

Festkörper

Unterscheidung: kristallin ↔ amorph/glasartig

kristalline Festkörper:

dreidimensional periodische Ordnung

amorphe/glasartige Festkörper:

nur Nahordnung (Glas: „eingefrorene Schmelze“)

Kristalline Festkörper:

- Ionenkristalle
- Molekülkristalle
- Metalle
- kovalente Kristalle („Atomgitter“)

Beschreibung von Kristallstrukturen:

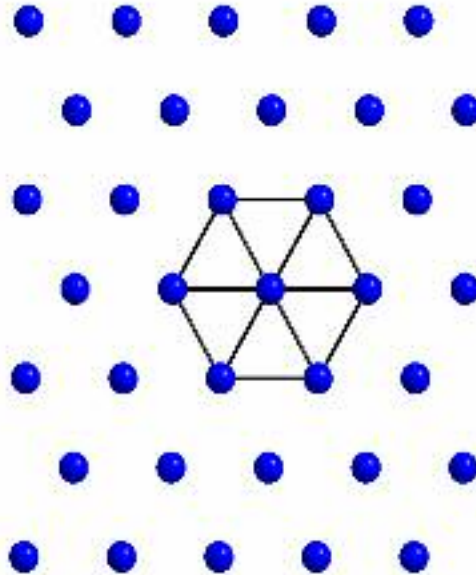
- dichteste Packungen und besetzte Lücken
- Verknüpfung der Polyeder
- Elementarzelle

Strukturbestimmende Faktoren:

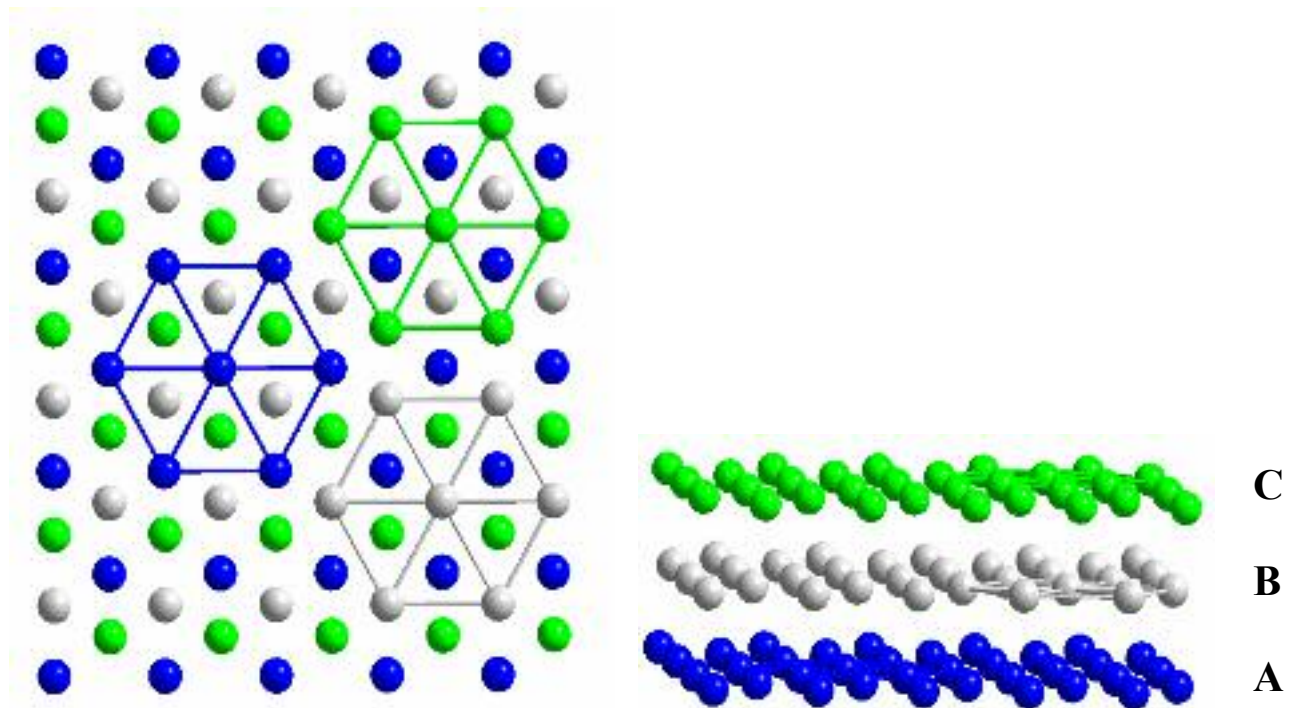
- Radienverhältnisse
- Art der chemischen Bindung
- Stöchiometrie
- Raumerfüllung
- Symmetrie
- Maximierung der Bindungsenergie

Dichteste Kugelpackungen

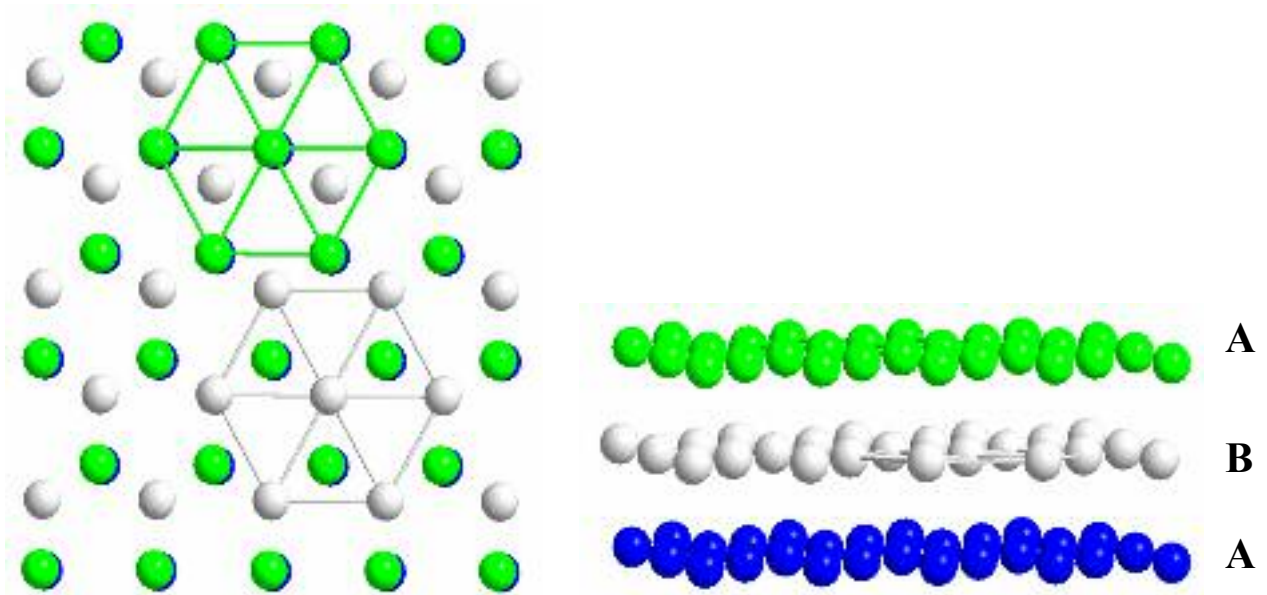
hexagonal dichte Schicht:



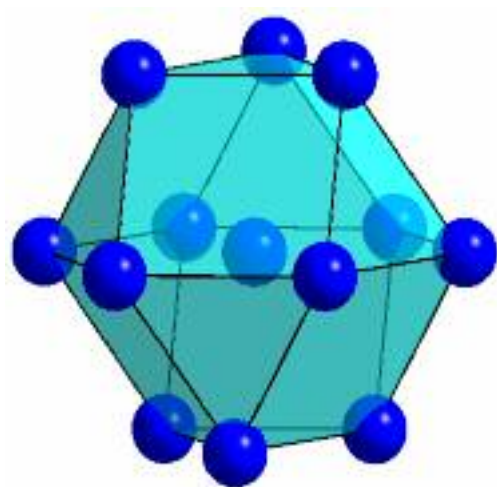
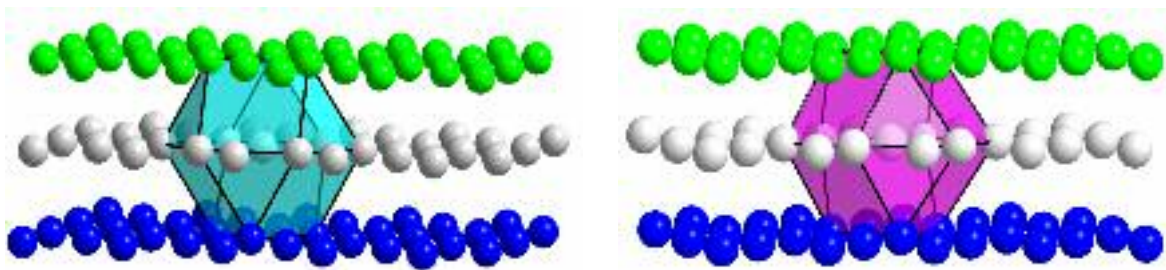
kubisch dichteste Kugelpackung (ccp): Stapelfolge ABC



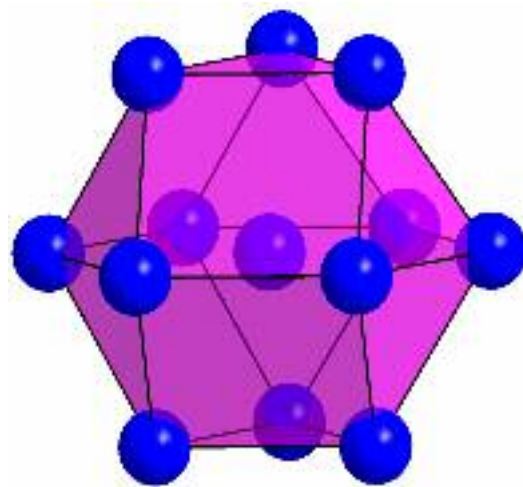
hexagonal dichteste Kugelpackung (hcp): Stapelfolge AB



Koordination in der dichtesten Kugelpackung



ccp: Kuboktaeder

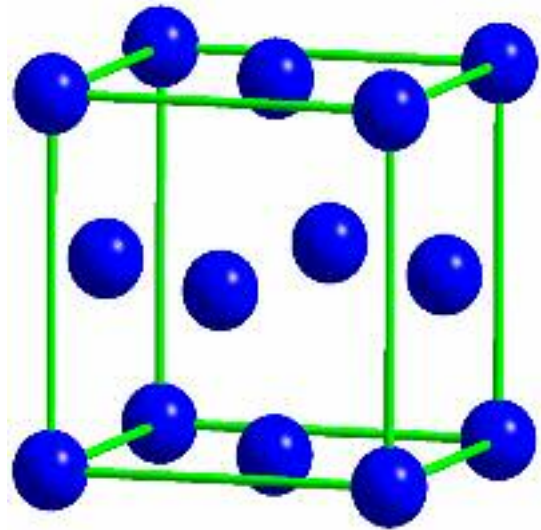
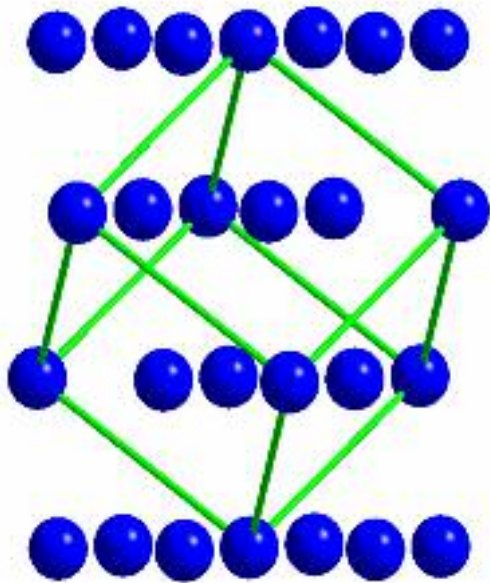


hcp: „Antikuboktaeder“

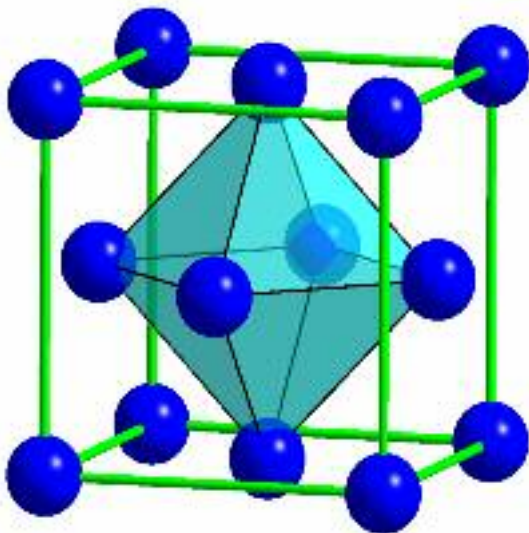
Dichteste Kugelpackung und Elementarzelle

Beispiel:

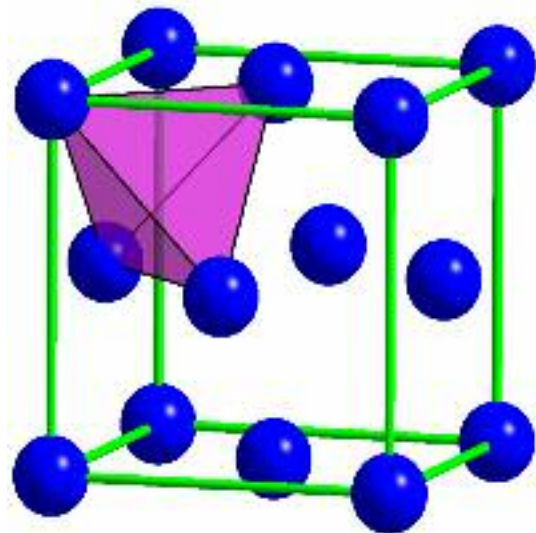
ccp-Anordnung entspricht kubisch-flächenzentrierter EZ



Position der Lücken in der Elementarzelle



Oktaederlücke



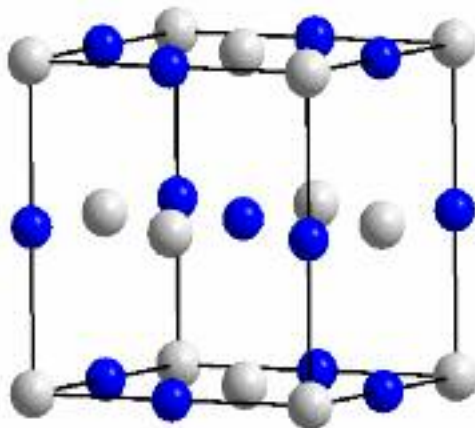
Tetraederlücke

Metallstrukturen

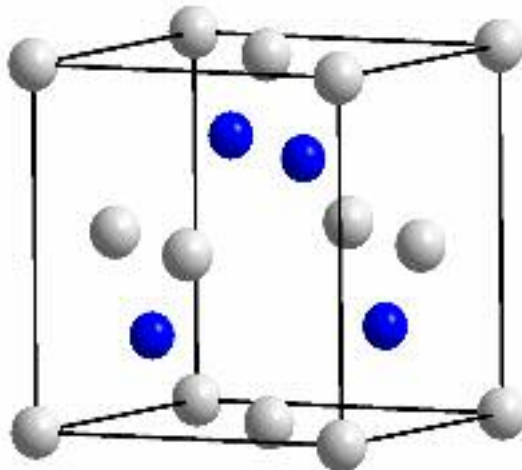
- **Cu-Typ:** ccp
- **Mg-Typ:** hcp
- **W-Typ:** bcc (kubisch innenzentrierte Packung)
- **α -Po-Typ:** kubisch primitive Packung
- **Stapelvarianten der dichtesten Kugelpackung**

Strukturen einfacher Verbindungen

NaCl: ccp von Cl; alle OL mit Na besetzt



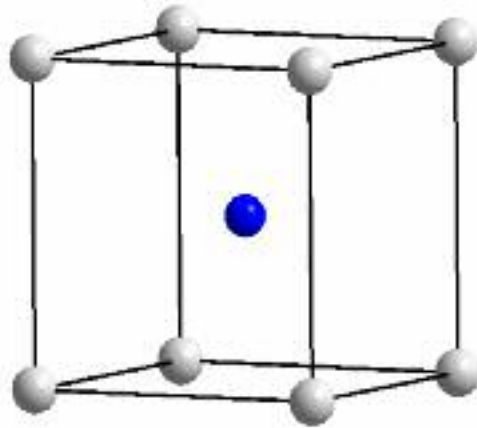
ZnS: ccp von S; $\frac{1}{2}$ der TL mit Zn besetzt („Sphalerit“)



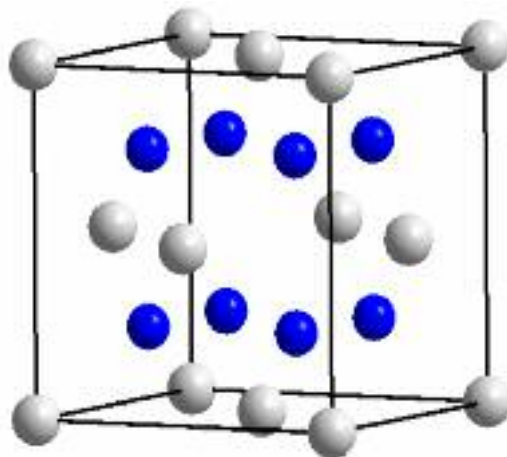
hexagonale Variante von ZnS: „Wurtzit“

NiAs: hcp von As; alle OL mit Ni besetzt

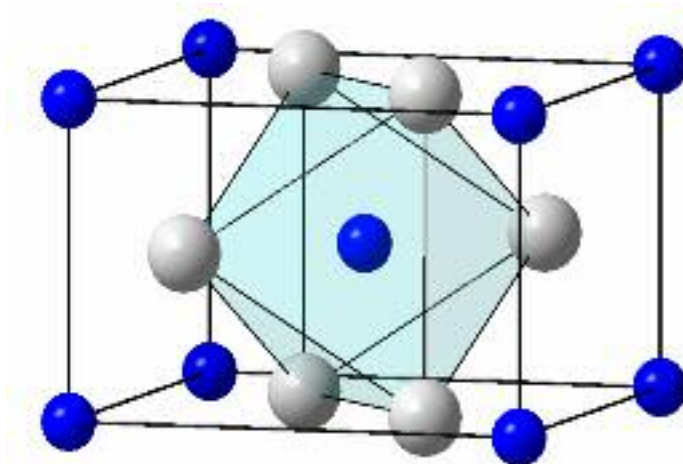
CsCl: kubisch primitive Anordnung von Cl; alle
Würfellücken mit Cs besetzt



CaF₂: ccp von Ca; alle TL mit F besetzt

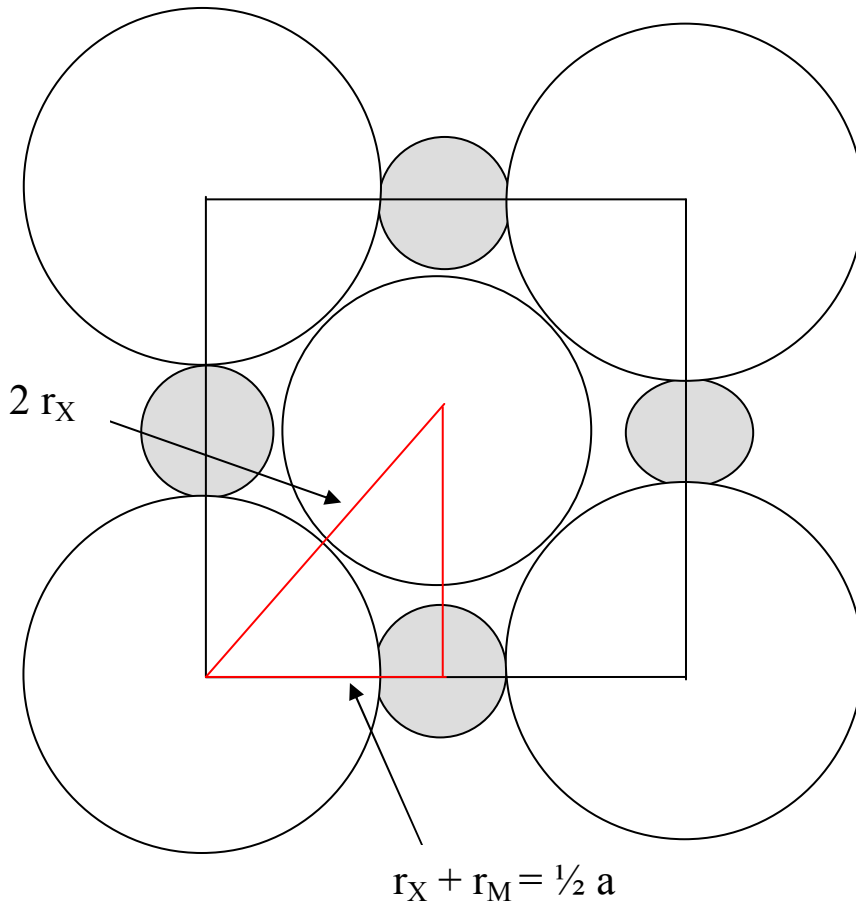


TiO₂:



Radienverhältnisse in AB-Strukturen

Beispiel: Grenzzadienverhältnis im NaCl-Typ (CN = 6)



$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}a\right)^2 + \left(\frac{1}{2}a\right)^2 &= (2 \cdot r_X)^2 & \Leftrightarrow & 2 \cdot \left(\frac{1}{2}a\right)^2 = 4 \cdot r_X^2 & \Leftrightarrow & \left(\frac{1}{2}a\right)^2 = 2 \cdot r_X^2 \\ \Leftrightarrow \frac{1}{2}a &= \sqrt{2} \cdot r_X & \Rightarrow & \sqrt{2} \cdot r_X = r_X + r_M \\ & & \Leftrightarrow & \sqrt{2} = 1 + \frac{r_M}{r_X} & \Leftrightarrow & \frac{r_M}{r_X} = \sqrt{2} - 1 = 0,414 \end{aligned}$$

entsprechende Berechnungen ergeben:

- | | |
|---------------------------|---------------------------------|
| $r_M/r_X > 0,732$ | \rightarrow CsCl-Typ (CN = 8) |
| $0,732 > r_M/r_X > 0,414$ | \rightarrow NaCl-Typ (CN = 6) |
| $0,414 > r_M/r_X > 0,225$ | \rightarrow ZnS-Typ (CN = 4) |