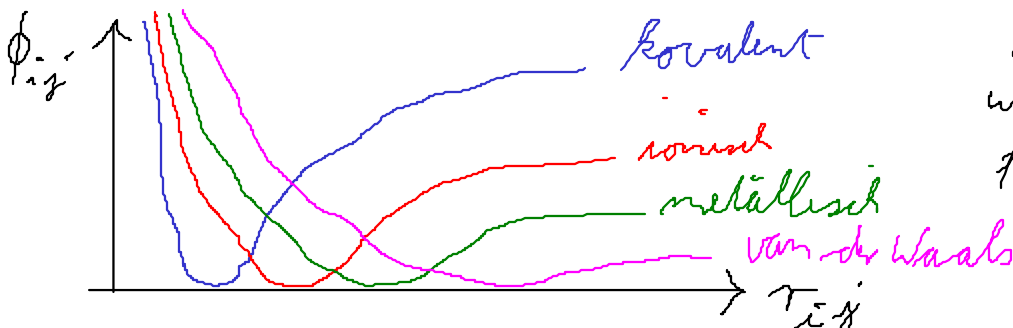
Bindungsenergie steigt el. stat. Natur

Bindungsenergie U_b variiert um 2 Größenordnungen

je kleiner die Bindungsenergie, desto flacher

die Potentialkurve und desto größer der

Atomabstand.



Kristallenergie wirkt sich auf freq. der Gitterschwing. aus.

⇒ große Unterschiede zw. versch. Bindungstypen
z.B. makroskop. Härte, elast. Eigenschaften
(z. Ableitung des Potentials $\hat{=}$ Elastizität)
 $F = kx, \quad F = -\frac{dU}{dx} \Rightarrow k = \frac{d^2U}{dx^2}$

Nochmal betont: hier nur idealisierte Bindungstypen
vorgestellt, in der Natur kommen häufig
Mischformen vor.

2. Kristallstrukturen

Chem. Bindungen von Atomen oder Ionen ergibt
wohldef. Abstände der Nachbarn.

Diese werden durch Minima der Gesamtenergie
bestimmt.

Für Festkörper aus gleichen Atomen wird ein Minimum
erreicht, wenn die Umgebung für jede Atom
gleich ist.

⇒ Periodische Struktur $\hat{=}$ Kristall

Bem: Amorpher FK: Freie Energie ist größer als
beim entsprechenden Kristall:

"metastabiler Zustand" (amorpher FK)

Aber auch im Kristall gibt es Abweichungen von
der idealen periodischen Struktur:

Oberflächen, Korngrenzen, in polykristallinen
Materialien, Verunreinigungen

(best. Kristalle 10^{12} Fremdatome unter $10^{23} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$)

z.B. Si (Diamant geht auch)

Gitterfehler (Leerstellen), Zwischengitteratome, Versetzungen

Hier: idealer Kristall

wir beschäftigen uns mit seinen geom. Eigenschaften
besonders symmetrien: "Kristallographie"

2.1 Punktgitter, Elementarzelle, Basis

Def Ein 3d "Bravais"-Gitter besteht aus allen
Punkten, die durch die Ortsvektoren

$$\underline{R} = m_1 \underline{a}_1 + m_2 \underline{a}_2 + m_3 \underline{a}_3$$

Dabei sind die Vektoren \underline{a}_i "fundamentale Gittervektoren"

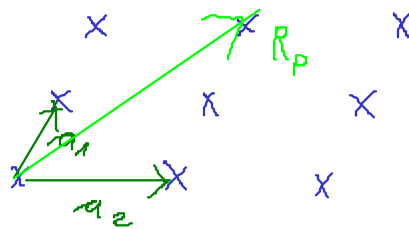
\underline{a}_i lin. unabhängig, m_i ganze Zahlen

R heißen Gittervektoren

Sprechweise: Die Vektoren \underline{a}_i spannen das
Gitter auf (Punktgitter, Translationsgitter)

Bsp. 2 dim. Translationsgitter mit fund. Gittervektoren

$$\underline{a}_1, \underline{a}_2, \quad \underline{R}_p = 2 \underline{a}_1 + \underline{a}_2$$



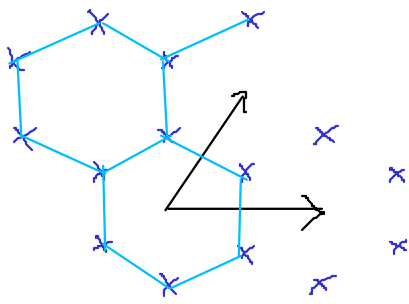
Das Gitter ist durch die
Festlegung der \underline{a}_i eindeutig
definiert, unabhängig von

der Wahl des Ursprungs

=> wichtige Eigenschaft: Translationsymmetrie

Translation um R überführt Gitter in
sich selbst.

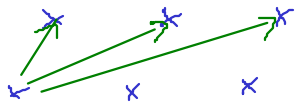
=> alle Gitterpunkte sind äquivalent, haben
identische Umgebung



Eckpunkte - kein Bravais-Gitter
 so ist es wieder ein Bravais-Gitter

Für ein gegebenes Gitter ist die Wahl der fundamentalen Gittervektoren nicht eindeutig.

Bsp. 2-d Gitter mit versch. Gittervektoren



Aber: Für viele häufig vorkommende Gittertypen durch Konvention festgelegt.

Man kann jedem Gitterpunkt ein Volumen zuordnen, so dass bei period. Aneinandersetzung dieses Vol. das Gitter lückenlos ausfüllt.

Def Die zelle, die diese Einheitsvolumen V_E einschließt, heißt primitive Einheitszelle oder Elementarzelle.

(zusammenfassung Folie)

Bsp 2-d Gitter

Auch hier wieder viele Möglichkeiten der Wahl der Einheitszelle.

Naheliegende Wahl: Parallelepiped aus den fundamentalen Gittervektoren \underline{a}_1

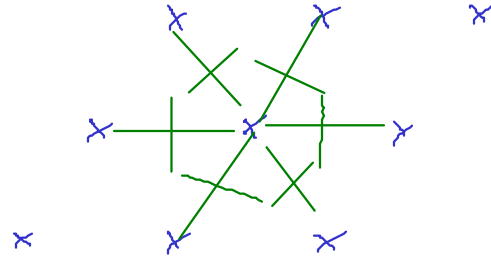
$$V_E = | \underline{a}_1 \cdot (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3) |$$

Für prim. Einheitszellen ist V_E unabhängig von der Wahl der Zelle, V_E enthält dann genau einen Gitterpunkt

Eine besonders häufig benutzte primitive
 Einheitszelle ist die Wigner-Seitz-Zelle.
 Die WS-Zelle ist der Teil des Raumes, der
 dem gegebenen Gitterpunkt näher ist als
 allen anderen.

Konstruktion:

- ① Zeichne Verbindungen
 vom geg. Gitterpunkt
 zu Nachbarn
- ② Zeichne Mittelsenkrechte (bzw. Ebene)
- ③ kleinste abgeschlossenes Vol. ist Wigner-Seitz-Zelle



Bisher: Gitter kann gelernt als abstraktes Gebilde
 aus math. Punkten bzw. Vektoren.

Nun wollen Kristalle beschreiben, d. h.
 physikalische Struktur aus identischen
 Bausteinen (Atome, Ionen, Moleküle)

Dazu brauchen wir

1. Gitterpunkte
2. Anordnung der Bausteine innerhalb der
 Einheitszelle "Basis"

Kristallstruktur = Gitter + Basis

Bsp. 1. 2 dim. Gitter + Basis

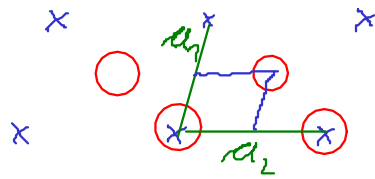
2. Wabengitter

Zur Beschreibung der Kristallstruktur braucht man also
 außer den fundamentalen Gittervektoren \underline{a}
 noch weitere Lageparameter, die die Lage der Atome in

der Einheitszelle beschreiben.

$$\underline{r}_\alpha = \lambda_\alpha \underline{a}_1 + \mu_\alpha \underline{a}_2 + \nu_\alpha \underline{a}_3 \quad 0 \leq \lambda, \mu, \nu \leq 1$$

α Index für versch.
Atome



$$\pi_1 = 0, \quad \pi_2 = \frac{1}{2} a_1 + \frac{1}{2} a_2$$

Es gibt unendlich viele Gitter: a_i sind bel.

d.h. Länge und Winkel sind beliebig

Klassifizierung nach Symmetrie

Symmetrieeigenschaften: Menge der Symmetrieeoperationen
(Zähligkeit der Drehachsen)

Es gibt keine 5-zählige Achse