

## Kristallstrukturen:

**Kristall = regelmäßige Anordnung von identischen Bausteinen**

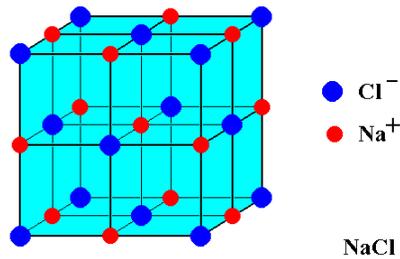
Kristallstruktur = Gitter + Basis

- Ein Gitter ist eine regelmäßige, *periodische* Anordnung von Punkten im Raum.
- In drei Dimensionen ergeben sich aus den Symmetrieeigenschaften der Punkgruppen **14** verschiedene Gitter (Bravaisgitter)
- Für die Strukturanalyse ist es nützlicher, die Lage der Eben durch die Millerschen Indizes anzugeben.

### • Wichtige Gitter und Kristallstrukturen:

#### ➤ Natriumchloride Struktur:

Das Bravais-Gitter ist Kubische flächenzentriert. Die Basis besteht aus einem  $\text{Cl}^-$  -Ion bei 000 und einem  $\text{Na}^+$  -Ion bei  $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ . (Bild 1)

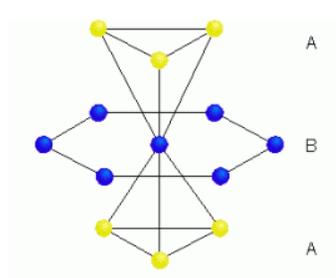


**Bild 1:** Die Kristallstruktur von Natriumchloride

#### ➤ Kristallstrukturen mit dichtester Kugelpackung:

Die Strukturen der Metalle sind relativ einfach zu beschreiben, weil sich alle Atome eines Elements durch Kugeln gleicher Größe darstellen lassen. Man unterscheidet Metalle mit dichtester Kugelpackung und Strukturen.

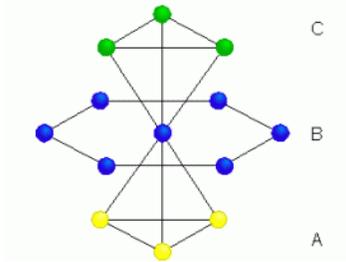
- Die eine wird als hexagonal-dichteste Packung (**hcp**: hexagonal close-packed) bezeichnet. Hier ist die Schichtfolge AB AB..., d. h. die dritte Schicht liegt genau über der ersten (Bild 2).



**Bild 2:** hexagonal close-packed (hcp)

- Bei der anderen Kristallstruktur sind die Kugeln der dritten Schicht über den Mulden der ersten Schicht lokalisiert, so dass die zweite Schicht die eine Hälfte und die dritte

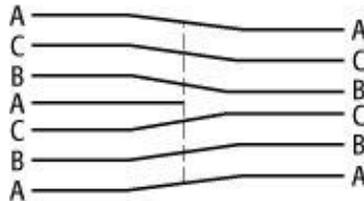
Schicht die verbleibenden Mulden der ersten Schicht bedeckt. Diese Struktur ist kubisch dichtest gepackt (**fcc** close-packed). In diesem Fall ist die Schichtfolge ABCABC..., d. h. die vierte Schicht liegt genau über der ersten (Bild 3).



**Bild 3:** Kubisch flächenzentriert (close-packed)

- **Stapelfehler in dichtesten Kugelpackungen**

Ein Stapelfehler ist ein 2-dimensionaler Gitterfehler in bestimmten Kristallstrukturen. Er tritt z. B. in der kubisch-flächenzentrierten Kristallstruktur (fcc) auf, die als Stapelung von Kristallebenen mit der Abfolge ABCABC... beschrieben werden kann. Wird diese Regelmäßigkeit unterbrochen (z.B. ABCBCABC...), so liegt ein Stapelfehler vor (Bild 4). Üblicherweise bildet sich hierbei eine lokale hcp-Gitterstruktur mit der Stapelung ABAB... aus!



**Bild 4:** die Stapelsequenz ABCABCA.. nicht mehr stimmt; sie lautet jetzt ABCBCA... Die Leerstellen Scheibe ist offensichtlich von einer (Stufen) Versetzung berandet.

- **Symmetriegesetze**

Unter einer Symmetrieeoperation versteht man eine geometrische Operation (Spiegelung, Drehung usw.), nach deren Ausführung alle Punkte eines Punktsystems miteinander zur Deckung kommen.

Die hierzu benützten geometrischen Gebilde (Ebenen, Achsen usw.) nennt man Symmetrieelemente.

Die Symmetrieelemente:

1. Drehungen
2. Spiegelungen
3. Symmetriezentrum
4. Drehung + Spiegelung = Drehspiegelung

Durch Kombination der drei Symmetrieelemente (Spiegelung, Drehung und Drehspiegelung) ergeben sich die 32 Symmetrieklassen, in welche alle vorkommenden Kristalle eingeteilt werden können.