

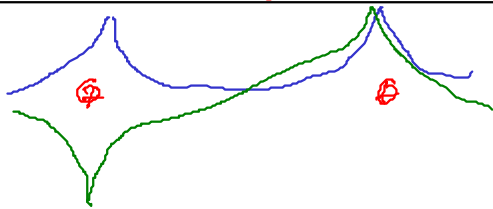
repetition

van-der-Waals : neutral, non-polar atoms / molecules  
 $\frac{1}{r^6}$

ion binding : electron transfer to atom with high electron affinity  $\Rightarrow$  Coulomb attraction

covalent binding :

1.4 kovalente Bindung



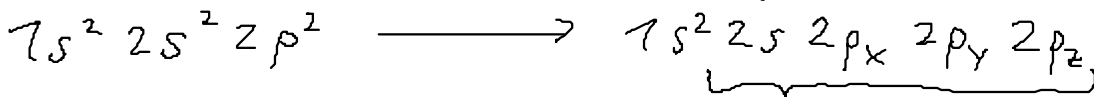
symmetrisch  $\oplus \Rightarrow$  Energieabsenkung

$H^+$

antisymmetrisch  $\ominus \Rightarrow$  Energieerhöhung

$\Rightarrow$  symmetrische Fall energetisch günstiger

Hybrid - Wellenfkt. :

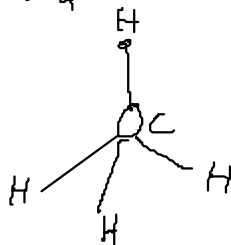


Hybridorbitale

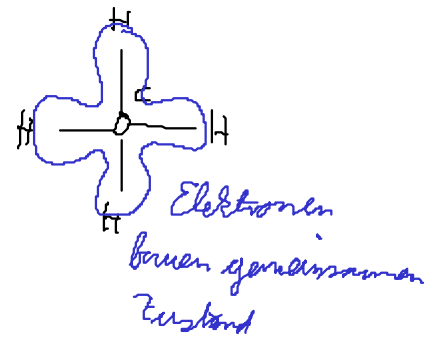
$4 \cdot sp^3 \psi \propto Y_{10} + Y_{1-1}$

Beispiel Methan  $CH_4$

$4 \times sp^3$

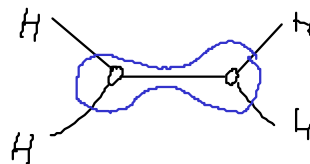


2D  $\rightarrow$



ODER Überlagerung zu  $2p_z + 3sp^2$

Beispiel Ethan  $C_2H_4$



Kristalle ( (Diamant) } starke kovalente Bindung  
 Si, Ge,  
 aber auch organische:  $A^{III} B^{IV}$  wie  $3n Sb$ ,  $6a As$

Graphit:  $p_z + 3 sp^2$   
 aus Schichten (Graphen), die über  $p_z$ -Orbitale  
 schwach aneinander gebunden sind  
 (Graphen 2004 entdeckt, galt als instabil)

3D Graphit      2D Graphen      1D Nanotubes  
 0D Fullerene

### 1.5 metallische Bindung

Valenzelektronen sind delokalisiert  
 ↓  
 Elektronengas

$Li$ -Ionen  $r_i \sim 0,6 \text{ \AA}$

$Li$ -Kristall  $R_0 \approx 3 \text{ \AA}$

$$Cu: \left. \frac{R_0}{r_i} \right|_{T=0K} \sim 1,33$$

$$Au: \left. \frac{R_0}{r_i} \right| \approx 1,05$$

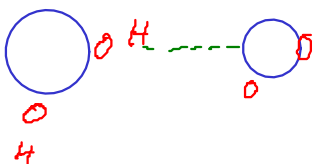
### 1.6 Wasserstoffbrückenbindung

H:  $U_i \approx 13,6 \text{ eV}$       Na:  $U_i \approx 5,1 \text{ eV}$

*Ionisierungsenergie*

H → kovalente Bindung nur mit einem Nachbarn

Bsp  $H_2O$



$H F_2^-$



wichtig z.B. für Eiskristalle  
 DNA (dynamische Bindung)  
 Ammoniak  $NH_3$

2 Struktur der Kristalle

2.1 Symmetrie

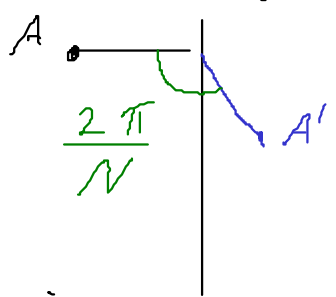
Mathem. - Gruppentheorie

Transformation, unter denen das System unverändert erscheint

2.1.1 Punktgruppen

Punktgruppen haben mind. einen Fixpunkt

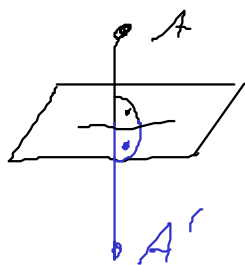
z.B. Drehung um eine Achse



$N = 1, 2, 3, 4, 6$

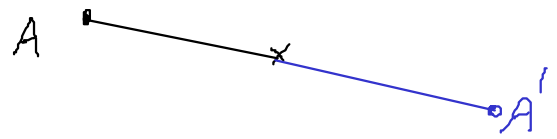
Spiegelung an Ebene

$\sigma$



Spiegelung an einem Punkt = inversion

$\bar{\sigma}$

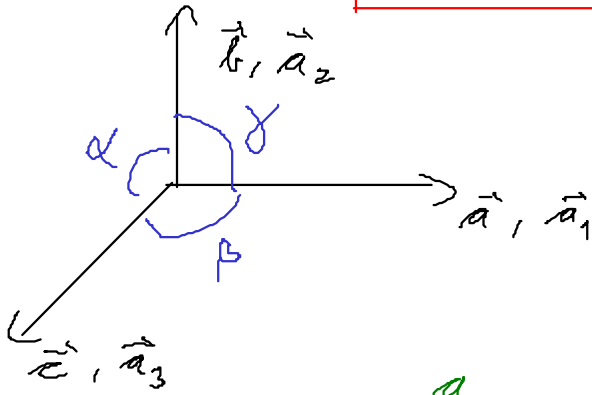


und Kombinationen wie Spiegelung & Drehung

# 2.1.2 Raumgruppen (translativ Symmetrie)

## 2-2 Kristallsysteme

Kristall = Gitter + Basis

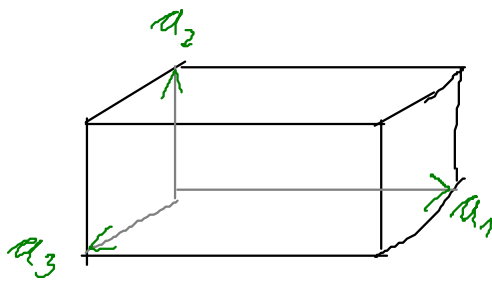


$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R})$$

Basis
Gitter

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

Gitter-Basisvektoren



Elementarzelle

primitive Elementarzelle  $\Leftrightarrow$  kleinstmögliche Elem. Zelle

in 3D	Bravais-Gitter Basisobjekt Kugelgruppen	Kristallstrukturen bel. Basisobjekt
Punktgruppen	7 Kristallsyst.	32
Raumgruppen	14 Bravais-Gitter	230 Raumgruppen
in 2D	5	17

(Bilder zu den Gruppen / Gittern)