

# Theorie der Kondensierten Materie I

Notiztitel

01.11.2010

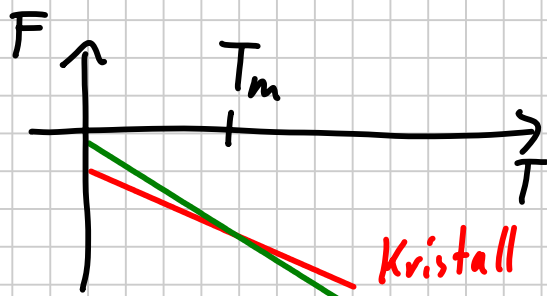
## 1 Periodische Strukturen

Experimentelle Erfahrungstatsache: kondensierte Materie ordnet sich bei genügend tiefen Temperaturen  $T < T_m$  häufig als **Kristall**, d.h. weist eine periodische Struktur auf.

Begründung: • Atome sind **äquivalent** (eiatomiger Fall), daher sollte Struktur von jedem Platz gleich aussehen  $\rightarrow$  **Translationsinvarianz** (mehratomiger Fall: Atom  $\rightarrow$  Atomgruppe)

• Kristall hat i.A. niedrigere **Energie**  $E$  (da jedes Atom optimale Nahstruktur hat), auch niedrigere **Entropie**  $S$

$\Rightarrow F = E - TS$  bevorzugt  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Kristall} \\ \text{Unordnung} \end{array} \right\}$  für  $\left\{ \begin{array}{l} \text{niedrige} \\ \text{hohe} \end{array} \right\} T$



Vorteil für Theorie: Kristall durch wenige Parameter charakterisiert (statt  $10^{23}$  Freiheitsgrade)

**Aber:** es gibt wichtige Ausnahmen:

Gläser, Kunststoffe, amorphe Metalle + Halbleiter, ...

häufig: schnelles Erstarren, metastabil

⑥

# 1.1 Kristall-System und Kristall-Gitter

Idealer Kristall: unendlich ausgedehnt, streng periodisch.

Bravais-Gitter: besteht aus (äquivalenten) Gitterpunkten im Raum; in  $d$  Dimensionen durch  $d$  linear unabhängige

Basisvektoren darstellbar:  $\Lambda = \{ \vec{R}_{\vec{n}} \mid \vec{R}_{\vec{n}} = \sum_{i=1}^d n_i \vec{a}_i; \vec{n} \in \mathbb{Z}^d \}$

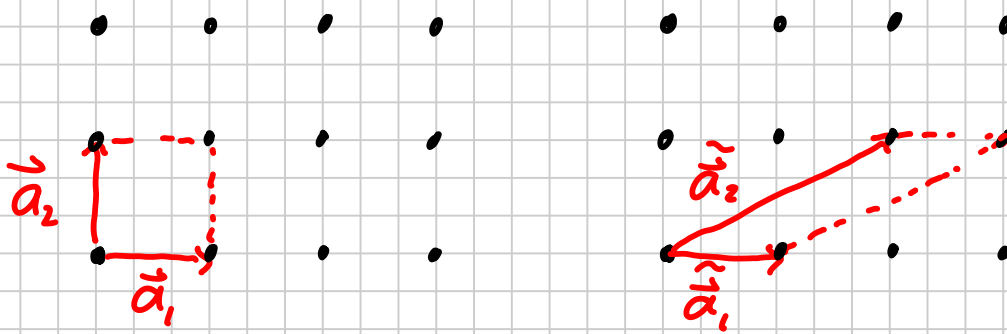
(Abbildung zwischen Gitterpunkten und  $\mathbb{Z}^d$ )

Klar: • Gitter vollständig durch Basisvektoren definiert  
→  $d^2$  Parameter in  $d$  Dimensionen

•  $\Lambda$  ist invariant unter Translation um einen beliebigen Gittervektor

Die Basisvektoren spannen die/eine Einheitszelle auf.

Beispiel



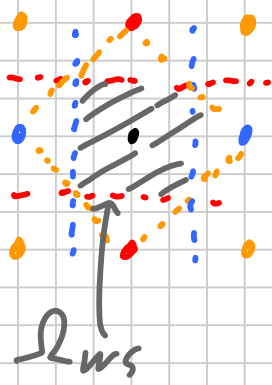
Primitive Einheitszelle:  $\Omega = \{ \vec{R} \mid \vec{R} = \sum_{i=1}^d \varphi_i \vec{a}_i; \varphi_i \in [0, 1] \}$ ;

nicht eindeutig, da Basisvektoren nicht eindeutig.

Wigner-Seitz-Zelle: Einheitszelle um Gitterpunkt  $\vec{R}_{\vec{n}}$  (meistens um Ursprung); besteht aus Punkten, die näher am Referenzpunkt als an anderen Gitterpunkten ist:

$$\Omega_{ws}^{\vec{R}_{\vec{n}}} = \{ \vec{R} \mid |\vec{R} - \vec{R}_{\vec{n}}| \leq |\vec{R} - \vec{R}_{\vec{n}'}| \forall \vec{n}' \neq \vec{n} \}; \quad \Omega_{ws} \equiv \Omega_{ws}^{\vec{0}}$$

Beispiel:



Konstruktion durch  
„Mittelsenkrechte“

Volumen einer Einheitszelle:

$$\text{Vol}(\Omega) = |\det(A)| \quad \text{für } A = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_d)$$

Speziell:  $\text{Vol}(\Omega) = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$  für  $d=2$

$$\text{Vol}(\Omega) = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| \quad \text{für } d=3$$

Punktgruppe: Operationen, die einen Punkt invariant lassen und ein Gitter in sich überführen, z.B.:

- Rotationen um eine Achse: 2, 3, 4, 6-zählig
- Spiegelung an Ebene
- Inversion
- nicht: Translation

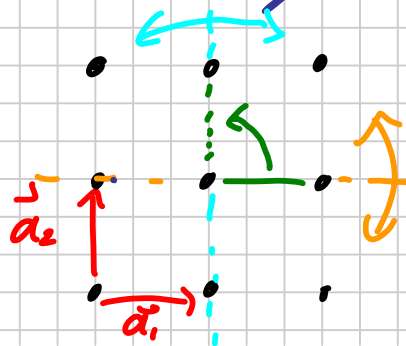
Wichtig: die WS-Zelle hat die <sup>Punkt</sup>Symmetrie des Gitters

Kristallsystem: alle Gitter mit gleicher Punktgruppe

$d=2$  2 kürzeste Basisvektoren mit Länge  $a_1, a_2$ , Winkel  $\alpha_1$

1. Quadratisches System

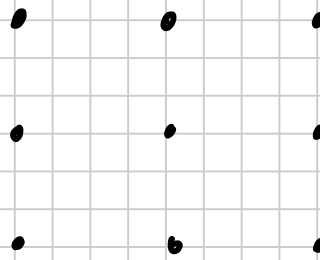
z.B.  $a_1 = a_2, \alpha_1 = 90^\circ$



- Symmetrioperationen:
- 4-zählige Drehsymmetrie
  - Spiegelung an 2 Achsen
  - Inversion

## 2. Rechtwinkliges System

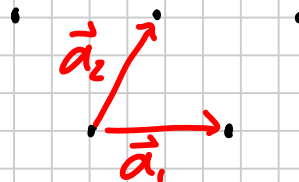
$$a_1 \neq a_2, \alpha_1 = 90^\circ$$



- Symmetrioperationen:
- Spiegelung an 2 Achsen
  - Inversion

## 3. Hexagonales System:

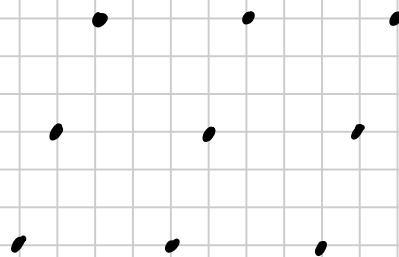
$$a_1 = a_2, \alpha_1 = 60^\circ$$



- Symmetrie:
- 6-zählige Drehung
  - Spiegelung an 3 Achsen
  - Inversion

## 4. schiefwinkliges Gitter

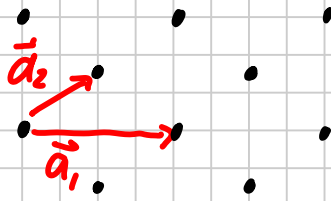
$$a_1 \neq a_2, \alpha_1 \neq 90^\circ$$



- Symmetrie:
- Inversion

Kristallsysteme enthalten i. A. mehr als ein Bravais-Gitter, z. B. gehört zu 2. auch das

zentriert - rechtwinklige Gitter:



$d=3$  7 Kristallsysteme und 14 Bravais gitter

z. B. kubisch mit

- einfach kubisch (sc)

- kubisch - flächenzentriert (fcc)

- kubisch - raumzentriert (bcc)

Kristallstruktur: i. A. enthält ein Kristall unterschiedliche Atome  $\rightarrow$  Gitter mit Basis

$$\vec{R}_{\vec{n}\mu} = \vec{R}_{\vec{n}} + \vec{R}_{\mu}$$

z. B. Natriumchlorid-Struktur:

fcc-Gitter mit  $\vec{R}_{Na} = (0,0,0)$  und  $\vec{R}_{Cl} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})a$

alternative Sichtweise: sc-Gitter mit alternierenden Atomen

Wichtig: auch monoatomare Kristalle können nicht-Bravais-Gitter bilden, z. B.

- Diamant-Gitter fcc,  $\vec{R}_1 = (0,0,0)$ ,  $\vec{R}_2 = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})a$

- hexagonal dichteste Packung

## 1.2 Reziprokes Gitter

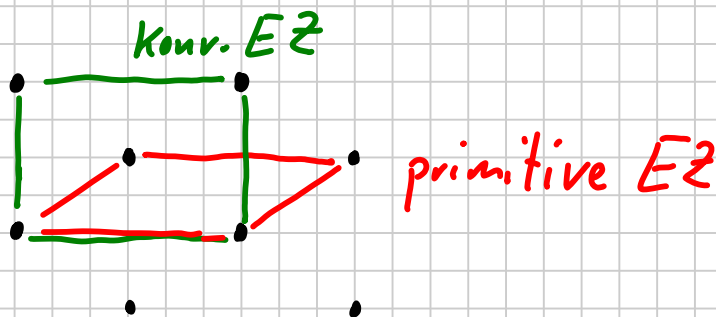
Jedem Bravais-Gitter  $\Lambda$  lässt sich ein reziprokes Gitter  $\bar{\Lambda}$  zuordnen; dessen Einheitsvektoren  $\vec{b}_i$  sind über eine Orthogonalitätsbedingung mit denen des direkten Gitters verknüpft:  $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$  \*

Konstruktion in  $d=3$ :  $\epsilon_{ijk} \vec{b}_i = \frac{2\pi}{\text{Vol}(\Omega)} \vec{a}_j \times \vec{a}_k$

(auch in  $d=2$  zu verwenden mit  $\vec{b}_3 = \vec{a}_3 = (0,0,1)$ )

2.11.10

**Nachtrag:** 1) In Fällen wie dem zentriert-rechtwinkligen Gitter oder den „dekorierten“ kubischen Gittern (fcc, bcc) benutzt man auch die Einheitszelle des einfacheren Gitters als konventionelle Einheitszelle, diese enthält dann mehrere Gitterplätze.



2) \* Matrixschreibweise:  $B = 2\pi (A^T)^{-1}$