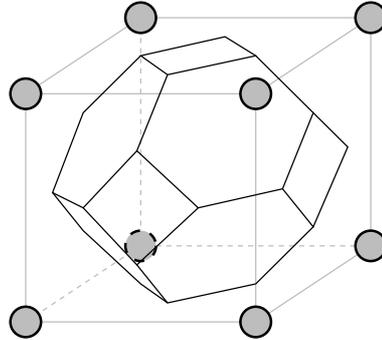


Die Brillouin Zone wird wiederum durch die Ebenen gekennzeichnet, die diese Vektoren in ihrer Mitte schneiden, also bei:

$$\frac{1}{2a} (\pm \vec{x} \pm \vec{y} \pm \vec{z})$$



**Abbildung 2.16:** Brillouin-Zone des kubisch flächenzentrierten Gitters. Die Einheitszellen sind im reziproken Raum, das reziproke Gitter ist kubisch raumzentriert.

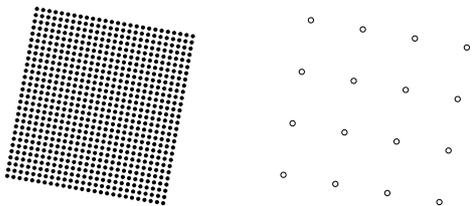
### Die Bedeutung der ersten Brillouin Zone

Nur Wellen, deren Wellenvektor (vom Ursprung aus aufgetragen) auf der Oberfläche der Brillouin Zone enden werden durch den Kristall gebeugt. Dies ist wichtig fuer Kristallstrukturanalysen durch Röntgen- oder Neutronenbeugung. Das Selbe gilt fuer Elektronenbeugung, woraus die Bandstruktur ermittelt wird. Die Bandstruktur wird im Übrigen stets innerhalb der Brillouin Zone aufgetragen, und zwar entlang eines speziellen Weges. Letzendlich werden auch Gitterschwingungen anhand der Brillouin Zone beschrieben.

## 2.7 Röntgen Diffraction

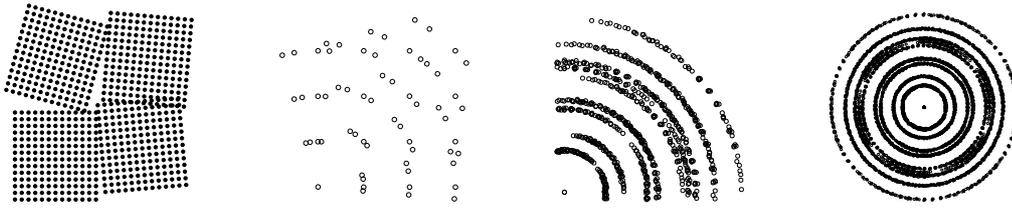
An dieser Stelle soll weniger auf die Methoden eingegangen werden, als das ihre prinzipielle Funktionsweise erläutert werden. Prinzipiell muß die Beugungs-Bedingung erfüllt sein, damit ein Beugungsbild entstehen kann.

Die **Laue Methode** arbeitet mit weißem Röntgenlicht. Es werden Einkristalle untersucht. Abhängig von der Orientierung des Kristalls zum Primärstrahl entsteht ein Beugungsbild für alle möglichen Scharen von Netzebenen. Dies ist möglich, da in weißem Röntgenlicht jede beliebige Wellenlänge enthalten ist und hierdurch jeder beliebige Netzebenenabstand die Röntgenstrahlen mit der passenden Wellenlänge zur Interferenz bringen kann.

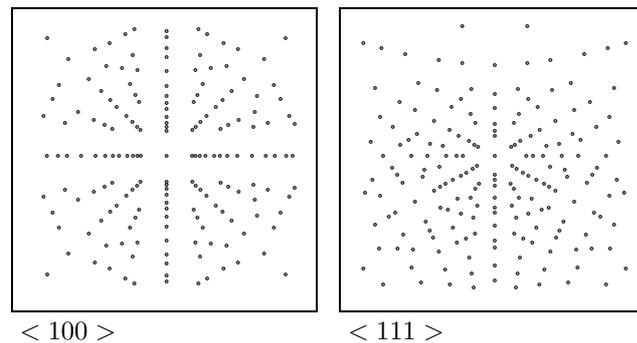


Hier gezeigt ist ein Kristall, der leicht gedreht ist. Sein Abbild, das reziproke Gitter ist in die selbe Richtung gedreht, wie der Kristall im Ortsraum.

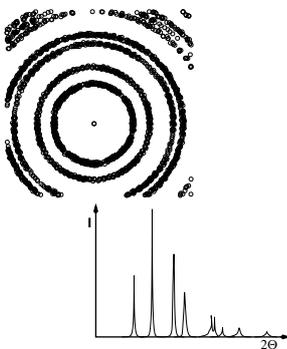
Kommen nun mehrere Kristalle in den Strahl, so überlagern sich die reziproken Gitter im Ursprung. Da jedes Abbild der Rotation des dazugehörigen Kristalls folgt, erscheinen die verschiedenen reziproken Gitter um ihren Ursprung gegeneinander verdreht. Werden beliebig viele Kristalle in den Strahl gebracht verschmieren die Punkte der reziproken Gitter zu Kreisbahnen.



In den mittleren Darstellungen des reziproken Gitters sind jeweils nur Ausschnitte des Gitters gezeigt. Das rechte Bild zeigt den Ursprung des reziproken Gitters in der Bildmitte. Es ist leicht einzusehen, daß die Laue Methode für Orientierungsbestimmungen an Einkristallen und nicht an Polykristallen eingesetzt wird. Laue Bilder eines kubischen Systems sind hier beispielhaft für die  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$  Orientierungen gezeigt.



Für polykristalline Proben ist diese Methode unzweckmäßig und es kommen **Pulver Diffraktions Methoden** zum Einsatz. Pulverdiffraktometer messen nicht in zwei Dimensionen, sondern nur in einer. Dies entspricht einem Intensitätsprofil entlang des Radius eines der gezeigten Bilder.



Für Pulverproben werden monochromatische Röntgenstrahlen verwendet. Durch die große Anzahl und der statistischen Verteilung der Kristallite wird jede beliebige Orientierung durch den Strahl erfaßt. Ist die Bragg-Bedingung erfüllt, so kommt es unter den vorgegebenen Winkeln zur Beugung. Prinzipiell ist es auch möglich Einkristalle mit monochromatischen Röntgenstrahlen zu untersuchen. Hierbei muß für jede einzelne Schar von Netzebenen der gesamte Winkelbereich abgerastert werden, um zu testen, ob die Reflexionsbedingung für diese Anordnung erfüllt werden kann. Hieraus sieht man schon, daß dies ein sehr aufwendiges Verfahren ist und in der Praxis nur für ganz besondere Aufgaben eingesetzt wird (Vierkreisdiffraktometrie).

### 2.7.1 Die ITs (International Tables for Crystallography)

Die ITs bestehen aus mehreren Bänden (Volume A: Space-Group Symmetry; Volume B: Reciprocal Space; Volume C: Mathematical, Physical and Chemical Tables; Volume D: Physical properties of crystals Volume E: Subperiodic Groups; Volume F: Crystallography of Biological Macromolecules; Volume G: Definition and exchange of crystallographic data). Der Zweck dieser Reihe ist es Daten, die zur Anwendungen der kristallographischen Methoden in allen Wissenschaften relevant sind, zu sammeln und kritisch auszuwerten. Dabei wird besonders Wert auf die Struktur und Eigenschaften der Materialien gelegt. Die einzelnen Bände bestehen aus Tabellen, die von praktischen Erklärungen und Beispielen begleitet werden. Für die Metallphysik in der Anwendung ist der Teil A über die Theorie und praktische Anwendungen der Raumgruppen der wohl wichtigste. Im nun Folgenden (siehe Doppelseite 50,51) sind die Seiten aus den ITs zur Raumgruppe  $I4/mmm$  aufgeführt. An diesem Beispiel soll die Struktur der ITs verdeutlicht werden.

Die Kopfzeile  $\textcircled{A}$  enthält die verschiedenen Symbolde, die die Raumgruppe klassifizieren. Auf der ersten Seite für jede Raumgruppe stehen in zwei Zeilen von links nach rechts: Das kurze Hermann-Mauguin

Symbol, das Schönflies Symbol, die Kristallklasse (Punktgruppe) und das Kristallsystem in der ersten Zeile und in der zweiten die Nummer der Raumgruppe, das vollständige Hermann-Mauguin Symbol und die Patterson Symmetrie. In der Kopfzeile der folgenden Seite(n) stehen die Nummer der Raumgruppe und das kurze Hermann-Mauguin Symbol, sowie ein Hinweis, daß es sich um eine Fortsetzung handelt. Im folgenden Abschnitt ③ sind die Diagramme der Raumgruppen abgebildet. Sie beinhalten eine oder mehrere Projektionen der Symmetrieelemente, sowie eine Abbildung (rechts unten) eines Satzes von äquivalenten Punkten in einer allgemeinen Lage. Die Anzahl und Art der Abbildungen ist vom Kristallsystem abhängig.

Die nun folgenden Punkte beschreiben die am Ursprung existierenden Symmetrieelemente, sowie die Lage des Ursprungs in Hinblick auf diese Symmetrieelemente ④. Weiterhin wird die asymmetrische Einheit ⑤ angegeben. Schließlich werden die Symmetrie-Operationen ⑥ benannt. Jeder Punkt in einer allgemeinen Lage wird durch diese Operationen erzeugt. Das Symbol beschreibt die Art der Symmetrie-Operation, also ihre Gleit-, oder Schraubenkomponente (in Klammern) sowie die Lage und Orientierung des betreffenden Symmetrie-Elements.

Ein Satz von Erzeugern für diese Raumgruppe ⑦ ist ebenfalls angegeben. Dieser wird in Form von Translationen und der Nummer der Position der allgemeinen Koordinaten angegeben. Die Erzeuger bestimmen die Koordinaten der allgemeinen Lage, sowie deren Symmetrie Operationen.

⑧ - der wohl wichtigste Abschnitt: Die Positionen

Die allgemeine Wyckoff Lage ist in der obersten Zeile angegeben, gefolgt von verschiedenen speziellen Wyckoff Lagen, die eine reduzierte Multiplizität aufweisen. Die Multiplizität einer Lage steht zuerst in jeder Zeile und gibt an, wie oft ein Atom auf der jeweiligen Position in einer Einheitszelle vorhanden ist. Mit abnehmender Multiplizität steigt die Symmetrie der Lage an. Für jede allgemeine und spezielle Lage wird angegeben: Multiplizität, Wyckhoff letter, die Symmetrie der Lage, sowie dazugehörige Koordinaten-Triplets. Schließlich sind in der rechten Tabelle spezielle Kriterien für Röntgen Reflexe angegeben.

Für jede Raumgruppe sind drei senkrechte Projektionen entlang von Symmetrie Richtungen angegeben ⑨. Hierbei wird die Projektionsrichtung, die Ebene der Projektion, sowie die Axen und der Ursprung der projizierten Zelle angegeben.

Die Maximalen nicht-isomorphen Untergruppen ⑩ enthalten translationsgleiche (I) Untergruppen, klassengleiche Untergruppen, die durch eine 'Entzentrierung' der Einheitszelle entstehen (IIa), sowie klassengleiche Untergruppen, die durch eine Vergrößerung der Einheitszelle entstehen (IIb).

Die Maximal isomorphen Untergruppen mit kleinstem Index ⑪ sind ebenfalls klassengleiche Untergruppen des gleichen Typs.

Schließlich werden noch die Minimal nicht-isomorphen Übergruppen angegeben. Diese Liste zeigt die Relationen umgekehrt, wie die der Untergruppen, wie zuvor beschrieben.

## Rechenprogramme

Für die Röntgen-Feinstrukturanalyse ist die Kenntniss der Lagen der Atome in der Kristallstruktur nötig. Um zum Beispiel auch Phasenreinheiten mittels Röntgen bestimmen zu können ist es wichtig eine Struktur genau zu kennen und berechnen zu können. Für beide Fälle hat sich die Rietveld Analyse etabliert. Hierfür stehen eine Reihe von Programmen zur Verfügung:

### Rietveld-Programme

FullProf <http://www-llb.cea.fr/fullweb/fp2k/fp2k.htm>

Gsas <http://www.ncnr.nist.gov/programs/crystallography/software/gsas.html>

### Struktur-Visualisierungs-Programme

PowderCell [http://ccp14.minerals.csiro.au/ccp/web-mirrors/powdcell/a\\_v/v\\_1/powder/e\\_cell.html](http://ccp14.minerals.csiro.au/ccp/web-mirrors/powdcell/a_v/v_1/powder/e_cell.html)

## ZUM NACHDENKEN:

- Die Struktur von  $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$  wird wie folgt besetzt: Ho: 2a, Ni: 4d, B: 4e und C: 2b.
- Wie viele Formeleinheiten sind in der Elementarzelle?
- Erstelle ein Strukturbild z.B. mit PowderCell

A	$I 4/mmm$	$D_{4h}^{17}$	$4/mmm$	Tetragonal
	No. 139	$I 4/m 2/m 2/m$		Patterson symmetry $I 4/mmm$
B				
C	Origin at centre ( $4/mmm$ )			
D	Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}$ ; $0 \leq y \leq \frac{1}{2}$ ; $0 \leq z \leq \frac{1}{4}$ ; $x \leq y$			
E	<b>Symmetry operations</b>			
	For $(0, 0, 0)^+$ set			
	(1) 1	(2) 2 $0, 0, z$	(3) $4^+$ $0, 0, z$	(4) $4^-$ $0, 0, z$
	(5) 2 $0, y, 0$	(6) 2 $x, 0, 0$	(7) 2 $x, x, 0$	(8) 2 $x, \bar{x}, 0$
	(9) $\bar{1}$ $0, 0, 0$	(10) $m$ $x, y, 0$	(11) $\bar{4}^+$ $0, 0, z; 0, 0, 0$	(12) $\bar{4}^-$ $0, 0, z; 0, 0, 0$
	(13) $m$ $x, 0, z$	(14) $m$ $0, y, z$	(15) $m$ $x, \bar{x}, z$	(16) $m$ $x, x, z$
	For $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})^+$ set			
	(1) $t$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	(2) 2 $(0, 0, \frac{1}{2})$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z$	(3) $4^+$ $(0, 0, \frac{1}{2})$ $0, \frac{1}{2}, z$	(4) $4^-$ $(0, 0, \frac{1}{2})$ $\frac{1}{2}, 0, z$
	(5) 2 $(0, \frac{1}{2}, 0)$ $\frac{1}{4}, y, \frac{1}{4}$	(6) 2 $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ $x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	(7) 2 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $x, x, \frac{1}{4}$	(8) 2 $x, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$
	(9) $\bar{1}$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	(10) $n$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $x, y, \frac{1}{4}$	(11) $\bar{4}^+$ $\frac{1}{2}, 0, z; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	(12) $\bar{4}^-$ $0, \frac{1}{2}, z; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$
	(13) $n$ $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ $x, \frac{1}{4}, z$	(14) $n$ $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ $\frac{1}{4}, y, z$	(15) $c$ $x + \frac{1}{2}, \bar{x}, z$	(16) $n$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ $x, x, z$
I	<b>Maximal non-isomorphic subgroups (continued)</b>			
	<b>IIa</b> [2] $P 4/mmm$ 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10; 11; 12; 13; 14; 15; 16			
	[2] $P 4/nnc$ 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; (9; 10; 11; 12; 13; 14; 15; 16) + $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$			
	[2] $P 4/mnc$ 1; 2; 3; 4; 9; 10; 11; 12; (5; 6; 7; 8; 13; 14; 15; 16) + $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$			
	[2] $P 4/nmm$ 1; 2; 3; 4; 13; 14; 15; 16; (5; 6; 7; 8; 9; 10; 11; 12) + $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$			
	[2] $P 4_2/nmm$ 1; 2; 5; 6; 11; 12; 15; 16; (3; 4; 7; 8; 9; 10; 13; 14) + $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$			
	[2] $P 4_2/nmc$ 1; 2; 7; 8; 11; 12; 13; 14; (3; 4; 5; 6; 9; 10; 15; 16) + $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$			
	[2] $P 4_2/mmc$ 1; 2; 5; 6; 9; 10; 13; 14; (3; 4; 7; 8; 11; 12; 15; 16) + $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$			
	[2] $P 4_2/mmm$ 1; 2; 7; 8; 9; 10; 15; 16; (3; 4; 5; 6; 11; 12; 13; 14) + $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$			
	<b>IIb</b> none			
J	<b>Maximal isomorphic subgroups of lowest index</b>			
	<b>IIc</b> [3] $I 4/mmm(c'=3c)$ ; [9] $I 4/mmm(a'=3a, b'=3b)$			
K	<b>Minimal non-isomorphic supergroups</b>			
	<b>I</b> [3] $Fm\bar{3}m$ ; [3] $Im\bar{3}m$			
	<b>II</b> [2] $C 4/mmm(2c'=c)(P 4/mmm)$			

CONTINUED		No.139		$I4/mmm$		(A)
<b>Generators selected</b>		(1); $t(1, 0, 0)$ , $t(0, 1, 0)$ ; $t(0, 0, 1)$ ; $t(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ; (2); (3); (5); (9)				(F)
<b>Positions</b>		Coordinates		Reflection condition		(G)
Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry		(0, 0, 0)+	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+$	General:		
32 o 1	(1) $x, y, z$ (5) $\bar{x}, y, \bar{z}$ (9) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (13) $x, \bar{y}, z$	(2) $\bar{x}, \bar{y}, z$ (6) $x, \bar{y}, \bar{z}$ (10) $x, y, \bar{z}$ (14) $\bar{x}, y, z$	(3) $\bar{y}, x, z$ (7) $y, x, \bar{z}$ (11) $y, \bar{x}, \bar{z}$ (15) $\bar{y}, \bar{x}, z$	(4) $y, \bar{x}, z$ (8) $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$ (12) $\bar{y}, x, \bar{z}$ (16) $y, x, z$	$hkl: h + k + l = 2n$ $hk0: h + k = 2n$ $0kl: k + l = 2n$ $hkl: l = 2n$ $00l: l = 2n$ $h00: h = 2n$	
16 n .m.	$0, y, z$ $0, y, \bar{z}$	$0, \bar{y}, z$ $0, \bar{y}, \bar{z}$	$\bar{y}, 0, z$ $y, 0, \bar{z}$	$y, 0, z$ $\bar{y}, 0, \bar{z}$	Special: as above, plus no extra conditions	
16 m ..m	$x, x, z$ $\bar{x}, x, \bar{z}$	$\bar{x}, \bar{x}, z$ $x, \bar{x}, \bar{z}$	$\bar{x}, x, z$ $x, x, \bar{z}$	$x, \bar{x}, z$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$	no extra conditions	
16 l m..	$x, y, 0$ $\bar{x}, y, 0$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$ $x, \bar{y}, 0$	$\bar{y}, x, 0$ $y, x, 0$	$y, \bar{x}, 0$ $\bar{y}, \bar{x}, 0$	no extra conditions	
16 k ..2	$x, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ $\bar{x}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\bar{x}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ $x, x + \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x, \frac{1}{4}$ $x + \frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{3}{4}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{4}$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, x, \frac{3}{4}$	$hkl: l = 2n$	
8 j m2m .	$x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, x, 0$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, 0$	no extra conditions	
8 i m2m .	$x, 0, 0$	$\bar{x}, 0, 0$	$0, x, 0$	$0, \bar{x}, 0$	no extra conditions	
8 h m . 2m	$x, x, 0$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$	$\bar{x}, x, 0$	$x, \bar{x}, 0$	no extra conditions	
8 g 2mm .	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$	$0, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z}$	$hkl: l = 2n$	
8 f ..2/m	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$	$hkl: k, l = 2n$	
4 e 4mm	$0, 0, z$	$0, 0, \bar{z}$			no extra conditions	
4 d $\bar{4}m2$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$			$hkl: l = 2n$	
4 c mmm .	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, 0$			$hkl: l = 2n$	
2 b 4/mmm	$0, 0, \frac{1}{2}$				no extra conditions	
2 a 4/mmm	$0, 0, 0$				no extra conditions	
<b>Symmetry of special projections</b>		Along [001] $p4mm$		Along [100] $c2mm$		(H)
Along [001] $p4mm$		Along [100] $c2mm$		Along [010] $p2mm$		
$a' = \frac{1}{2}(a - b)$ $b' = \frac{1}{2}(a + b)$		$a' = b$ $b' = c$		$a' = \frac{1}{2}(-a + b)$ $b' = \frac{1}{2}c$		
Origin at $0, 0, z$		Origin at $x, 0, 0$		Origin at $x, x, 0$		
<b>Maximal non-isomorphic subgroups</b>						(I)
I	[2] $I422$	(1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8)+				
	[2] $I4/m11$ ( $I4/m$ )	(1; 2; 3; 4; 9; 10; 11; 12)+				
	[2] $I4mm$	(1; 2; 3; 4; 13; 14; 15; 16)+				
	[2] $I\bar{4}2m$	(1; 2; 5; 6; 11; 12; 15; 16)+				
	[2] $I\bar{4}m2$	(1; 2; 7; 8; 11; 12; 13; 14)+				
	[2] $I2/m2/m1$ ( $Immm$ )	(1; 2; 5; 6; 9; 10; 13; 14)+				
	[2] $I2/m12/m$ ( $Fmmm$ )	(1; 2; 7; 8; 9; 10; 15; 16)+				
(Continued on preceding page)						

## 2.7.2 Experimentelle Röntgendiffraktion

Mittels einer Meßanordnung in Bragg-Brentano-Geometrie, in der die Bragg-Reflexe unter doppelten Beugungswinkel  $2\Theta$  beobachtet werden, kann die Kristallstruktur einer polikristallinen Probe bestimmt werden. Die an den Netzebenen gebeugten Strahlen ergeben einen Kegelmantel, dessen Öffnungswinkel dem Abstand der betreffenden Netzebenen entspricht. Hierdurch ist eine Rekonstruktion der Kristallstruktur möglich. Ist diese bekannt, so kann im Fall kubischer Materialien die Gitterkonstante nach Gleichung 2.16 berechnet werden.

$$\sin^2 \Theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2) \quad (2.16)$$

Hierin ist  $\Theta$  der Winkel, unter dem die Reflexe erscheinen,  $a$  die Gitterkonstante,  $\lambda$  die Wellenlänge der eingestrahlten Röntgenstrahlung und  $hkl$  die Millerschen Indices.

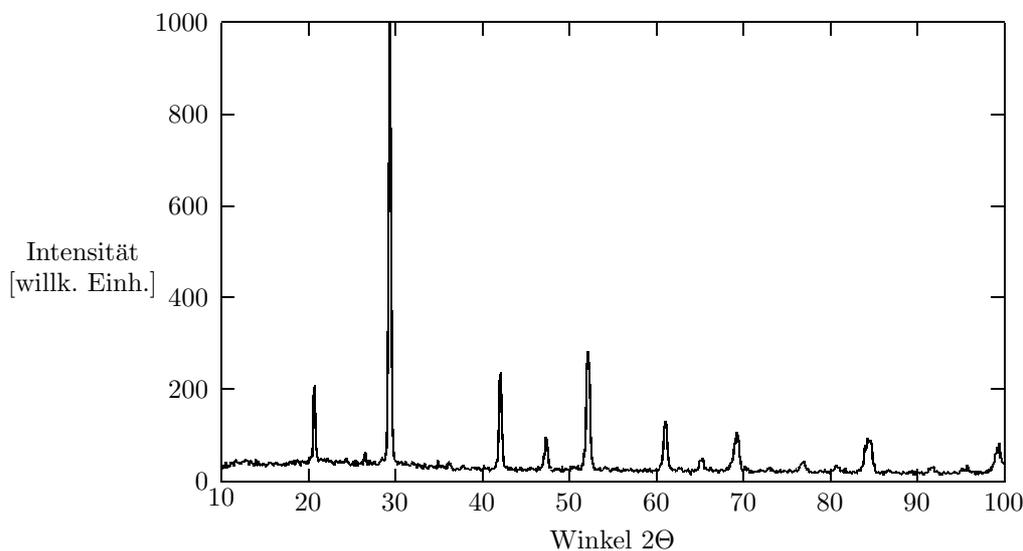


Abbildung 2.17: Diffraktogramm einer  $\text{Ba}_x\text{K}_{1-x}\text{BiO}_3$  Pulverprobe, gemessen mit  $\text{Cu}_{\text{K}\alpha}$ ,  $\lambda = 0,15406 \text{ nm}$ .

### ZUM NACHDENKEN:

- Wie groß ist die Gitterkonstante der  $\text{Ba}_x\text{K}_{1-x}\text{BiO}_3$  Pulverprobe (s. Abb. 2.17 und Tab. 2.3)?

Die Reflexlagen und -Indizierungen dieses Diffraktogramms sind in Tabelle 2.3 angeführt.  $\text{Ba}_x\text{K}_{1-x}\text{BiO}_3$  besitzt eine kubische Perovskitstruktur (Raumgruppe  $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ ; 221).

(1 0 0)	20,67	(2 2 0)	60,98	(3 2 1)	84,32
(1 1 0)	29,39	(2 2 1), (3 0 0)	65,12	(4 0 0)	91,70
(2 0 0)	42,05	(3 1 0)	69,12	(4 1 0)	95,40
(2 1 0)	47,30	(2 2 2)	76,84	(3 3 0), (4 1 1)	99,12
(2 1 1)	52,13	(3 2 0)	80,60		

Tabelle 2.3: Reflex-Indizierung und -Lage der Röntgenreflexe einer  $\text{Ba}_x\text{K}_{1-x}\text{BiO}_3$  Pulverprobe.

## 2.8 Aperiodische Ordnung

Die Bravais Gitter können nur 2, 3, 4 oder 6 zählige Symmetrieachsen haben. 1982 wurde die Klasse der **Quasikristalle** entdeckt (Shechtman), die unter anderen eine fünfzählige Symmetrie hat. Seither stellen die Quasikristalle ein verwirrendes Puzzlespiel dar: Warum bilden Atome ein komplexes quasiperiodisches Muster anstelle einer regulären und sich wiederholenden Kristallanordnung?

Obwohl es keine Kristallstruktur mit periodisch wiederkehrender Ordnung gibt, wird in Röntgen- und Elektronenbeugungsexperimenten eine langreichweitige Ordnung nachgewiesen, die die Grundlage für ein Beugungsmuster ist. Hierbei handelt es sich offensichtlich um eine langreichweitige aperiodische Ordnung. Mit dem sogenannten Penrose Muster gelingt es eine Fläche mit zwei Clustern zu bedecken, ohne daß sich die Cluster überlappen, oder Lücken zurück lassen.

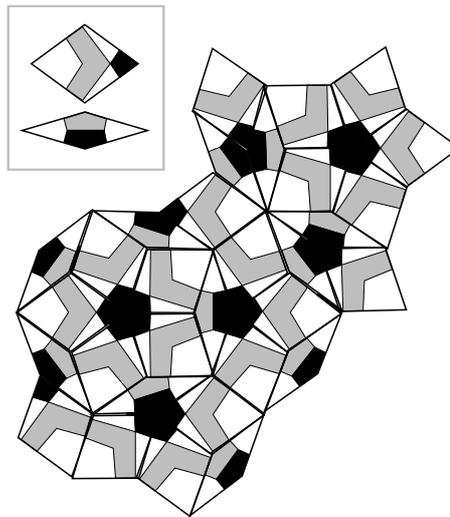
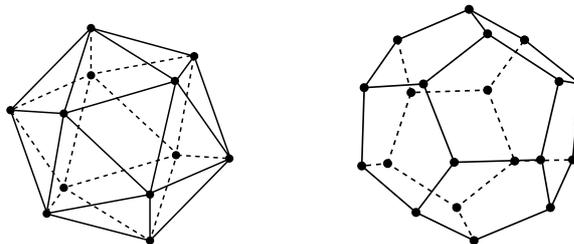


Abbildung 2.18: Zweidimensionales Penrose Muster mit fünf-zähligen Symmetrieelementen.

Darüberhinaus gibt es Strukturen, die in einer Ebene aperiodisch geordnet sind und in der dritten Dimension eine periodische Ordnung aufweisen. Auch im Dreidimensionalen gelingt es ein Volumen mit zwei unterschiedlichen Clustern lückenlos zu füllen, sodaß in allen Raumrichtungen eine aperiodische Ordnung entsteht. Die wohl bekanntesten Strukturen sind der Ikosaeder (links) und der Dodekaeder (rechts)



Einige Eigenschaften der Quasikristalle:

- Im Allgemeinen schlechte elektrische und thermische Leitfähigkeit (obwohl nur aus Metallen aufgebaut).
- Hart und spröde
- Geringe Reibung

Mit der Entdeckung der Quasikristalle ist eines der Dogmen der Festkörperphysik gefallen. Hierdurch ist ersichtlich, daß selbst die relativ alte Festkörperphysik keine abgeschlossene Naturwissenschaft ist.

