

Seminar zur Vorlesung

# Anorganische Chemie III

Wintersemester 2017/18

Christoph Wölper

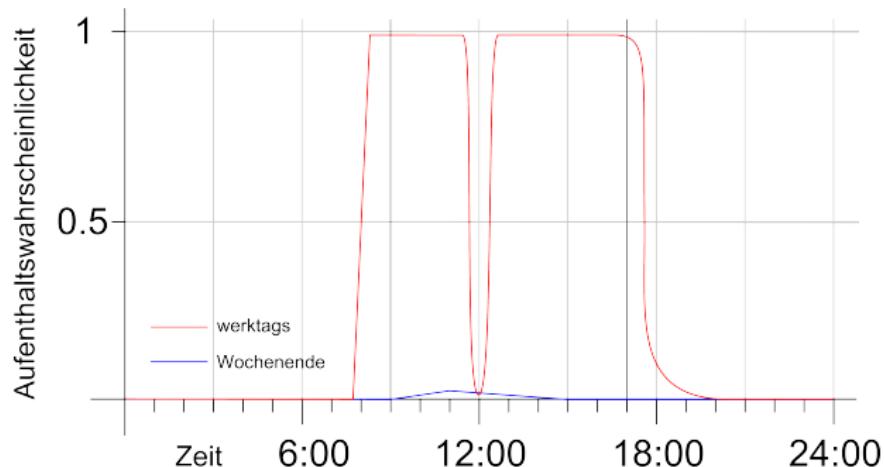
Institut für Anorganische Chemie der Universität Duisburg-Essen

# Sprechzeiten

Christoph Wölper

[christoph.woelper@uni-due.de](mailto:christoph.woelper@uni-due.de) [www.uni-due.de/~adb297b](http://www.uni-due.de/~adb297b)

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



---

# Kristalline Feststoffe

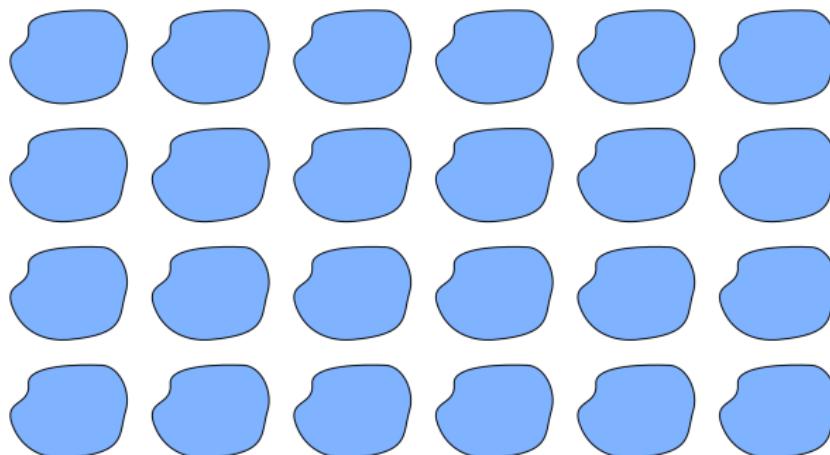
---

Beschreibung von Kristallen

# Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

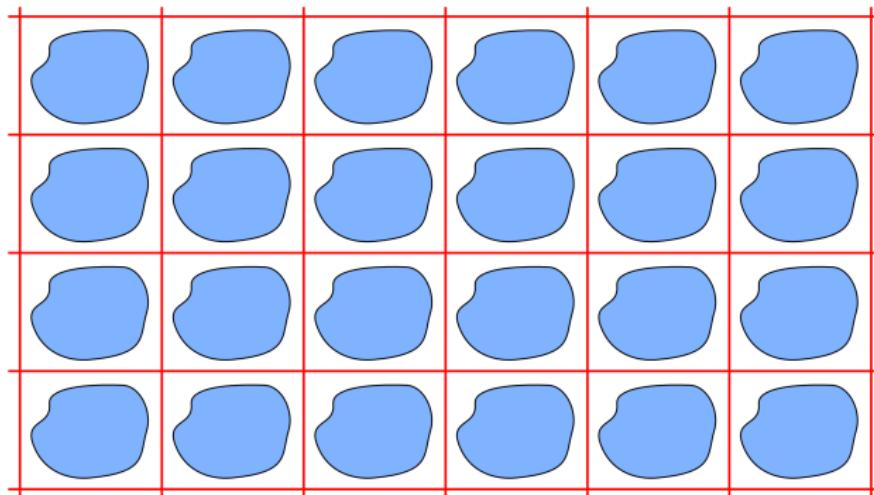
## Periodizität



# Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

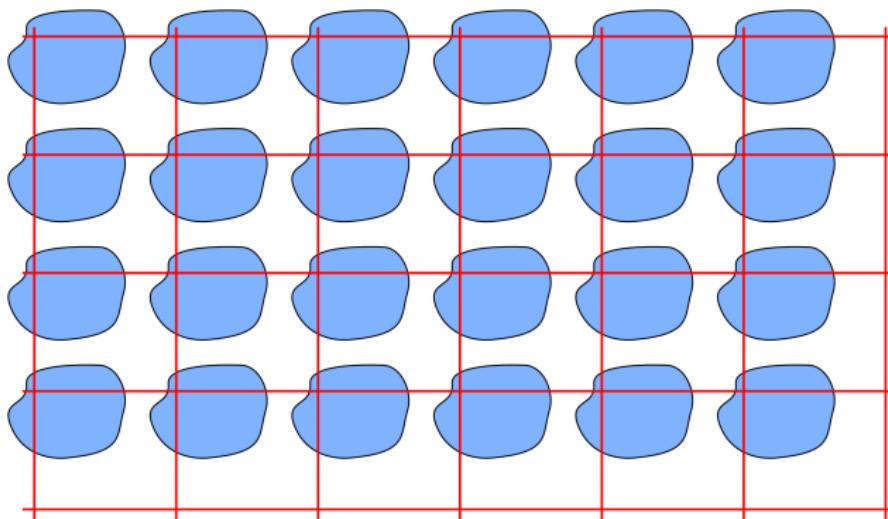
## Periodizität



# Kristalline Feststoffe

Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

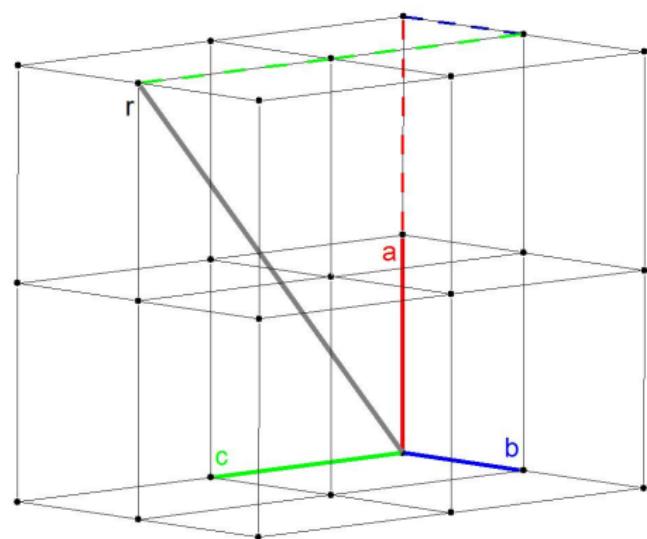
## Periodizität



# Kristalline Feststoffe

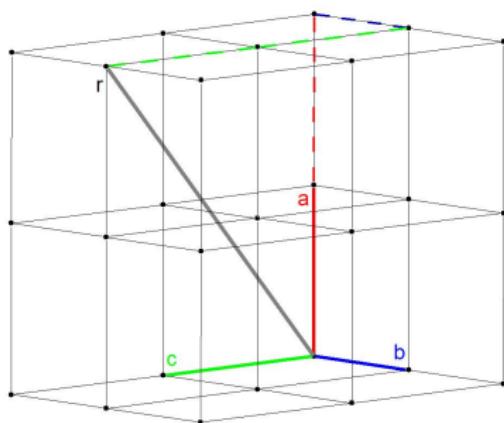
Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen

## Gitter



# Kristalline Feststoffe

## Kristalline Feststoffe > Beschreibung von Kristallen



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

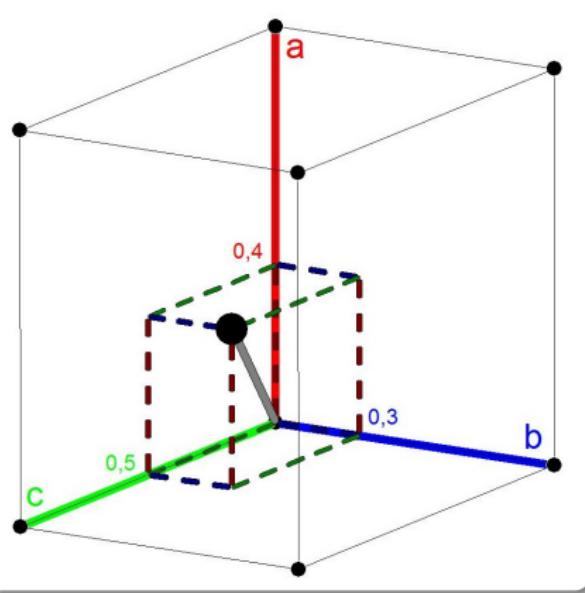
## Gitter

- # 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



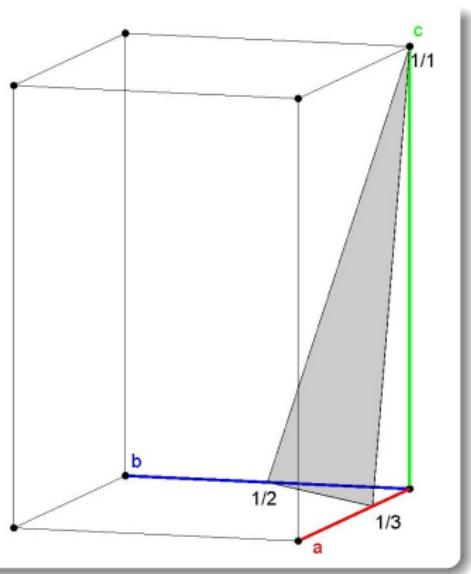
- # Die Basisvektoren können als Koordinatenachsen benutzt werden
- #  $x \ y \ z$  sind rationale Zahlen zwischen 0 und 1
- # Zahlen größer oder kleiner beschreiben Positionen in den Nachbarzellen

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

# 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-Maugin 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
- Gleitspielebenen

---

# Symmetrie

---

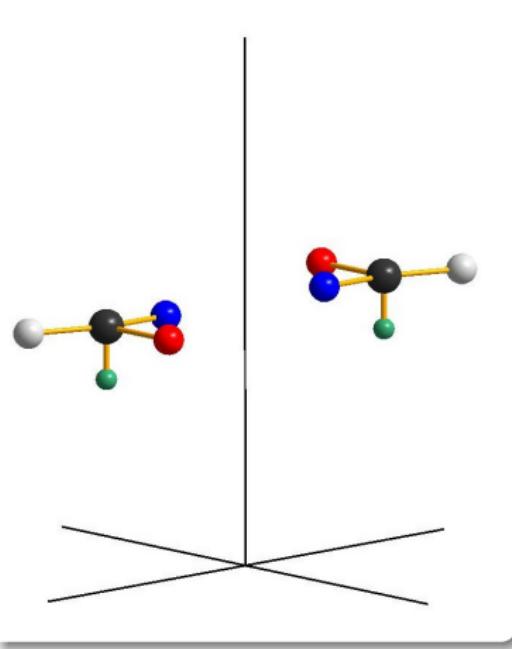
Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

Drehachsen

# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

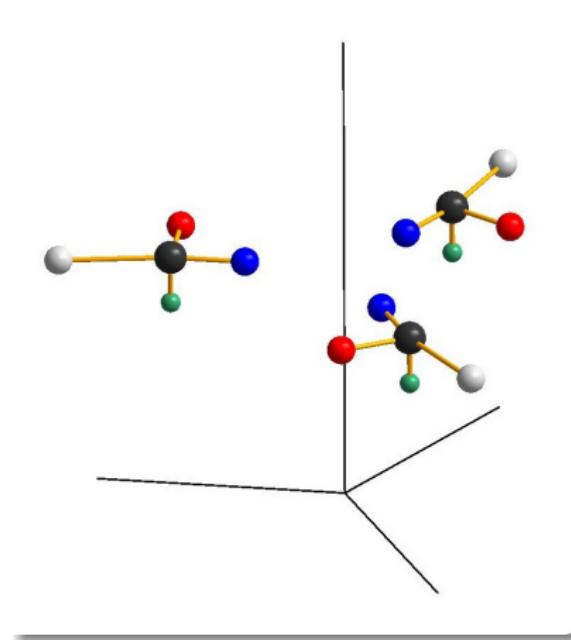
## Drehachsen



# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

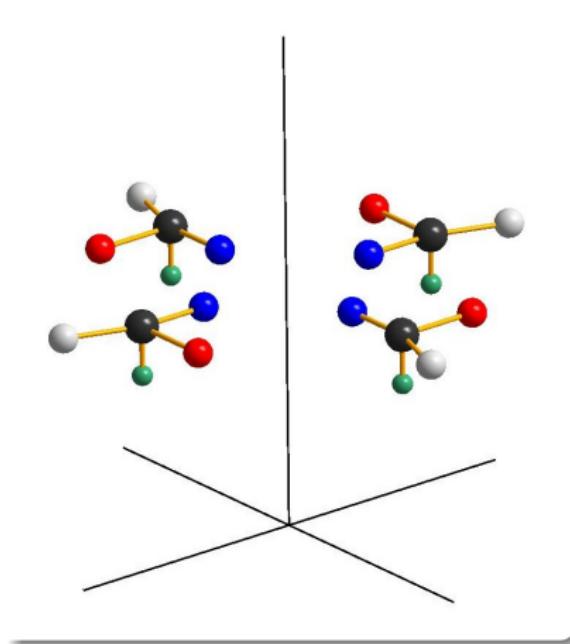
## Drehachsen



# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

## Drehachsen



---

# Symmetrie

---

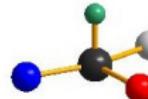
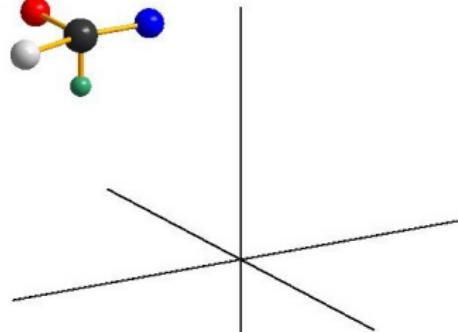
Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

## Inversionsdrehachsen

# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

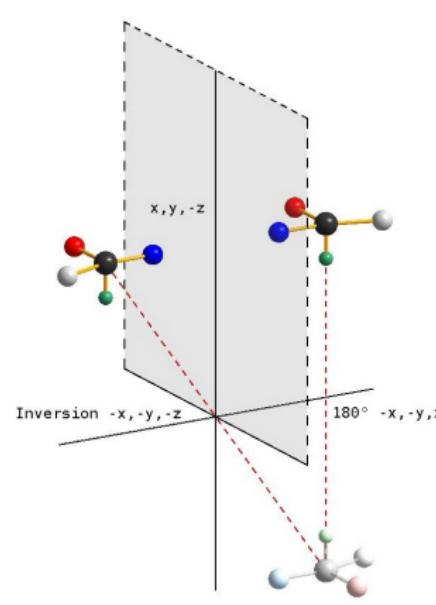
## Inversionsdrehachsen



# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

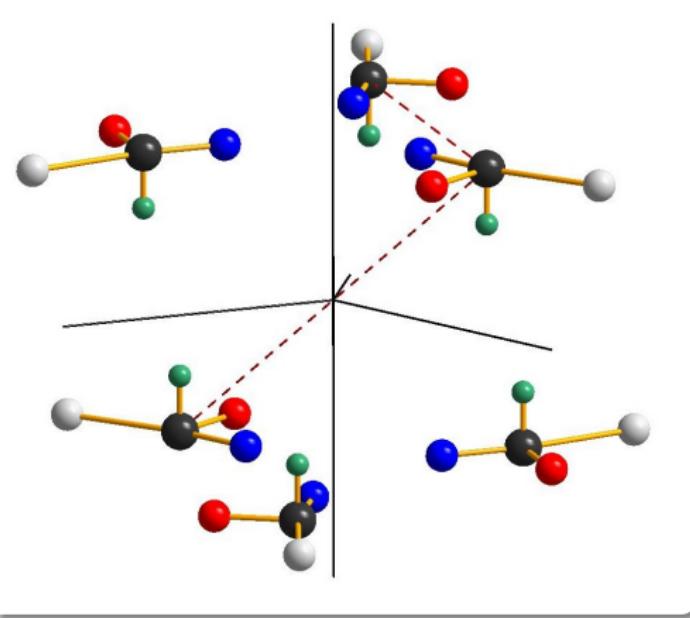
## Inversionsdrehachsen



# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

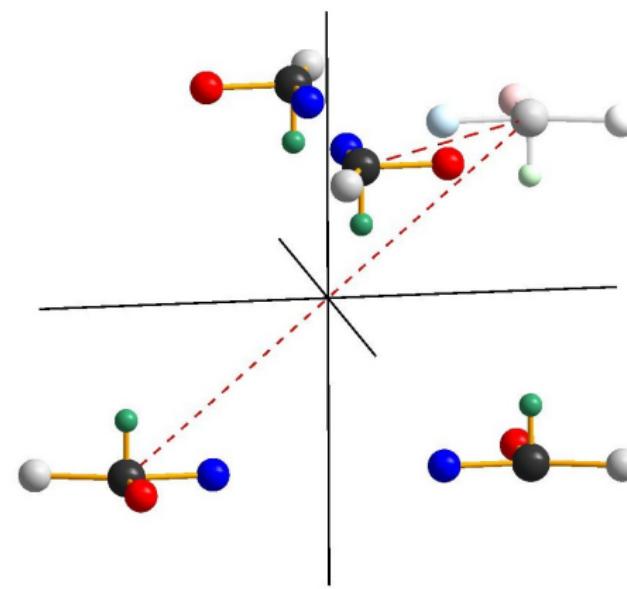
## Inversionsdrehachsen



# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

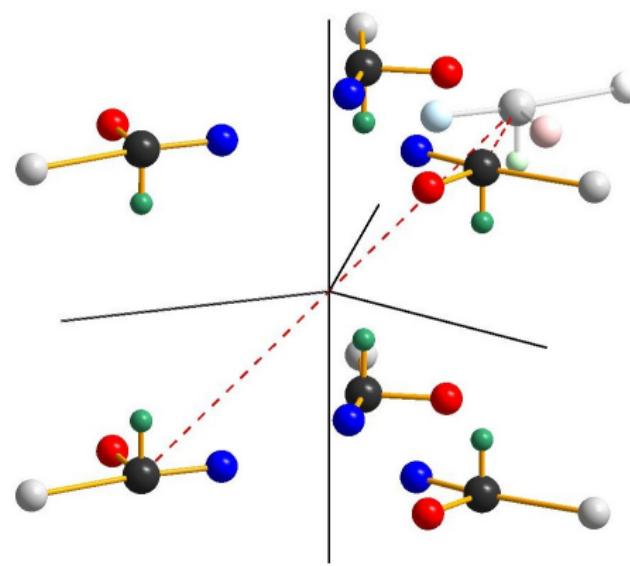
## Inversionsdrehachsen



# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

## Inversionsdrehachsen



---

# Symmetrie

---

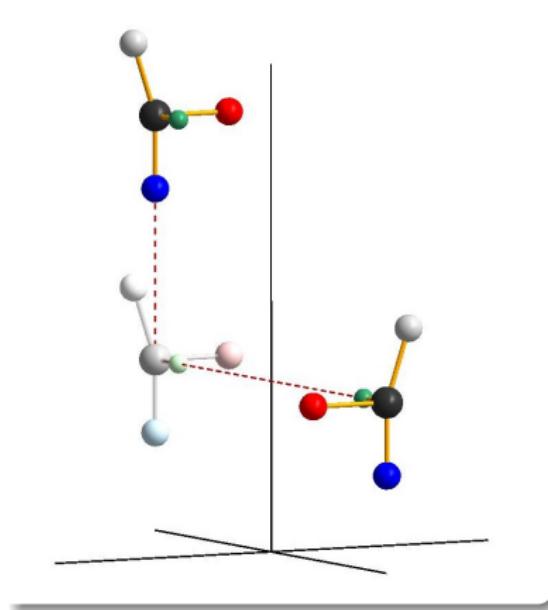
Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

## Schraubenachsen

# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

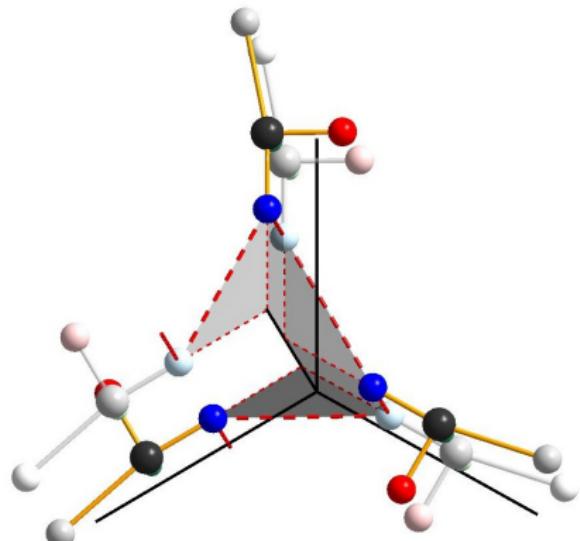
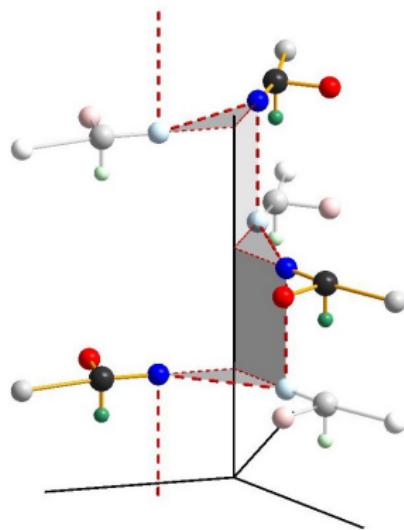
## Schraubenachsen



# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

## Schraubenachsen



---

# Symmetrie

---

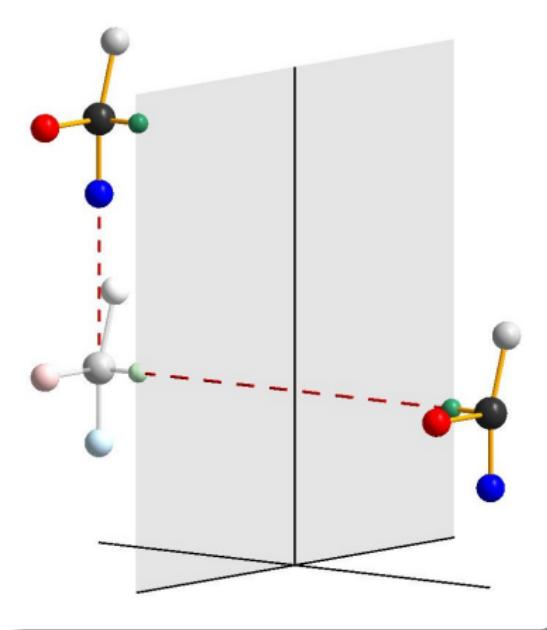
Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin System

Gleitspiegelebenen

# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie > Hermann-Maugin 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 Drehachse
- Händigkeit ändert sich

### # Inversion (Punktsymmetrie) $i$

- Händigkeit ändert sich

### # Spiegelebene $\sigma$

- Händigkeit ändert sich

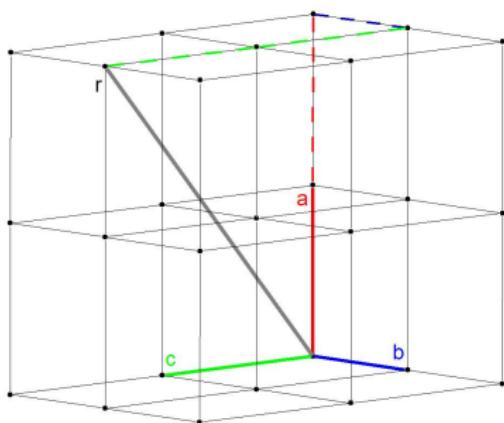
# Symmetrie

Symmetrie > Beschreibung von Symmetrie

## Inversionsdreh- vs. Drehspiegelachsen

Hermann-Maugin	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

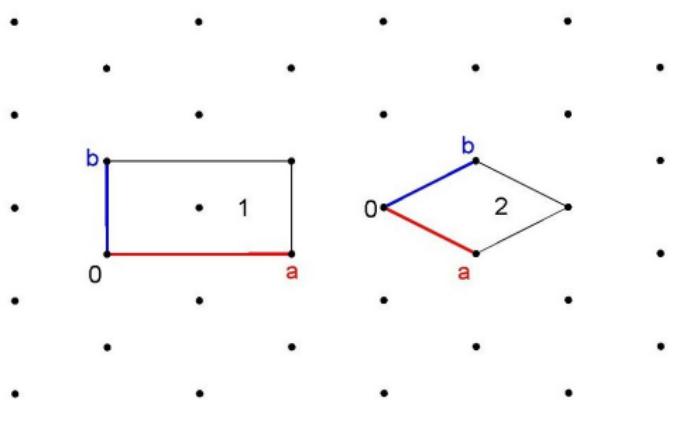
## Gittertypen und Symmetrie

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