

JEAN KUNTZMANN

**Unendliche Reihen**

Mathematische Hilfsmittel der Physik und Chemie

Mit 94 Übungen und 29 Aufgaben

JEAN KUNTZMANN

**Systeme von Differentialgleichungen**

Mathematische Hilfsmittel der Physik und Chemie

Mit 88 Übungen und 40 Aufgaben

JEAN KUNTZMANN

**Komplexe Veränderliche**

Mathematische Hilfsmittel der Physik und Chemie

Mit 90 Übungen und 37 Aufgaben

FERDINAND CAP

**Einführung in die Plasmaphysik**

I. Theoretische Grundlagen

FERDINAND CAP

**Einführung in die Plasmaphysik**

II. Wellen und Instabilitäten

FERDINAND CAP

**Einführung in die Plasmaphysik**

III. Magnetohydrodynamik

J. A. ROSANOW

**Wahrscheinlichkeitstheorie**

HARRY PFEIFER

**Theorie linearer Bauelemente**

Elektronik für den Physiker I

HARRY PFEIFER

**Die Elektronenröhre**

Elektronik für den Physiker II

HARRY PFEIFER

**Schaltungen mit Elektronenröhren**

Elektronik für den Physiker III

HARRY PFEIFER

**Leitungen und Antennen**

Elektronik für den Physiker IV

HARRY PFEIFER

**Mikrowellenelektronik**

Elektronik für den Physiker V

HARRY PFEIFER

**Halbleiterelektronik**

Elektronik für den Physiker VI

GERHARD HÜBNER / KLAUS JUNG / ECKART WINKLER

**Die Rolle des Wassers in biologischen Systemen**

STEPHEN G. BRUSH

**Kinetische Theorie, Teil I und II**

Einführung und Originaltexte

EBERHARD HOFMANN

**Eiweiße und Nucleinsäuren als biologische Makromoleküle**

Dynamische Biochemie, Teil I

EBERHARD HOFMANN

**Enzyme und energieliefernde Stoffwechselreaktionen**

Dynamische Biochemie, Teil II

EBERHARD HOFMANN

**Intermediärstoffwechsel**

Dynamische Biochemie, Teil III

EBERHARD HOFMANN

**Grundlagen der Molekularbiologie  
und Regulation des Zellstoffwechsels**

Dynamische Biochemie, Teil IV

HERBERT GOERING

**Elementare Methoden zur Lösung von  
Differentialgleichungsproblemen**

PETER KRUMBIEGEL

**Isotopieeffekte**

D. M. BRINK

**Kernkräfte.** Einführung und Originaltexte

DIETER ONKEN

**Steroide**

Zur Chemie und Anwendung

HEINZ GEILER

**Ökologie der Land- und Süßwassertiere**

ARTHUR F. CRACKNELL

**Angewandte Gruppentheorie.** Einführung und Originaltexte

DIETER KLAUA

**Elementare Axiome der Mengenlehre**

GÜNTER TEMBROCK

**Grundlagen der Tierpsychologie**

J. P. VINSON

**Optische Kohärenz in der klassischen Theorie  
und in der Quantentheorie**

W. R. HINDMARSH

**Atomspektren.** Einführung und Originaltexte

GÜNTER TEMBROCK

**Biokommunikation**

Informationsübertragung im biologischen Bereich  
Teil I und II

ADOLF ZSCHUNKE

**Kernmagnetische Resonanzspektroskopie  
in der organischen Chemie**

DIETER MERKEL

**Riechstoffe**

JOHN CUNNINGHAM

**Vektoren**

GEORG DAUTCOURT

**Relativistische Astrophysik**

ERNST SCHMUTZER

**Symmetrien und Erhaltungssätze der Physik**

GERHARD LERCH

**Pflanzenökologie**

MICHAEL GÖSSEL

**Angewandte Automatentheorie, Band I**  
Grundbegriffe

MICHAEL GÖSSEL

**Angewandte Automatentheorie, Band II**

Lineare Automaten und Schieberegister

HEINRICH KINDLER

**Der Regelkreis. Eine Einführung**

HANS BANDEMER / ANDREAS BELLMANN

WOLFHART JUNG / KLAUS RICHTER

**Optimale Versuchsplanung**

HARRY PAUL

**Nichtlineare Optik, Teil I und II**

A. R. KESSEL

**Akustische Kernresonanz**

WOLFRAM BRAUER / HANS-WALDEMAR STREITWOLF

**Theoretische Grundlagen der Halbleiterphysik**

EBERHARD TEUSCHER

**Pharmakognosie, Teil I und II**

DIETER KLAUA

**Grundbegriffe der axiomatischen Mengenlehre, Teil I und II**

JOACHIM NITSCHMANN

**Entwicklung bei Mensch und Tier**

DIETRICH BENDER / ERNST-EGON PIPPIG

**Einheiten, Maßsysteme, SI**

E. G. GOLSTEIN

**Konvexe Optimierung. Die Elemente der Theorie**

HELMUT FRIEMEL / JOSEF BROCK

**Grundlagen der Immunologie**

SIEGFRIED HAUPTMANN

**Über den Ablauf organisch-chemischer Reaktionen**

R. A. R. TRICKER

**Frühe Elektrodynamik**

A. S. SONIN / B. A. STRUKOW

**Ferroelektrizität**

L. A. SKORNJAKOW

**Elemente der Verbandstheorie**

HANS-MARTIN BARCNET  
**Chemie photographischer Prozesse**

KONRAD KREHER  
**Festkörperphysik**

N. D. SHEWANDROW  
**Polarisation des Lichtes**

DIETER KLAU A  
**Kardinal- und Ordinalzahlen, Teil 1 und 2**

A. A. SMIRNOW  
**Metallphysik**

VOLKER KEMPE  
**Theorie stochastischer Systeme**

ROLF BORS DORF / MANFRED SCHOLZ  
**Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie**

KLAUS ODENING  
**Parasitismus. Grundfragen und Grundbegriffe**

WOLFGANG PAULI  
**Vierpoltheorie und ihre Anwendung auf elektrische Schaltungen**

R. A. R. TRICKER  
**Die Beiträge von Faraday und Maxwell zur Elektrodynamik**

HANS DAWCZYNSKI  
**Temperaturbeständige Faserstoffe aus organischen Polymeren**

HANS DAWCZYNSKI  
**Temperaturbeständige Faserstoffe aus anorganischen Polymeren**

GERALD WOLF  
**Neurobiologie**

HORST KEHLEN / FRANK KUSCHEL / HORST SACKMANN  
**Grundlagen der chemischen Kinetik**

HANS BERGNER  
**Tierernährung**

MARTIN SCHMIDT  
**Pflanzenschutz im Gartenbau**

ULRICH SEDLAG  
**Biologische Schädlingsbekämpfung**

WOLFGANG WAGNER

**Chemische Thermodynamik**

HANNELORE FISCHER / JOACHIM PIEHLER

**Modellsysteme der Operationsforschung**

MICHAEL GÖSSEL

**Wahrscheinlichkeitsautomaten und Zufallsfolgen**

HANS-JÜRGEN TREDER

**Elementare Kosmologie**

P. PAUFLER / D. LEUSCHNER

**Kristallographische Grundbegriffe der Festkörperphysik**

*Vorschau auf die nächsten Bände:*

PAUL HOFFMANN

**Photosynthese**

WOLFGANG MEILING

**Kernphysikalische Elektronik**

W. DÖPKE

**Stereochemie organischer Verbindungen**

WLB

---

BAND 156

*P. Paufler / D. Leuschner*

# Kristallographische Grundbegriffe der Festkörperphysik

Mit 77 Abbildungen und 21 Tabellen



AKADEMIE-VERLAG · BERLIN

**Reihe MATHEMATIK UND PHYSIK**

Herausgeber:

Prof. Dr. phil. habil. W. Holz Müller, Leipzig

Prof. Dr. phil. habil. A. Lösche, Leipzig

Prof. Dr. phil. habil. H. Reichardt, Berlin

Prof. Dr. phil. habil. K. Schröder, Berlin

Prof. Dr. phil. habil. K. Schröter, Berlin

Prof. Dr. rer. nat. habil. H.-J. Treder, Potsdam

Verfasser:

***Doz. Dr. sc. nat. Peter Paufler***

Sektion Physik der Technischen Universität Dresden

***Dr. rer. nat. Dieter Leuschner***

Akademie der Landwirtschaftswissenschaften der DDR

Institut für Obstforschung Dresden-Pillnitz

ISBN-13: 978-3-528-06810-3

e-ISBN-13: 978-3-322-85833-7

DOI: 10.1007/978-3-322-85833-7

1975

Alle Rechte vorbehalten

Erschienen im Akademie-Verlag, 108 Berlin, Leipziger Str. 3—4

© Akademie-Verlag, Berlin, 1975

Lizenznummer: 202 · 100/437/75

Herstellung: VEB Druckhaus „Maxim Gorki“, 74 Altenburg

Bestellnummer: 762 000 4 (7156) · LSV 1184

EVP 8,—



## Inhaltsverzeichnis

	Vorwort . . . . .	7
0.	Vorbemerkungen . . . . .	8
1.	Geometrische Beschreibung des Kristallgitters . . . . .	9
1.1.	Vektordarstellung des Gitters . . . . .	9
1.1.1.	Elementarzelle . . . . .	9
1.1.2.	Beschreibung rationaler Kristalleigenschaften . . . . .	23
1.1.2.1.	Gitterpunkte . . . . .	23
1.1.2.2.	Gittergeraden . . . . .	24
1.1.2.3.	Netzebenen . . . . .	27
1.1.2.4.	Zonen und Zonenachsen . . . . .	31
1.2.	Reziprokes Gitter . . . . .	32
1.2.1.	Definition . . . . .	32
1.2.2.	Geometrische Eigenschaften des reziproken Gitters . . . . .	33
1.2.3.	Anwendung des reziproken Gitters bei geometrischen Rechnungen im Raumgitter . . . . .	37
1.2.3.1.	Berechnung von Netzebenenabständen . . . . .	37
1.2.3.2.	Winkel zwischen zwei Netzebenen . . . . .	38
1.2.3.3.	Vektorprodukt zweier Raumgittervektoren . . . . .	38
1.2.3.4.	Zonen . . . . .	38
1.2.3.5.	Zahl der Gitterpunkte in der Elementarzelle . . . . .	39
1.2.3.6.	Belegungsdichte von Netzebenen . . . . .	40
1.2.4.	Anwendung des reziproken Gitters auf einige physi- kalische Probleme . . . . .	40
1.2.4.1.	FOURIER-Entwicklung periodischer Funktionen . . . . .	40
1.2.4.2.	Interferenzen am Kristallgitter . . . . .	41
1.2.4.3.	BRILLOUIN-Zonen . . . . .	45
1.2.5.	Der Sonderfall des hexagonalen Gitters . . . . .	47
1.2.5.1.	Gittergeraden . . . . .	49
1.2.5.2.	Netzebenen . . . . .	51
1.3.	Koordinatentransformation . . . . .	53

2.	Symmetrieeigenschaften des Gitters . . . . .	55
2.1.	Symmetrieoperationen . . . . .	56
2.2.	Symmetrieelemente . . . . .	56
2.2.1.	Translation . . . . .	57
2.2.2.	Drehachse . . . . .	57
2.2.3.	Drehinversionsachse . . . . .	60
2.2.4.	Schraubenachse . . . . .	63
2.2.5.	Gleitspiegelebene . . . . .	65
2.2.6.	Antisymmetrieelement . . . . .	67
2.3.	Stereographische Projektion . . . . .	68
2.4.	Kombination von Symmetrieelementen . . . . .	71
2.4.1.	Kombination von Drehachsen und Drehinversionsachsen (Punktgruppen) . . . . .	71
2.4.2.	Kombination aller (nichtantisymmetrischer) Symmetrieelemente (Raumgruppen) . . . . .	77
2.4.3.	Einbeziehung des Antisymmetrieelements (HEESCH-SCHUBNIKOV-Klassen und -Gruppen) . . . . .	80
2.5.	Kristallsysteme . . . . .	84
3.	Ungestörte Kristallstrukturen . . . . .	84
3.1.	Strukturbegriff . . . . .	85
3.2.	Gitterkomplex . . . . .	86
3.3.	Koordinationspolyeder . . . . .	93
3.3.1.	Geometrie der Koordinationspolyeder . . . . .	93
3.3.2.	Koordinationszahl . . . . .	99
3.3.3.	Atomgrößen, Kugelpackungen . . . . .	101
3.4.	Strukturtypen . . . . .	108
3.5.	Bauzusammenhänge oder -verbände . . . . .	123
3.6.	Symmetriegruppen- und Strukturtabellen . . . . .	124
3.6.1.	Symmetriegruppendarstellungen . . . . .	125
3.6.2.	Tabellen mit Angaben zur Kristallstruktur . . . . .	125
4.	Störungen der Kristallstruktur . . . . .	126
4.1.	Nulldimensionale Fehlordnung . . . . .	127
4.1.1.	Atomare Punktfehler . . . . .	128
4.1.2.	Elektronische Störstellen . . . . .	132
4.1.3.	Energetische Störungen . . . . .	133
4.2.	Eindimensionale Fehlordnung . . . . .	134
4.2.1.	Kristallversetzungen . . . . .	135
4.2.2.	Disklinationen . . . . .	137
4.3.	Zweidimensionale Fehlordnung . . . . .	139
4.3.1.	Freie Oberflächen . . . . .	139

Inhaltsverzeichnis	5
4.3.2. Korngrenzen . . . . .	140
4.3.3. Phasengrenzen . . . . .	142
4.3.4. Stapelfehler . . . . .	144
4.3.5. Antiphasengrenzen . . . . .	146
4.4. Dreidimensionale Fehlordnung . . . . .	148
4.5. Struktur amorpher Festkörper . . . . .	148
Literaturhinweise . . . . .	151
Quellennachweis zu den Abbildungen . . . . .	155
Sachverzeichnis . . . . .	158

## Vorwort

Gewöhnlich muß sich der angehende Physiker, Werkstoffwissenschaftler oder Chemiker die kristallographischen Grundlagen seiner Spezialisierungsrichtung ohne Hilfe ausführlicher Lehrveranstaltungen zu diesem Thema selbst erarbeiten.

Das vorliegende Taschenbuch kann dabei zur Einführung dienen. Es enthält eine Zusammenstellung und Erläuterung elementarer kristallographischer und verwandter kristalchemischer Begriffe, die zur Beschreibung des Festkörpers verwendet werden und deren Kenntnis weiterführende Studien ermöglicht. Die Betrachtung beschränkt sich auf den Festkörper ohne Einwirkung äußerer Felder.

Die folgende Darstellung baut auf Erfahrungen im Lehrbetrieb an der Technischen Universität Dresden auf. Gruppentheoretische Hilfsmittel wurden mit Rücksicht auf den breiten Leserkreis nicht verwendet. Dagegen werden Grundkenntnisse der Vektor- und Matrixalgebra vorausgesetzt.

Herrn Prof. Dr. GUSTAV E. R. SCHULZE sind wir für die Einführung in dieses Gebiet und für die kritische Durchsicht des Manuskripts sehr zu Dank verpflichtet. Er hat das Erscheinen des Büchleins leider nicht mehr erlebt. Daher ist es für uns in besonderem Maße ein Andenken an ihn.

An der technischen Herstellung des Manuskripts haben Frau GISELA LEUSCHNER, Frau CHRISTA MYRCZIK und Fräulein CHRISTEL ARNDT wesentlichen Anteil, für den wir ihnen an dieser Stelle ebenfalls danken.

P. PAUFLER, D. LEUSCHNER