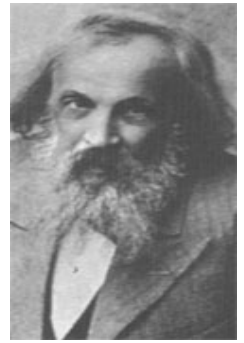


Kristallehre ideale Kristalle

- **Wiederholung:** Bindungstypen,
Aggregatzustand, Struktur der Festkörper.
- Begriffe der Kristallehre, Systeme,
Bezeichnungen

„Zwischen der Eigenschaften der einfachen Körper, der Typen und Eigenschaften der Verbindungen und dem Atomgewicht der Elementen ist ein periodischer Zusammenhang“.
(Mendelejev)



Die chemischen Elemente kann man auf Grund der Atomkern und Atomhüllenkonfiguration in eine periodische Tabelle ordnen. Die Säule der Tabelle zeigen die Elektronenerfüllung der Positionen der Elektronenschale. Die Elementen im gleichen Säulen haben ähnlichen Eigenschaften. Die Reihen zeigen die Anzahl der Elektronenschalen.

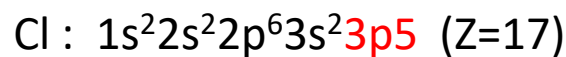
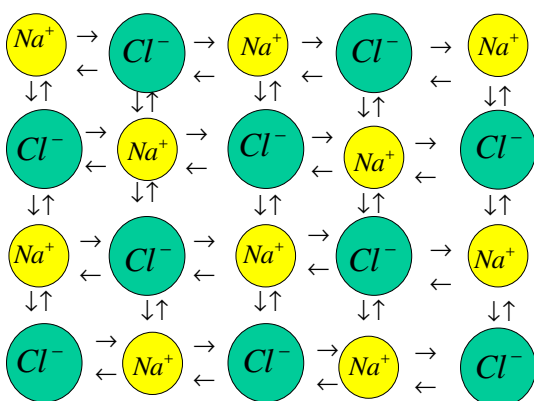
1 IA												18 0														
2 IIA											13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 0										
1 H 1.008	2 He 4.0026											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.002									
3 Li 6.939	4 Be 9.0122											11 Na 22.990	12 Mg 24.312	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.064	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948							
19 K 39.102	20 Ca 40.08	21 Sc 44.956	22 Ti 47.90	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.847	27 Co 58.933	28 Ni 58.71	29 Cu 63.54	30 Zn 65.37	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.91	36 Kr 83.80									
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (99)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.40	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30									
55 Cs 132.91	56 Ba 137.34	Lanthanide										72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.09	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.19	83 Bi 208.98	84 Po (210)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	Aktinide										104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (264)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 Uuu (269)	111 Uun (272)	112 Uub (277)						
		57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.35	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.92	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97										
		89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa (231)	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (242)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (249)	99 Es (253)	100 Fm (253)	101 Md (256)	102 No (254)	103 Lr (257)										

 Alkalimetallen	 Übergangsmetalle	 Metalloid
 Alkalierdelement	 Andere Metalle	 Nicht Metalle

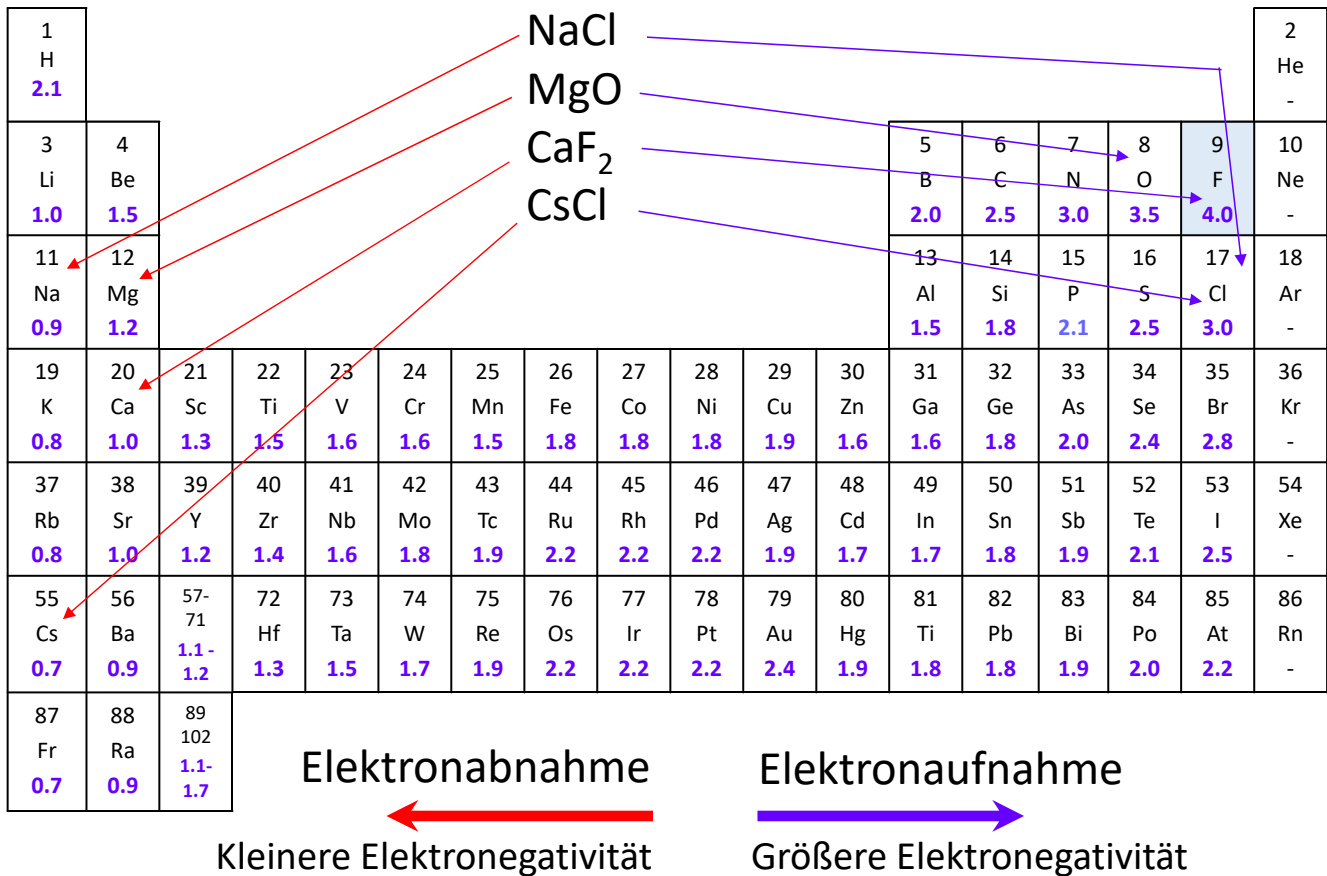
Primäre Bindung: Chemische Bindung mit Übertragung bzw. Aufteilung von Außenelektronen → Entstehung einer festen Bindung zwischen benachbarten Atomen; Beispiele: Ionische, kovalente, metallische Bindung

Sekundäre Bindung: Schwache physikalische Bindung, beruhend auf Ladungsunterschieden ohne Übertragung bzw. Aufteilung von Elektronen; Beispiele: Van der Waals'sche Bindung, Wasserstoffbrückenbindung

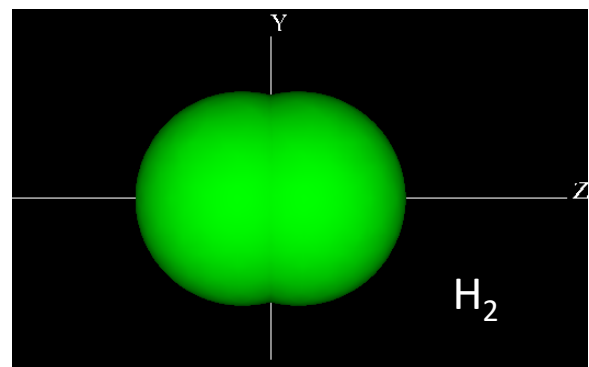
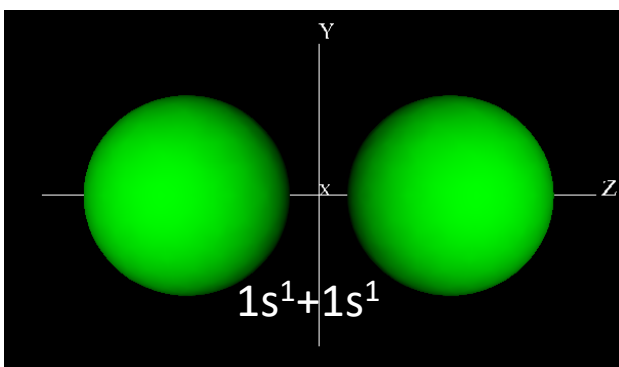
Voraussetzung: Unterschied in der Elektronegativität der Bindungselementen. Die Besetzung der äußere Schalen sind stark unterschiedlich. Ein Atom gibt das Elektron leicht ab und das zweite Atom nimmt das Elektron leicht auf. Bei der Ionenbindung die geschlossene Elektronschalen führen zur besonderen Stabilität.

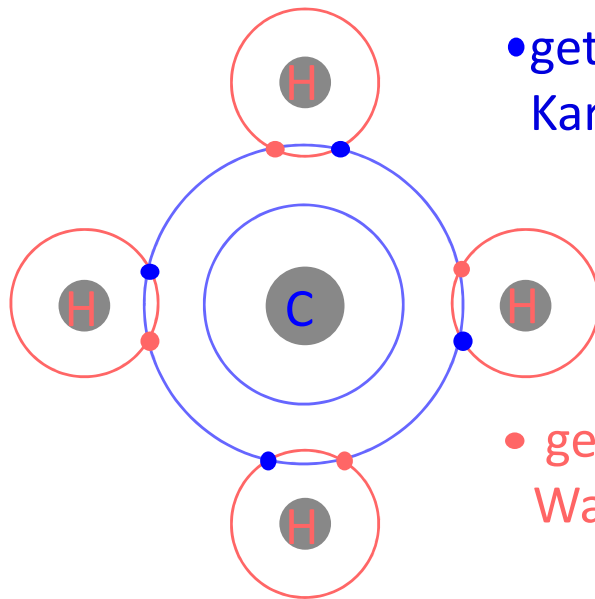


- Kation(+) – Anion(-)
- Metallische und nicht metallische Ei.
- Schlechte W.- und el. Leitfähigkeit
- Richtungsunabhängige Eigenschaften
- Sprödes Benehmen
- typische keramische Bindung



Die benachbarten Atomen geben Elektronen ab, die paarweise den Raum zwischen den Atomrümpfen ausfüllen (Elektronenbrücken). Die Elektronenbrücke kann durch Zufuhr thermischer Energie teilweise aufgebrochen werden so, dass einzelne Elektronen für elektrische Leitung zur Verfügung stehen.





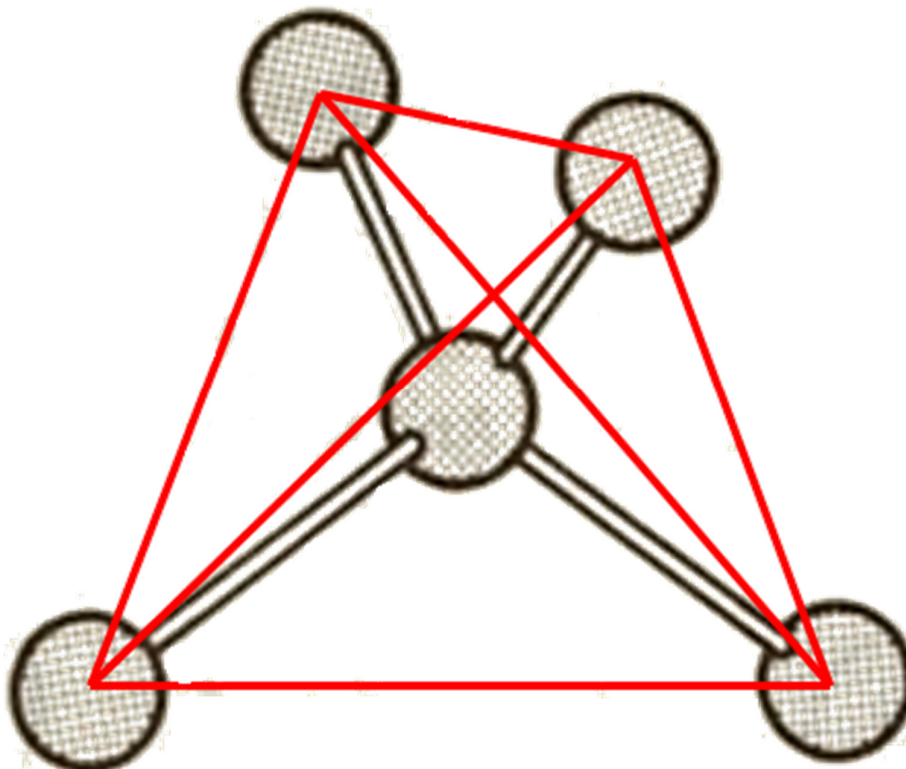
- geteilte Elektronen von einem Karbonatom (oder Si Atom)

- geteilte Elektronen der Wasserstoffatomen

C: 4 Valenzelektronen sind, Soll noch 4 e. **H:** 1 Valenzelektron ist, Soll noch 1 e.

9

Bindung bei vierwertigen Si (oder C) Atomen

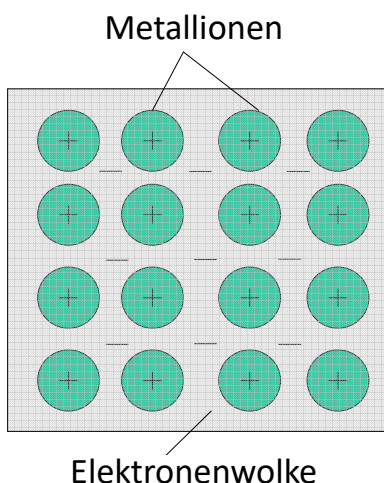


10

1 H 2.1																	2 He -				
3 Li 1.0	4 Be 1.5															5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne -
11 Na 0.9	12 Mg 1.2															13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -				
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -				
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57 La 1.1	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -				
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89 Ac 1.1																			

H_2 (H-H), H_2O (H-O-H), Cl_2 (Cl-Cl), F_2 (F-F), SiC (Si-C), $GaAs$ (Ga-As)

Metallbindung bildet sich, wenn die Elementen die Elektronen von der äußeren Schale zu einem gesamten Elektronwolke abgeben können. Die positive Metallionen bilden eine geordnete struktur, die Kristallstruktur.

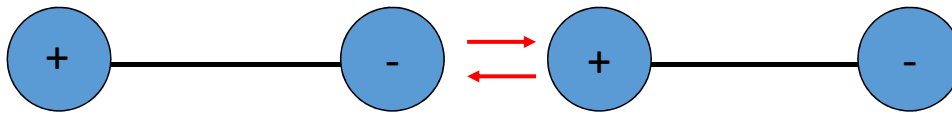


- Gute el. und Wärmeleitfähigkeit
- Kleine elektrische Widerstand
- Große plastische Verformungsvermögen
- Richtungsunabhängige Eigenschaften

Elektropositives Element: fähig für Elektronabgabe

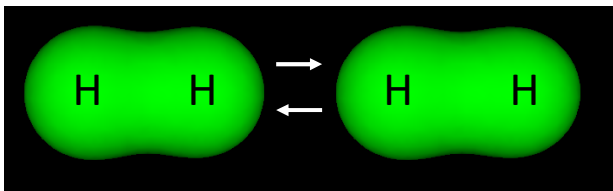
Elektronegatives Element: fähig für Elektronaufnahme

Coulomb Kräfte zwischen Atomdipole oder Moleküldipole. (**Permanente Dipolbindung**)



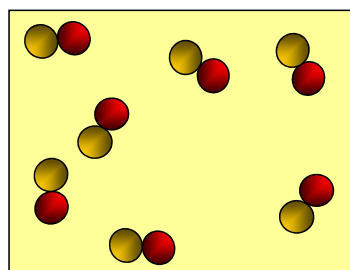
Induzierte Dipolbindung

Elektrisch symmetrisches Atom oder Molekül zeitlich polarisiert wird, und in seiner Umgebung Dipole induziert. z.B.: zwischen H_2 und Cl_2 Moleküle.

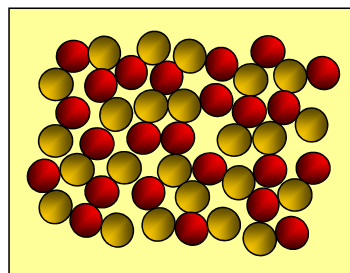


Schwächste Bindung
Niedrige Schmelzpunkten
und Siedepunkten

Gase: füllen ein Gesamtvolumen aus, was wesentlich größer als die Summe der Einzelvolumina der Gasmoleküle ist. Die freie Weglänge zwischen den Zusammenstößen zweier Moleküle ist sehr groß. Die anziehende Wechselwirkung der Molekülen ist vernachlässigbar. Form und Volumen ist veränderlich. Statistisch ungeordnete Zustand.

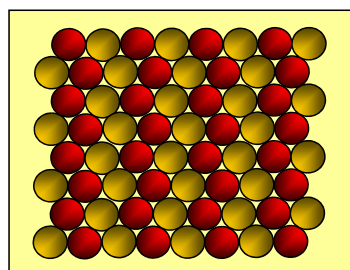


Flüssigkeiten: Der freie Raum kann zwischen den Molekülen vernachlässigt werden. Zwischen den Flüssigkeitsmolekülen sind van der Waals Kräfte wirksam. Form ist veränderlich, Volumen ist konstant.

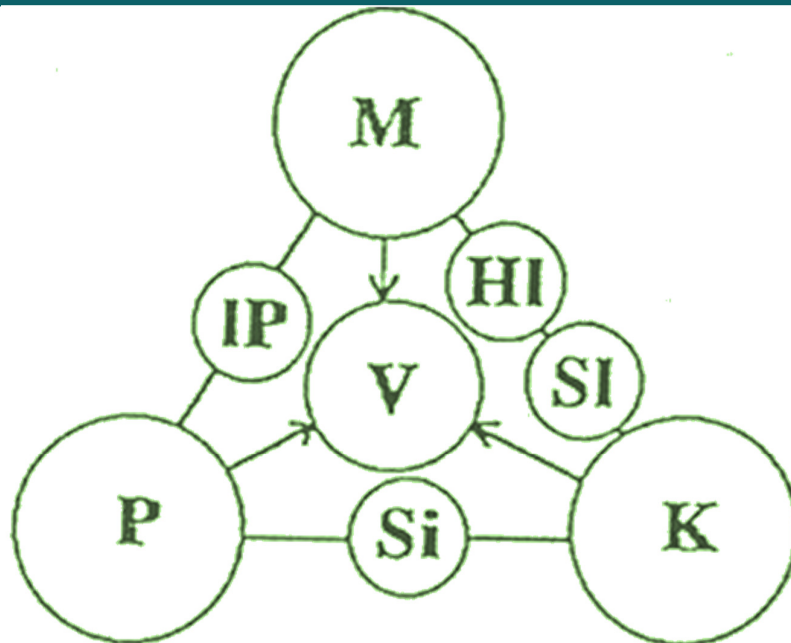


Gas- und Flüssigkeitsmoleküle: befinden sich in ungeordneter (Thermischer) Bewegung.

Festkörper (kristalline Körper): Form ist konstant, Volumen ist konstant. Die sind ferngeordnet.



Eigenschaft	Gase	Flüssigkeiten	Festkörper
Dichte	gering	mittlere bis hohe	
Kompressibilität	hoch	gering	
Formänderungs- widerstand	sehr gering	gering	gering bis hoch
Wärmeleitfähigkeit	sehr gering	gering	gering bis hoch



Die vier Werkstoffgruppen:

M-Metalle metallische Bindung

K-Keramik kovalente Bindung

P-Polymere Kettenmoleküle

V-Verbunde Kombination verschiedener Stoffe

IA											O										
1	IIA												III A	IV A	V A	VIA	VII A	2			
H													He								
3 Li	4 Be												5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne			
11 Na	12 Mg												13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar			
			III B	IV B	V B	VIB	VIII				IB	IIB									
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr				
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe				
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn				
87 Fr	88 Ra	89 Ac																			

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lw

Bild 1.14: Elemente mit Metallcharakter dargestellt im Periodensystem

1.3.2 Keramiken und Gläser (anorganisch-nichtmetallische Werkstoffe)

Keramiken und Gläser sind Verbindungen von den Nichtmetallen C, N, O, P, S (dunkel hervorgehoben in Bild 1.15) und Metallen (heller hervorgehoben).

IA											O										
1	IIA												III A	IV A	V A	VIA	VII A	2			
H													He								
3 Li	4 Be												5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne			
11 Na	12 Mg												13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar			
			III B	IV B	V B	VIB	VIII				IB	IIB									
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr				
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe				
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn				
87 Fr	88 Ra	89 Ac																			

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lw

Bild 1.15: Elemente des Periodensystems, aus denen Keramiken und Gläser entstehen

Hochpolymere Werkstoffe bestehen aus Nichtmetallen (s. Bild 1.17). Das Grundgerüst ist immer eine Kohlenstoff-Wasserstoff-Kette. Die übrigen Nichtmetalle findet man z.B. in Acrylen (Sauerstoff), in Polyamiden (Stickstoff), in Silikonen (Silizium)

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
		III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII			IB	II B						
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac															

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lw

Verbundwerkstoffe entstehen durch Kombination von unterschiedlichen oder unterschiedlich strukturierten Werkstoffen aus einer oder mehreren Werkstoffhauptgruppen
 ➔ außer den Edelgasen können alle Elemente des Periodensystems Verbundwerkstoffe bilden
 Ziel: Eigenschaft oder Eigenschaftskombination des Matrixwerkstoffs, der die Verstärkungsphase aufnimmt, zu verbessern. Beispiele (vgl. Bild 1.18):

natürlicher Verbundwerkstoff: Holz	faserverstärkter Verbundwerkstoff aus zwei Werkstoffhauptgruppen: GFK (glasfaserverstärkter Kunststoff) ➔ Verbesserung der Steifigkeit und Festigkeit	Aggregatverbundwerkstoff aus einer Werkstoffhauptgruppe: Beton ➔ Erzeugung eines druckfesten Baustoffs
--	---	---

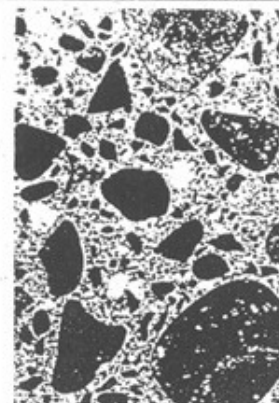
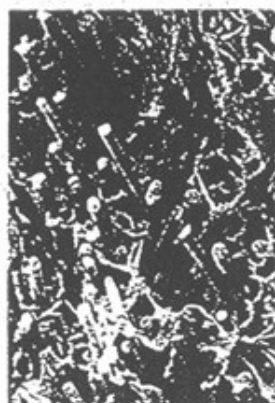


Bild 1.18: Beispiele für Verbundwerkstoffe

Die Halbleiter sind eine kleine Gruppe von Elementen, die weder gute Leiter wie die Metalle noch gute Isolatoren wie die Kunststoffe sind. Ihre Eigenschaften lassen sich nicht allein aufgrund der chemischen Bindung verstehen, sondern werden ganz entscheidend von gezielt eingebrachten Punktdefekten bestimmt.

Elemente der 4. Hauptgruppe (dunkler dargestellt in Bild 1.19) Si, Ge und Sn bilden die Grenze zwischen Metallen und Nichtmetallen und werden als **Elementhalbleiter** eingesetzt. Je reiner das Material ist, desto besser sind die Eigenschaften

→ Verwendung in der Mikroelektronik

Jeweils ein rechts und links benachbartes Element der 4. Hauptgruppe (heller dargestellt) können **Verbindungshalbleiter** bilden.

Beispiel: Galliumarsenid GaAs → Verwendung als Lasermaterial und Hochtemperaturgleichrichter

IA																		O																		
1 H	IIA																																		2 He	
3 Li	4 Be																	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne													
11 Na	12 Mg																	13 Al	IIIA		14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar											
																		VIII																		
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr																			
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe																			
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn																			
87 Fr	88 Ra	89 Ac																																		
																		IB																		
																		IIB																		
																		III A																		
																		IV A																		
																		V A																		
																		VI A																		
																		VII A																		
																		IX																		
																		X																		
																		XI																		
																		XII																		
																		XIII																		
																		XIV																		
																		XV																		
																		XVI																		
																		XVII																		
																		XVIII																		
																		XIX																		
																		XX																		
																		XXI																		
																		XXII																		
																		XXIII																		
																		XXIV																		
																		XXV																		
																		XXVI																		
																		XXVII																		
																		XXVIII																		
																		XXIX																		
																		XXX																		
																		XXXI																		
																		XXXII																		
																		XXXIII																		
																		XXXIV																		
																		XXXV																		
																		XXXVI																		
																		XXXVII																		
																		XXXVIII																		
																		XXXIX																		
																		XL																		
																		XLI																		
																		XLII																		
																		XLIII																		
																		XLIV																		
																		XLV																		
																		XLVI																		
																		XLVII																		
																		XLVIII																		
																		XLIX																		
																		L																		
																		LI																		
																		LII																		
																		LIII																		
																		LIV																		
																		LV																		
																		LVI																		
																		LVII																		
																		LVIII																		
																		LIX																		
																		LX																		
																		LXI																		
																		LXII																		
																		LXIII																		
																		LXIV																		
																		LXV																		
																		LXVI																		
																		LXVII																		
																		LXVIII																		
																		LXIX																		
																		LXX																		
																		LXXI																		
																		LXXII																		
																		LXXIII																		
																		LXXIV																		
																		LXXV																		
																		LXXVI																		
																		LXXVII																		
																		LXXVIII																		
																		LXXIX																		
																		LXXX																		
																		LXXXI																		
																		LXXXII																		
																		LXXXIII																		
																		LXXXIV																		
																		LXXXV																		
																		LXXXVI																		
																		LXXXVII																		
																		LXXXVIII																		
																		LXXXIX																		
																		LXXXX																		
																		LXXXXI																		
																		LXXXXII																		
																		LXXXXIII																		
																		LXXXXIV																		
																		LXXXXV																		
																		LXXXXVI																		
																		LXXXXVII																		
																		LXXXXVIII																		
																		LXXXXIX																		
																		LXXXXX																		
																		LXXXXXI																		
																		LXXXXXII																		
																		LXXXXXIII																		
																		LXXXXXIV																		
																		LXXXXXV																		
																		LXXXXXVI																		
																		LXXXXXVII																		
																		LXXXXXVIII																		
																		LXXXXXIX																		
																		LXXXXXX																		
																		LXXXXXXI																		
																		LXXXXXXII																		
																		LXXXXXXIII																		
																		LXXXXXXIV																		
																		LXXXXXXV																		
																		LXXXXXXVI																		
																		LXXXXXXVII																		
																		LXXXXXXVIII																		
																		LXXXXXXIX																		
																		LXXXXXXX																		
																		LXXXXXXXI																		
																		LXXXXXXXII																		
																		LXXXXXXXIII																		
																		LXXXXXXXIV																		
																		LXXXXXXXV																		
																		LXXXXXXXVI																		
																		LXXXXXXXVII																		
																		LXXXXXXXVIII																		
																		LXXXXXXXIX																		
																		LXXXXXXX																		

Bild 1.19: Elemente des Periodensystems aus denen Halbleiter entstehen

1.4 Werkstoffauswahl

1.4.1 Der allgemeine Aspekt

Aus den fünf Werkstoffhauptgruppen müssen für den jeweiligen Anwendungsfall die jeweils bestmöglichen Materialien ausgewählt werden. Dies führt zum Vergleich zwischen

Beanspruchungsprofil und Eigenschaftsprofil.

Wichtige Anforderungskriterien sind beispielsweise

ausreichende Werkstoffwiderstände gegen

- mechanische,
- thermische,
- chemische sowie
- daraus zusammengesetzte

Beanspruchungen unter Berücksichtigung von

- Werkstoff und Werkstoffzustand
- Bauteilumgebung und
- Bauteilgeometrie

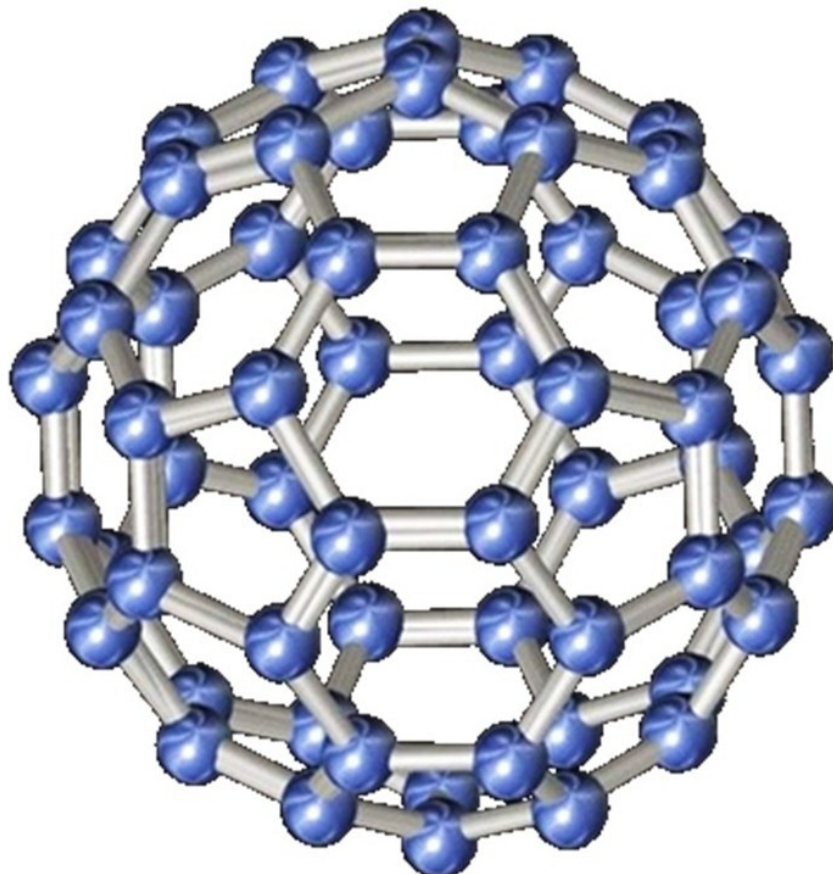
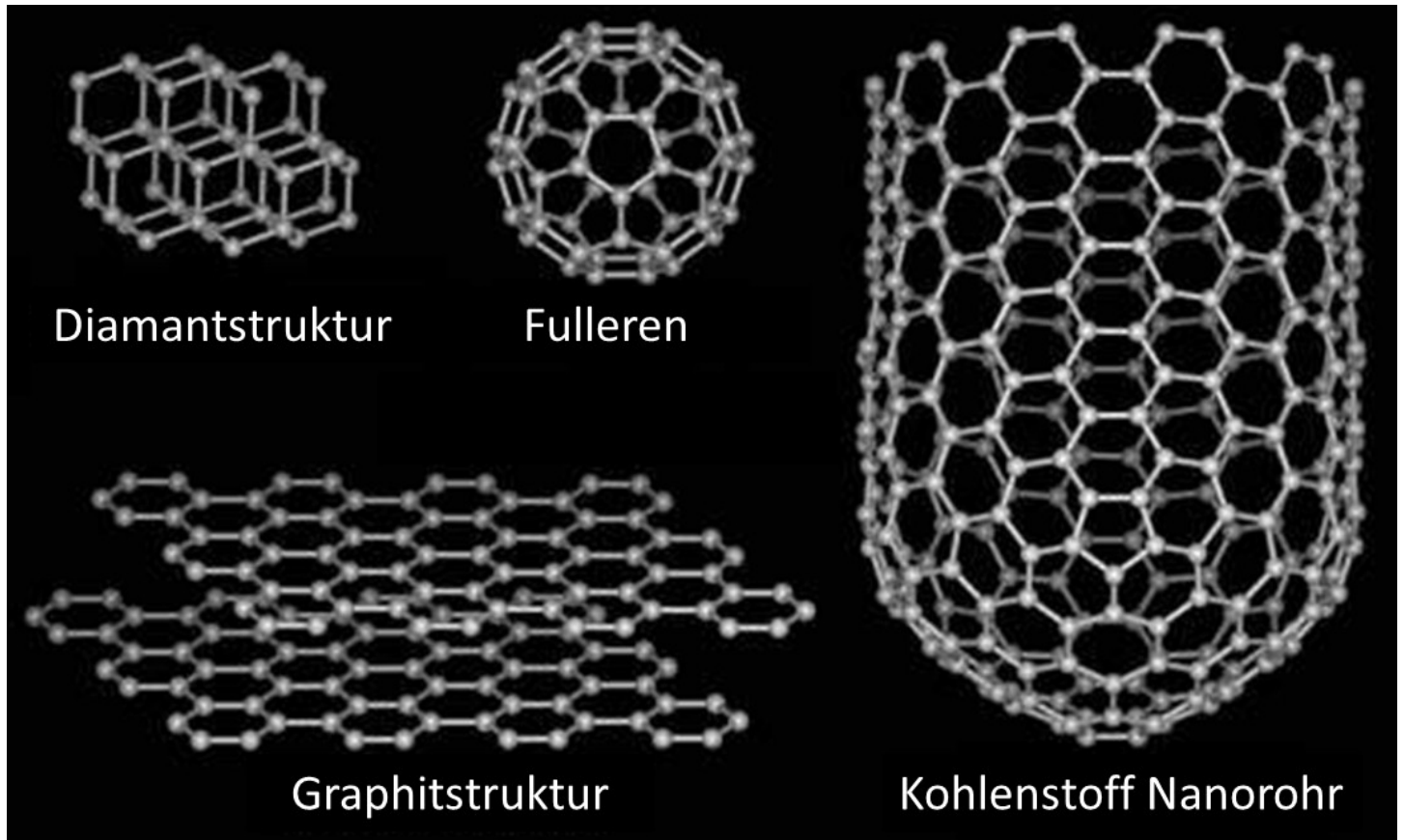
Möglichkeit zur wirtschaftlichen Fertigung mit beherrschten Technologien

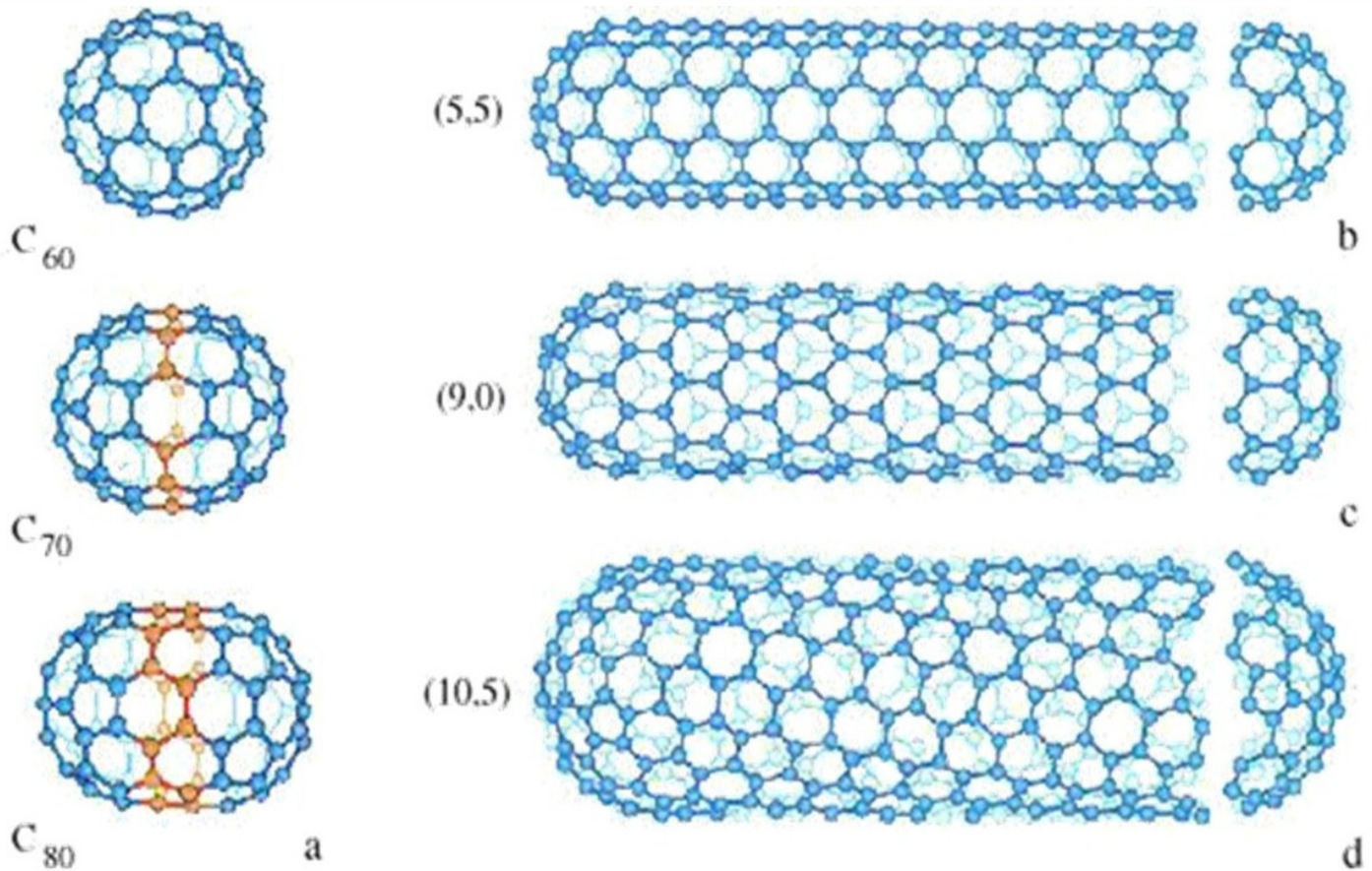
kein Bauteilversagen während der vorgesehenen Lebensdauer

Stoffe:

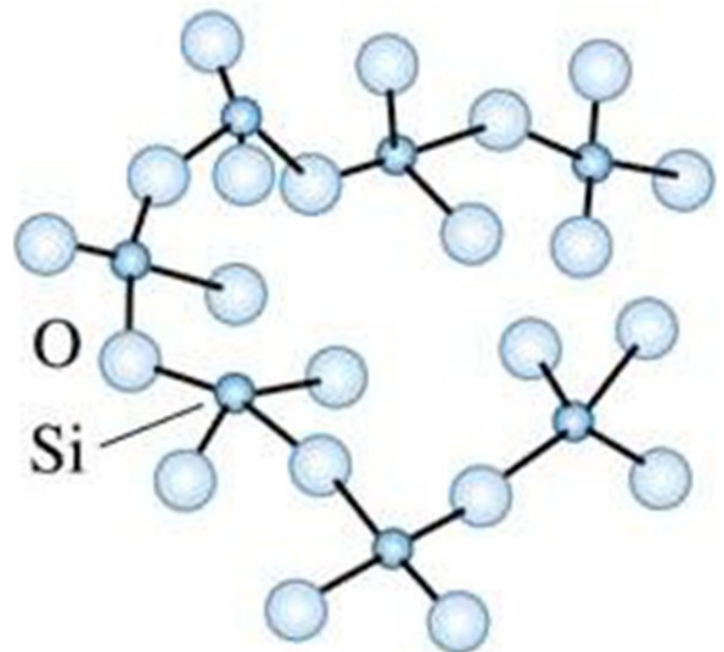
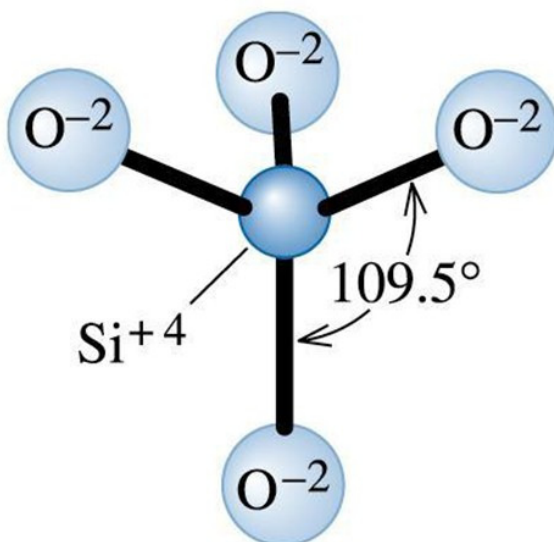
- Gase
 - Flüssigkeiten
 - Feste Stoffe
- } Und deren Mischungen

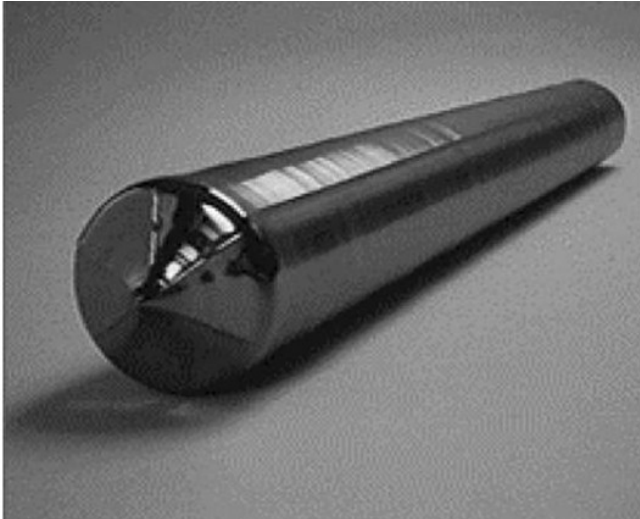
- Fulleren (C Atomen, Vielecken)
geschlossener Kugel, Eier
Rohre (ein und viel Lagen)
geschraubte Formen (Spiral, Torus, usw.)
- Amorphe Festkörper (Atome ohne geometrische Ordnung)
- Biologische Festkörper (Bohnen, Baum, usw.)
- Kristallen (Atome mit geometrischer Ordnung)



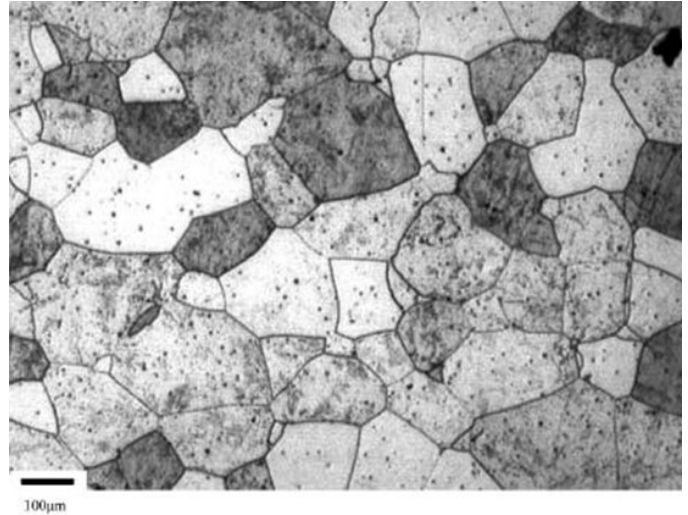


Anordnung der Atomen für kurze Strecken →
amorphe Stoffe





Einristalle
z.B. Si, GaAs



Polikristallin
z.B. Metalle, Legierungen,
einige Keramiken

Liniengitter, Ebenengitter, Volumengitter

Translationsvektor

Translationseinheitsvektor

Gitterkonstante, Gitterparameter

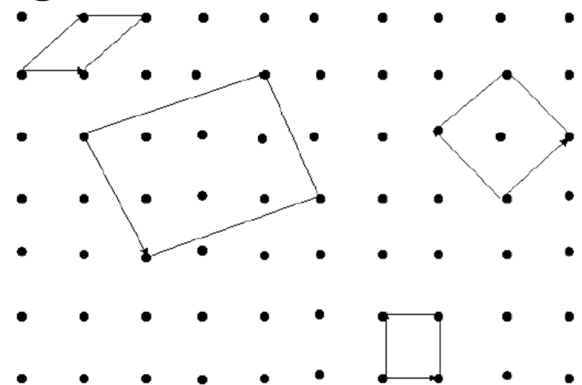
Elementarzelle

Primitivie Zelle

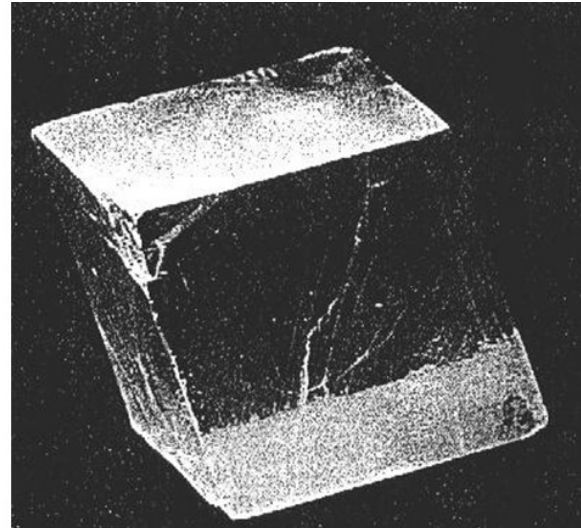
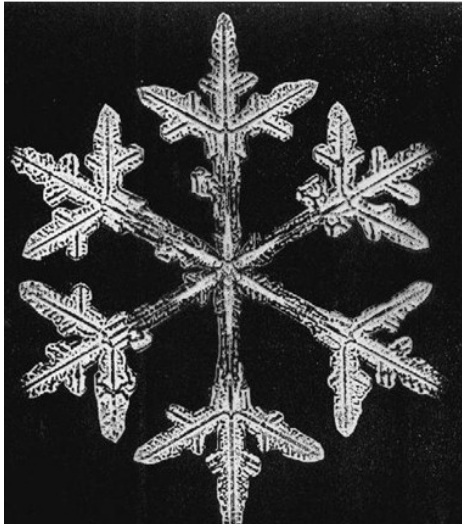
7-Gittertypen (keine andere Möglichkeiten)

14 Bravais-Gitter

Die Atome sind als Kugeln dargestellt, die sich einander in der dichtest gepackte Richtung berühren.



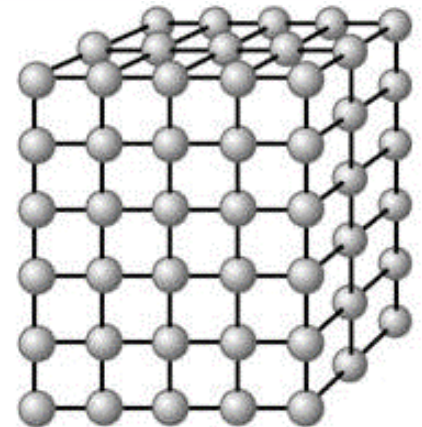
Gitterpunkten, ideale Ordnung, periodische Struktur
 Ordnung zwischen der Atome → Eigenschaften
 Symmetrie, Ebenen, Trennen, Anizotropie



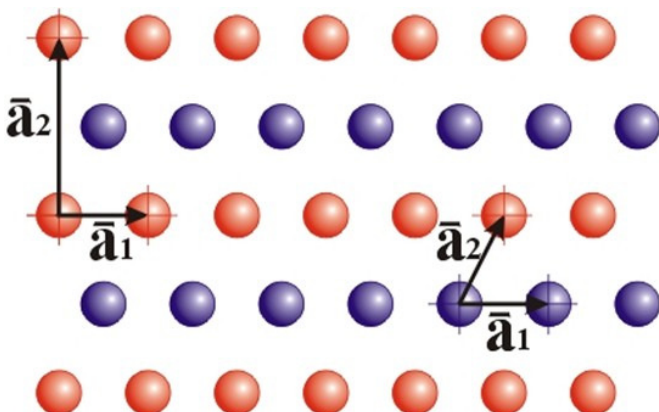
33

Verteilung der Atome:

- langfristige Ordnung (Kristallen)
- Die Position der Atome lässt sich mit gut definierten Translation beschreiben



Translation:



$$\vec{r} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$$

$m; n$: Ganzzahlen

\vec{r} : Translationsvektor

$\vec{a}_1; \vec{a}_2$: Basisvektoren

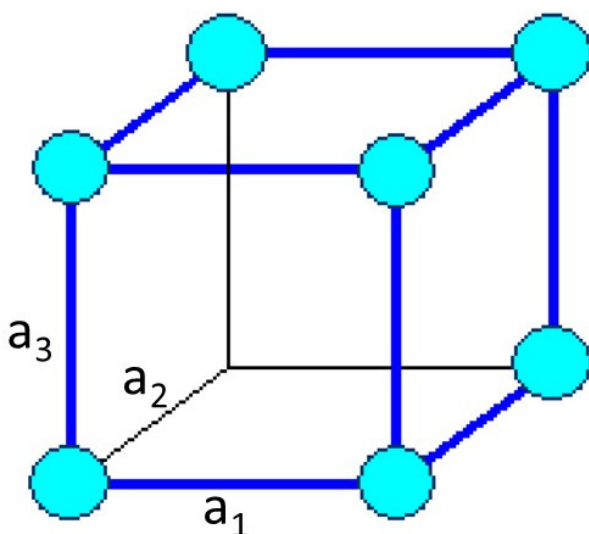
34

Translation: $\vec{r} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + p\vec{a}_3$

Primitive Zelle: ist von der Basisvektoren definierte Volumenteil. Nur an der Ecken beinhaltet Atome, es beinhaltet insgesamt ein Atom.

Zusammengesetztes Gitter: einfache geometrische Beschreibung, kann aber mehrere Atome beinhalten.

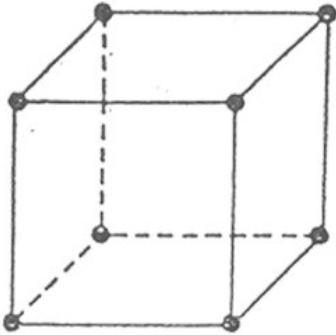
Bravis: Jede Gittertyp lässt sich in die 7 primitive Gittertyp einordnen



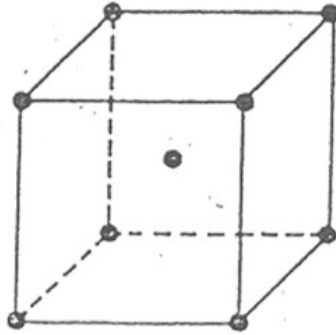
- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- Po

a) Kubisches Gitter

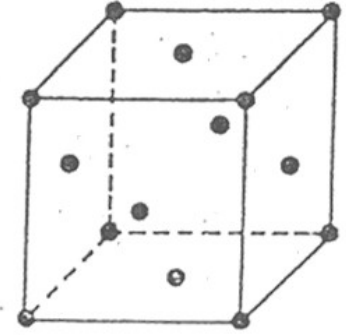
$$a_0 = b_0 = c_0, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



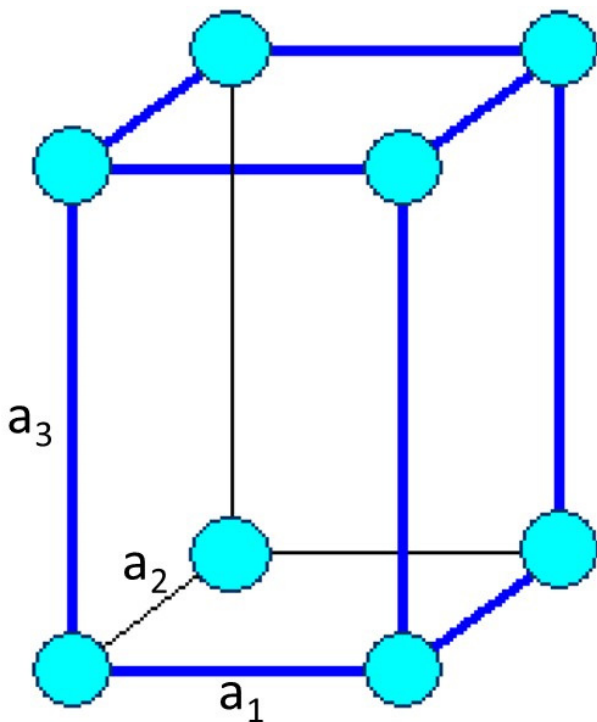
1. Kubisch primitiv



2. Kubisch raumzentriert (innenzentriert)



3. Kubisch flächenzentriert



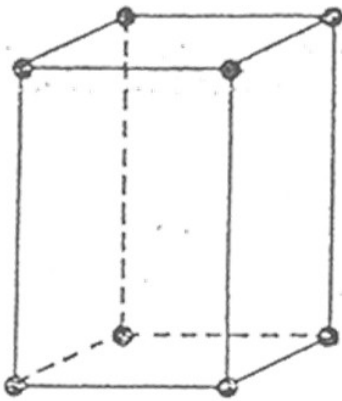
➤ $a_1 = a_2 \neq a_3$

➤ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

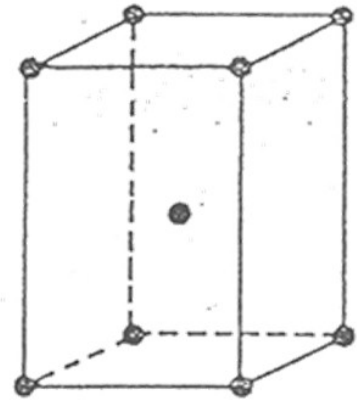
➤ In, Sn (wenn $T > 13^\circ\text{C}$)

b) Tetragonales Gitter

$$a_0 = b_0 \neq c_0, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

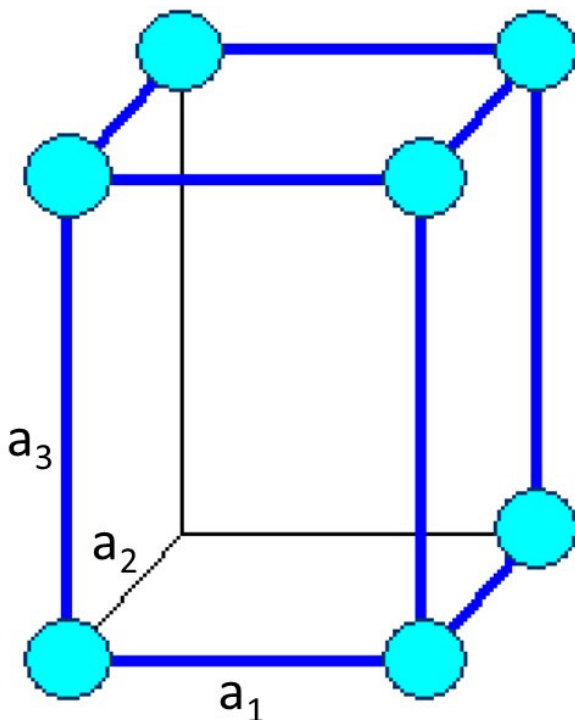


1. Tetragonal primitiv



2. Tetragonal raumzentriert

39

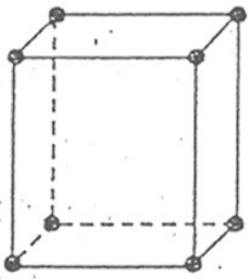


- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- Ga, U

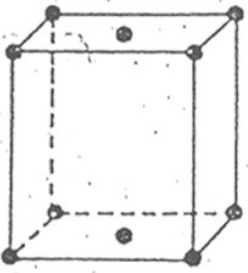
40

c) Orthorhombisches Gitter

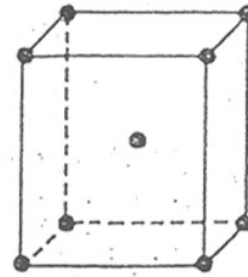
$$a_0 \neq b_0 \neq c_0, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



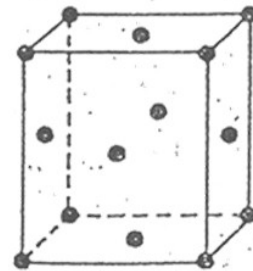
1. Orthorhombisch primitiv



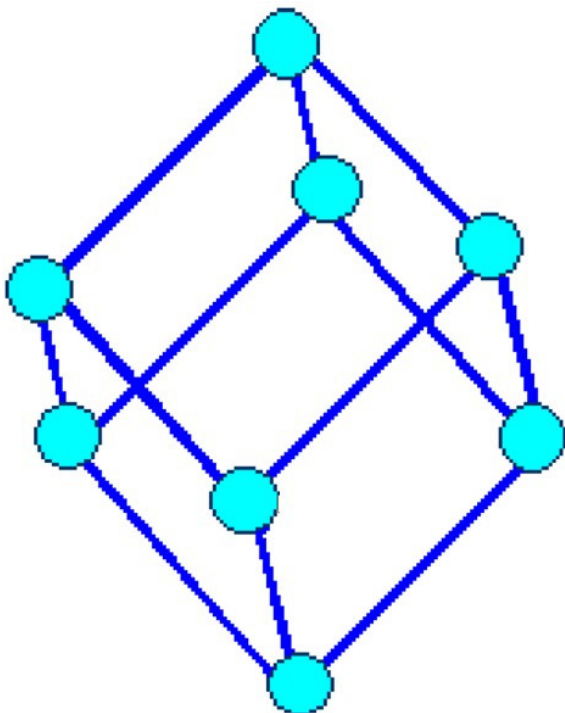
2. Orthorhombisch basiszentriert



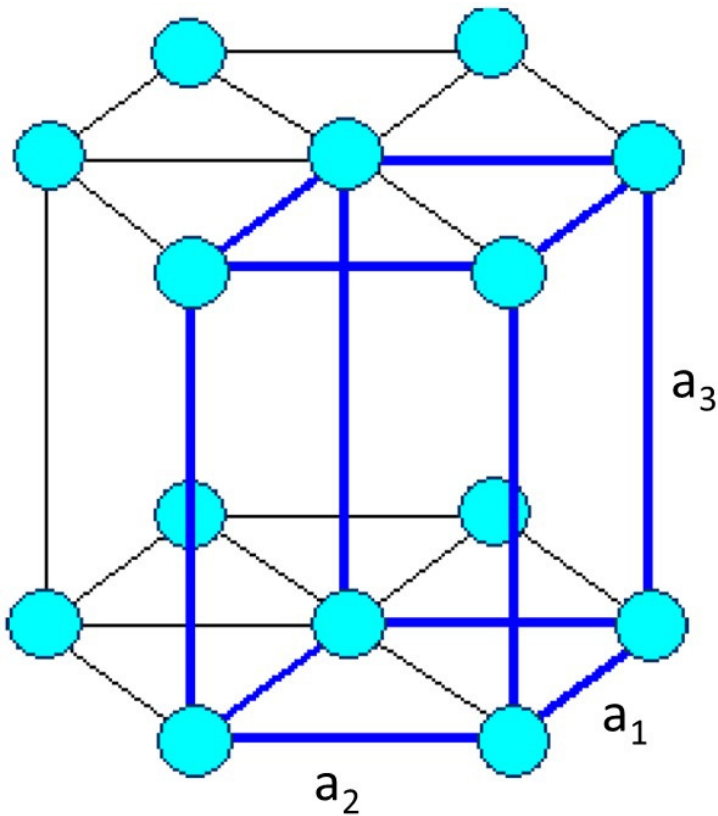
3. Orthorhombisch raumzentriert



4. Orthorhombisch flächenzentriert

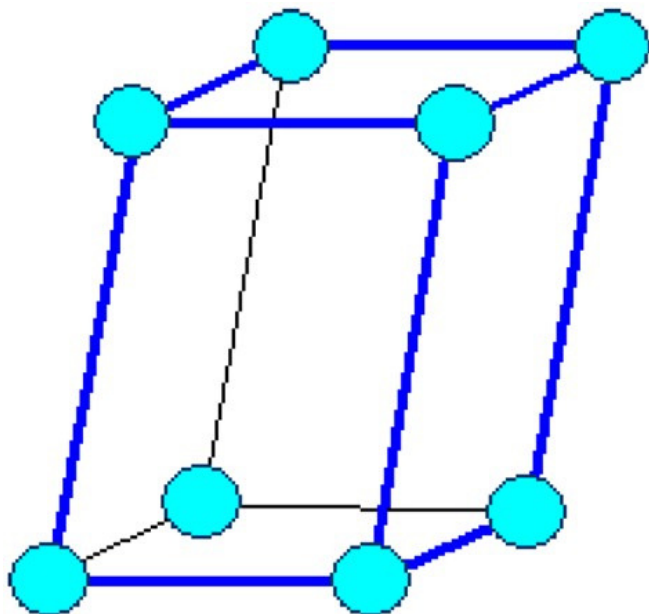


- $a_1 = a_2 = a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Hg, Bi, As



- $a_1 = a_2 \neq a_3$
- $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- Cd, Mg, Zn, Graphit

43

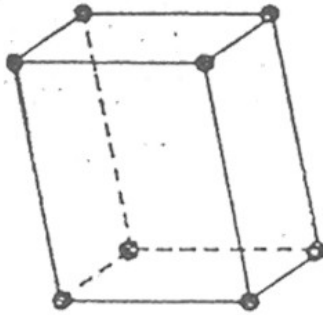


- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma = 90^\circ$
- S

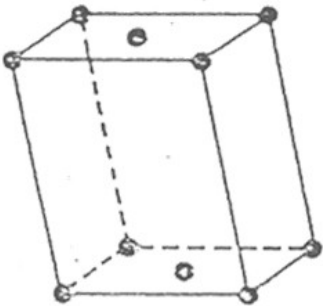
44

d) Monoklines Gitter

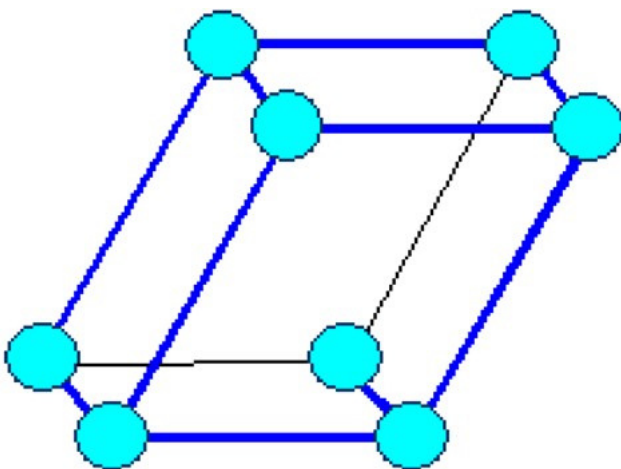
$$a_0 \neq b_0 \neq c_0, \quad \alpha \neq 90^\circ, \quad \beta = \gamma = 90^\circ$$



1. Monoklin primitiv



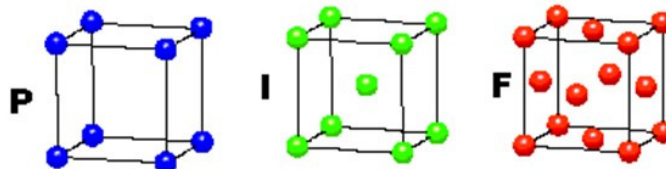
2. Monoklin basiszentriert



- $a_1 \neq a_2 \neq a_3$
- $\alpha \neq 90^\circ, \beta \neq 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- Se, Te

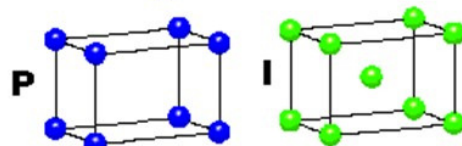
System	Achsenlänge	Achsenwinkel
Kubisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Orthorhombisch	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Rhomboedrisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Monoklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
Triklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Hexagonal	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c$	$\sphericalangle a_n/a_m = 120^\circ$ $\sphericalangle a/c = 90^\circ$

Kubisch



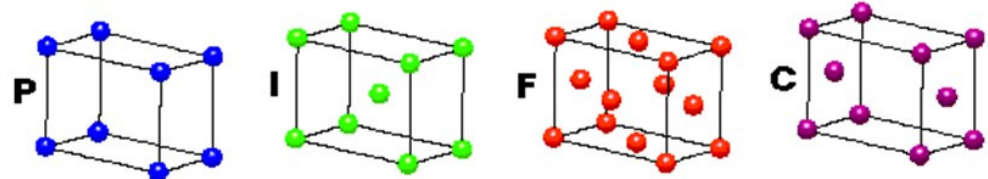
e.k, r.z.k, f.z.k

Tetragonal

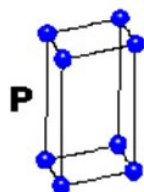


Nach Bravais

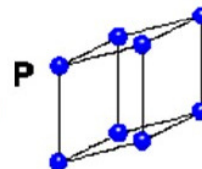
Orthorhombisch



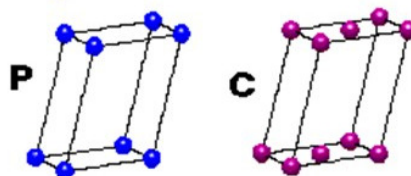
Hexagonal



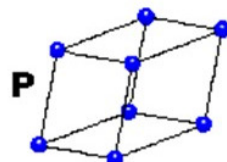
Rhomboedrisch



Monoklin



Triklin



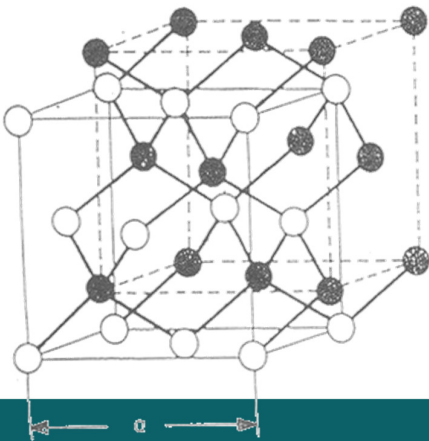
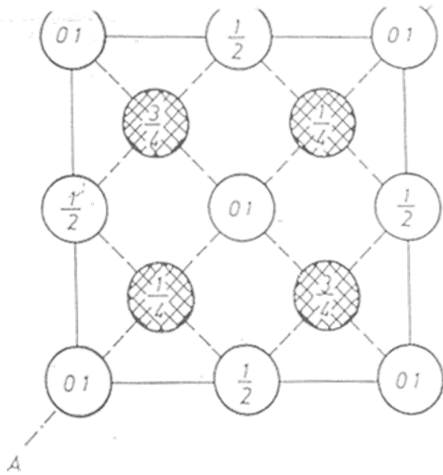
- P** - Primitive (einfache)
- I** - Body centered
(kubisch raumzentriert)
- F** - Face centered
(kubisch flächenzentriert)
- C** - Side centered
(an der Seite zentriert)

kubisch	primitiv	cP	α -Polonium, β -Mangan
	flächenzentriert	cF	Kupfer, Gold, Blei, Aluminium, Kohlenstoff (Diamant), γ -Eisen
	raumzentriert	cI	α -Eisen, Molybdän, Tantal, Vanadium, Wolfram
tetragonal	primitiv	tP	Bor, β -Uran, β -Neptunium
	raumzentriert	tI	β -Zinn, Indium, Protactinium
orthorhombisch	primitiv	oP	α -Neptunium
	basiszentriert	oC	Gallium, Phosphor (schwarz)
	flächenzentriert	oF	γ -Plutonium, Schwefel
	raumzentriert	oI	S_2Si , $CeCu_2$, B_4Ta_3 , Al_4U , Ga_2Mg_5 , Nb_6Sn_5

monoklin	primitiv	mP	α -Selen, β -Selen, Schwefel, α -Plutonium
	basiszentriert	mC	β -Plutonium
triklin	primitiv	aP	HgK, $ReSe_2$, $\delta-Al_{11}Mn_4$, Fe_7Se_8 , Al_4Re
hexagonal	primitiv	hP	Magnesium, α -Lanthan
rhomboedrisch	primitiv	rP	Antimon, Arsen, Wismut, Quecksilber

Diamantstruktur

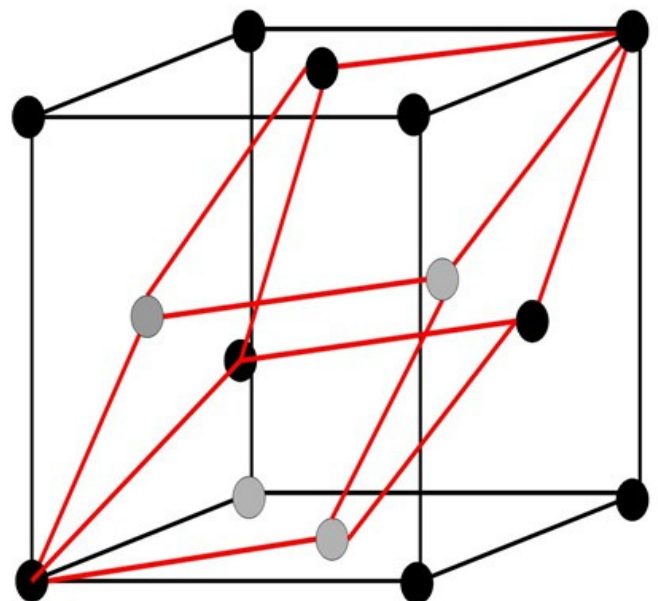
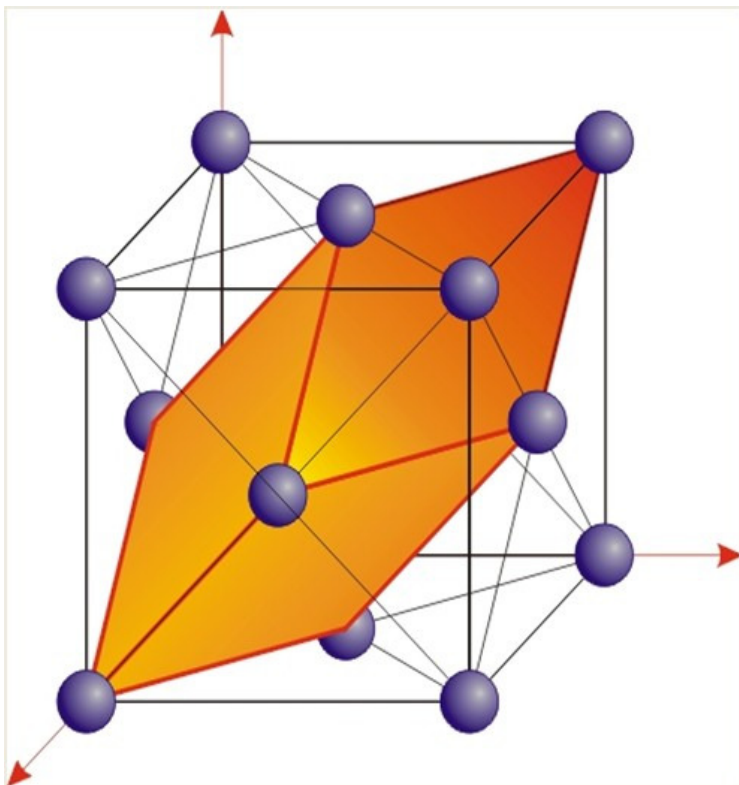
Projektion einer Elementarzelle des Diamantgitters auf die Grundfläche. Die Zahlen geben die Höhe der Gitterpunkte über der Grundfläche in Bruchteilen der Gitterkonstante a an. Bei zwei Zahlen gehört der Gitterpunkt sowohl zur Grund- als auch zur Deckfläche.



Diamantgitter

Entstehung des Diamantgitters aus zwei ineinander gestellten kfz-Gittern. Der Versatz der kfz-Gitter beträgt $1/4$ Raumdiagonale.

Primitives Gitter KFZ \rightarrow Rhomboedrisch



Manche Elemente weisen je nach Temperatur (und Druck) verschiedene Raumgitter auf! Man spricht von "Polymorphie" oder "allotropen Elementmodifikationen" mit im allgemeinen unterschiedlichen Eigenschaften.

Metall	Phasenbezeichnung	Temperaturbereich [°C] bei 1 bar	Gittertyp
Eisen	α	< 911	krz
	γ	911 ... 1392	kfz
	δ	1392 ... 1536	krz
Kobalt	α	< 450	hex
	β	450 ... 1495	kfz
Titan	α	< 882	hex
	β	882 ... 1668	krz

Tab. 3.1: Beispiele allotroper Elementmodifikationen

Die angegebenen Temperaturbereiche gelten nur für die reinen Elemente. Legierungszusätze können bestimmte Modifikationen stabilisieren oder verschwinden lassen.

Technisch wichtigstes Beispiel: Austenitische Stähle (Fe + ≥ 8 Ma.-% Ni + ≥ 18 Ma.-% Cr) liegen bei Raumtemperatur in kfz Struktur (γ) vor.

1. Achsenabschnitte in Gitterparameterereinheit
2. Kehrwert- (Reziprok)bildung
3. Kleinste Ganzzahlbildung
4. Klammern () { }

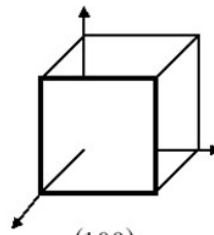
$$\{100\} = (100) + (010) + (001) + (3 \text{ mal die Minuswerte})$$

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1$$

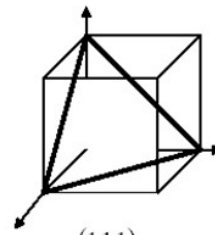
$$hx + ky + lz = q$$

(hkl)

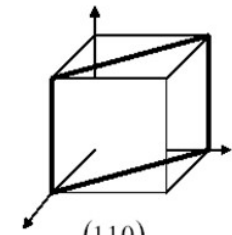
$\{hkl\}$



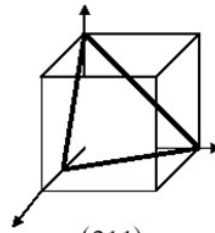
(100)



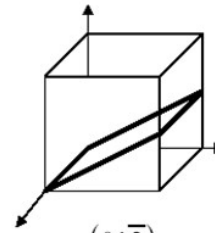
(111)



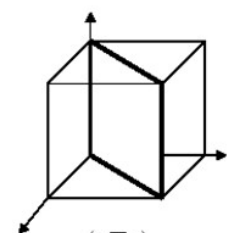
(110)



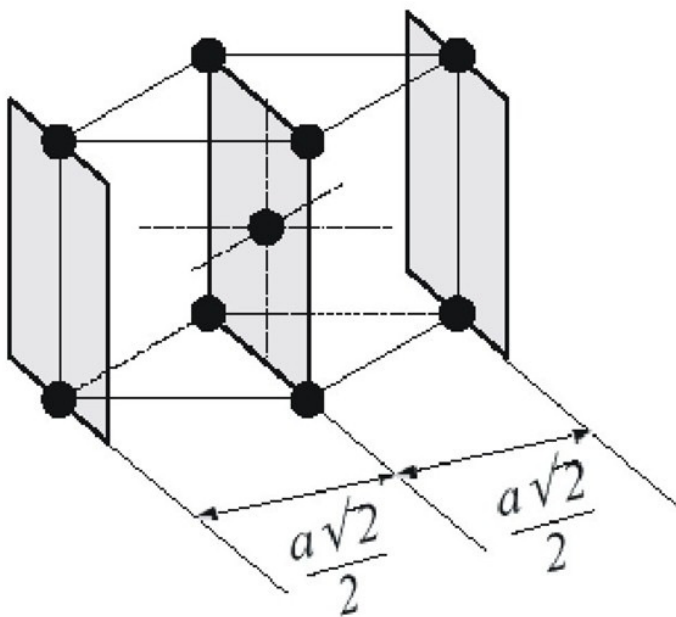
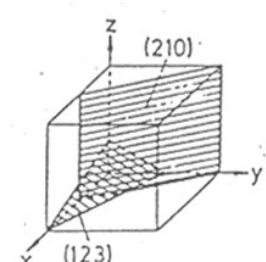
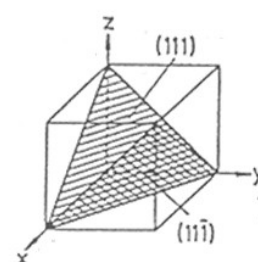
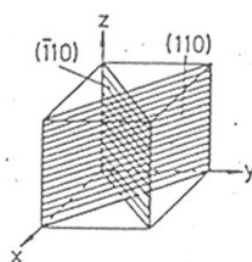
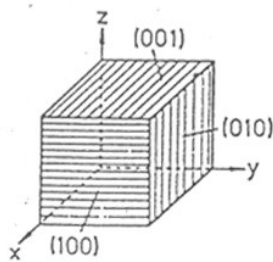
(211)



(01 $\bar{2}$)



(1 $\bar{1}$ 0)



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

KRZ ($\bar{1}10$)

$$d_{\bar{1}10} = \frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{a\sqrt{2}}{2}$$

Für kubisches Gitter

$[hkl] \perp (hkl) !!!$

Winkel zwischen Ebenen:

weil

$$(h_1 k_1 l_1) \perp [h_1 k_1 l_1] \text{ und } (h_2 k_2 l_2) \perp [h_2 k_2 l_2],$$

und

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = |\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2| \cos \varphi,$$

$$\cos \varphi = \frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{|\vec{r}_1| \cdot |\vec{r}_2|} = \frac{h_1 \cdot h_2 + k_1 \cdot k_2 + l_1 \cdot l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

Die Schnittlinie zwei Ebenen ist die Vektor-
multiplikation der Normalvektoren der Ebenen:

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} = \vec{i}(k_1 l_2 - l_1 k_2) - \vec{j}(h_1 l_2 - l_1 h_2) + \vec{k}(h_1 k_2 - k_1 h_2)$$

$$\bar{T} = u\bar{a}_1 + v\bar{a}_2 + w\bar{a}_3$$

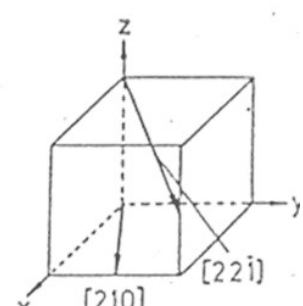
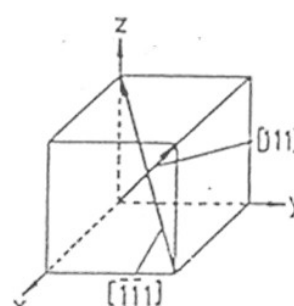
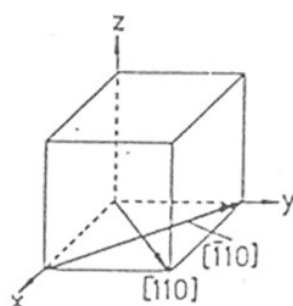
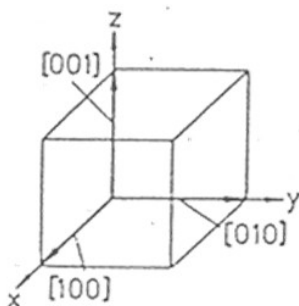
$$[uvw]$$

$$\langle uvw \rangle$$

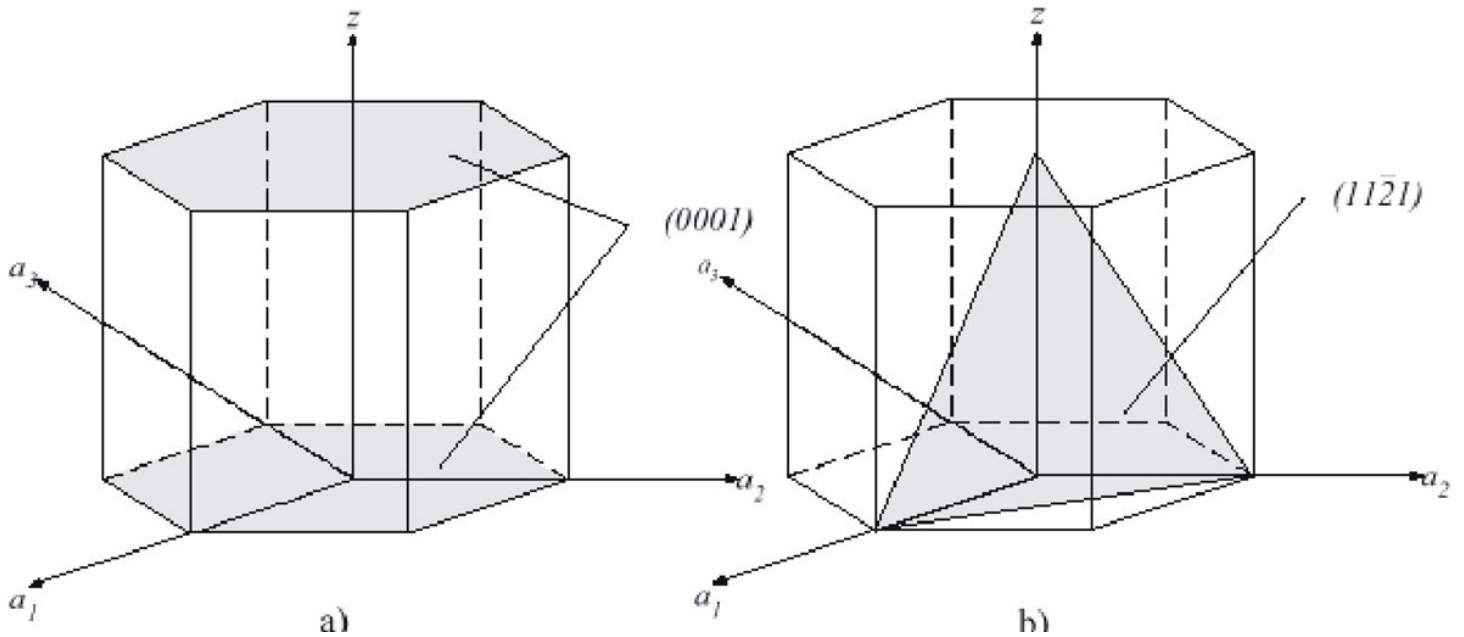
59

1. Koordinaten der Endpunkte minus die Koordinaten der Ausgangspunkte
2. Kleinste Ganzzahlbildung
3. Klammern [] <>

$$\langle 100 \rangle = [100] + [010] + [001] + [3 \text{ mal Minuswerte}]$$



60



$$(hki)$$

$$i = -(h + k)$$

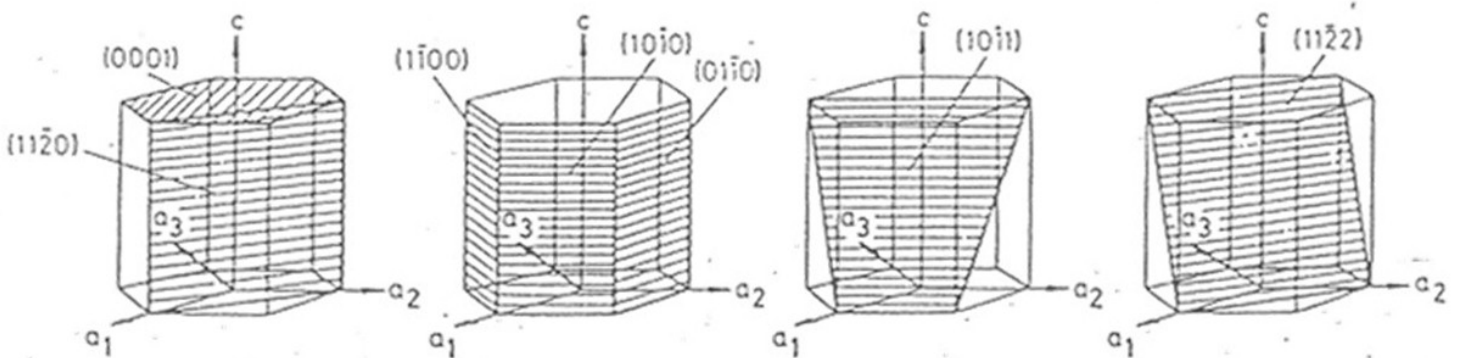
Bei hexagonalen Kristallen wird üblicherweise für die Gitterebenen ein Bezeichnungssystem mit vier Indizierungen h^* , k^* , i^* und l^* benutzt. Dadurch tritt die Symmetrie des Gitters besser zutage. Dabei sind die Indizes die teilerfremden Reziprokwerte der Ebenenschnittpunkte mit den Achsen a_1 , a_2 , a_3 und c . Die vier Indizes sind nicht voneinander unabhängig, da bereits die Schnittpunkte mit drei nicht koplanaren Achsen zur eindeutigen Charakterisierung einer Ebene ausreichen. Deshalb muß die Nebenbedingung

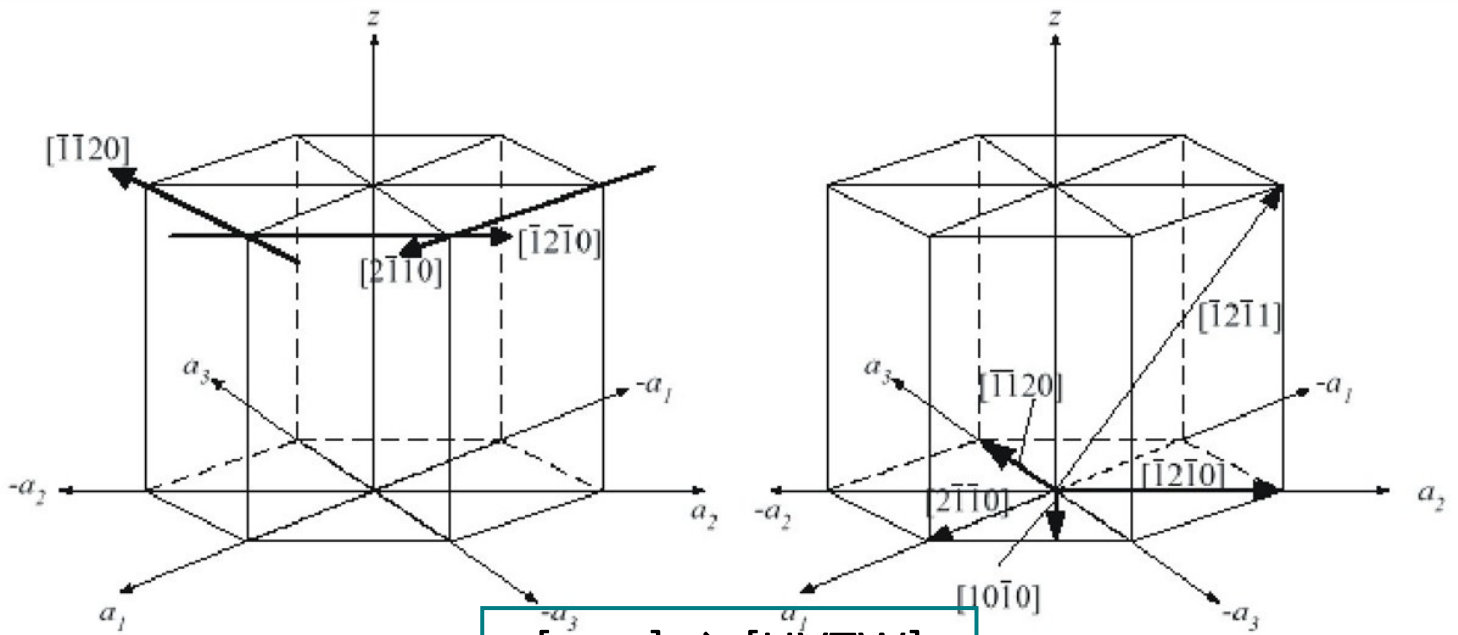
$$h^* + k^* + i^* = 0$$

erfüllt sein.

$$(hki)$$

$$i = -(h + k)$$





$$[uvw] \rightarrow [UVTW]$$

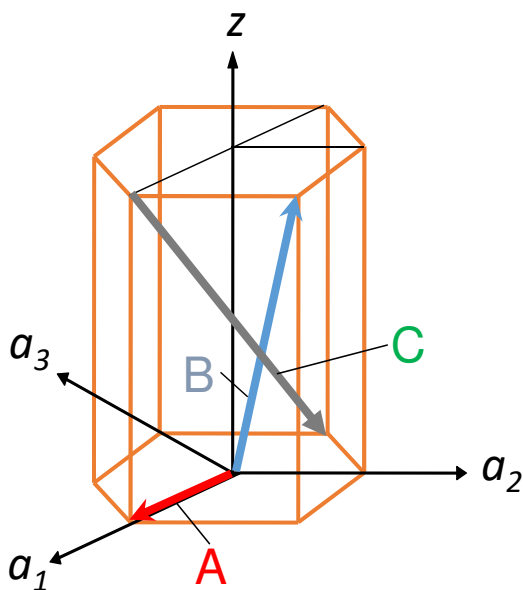
$$U = (2u - v) / 3$$

$$V = (2v - u) / 3$$

$$T = -(U + V)$$

$$W = w$$

63



$$[u'v'w'] \rightarrow [uvw]$$

$$u = \frac{1}{3}(2u' - v')$$

$$v = \frac{1}{3}(2v' - u')$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = w'$$

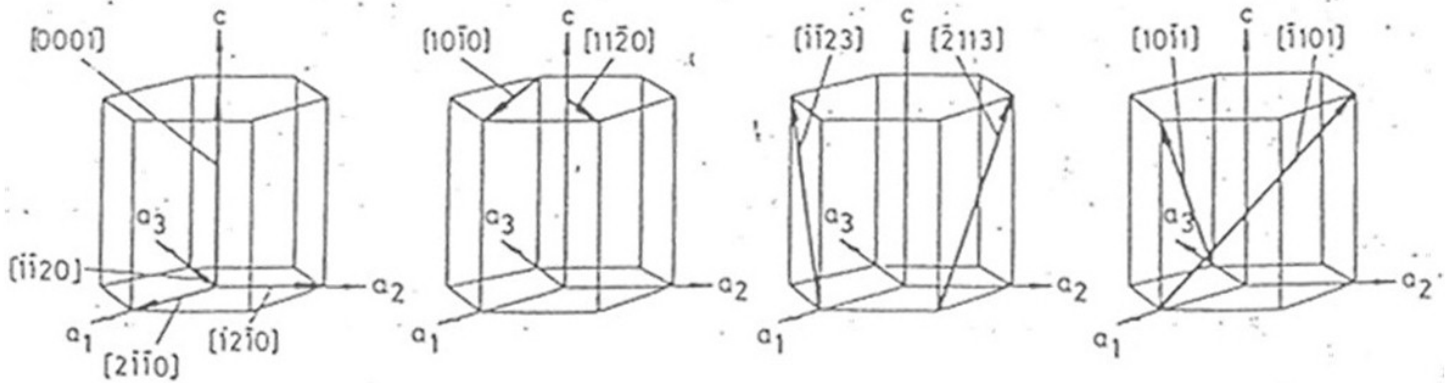
A Richtung: $[100] \rightarrow [2\bar{1}\bar{1}0]$

B Richtung: $[111] \rightarrow [22\bar{4}3]$

C Richtung: $[\bar{2}0\bar{1}] \rightarrow [4\bar{2}6\bar{3}]$

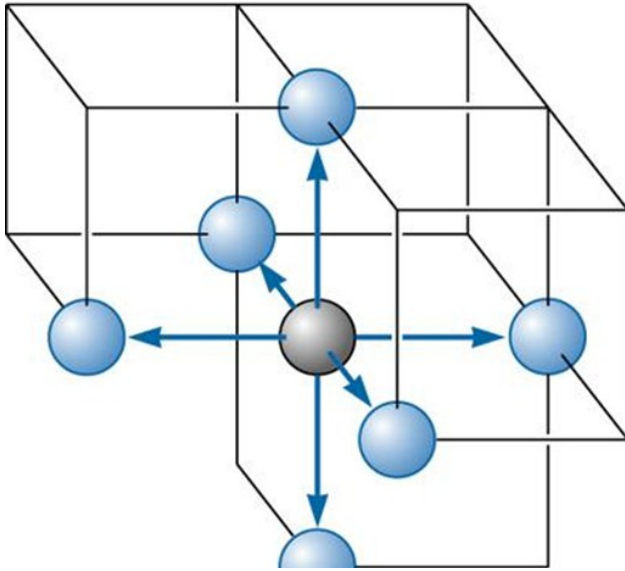
Bei der Richtungsindizierung wird von den Indizes u^* , v^* , j^* , w^* ausgegangen. Dabei sind die Indizes die teilerfremden Vektorkomponenten längs der Achsen a_1 , a_2 , a_3 und c . Mit vier Komponenten sind auch die Richtungen überbestimmt. Deshalb gilt für die Indizes der koplanaren Komponenten

$u^* = \frac{1}{3} (2u - v)$	$t^* = -\frac{1}{3} (u + v)$
$v^* = \frac{1}{3} (2v - u)$	$w^* = w$

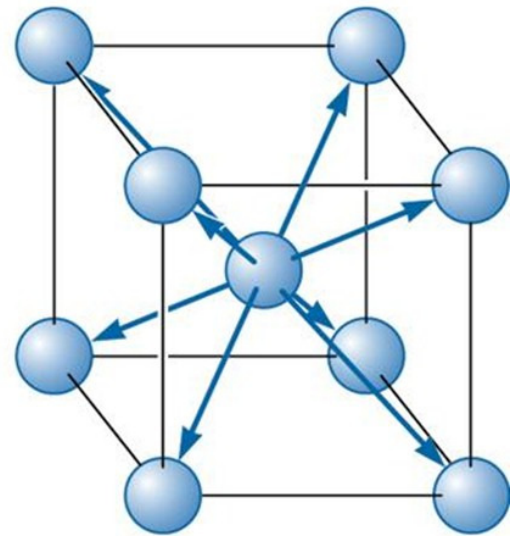


- Koordinationszahl (KZ)
- Atome pro Elementarzelle
- Atomdurchmesser (Gitterparameter)
- Packungsdichte (PD) (für Volumen)
- Größte Gitterlücken (Größe, Platz)
- Dichtest gepackte Ebenen, Richtungen

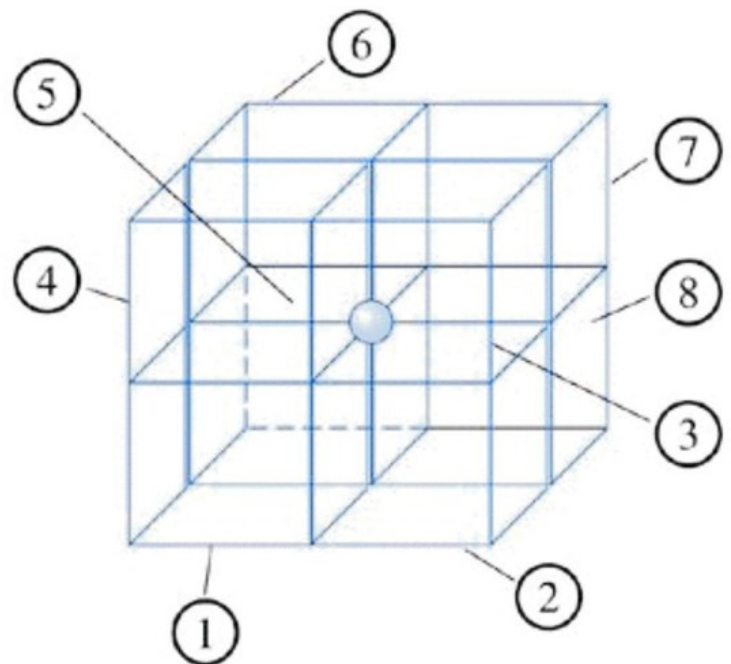
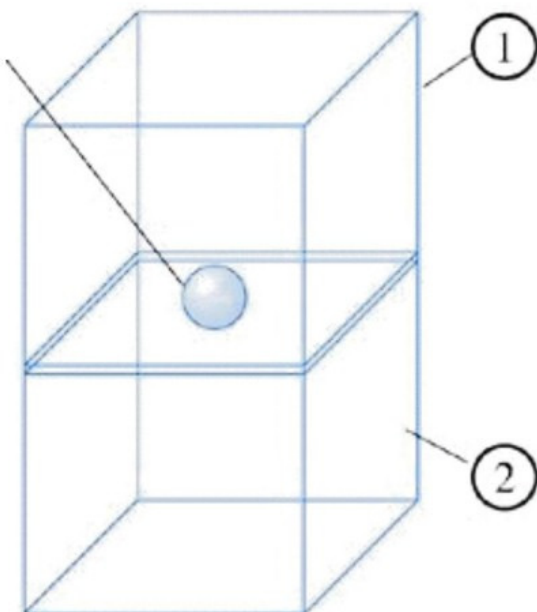
- Packungsdichte für Ebenen
- Packungsdichte für Richtungen

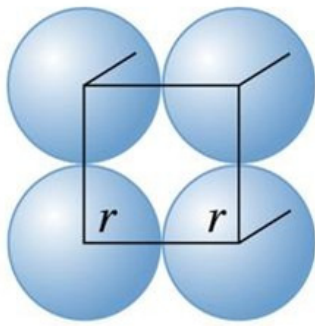


Primitiv kubisch



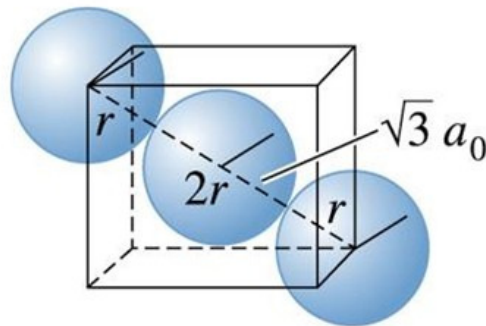
Kubisch raumzentriert





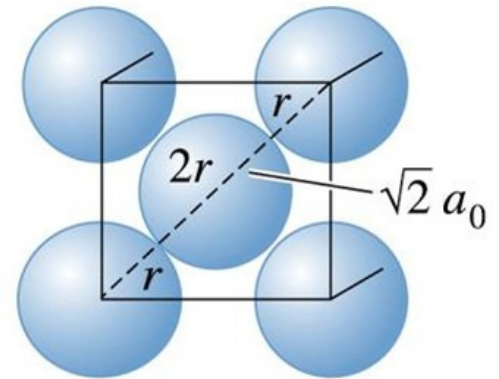
$$\leftarrow a_0 \rightarrow$$

(SC)



$$\leftarrow a_0 \rightarrow$$

(BCC)



$$\leftarrow a_0 \rightarrow$$

(FCC)

SC = Simple Cubic = primitiv kubisch

BCC = Body Centered Cubic = kubisch raumzentriert

FCC = Face Centered Cubic = kubisch flächenzentriert

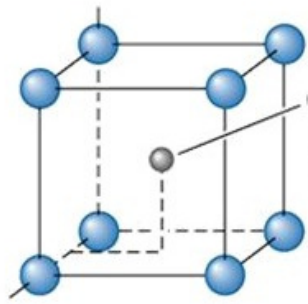
PD = Volumen d. Atome in der EZ / Volumen d. EZ

a = Gitterparameter

d = Atomdurchmesser

krz \rightarrow 2 Atomen pro Zelle

$$PD = \frac{2 \left(\frac{d^3 \Pi}{6} \right)}{a^3} = \frac{\left(\frac{a\sqrt{3}}{2} \right)^3 \Pi}{3a^3} = \frac{a^3 \sqrt{3} \Pi}{8a^3} = \frac{\sqrt{3} \Pi}{8} \approx 0.68$$



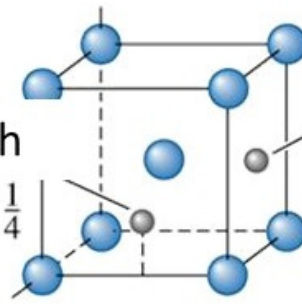
KP

Kubisch

$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Tetraedrisch

$1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$



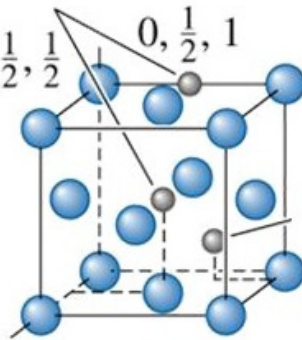
KRZ

Oktaedrisch

$\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}$

Oktaedrisch

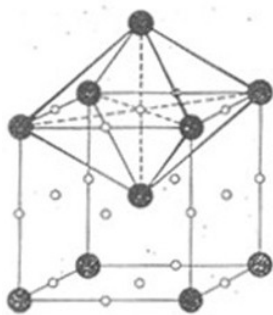
$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$



KFZ

Tetraedrisch

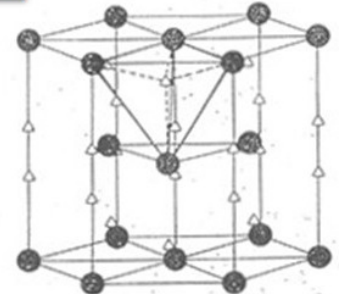
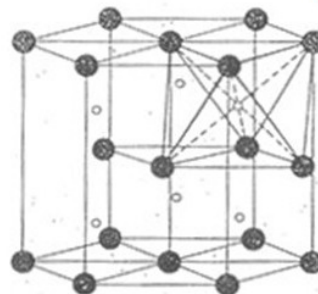
$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$



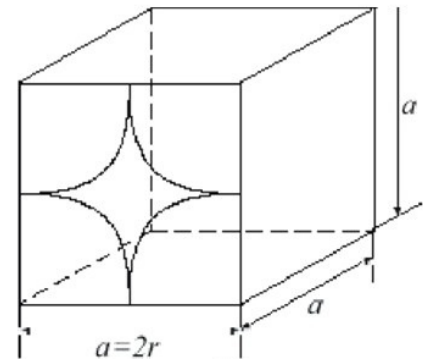
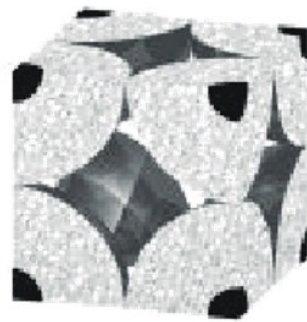
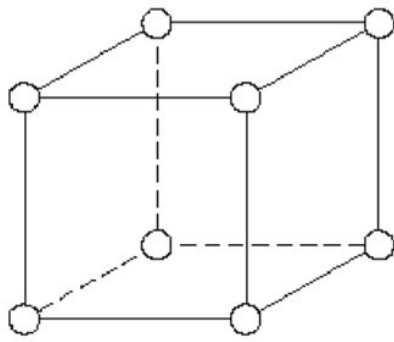
KRZ

- Gitterplätze
- Oktaederplätze
- Tetraederplätze

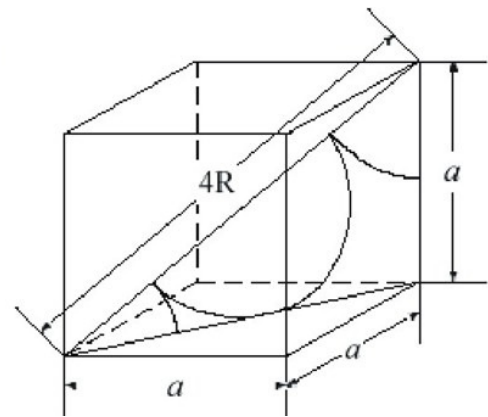
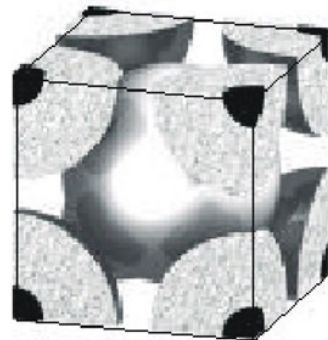
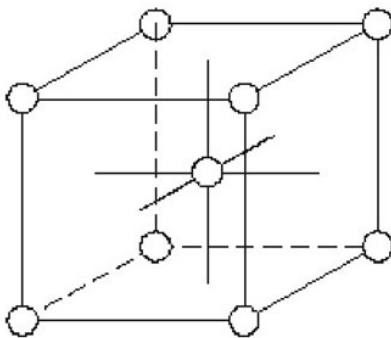
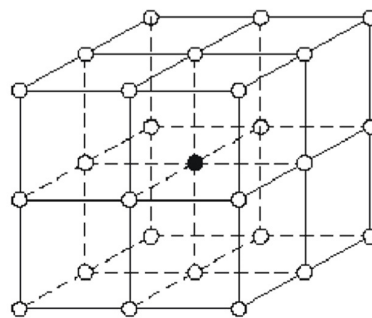
HEX



KFZ

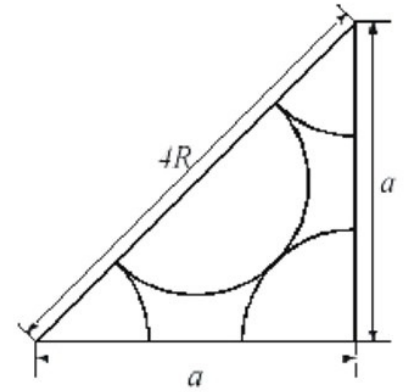
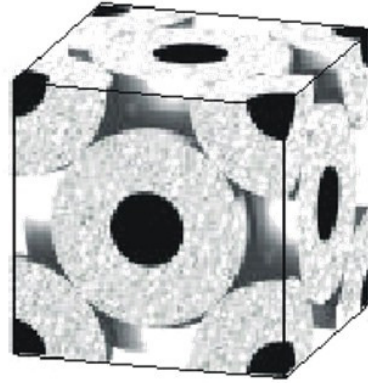
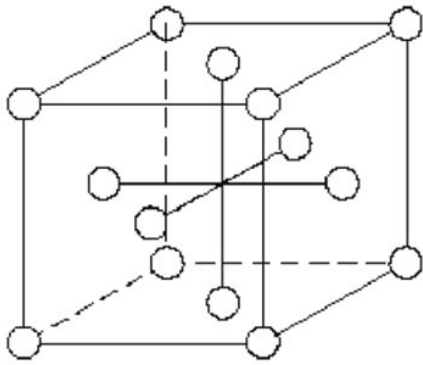


Gittertyp	Metalle	Koord. zahl	Atomdurchmesser D	Anzahl der Atome N_A	Packungsdichte PD	Größte Gitterlücke d_i	Dichteste Packungen
PK	Po	6	a	1	0,52	$0,73 \times a$ in die Mitte	{100} <100>



Gittertyp	Metalle	Koord. zahl	Atomdurchmesser D	Anzahl der Atome N_A	Packungsdichte PD	Größte Gitterlücke d_i	Dichteste Packungen
KRZ	Na, K, Cr, Mo, W, β Ti, α Fe	8	$\frac{\sqrt{3}}{2} a$	2	0,68	$0,252 \times a$ $\frac{1}{2} \frac{1}{4} 0$	{110} <111>

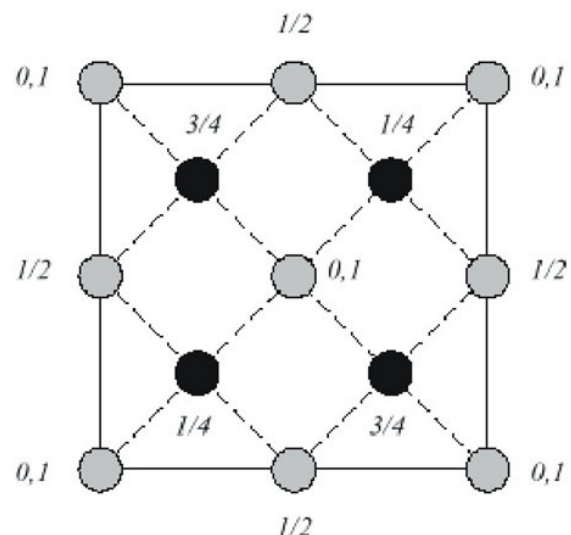
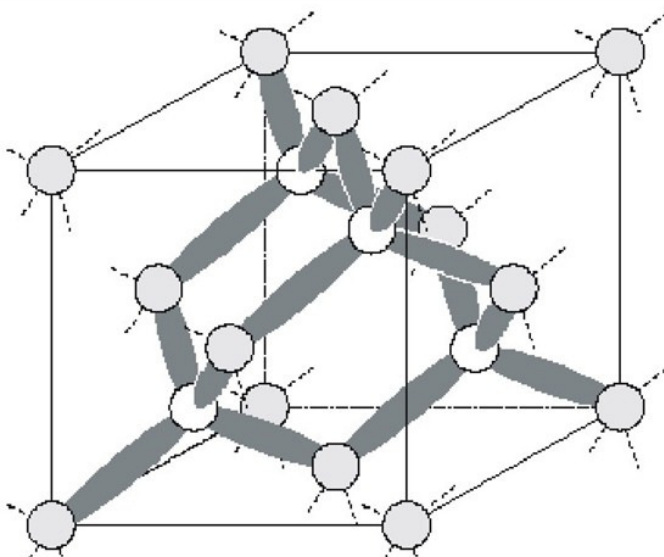
Verformbarkeit im kleinem Maß. Neigung zur Oxidation, Schwache Leitungsfähigkeit, Spröd-plastischer Übergang.



Gittertyp	Metalle	Koord. zahl	Atomdurchmesser D	Anzahl der Atome N_A	Packungsdichte PD	Größte Gitterlücke d_i	Dichteste Packungen
KFZ	Cu, Au, Ag, Pb, Ni, Pt, γ Fe	12	$\frac{\sqrt{2}}{2} a$	4	0,74 Maximal!	0,293 a $\frac{1}{2} 0 0$ $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	{111} <110>

Gute Verformbarkeit, chemische Stabilität, gute thermische- und elektrische Leitfähigkeit.

75

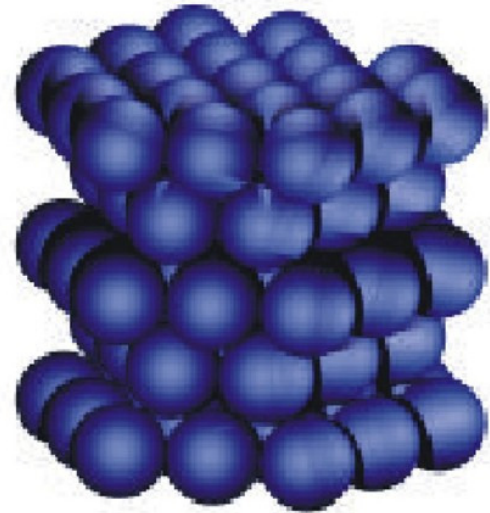
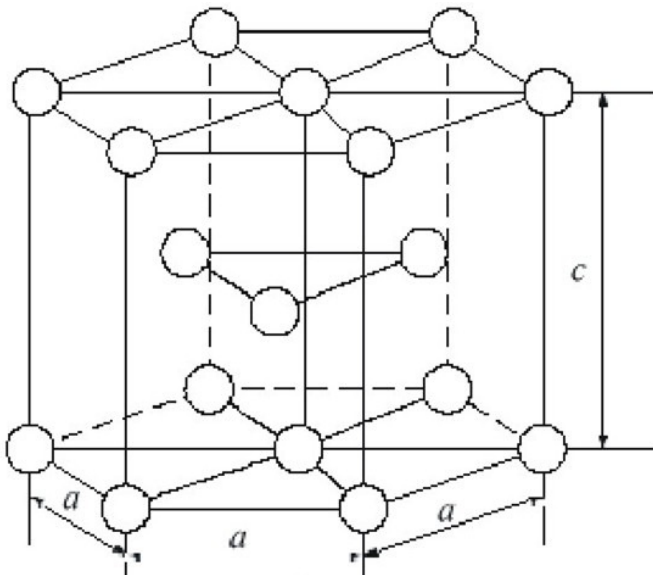


Gittertyp	Metalle	Koord. zahl	Atomdurchmesser D	Anzahl der Atome N_A	Packungsdichte PD	Größte Gitterlücke d_i	Dichteste Packungen
Diamant	C, Si, Ge, α Sn	4	$\frac{\sqrt{3}}{4} a$	8	0,34	{111} <110> Berühren sich nicht	{111} <110>

d_i ist nicht charakteristisch.

Verbindungsrichtung: die Diagonale

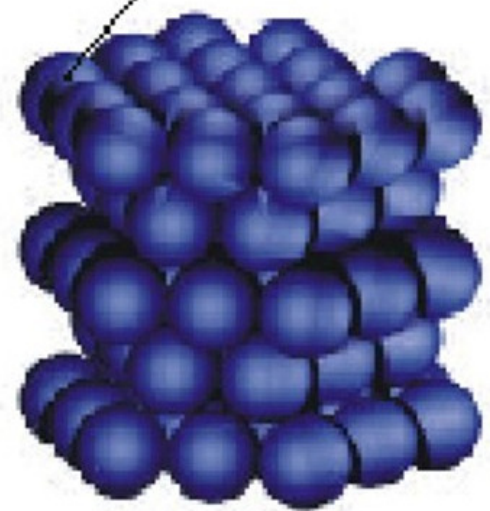
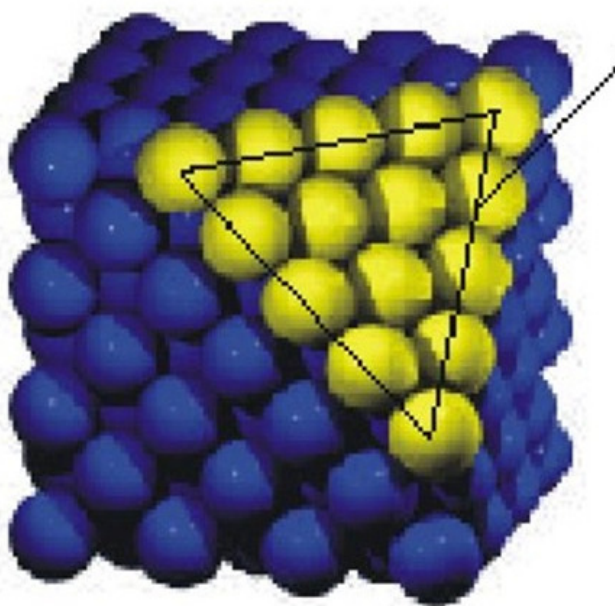
76



Gittertyp	Metalle	Koord. zahl	Atomdurchmesser D	Anzahl der Atome N_A	Packungsdichte PD	Größte Gitterlücke d	Dichteste Packungen
HCP	Be, Mg, Zn, Cd, α Ti	12	$c/a=1,63$	6	0,74 Maximal!	0,235 a	{0001} <1120>

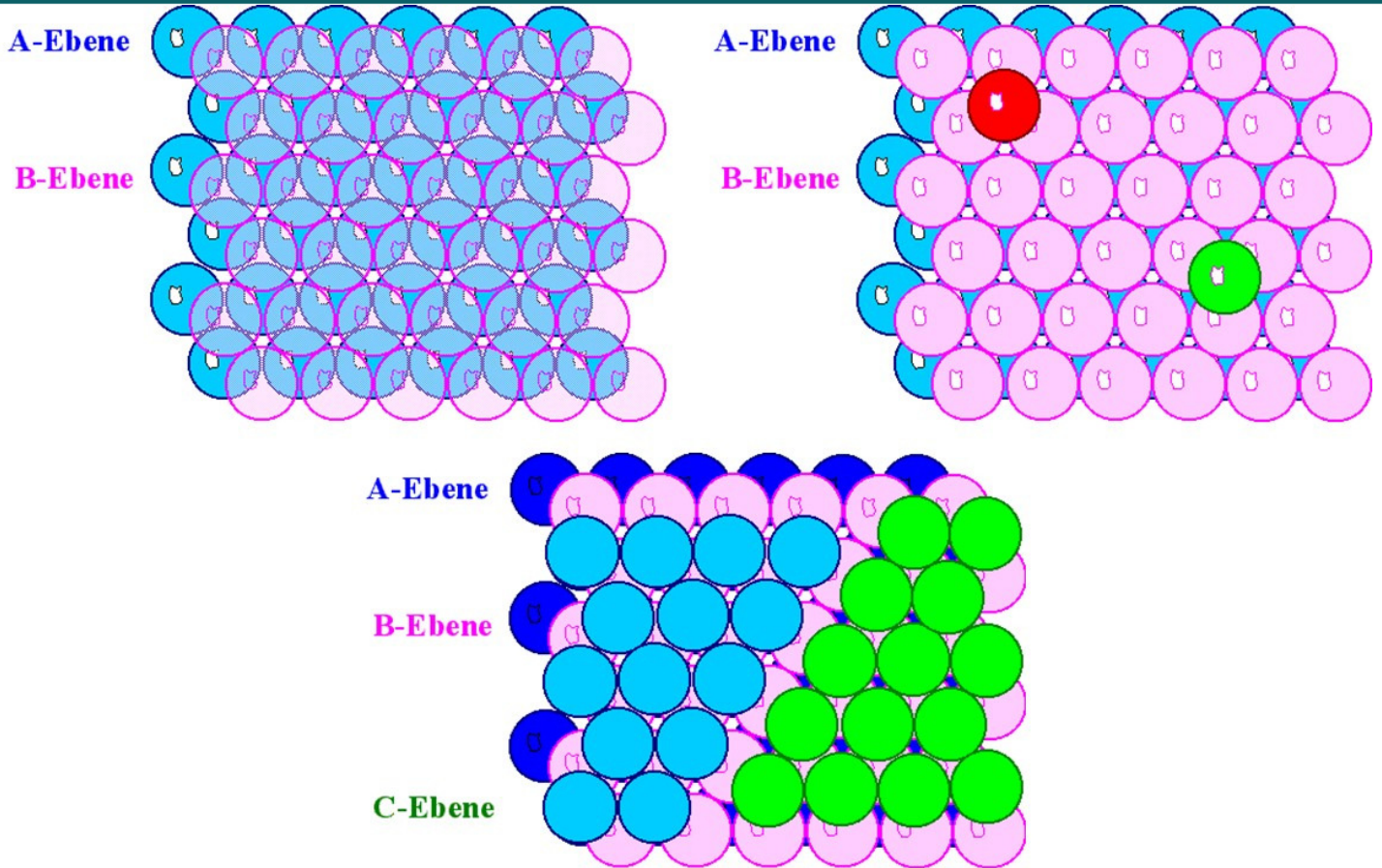
(111)

(0001)

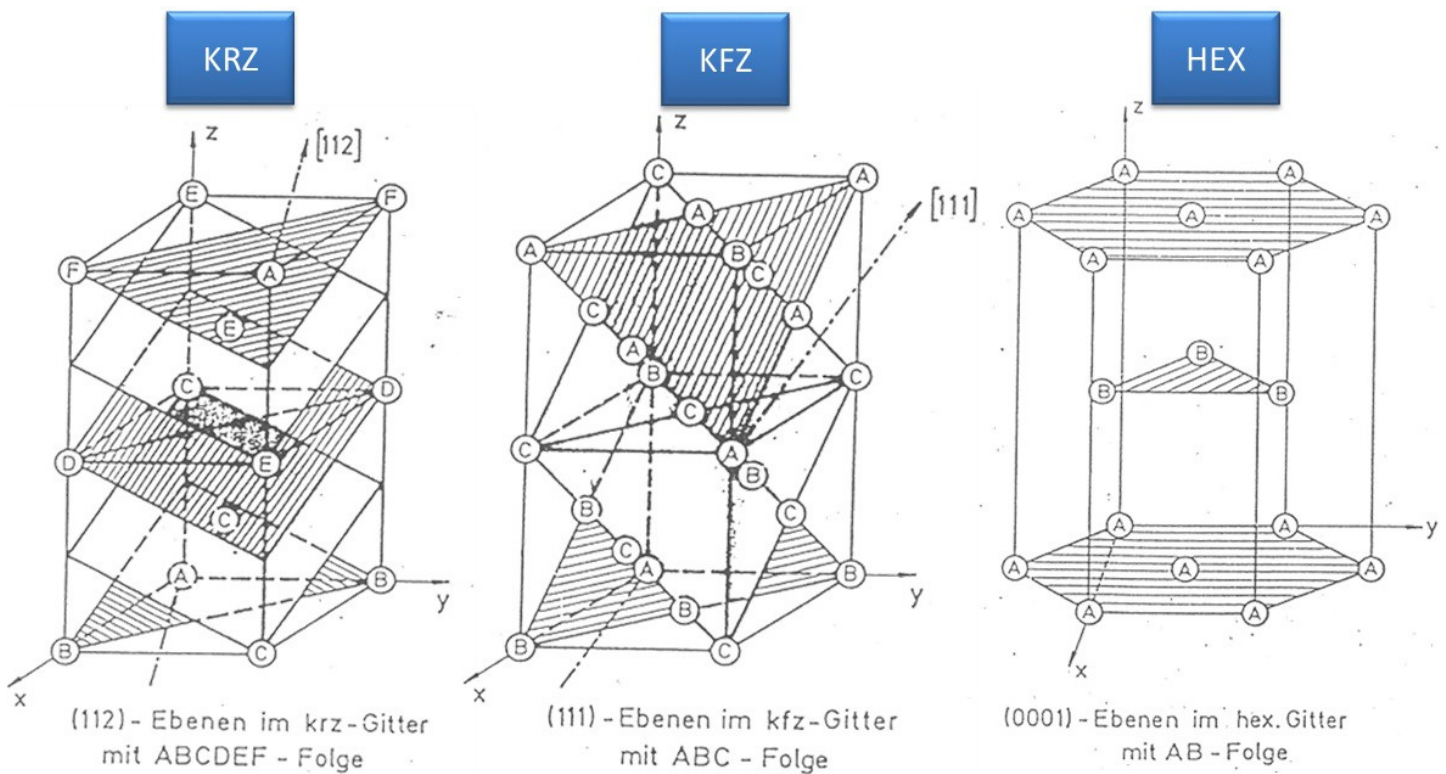


ABCABC

ABABAB



79



80

Danke für die Aufmerksamkeit !

