

VORLESUNG MATERIALWISSENSCHAFTEN

138.016

Ernst Bauer
Christoph Eisenmenger-Sittner
Josef Fidler

Institut für Festkörperphysik, TU Wien

3. Okt. 2007

Vorlesungsinhalt

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?



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

Materialwissenschaft

ist die Wissenschaft von den

Eigenschaften der Materialien

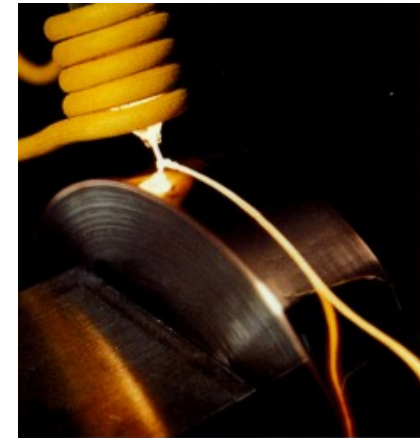
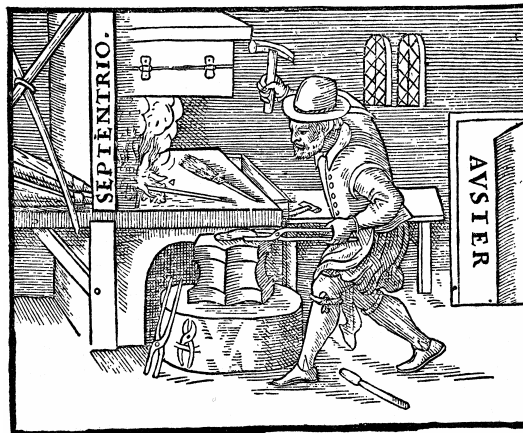
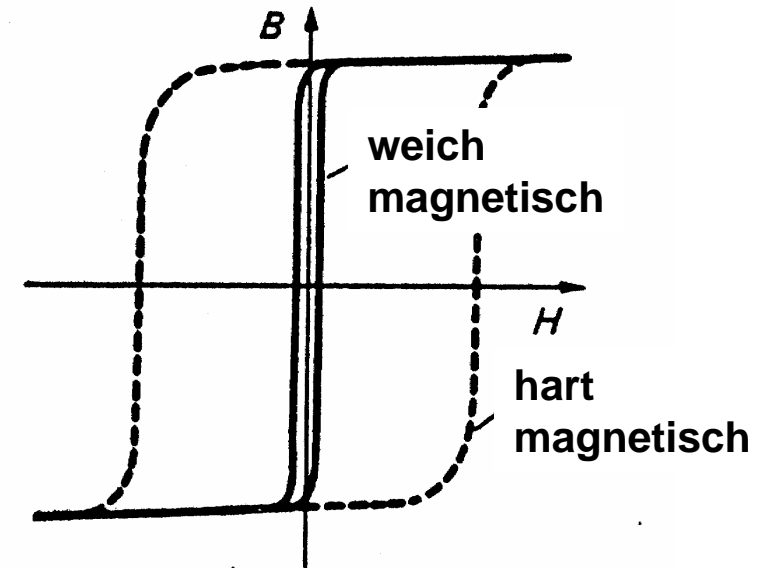
den **Ursachen** dieser Eigenschaften
(physikalischen, chemischen, wirtschaftlichen oder sonstigen),
und damit der wissenschaftlich begründeten

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

Materialherstellung

und

Materialanalyse



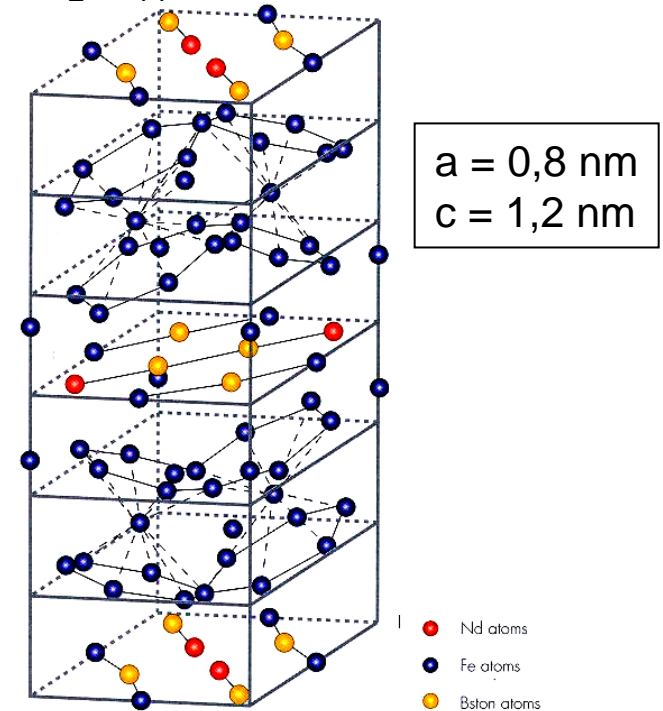
Materialphysik

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

mechanische
elektrische
magnetische
thermische

.....

$\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, tetragonale EZ











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

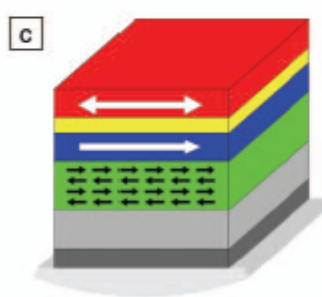
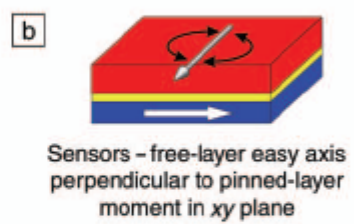
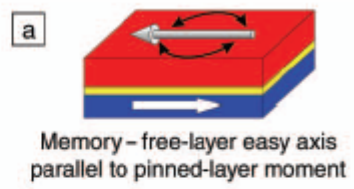
Daraus folgt das wichtige Ziel des Materialwissenschaftlers:
die **zeitliche Änderung der Eigenschaften**
(Materialermüdung, Korrosion, Auflösung von Materialverbänden,...)

Funktionswerkstoff

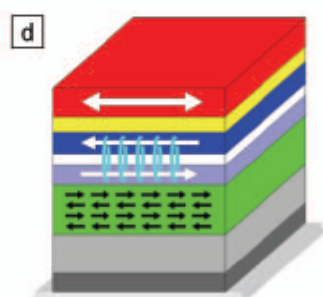
„Spin-engineered magnetic devices“
 S. Parkin, MRS Bulletin, Vol.31, May 2006, 389.

Spin-Polarized Current in Spin Valves and Magnetic Tunnel Junctions

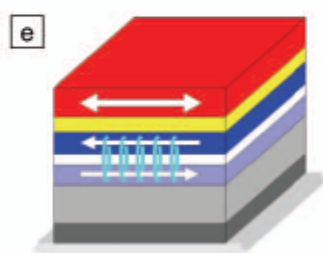
-  Magnetic free layer
-  Magnetic pinned layer
-  Spacer layer – metallic or tunnel barrier
-  Ru spacer layer
-  Antiferromagnetic exchange-bias layer
-  Underlayers
-  Seed layer
-  Substrate



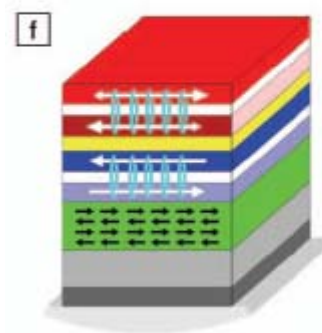
Exchange-biased pinned layer



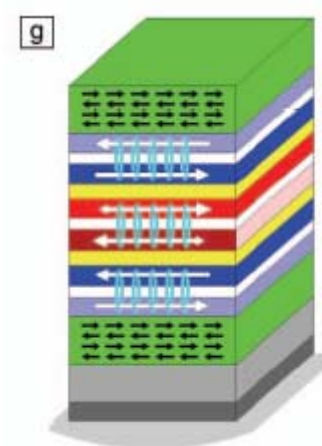
Flux-closed "artificial antiferromagnet" exchange-biased pinned layer



Flux-closed "artificial antiferromagnet" unbiased pinned layer



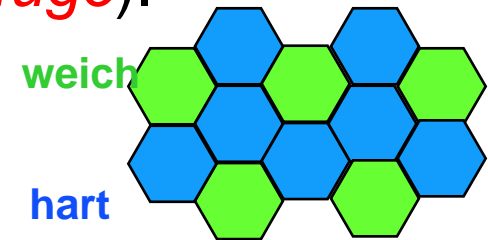
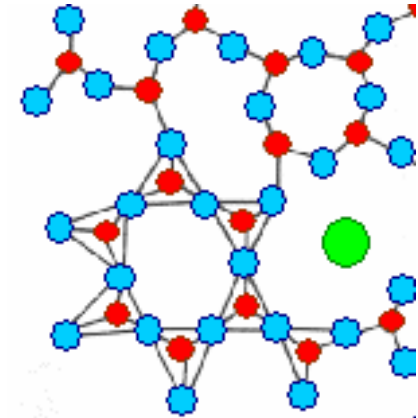
Flux-closed "artificial antiferromagnet" pinned layer and free layer



Double junction: center flux-closed free-layer structure; 2 barriers, 2 flux-closed exchange-biased pinned-layer structures

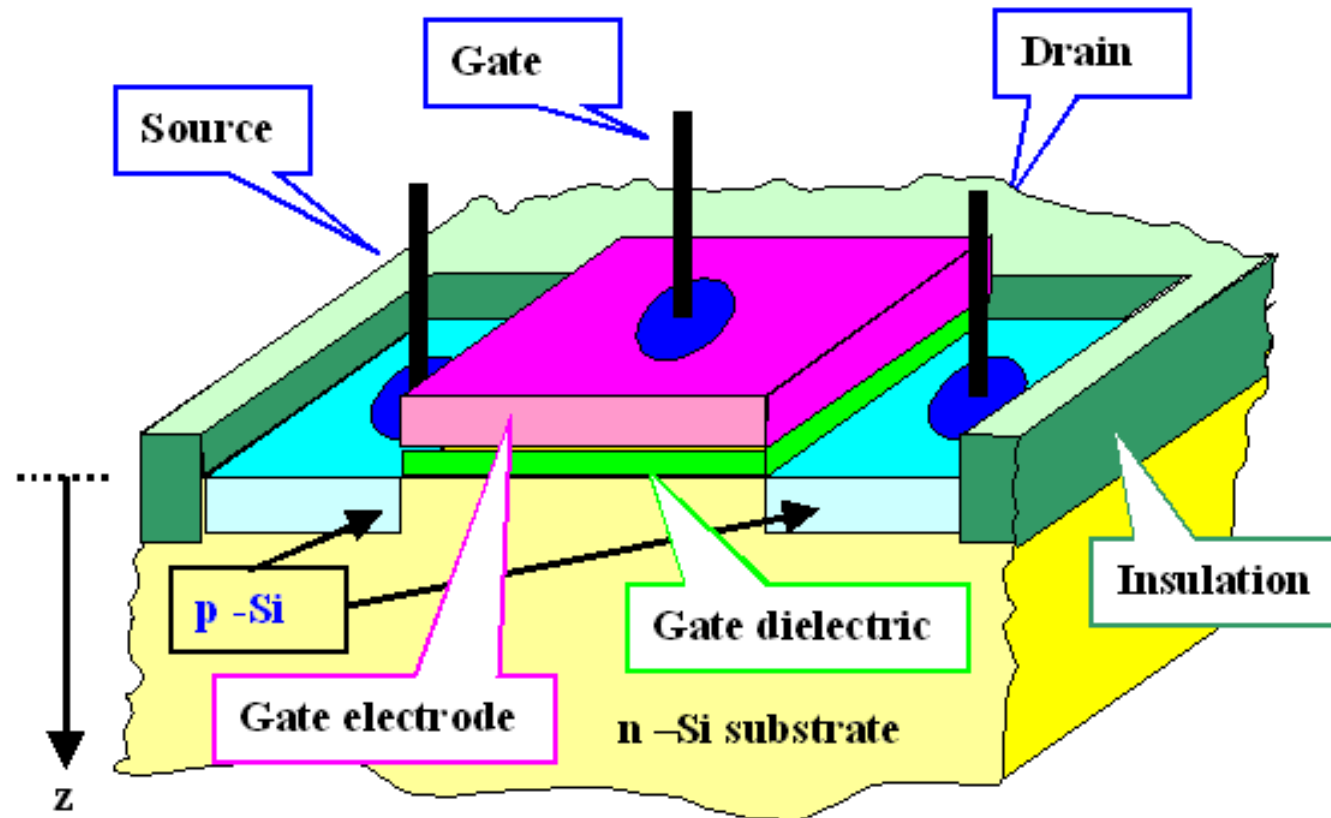
Wichtige Fragen bei Materialeigenschaften

- Was für *Atome* beteiligt sind (das "*Material*").
- Wie sind sie untereinander verbunden (die Natur der *chemischen Bindung*).
- Wie das Material atomar aufgebaut ist (das *Gefüge*).
- Welche *Temperatur* vorliegt.
- Welche weiteren *Parameter*, die wir noch gar nicht beachtet haben (z. Bsp. der Druck), auch noch Einfluss haben könnten.



Beispiel:

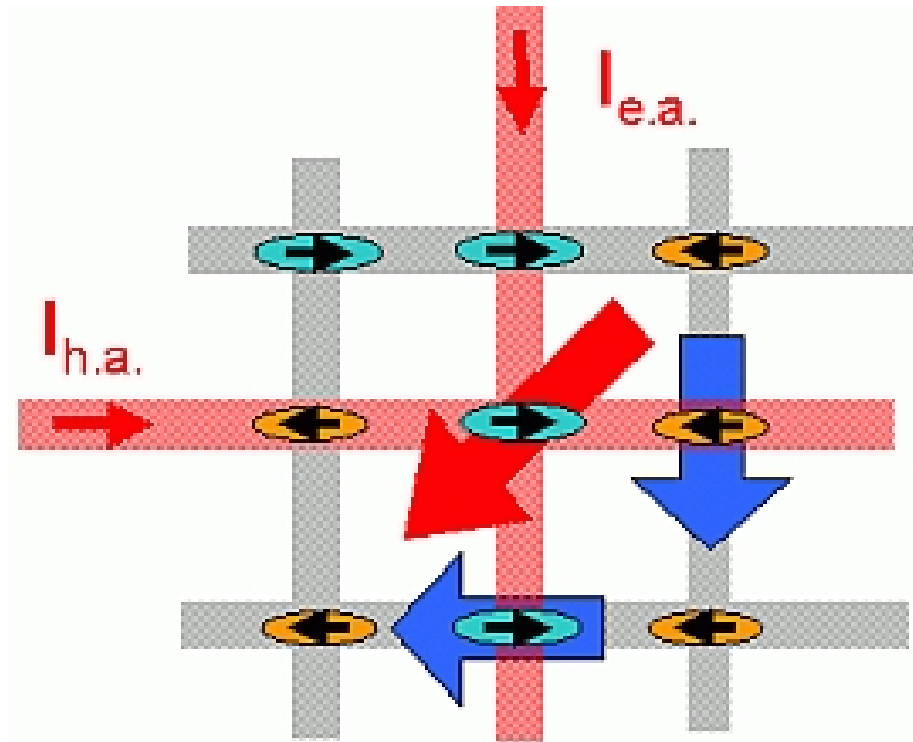
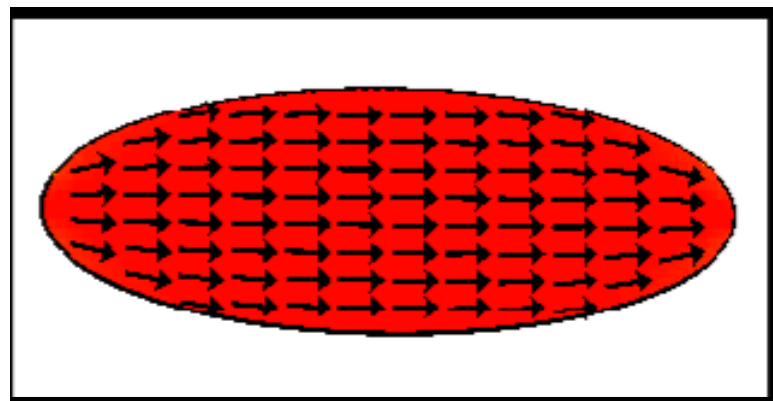
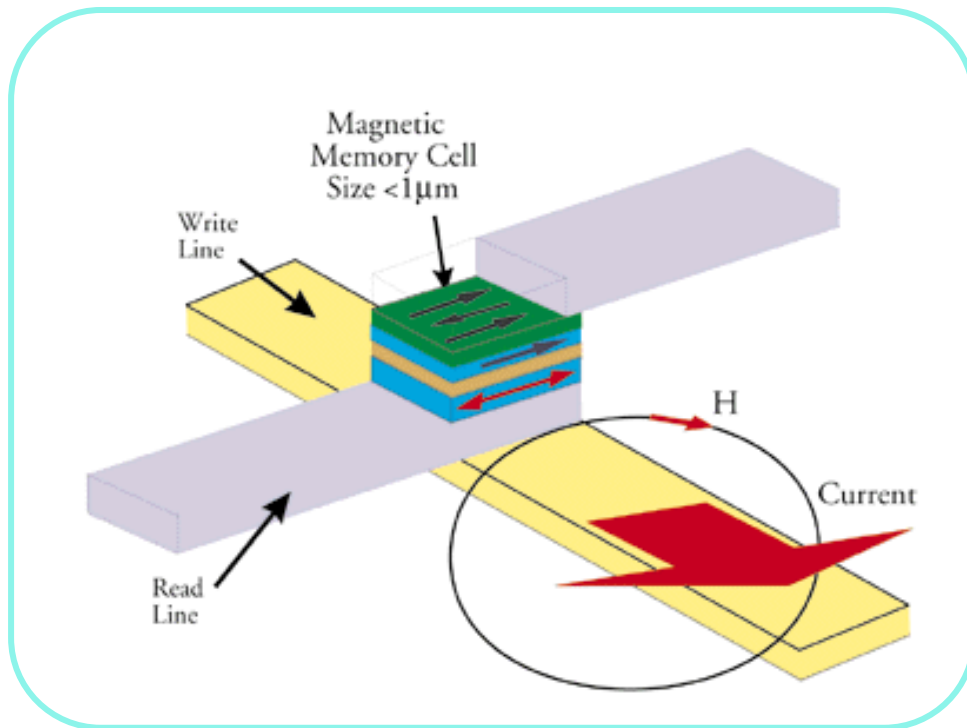
MOS Transistor



Wie kommt Phosphor oder Bor ins Silizium?

- Es muss ja irgendwie von außen ins Kristallinnere kommen, wenn wir das systematisch machen wollen.
- Der Si-Kristall besteht aber aus Si Atomen, die so dicht wie möglich zusammensitzen und nur mit großem Energieaufwand zu trennen sind (dann schmilzt der Kristall). Wie kommt ein Phosphoratom da rein - und das Si Atom, dessen Platz es einnimmt, raus?
- Man setzt **Si einem phosphorhaltigen Stoff** aus, macht die Anordnung für einige Zeit heiß, und analysiert dann, was geschehen ist. War die Temperatur hoch genug (ca. 1000°C) und verfügt man über entsprechende Analysemethoden, wird man finden, dass kleine Mengen Phosphor in den Si Kristall eingedrungen sind. Der Konzentrationsverlauf als Funktion der Tiefe, der Temperatur, der Zeit usw. wird Regeln folgen
- **der gesammelte Erfahrungsschatz, mathematisch aufbereitet, reicht aus, um Vorhersagen machen zu können**, wie man den Prozess gestalten muss, um neue Parameter - z.B. eine andere Phosphorkonzentration - zu erhalten.

Beispiel: **M**agnetic **R**andom **A**ccess **M**emory

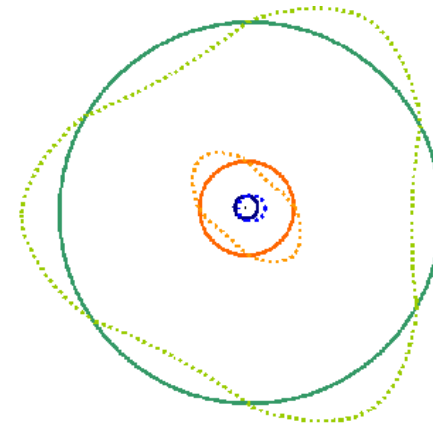


	45° field (strong enough to switch)
	Easy axis field (half selected cell)
	Hard axis field (half selected cell)

Bohr'sches Atommodell

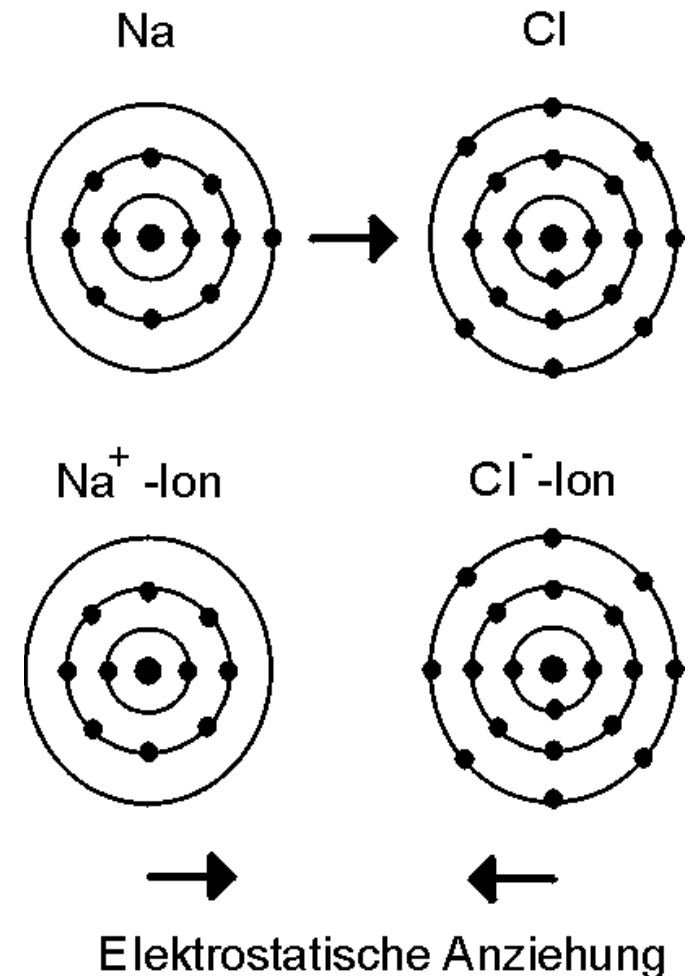
- **Niels Bohr** postulierte **1913** ein "Axiom", das dazu führt, dass es einige wenige stabile Bahnen des Elektrons um den Atomkern gibt, d.h. Bahnen, auf denen das Elektron *keine* Energie verliert. Zu jeder dieser *erlaubten Bahnen* gehört eine bestimmte Energie, die sich als Summe der kinetischen 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.

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



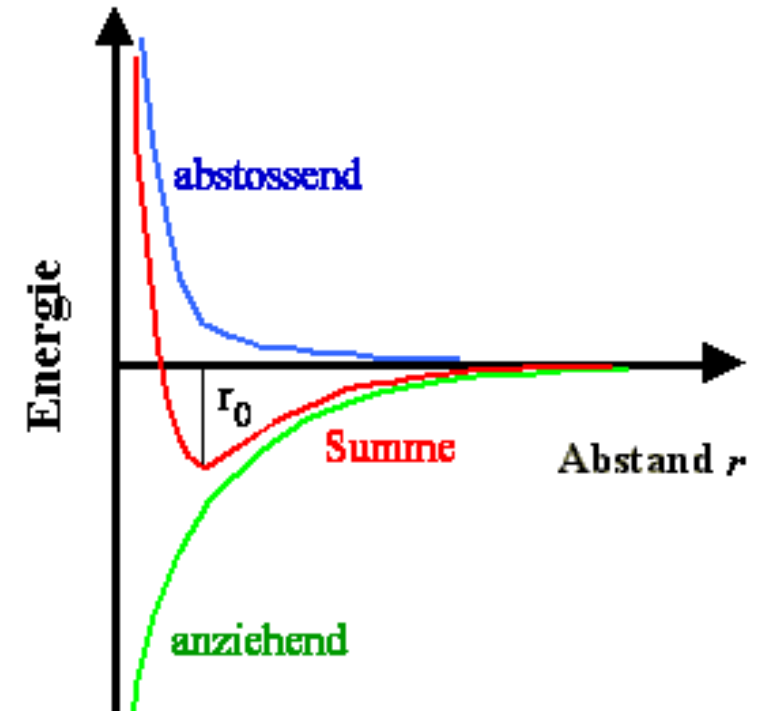
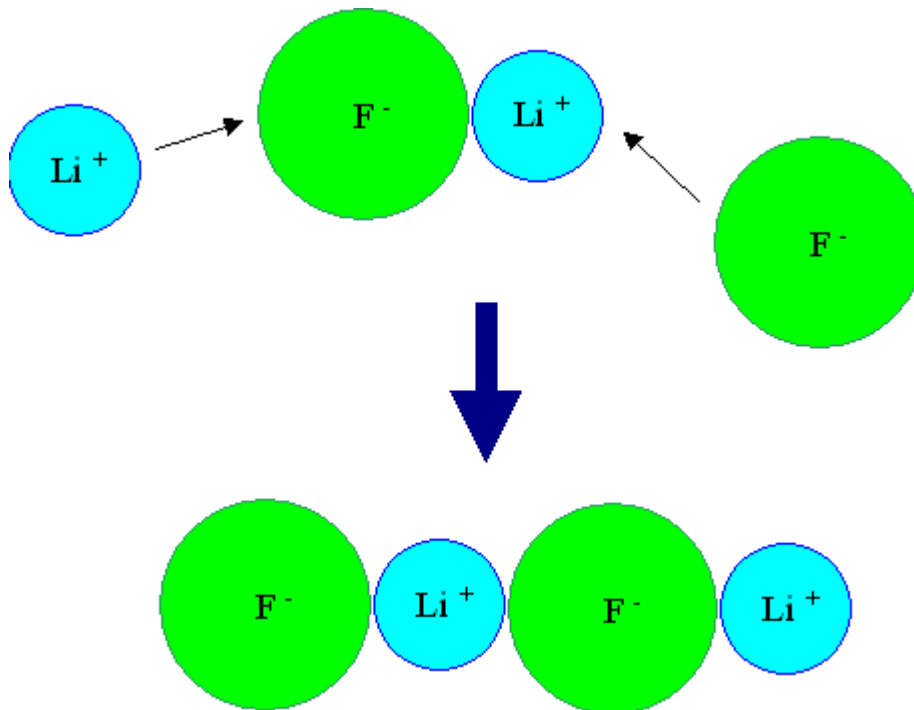
Bindungen / Ionenbindung

- 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

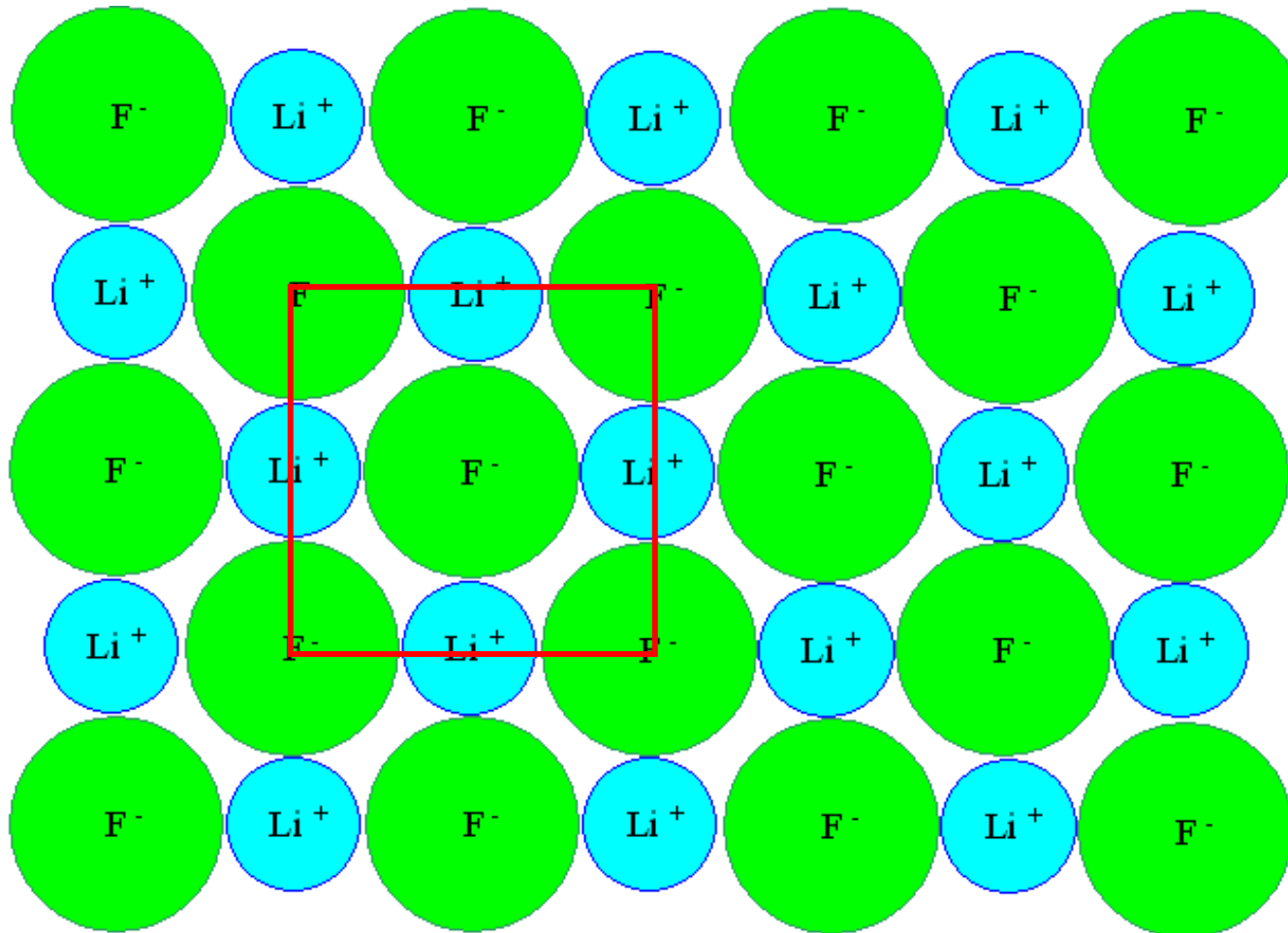
- Im Falle der **Ionenbindung** ergibt sich ein *Energie - Abstands Diagramm*.



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

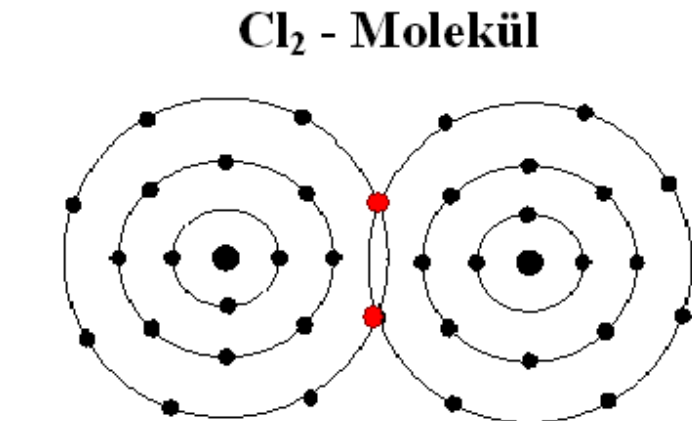
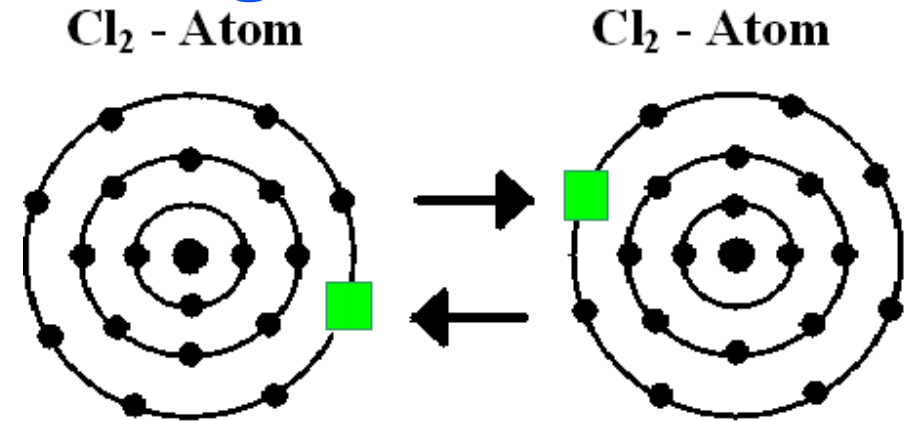
a_m Madelungkonstante

Vom Molekül zum Festkörper



Bindungen / Kovalente Bindung

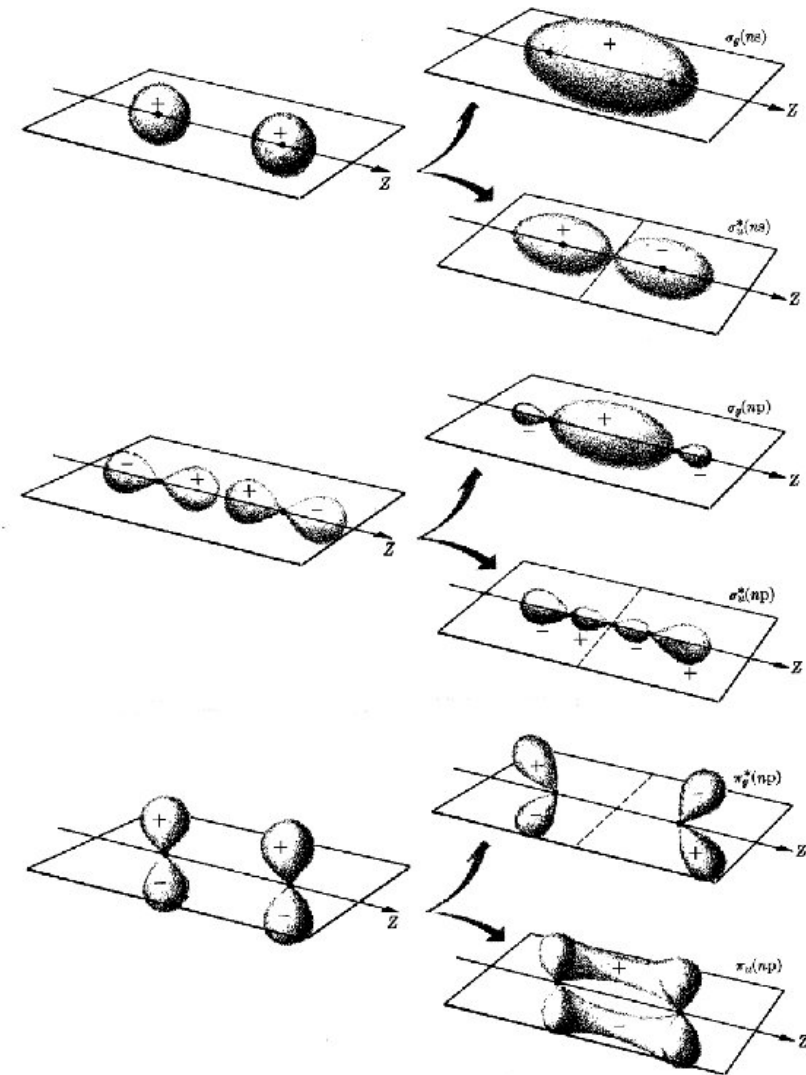
- **Kovalente Bindungen** in Reinkultur liegen vor, wenn zwei Atome, die beide *zu wenig* Elektronen haben, sich verbinden.
- Beispiele sind:
Die **Halogenide** in Gasform: **F₂**, **Cl₂**, **Br₂**, usw.
Viele typischen Gase: **O₂**, **N₂**, **NH₃** (Ammoniak), **CO₂**, usw.
Festkörper wie z.B. **Si**, **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.

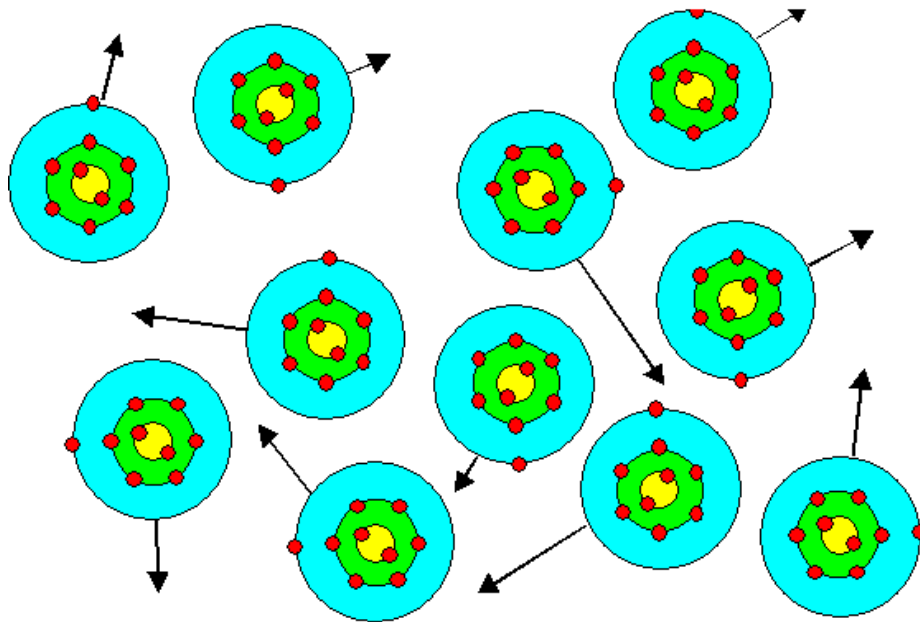


Gezeigt sind die bindenden und antibindenden Orbitale bei Überlappung von **s** - Orbitalen (keine Richtungsabhängigkeit der Bindung), **p** - Orbitale in Keulenrichtung und senkrecht dazu.

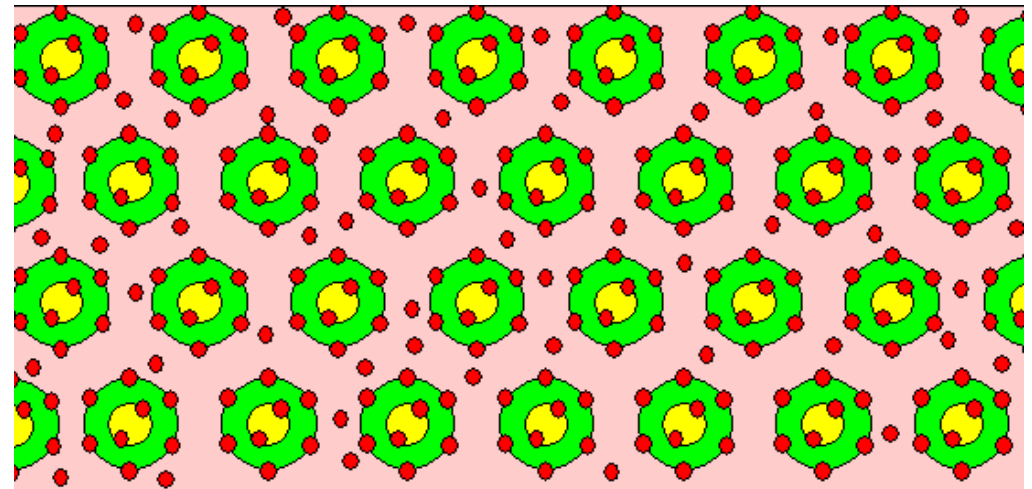
Bindungen / Metallbindung

- 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.

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



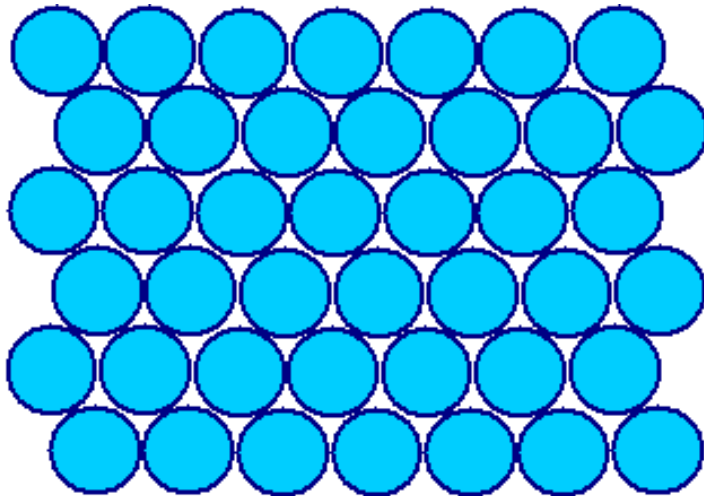
Schalenbild von (großen) **Na** - Atomen im Dampf.
Die Atome befinden sich in lebhafter Bewegung;
angedeutet durch Pfeile.



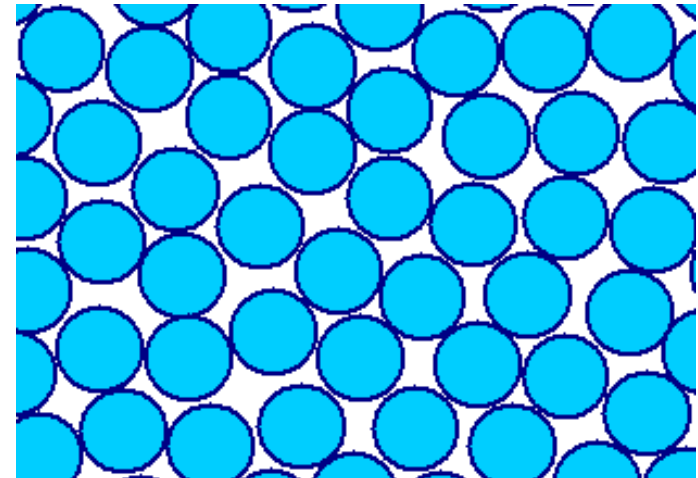
Kleine **Na⁺** - Ionenrümpfe eingebettet in das negativ geladene (rosa) Elektronengas.
Die Atome sitzen fest auf ihren Plätzen, allenfalls vibrieren sie ein wenig
um die Gleichgewichtslage.
Die Elektronen sind frei beweglich und nicht mehr einzelnen Ionen zugeordnet.

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

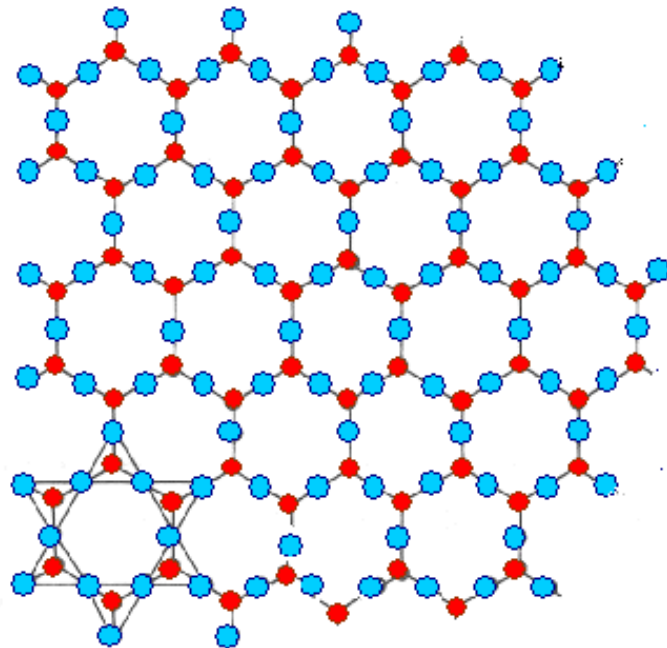
- Bergkristall, also kristallines SiO_2 , kommt beispielsweise

kristallin

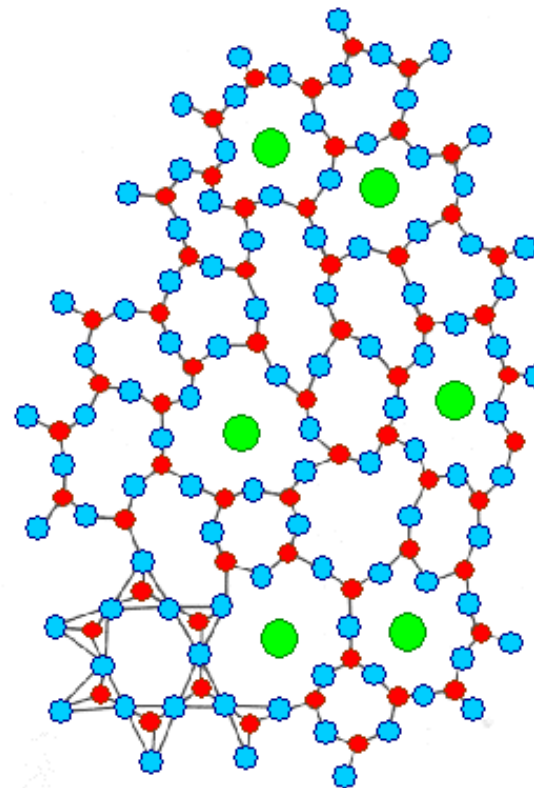
oder

amorph

vor.

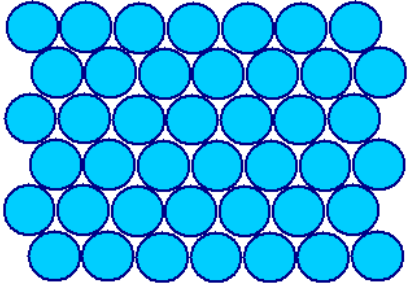
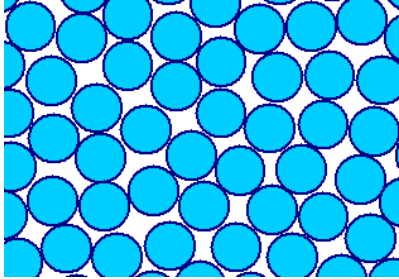
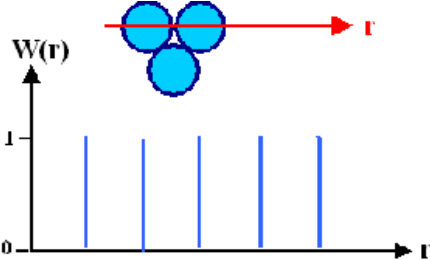
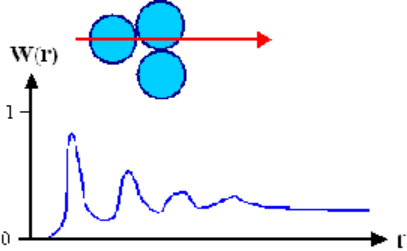


● Si ● O ● Na



Wie kann man Kristalle *formal* beschreiben?

Was heißt "regelmäßiger Aufbau"?

Kristall	Amorph
	
<p>Aus der <i>bekannten Position einiger Atome</i> lässt sich die Position <i>aller anderen Atome</i> berechnen</p>	<p>Aus der <i>bekannten Position einiger Atome</i> lässt sich die Position aller anderen Atome <i>nicht</i> berechnen</p>
<p>Die Wahrscheinlichkeit, bei einer beliebigen Position ein Atom zu finden, wird durch δ - Funktionen angegeben</p>	<p>Die Wahrscheinlichkeit, bei einer beliebigen Position ein Atom zu finden, wird durch eine radiale Verteilungsfunktion angegeben, die bei kleinen Abständen vom Ursprung Maxima bei $\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}_0$ hat und bei größeren Abständen vom Ursprung konstant wird</p>
	
<p>Es existiert eine Nah- und Fernordnung</p>	<p>Es existiert nur eine beschränkte Nahordnung</p>
<p>Es existiert eine Translationssymmetrie</p>	<p>Es existiert <i>keine</i> Translationssymmetrie</p>

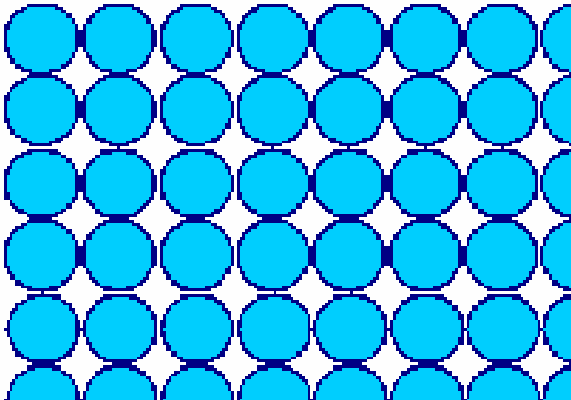
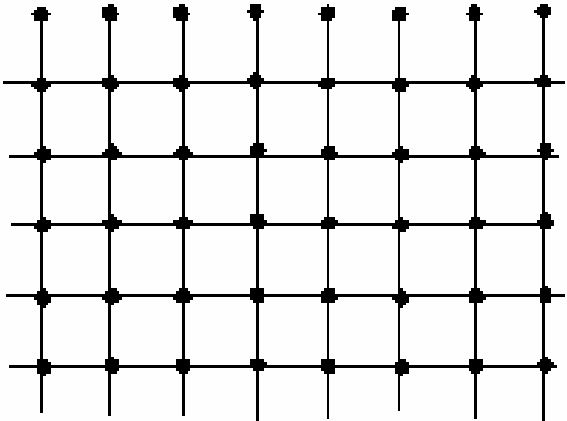

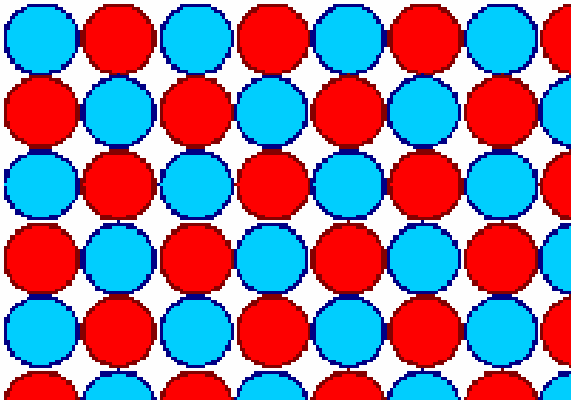
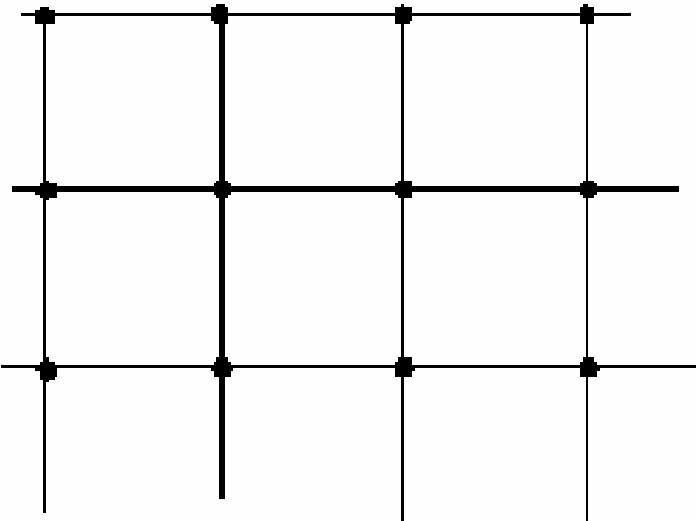


Symmetrie

- 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.**

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:

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

Kristall	=	Gitter	+	Basis
	=		+	
	=		+	 <p>oder</p> 

Mathematische Beschreibung des Gitters

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

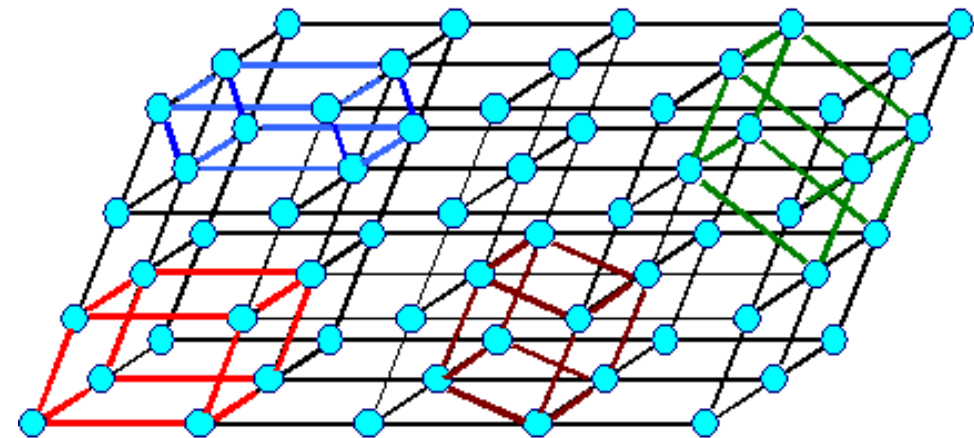
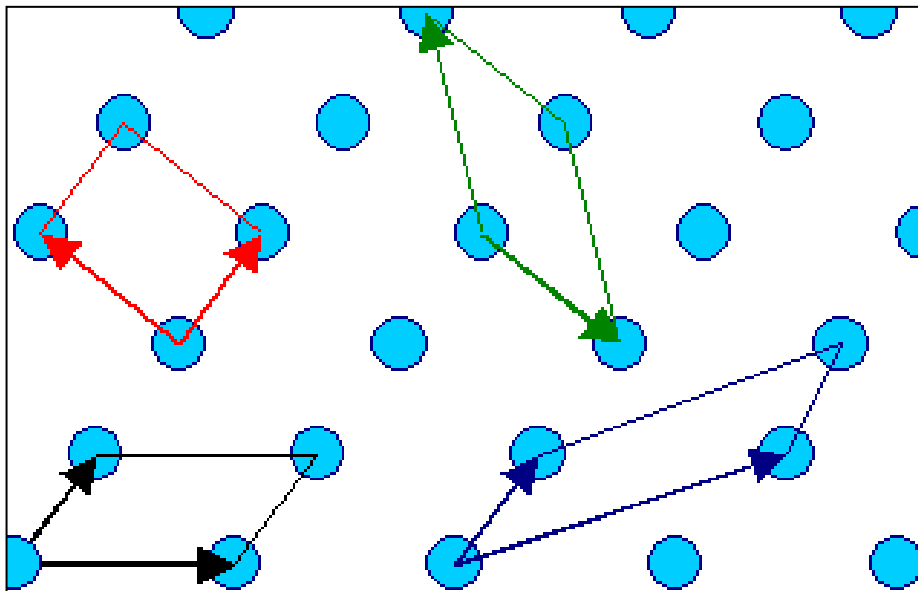
$$\underline{\mathbf{T}} = u \cdot \underline{\mathbf{a}}_1 + v \cdot \underline{\mathbf{a}}_2 + w \cdot \underline{\mathbf{a}}_3$$

u, v, w ganzzahlig

- Die Basisvektoren $\underline{\mathbf{a}}_1$, $\underline{\mathbf{a}}_2$, $\underline{\mathbf{a}}_3$ sind *per Definitionem* auch Translationsvektoren des betrachteten Gitters; das von ihnen aufgespannte Parallelepipid 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.

Primitive Einheitszelle

- Die Einheitszelle mit dem *kleinsten Volumen* heißt **primitive Einheitszelle** wobei das Volumen V einer Einheitszelle durch das **Spatprodukt** der Basisvektoren gegeben ist:

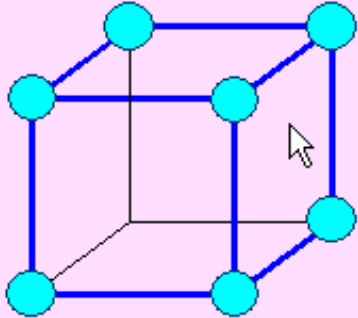
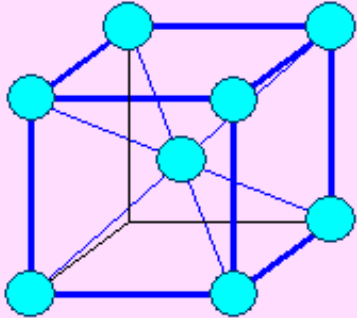
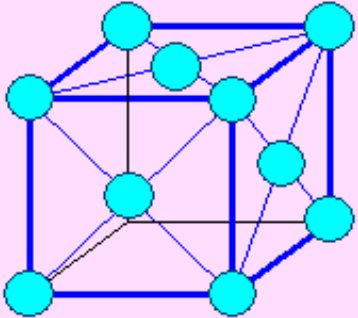
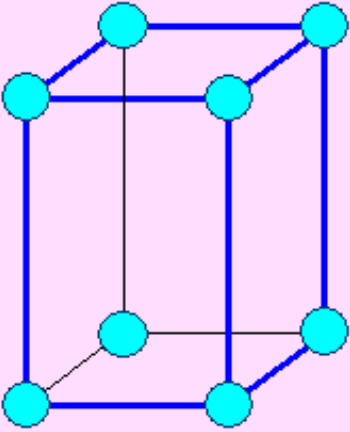
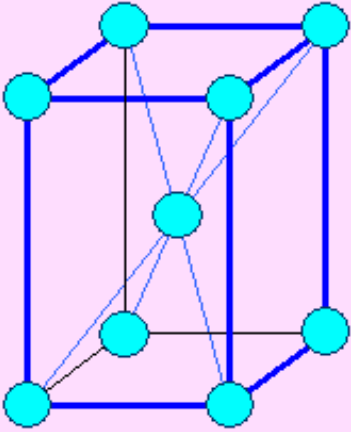
$$V = \underline{\mathbf{a}}_1 \cdot (\underline{\mathbf{a}}_2 \times \underline{\mathbf{a}}_3)$$

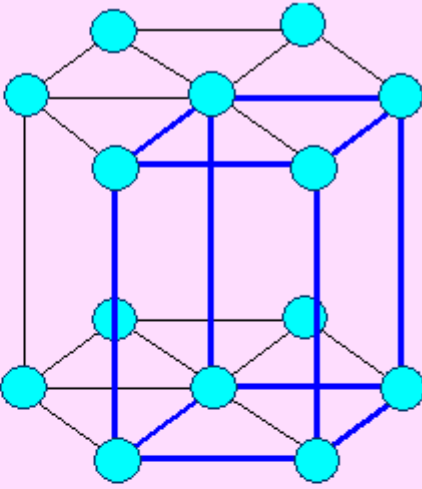
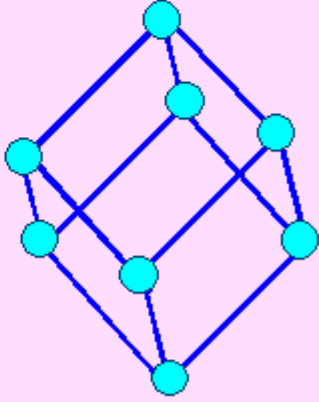
Symmetrieoperationen

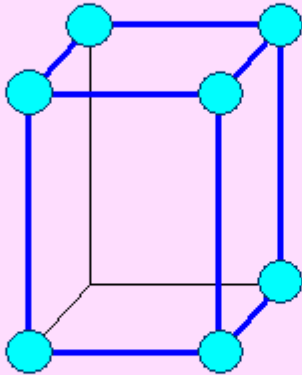
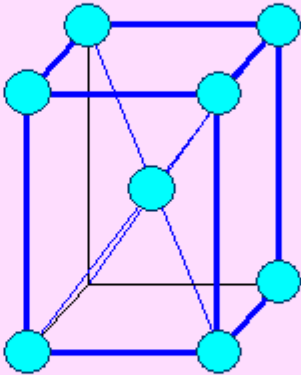
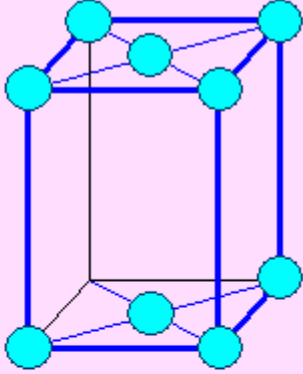
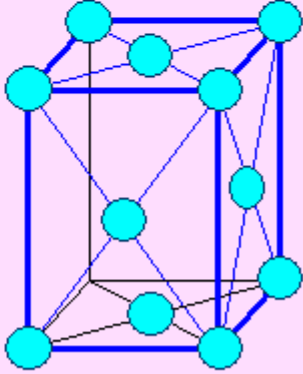
- **Translation** um einen beliebigen Gittervektor. Dies lässt per Definitionem das Gitter unverändert, d.h. überführt das Ausgangsgitter bei Anwendung der Symmetrieoperation in sich selbst. Alle Gitter haben Translationssymmetrie.
- **Spiegelungen** an Ebenen (die durch **2** Translationsvektoren aufgespannt 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 mindestens eine Rotationssymmetrie.

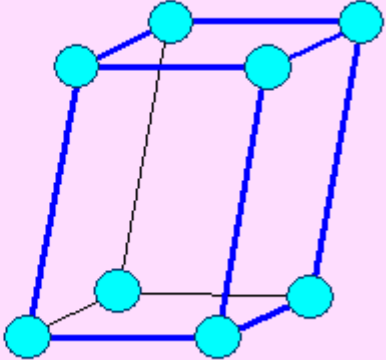
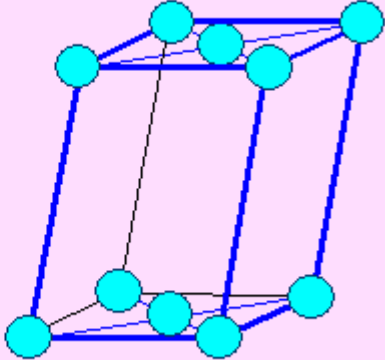
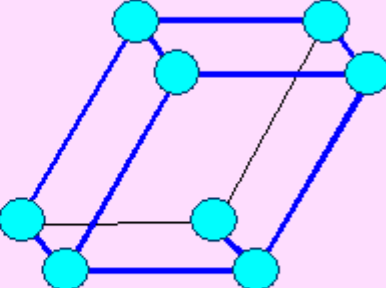
14 Gittertypen / Bravais - Gitter

- 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 $a_1 = a_2 = a_3$	$a = b = c = 90^\circ$	 <p data-bbox="714 699 922 735">kubisch-primitiv</p>	 <p data-bbox="1139 699 1419 735">kubisch-raumzentriert</p>	 <p data-bbox="1605 699 1916 735">kubisch-flächenzentriert</p>
Tetragonal $a_1 = a_2 \neq a_3$	$a = b \neq c = 90^\circ$	 <p data-bbox="694 1220 942 1256">Tetragonal-primitiv</p>	 <p data-bbox="1118 1220 1440 1256">Tetragonal-raumzentriert</p>	

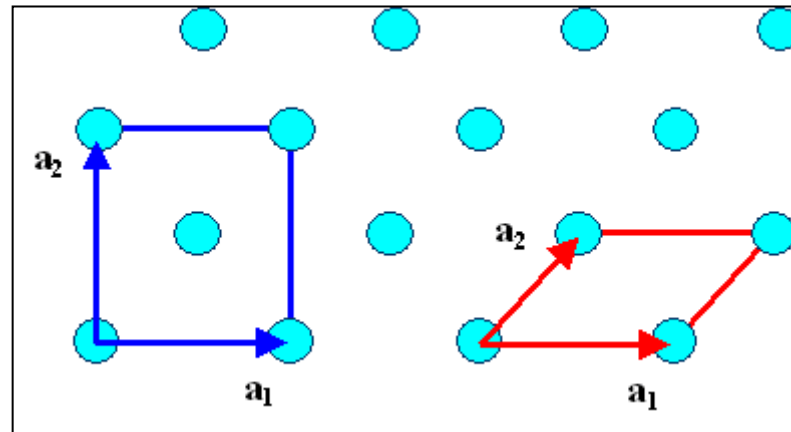
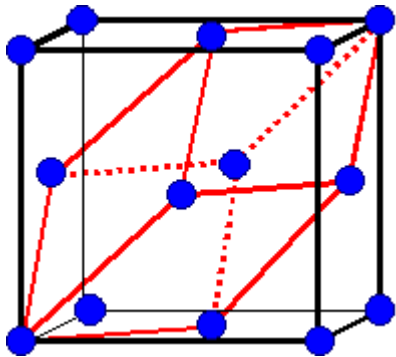
Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Achsenwinkel	Zugehörige Bravaisgitter (gelegentlich sind nur "sichtbare" Gitterpunkte (= blaue Kreise) eingezeichnet)	
Hexagonal $a_1 = a_2 \neq a_3$	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$	 <p data-bbox="638 806 1058 878">Hexagonal (EZ ist ergänzt um hex. Symmetrie zu zeigen)</p>	
Rhombisch oder Trigonal $a_1 = a_2 \neq a_3$	$a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	 <p data-bbox="752 1328 944 1363">Rhombisch</p>	

Name des Kristallsystems Länge der Basisvektoren	Achsenwinkel	Zugehörige Bravaisgitter (gelegentlich sind nur "sichtbare" Gitterpunkte (= blaue Kreise) eingezeichnet)		
Orthorhombisch $a_1 \neq a_2 \neq a_3$	$a = b = c = 90^\circ$	 <p data-bbox="700 911 1000 939">Orthorhombisch-primitiv</p>	 <p data-bbox="1104 911 1466 939">Orthorhombisch-raumzentriert</p>	 <p data-bbox="1508 704 1953 732">Orthorhombisch-basisflächenzentriert</p>  <p data-bbox="1539 1125 1922 1153">Orthorhombisch-flächenzentriert</p>

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

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

- 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:

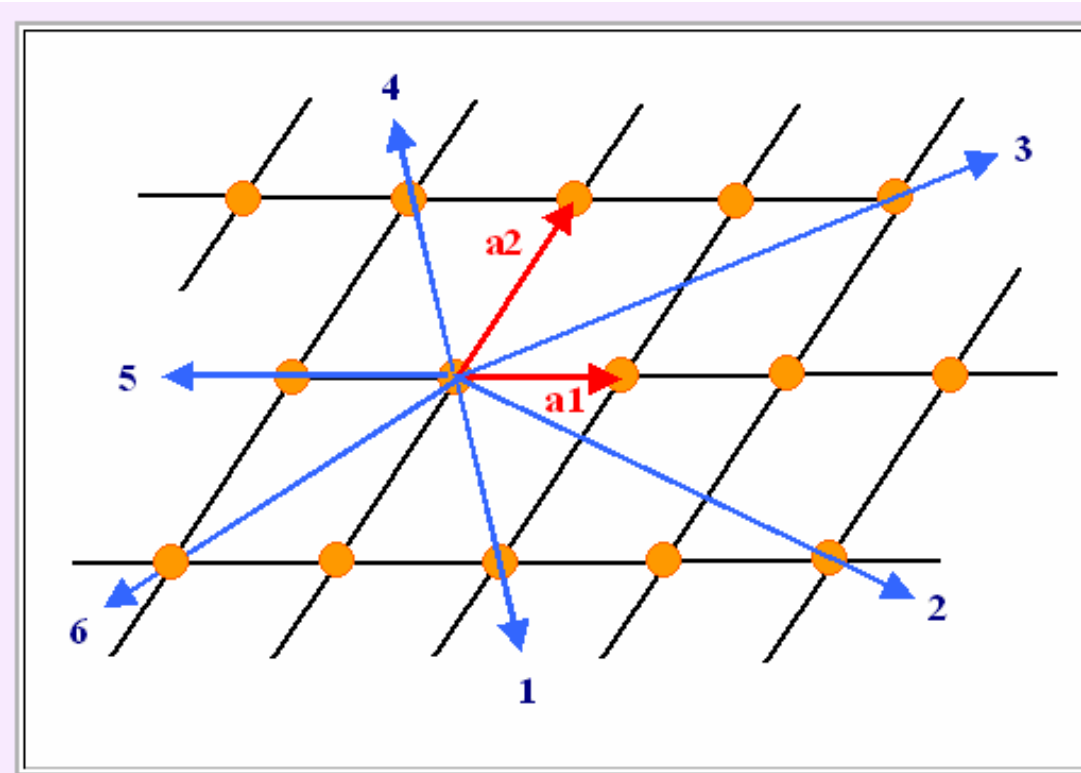


- Der primitiven **EZ** des **fcc** - Gitters sieht man die einfache kubische Symmetrie des Gitters nicht an; sie wird deshalb kaum verwendet.

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

- 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.

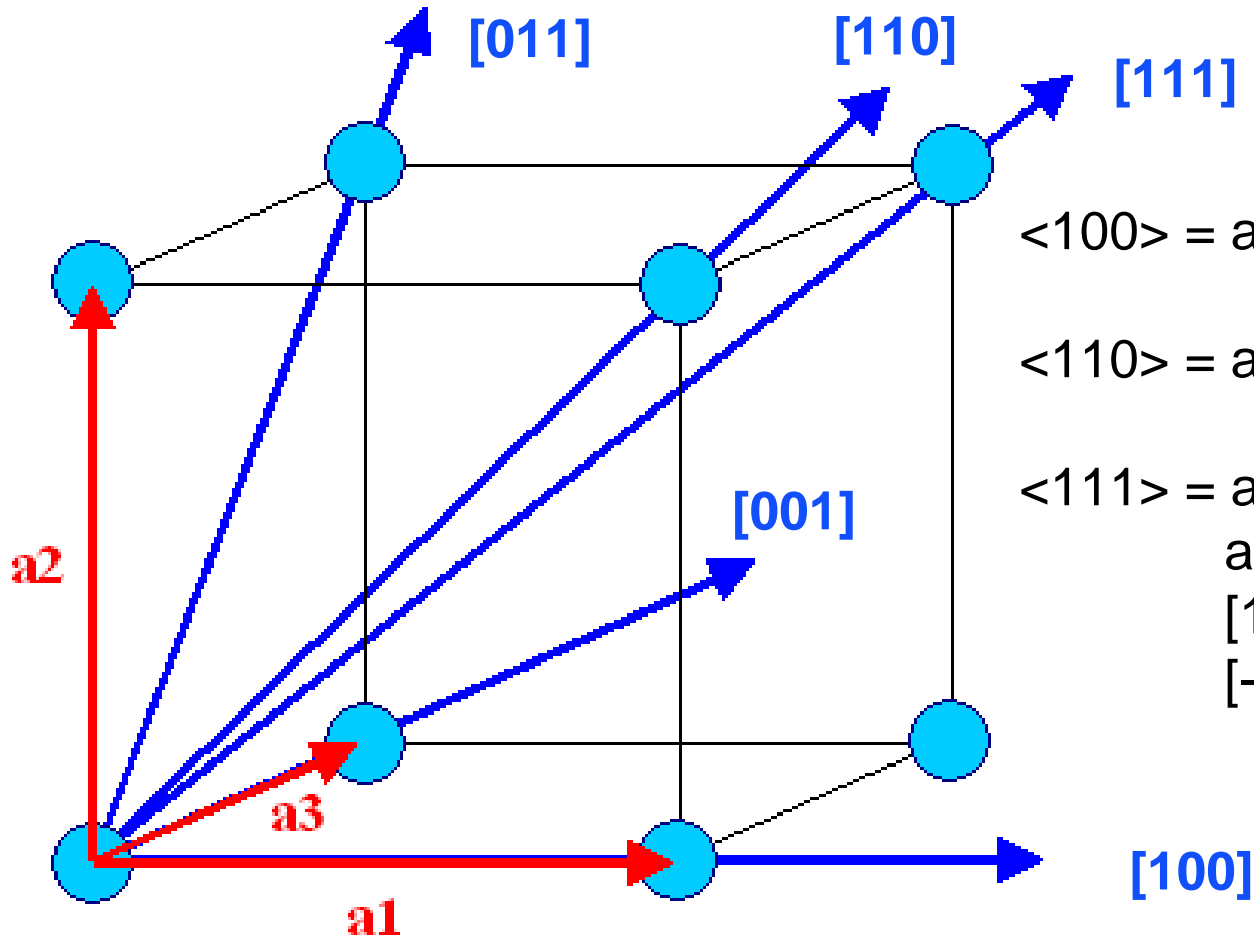
Richtungen und Ebenen im Gitter – *Miller Indizierung für Richtungen*



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

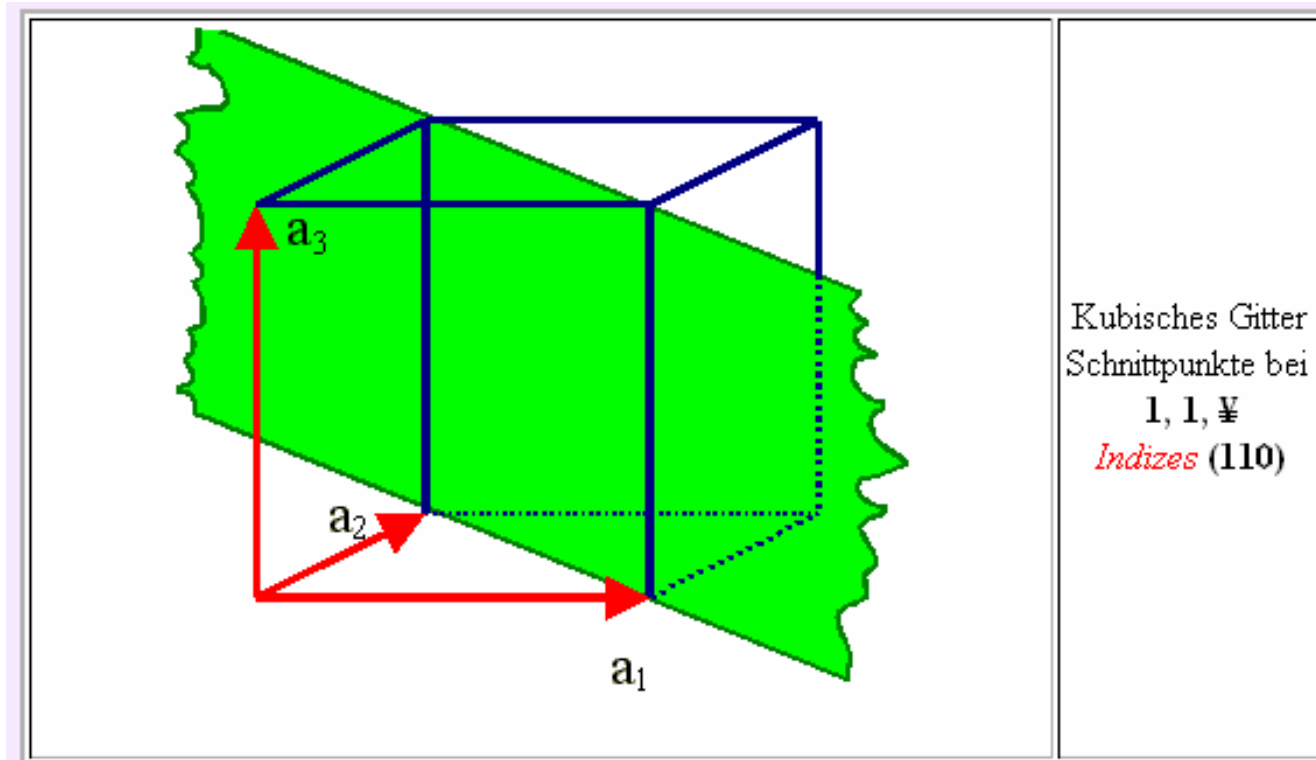
$\langle 111 \rangle$ = alle Raumdiagonalen, z.Bsp.
alle 8 Permutationen der Indizes:
[111], [11-1], [1-11], [-111],
[-1-11], [1-1-1], [-11-1], [-1-1-1],

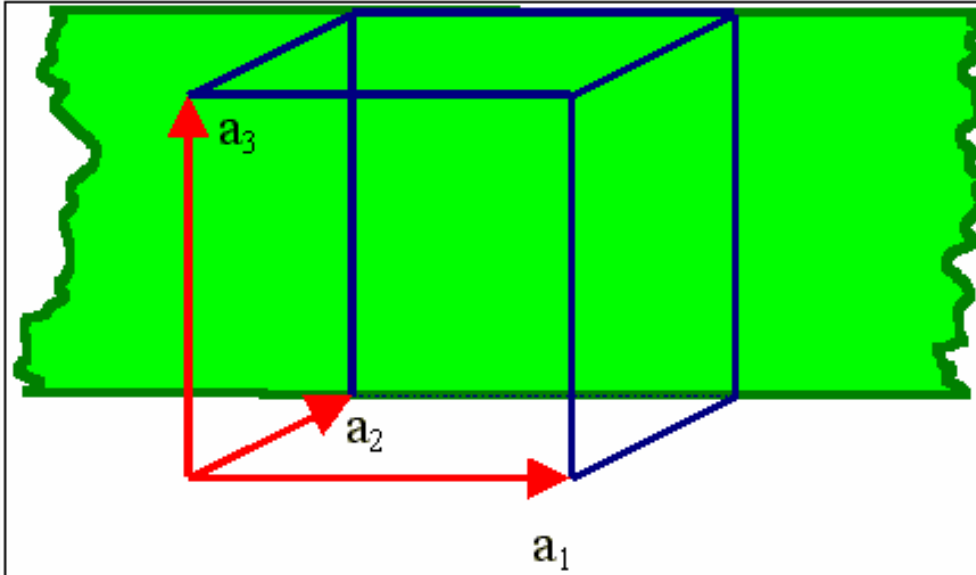
Richtungen und Ebenen im Gitter – Mathematische Beschreibung von Ebenen im Gitter

- 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 „ ∞ “)
- Das erhaltene Zahlentripel *reziprok* dargestellt und die resultierenden Brüche durch Erweitern ganzzahlig gemacht werden; aus „ ∞ “ 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.

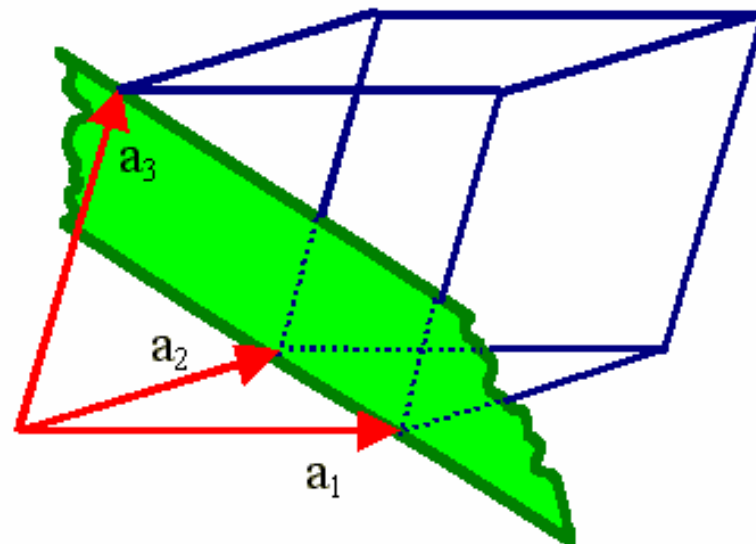
Richtungen und Ebenen im Gitter – Mathematische Beschreibung von Ebenen im Gitter

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

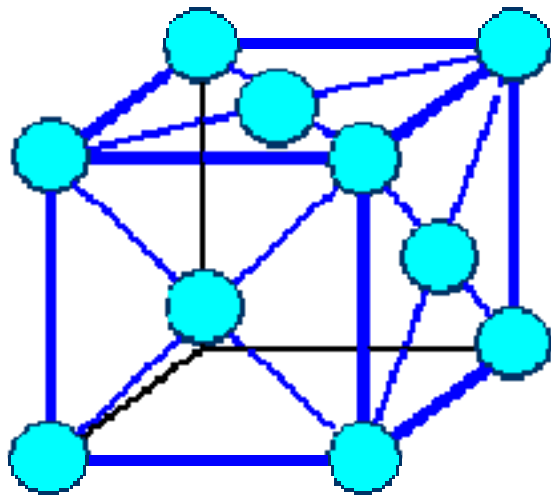
- *Kristallographisch äquivalente* Richtungen und Ebenen haben immer den gleichen Satz an Miller Indizes.
- Die Richtung $\langle hkl \rangle$ steht immer **senkrecht** auf der Ebenen (hkl) . Die Abstände d_{hkl} zwischen zwei benachbarten Ebenen sind direkt aus den Indizes berechenbar.
- Die Formeln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

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

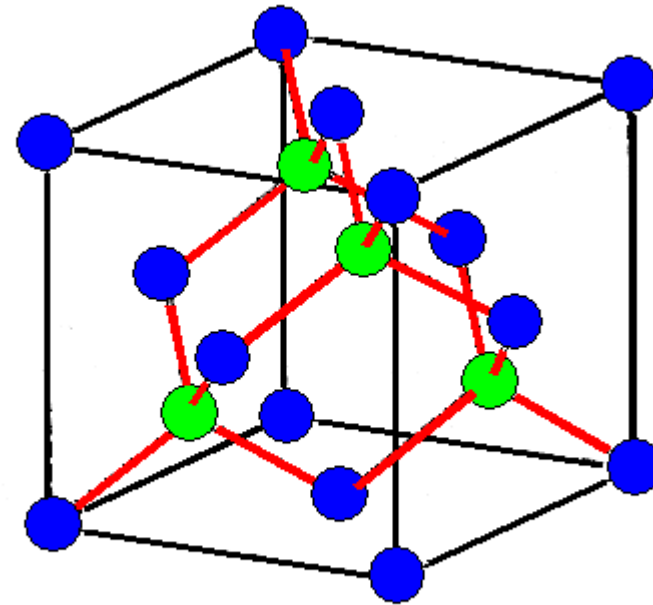
Die wichtigsten Gitter der Elementkristalle

fcc für "face centered cubic" oder *kfz*

- 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 "Diamant*kristall*" 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.



fcc Bravais Gitter

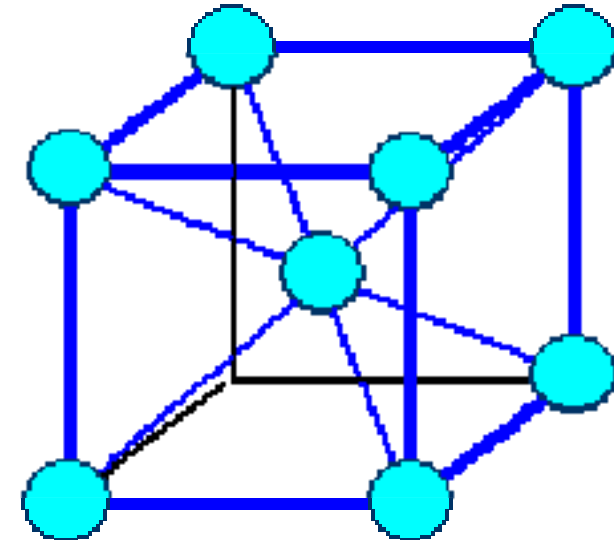


Diamantstruktur

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

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

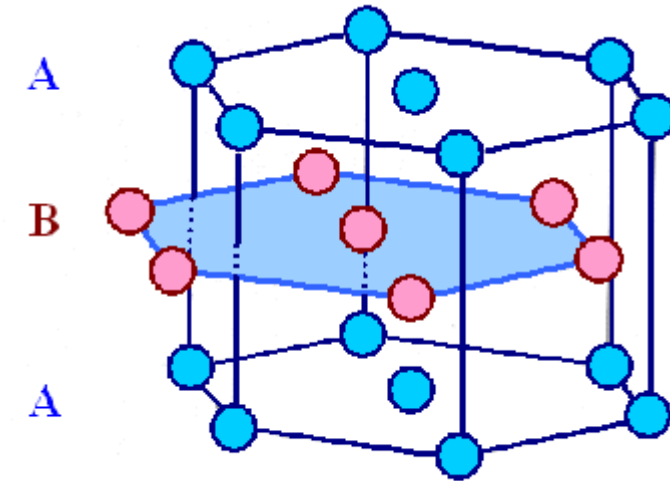
- Mit *einem* Atom in der Basis, das dann auf den Ecken und im Zentrum des Würfels sitzt, z.B. **K**, **Rb**, **Cs**, **V**, **Nb**, **Ta**, **Cr**, **Mo** und **W**.
- Etwa **30 %** aller Elemente kristallisieren in einem **bcc**-Gitter



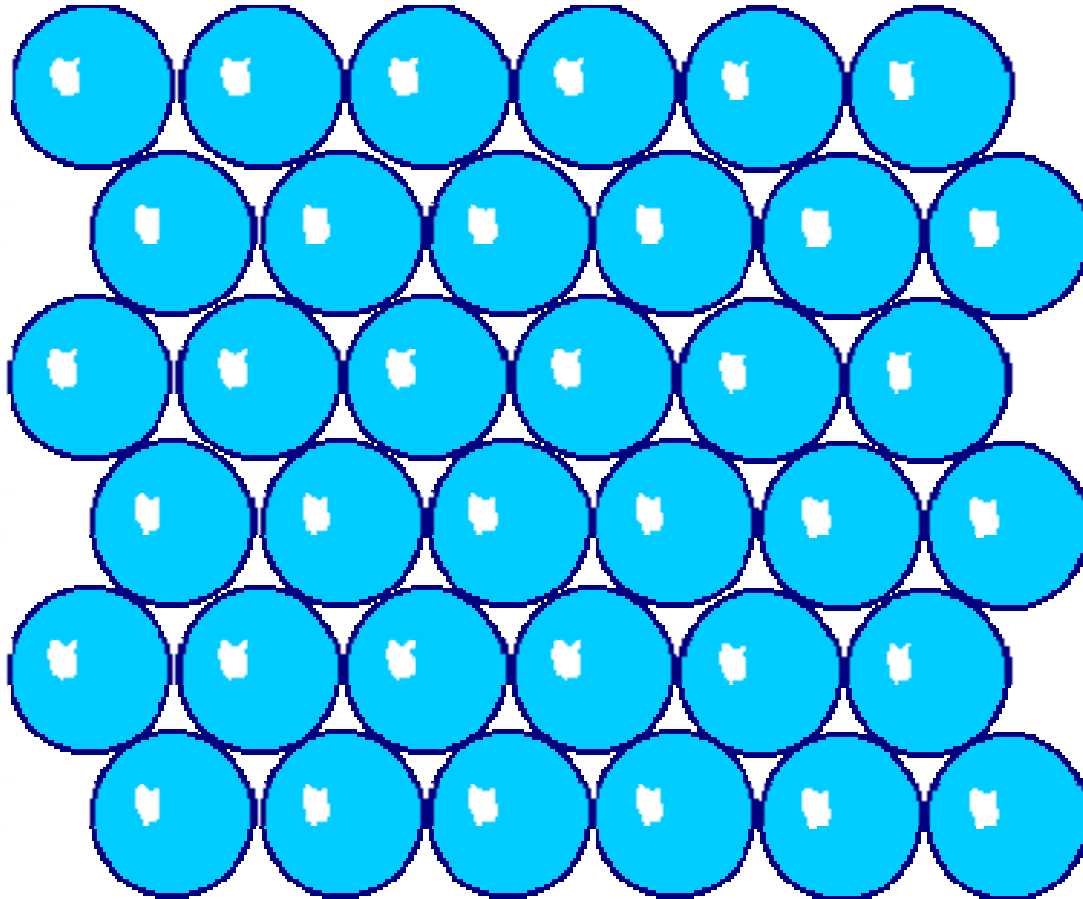
Hexagonal dichteste Kugelpackung

hcp für "hexagonal closed packed".

- 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 $(1/2, 1/4, 1/2)$; 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.

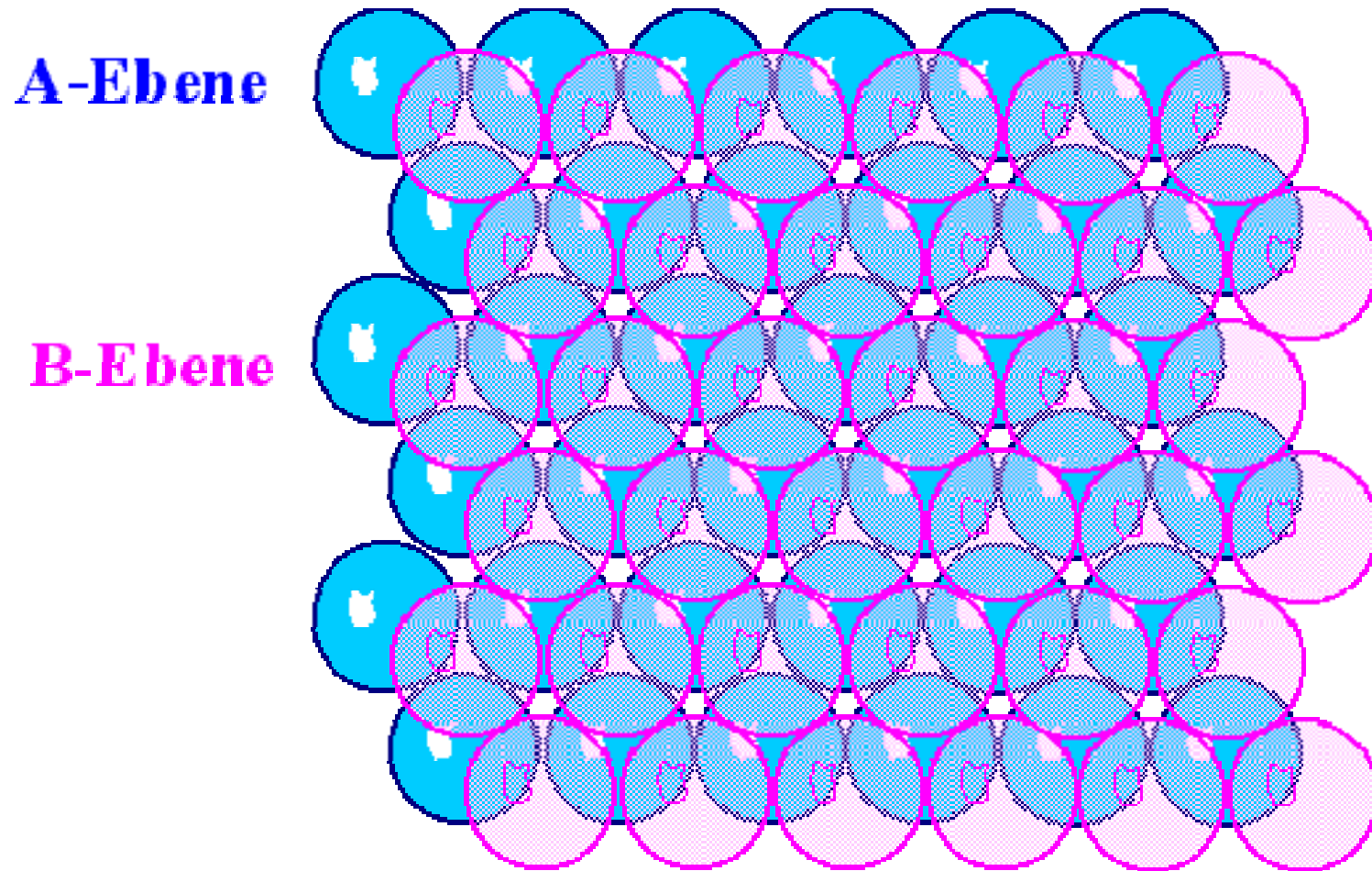


Bravaisgitter und dichteste Kugelpackung



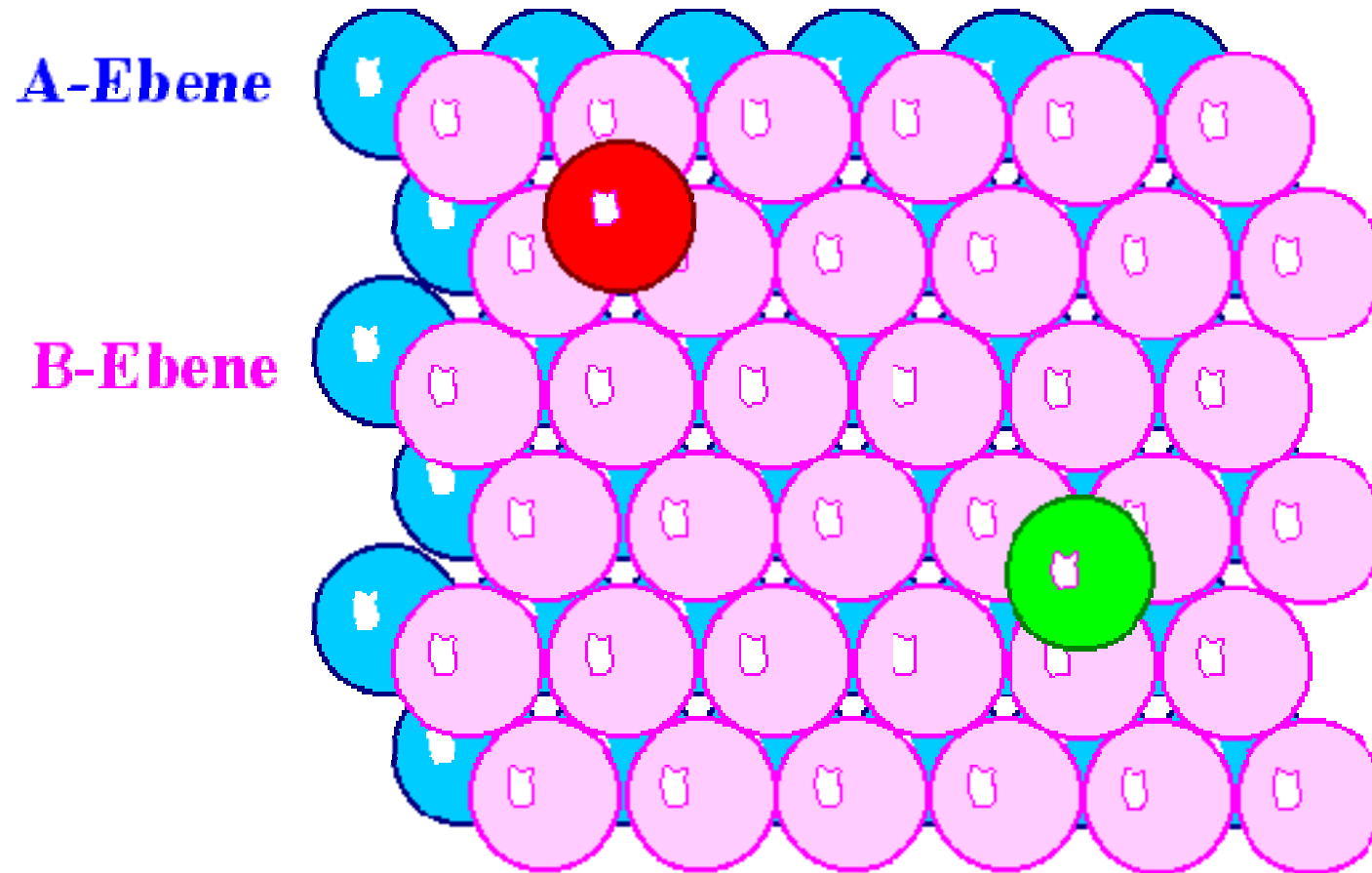
Dichteste Kugelpackung in der Ebene

Dichteste Kugelpackung mit zwei Ebenen



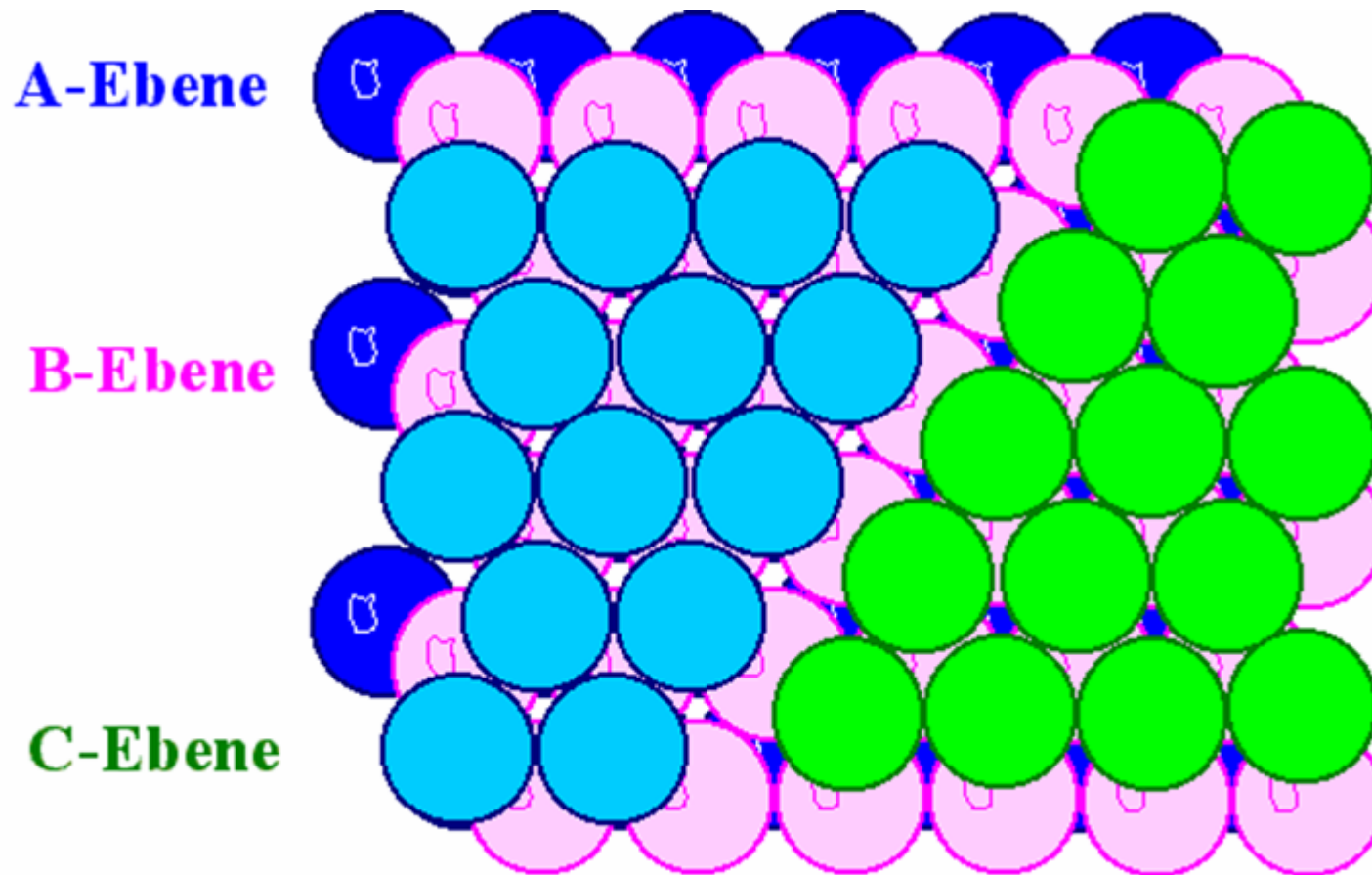
Wählen wir als *dritte Ebene wieder eine A-Ebene* und machen dann periodisch weiter, erhalten wir die **Stapelfolge: ABABABABA...**

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

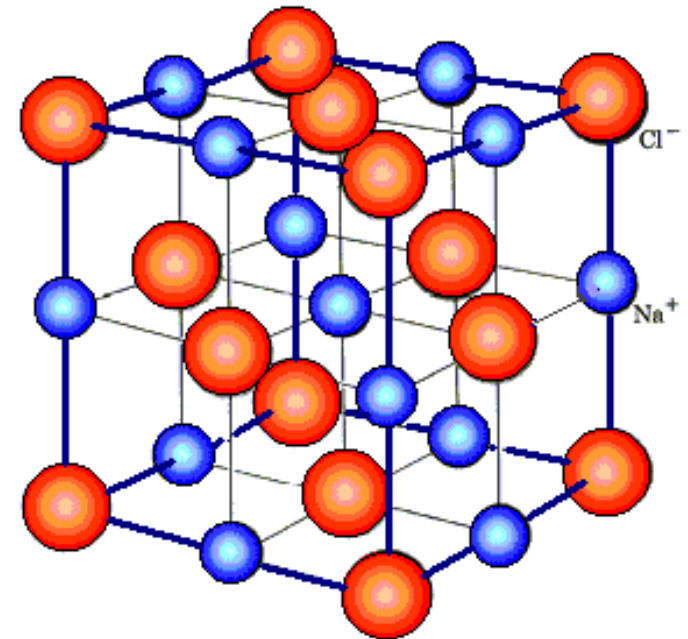
Dichteste Kugelpackung mit den zwei möglichen Varianten der dritten Ebene



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

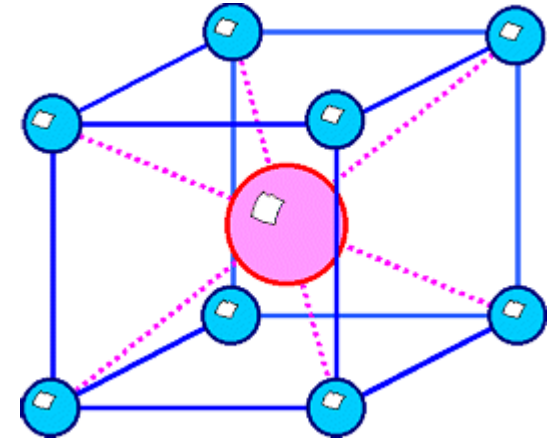
Die NaCl - Struktur

- 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**.

