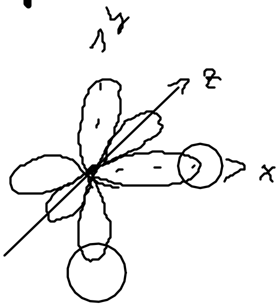
1.6 Wasserstoff-Brückenbindung

Kommt vor, wenn H an ein stark elektronegatives Atom gebunden wird (z.B. F, O, N) ⇒ ionogener Anteil der Bindung
⇒ Anziehung zwischen "H^+-Ion" und Nachbarmolekül

Beispiel H_2O



$H \diagdown O - H \cdots O \diagup H \diagdown H$

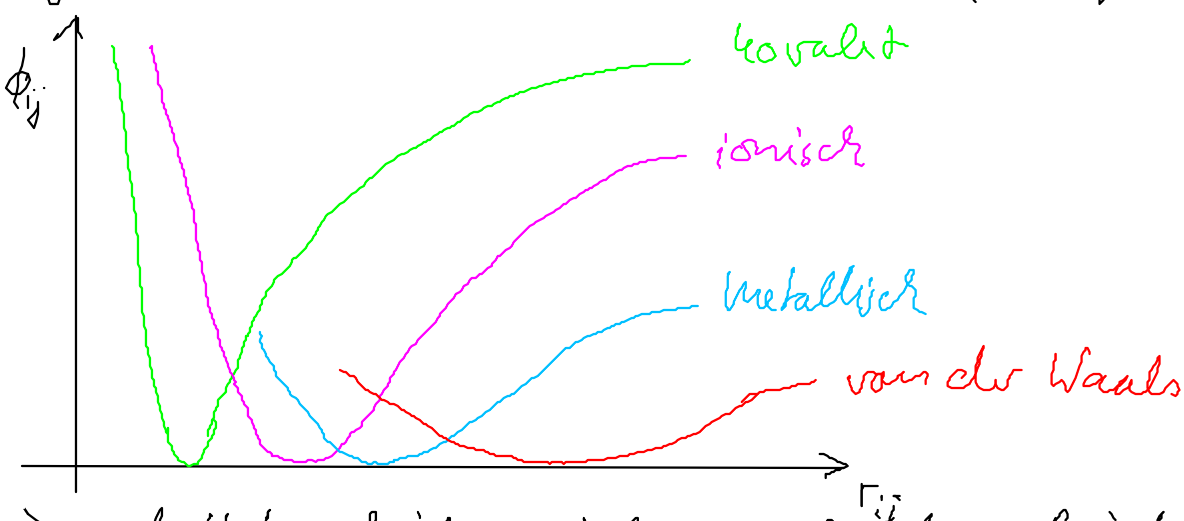
„fast nacktes" Proton bindet O vom benachbarten H_2O über elektrostatische Anziehung der Elektronen

Wasserstoff-Brückenbindung ist für die Anomalie des Wassers zuständig. Festkörperphysik: Eis interessant

H-Brückenb.: – häufig in organischen Substanzen
z.B. DNA-Doppelhelix

1.7 Zusammenfassung (Bindungstypen)

- Bindungskräfte sind elektrostatischer Natur
- Bindungsenergie U_b variiert um 2 Größenordnungen
- Je kleiner U_b, desto flacher die Potentialkurve, desto größer i.A. der Atomabstand



⇒ große Unterschiede zwischen verschiedenen Bindungstypen, z.B. makroskopische Härte, elastische Eigenschaften

⇒ hier nur idealisierte Bindungstypen vorgestellt, in der Natur häufig Mischformen.

2. Kristallstrukturen

Chem. Bindung von Atomen oder Ionen ergibt wohldef. Abstände der Nachbarn, diese werden bestimmt durch Minimum der Gesamtenergie. Für Festkörper (aus gleichen Atomen) wird Min erreicht, wenn die Umgebung für jedes Atom gleich ist.

⇒ periodische Struktur, Kristall

Bem: Amorphe Festkörper: Energie größer als beim entspr. Kristall „metastabiler Zustand"

- Auch im Kristall gibt es Abweichungen von der idealen periodischen Struktur: Oberflächen, Korngrenzen in polykristallinen Materialien, Verunreinigungen (beste Kristalle: $10^{12} \frac{\text{Fremdatome}}{cm^3}$ bei $\sim 10^{23} \frac{At}{cm^3}$ - Si)
  „Gitterfehler" (Leerstellen, Zwischengitteratome, Versetzungen)

<u>Hier:</u> idealer Kristall und betrachten geometrische, insbesondere Symmetrie-Eigenschaften ⇒ „Kristallographie"

2.1 Punktgitter, Elementarzelle, Basis

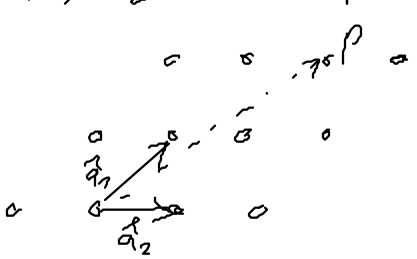
Def: Ein 3d „<u>Bravais"-Gitter</u> besteht aus allen Punkten, die durch die Ortsvektoren $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ geg. sind. die <u>fundamentalen Gittervektoren</u> $\vec{a}_i$ sind lin. unabh.

$n_i = 1, 2, 3, \ldots$

$\vec{R}$: <u>Gittervektoren</u>

Sprechweise: Die Vektoren $\vec{a}_i$ "spannen" das Gitter auf (Punktgitter, Translationsgitter)

Beispiel: 2-dim Translationsgitter mit fundament. Gittervektor $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ $\quad \vec{R}_p = 2\vec{a}_1 + \vec{a}_2$



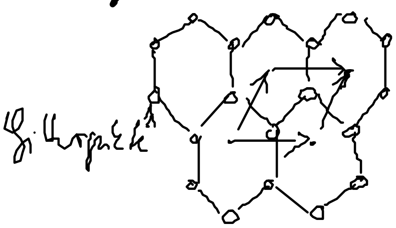
Das Gitter ist durch die $\vec{a}_i$ eindeutig definiert unabh. von der Wahl des Ursprungs.

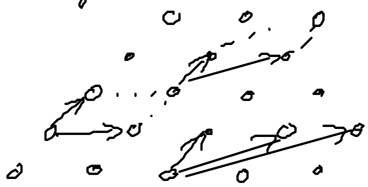
⇒ wichtige Eigenschaft: Translationssymetrie

Translation um $\vec{R}$ überführt Gitter in sich selbst.

⇒ alle Gitterpunkte sind äquivalent, haben identische Umgebung (Anordnung und Orientierung)

Beispiel: (Wabengitter) Für ein geg. Gitter ist die Wahl der fundament. Gittervektoren nicht eindeutig.





(2-d Gitter mit verschiedenen Gittervektoren)

Aber: Für viele häufig vorkommende Gittertypen durch Konvention festgelegt.
Man kann jedem Gitterpunkt ein Volumen zuordnen, sodass bei periodischer Wdh. dieses Volumen das Gitter lückenlos ausfüllt.

Def: Die Zelle die dieses Einheitsvolumen V_E einschließt heißt primitive Einheitszelle oder Elementarzelle

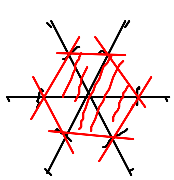
Beispiel: 2-dim Gitter

mögl. Wahl der Einheitszelle: Parallelepiped aus den $\vec{a}_i$

$$\Rightarrow V_E = |a_1 \cdot (a_2 \times a_3)|$$

Für primitive Einheitszellen ist V_E unabhängig von der Wahl der Zelle, V_E enthält dann genau einen Gitterpunkt.
Eine besonders häufig benutzte prim. Einheitszelle ist die Wigner-Seitz-Zelle (WS-Zelle)

Die WS-Zelle ist der Teil des Raumes, der dem geg. Gitterpunkt näher ist als allen anderen.



① Verbindungslinien zu Gitterpunkten
② Mittelsenkrechte der Verbind.
③ kleinstes eingeschl. Volumen ist WS-Zelle

Bisher: Gitter kennengelernt als abstraktes Gebilde aus math. Punkten

Wir wollen Kristalle beschreiben, d.h. physikal. Struktur aus identischen Bausteinen (Atome, Moleküle, Ionen). Dazu braucht man

① das Gitter

② Anordnung der Bausteine innerhalb der Einheitszelle "Basis"

$$\boxed{\text{Kristallstruktur} = \text{Gitter} + \text{Basis}}$$

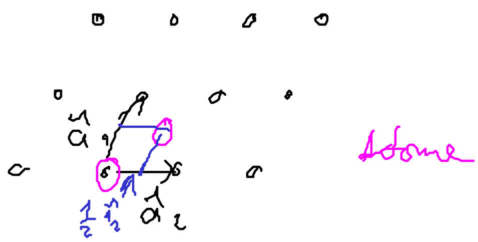
Beispiel: ① 2-dim Gitter + Basis

② Wabengitter

Zur Beschreibung der Kristallstruktur braucht man außer den fundam. Gittervektoren $\vec{a}_i$ noch weitere Lageparameter, beschreibt Lage der Atome in Einheitszelle V_E

$$\vec{r}_\alpha = n_\alpha \vec{a}_1 + \mu_\alpha \vec{a}_2 + \nu_\alpha \vec{a}_3 \qquad 0 \le n_\alpha, \mu_\alpha, \nu_\alpha \le 1$$

$\alpha = 1, \dots, p$ (Atome)



$$\vec{r}_1 = 0$$

$$\vec{r}_2 = \frac{1}{2}\vec{a}_1 + \frac{1}{2}\vec{a}_2 \qquad \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad (n_\alpha, \mu_\alpha, \nu_\alpha)$$

Es gibt unendlich viele Gitter: $\vec{a}_i$ sind beliebig, d.h. Längen und Winkel sind beliebig. Klassifizierung nach Symmetrien.

Symmetrieoperationen

- Translation
- Rotation (Zähligkeit der Achse 1, 2, 3, 4, 6)