

Seminar zur Vorlesung

Anorganische Chemie III

Wintersemester 2017/18

Christoph Wölper

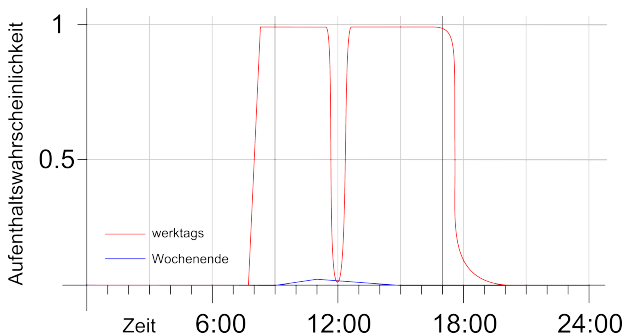
Institut für Anorganische Chemie der Universität Duisburg-Essen

Sprechzeiten

Christoph Wölper

christoph.woelper@uni-due.de www.uni-due.de/~adb297b

Sprechzeiten (Raum: S07 S00 C24 oder S07 S00 D27)



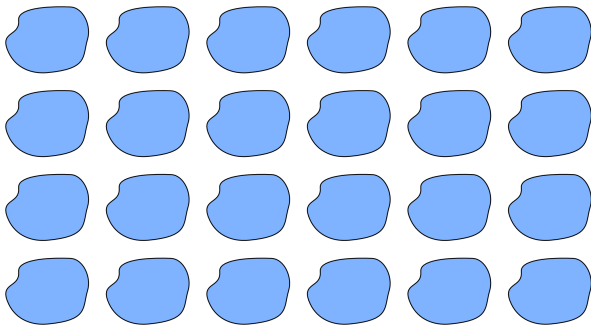
Kristalline Feststoffe

Beschreibung von Kristallen

Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

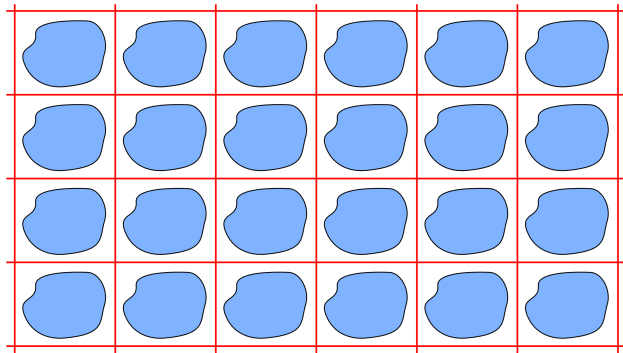
Periodizität



Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

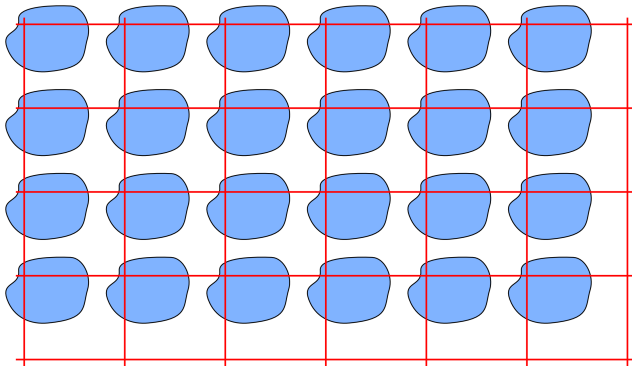
Periodizität



Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

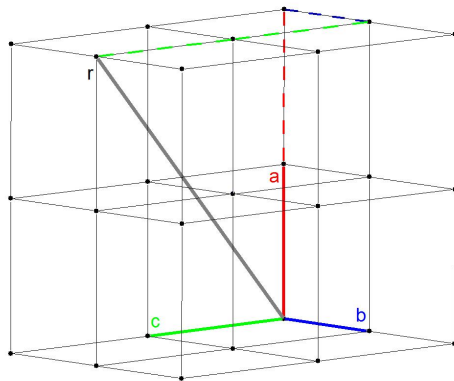
Periodizität



Kristalline Feststoffe

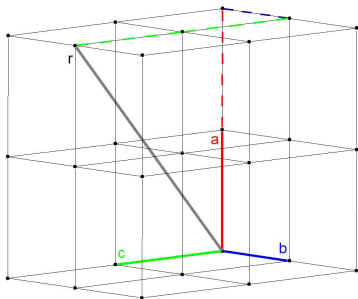
Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

Gitter



Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen



$$\vec{r} = u \cdot \vec{a} + v \cdot \vec{b} + w \cdot \vec{c}$$

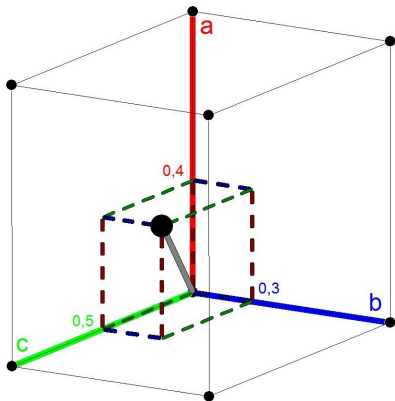
Gitter

- # Längen der Vektoren und die Winkel zwischen ihnen beschreiben die *Elementarzelle*
- # Die Gitterpunkt können mit Atomen besetzt sein müssen aber nicht
- # Faktoren u v w können für Richtungsangaben benutzt werden
 - \vec{r} zeigt in Richtung $[212]$

Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

Koordinatensysteme



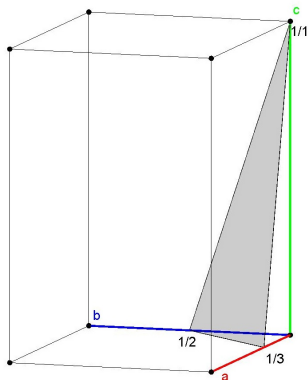
- # Die Basisvektoren können als Koordinatenachsen benutzt werden
- # x y z sind rationale Zahlen zwischen 0 und 1
- # Zahlen größer oder kleiner beschreiben Positionen in den Nachbarzellen

$$\vec{r} = x \cdot \vec{a} + y \cdot \vec{b} + z \cdot \vec{c}$$

Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

Miller-Ebenen



- # durch die Schnittpunkte mit den Achsen definiert
- # Kehrwert des Bruches ist der Miller-Index h , k bzw. l für die entsprechende Achse
- # wird eine Achse gar nicht geschnitten ist der Miller-Index 0
- # Miller-Ebenen werden durch runde Klammern dargestellt
 - allgemein (hkl)
 - hier (321)

Symmetrie

Was ist Symmetrie?

Symmetrie

Was ist Symmetrie?

Ein Objekt ist symmetrisch, wenn man es durch eine Operation in einen Zustand überführen kann, der vom Ausgangszustand nicht unterscheidbar ist.

In Kristallen ist das „Objekt“ üblicherweise eine Gruppe von Molekülen, kann aber auch ein einzelnes Molekül sein.

Symmetrie

Beschreibung von Symmetrie

Hermann-Mauguin System in der Kristallographie

- Drehachsen
- Inversionsdrehachsen

Schoenflies System in der Spektroskopie

- Drehachsen
- Drehspiegelachsen

Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie

Hermann-Maugin System

Drehachse n

- Rotation um $360^\circ/n$
- 1, 2, 3, 4 und 6 zählige Symmetrie mit Gitter kompatibel
- Händigkeit bleibt erhalten

Inversionsdrehachse \bar{n}

- Rotation um $360^\circ/n$ und Inversion (Punktspiegelung)
- 1, 2, 3, 4 und 6 zählige Symmetrie mit Gitter kompatibel
- Händigkeit ändert sich

Kombination mit Gittertranslation

- Schraubenachsen
- Gleitspiegelebenen

Symmetrie

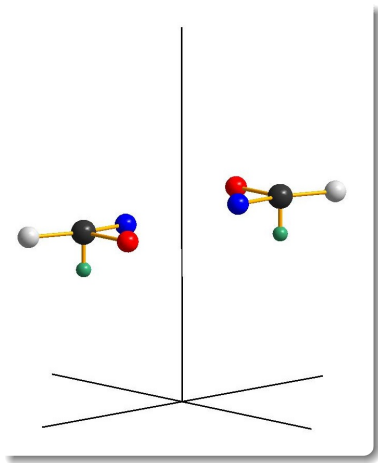
Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

Drehachsen

Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

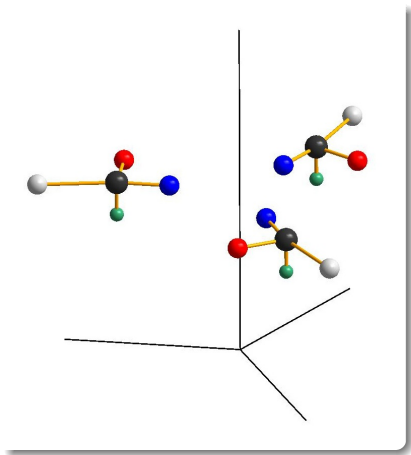
Drehachsen



Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

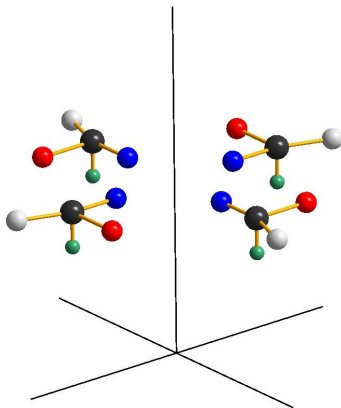
Drehachsen



Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

Drehachsen



Symmetrie

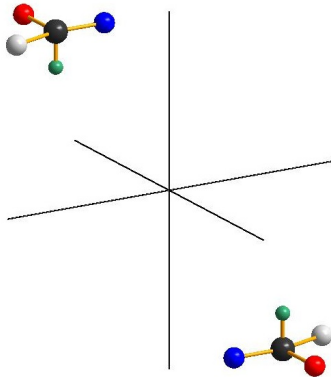
Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

Inversionsdrehachsen

Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

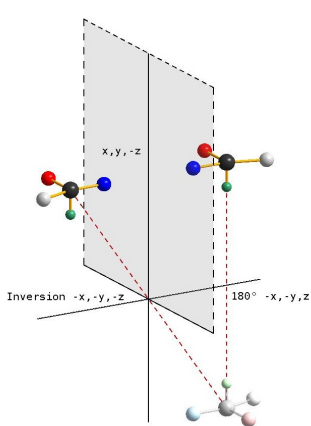
Inversionsdrehachsen



Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

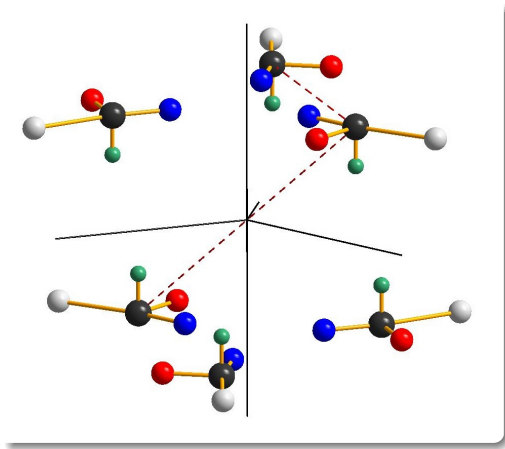
Inversionsdrehachsen



Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

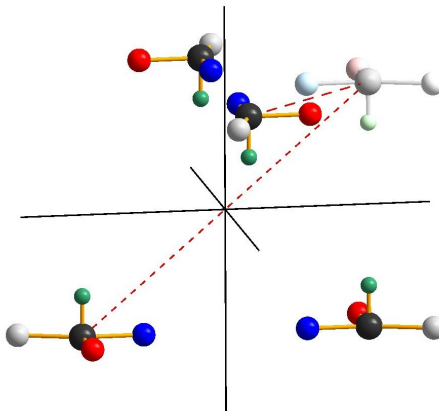
Inversionsdrehachsen



Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

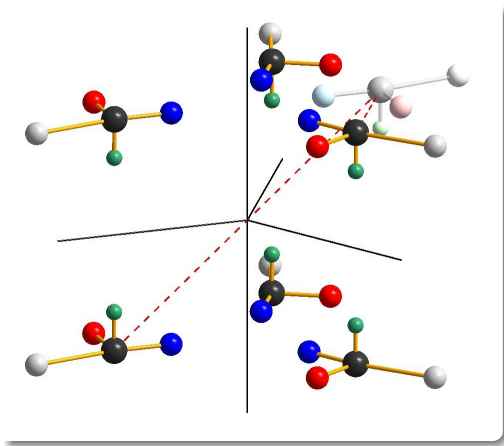
Inversionsdrehachsen



Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

Inversionsdrehachsen



Symmetrie

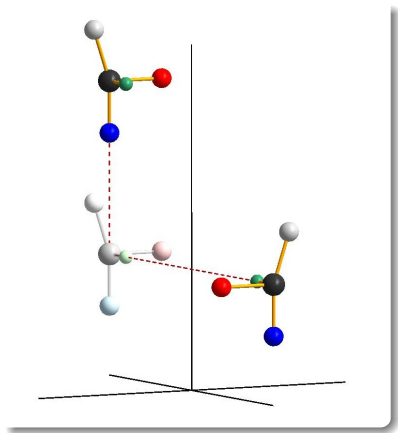
[Symmetrie](#) > [Beschreibung von Symmetrie](#) > [Hermann-Maugin System](#)

Schraubenachsen

Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

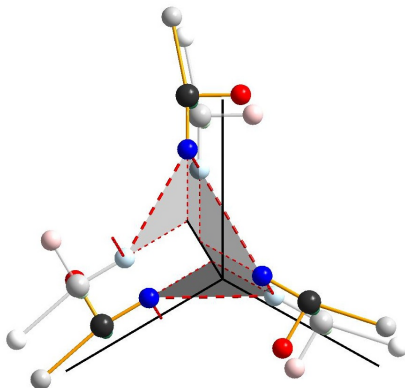
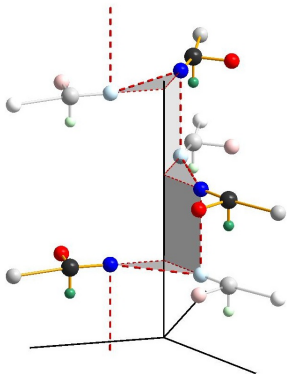
Schraubenachsen



Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

Schraubenachsen



Symmetrie

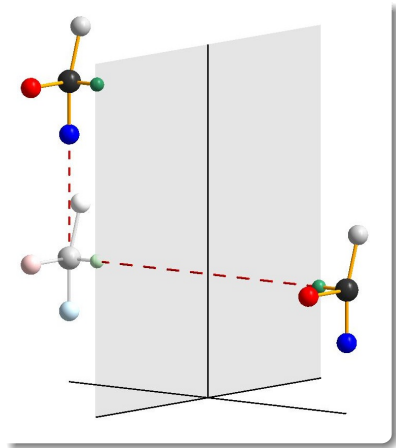
Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

Gleitspiegelebenen

Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Mauguin System

Gleitspiegelebenen



Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie

Schoenflies System

Drehachse C_n

- Rotation um $360^\circ/n$
- Händigkeit bleibt erhalten

Drehspiegelachse S_n

- Rotation um $360^\circ/n$ und Spiegelung senkrecht zur Drehsachse
- Händigkeit ändert sich

Inversion (Punktspiegelung) i

- Händigkeit ändert sich

Spiegelebene σ

- Händigkeit ändert sich

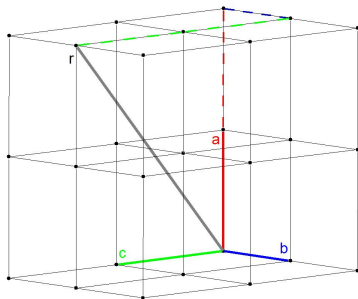
Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie

Inversionsdreh- vs. Drehspiegelachsen

Hermann-Mauguin	Schoenflies
$\bar{1}$	$i (S_2)$
$m (\bar{2})$	$\sigma (S_1)$
$\bar{3}$	S_6
$\bar{4}$	S_4
$\bar{6}$	S_3

Symmetrie



$$\vec{r} = u \cdot \vec{a} + v \cdot \vec{b} + w \cdot \vec{c}$$

Gittertypen

- # Gitter haben Symmetrie
- # für verschiedene Symmetrien sind besondere Anforderungen an die Längen der Basisvektoren und der Winkel zwischen ihnen gegeben
- # daraus ergeben sich verschiedene Gittertypen

Symmetrie

Symmetrie > Gittertypen

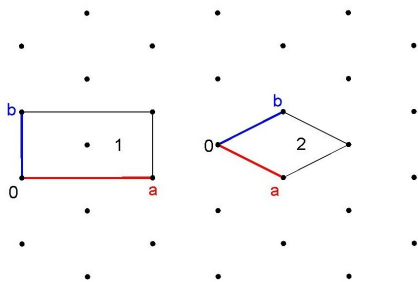
Gittertypen und Symmetrie

Gittertyp	Beschränkungen	Symmetrie
triklin	$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$	1
monoklin	$a, b, c, 90^\circ, \beta, 90^\circ$	2 (eine Achse), 1
orthorhombisch	$a, b, c, 90^\circ, 90^\circ, 90^\circ$	2 (drei Achsen), 1
tetragonal	$a = b, c, 90^\circ, 90^\circ, 90^\circ$	4, 2, 1
hexagonal	$a = b, c, 90^\circ, 90^\circ, 120^\circ$	6, 3, 2, 1
rhomboedrisch	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma$	3, 2, 1
kubisch	$a = b = c, 90^\circ, 90^\circ, 90^\circ$	4, 3, 2, 1

Symmetrie

Symmetrie > Gittertypen

Gitterzentrierungen



- # nur Zelle 1 beschreibt die Symmetrie vollständig
- # zusätzliche Gitterpunkte nötig
- # u , v und/oder w können auch gleich $1/2$ sein

Symmetrie

Symmetrie > Gittertypen

Bravais-Gitter

Gittertyp	Zentrierung			
triklin	P			
monoklin	P	C		
orthorhombisch	P	C	I	F
tetragonal	P		I	
hexagonal	P			(R)
rhomboedrisch	P			
kubisch	P		I	F