

Ein Skript der Vorlesung

# Festkörperphysik 1

*(unkorrigierte Version – bitte am Semesterende neue Version downloaden!)*

Prof. Martin Stutzmann  
TU München  
5. Semester, WS 2000 / 2001

Datum: 22.11.2001

von Michael Wack und Christoph Moder  
(© 2001–2002)  
<http://www.skriptweb.de>

*Hinweise (z.B. auf Fehler) bitte per eMail an uns: [mail@skriptweb.de](mailto:mail@skriptweb.de) – Vielen Dank.*

## Inhaltsverzeichnis

Organisatorisches.....	3
Übungen.....	3
Literatur.....	4
Sprüche.....	5
1. Einleitung.....	7
1.1 Gegenstand der Festkörperphysik (FKP).....	7
1.2 Relevanz der Festkörperphysik.....	9
Physics & Astronomy Classification Scheme (PACS).....	9
FKP am PD der TUM.....	9
Wirtschaftliche Bedeutung.....	9
1.3 Zur Geschichte der FKP.....	10
2. Kristallgitter.....	11
2.1 Kristallsysteme und Bravais-Gitter.....	11
2.2 Gittersymmetrie.....	14
Gittersymmetrien.....	15
2.3 Richtungen und Flächen im Kristall.....	20
2.4 Wichtige spezielle Gitter.....	21
2.4.1 Elementare Festkörper (A).....	21
2.4.2 AB-Verbindungen (binär).....	22
2.4.3 Komplizierte Kristallgitter.....	24
2.5 Amorphe Festkörper (Gläser) und Polymere.....	24
3. Beugung an Kristallen, Realstruktur.....	27
3.1 Beugung am Strichgitter.....	27
3.2 Beugung am Kristallgitter.....	28
3.2.1 Primärstrahlen.....	28

## Organisatorisches

Martin Stutzmann  
stutz@wsi.tum.de  
089/289-12760 (Sekretariat -12761)

4 Übungsgruppen  
Einteilung am Donnerstag, 18.10.2001

Tutoren:

- Martin Hermann  
Tel. 12755  
martin.hermann@wsi.tum.de
- Christopher Eisele (Laser)  
Tel. 12774  
christopher.eisele@wsi.tum.de
- Tobias Graf (Kristallographie)  
Tel. 12768  
tobias.graf@wsi.tum.de
- Georg Steinhoff (Biophysik)  
Tel. 12774  
georg.steinhoff@wsi.tum.de
- Gwenoelle Rumen  
Tel. 12739  
gwen.rumen@wsi.tum.de

Advisorsystem: Bedeutet, dass man sich einen Lehrstuhl aussucht, der einen berät.

Vorlesung:

10:00–11:00 Montag  
11:15–12:30 Donnerstag

Festkörperphysik sind Prüfungsfach der DHP1, daher sind Übungen sehr wichtig. Übungen Vorrechnen einer Übungsaufgabe bringt Bonuspunkte: erstens bekommt man Schein (ECTS?), zweitens darf man eines der 11 Kapitel in der DHP auslassen. Für ECTS ist Teilnahme an Übungen Pflicht.

Im Laufe des Semesters gibt es ein Repetitorium (ca. 60 Seiten); statt Skript: lieber gute Bücher nehmen.

Folien: Gibt es im Internet.

## Übungen

Termine:

- Montag 11:15–12:45 Tobias Graf
- Dienstag 13:30–15:00 Gwenoelle Rumen, in englisch
- Mittwoch 09:30–11:00 Martin Hermann
- Mittwoch 14:00–15:30 Georg Steinhoff
- Donnerstag 15:15–16:45 Christopher Eisele

Ort: Seminarraum des WSI (S101) (Erdgeschoss, von Physik 2 kommend links, ganz am Ende des Gangs links)

Regeln:

- pro Semester 1–2 Aufgaben vorrechnen; ein Teilgebiet, aus dem eine Aufgabe vorgerechnet wurde, kann man bei der DHP1 aus dem Stoff ausschließen
- in der Übung in Anwesenheitsliste eintragen und ankreuzen, zu welchen Aufgaben man bereit ist, vorzurechnen
- Übungsschein: mindestens 50% der Aufgaben müssen angekreuzt sein, und 1–2 Aufgaben vorgerechnet

### **Literatur**

- Ashcroft, Mermin: Solid State Physics  
Harcourt Brace College Publishers, Fort Worth et al. 1976  
Sehr gutes amerikanisches Lehrbuch mit Schwerpunkt auf Theorie. Einer der Klassiker, erschlagend.
- Bergmann–Schaefer, Lehrbuch der Experimentalphysik Band 6 Festkörper  
de Gruyter, Berlin–New York 1992  
Sehr umfassend, geht vom Umfang über die Vorlesung hinaus; ist aber eher Nachschlagewerk als Lehrbuch
- Ibach–Lüth: Festkörperphysik, Einführung in die Grundlagen  
Modern (auch wenn es nicht so aussieht), empfehlenswert
- Ch. Kittel: Einführung in die Festkörperphysik  
Oldenbourg Verlag, München–Wien 1993  
viele Tabellen, nach jedem Kapitel eine kurze Zusammenfassung; anspruchsvoller Klassiker
- K. Kopitzki: Einführung in die Festkörperphysik  
Teubner Verlag Stuttgart, 3. Auflage 1993  
kompakt, sehr gut geschrieben, übersichtlich, preiswert
- M. P. Marder: Condensed Matter Physics  
Wiley, New York et al. 2000  
sehr theoretisch, weitergehend (z.B. Kapitel über Fluidmechanik), eigentlich zu viel für Vorlesung, ganz neues Buch
- Ch. Weißmantel und C. Hamann: Grundlagen der Festkörperphysik  
Barth Verlag Heidelberg, 4. Auflage 1995  
umfassend, didaktisch sehr gut, aber Supraleitung fehlt; ansonsten Favorit von Prof. Stutzmann

Weiterführende Bücher:

- P. Grosse: Freie Elektronen in Festkörpern  
Springer Verlag Berlin u.a. 1979
- Walter A. Harrison: Solid State Physics  
Dover Publications, New York 1979  
sehr theoretisch
- M. Prutton: Introduction to Surface Physics  
Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford 1994  
nur für Leute, die in Oberflächenphysik interessiert sind

- G. P. Srivastava: The Physics of Phonons  
Adam Hilger, Bristol et al. 1990  
„sehr weiterführend“, sehr kompliziert zu lesen
- Adrian P. Sutton: Elektronische Struktur in Materialien  
VCH, Weinheim 1996
- P. Y. Wu, M. Cardona: Fundamentals of Semiconductors  
Springer 1996  
sehr theoretisch
- Buckel: Supraleitung  
Standardwerk für Supraleitung

### **Sprüche**

- Es gibt viele Martins in meinem Lehrstuhl. Aber der Name ist keine hinreichende Bedingung.
- Powerpoint-Präsentationen gehen immer in die Hose, das ist ein Naturgesetz.
- Quantenmechanik: Wer hat es schon im vierten Semester gehört? (Alle melden sich.) Und wer hat's kapiert?
- Dann nehme ich eben ein älteres Device, einen Photonenwerfer. (gemeint ist ein Overhead-Projektor)
- Diamant: der schönste Festkörper, den es gibt
- Dass Ihr Auto recht zuverlässig ist, liegt daran, dass Metalle sehr gut verstanden sind.
- Wenn man im Web nach Magnetismus sucht, findet man jede Menge esoterische Webseiten.
- Kalkspat kriegt man auf Kristallmessen. Wenn man da durchschaut, sieht man alles doppelt; und das liegt nicht daran, dass man besoffen ist, sondern an den optischen Eigenschaften des Kristalls.
- Hilbert – den kennen Sie ja aus dem Hilbertraum – hat eine Sammlung von ungelösten Problemen der Mathematik zusammengestellt.
- Wenn Sie mit dem Bleistift schreiben, nutzen Sie die Tatsache, dass beim Graphit die Ebenen nur schwach gebunden sind aus; Sie schieben die Ebenen nacheinander auf das Papier.
- Silberbromid ist wichtig für die Photographie, damit wird die lichtempfindliche Schicht realisiert. Aber es wird zunehmend von Silizium ersetzt, in Form von CCDs...
- Quarzglas wird z.B. in Hochdrucklampen verwendet, wie bei Flakgeschützen (Flakscheinwerfer), oder auch in modernen Autos wie BMW oder Mercedes, die so blau funzeln. Hier wird Quarz amorph als Glas verwendet; und es kann passieren (speziell bei Wärme), dass das Glas auskristallisiert, und die Lampe dann den Druck nicht mehr aushält und explodiert (=> beim Wechseln dieser Lampe Brille und Splitterschutz).
- Laserbeugung an Kristallen: Sie in der zweiten Reihe von hinten: stehen Sie bitte nicht auf und drehen sich um, ich habe keine Lust, Ihnen neue Augäpfel kaufen zu müssen.
- Mit hellem Laserpointer: eigentlich ist der verboten...
- Grenoble: im Hintergrund sehen Sie die Berge, d.h. es ist auch touristisch sehr attraktiv...
- Synchrotron: Da laufen die Elektronen herum, und jedesmal, wenn sie um die Ecke kommen, strahlen sie.

- Von der Leuchtdichte her ist die Sonne vernachlässigbar gegenüber einem Synchrotron.

# 1. Einleitung

## 1.1 Gegenstand der Festkörperphysik (FKP)

Elementarteilchen → Atome → Moleküle → kondensierte Materie

5 Aggregatzustände:

- Gase
- Plasmen
- Flüssigkeiten
- Festkörper
- exotische Materie (z.B. Neutronenstern, „extremely condensed matter“; Bose–Einstein–Kondensat)

In Reihenfolge zunehmender Ordnung (d.h. ungeordnet → geordnet):

- Flüssigkeiten/Festkörper: Polymere, Biophysik, „soft matter“
- Festkörper: Gläser, amorphe Festkörper (d.h. ohne Kristallordnung, z.B. Fensterglas)
- Festkörper: Kristalle, künstliche Kristalle

Übergang flüssig–fest: definiert durch Viskosität

Viskosität  $\eta = 10^{14}$  Poise (1 Poise = 0,1 N s/m<sup>2</sup>); ist die Viskosität kleiner, dann ist das Material flüssig, ansonsten fest.

Versuch, zum Messen der Viskosität:

Zwei parallele Flächen des Materials, die verschoben werden (Scherung); es entsteht ein Geschwindigkeitsgradient:

$$v(x) = \frac{1}{\eta} \times \frac{F}{A}$$

Beispiel:

$$A = 1 \text{ cm}^2, \quad F = 10^5 \text{ Pa}, \quad x = 1 \text{ cm}, \quad \eta = 10^{14} \text{ Poise}$$

$$\Rightarrow v(1 \text{ cm}) = 1 \text{ mm} / 3 \text{ Jahre}$$

Ziel der FKP:

Quantitative Beschreibung makroskopischer Eigenschaften eines Festkörpers durch atomistische Modelle

Methoden:

Einwirkklassen von

- Wärme ( $Q$ )
- Photonen ( $\hbar \omega$ )
- Felder ( $\vec{E}, \vec{B}$ )
- Kräfte ( $\vec{F}$ )
- Teilchen ( $\gamma, e, n, \dots$ )

Kristallstruktur:

z.B. Diamant, Photosystem 1 (Makromolekül, auf dem die Photosynthese beruht)

Defekte:

es gibt nicht nur ideale Kristalle; reale Kristalle haben Versetzungen, die entscheidend für die Festigkeit sind

Elektronische Bandstruktur, Fermi-Flächen

Teil 2 der Festkörperphysik:

- Metalle
- Halbleiter
- Optik und Dielektrika (Wie verhält sich ein Festkörper unter Einwirkung von Photonen?)
- Supraleiter

Kristalle:

Symmetrieoperationen:

- Translation: welche Translationsvektoren soll man wählen?
  - primitive Einheitszelle  $p$   
Eine Einheitszelle ist dann primitiv, wenn man jeden Punkt durch einen oder mehrere Translationsvektoren auf einen anderen Punkt abbilden kann.  
Beispiel: Bild von Escher (Schmetterline); zwei Vektoren von einem Schmetterling zu den nächsten beiden, die in gleicher Richtung ausgerichtet sind, (z.B. links und drunter) spannen die Einheitszelle auf.  
  
Escher-Websketch: Software zum Erstellen von Symmetrien im Kristall (Java)  
<http://www-sphys.unil.ch>
  - zentrierte Einheitszelle  $c$   
Dort ist ein Atom in der Mitte. Wird verwendet, weil hier zusätzliche Informationen ausgedrückt werden können (z.B. Abstand der Atome), was mit primitiven Einheitszellen nicht geht.
- Rotation  
Nicht jede Rotation ist mit Translation vereinbar; nur Rotation um  $360/n$  ( $n=1,2,3,4,6$ ).
- Spiegelungen (m, mm)
- Kombination  
Gleitspiegelung (Translation+Spiegelung), Inversion (2-zählige Rotation + Spiegelung), Schraube (Rotation+Translation)

Im Dreidimensionalen gibt es 230 derartige Kristallstrukturen.

Web-Adressen zu Kristallen (Gitterkonstanten, Symmetrien, Simulationen)

- <http://jas.eng.buffalo.edu>
- <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/>



## 1.2 Relevanz der Festkörperphysik

### Physics & Astronomy Classification Scheme (PACS)

Publikationen/Jahr

0. Allgemeine Physik (13000 = 8%)
1. Elementarteilchenphysik (7500 = 5%)
2. Kernphysik (7500 = 5%)
3. Atome & Moleküle (7500 = 5%)
4. Optik & Flüssigkeitsdynamik (15000 = 10%)
5. Plasmaphysik (4500 = 3%)
6. Physik der kondensierten Materie (strukturelle Eigenschaften)
7. Physik der kondensierten Materie (zusammen mit 6. insgesamt 45000 = 30%)
8. Materialwissenschaft (20000 = 13%)
9. Geophysik, Astronomie (30000 = 20%)

Festkörperphysik umfasst in etwa die Punkte 6 bis 8.

### FKP am PD der TUM

- Abstreiter: Niedrigdimensionale Halbleiter
- Böni: Neutronenstreuung, Magnetismus
- R. Gross (am WMI): Magnetismus, Supraleiter
- A. Groß: Theorie der Festkörper–Oberflächen
- Kinder: Supraleiter (technische Anwendung), Phononen (Gitterschwingungen)
- Koch: Halbleiter–Bauelemente (Silizium)
- Laubereau (Dekan): nichtlineare Optik (z.B. Frequenzverdopplung)
- Menzel: experimentelle Oberflächenphysik
- Petry: Polymere, Neutronenstreuung (wiss. Leiter FRM II)
- Stutzmann: Halbleiter (dünne Schichten, Photovoltaik, große Bandlücken, Bioelektronik)
- Vogl: Festkörpertheorie

### Wirtschaftliche Bedeutung

Umsatz 2000 weltweit:

- Halbleiter: 400 Mrd DM
- Stahl: 200 Mrd DM
- Inorg. Chemie: 100 Mrd DM
- Glas: 20 Mrd DM
- Ziegel: 10 Mrd DM

Zum Vergleich: BSP in Deutschland 5000 Mrd DM

### 1.3 Zur Geschichte der FKP

- um 1660: Nicolaus Steno: „Gesetz der konstanten Flächenwinkel“  
Hooke (bekannt vom Federgesetz) erklärt Kristallformen durch „a company of bullets“
- um 1800: geometrische Theorie der Kristallstruktur (Haüy (aus Ungarn))
- 1826: Ohm: Leitfähigkeit von Metallen
- 1837: Faraday: Dielektrizität von Festkörpern
- 1850: Bravais: periodische Atomgitter, Klassifizierung
- 1876: Braun: elektrische Gleichrichtung (Spitzendiode)
- 1887: Hertz: Elektronenemission aus Festkörper–Oberflächen (Photoeffekt)
- 1905: Langevin: Theorie der Suszeptibilität
- 1912/13: Laue, Bragg: Röntgenbeugung an Kristallen  
Born, v. Karmann: Theorie der Gitterschwingungen (Phononen)  
Debye: spezifische Wärme  
Onnes: Entdeckung der Supraleitung
- 1928: Sommerfeld, Bloch: Elektronentransport im Festkörper
- 1947: Bardeen, Brattain, Shockley: erster Transistor
- 1956: BCS–Theorie der Supraleitung (Bardeen, Cooper, Schrieffer)
- 1980: v. Klitzing: Quanten–Hall–Effekt (QHE)
- 1982: Binnig, Rohrer: Rastertunnel–Mikroskop (STM, AFM atomic force microscope)
- 1986: Hochtemperatur–Supraleiter: Bednorz, Müller
- 1998: Fraktionierter Quanten–Hall–Effekt, „composite fermions“ (Störmer, Tsui, McLaughlin)

## 2. Kristallgitter

- Kristalle: diskrete Translationsinvarianz im Raum => Quasi-Impuls  $\hbar \vec{k}$
- Amorphe Festkörper (amorph = strukturlos) => kein Quasiimpuls-Erhaltung

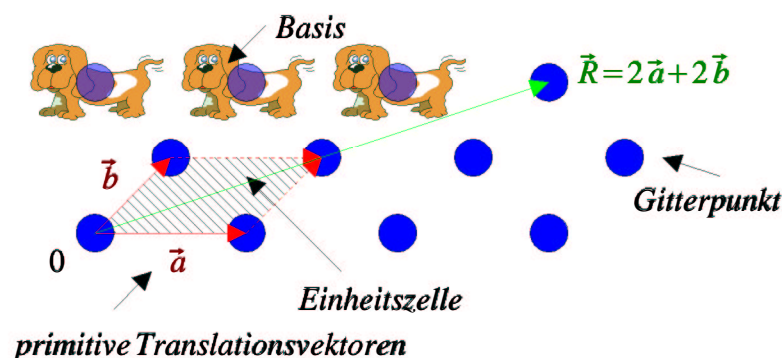
Beispiel Solarzellen: durch eine 100  $\mu\text{m}$  dicke Scheibe kristallines Silizium kann man durchschauen, aber nicht durch 1  $\mu\text{m}$  amorphes Silizium (da keine Quasiimpuls-Erhaltung) => bessere Solarzellen

Beschreibung:

- Punktgitter (mathematisches Konstrukt)  
regelmäßige, periodische, unendliche Anordnung von Punkten im Raum (wo sich Atome im Kristall aufhalten dürfen)
- Basis:  
Anordnung von Atomen, die die Punkte eines Punktgitters besetzen

Punktgitter + Basis => Kristallgitter

Strukturfaktor + Formfaktor => Gitter, exp. durch Röntgenbeugung beobachtbar



Punktgitter aufgespannt durch Translationsvektoren:  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

$$\vec{R} = l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}, \quad l, m, n = -\infty, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, +\infty$$

NB: Gitter mit geringer Symmetrie: primitive Vektoren nicht eindeutig (praktische Wahl: z.B. bestimmte Kristallachsen)

- primitive Vektoren definieren Kristallachsen (internes Koordinatensystem)
- reale Kristalle:  $l, m, n \approx 10^9$

Das von Translationsvektoren aufgespannte Volumen: **Einheitszelle**

Einheitszelle mit kleinstem Volumen ( $V = |\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}|$ ) heißt **primitive Einheitszelle**, aufgespannt durch primitive Vektoren.

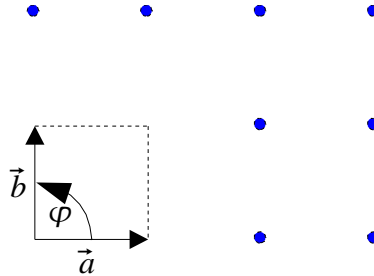
### 2.1 Kristallsysteme und Bravais-Gitter

Je nach Anordnung der Gitterpunkte: Kristallsysteme (im 3D: 7 Systeme) unterschiedlicher Symmetrie.

Im 2D in Richtung abnehmender Symmetrie:

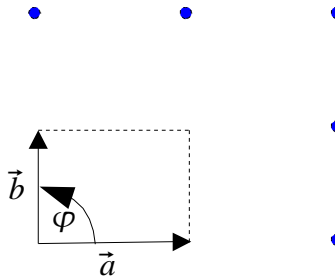
(i) Quadratisches System:

$$|\vec{a}| = |\vec{b}|, \varphi = 90^\circ$$



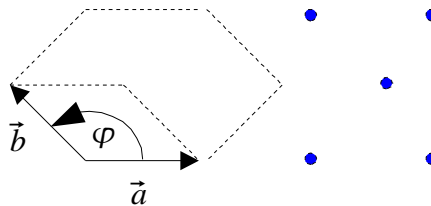
(ii) Rechtwinkliges System:

$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|, \varphi = 90^\circ$$



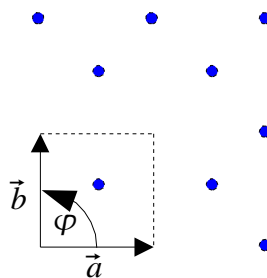
(iii) Hexagonales System:

$$|\vec{a}| = |\vec{b}|, \varphi = 120^\circ$$



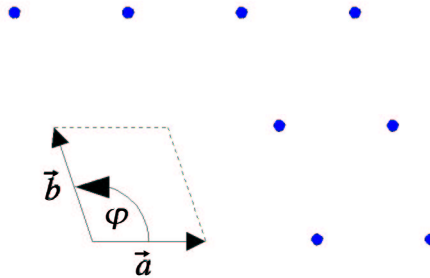
(iv) Zentriertes rechtwinkliges System:

$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|, \varphi = 90^\circ, \text{ Basis umfasst 2 Atome; flächenzentrierte Einheitszelle}$$

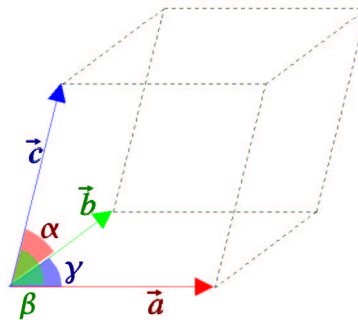


(v) Schiefwinkliges System:

$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|, \varphi \neq 90^\circ \text{ bzw. } 120^\circ$$



3D:



Sieben Systeme (in Reihenfolge zunehmender Symmetrie):

1) triklin:

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

2) monoklin:

$$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = \pi/2 \neq \beta$$

3) orthorhombisch:

$$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = \pi/2$$

4) tetragonal (quadratisch):

$$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = \pi/2$$

5) rhomboedrisch (trigonal):

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

6) hexagonal:

$$a = b \neq c, \alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 120^\circ$$

7) kubisch:

$$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = \pi/2$$

Zulassung nicht-primitiver Einheitszellen: mit 7 Kristallgittern gibt es 14 Bravais-Gitter

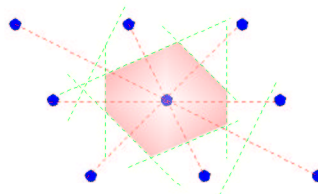
<i>deutsch</i>	<i>englisch</i>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• triklin</li> <li>• monoklin               <ul style="list-style-type: none"> <li>– primitiv</li> <li>– basiszentriert</li> </ul> </li> <li>• orthorhombisch               <ul style="list-style-type: none"> <li>– primitiv</li> <li>– basiszentriert</li> <li>– innen-(raum-)zentriert</li> <li>– flächenzentriert</li> </ul> </li> <li>• rhomboedrisch</li> <li>• tetragonal               <ul style="list-style-type: none"> <li>– primitiv</li> <li>– innenzentriert</li> </ul> </li> <li>• hexagonal</li> <li>• kubisch               <ul style="list-style-type: none"> <li>– primitiv</li> <li>– innenzentriert</li> <li>– flächenzentriert</li> </ul> </li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• triclinic</li> <li>• monoclinic               <ul style="list-style-type: none"> <li>– simple</li> <li>– centered</li> </ul> </li> <li>• orthorombic               <ul style="list-style-type: none"> <li>– simple</li> <li>– base-centered</li> <li>– body-centered</li> <li>– face-centered</li> </ul> </li> <li>• trigonal</li> <li>• tetragonal               <ul style="list-style-type: none"> <li>– simple</li> <li>– centered</li> </ul> </li> <li>• hexagonal</li> <li>• cubic               <ul style="list-style-type: none"> <li>– simple (sc)</li> <li>– body-centered (bc)</li> <li>– face-centered (fc)</li> </ul> </li> </ul>

**NB:** Zentrierte Gitter (mehratomige Basis) entstehen durch Ineinanderschachteln primitiver Gitter.

Besondere Einheitszellen: gleiche Symmetrie wie das zugehörige Bravais-Gitter: **Wigner-Seitz-Zelle** (Teil des Raumes, der einem Gitterpunkt näher ist als jedem anderen Gitterpunkt).

Konstruktion:

- Mittelsenkrechte auf jeder Verbindungslinie des Gitterpunkts mit Nachbarpunkten
- Wahl des kleinsten Vielecks aus diesen Flächen



## 2.2 Gittersymmetrie

Bravais-Gitter: charakterisiert durch Gruppe von Symmetrieeoperationen, die es invariant lassen => mathematische Gruppe: Symmetriegruppe des Gitters.

Natürliche Symmetrieeoperation:

Translation um  $\vec{R}$  :

$$T_{\vec{R}}, \vec{R} = l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}$$

Weitere Operationen:

- Drehung um Winkel:

$$\frac{2\pi}{n} \cdot l, 0 < l < n$$

mit  $n=1, 2, 3, 4, 6$  um eine bestimmte Drehachse

Notation:

$n=2$  Ellipse;  $n=3$  Dreieck;  $n=4$  Quadrat;  $n=6$  Sechseck

### Gittersymmetrien

Drehachsen mit  $n=5, 7, \geq 8$  existieren nicht. Keine raumfüllenden Gitter möglich. Trotzdem  $n=5$  in Natur „realisiert“  $\Rightarrow$  Quasikristalle (s.u.)

- **Spiegelung** der Gitterpunkte an Spiegelebenen

Notation:  $m$  (mirror, miroir)

$mm$  : zwei senkrecht zueinander stehende Spiegelebenen




$mmm$  : drei senkrecht aufeinander stehende Spiegelebenen

- **Inversion** an Inversionszentren:  $x, y, z \rightarrow -x, -y, -z$

Notation:  $I$  oder  $\bar{1}$  (Kristallographie:  $-r \rightarrow \bar{r}$ )

- **Drehinversion**: Drehung um  $n=1, 2, 3, 4, 6$ , gefolgt von Inversion

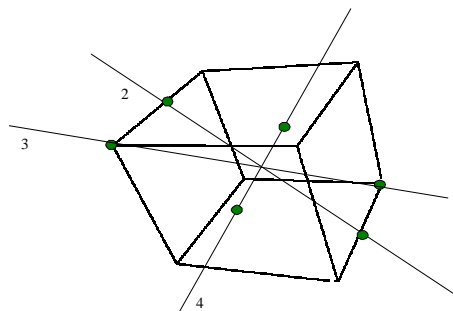
Notation:  $\bar{n} = n \cdot \bar{1}$

( $\bar{3} =$  ,  $\bar{4} =$  ,  $\bar{6} =$  )

NB:  $\bar{1} = I$  (einfache Inversion);  $\bar{2} = m$  (einfache Spiegelung)

- **Schraubenachse**: Drehung, gefolgt von Translation um rationalen Bruchteil des Gittervektors parallel zur Drehachse
- **Gleitspiegelebene**: Translation um  $1/2$  Gitterkonstante, gefolgt von  $m$  an einer Ebene durch Translationsachse

**Beispiel**: Symmetrie primitiv kubischer Gitter (Bezeichnung nach Hermann/Mauguin)



Symmetrie:  $\frac{4}{m} 3 \frac{2}{m}$

$\frac{n}{m}$  : Existenz von  $m$  -Ebene senkrecht zur Drehachse  $n$

Für primitive Bravais-Gitter:

- triklin:  $\bar{1} \bar{1} \bar{1} \hat{=} C_i$
- monoklin:  $\bar{1} \frac{2}{m} \bar{1} \hat{=} C_{2h}$
- orthorhombisch:  $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \hat{=} D_{2h}$
- tetragonal:  $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \hat{=} D_{4h}$
- trigonal:  $\bar{3} \frac{2}{m} \hat{=} D_{3d}$
- hexagonal:  $\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \hat{=} D_{6h}$
- kubisch:  $\frac{4}{m} 3 \frac{2}{m} \hat{=} O_h$

Andere Angaben: Notation nach Schönflies

$C_n$  :  $n$  -zählige Drehachse (  $C$  : Cyclus)

$S_n$  :  $n$  -zählige Drehinversionsachse (  $S$  : Spiegel)



$D_n$  :  $n$  zweizählige Drehachsen senkrecht zu  $n$  -zähliger Hauptdrehachse (  $D$  : Dihedral)

$C_i$  : Inversionszentrum

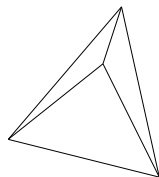
$C_s$  : Spiegelebene

Lage von Spiegelebenen relativ zur Hauptdrehachse: Indizes  $h$  (horizontal, senkrecht zur Achse),  $v$  (vertikal, parallel zur Achse),  $d$  (diagonal)

Speziell für kubisches System:

$T$  : Symmetrie eines Tetraeders (4x  + 3x )

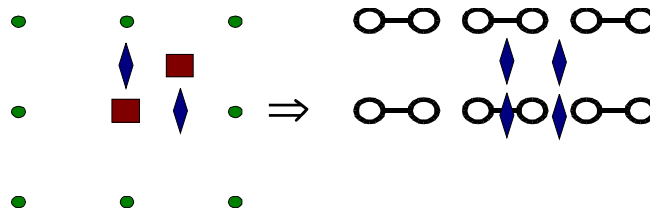
$O$  : Symmetrie eines Oktaeders (3x  + 4x , ... s.o.)



Darstellung der Symmetrieeigenschaften: Projektion auf Ebene (Stereogramm)



- Symmetrie des Punktgitters wird durch Symmetrie i.a. verringert:  
2D-Beispiel:



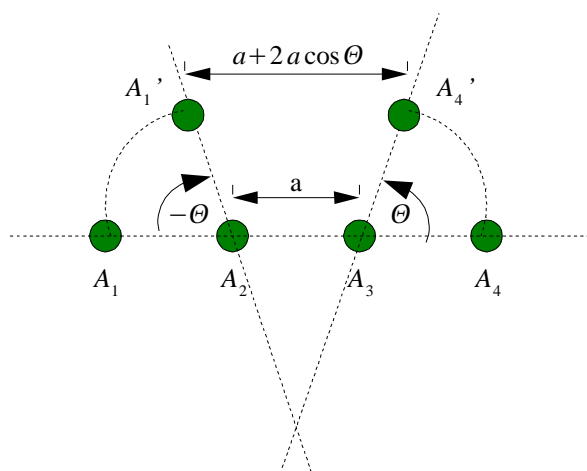
Unter Berücksichtigung der Symmetrie der Basis: 14 Bravaisgitter  $\rightarrow$  230 Kristallgitter

- Systematik:
  - 1) Symmetrie-Operationen primitiver Punktgitter, bei denen ein Gitterpunkt im Raum fixiert ist (d.h. keine Translation!)  
 $\Rightarrow$  **Punktgruppe** des Gitters, 7 Kristallsysteme
  - 2) Symmetrie-Operationen der Punktgitter inkl. Translation  
 $\Rightarrow$  **Raumgruppen**, 14 Bravaisgitter  
(Translation: Erzeugung der Zentrierung durch Verschieben des primitiven Gitters)
  - 3) Symmetrie-Operationen des Punktgitters (ohne Translation) mit Basis, deren Symmetrie geringer als sphärisch ist.  
 $\Rightarrow$  32 **kristallographische Punktgruppen (Kristallklassen)**
  - 4) Symmetrie-Operationen der 14 Bravais-Gitter mit Basis und Translation  
 $\Rightarrow$  230 Raumgruppen der möglichen Kristallstrukturen

Von 230:

- 73 durch Kombination der 32 Punktgruppen der Basis mit den 14 Bravais-Gittern
- 157 durch Einbeziehung der Operationen „Schraubenachse“ und „Gleitspiegelebene“

Es gibt nur Punktgitter mit Drehachsen  $n=1, 2, 3, 4, 6$ .



Drehung um  $\theta$  erzeugt wieder Gitterpunkte, wenn  $\theta$  ein erlaubter Symmetriewinkel  $\theta=360^\circ/n$

ist  $\Rightarrow A''_1, A'_4$  sind wieder Gitterpunkte

$$\Rightarrow a + 2a \cos \theta = ma, \quad m \in \mathbb{N} \text{ (Vielfaches der Gitterkonstanten)}$$

$$a \left( 1 + 2 \cos \left( \frac{2\pi}{n} \right) \right) = ma$$

$$|\cos(2\pi/n)| = 0 \Rightarrow n = 4$$

$$|\cos(2\pi/n)| = 1/2 \Rightarrow n = 3, 6$$

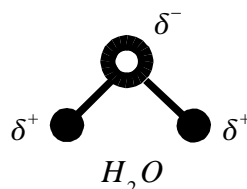
$$|\cos(2\pi/n)| = 1 \Rightarrow n = 1, 2$$

**Quasikristalle** (siehe Folie):

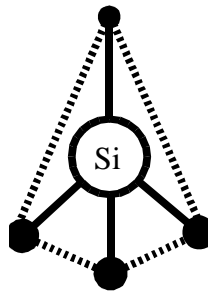
- Erzeugung scheinbar nicht-kristalliner Struktur durch Projektion eines N-dimensionalen periodischen Gitters auf niedrigere Dimensionen.
- Beispiel: Erzeugung eines 1D-Quasikristalls („Fibonacci“-Folge) durch geeignete Projektion aus einem 2D quadratischen Gitter.  
Fibonacci-Folge:  $n_n = n + (\tau - 1) \text{int}[n/\tau]$ ,  
wobei  $\tau = 1 + 1/\tau$  der goldene Schnitt ist.
- Folge wird generiert, indem man aus einem Quadratgitter einen Bereich rund um eine Linie mit Steigung  $1/\tau$  mit vertikaler Höhe 1 auswählt und alle Gitterpunkte in diesem Bereich auf die x-Achse projiziert.  
Der Abstand zwischen zwei projizierten Gitterpunkten ist entweder  $\tau$  oder 1.
- Deflationsregel: Ersetzt man in der Folge den Abstand 1 durch  $\tau$  und  $\tau$  durch  $(\tau, 1)$ , erhält man wieder eine Fibonacci-Folge.

Zur Bedeutung von Symmetrie in Festkörpern:

- Symmetrie eines Kristallgitters  $\Rightarrow$  Anisotropie makroskopischer Observablen (z.B. Schallgeschwindigkeit in verschiedenen Richtungen, optische Anisotropie etc.)
- Bestimmte Kristalleigenschaften sind nur für bestimmte Symmetrien möglich, z.B. spontane Polarisation (Pyroelektrika, Ferroelektrika). Elektrische Dipolmomente in EZ, wenn Symmetrie  $\bar{1} (= C_i), m (= C_s), n (= C_n), nm (= C_{nv})$ .



Silan (  $\text{SiH}_4$  )



- Symmetrieoperationen entsprechen quantenmechanischen Operatoren, die mit dem Hamiltonoperator kommutieren (da  $\hat{H}$  bei Anwendung der Operation invariant bleibt) (z.B. Translation um Gittervektor  $\vec{R} : \hat{T}_{\vec{R}}$ , Rotation um  $360^\circ/n : \hat{D}_n$ ).  
Quantenmechanik:  $\hat{H}$  und Symmetrieoperator haben gemeinsames System aus Eigenzuständen.

Beispiel: Symmetrie  $\hat{C}_2 \Rightarrow (\hat{C}_2)^2 = I$ , d.h. Eigenwerte von  $\hat{C}_2$  sind  $\pm 1$ ;

$$\hat{C}_2 \psi^+ = +1 \psi^+, \hat{C}_2 \psi^- = -1 \psi^- \text{ (gerade und ungerade Parität)}$$

$$\Rightarrow \text{Eigenwerte von } \hat{H} : \hat{H} \psi^+ = E^+ \psi^+, \hat{H} \psi^- = E^- \psi^-, E^+ \neq E^-$$

- Volles Potenzial der Symmetrie für FKP: Gruppentheorie; Symmetrieoperationen bilden mathematische Gruppen (d.h. Existenz der Identität  $I$ , des Inversen  $S S^{-1} = I$ , Assoziativität  $S_1(S_2 S_3) = (S_1 S_2) S_3$ ).

Leicht verständliche Einführung: „Physikalische Chemie“, P. W. Atkins, Kapitel 16

- Symmetrie und Erhaltungssätze:

$$\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{O}], \quad \hat{H} = \frac{(\hat{p})^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r}, t)$$

Beispiel: Energieerhaltung aus Translationsinvarianz in der Zeit

Translation um  $\Delta t \Rightarrow \psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi' = \psi(\vec{r}, t + \Delta t)$ , Beschreibung durch unitären Operator

$$\hat{S}_t : \psi' = \hat{S}_t \psi$$

Da  $\hat{S}_t$  unitär:  $\hat{S}_t = \exp(i\hat{L}t)$ ,  $\hat{L}$  hermitesch.

bei infinitesimalem  $\Delta t$ :  $\hat{S}_t = \hat{1} + i\hat{L}\Delta t \Rightarrow \psi' = \hat{S}_t \psi = \psi + i\hat{L}\Delta t \psi$

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = \frac{\psi' - \psi}{\Delta t} = i\hat{L}\psi$$

Vergleich mit zeitabhängiger Schrödingergleichung:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi$$

$$\Rightarrow \hat{L} = -\frac{1}{\hbar} \hat{H} \Rightarrow \hat{S}_t = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)$$

Translationsinvarianz in Zeit  $\Rightarrow \hat{L}$  nicht zeitabhängig:

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$$

$\Rightarrow$  insgesamt:

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow \text{Energieerhaltung}$$

Analog: Translationsinvarianz im Raum  $\Rightarrow$  Impulserhaltung

Rotationssymmetrie: Drehimpulserhaltung

Inversionssymmetrie: Paritätserhaltung

Umkehrbarkeit von QM-Prozessen folgt aus Inversionssymmetrie in der Zeit.

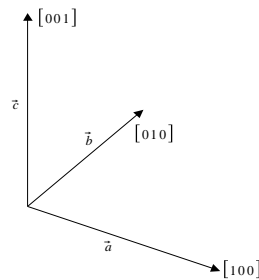
Translationsinvarianz um *diskrete* Gittervektoren: Erhaltung des **Quasiimpulses** (crystal momentum)  $\hbar \vec{k}$ ,  $\vec{k}$  kann nur diskrete Werte annehmen (stehende Wellen im Kristall,  $k = (2\pi)/\lambda$ ).

### 2.3 Richtungen und Flächen im Kristall

(i) Angabe von Richtungen:

kleinste ganze Maßzahlen (d.h. Vielfache primitiver Translationsvektoren) des Gittervektors, der in die gewünschte Richtung zeigt:

$\vec{R} = 6\vec{a} + 9\vec{b} + 3\vec{c} = 3(2\vec{a} + 3\vec{b} + \vec{c}) \Rightarrow [2\ 3\ 1]$  (bei negativen Zahlen schreibt man statt Minus einen oberen Querstrich)



Angabe nicht einer bestimmten Richtung, sondern Gesamtheit aller äquivalenten Richtungen:

$\langle \ \rangle$  statt  $[ \ ]$ ; Beispiel:

$$\langle 100 \rangle = [100][010][001][\bar{1}00][0\bar{1}0][00\bar{1}]$$

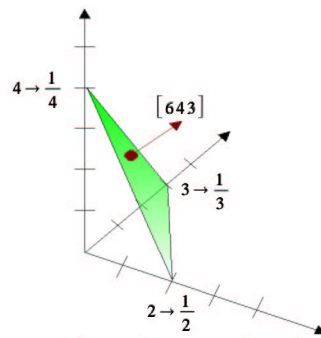
(ii) Angabe von Flächen: **Miller'sche Indizes**; Schreibweise:  $(hkl)$

Bestimmung:

- 1) Bestimmung der Schnittpunkte der Flächen mit Achsen  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ,  $\Rightarrow$  Maßzahlen.
- 2) Kehrwerte der Maßzahlen
- 3) Bestimmung der drei kleinsten ganzen Zahlen  $h, k, l$ , die im gleichen Verhältnis stehen wie Kehrwerte

Beispiel:

$$\left( \frac{1}{2} \frac{1}{3} \frac{1}{4} \right) \Rightarrow \left( \frac{6}{12} \frac{4}{12} \frac{3}{12} \right) \Rightarrow (643)$$



Gesamtheit aller äquivalenten Ebenen:  $\{hkl\}$  statt  $(hkl)$

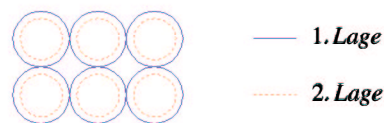
Im kubischen System: Miller'sche Indizes = Richtung der Flächennormalen

## 2.4 Wichtige spezielle Gitter

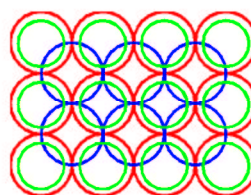
### 2.4.1 Elementare Festkörper (A)

Hauptsächlich kubisch oder hexagonal

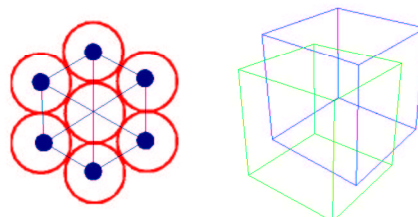
- wegen großer Symmetrie => starke Bindungskräfte
- beste Raumfüllung => ebenfalls starke Bindungskräfte
- primitiv kubisch (sc): Raumfüllung nur ca. 52%; tritt bei Atomen auf, die sechs Bindungen bevorzugen



- innenzentriert kubisch (bcc): Raumfüllung ca. 68%



- flächenzentriert kubisch (fcc), hexagonal dichtgepackt (hcp hexagonal close packed ): dichteste Packung gleich großer Kugeln (Keplersche Behauptung)



(i) 3. Lage genau über 1. Lage: Stapelfolge A-B-A-B-A-B-...

=> hexagonales Gitter mit Basis aus gleichen Atomen bei  $0,0,0$  und  $2/3,1/3,1/2$  = hcp-Struktur

(ii)3. Lage liegt über „ungenutzten Lücken“ der 1. Lage: Stapelfolge A–B–C–A–B–C–...  
=> flächenzentriert kubisches Gitter mit einatomiger Basis fcc (hexagonal dichtgepackte Ebenen senkrecht zur Raumdiagonale, d.h. zur  $(111)$ -Fläche)

In beiden Gittern ist die Raumfüllung ca. 74%; in hcp-Struktur gilt  $c/a = \sqrt{8/3} \approx 1,633$ .

Wichtige Beispiele:

- sc: Po (1 Element im Periodensystem, das so kristallisiert)
- bcc: Fe, Ta, W, ... (14)
- fcc: Al, Cu, Ag, Au, Pt, alle Edelgase (20)
- hcp: Be, Ti, Cd (24)

(diese Elemente sind aus den Gruppen I, II und VIII)

Alle anderen Elemente (Gruppen III, IV, V im Periodensystem):

- Diamantstruktur:  $C_{\text{diam}}$ , Si, Ge, Sn  
fcc-Gitter mit Basis aus gleichen Atomen bei  $0,0,0$  und  $1/4,1/4,1/4$ ; Raumfüllung nur 34%
- hexagonale Struktur: Graphit (thermodynamisch stabile Form von C)  
hexagonal gepackte Ebenen, die nur schwach in c-Richtung verbunden sind (Grund:  $sp^2$ -Hybridisierung;  $sp^2$ -Hybrid: s.u.)
- hexagonal mit Schraubenachse: Si, Se, Te

### 2.4.2 AB-Verbindungen (binär)

Typ AB,  $A_nB_m$ : binär

Typ ABC,  $AB_mC_n, \dots$ : ternär

Typ  $AB_lC_mD_n, \dots$ : quaternär

Typ AB: hauptsächlich fünf verschiedene Strukturen:

(i) Cäsiumchlorid-Struktur ( $CsCl$ ):

einfach kubisch, mit Basis aus unterschiedlichen Atomen (Anion und Kation) bei  $0,0,0$  und  $1/2,1/2,1/2$  => jedes Ion hat 8 nächste Nachbarn der anderen Sorte; wird bevorzugt für gleich großes Anion und Kation.

Beispiele:  $CsCl$ ,  $CsBr$ ,  $TlCl$ ,  $FeAl$ , ...

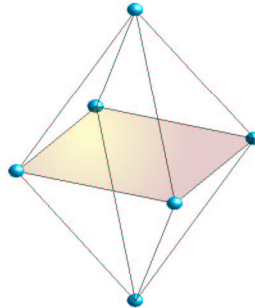
(ii) Natriumchlorid-Struktur:

kubisch, 6 nächste Nachbarn in Form eines regelmäßigen Oktaeders; Basis  $(0,0,0)$   $(1/2,1/2,1/2)$ , kubisch, flächenzentriert

Beispiele:

- $NaCl$  (Kochsalz)
- $AgBr$  (Photopapier)
- $NbN$  (Supraleiter)

- LiF (Optik)
- TiN ( falsches Gold )

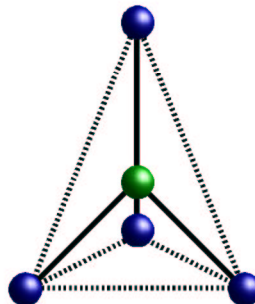


(iii)

(iv) Zinkblende und Wurtzit-Struktur

Bei vielen kovalenten (wenig ionischer Charakter) Festkörpern (z.B. Halbleitern):  
 richtungsabhängige WW => Symmetriebrechung, vier nächste Nachbarn, tetraedrische  
 Anordnung der Atome

Struktureller Baustein: Tetraeder



Zwei Stapelmöglichkeiten für Tetraeder:

- übereinander mit parallelen Seitenkanten, Folge ABCABC... => **Zinkblende-Gitter**  
 kubisch flächenzentriert, unterschiedliche Atome auf Basispunkten = Diamantstruktur  
 Beispiele: CdS, GaAs, ZnSe, ... (III-V, II-VI-Materialien)

- Stapelung der Tetraeder mit Folge ABAB => hexagonales **Wurtzit-Gitter**  
 übereinander liegende Tetraeder sind 120° gegeneinander verdreht (vgl. dichteste  
 Kugelpackung: fcc = Zinkblende, hcp = Wurtzit)

Beispiele: GaN, AlN, ZnO (Halbleiter mit großer Bandlücke, wide gap semiconductors )

(v) Rotnickelkies-Struktur (NiAs)

hexagonale Struktur wie Wurtzit, hier Spiegelsymmetrie senkrecht zur 6-zähligen Drehachse

ZnO  $6mm = C_{6v}$

$$\text{NiAs} \frac{6}{m} \frac{2}{2} \frac{2}{m} = D_{6h}$$

### 2.4.3 Komplizierte Kristallgitter

Verbindungen vom Typ  $AB_2$ :

- Flußspat:  $CaF_2$   
Ca auf Punkten eines fcc-Gitters, jeweils 8 F-Atome auf Würfel um Ca
- Pyrit:  $FeS_2$   
 $S_2$ -Hanteln und Fe bilden jeweils fcc-Teilgitter, die um halbe Raumdiagonale gegeneinander verschoben sind
- Kuprit: Cu  
Cu auf fcc-Gitter, O auf bcc-Gitter um  $\frac{1}{4}$  Raumdiagonale verschoben
- Quarz:  $SiO_2$  (Si und O sind häufigste Elemente in der Erdkruste)  
aufgebaut aus  $SiO_4$ -Tetraedern; viele verschiedene Strukturen (triklin, rhomboedrisch, hexagonal, tetragonal, kubisch)

Beispiele für ternäre Festkörper:

- Kalkspat  $CaCO_3$ , rhomboedrisch  
mehr als 200 Wachstumsformen (Polytypen), bekannt wegen Doppelbrechung
- Spinell:  $MgAl_2O_4$   
Laser-Kristalle
- Perowskit-Struktur:  $BaTiO_3$  Bariumtitanat, kubisch  
besonders wichtig wegen Hochtemperatur-Supraleitung  
z.B.  $Ba_xLa_{2-x}CuO_4$ ,  $YBaCu_3O_7$ ,  $Pb_2Sr_2RCu_3O_8$  (R: „rare earth“, seltene Erden)

Formel zur Berechnung der Atome pro Einheitszelle (für kubisch; Achtung bei hexagonalen Einheitszellen!):

$$N_{EZ} = N_I + \frac{N_F}{2} + \frac{N_K}{4} + \frac{N_E}{8}$$

$N_I$ : Atome im Inneren

$N_F$ : Atome auf Seitenflächen

$N_K$ : Atome auf Kanten

$N_E$ : Atome auf Ecken

### 2.5 Amorphe Festkörper (Gläser) und Polymere

Amorph: „ohne Gestalt“

Erreichen des amorphen Zustands: „schnelles“ Abkühlen (abschrecken, quenchen) aus Schmelze oder Gasphase (1 K/h für gute Glasbildner,  $10^9$  K/s für z.B. Si).

Die Abkühlung muss so schnell gehen, dass die Atome ihre Kristallgitterplätze nicht erreichen können.

Amorphe Festkörper haben im Vergleich zu kristallinen Festkörpern:

- geringe Dichte
- große freie Enthalpie  
(Gibbs-Potenzial:  $G = U - TS + pV$ ,  $U$ : innere Energie,  $S$ : Entropie)

NB: Bei  $T, p = const$  ist  $G$  minimal (Kristall); amorphe FK sind nicht im Grundzustand: metas



tabil, Kristallisation bei Erhöhung von  $T$

- größere Nullpunkts-Entropie

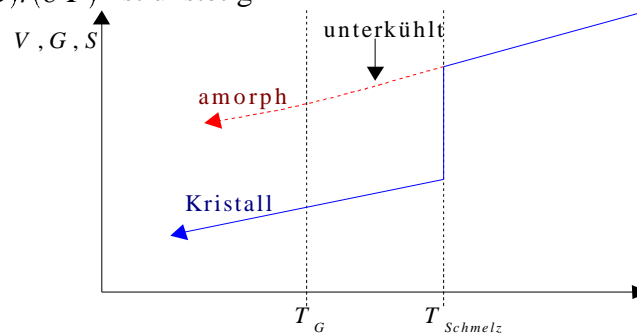
$$S(T \rightarrow 0) \neq 0, \quad S = k \ln W$$

- Gläser: charakteristische Temperatur (**Glasübergangstemperatur**)  $T_G$

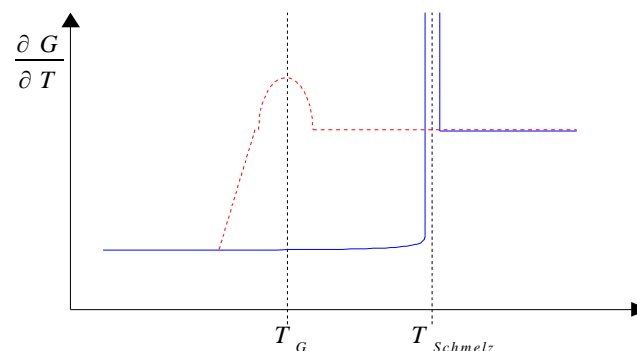
Übergang fest-flüssig,  $\eta(T_G) = 10^{14}$  poise

Glasübergang: Phasenübergang 2. Ordnung

$G(T)$  ist stetig,  $(\partial G)/(\partial T)$  ist unstetig



Kanzmann-Regel:  $T_G \approx 0,7 T_{Schmelz}$



auch Wärmekapazität, Wärmeausdehnung

- Beschreibung der Struktur: **Radialverteilungsfunktion**  $J(r)$  (radial distribution function RDF)

Ausgehend vom Ursprungsatom ( $r = 0$ ) Dichteverteilung  $\varrho(r)$  im amorphen FK:

$$J(r) = 4\pi r^2 \varrho(r)$$

- Kontinuum:  $\varrho(r) = \varrho_0$  (makroskopische Dichte)  $\rightarrow$  Grenzfall für  $r \rightarrow \infty$   
diskrete Massenverteilung am Ort von Atomen:

$$\varrho(r) = \frac{M_{atom}}{V_{atom}} = \varrho_{atom}$$

- Anzahl von Atomen zwischen  $r_1$  und  $r_2$

$$N(r_1, r_2) = \frac{1}{M_{atom}} \int_{r_1}^{r_2} J(r) dr$$

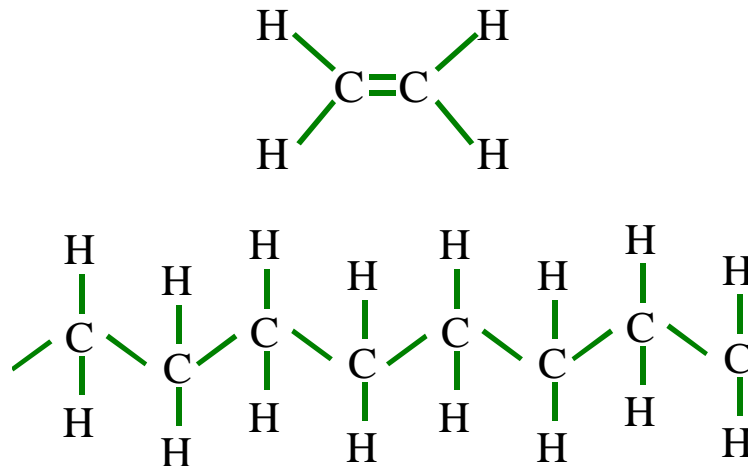
Integral über ersten Peak der RDF: **Koordinationszahl**  $Z$

- $Z=12$  : fcc, hcp
- $Z=8$  : bcc, CsCl
- $Z=6$  : sc, hexagonal, NaCl
- $Z=4$  : Diamant, Zinkblende, Wurtzit
- $Z=2$  : Ketten (Se, Polymere)

RDF => Atomabstände wie im Kristall; Unordnung durch Winkelunordnung (dihedrischer Winkel  $\varphi_D$ )

- Polymere: 1- oder 2-dimensionale Verbindungen, sequentiell aus Vorläufern (Monomere) zusammengesetzt (Polymerisation)

Beispiel: Monomer Äthylen (Ethen)



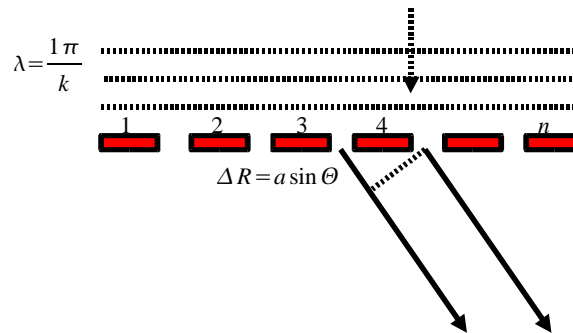
Bildung eines FK:

- statistische Verknäuelung der Ketten
- Kristallisation (parakristalliner Zustand)

### 3. Beugung an Kristallen, Realstruktur

Aufklärung der Realstruktur: Beugung am Kristallgitter, mit Licht ( $\lambda \approx a$ , Röntgenstrahlung,  $\hbar\omega = 20\text{keV}$ ) oder Materiewellen ( $e^-$ ,  $n$  (FRM II))

#### 3.1 Beugung am Strichgitter



$D$  : Gesamtbreite des Gitters

$N$  : Anzahl der Striche

$b \ll a$

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

Es gilt:

$$k = k'$$

$$\text{Beugungswinkel: } \cos \theta = \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}'}{k^2}$$

Feld an  $\vec{R}_{obs}$  :

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{R}_{obs}) &= C e^{-i\omega t} \sum_{l=1}^N e^{i\vec{k}' \cdot \vec{R}_l} = C \exp\{i(\vec{k}' \cdot \vec{R}_1 - \omega t)\} \cdot \{1 + e^{-i\vec{k}' \cdot \Delta \vec{R}} + e^{-i\vec{k}' \cdot 2\Delta \vec{R}} \dots\} = \\ &= \dots (\text{geometrische Reihe}) \dots = \exp\left[i \frac{N-1}{2} \vec{k}' \cdot \Delta \vec{R}\right] \frac{\sin(1/2 N \vec{k}' \cdot \Delta \vec{R})}{\sin(1/2 \vec{k}' \cdot \Delta \vec{R})} \end{aligned}$$

Intensität am Punkt  $\vec{R}_{obs}$  ( $D = N a \gg a$ ):

$$I(\vec{R}_{obs}) = |E(\vec{R}_{obs})|^2 = E_0^2 \frac{\sin^2\left(N \pi a \sin \frac{\theta}{\lambda}\right)}{\sin^2\left(\pi a \sin \frac{\theta}{\lambda}\right)} = I_0 \frac{\sin^2\left(\frac{\pi D \sin \theta}{\lambda}\right)}{\sin^2\left(\frac{\pi a \sin \theta}{\lambda}\right)}$$

- Maxima von  $I$  : Nullstellen des Nenners

$$\frac{\pi a \sin \theta}{\lambda} = \pm m \pi \Rightarrow a \sin \theta = \pm m \lambda \quad (m \in \mathbb{N})$$

- Breite eines Maximums: bestimmt durch Gesamtbreite  $D$ , Anzahl  $N$  der Gitterperioden; FWHM (full width @ half maximum)  $\approx \lambda/D$ .

Für kleinere Beugungswinkel  $\theta \approx \sin \theta$  ergibt sich qualitativ:

[Diagramm Sinus]

**NB:**

$$(i) \quad a \sin \theta = \pm m \lambda \Rightarrow k a = \frac{\pm 2 \pi m}{\sin \theta}$$

Bei gegebenem  $\theta$ :  $k a = \text{const}$ ;

$a$  und benötigter Wellenvektor  $k$  für konstante Interferenz sind invers zueinander;  
kleine Strukturen  $\Leftrightarrow$  große Wellenvektoren  $\Leftrightarrow$  kleine  $\lambda$

(ii) Einfluss einer endlichen Spaltbreite  $b$ : Amplitudenfunktion:

$$I = I_0 A(b, \lambda, \theta) \frac{\sin^2 \dots}{\sin^2 \dots}$$

$A$  aus Übergang  $b \rightarrow D, N \rightarrow \infty, a \rightarrow 0$ :

$$\Rightarrow A = \frac{\sin^2 \left( \pi b \frac{\sin \theta}{\lambda} \right)}{\left( \frac{\pi b \sin \theta}{\lambda} \right)^2}$$

Amplitudenfunktion des Einfachspalts

### 3.2 Beugung am Kristallgitter

Verallgemeinerung auf FK:

(i) Gitterkonstanten  $a, b, c \approx 2 \text{ \AA} \dots 100 \text{ \AA} \Rightarrow$  Röntgenstrahlen mit  $\lambda \leq 1 \text{ \AA}$ , Materiewellen ( $e^-, n$ )

(ii) 1D  $\rightarrow$  3D: komplizierte Streugeometrie ( $\Rightarrow$  reziprokes Gitter, **Brioullinonen**)

(iii) Einfluss der Basis: komplizierter Amplitudenfaktor

Siehe: „Interactive Tutorial about Diffraction“

<http://www.uni-wuerzburg.de/mineralogie/crystal/teaching>

#### 3.2.1 Primärstrahlen

A) Röntgenstrahlen

$$\lambda = c/f = (2\pi c)/\omega, \quad E = \hbar \omega, \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

$$\lambda = 1 \text{ \AA} \Rightarrow f \approx 3 \cdot 10^{18} \text{ Hz}, \quad E \approx 12 \text{ keV}, \quad k \approx 6 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

Erzeugung: Beschießen eines Metalltargets (Cu, Mg) mit beschleunigten Elektronen  $\Rightarrow$  Bremsstrahlungs-Kontinuum + charakteristische inneratomare Strahlung

Beispiel: Cu ( $K_\alpha$ -Linie:  $\lambda = 1,5405 \text{ \AA}$ )

[Grafik Röntgenröhre]

Dipol-Strahlung:

$$I \propto \left| \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} \right| = \left| \frac{e Z e}{m_e r} \right|^2 \propto Z^2$$

[Grafik r-E-Diagramm]

$\hbar \omega = E_m - E_n$  charakteristische Strahlung

Auch als Analytik-Methode: EDX (energy dispersive X-ray spectroscopy)  
moderne Röntgenquelle (durchstimmbare): Synchrotrons, z.B. ESRF (European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble), BESSY II (Berliner Synchrotron), ALS (Advanced Light Source, Berkeley)

B) Materiewellen

de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda = h/p$ ,  $E = p^2/(2m)$ ,  $\lambda = \sqrt{h^2/(2mE)}$

Elektronen:  $E \approx 10^5$  eV (im FK),  $E \approx 1$  keV (an FK-Oberfläche, Eindringtiefe  $\approx 5$  Å)

Neutronen: schwache WW  $\Rightarrow$  große Eindringtiefe; kalte Neutronen ( $E \ll kT$  @ 300 K, 25 meV)  
)  $\Rightarrow$  Phononenspektroskopie, magnetische Eigenschaften