

# Vorlesung 2

## Chemische Bindungen und ideale Kristallstrukturen

# Kapitel 1

## Aufbau von Atomen und Festkörpern

- 1.1 Atommodell
- 1.2 Periodensystem der Elemente
- 1.3 Chemische Bindungen
- 1.4 Ideale Kristalle
- 1.5 Kristallfehler und reale Festkörper
- 1.6 Exkurs in die Gibbs'sche Thermodynamik
- 1.7 Thermische und mechanische Aspekte

# 1.3 Chemische Bindungen

## Bindungsarten der Festkörper

Bildung von Verbindungen durch Wechselwirkungen der äußeren Atomorbitale (z.B. Elektronenabgabe und -aufnahme, Überlappung der Elektronenwolken)

### Idealtypen (Grenzfälle)

- ionische Bindung (heteropolare, ungerichtete Bindung)
- kovalente Bindung (homöopolare, gerichtete Bindung)
- metallische Bindung

### Beispiele

- Kochsalz (NaCl)
- Silizium (Si)
- Kupfer (Cu)

Ursache der Bildung von Verbindungen sind elektrostatische Kräfte zwischen den Atomen.  
⇒ Gleichgewicht zwischen elektrostatischer Anziehung und Abstoßung

# 1. Die ionische Bindung

# 1.3 Chemische Bindungen

## Wechselwirkung zwischen einzelnen Atomen

### Kräfte und Energien

Anziehung  $F_{an} \sim \frac{1}{r^2}$  z.B. zwischen pos. und neg. Ionen

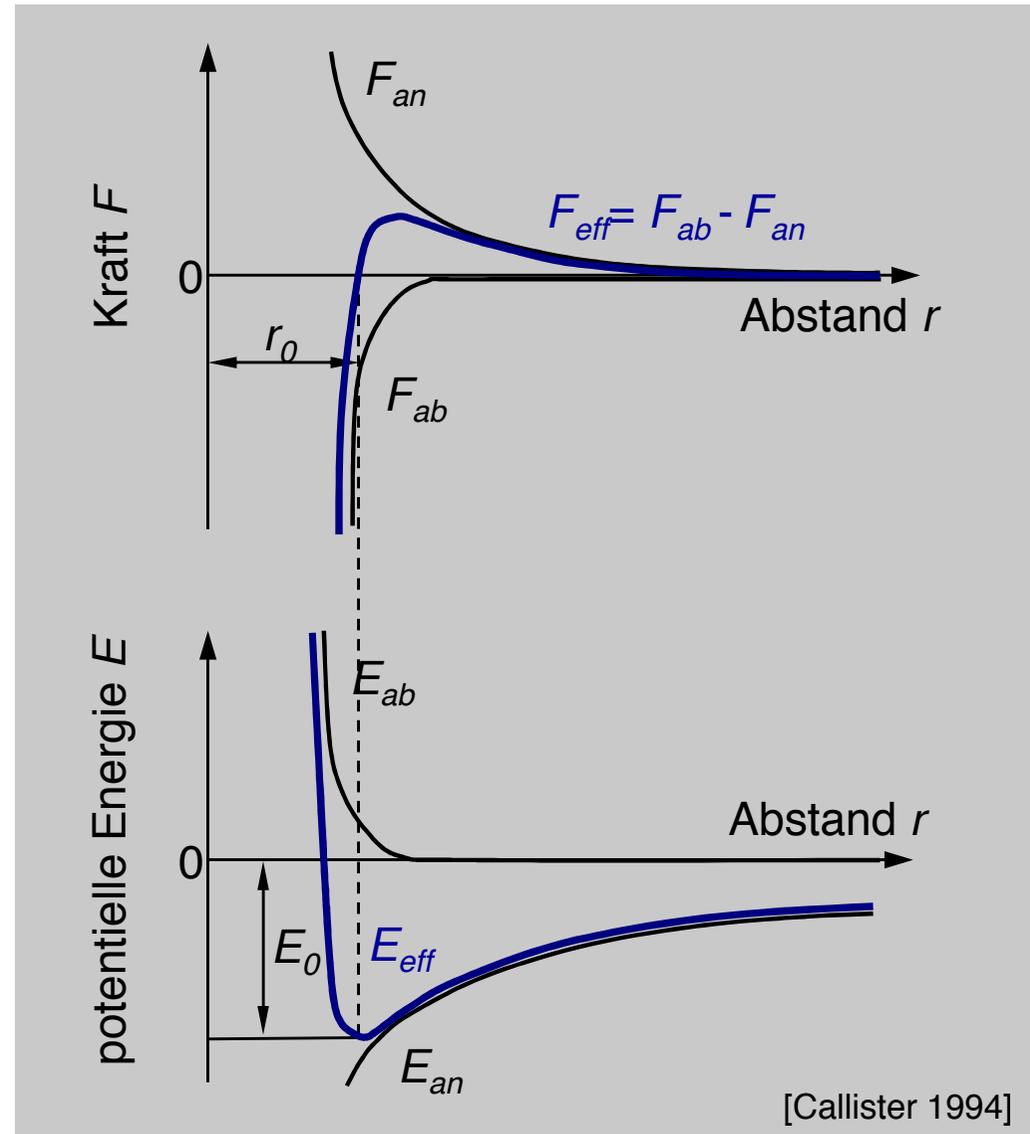
Abstoßung  $F_{ab} \sim \frac{1}{r^{9...12}}$  z.B. zwischen den inneren, vollständig gefüllten Elektronenschalen

frei werdende Energie

zu zuführende Energie  $E_{ab} = \int_{\infty}^r F_{ab} dr$

Energiebilanz  $E_{eff} = \int_{\infty}^r F_{eff} dr = E_{an} + E_{ab}$

Gleichgewichtsabstand  $r_0$  bei resultierende Bindungsenergie



# 1.3 Chemische Bindungen

## Ionische Bindung am Beispiel von Natriumchlorid (1)

### Chlor (Cl)

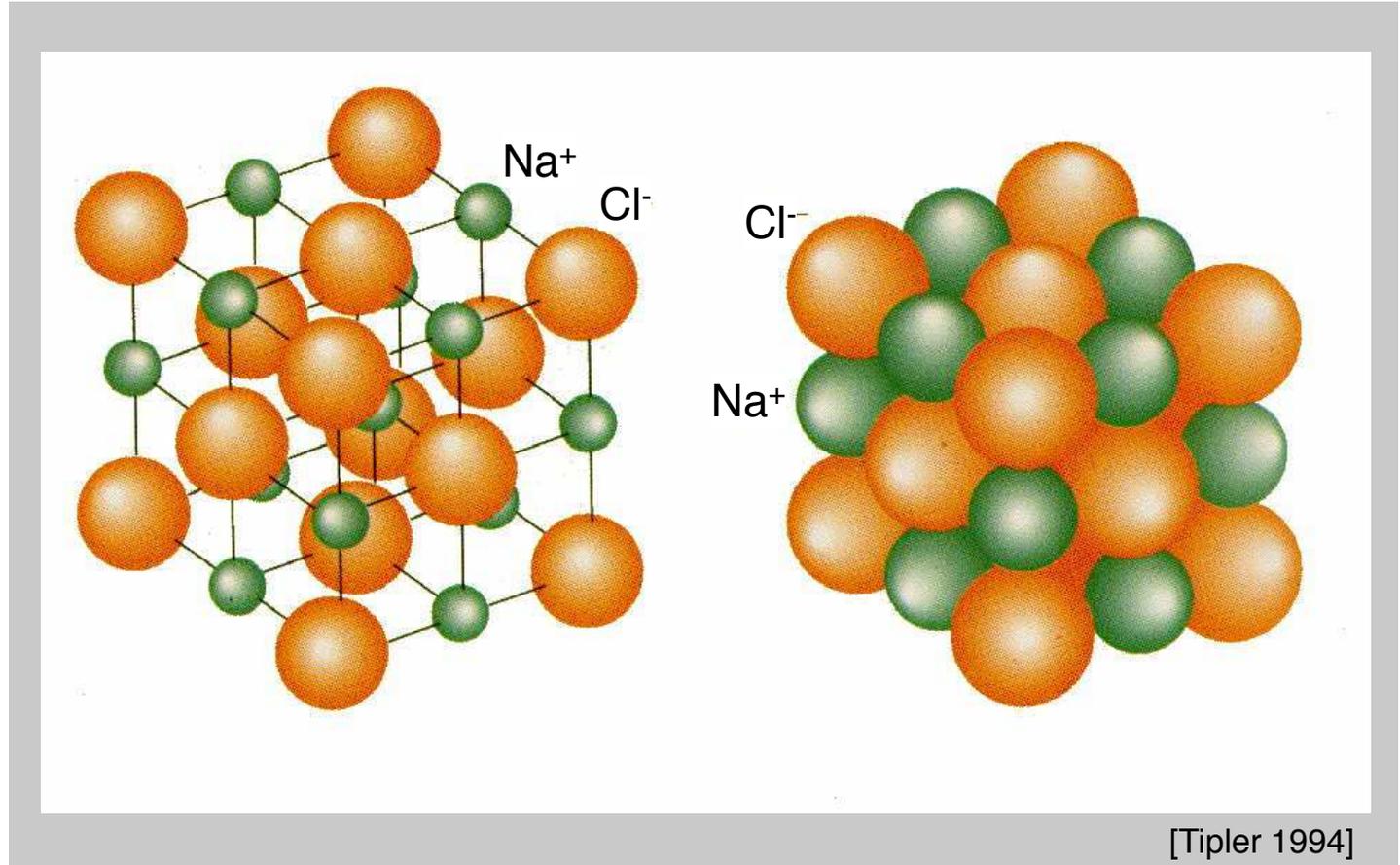
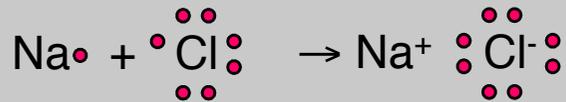
hohe Elektronenaffinität

Cl<sup>-</sup> ist ein Anion

### Natrium (Na)

niedrige Ionisierungsenergie

Na<sup>+</sup> ist ein Kation



Eigenschaften: nicht plastisch verformbar, gute Isolatoren

# 1.3 Chemische Bindungen

## Ionische Bindung am Beispiel von Natriumchlorid (2)

### Vereinfachte Darstellung der Bildung von NaCl

Elektronenabgabe verbraucht Energie  
(Ionisierungsenergie des Natrium-  
Atoms)



Elektronenaufnahme setzt Energie frei  
(Elektronenaffinität des Chlor-Atoms)



Kondensation gasförmiger Ionen in ein  
Kristallgitter setzt Energie frei



Energiegewinn der Reaktion: 6,62 eV

# 1.3 Chemische Bindungen

## Oxidationszahlen bzw. Wertigkeiten der Elemente

Gruppen

Perioden

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 1,008 <b>H</b> 1 (-1)																	2 4,003 <b>He</b>
2	3 6,941 <b>Li</b> 1	4 9,012 <b>Be</b> 2											5 10,81 <b>B</b> 3	6 12,01 <b>C</b> -4,4 (2)	7 14,01 <b>N</b> -3 (2,3,4,5)	8 16,00 <b>O</b> -2 (-1)	9 19,00 <b>F</b> -1	10 20,18 <b>Ne</b>
3	11 22,99 <b>Na</b> 1	12 24,31 <b>Mg</b> 2											13 26,98 <b>Al</b> 3 3	14 28,09 <b>Si</b> 4 (-4)	15 30,97 <b>P</b> 5 (-3,3)	16 32,06 <b>S</b> 6 (-2,2,4)	17 35,45 <b>Cl</b> -1 (1,3,5,7)	18 39,95 <b>Ar</b>
4	19 39,10 <b>K</b> 1	20 40,08 <b>Ca</b> 2	21 44,96 <b>Sc</b> 3	22 47,87 <b>Ti</b> 4 3	23 50,94 <b>V</b> 5 (0,2,3,4)	24 52,00 <b>Cr</b> 3 (0,2,6)	25 54,94 <b>Mn</b> 2 (-1,0,3,4,6,7)	26 55,85 <b>Fe</b> 3 (-2,0,2,6)	27 58,93 <b>Co</b> 2 (-1,0,3)	28 58,69 <b>Ni</b> 2 (0,3)	29 63,55 <b>Cu</b> 2 (1)	30 65,41 <b>Zn</b> 2	31 69,72 <b>Ga</b> 3	32 72,64 <b>Ge</b> 4	33 74,92 <b>As</b> 3 (-3,5)	34 78,96 <b>Se</b> 4 (-2,6)	35 79,90 <b>Br</b> -1 (1,3,5,7)	36 83,80 <b>Kr</b> (2)
5	37 85,47 <b>Rb</b> 1	38 87,62 <b>Sr</b> 2	39 88,91 <b>Y</b> 3	40 91,22 <b>Zr</b> 4	41 92,91 <b>Nb</b> 5 (3)	42 95,94 <b>Mo</b> 6 (0,2,3,4,5)	43 (98) <b>Tc</b> 7	44 101,1 <b>Ru</b> 3,4 (-2,0,2,6,8)	45 102,9 <b>Rh</b> 1,3 (0,2,4,5)	46 106,4 <b>Pd</b> 2 (0,4)	47 107,9 <b>Ag</b> 1 (2)	48 112,4 <b>Cd</b> 2	49 114,8 <b>In</b> 3	50 118,7 <b>Sn</b> 2,4	51 121,8 <b>Sb</b> 3 (-3,5)	52 127,6 <b>Te</b> 4 (-2,6)	53 126,9 <b>I</b> -1 (1,5,7)	54 131,3 <b>Xe</b> (2,4,6)
6	55 132,9 <b>Cs</b> 1	56 137,3 <b>Ba</b> 2	57 - 71 <b>La-Lu</b>	72 178,5 <b>Hf</b> 4	73 180,9 <b>Ta</b> 5	74 183,8 <b>W</b> 6 (0,2,3,4,5)	75 186,2 <b>Re</b> 7 (-1,2,4,6)	76 190,2 <b>Os</b> 4 (-2,0,2,3,6,8)	77 192,2 <b>Ir</b> 1,4 (-1,0,2,3,6)	78 195,1 <b>Pt</b> 2,4 (0)	79 197,0 <b>Au</b> 3 (1)	80 200,6 <b>Hg</b> 2 (1)	81 204,4 <b>Tl</b> 1 (3)	82 207,2 <b>Pb</b> 2 (4)	83 209,0 <b>Bi</b> 3 (5)	84 (209) <b>Po</b> 4 (2,6)	85 (210) <b>At</b> -1 (1,3,5,7)	86 (222) <b>Rn</b> (2)
7	87 (223) <b>Fr</b> 1	88 (226) <b>Ra</b> 2	89 - 103 <b>Ac-Lr</b>															

↓ Atomradius nimmt ab

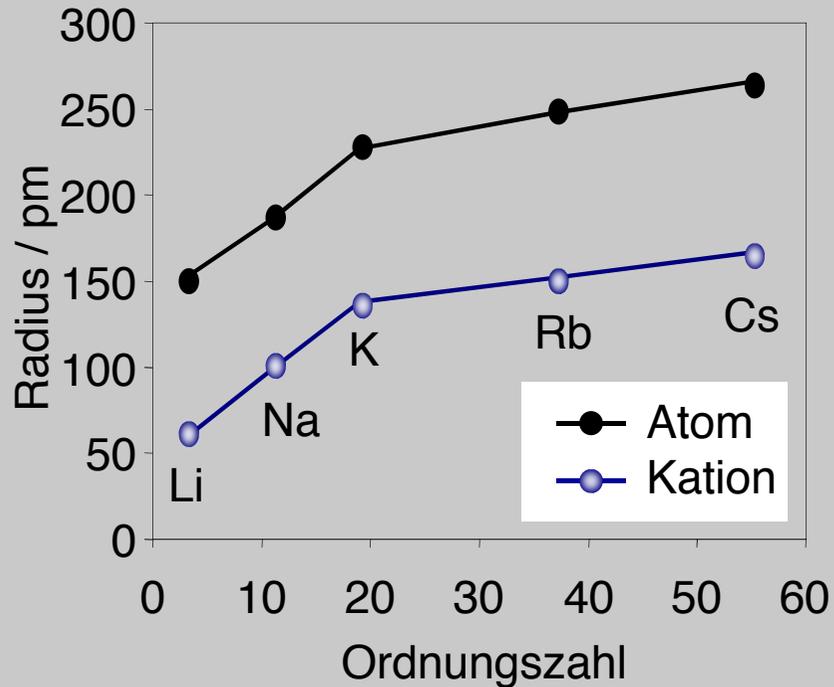
→ Atomradius nimmt zu

<b>Lanthanoide</b>	57 138,9 <b>La</b> 3	58 140,1 <b>Ce</b> 3 (4)	59 140,9 <b>Pr</b> 3 (4)	60 (145) <b>Nd</b> 3	61 (145) <b>Pm</b> 3	62 150,4 <b>Sm</b> 3 (2)	63 152,0 <b>Eu</b> 3 (2)	64 157,3 <b>Gd</b> 3	65 158,9 <b>Tb</b> 3 (4)	66 162,5 <b>Dy</b> 3	67 164,9 <b>Ho</b> 3	68 167,3 <b>Er</b> 3	69 168,9 <b>Tm</b> 3 (2)	70 173,0 <b>Yb</b> 3 (2)	71 175,0 <b>Lu</b> 3
<b>Actinoide</b>	89 (227) <b>Ac</b> 3	90 232,0 <b>Th</b> 4	91 231,0 <b>Pa</b> 5 (4)	92 238,0 <b>U</b> 6 (3,4,5)	93 (237) <b>Np</b> 5 (3,4,6)	94 (244) <b>Pu</b> 4 (3,5,6)	95 (243) <b>Am</b> 3 (4,5,6)	96 (247) <b>Cm</b> 3 (4)	97 (247) <b>Bk</b> 3 (4)	98 (251) <b>Cf</b> 3 (4)	99 (252) <b>Es</b> 3	100 (257) <b>Fm</b> 3	101 (258) <b>Md</b> 3	102 (259) <b>No</b> 2 (3)	103 (262) <b>Lr</b> 3

# 1.3 Chemische Bindungen

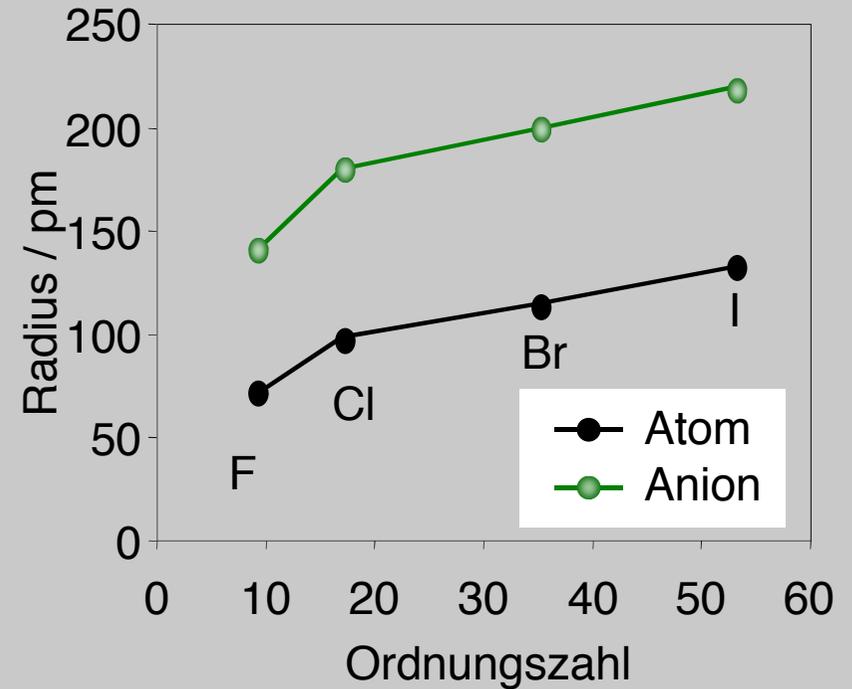
## Radien von Atomen und Ionen

Elemente der 1. Gruppe  
(früher I. Hauptgruppe)



[Mortimer 1973]

Elemente der 17. Gruppe  
(früher VII. Hauptgruppe)



[Mortimer 1973]

# 1.3 Chemische Bindungen

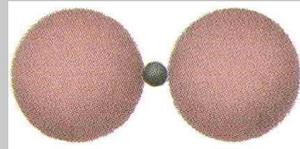
## Koordinationszahl von Verbindungen

Das Radienverhältnis von Kation zu Anion bestimmt die Geometrie (und damit die Koordinationszahl)

Koordinationszahl 2

Radienverhältnis:

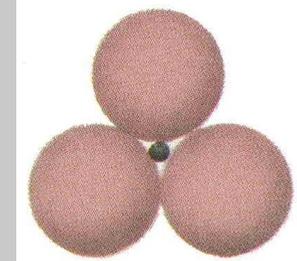
$$r_K/r_A < 0,155$$



Koordinationszahl 3

Radienverhältnis:

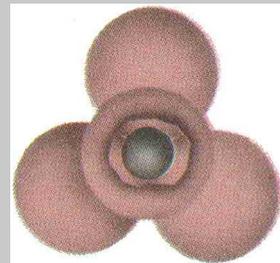
$$0,155 < r_K/r_A < 0,225$$



Koordinationszahl 4

Radienverhältnis:

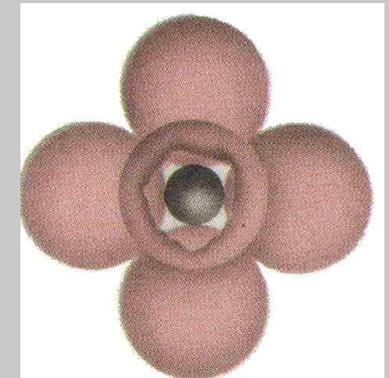
$$0,225 < r_K/r_A < 0,414$$



Koordinationszahl 6

Radienverhältnis:

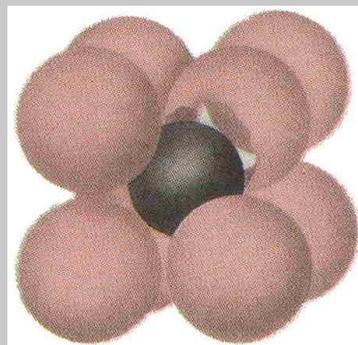
$$0,414 < r_K/r_A < 0,732$$



Koordinationszahl 8

Radienverhältnis:

$$0,732 < r_K/r_A < 1,000$$



Koordinationszahl 12

Radienverhältnis:

$$1,000 < r_K/r_A$$

[Callister 1994]

## 2. Die kovalente Bindung

# 1.3 Chemische Bindungen

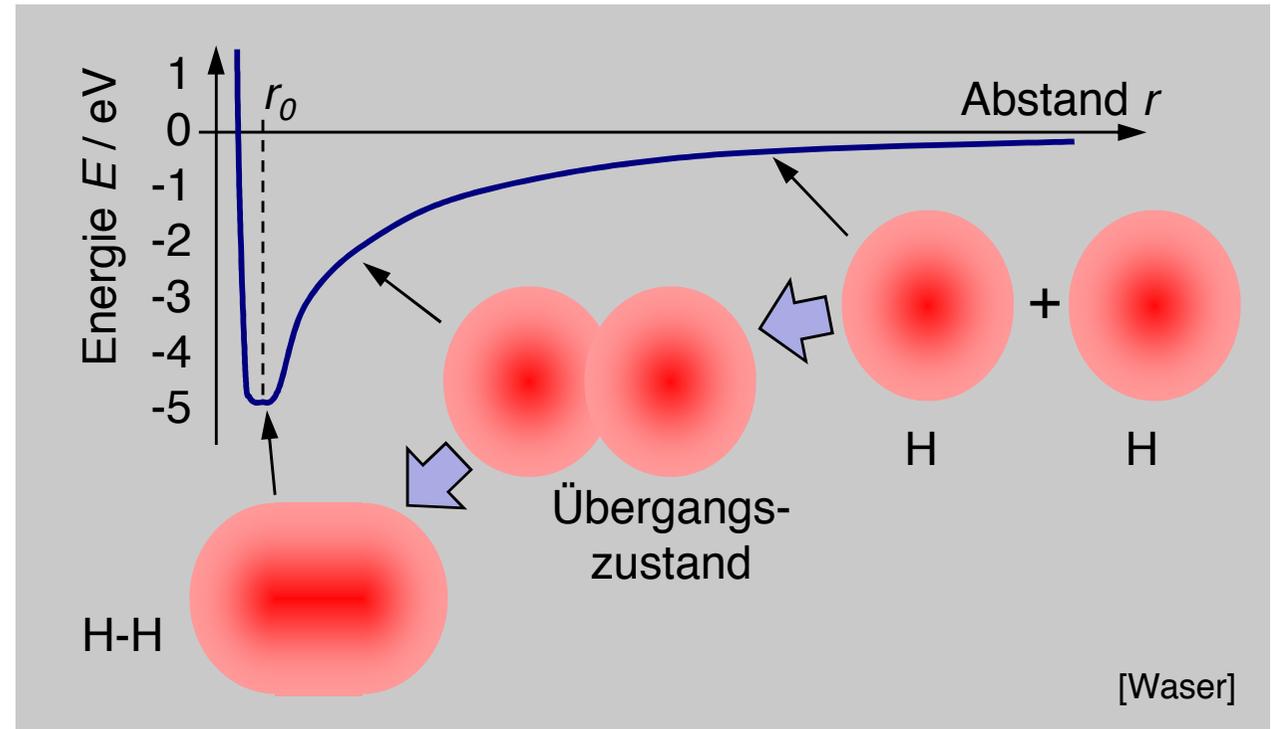
## Kovalente Bindung am Beispiel von Wasserstoff (1)

- Überlappung von (teilbesetzten) Elektronenschalen bzw. Atomorbitalen
- Partnerelektron hilft bei der Erreichung einer komplett besetzten Schale
- Elektronendichte zwischen den (positiven) Atomkernen erhöht

### Beispiel: Wasserstoffmolekül ( $H_2$ )

Gleichgewichtsabstand  
 $r_0 = 0,74 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Bindungsenergie  
 $E_0 = 4,33 \cdot 10^5 \text{ J/mol}$



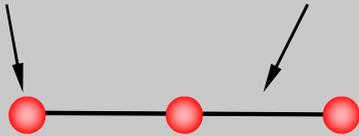


# 1.3 Chemische Bindungen

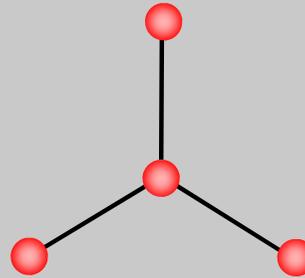
## Typische Hybridisierungsstrukturen kovalenter Bindungen

[Schaumburg 1990]

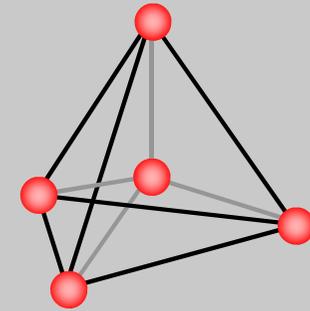
Atomrumpf      Hybrid-Orbital  
"Bindungsarm"



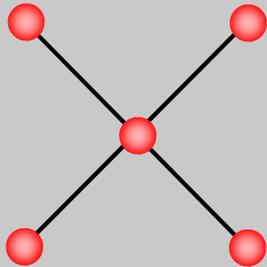
$sp$  linear



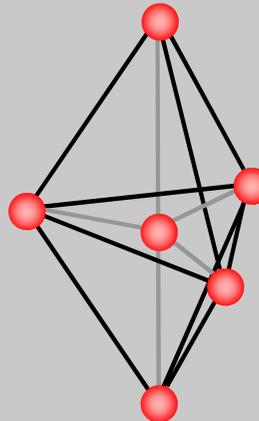
$sp^2$  dreieckig planar



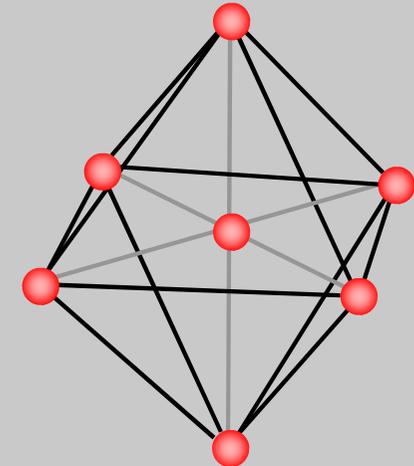
$sp^3$  tetraedrisch



$dsp^2$  quadratisch planar



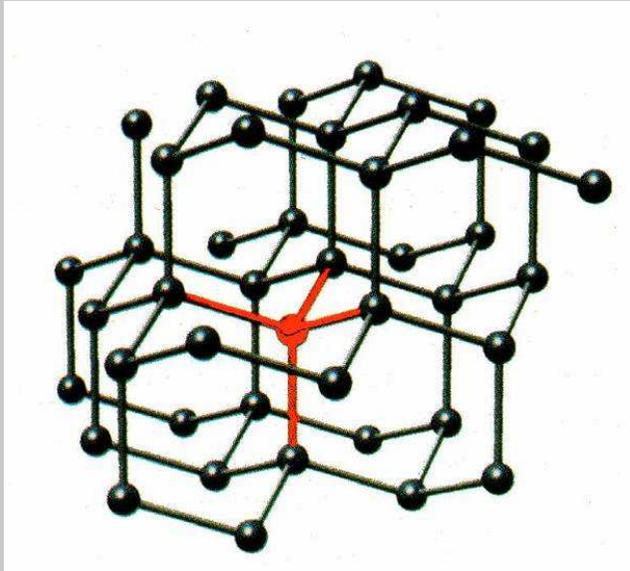
$dsp^3$  trigonal bipyramidal



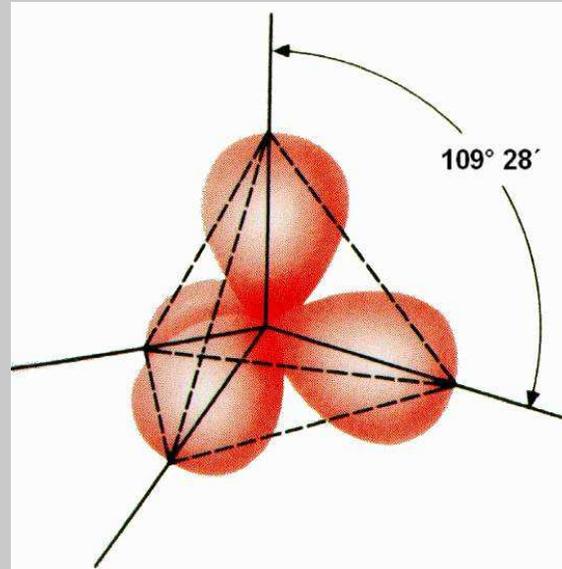
$d^2 sp^3$  oktaedrisch

# 1.3 Chemische Bindungen

## Kohlenstoff in Diamantstruktur

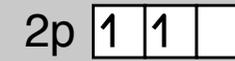


Koordinationszahl: 4



$sp^3$ -Hybridorbitale

Energieniveaus  
der Elektronen  
im Element C



Grund-  
zustand

Energieniveaus  
der Elektronen  
im Diamant



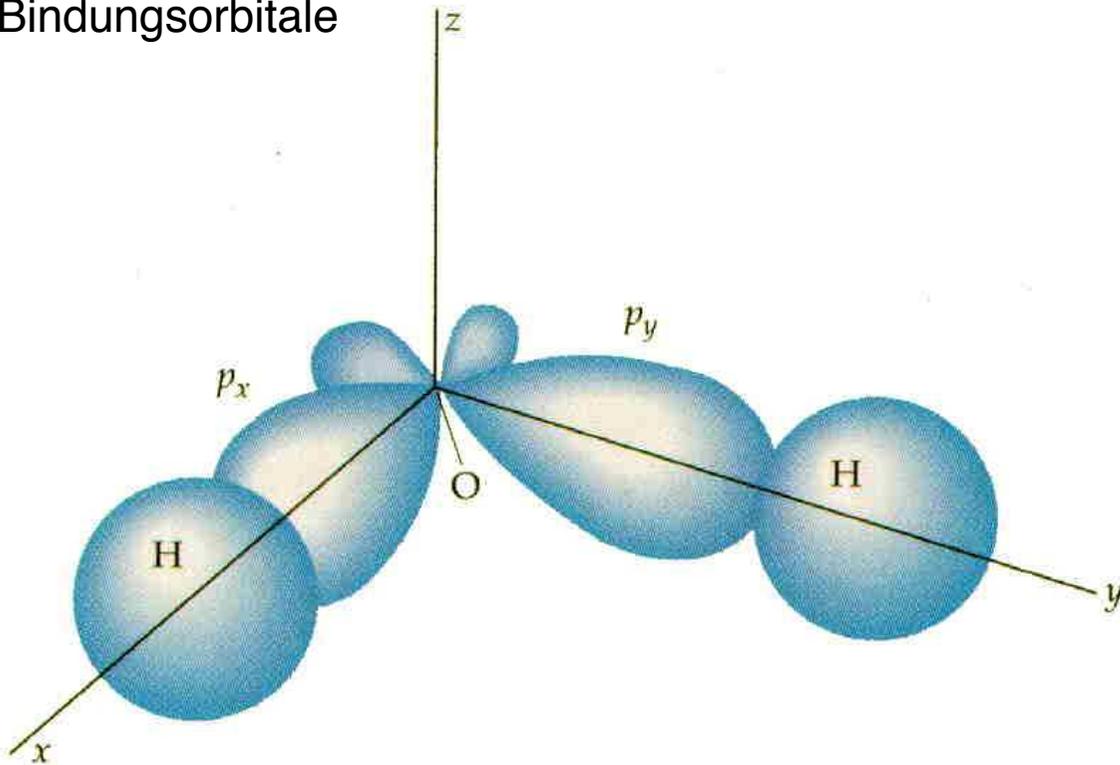
hybridisierter  
Zustand

Diamantstruktur (isomorph: Si, Ge)

[Tipler 1994, Mortimer 1973]

# 1.3 Chemische Bindungen Wasser (H<sub>2</sub>O-Molekül)

Bindungorbitale



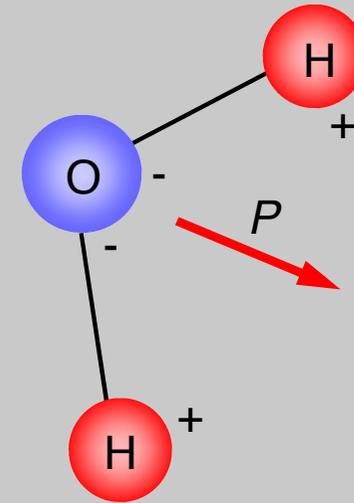
Bindungswinkel: 104,5°

Hybridorbital: sp<sup>3</sup>

px, py - Orbitale des Sauerstoff

s - Orbital des Wasserstoffs

Sauerstoff besitzt eine höhere Elektronenaffinität als Wasserstoff.



Es entsteht ein permanentes Dipolmoment  $P$ .

⇒ Wasser ist ein Dielektrikum (Orientierungspolarisation)

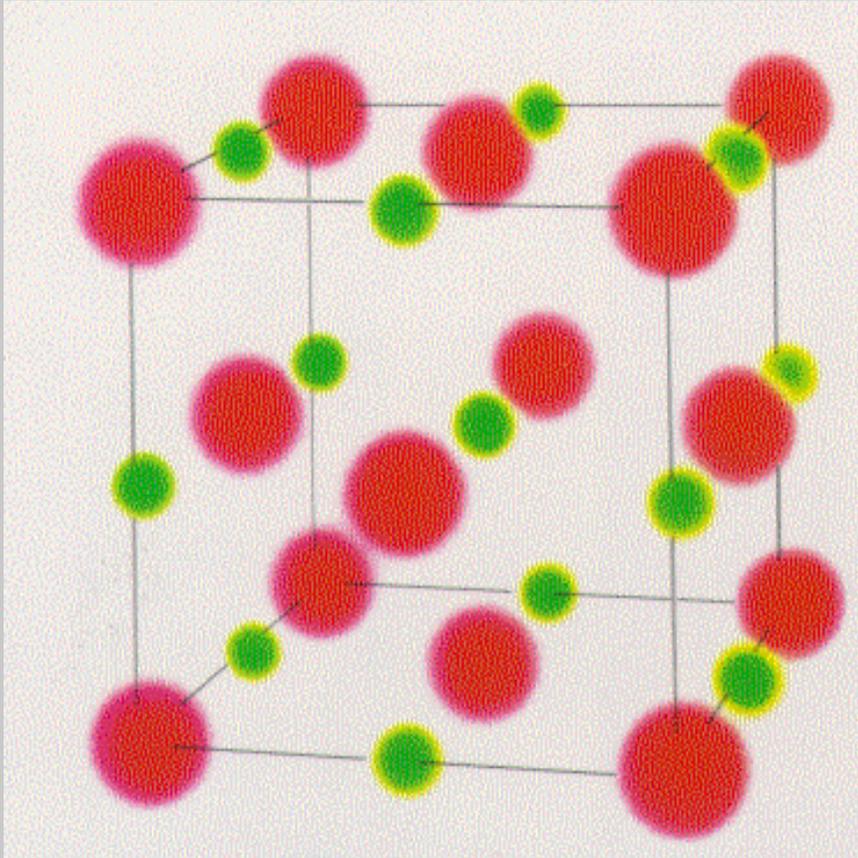
[Tipler 1994]

# Vergleich ionische vs. kovalente Bindung

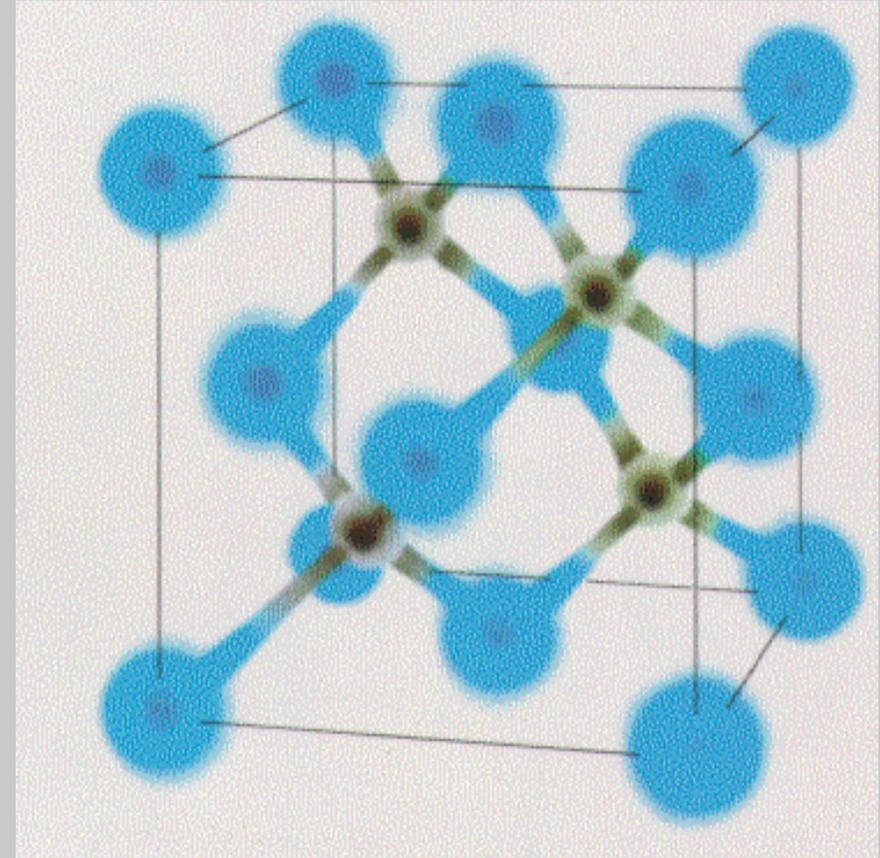
# 1.3 Chemische Bindungen

## Vergleich ionischer/ kovalenter Bindungstyp

ionische Bindung



kovalente Bindung



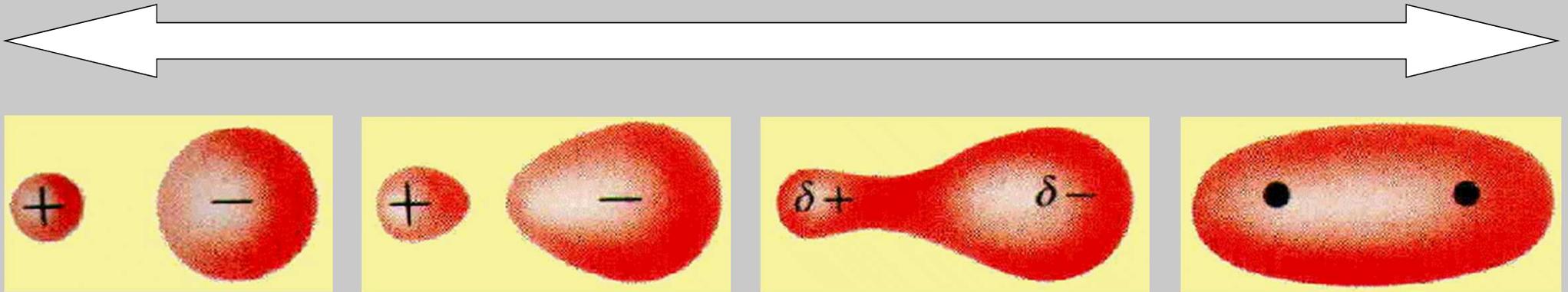
# 1.3 Chemische Bindungen

## Übergang zwischen ionischer und kovalenter Bindung

In der Realität sind nur die wenigsten Verbindungen rein ionisch oder rein kovalent.  
⇒ normalerweise herrschen gemischte Bindungen vor.

Ionische Bindung  
ungerichtet

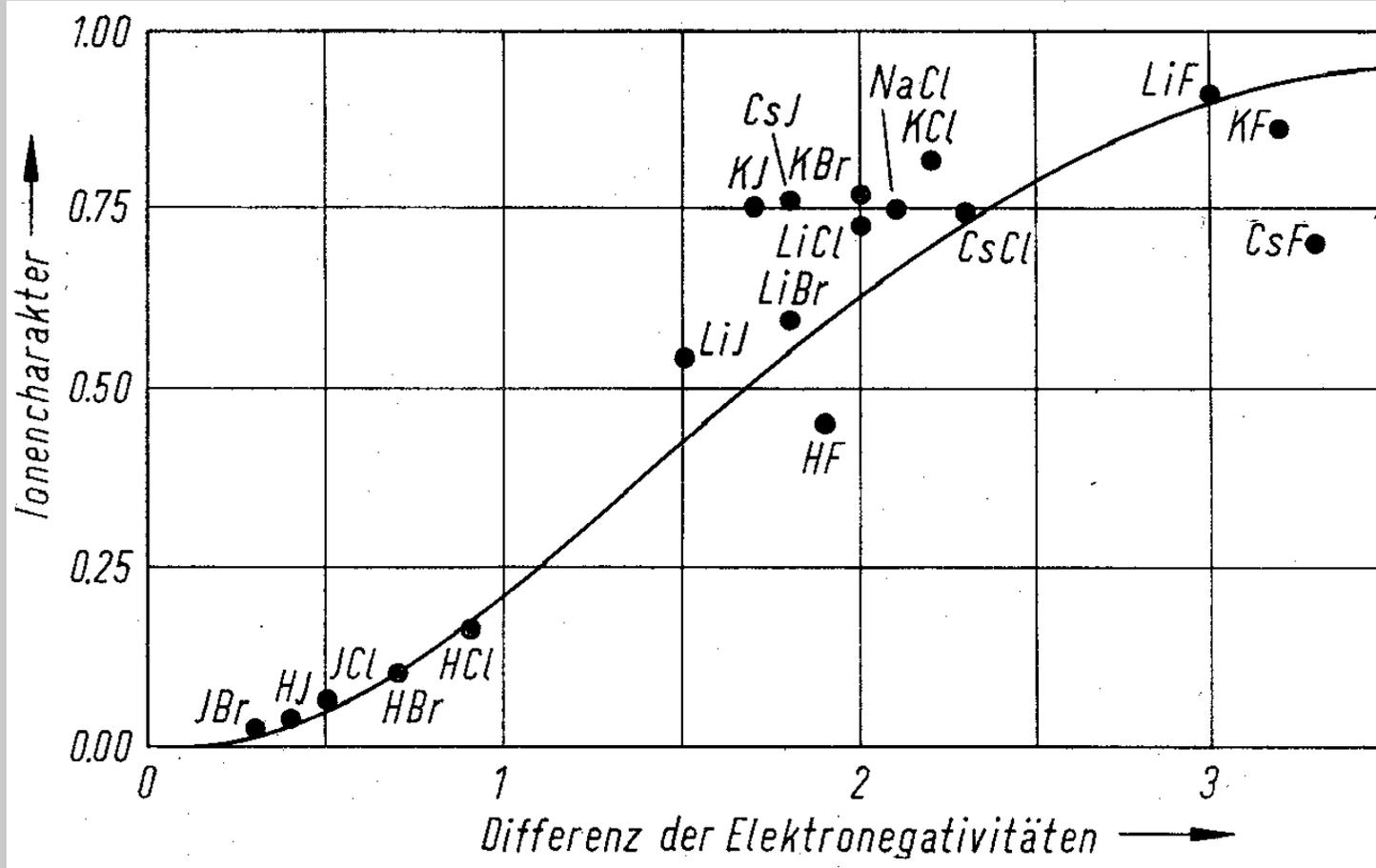
Kovalente Bindung  
gerichtet



[Mortimer 1973]

# 1.3 Chemische Bindungen

## Ionischer Grad einer Bindung



[Pauling 1964]

### Ionencharakter

ionischer Grad einer Verbindung

$$1 - \exp \left[ -\frac{(x_A - x_B)^2}{4} \right]$$

$x_i$ : Elektronegativität des Elements  $i$

# 1.3 Chemische Bindungen

## Ionischer Bindungsanteil bei verschiedenen binären Verbindungen

Kristall	Ionen- charakter	Kristall	Ionen- charakter	Kristall	Ionen- charakter
Si	0,00	InP	0,42	MgO	0,84
SiC	0,18	InAs	0,36	MgS	0,79
Ge	0,00	InSb	0,32	MgSe	0,79
ZnO	0,62	GaAs	0,31	LiF	0,92
ZnS	0,62	GaSb	0,26	NaCl	0,94
ZnSe	0,63			RbF	0,96
ZnTe	0,61	CuCl	0,75	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,63
		CuBr	0,74	SiO <sub>2</sub>	0,51
CdO	0,79			Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	0,30
CdS	0,69	AgCl	0,86		
CdSe	0,70	AgBr	0,85		
CdTe	0,67	AgI	0,77		

vollständig bzw.  
überwiegend  
**ionisch**

vollständig bzw.  
überwiegend  
**kovalent**

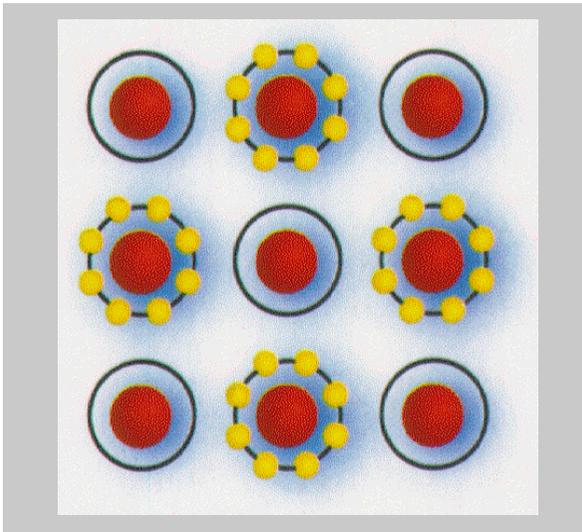
[Schaumburg 1990]

# **3. Sonstige Bindungstypen: Metallisch / Van-der-Waals / Wasserstoffbrücke**

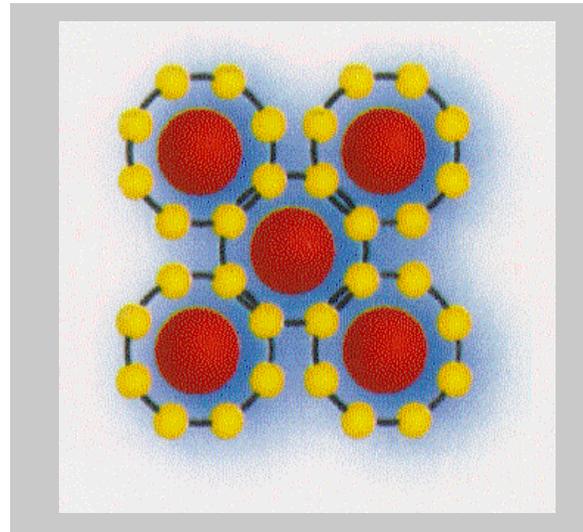
# 1.3 Chemische Bindungen

## Vergleich der ionischen, kovalenten und metallischen Bindung

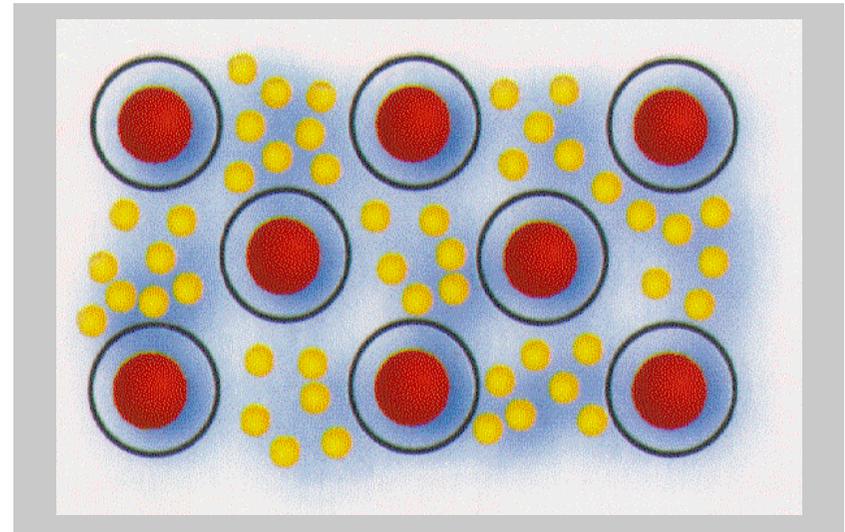
ionisch



kovalent



metallisch



Verbindungen  
der Haupt-  
gruppen-  
elemente:  
1 + 17 : NaCl  
2 + 16 : MgO

Halbleiter:  
GaAs,  
InSb,  
SiC

Moleküle: CH<sub>4</sub>  
Element-  
verbindungen:  
C, Si, Ge

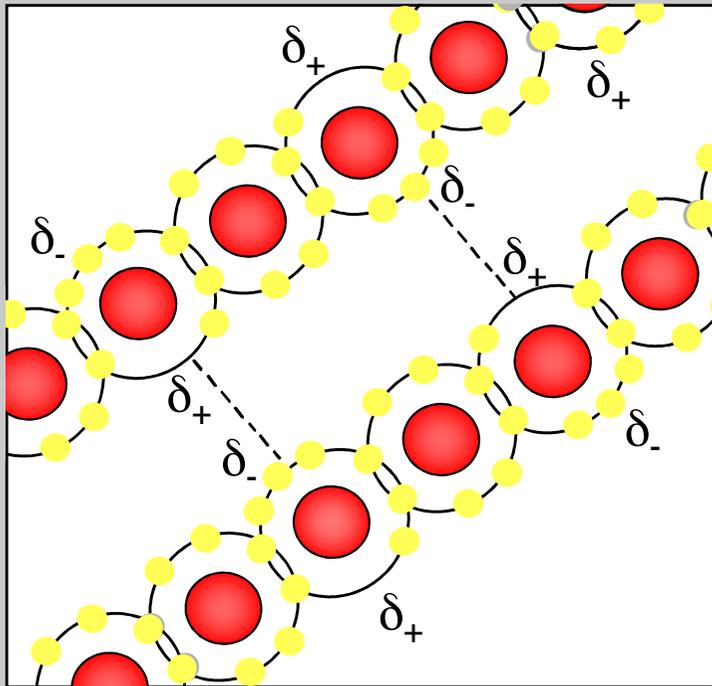
Intermetallische  
Verbindungen

Element-  
verbindungen  
der Metalle

# 1.3 Chemische Bindungen

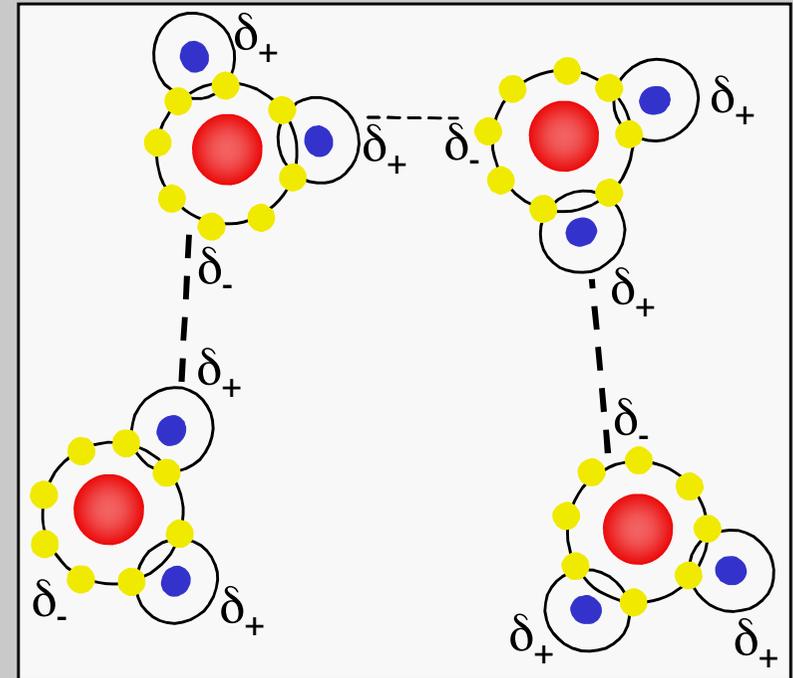
## Exkurs: Van-der-Waals- und Wasserstoffbrückenbindung

### Van-der-Waals-Bindung



Bindung aufgrund Ausbildung momentaner Dipolmomente

### Wasserstoffbrücken-Bindung



Bindung aufgrund der permanenten Dipolmomente

# 1.3 Chemische Bindungen

## Typen kristalliner Feststoffe

Bindung	Teilchen	Elektronen- verteilung	Elektrische Eigenschaften	Typische Bindungsenergie	Beispiele
ionisch	Positive und negative Ionen	Kugelförmig am Ion lokalisiert	Ionenleiter	800 kJ/mol	NaCl
kovalent	Atome	Zwischen 2 Atomen lokalisiert	Isolator	600 kJ/mol	C (Diamant), SiC, Ge, AsIn
metallisch	Positive Ionen Bewegliche Elektronen	Völlig delokalisiert	Sehr guter elektrischer Leiter	100 kJ/mol	Cu, Ag, Pt, Fe
Van-der-Waals	Moleküle			50 kJ/mol	Paraffin

[IWE]

# Kapitel 1

## Aufbau von Atomen und Festkörpern

- 1.1 Atommodell
- 1.2 Periodensystem der Elemente
- 1.3 Chemische Bindungen
- 1.4 Ideale Kristalle
- 1.5 Kristallfehler und reale Festkörper
- 1.6 Exkurs in die Gibbs'sche Thermodynamik
- 1.7 Thermische und mechanische Aspekte

# Exkurs: Grundlagen der Kristallographie

## Merkmale von Kristallen

**Kristall** [zu griech. *Ktystallos* "Eis, Bergkristall"], einheitlich zusammengesetzter Festkörper, dessen Bausteine (Atome, Moleküle, Ionen) zu einem räumlichen Kristallgitter angeordnet sind. Die Bausteine, ihre Anordnung und die Art der Bindung bestimmen das äußere Erscheinungsbild und die Eigenschaften der Kristalle.

### Merkmale von Kristallen:

Symmetrie

Äußere Erscheinungsform

Schönheit



### 3-dimensionale periodische Anordnung der Bausteine

# Grundlagen zur Klassifizierung von Kristallen

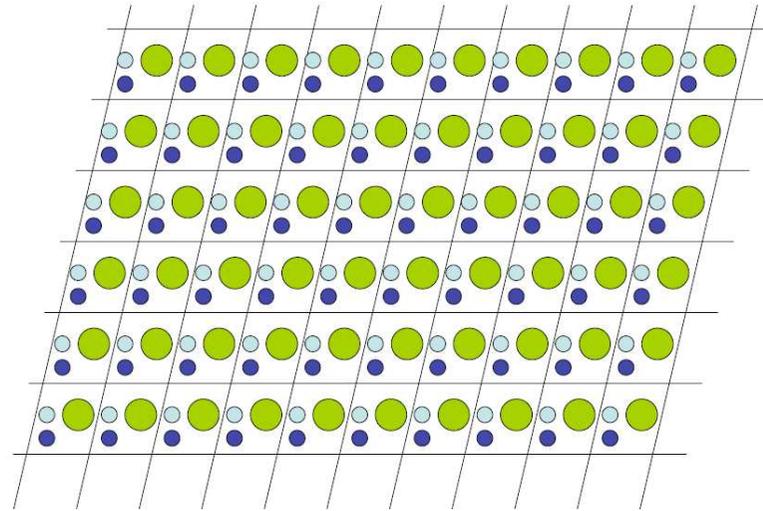
# Exkurs: Grundlagen der Kristallographie

## Merkmale der Einheitszelle

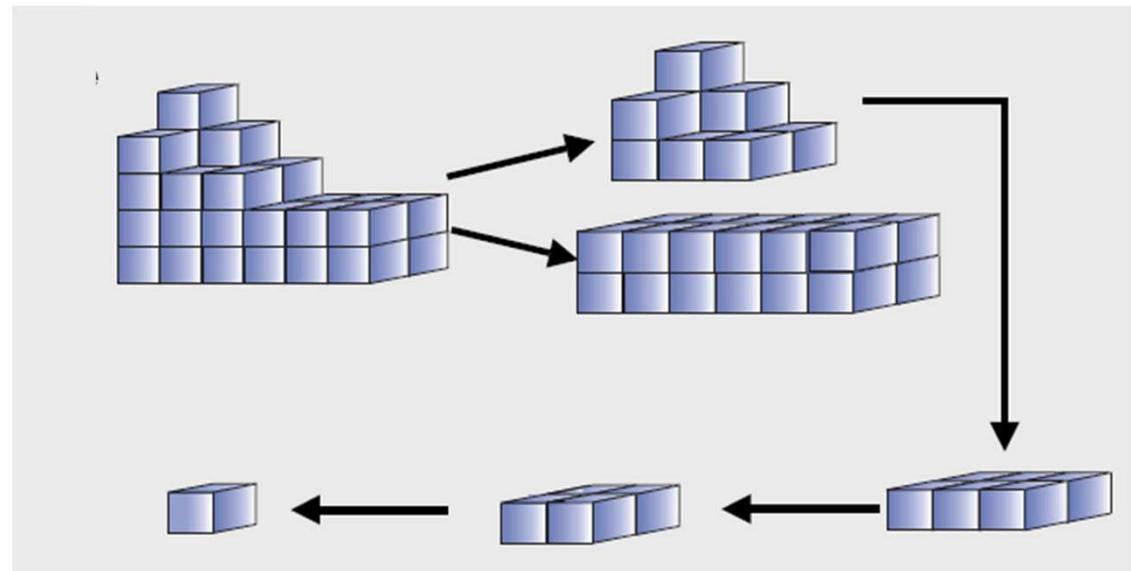
**Merkmale der Einheitszelle:**  
Imaginäre Bildungseinheit zur vereinfachten Beschreibung der Periodizität der Bausteine in Kristallen, wie Atome, Ionen oder Moleküle.

Die Einheitszelle ist die einfachste sich wiederholende Einheit in einem Kristall. Gegenüberstehende Flächen einer Einheitszelle sind parallel. Der Rand der Einheitszelle verbindet äquivalente Stellen.

Zur Beschreibung der Struktur werden somit nur wenige Parameter benötigt. Die Strukturbestimmung beschränkt sich auf den Inhalt der Elementarzelle, sie enthält die Gesamtinformation des Raumgitters.



Gitter + Basis  
= Struktur

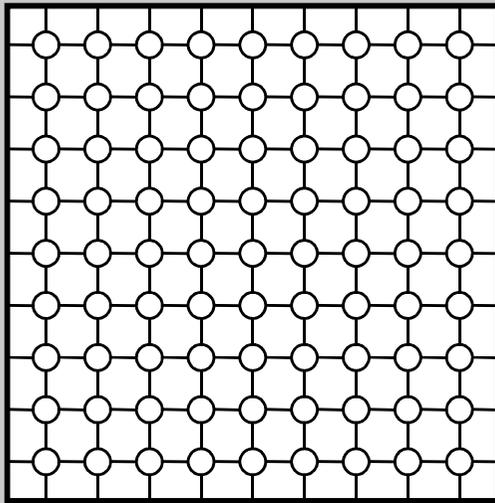


# 1.4 Ideale Kristalle

## Einkristalline, polykristalline und amorphe Festkörper

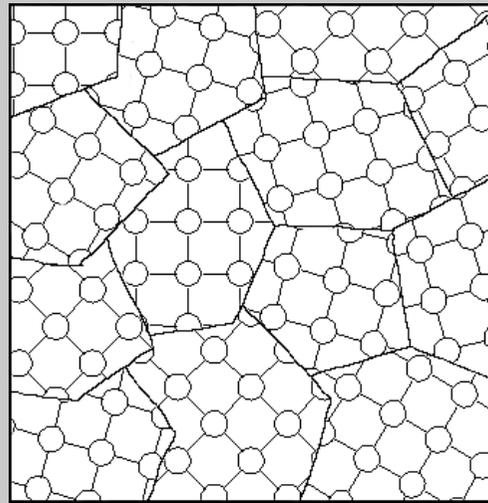
### Festkörper

#### Einkristallin



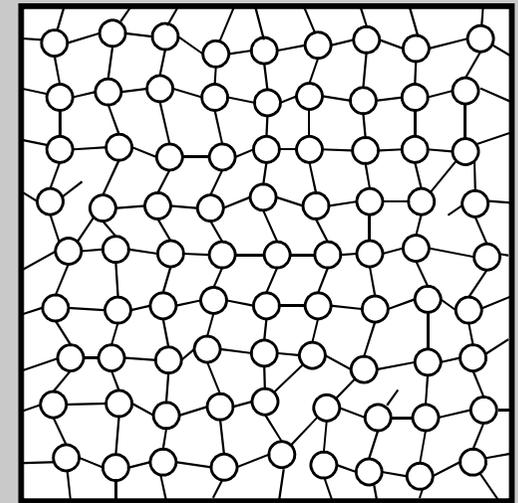
Fernordnung der Atome im gesamten Festkörper.

#### Polykristallin



Fernordnung der Atome in bestimmten Bereichen des Festkörpers.

#### Amorph



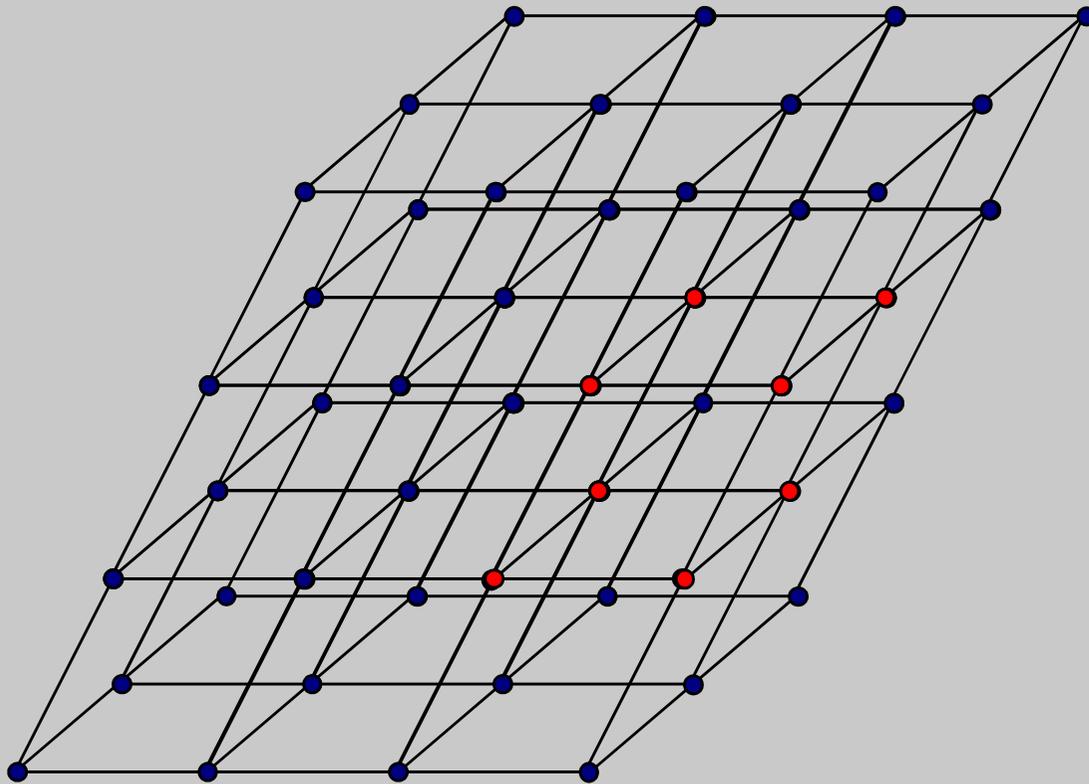
Fernordnung der Atome ist gestört, es existiert lediglich eine Nahordnung.

# 1.4 Ideale Kristalle

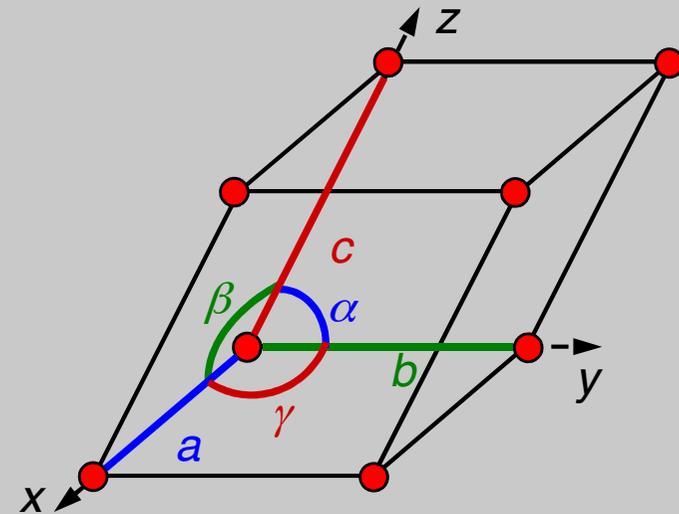
## Punktgitter, Elementarzelle und Gitterkonstanten

Angabe der Fernordnung durch Punktgitter und Elementarzelle

Punktgitter



Elementarzelle

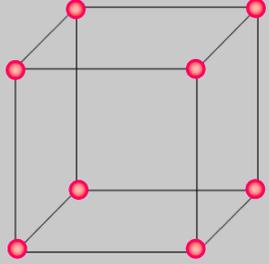


$x, y, z$  - Achsenrichtungen  
 $a, b, c$  - Achsenabschnitte  
der Elementarzelle  
 $\alpha, \beta, \gamma$  - Gitterwinkel der Elementarzelle

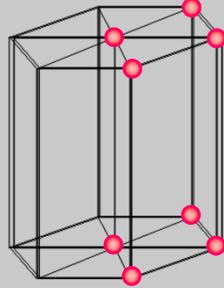
# 1.4 Ideale Kristalle

## Kristallgitter-Typen (7 Kristallsysteme)

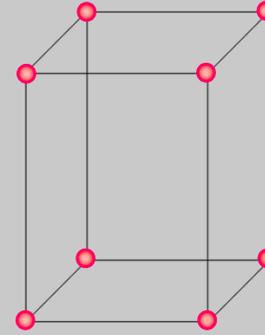
[Callister 1994]



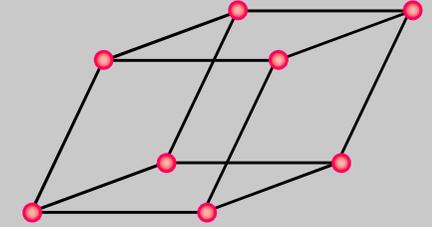
**kubisch**  
 $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



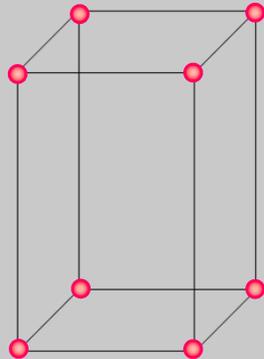
**hexagonal**  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$



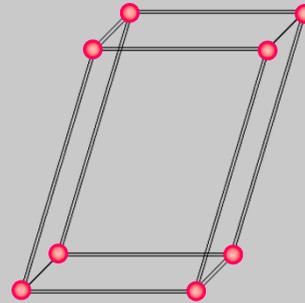
**tetragonal**  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



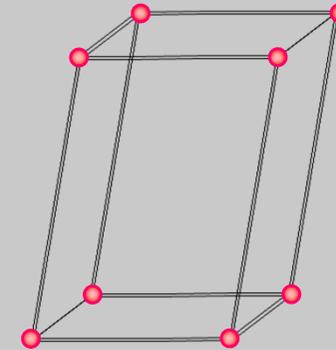
**rhomboedrisch**  
 $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



**orthorhombisch**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



**monoklin**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$



**triklin**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha \neq \gamma \neq 90^\circ \neq \beta$

# Exkurs Grundlagen der Kristallographie

## Merkmale der Einheitszelle

Die genannten Kristallgitter-Typen können an unterschiedlichen Positionen mit Atomen / Molekülen besetzt sein.

Man spricht von:

**Primitiv**

**Raum-zentriert**

**Flächen-zentriert**

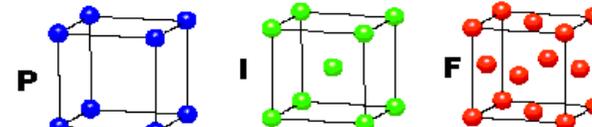
**Seiten-zentriert**

Je nach Gitter und Besetzungsposition kann man bis zu 14 unterschiedliche Strukturen erhalten, die sogenannten Bravais Gitter (siehe rechts)

### CUBIC

$$a = b = c$$

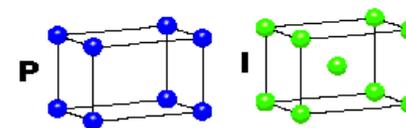
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



### TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

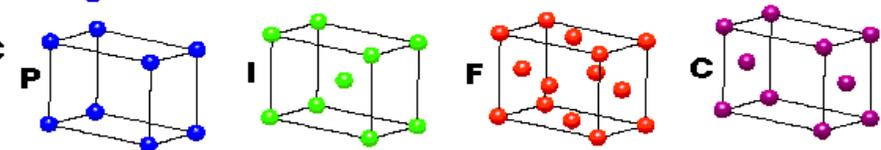
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



### ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

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

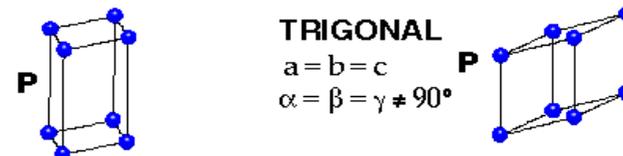


### HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

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

$$\gamma = 120^\circ$$



### TRIGONAL

$$a = b = c$$

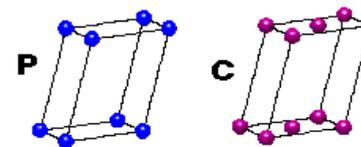
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

### MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

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

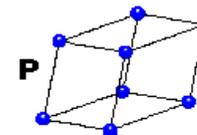
$$\beta \neq 120^\circ$$



### TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



**4 Types of Unit Cell**  
**P** = Primitive  
**I** = Body-Centred  
**F** = Face-Centred  
**C** = Side-Centred  
 +  
**7 Crystal Classes**  
 → **14 Bravais Lattices**

# Beispiel: Auftretende Kristallstrukturen bei Metallen

# 1.4 Ideale Kristalle

## Metalle: Kristallstrukturen (bei Raumtemperatur)

Gruppen

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Perioden	1																		
	2	3 6,941 <b>Li</b> Lithium	4 9,012 <b>Be</b> Beryllium																
	3	11 22,99 <b>Na</b> Natrium	12 24,31 <b>Mg</b> Magnesium											13 26,98 <b>Al</b> Aluminium					
	4	19 39,10 <b>K</b> Kalium	20 40,08 <b>Ca</b> Calcium	21 44,96 <b>Sc</b> Scandium	22 47,90 <b>Ti</b> Titan	23 50,94 <b>V</b> Vanadium	24 52,00 <b>Cr</b> Chrom	25 54,94 <b>Mn</b> Mangan	26 55,85 <b>Fe</b> Eisen	27 58,93 <b>Co</b> Cobalt	28 58,71 <b>Ni</b> Nickel	29 63,55 <b>Cu</b> Kupfer	30 65,37 <b>Zn</b> Zink						
	5	37 84,45 <b>Rb</b> Rubidium	38 87,62 <b>Sr</b> Strontium	39 88,91 <b>Y</b> Yttrium	40 91,22 <b>Zr</b> Zirkonium	41 92,91 <b>Nb</b> Niob	42 95,94 <b>Mo</b> Molybdän	43 (98) <b>Tc</b> Technetium	44 101,1 <b>Ru</b> Ruthenium	45 102,9 <b>Rh</b> Rhodium	46 106,4 <b>Pd</b> Palladium	47 107,9 <b>Ag</b> Silber	48 112,4 <b>Cd</b> Cadmium						
	6	55 132,9 <b>Cs</b> Cäsium	56 137,3 <b>Ba</b> Barium	57 - 71 <b>La-Lu</b>	72 178,5 <b>Hf</b> Hafnium	73 180,9 <b>Ta</b> Tantal	74 183,9 <b>W</b> Wolfram	75 186,2 <b>Re</b> Rhenium	76 190,2 <b>Os</b> Osmium	77 192,2 <b>Ir</b> Iridium	78 195,1 <b>Pt</b> Platin	79 197,0 <b>Au</b> Gold	80 200,6 <b>Hg</b> Quecksilber	81 204,4 <b>Tl</b> Thallium	82 207,2 <b>Pb</b> Blei				

<b>Lanthanoide</b>	57 138,9 <b>La</b> Lanthan	58 104,1 <b>Ce</b> Cer	59 140,9 <b>Pr</b> Praseodym	60 144,2 <b>Nd</b> Neodym	61 147,0 <b>Pm</b> Promethium	62 150,4 <b>Sm</b> Samarium	63 152,0 <b>Eu</b> Europium	64 157,3 <b>Gd</b> Gadolinium	65 158,9 <b>Tb</b> Terbium	66 162,5 <b>Dy</b> Dysprasium	67 164,9 <b>Ho</b> Holmium	68 167,3 <b>Er</b> Erbium	69 168,9 <b>Tm</b> Thulium	70 173,0 <b>Yb</b> Ytterbium	71 175,0 <b>Lu</b> Lutetium
--------------------	----------------------------------	------------------------------	------------------------------------	---------------------------------	-------------------------------------	-----------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	----------------------------------	-------------------------------------	----------------------------------	---------------------------------	----------------------------------	------------------------------------	-----------------------------------



kubisch raumzentriert (krz)



kubisch flächenzentriert (kfz)



hexagonal dichteste Packung (hdp)



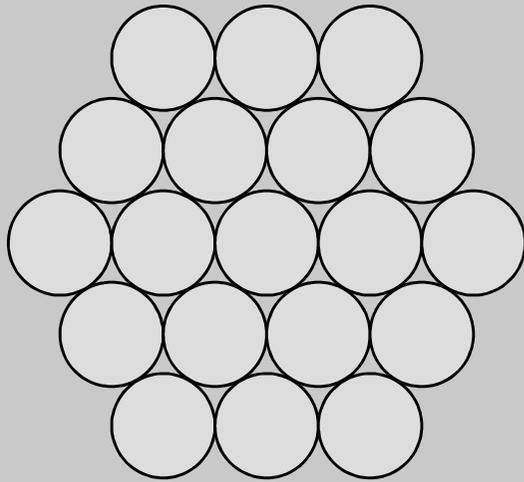
rhomboedrisch

[Mortimer 1973]

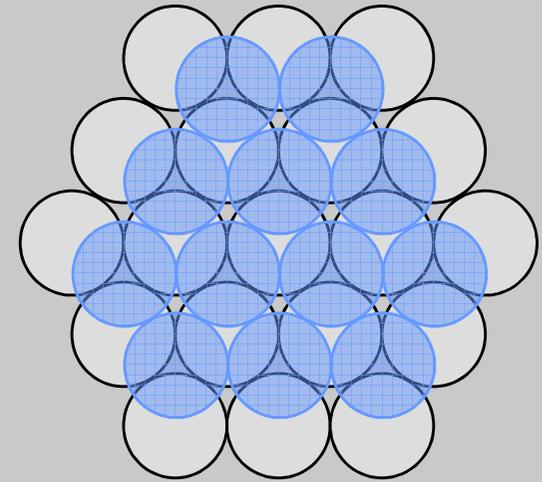
# 1.4 Ideale Kristalle

## Metalle: Räumlich dichteste Kugelpackungen

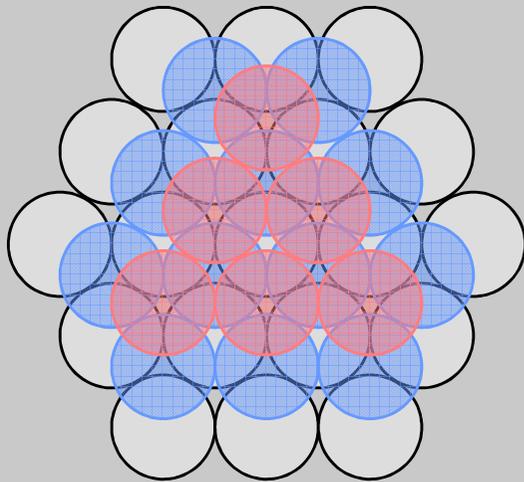
A-Lage



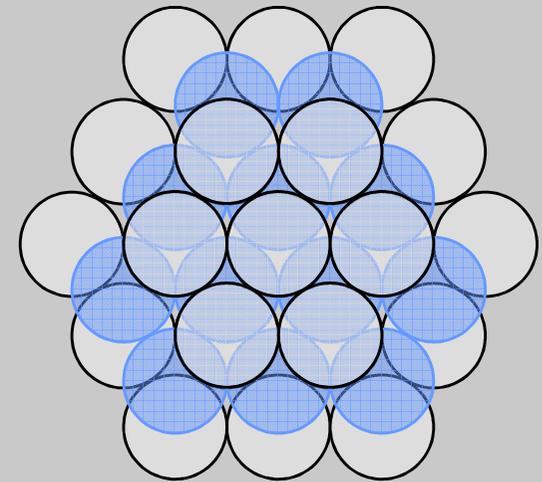
A-Lage  
B-Lage



A-Lage  
B-Lage  
C-Lage



A-Lage  
B-Lage  
A-Lage



# 1.4 Ideale Kristalle

## Metalle: Hexagonales Gitter (hdp)

### Hexagonal dichteste Kugelpackung (hdp)

74% Raumerfüllung

Koordinationszahl 12

$a, c$  = Gitterkonstanten  
 $d$  = Ionendurchmesser

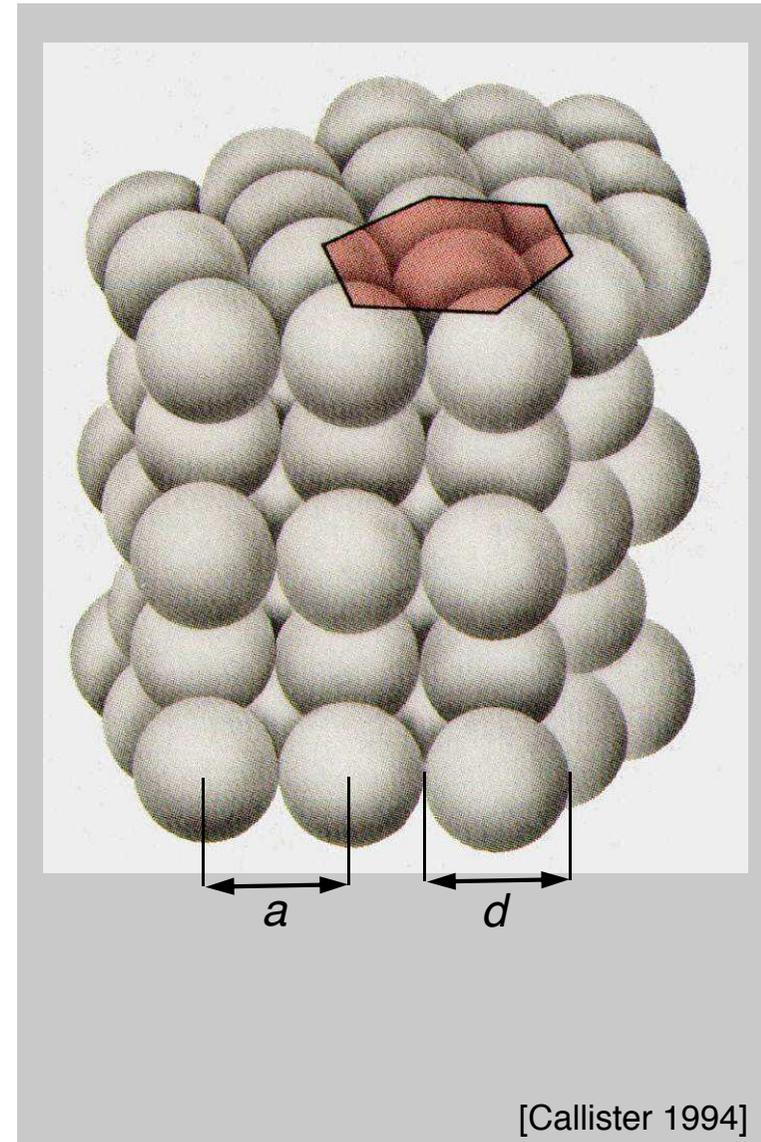
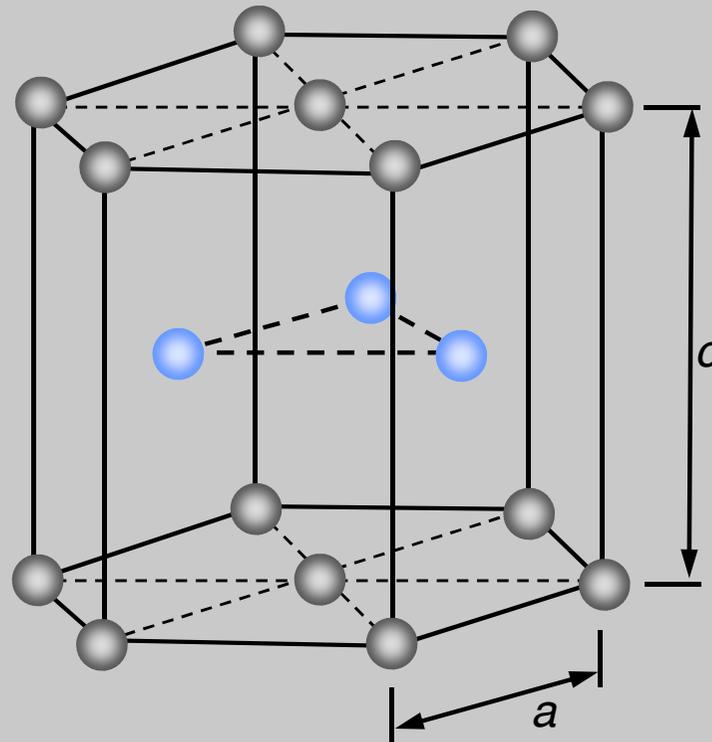
$$a = d$$

$$c = \sqrt{\frac{8}{3}} \cdot d$$

$$\frac{c}{a} = 1,633$$

(ideal)

Stapelfolge der Ebenen A-B-A-



# 1.4 Ideale Kristalle

## Metalle: Kubisch flächenzentriertes Gitter (kfz)

Kubisch dichteste Kugelpackung, Bsp.: Kupfer

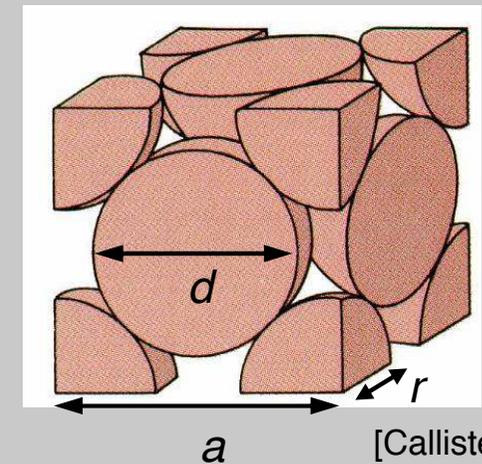
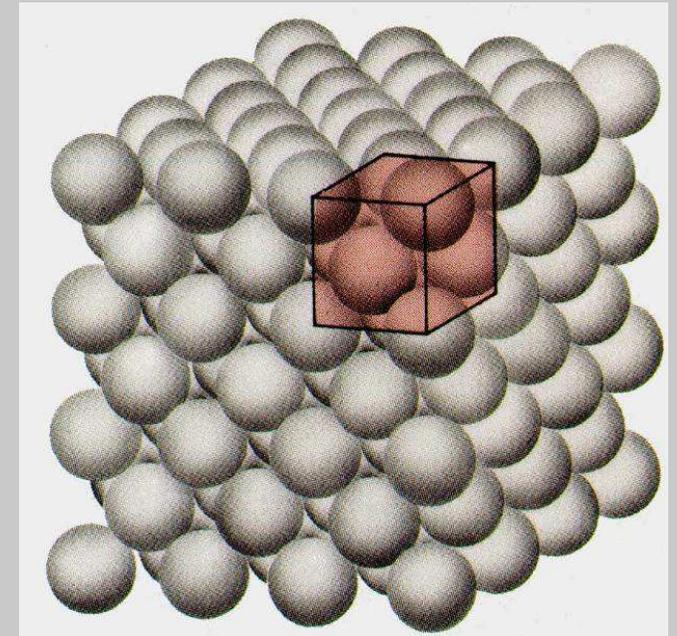
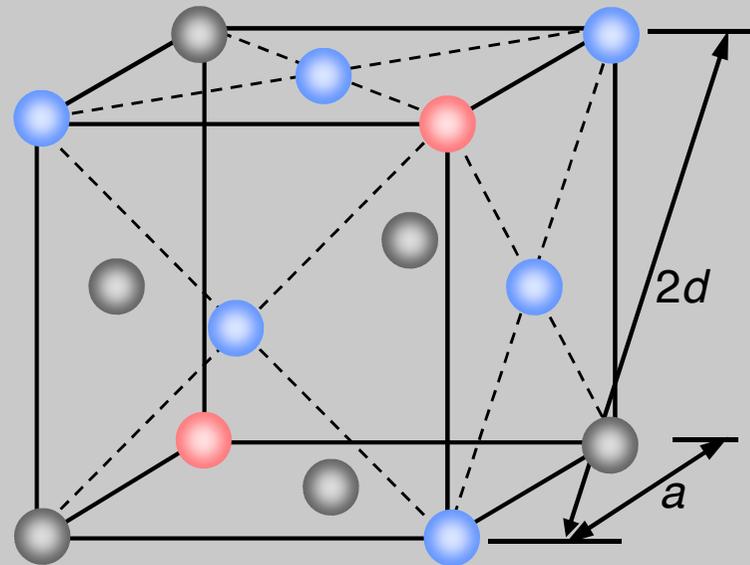
74% Raumerfüllung

Koordinationszahl 12

$a$  = Gitterkonstante  
 $d$  = Ionendurchmesser

$$a = \sqrt{2} \cdot d$$

Stapelfolge der Ebenen A-B-C-A-



# 1.4 Ideale Kristalle

## Metalle: Kubisch raumzentriertes Gitter (krz)

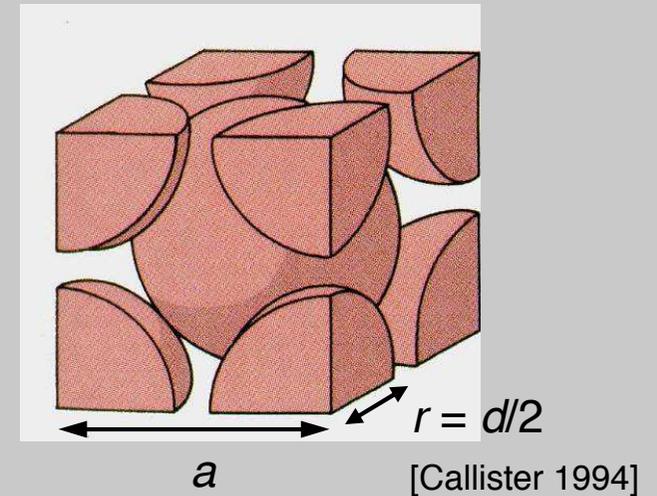
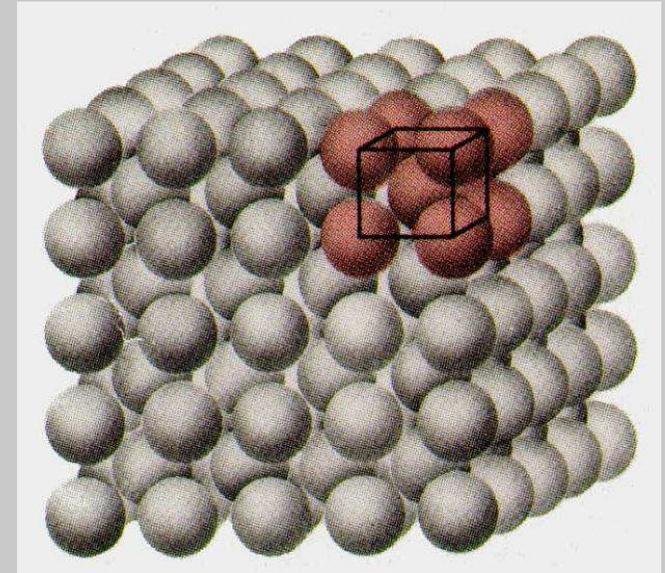
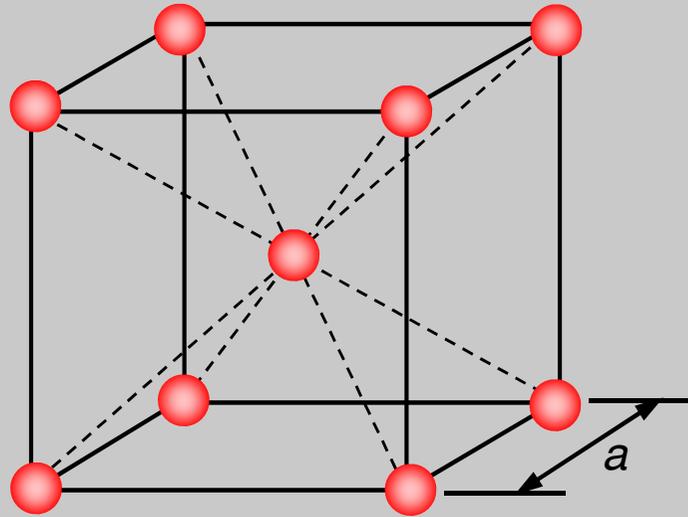
**Bsp.: Eisen**

68% Raumerfüllung

Koordinationszahl 8

$a$  = Gitterkonstante  
 $d$  = Ionendurchmesser

$$a = \sqrt{\frac{4}{3}} \cdot d$$

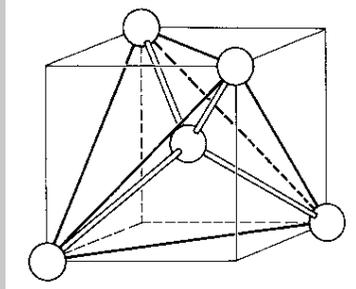


# Beispiel: Weitere wichtige und technisch relevante Kristallstrukturen

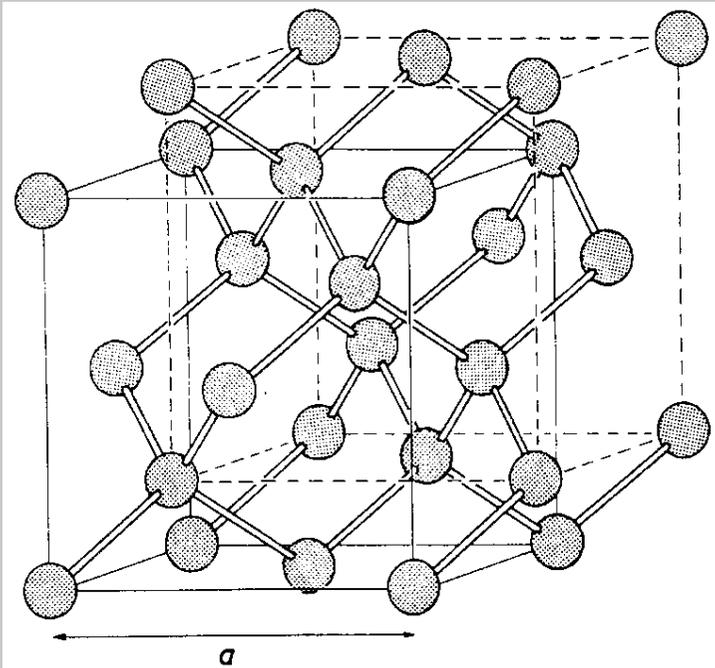
# 1.4 Ideale Kristalle

## Kovalente Bindung: Tetraedrische Koordination

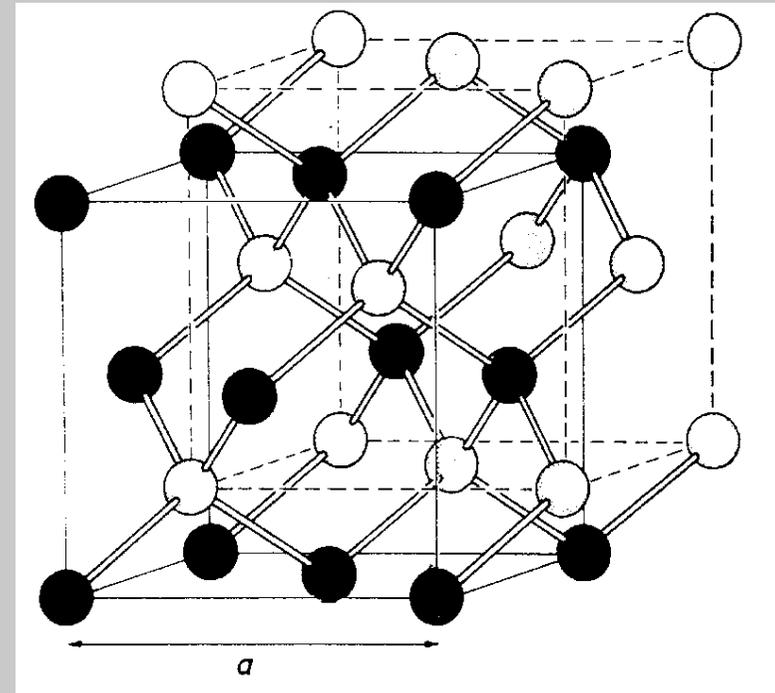
Tetraedrische  
Koordination  
von Atomen



### Diamantgitter

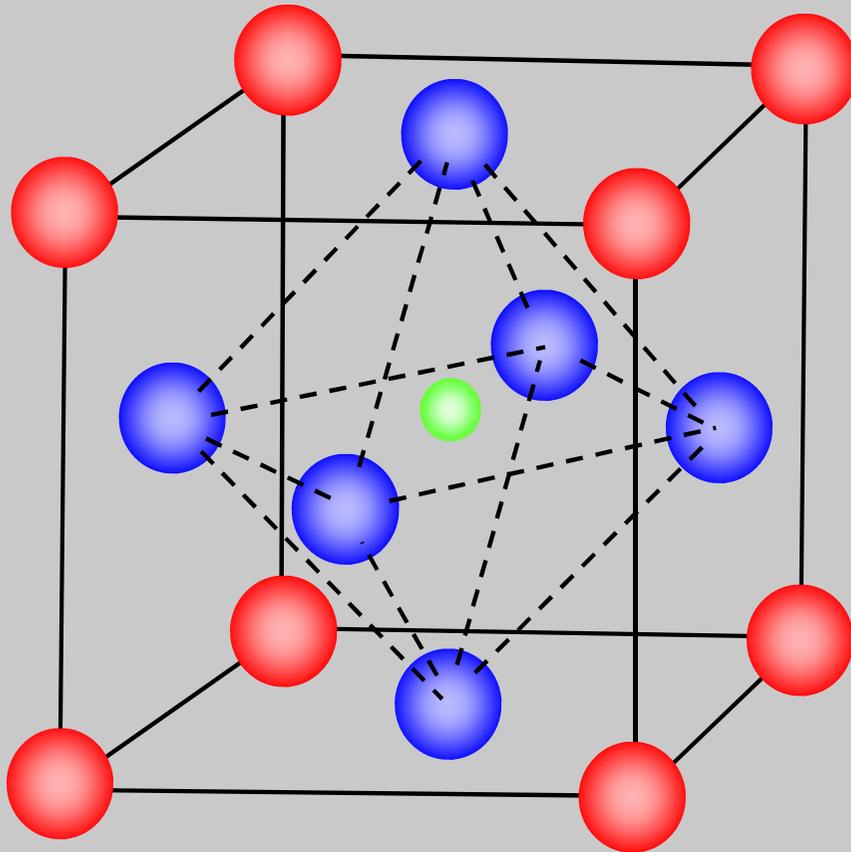


### Zinkblendegitter



# 1.4 Ideale Kristalle

## Perowskit $ABO_3$



- **A-Kationen:**  
kubisch primitives Gitter
- **B-Kationen:**  
Besetzung der Raumzentren
- **O-Anionen:**  
Besetzung der Flächenzentren

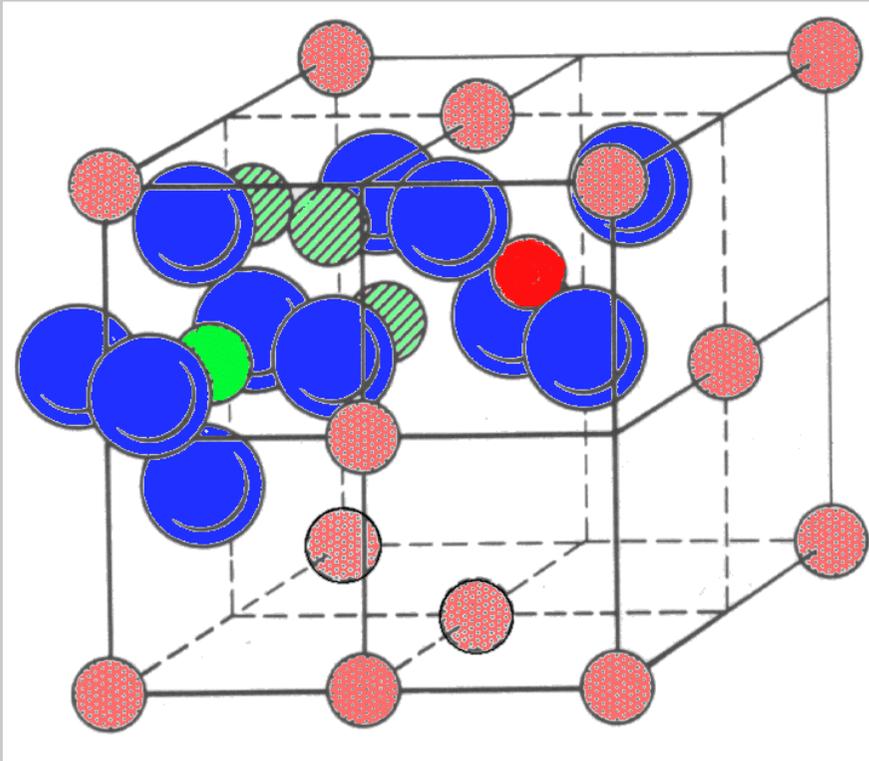
Oxidationszahlen	Beispiele
II / IV <span style="color: red;">A<sup>2+</sup></span> / <span style="color: green;">B<sup>4+</sup></span>	BaTiO <sub>3</sub> Pb(Zr, Ti)O <sub>3</sub>
I / V <span style="color: red;">A<sup>+</sup></span> / <span style="color: green;">B<sup>5+</sup></span>	KTaO <sub>3</sub>
III / III <span style="color: red;">A<sup>3+</sup></span> / <span style="color: green;">B<sup>3+</sup></span>	LaMnO <sub>3</sub>

**Anwendungen:** nichtlineare Widerstände (PTC), SMD-Kondensatoren, piezoelektrische Sensoren und Aktoren, Pyrodetektoren, ferroelektrische Speicher

[Chiang 1997]

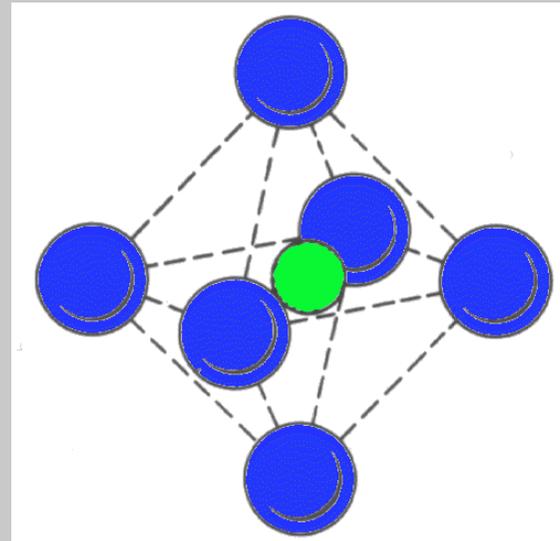
# 1.4 Ideale Kristalle

## Spinell $AB_2O_4$ ( $AO \cdot B_2O_3$ )

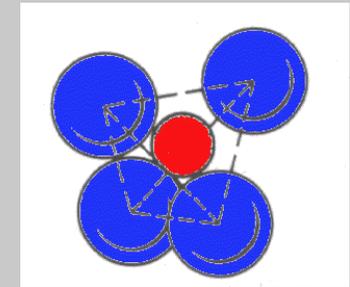


**O-Anionen:**  
kfz- oder hdp-Packung

**B-Kationen:**  
größeres Kation in  
Oktaeder-Umgebung



**A-Kationen:**  
kleineres Kation in  
Tetraeder-Umgebung



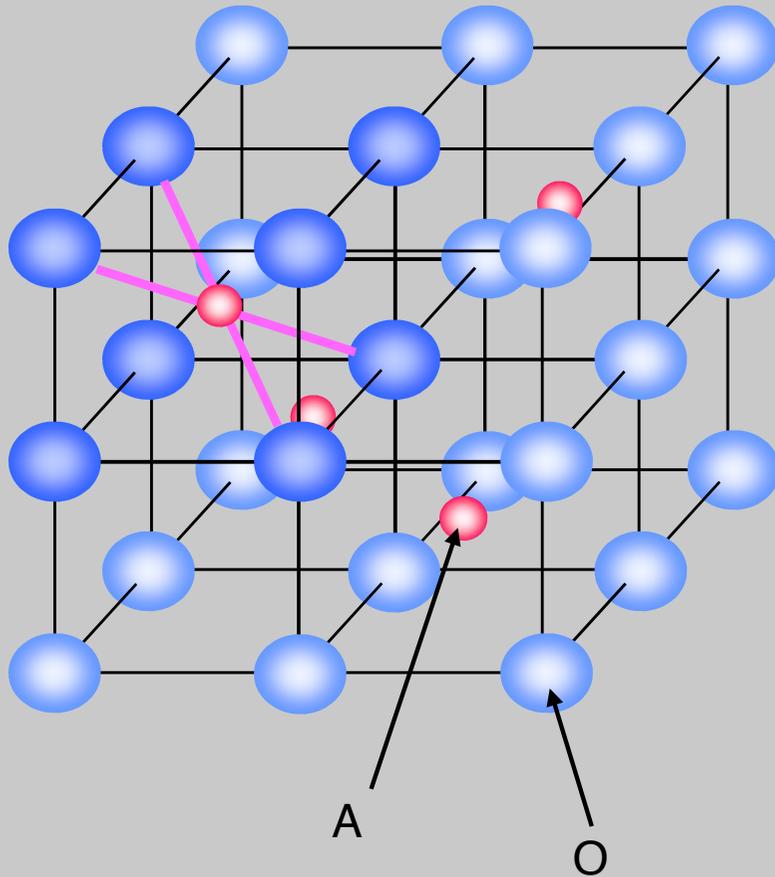
**Beispiele:**  
A = Mg, Mn, Co, Ni, Zn  
B = Al, Cr, Fe, Mn, Co  
 $MgAl_2O_4$  (Spinell),  
 $Fe_3O_4$  ( $Fe^{3+}Fe^{3+}Fe^{2+}O_4^{2-}$ )  
(inverser Spinell)

**Anwendungen:** nichtmetallische, polykristalline Magnetwerkstoffe,  
Weichferrite und Hartferrite

[Chiang 1997]

# 1.4 Ideale Kristalle

## Fluorit $\text{AO}_2$



### A-Kationen:

(kleine) Kationen in jedem zweiten O-Würfel

### O-Anionen:

(große) Anionen in kubischer Kugelpackung

Koordinationszahlen:

**8 für Kation / 4 für Anion**

### Beispiel:

$\text{ZrO}_2$ ,  $\text{CeO}_2$

**Anwendungen:**  $\text{ZrO}_2$  als Sauerstoff-Ionenleiter in der Lambda-Sonde, Regelung von Verbrennungsmotoren

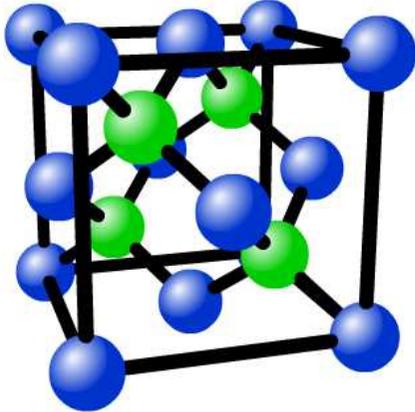
# 1.4 Ideale Kristalle

## Applet: 3D Crystal Viewer

Flash: 3D Crystal Viewer Flash 3D Atomic Structure Model Viewer

[HOME \[en\]](#) / [\[ja\]](#) | [ARCHIVES](#) | [HELP](#)

Zinc Blende Structure



EDIT  
SVG  
Theta: 76  
Phi: 344  
200  
25

ARCHIVES

- [hcp](#)
- [fcc](#)
- [diamond](#)
- [NaCl](#)
- [wurtzite](#)
- [CaF2](#)
- [rutile](#)
- [CsCl](#)
- [bcc](#)
- [zinc-blende](#)
- [C60](#)

3D APP LINKS

-  [3D Earth](#)
-  [3D Panorama](#)

3D Crystal Viewer ver2.00  
dawgsk.org/crystal

[Download standalone viewer for this model \(zinc-blende#0000\)](#)

[to page top](#)

Copyright©2004-2009 <http://www.dawgsk.org/crystal/>, Some rights reserved.

[<http://www.dawgsk.org/crystal/en/library/zinc-blende#0000>]

# Ende Vorlesung 2