

02 Das Kristallgitter

Binden sich Atome zu Festkörpern, so geschieht dies aus energetischen Gründen. Man unterscheidet zwischen kristallinen und amorphen Festkörpern.

Kristalline Festkörper bestehen aus einer periodischen Aneinanderreihung von gleichen Bausteinen bzw. Baugruppen. Sie besitzen eine Nah- und eine Fernordnung. Kristallin bedeutet, dass sich der Stoff aus mehreren kleinen Kristallen zusammensetzt. Es gibt jedoch auch Einkristalle, bei denen die gleiche periodische Struktur im gesamten Stoff erhalten ist. Beispiele sind Silicium und Diamant. Im Gegensatz dazu findet man bei amorphen Festkörpern zwar gleiche Bausteine, diese sind jedoch nicht räumlich periodisch angeordnet. Man sagt, sie besitzen eine Nah-, jedoch keine Fernordnung. Beispiele sind Gläser, Keramiken und Polymere.

Auf Grund der existierenden Fernordnung bei Kristallen können diese durch ein so genanntes Punktgitter beschrieben werden. Dabei wird jedem Baustein ein Gitterpunkt zugeordnet. Geht man von einem unendlich ausgedehnten Kristall ohne Defekte, also einem idealen Kristall, aus, so sieht die Anordnung der Atome von jedem Gitterpunkt aus betrachtet in jeder Hinsicht gleich aus.

Das Punktgitter kann durch Basisvektoren eindeutig bestimmt werden. Diese verbinden zwei Gitterpunkte miteinander und durch eine Linearkombination der Basisvektoren muss jeder Gitterpunkt erreichbar sein.

Wie hier im Beispiel in zwei Dimensionen

Oder allgemein in drei Dimensionen, kann so jeder Gittervektor r_n als Linearkombination der Basisvektoren dargestellt werden.

Sinnvoll ist es die Basisvektoren vom kleinstmöglichen Betrag zu wählen, sodass die Koeffizienten n_i in der angesprochenen Linearkombination ganzzahlig sind. Man nennt die Basisvektoren dann primitiv.

Auf Grund der streng periodischen Anordnung kann man von einer Translationsinvarianz von physikalischen Größen ausgehen. Das bedeutet, dass beispielsweise das Potential an allen Orten im Raum, die man von einem bestimmten Ort r mit einem Gittervektor r_n erreicht, gleich groß ist.

Die physikalische Größe lässt sich dann in einer Fourier-Reihe entwickeln. Diese Reihenentwicklung, zum Beispiel die des Potentials, ist dann gegeben durch die folgende Summe

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

mit den Fourier-Koeffizienten $V_{\vec{G}}$.

Damit die Translationsinvarianz auch für die Fourier-Reihe gilt, muss folgende Bedingung erfüllt sein: das Skalarprodukt von \vec{G} und \vec{r}_n muss einem ganzzahligen Vielfachen von 2π entsprechen, wobei \vec{r}_n ein beliebiger Gittervektor ist.

Zerlegen wir nun \vec{G} in seine Komponenten, und betrachten den Fall $n_2=n_3=0$, so ergibt sich durch Ausmultiplizieren diese Beziehung:

$$\vec{G} \cdot \vec{r}_n = (h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3) \cdot n_1 \vec{a}_1$$

Dies ist immer dann erfüllt, wenn eine Komponente von \vec{G} jeweils senkrecht zu zwei Komponenten von \vec{r}_n ist.

Die Vektoren \vec{g}_i bilden die Basis des reziproken Gitters. Die Vektoren groß \vec{G} werden reziproke Gittervektoren genannt. Sie haben die Dimension $1/\text{Länge}$. Das reziproke Gitter befindet sich im Fourier-Raum, in dem auch die Wellenzahlvektoren dargestellt werden. Man kann jeden Punkt im Fourier-Raum als Repräsentation einer Welle auffassen. Die Wellenzahlvektoren, die genau den Gittervektoren entsprechen, haben die Besonderheit, dass sie mit der Kristallstruktur assoziiert sind.