

2.2 Symmetrieeigenschaften des Kristalls

Symmetrieeoperationen:

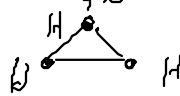
1. Translation (im Gittervektor beschreiben)
2. Rotation um $2\pi, \frac{2\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{4}, \frac{2\pi}{6}$
"Zählung Einheits des Drehwerts", 2, 3, 4, 6
3. Spiegelung in
4. Inversion π Inversionszentrum $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$
(= Rotation um 180° und Spiegelung an Ebene \perp Drehachse)
5. Drehinversion $\bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$
Einzeloperationen nicht notwendigerweise Symmetrieelemente
6. Schraubung } hier bleibt kein Punkt fest
7. Gleitspiegelung }

Def: Die Gesamtheit der Symmetrieeoperationen, die eine gegebene Anordnung von Gitterpunkten des ∞ -ausgedehnten Gitters oder Atom (eines Moleküls, einer Basis) invariant lassen und bei denen mindestens 1 Punkt fest bleibt heißt Punktgruppe.

Bem: Basis hat meist andere Symmetrie als Gitter, deshalb ist Unterscheidung wichtig. Die Menge aller Symmetriep. 2-5 für geg. Gitter oder Basis erfüllen die Def einer math. Gruppe (abgeschlossen, Einselement, Assoziativgesetz) nicht notwendigerweise kommutativ

Bestimmung der Punktgruppe:

• durch erzeugende Elemente oder "Schönflies-Notation"

Bsp: NH_3 -Molekül  Punktgruppe $3m$ bzw. " C_{3v} "

Def Raumgruppe: volle Symmetriegruppe einschließlich Translation, Schraubung und Gleitspiegelung

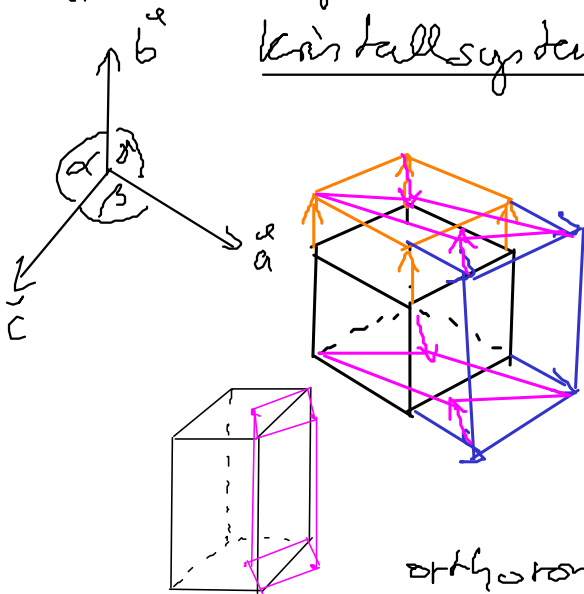
3.2 Fundamentale Gittertypen („Bravais-Gitter“) 1845 Bravais

7 Gitterpunktgruppen und 14 Gitterraumgruppen

„Kristallsysteme“

„Bravais Gitter“

Kristallsystem höchste Symmetrie: Würfel (kubisches System)



kubisch
↓
tetragonal
↓
orthorombisch
↓
monoklin
↓
triklin

hexagonal → trigonal (Rhomboeder) keine Rautendihedrale

orthorombisch

2.4 Kristallographische Punktgruppen

Kristallstruktur = Gitter + Basis

Zu jeder Punktgruppe gibt es verschiedene kristallographische Punktgruppen oder „Kristallklassen“.

Beispiel: kubisches System hat 5 kristallographische Punkte

Kristallographische Punktgruppen erhält man durch sukzessive Erniedrigung der Symmetrie, so lang noch Symmetrieelemente übrig bleiben, die nicht in der niedrigsten Gitterpunktgruppe fallen:

insgesamt 32 kristallogr. Punktgruppen

kombiniert mit Gitter und Gruppe: 230 Raumgruppen der Kristallstruktur

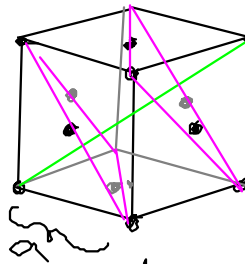
2.5 Einfache Kristallstrukturen

Die meisten Elemente (und sehr viele Verbindungen) kristallisieren in einer dieser Strukturen:

- kubisch-flächen-zentriert (fcc face-central cubic) 24
- kubisch-raum-zentriert (bcc body-central cubic) 14
- hexagonal dichteste Packung: (hcp hex-close packed) 26

[Einfach kubisch: in $\alpha - P_0$]

Kubisch flächenzentriertes Gitter:



4 Atome pro Einheitszelle

primitive Einheitszelle: Rhomboeder mit $V = \frac{a^3}{4}$

Abstand nächster Nachbar $a\sqrt{2}$

Anzahl nächster Nachbar (Koordinationszahl): 12

Dichtest gepackte Ebene: (⊥ Raumdiagonale)

Stapelfolge ABCABC...



Symmetrien: Spiegelungen

Inversion, Drehachsen 4, 3, 2

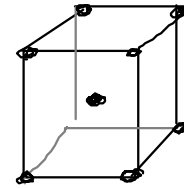
⇒ Punktgruppe $\frac{4}{m} \frac{3}{m} \frac{2}{m}$, oder O_h (O_h wie Octaeder)

Beispiele: Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al, ...

Kubisch-raumzentriertes Gitter

2 Atome pro Einheitszelle

primitive Einheitszelle: Rhomboeder $V = \frac{a^3}{2}$



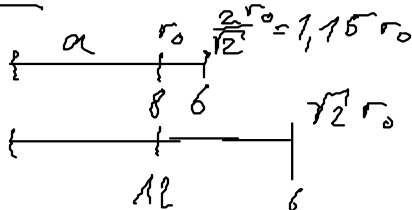
Abstand nächster Nachbar $\frac{1}{2} \sqrt{3} a$

Koordinationszahl: 8

Beispiele: Ba, V, Nb, Ta, W, Fe

Frage: Warum kristallisieren viele Metalle (mit ungerichtetem Bindungen) in bcc-Struktur und nicht fcc?

Erklärung: Abstand übernächster Nachbar r_2



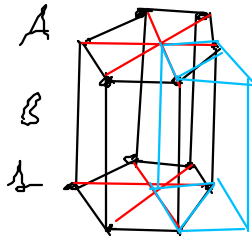
bcc

fcc

⇒ effektive Koordzahl 14

Hexagonal dichteste Packung (hcp)

Dichteste gepackte Ebenen, also Stapelung ABAB ...



kein Bravais Gitter

Basis besteht aus 2 Atomen

Beispiel: Zn, Cd, Be, Mg, Ru, Os

Koord. Zahl: 12