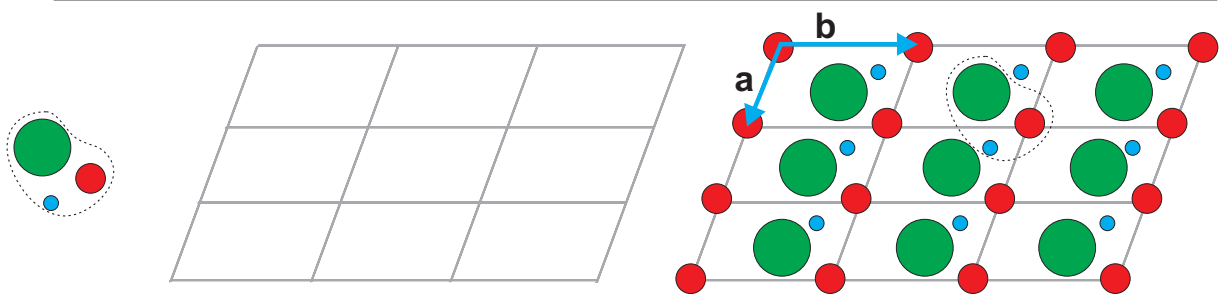
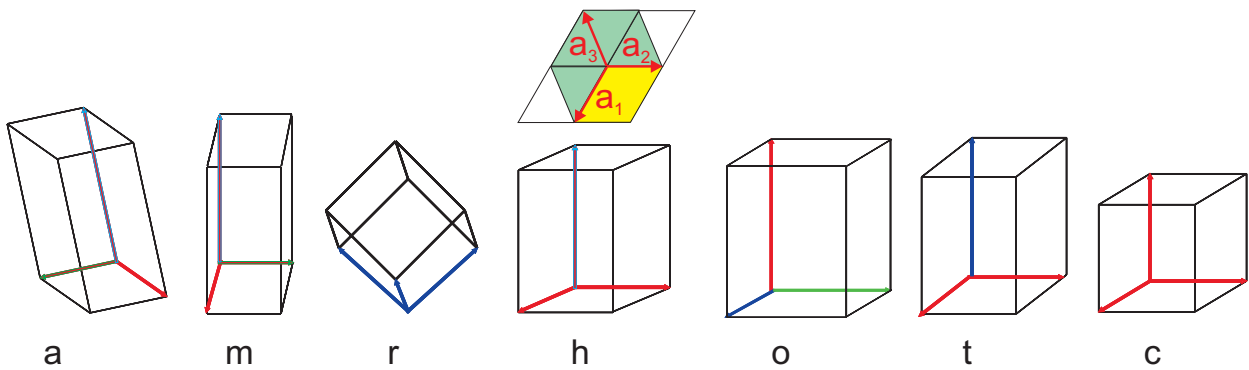


Kristallstruktur

● Atom A ● Atom B ● Atom C



Basis + **Gitter** = **Kristallstruktur**



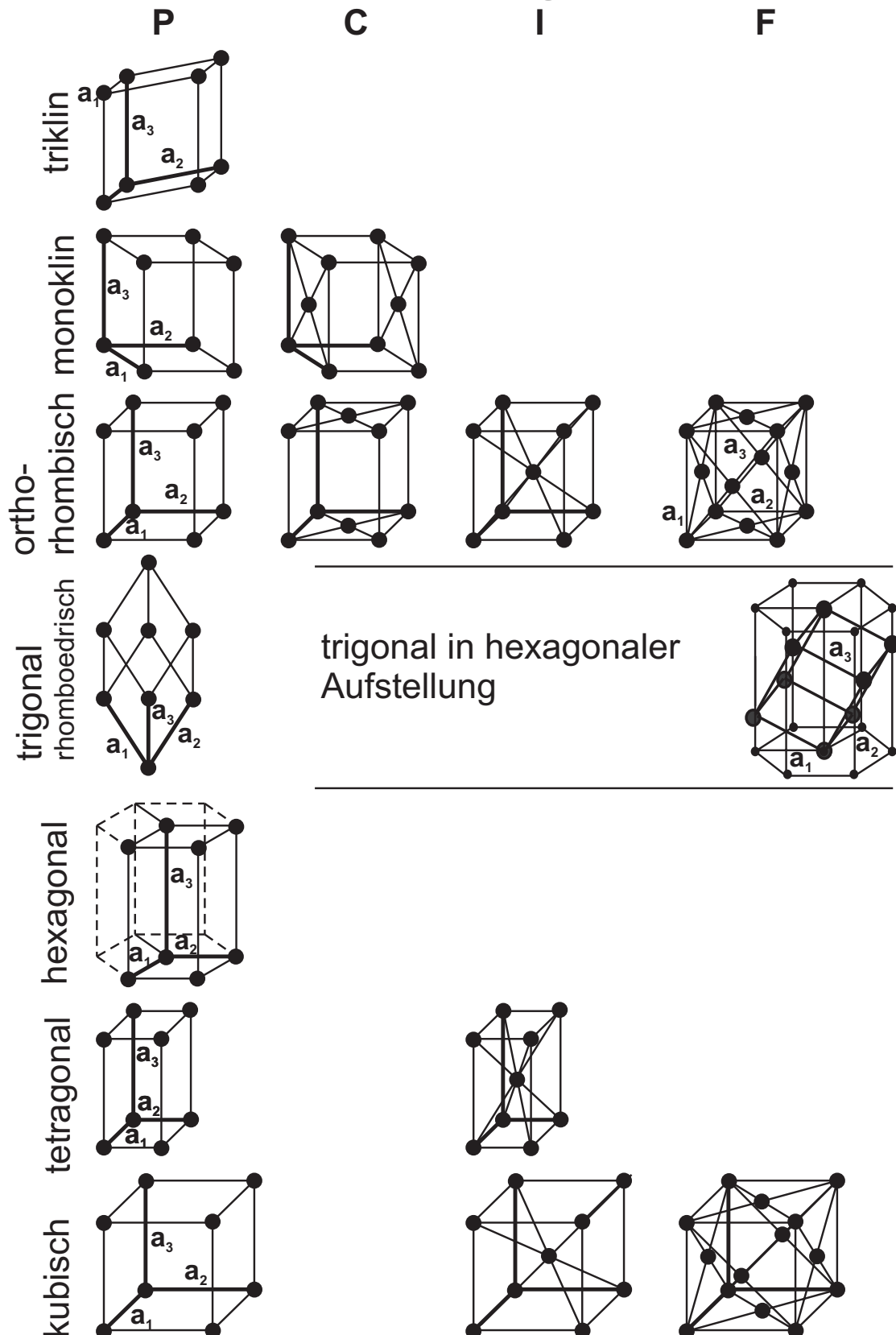
Name - Kurzzeichen	Gitterkonstanten	Winkel	Volumen Elementarzelle
triklin	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	Gleichung 11
monoklin	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta > 90^\circ$	$a_0 \cdot b_0 \cdot c_0 \cdot \sin \beta$
trigonal rhomboedrisch	$a_0 = b_0 \neq c_0$ $a_0 = b_0 = c_0$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$\frac{\sqrt{3}}{2} a_0^2 \cdot c_0$ $a_0^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}$
hexagonal	$a_0 = b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$\frac{\sqrt{3}}{2} a_0^2 \cdot c_0$
orthorhombisch	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a_0 \cdot b_0 \cdot c_0$
tetragonal	$a_0 = b_0 \neq c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a_0^2 \cdot c_0$
kubisch	$a_0 = b_0 = c_0$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a_0^3

Beschreibungsgrößen für die 7 Kristallsysteme

a_0 bzw. α - notwendige Beschreibungsgröße für dieses System, alle anderen fest durch Vorgaben!

bei trigonal und rhomboedrisch $a_0 \text{ trigonal} \neq a_0 \text{ rhombodredrisch}$

Die 14 Bravaisgitter



(beim trigonalen Kristallsystem ist die hexagonale Aufstellung kein extra Bravaisgitter)

Wahl der Elementarzelle

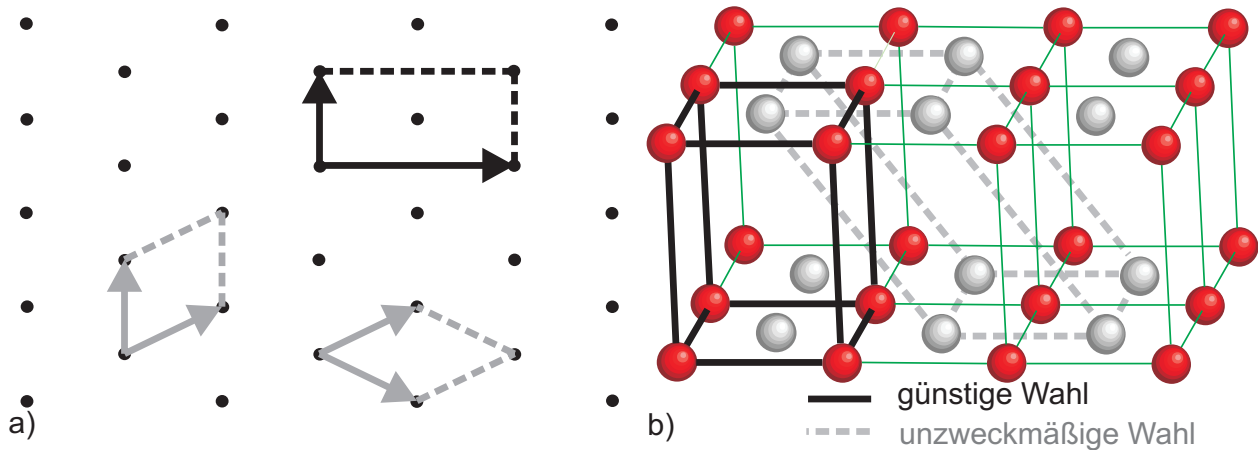
mathematischen Beschreibung des Gitters über drei nicht komplanare Vektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

die Vektoren spannen ein Parallelepiped auf (Elementarzelle)

$$\vec{r} = u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3$$

Vektoren \vec{a}_i so, dass u, v und w ganzzahlig sind

Besitzt die Elementarzelle nur an ihren Eckpunkten Gitterpunkte, so heißt sie primitiv. Sie enthält nur einen Gitterpunkt (jeder Eckpunkt wird durchschnittlich nur zu einem Achtel gezählt).

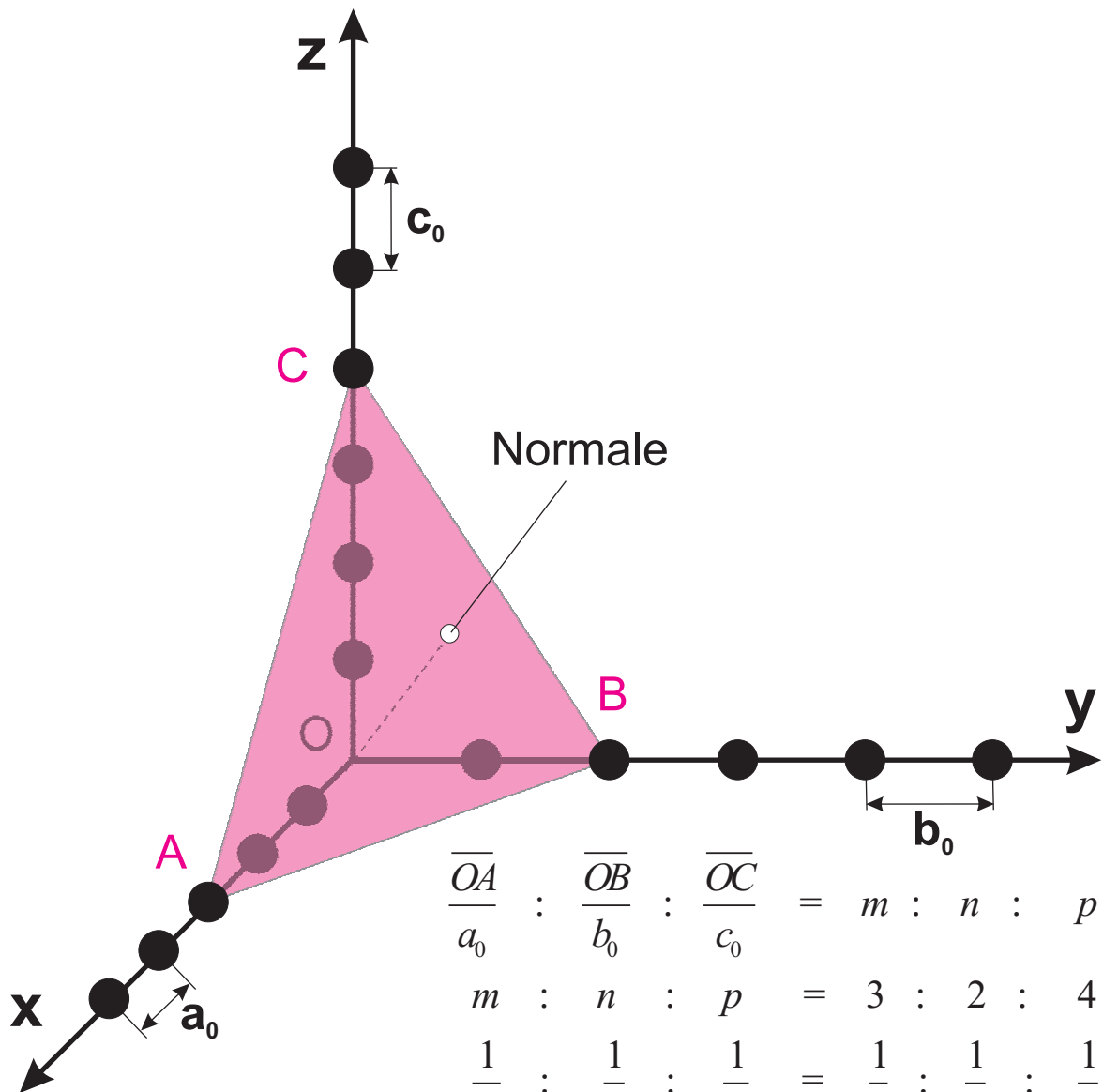


Wahl der Elementarzelle a) in einer Projektionsebene b) bei dreiminimaler Anordnung

Die Wahl der Elementarzellen kann nach verschiedenen Gesichtspunkten erfolgen.

- selten \vec{a}_i so, dass die Elementarzelle primitiv ist
- neben der möglichen Orthogonalität der Gittervektoren soll die Elementarzelle so gewählt werden, dass sich ein Volumenminimum ergibt

MILLERsche Indizes (Bestimmung)



$$\frac{\overline{OA}}{a_0} : \frac{\overline{OB}}{b_0} : \frac{\overline{OC}}{c_0} = m : n : p$$

$$m : n : p = 3 : 2 : 4$$

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = \frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{4}$$

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = \frac{4}{12} : \frac{6}{12} : \frac{3}{12}$$

$$h : k : l = 4 : 6 : 3$$

$$(hkl) = (463)$$

Flächenhäufigkeitsfaktoren aller Kristallsysteme

hkl	kubisch	tetragonal	hexagonal	orthorhombisch	monoklin	triklin
hkl	48	16	24	8	4	2
hhl	24	8	12	8	4	2
hlh	24	16	24	8	4	2
lhh	24	16	24	8	4	2
hk0	24	8	12	4	2	2
h0l	24	16	12	4	4	2
0kl	24	16	12	4	4	2
hhh	8	8	12	8	4	2
hh0	12	4	6	4	2	2
h0h	12	8	12	4	4	2
0hh	12	8	12	4	4	2
h00	6	4	6	2	2	2
0k0	6	4	6	2	2	2
00l	6	2	2	2	2	2

Anzahl gleichwertiger Ebenen, Flächenhäufigkeitsfaktor für
Pulveraufnahmen

Packungsdichte in der Elementarzelle - kubische Systeme

- jede Elementarzelle wird an ihren acht Ecken von jeweils einem Atom besetzt
- da neben einer betrachteten Elementarzelle noch weitere 7 sich anschließen, ist jedes Eckatom nur zu einem **Achtel** der Elementarzelle zugehörig
- neben den primitiven Elementarzellen (p - simple cell (sc)) gibt es noch die sogenannten Bravais-Gitter
- im kubischen System gibt es die
flächenzentrierte Elementarzelle (kfz - face centered cell (fcc))
raumzentrierte Elementarzelle (krz - body centered cell (bcc))

Atome pro Elementarzelle im kubischen Kristallsystem

- primitive Elementarzelle: $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ Atom/EZ
- raumzentrierte Elementarzelle: $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$ Atome/EZ
- flächenzentrierte Elementarzelle: $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ Atome/EZ

Packungsdichte (Atomausfüllung pro Elementarzelle)

- primitive Elementarzelle
Radien von den Eckatomen berühren sich, bzw. 1 Kugel mit Radius $\frac{a_0}{2}$ füllt den Würfel aus \rightarrow **54%**
- raumzentrierte Elementarzelle
2 Atome (Kugeln) mit einem Radius von einem Viertel der Raumdiagonale füllen den Würfel aus \rightarrow **68%**
- flächenzentrierte Elementarzelle
4 Atome (Kugeln) mit einem Radius von einem Viertel der Flächendiagonale füllen den Würfel aus \rightarrow **74%**