

# Festkörper- und Materialchemie

Jun.-Prof. Dr. Markus Suta  
*Anorganische Photoaktive Materialien*  
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

23.10.2025



[www.photoaktivematerialien.hhu.de](http://www.photoaktivematerialien.hhu.de)



[markus.suta@hhu.de](mailto:markus.suta@hhu.de)



[@markussuta.bsky.social](https://www.bsky.social/markussuta)

## Lernziele für heute:

- Kugelpackungskonzept und Lücken zum Aufbau einfacher Strukturen
- Nächste Woche: Einfache Strukturtypen in der Anorganischen Chemie

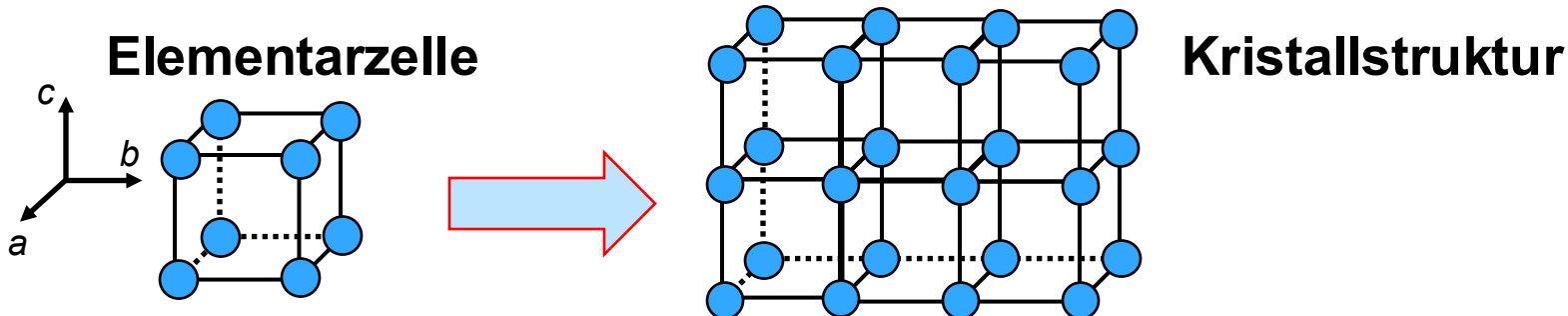
# Wiederholung: Was ist ein Kristall und eine Kristallstruktur?

Kristalle: Dreidimensionale Festkörper, deren Bausteine sich in allen drei Raumrichtungen in bestimmter Weise wiederholen

Kristalle weisen also eine **Periodizität** in 3D auf!

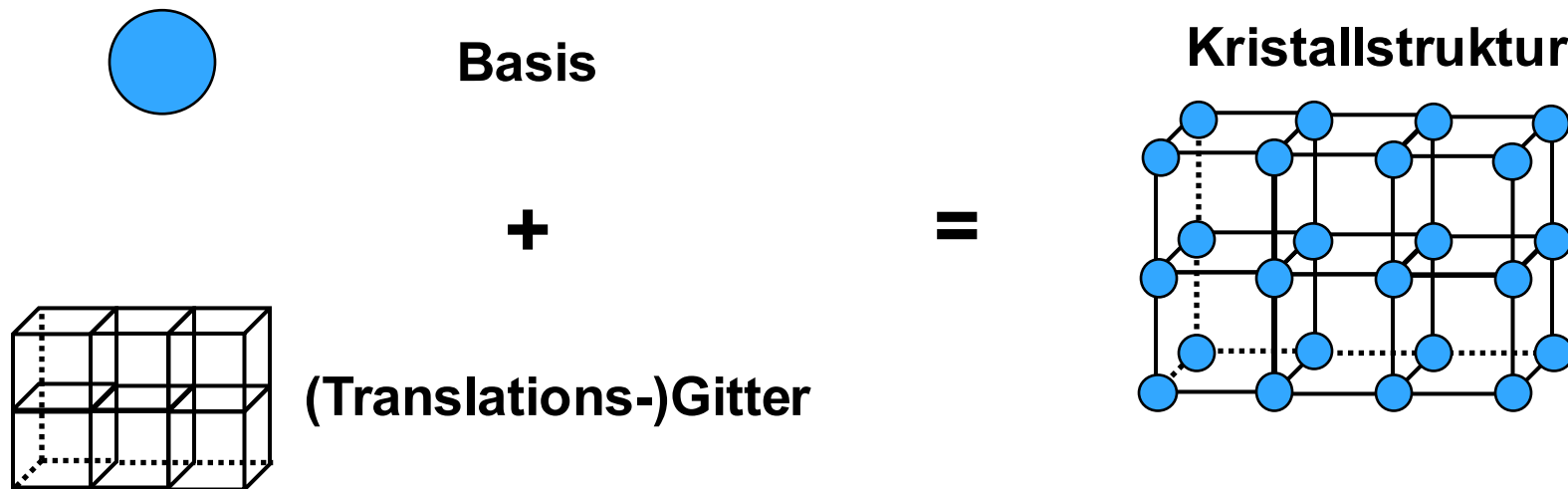
Jeder kristalline Festkörper kann aus einer kleinsten periodischen Baueinheit konstruiert werden, die alle nötigen Symmetrieinformationen enthält.

Diese Einheit wird **Elementarzelle** genannt.



# Wiederholung: Was genau ist eine Kristallstruktur?

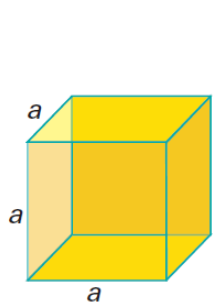
Also symbolisch:



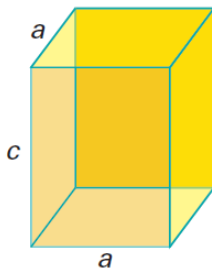
Wichtig: **Ein Gitter ist nur ein Gedankenkonstrukt!** Kein Kristall enthält wirklich ein Gitter!

# Wiederholung: Sieben Metriken im 3D

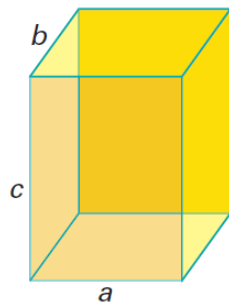
Für die Kristallsysteme gibt es ein paar **Restriktionen** an die **Metrik**:



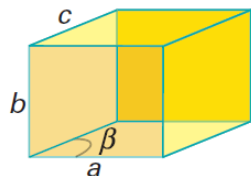
kubisch (**c**)



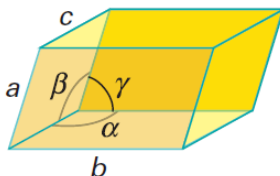
tetragonal (**t**)



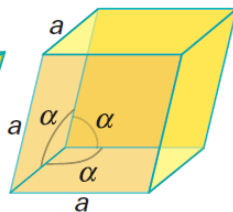
orthorhombisch (**o**)



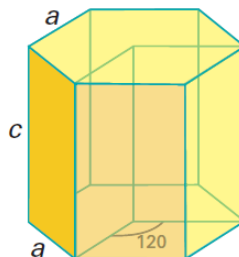
monoklin (**m**)



triklin (**a**)



rhomboedrisch (**h**)



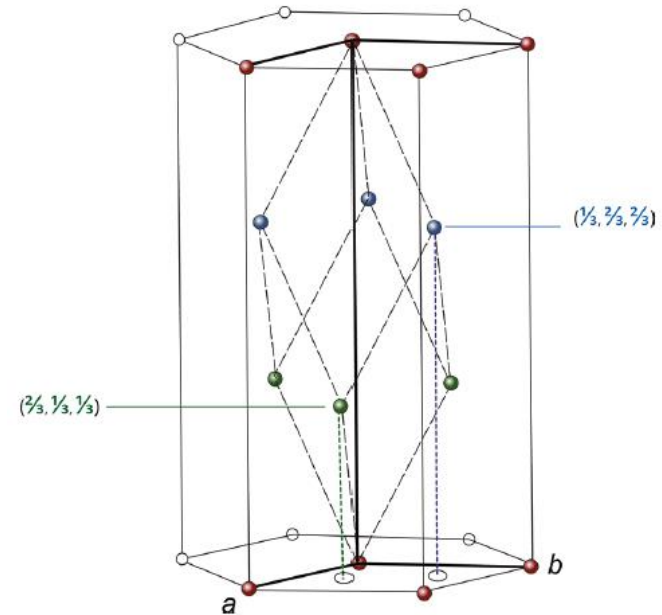
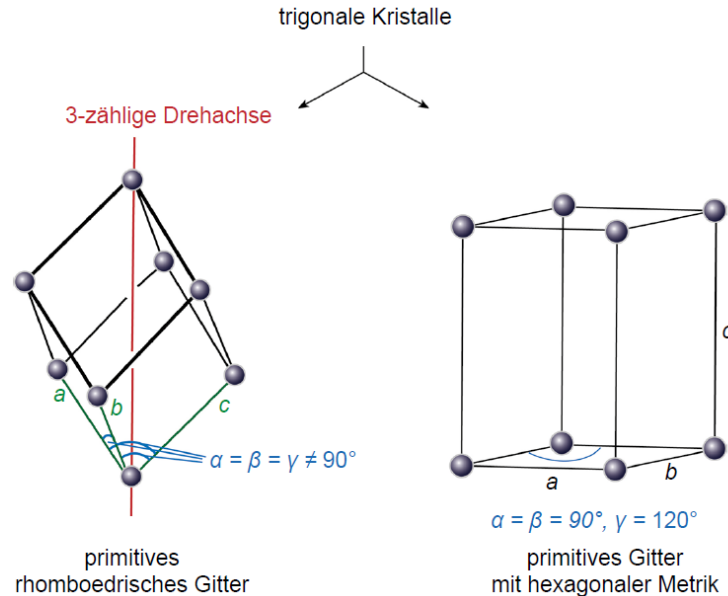
hexagonal (**h**)

Die Namen dieser sieben Metriken **gut merken!**

Es gibt eine Konvention für die Abkürzung dieser Systeme (in Klammern mit aufgeführt).

Rhomboedrische **Zellen** treten in **trigonalen Systemen** auf!

## Wiederholung: Der Sonderfall eines trigonalen Kristallsystems

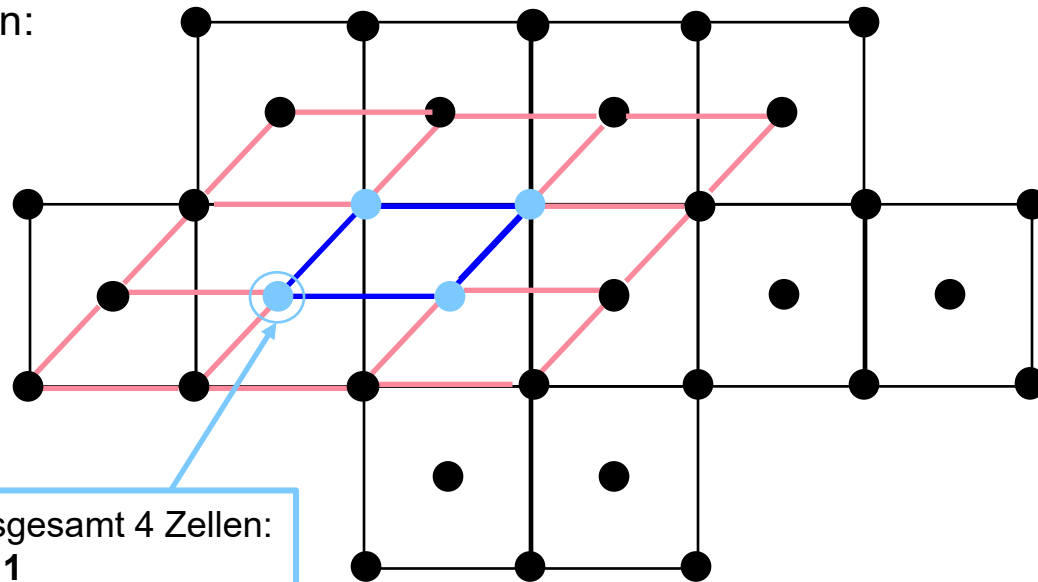
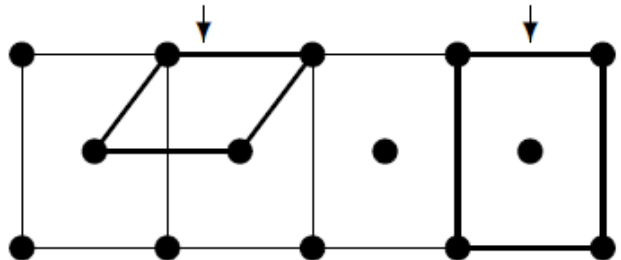


**Salopp:** Hat eine **Struktur** sechszählige Symmetrie, dann auch automatisch dreizählige Symmetrie, aber nicht umgekehrt!

# Wiederholung: Primitive vs. zentrierte Elementarzellen

Es gibt Unterscheidungen bei den Zellen:

primitive Zelle      zentrierte Zelle



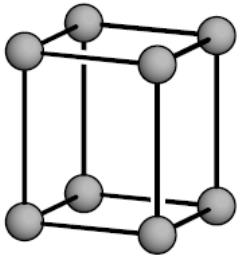
Jeder Punkt gehört zu insgesamt 4 Zellen:  
 $4 \times 1/4 = 1$

Eine **primitive Elementarzelle** ist die kleinste Zelle mit exakt einem **Basismotiv pro Zelle!**

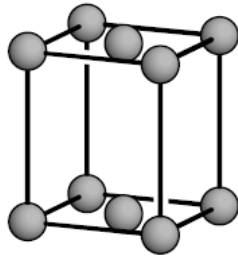
# Wiederholung: Arten der Zentrierung im 3D

In den sieben Kristallsystemen gibt es folgende Möglichkeiten der Zentrierung:

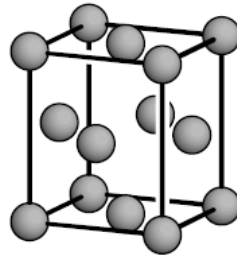
Separat betrachtet wird:



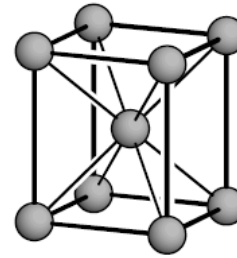
primitiv  
*P*



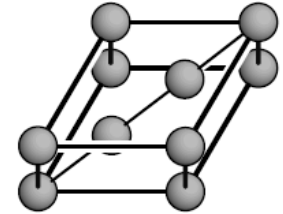
basis-  
zentriert  
*C* (od. *A*, *B*)



flächen-  
zentriert  
*F*



innen-  
zentriert  
*I*



rhomboedrisch  
*R*



# 1. Kristallstrukturen und ihre Beschreibung

Lehrbuchempfehlungen:



Springer Verlag, Kapitel 2

Beide auch als e-Book aus  
der ULB erhältlich...

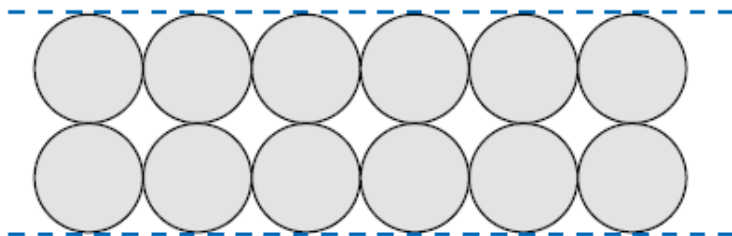


Vieweg & Teubner Verlag, Kapitel 2

# Näherung: Atome sind „harte“ Kugeln

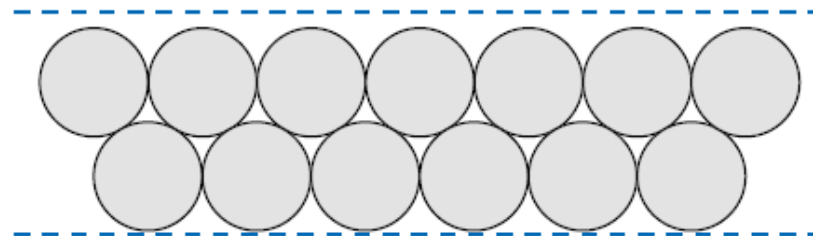
Atome können erstmal wie **harte Kugeln** betrachtet werden: Keine gerichteten Bindungen, bloß Aneinanderreihung von Atomen!

Primitive Packung, weniger raumerfüllend



**a**

Dichteste Packung, raumerfüllend

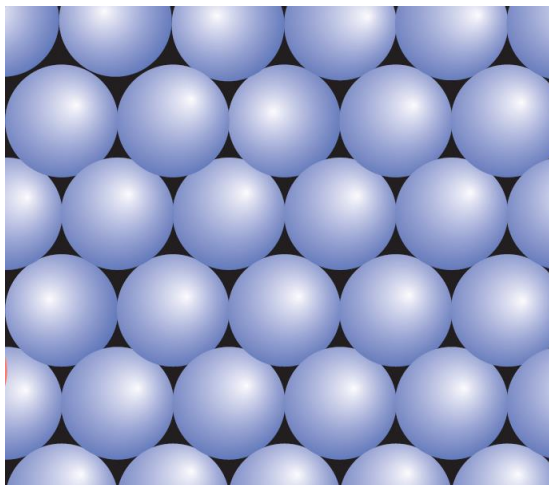


**b**

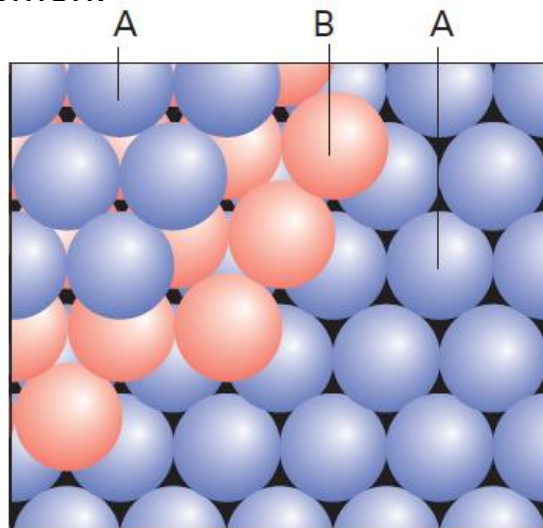
Idee: Bei ungerichteten Bindungen werden die Atome möglichst dicht aneinander packen!

# Näherung: Atome sind „harte“ Kugeln

Atome können erstmal wie **harte Kugeln** betrachtet werden: Keine gerichteten Bindungen, bloß Aneinanderreihung von Atomen!

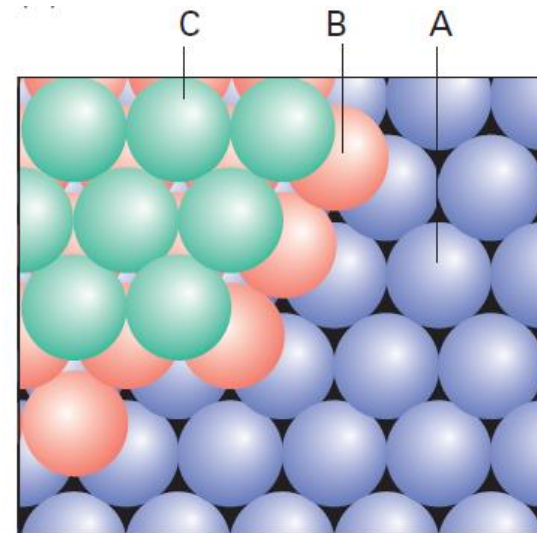


Eine Schicht Kugeln



(a)

Hexagonal dichteste Packung



(b)

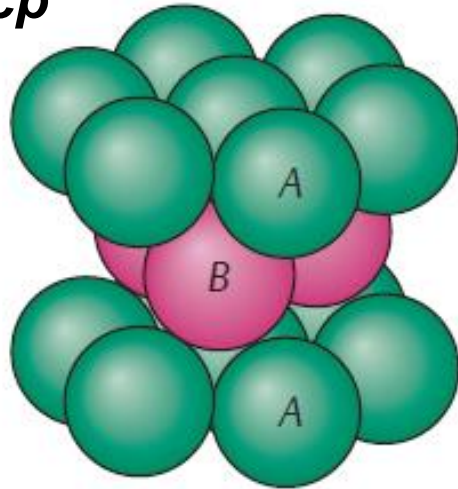
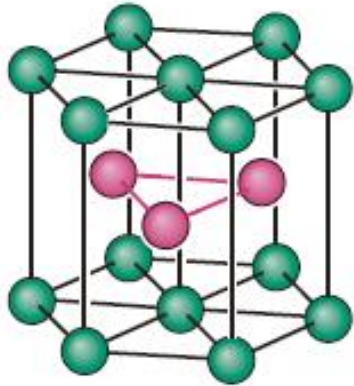
Kubisch dichteste Packung

# Näherung: Atome sind „harte“ Kugeln

Atome können erstmal wie **harte Kugeln** betrachtet werden: Festkörper werden durch die Packung solcher Kugeln gebildet!

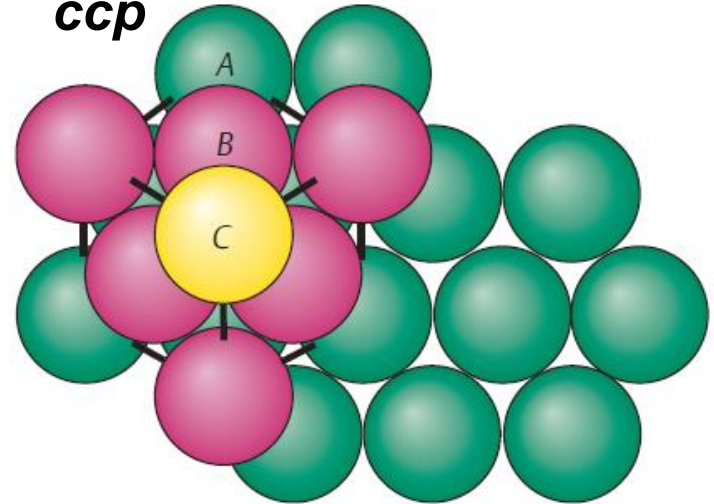
Hexagonal dichteste Packung: **ABABAB...**

*hcp*



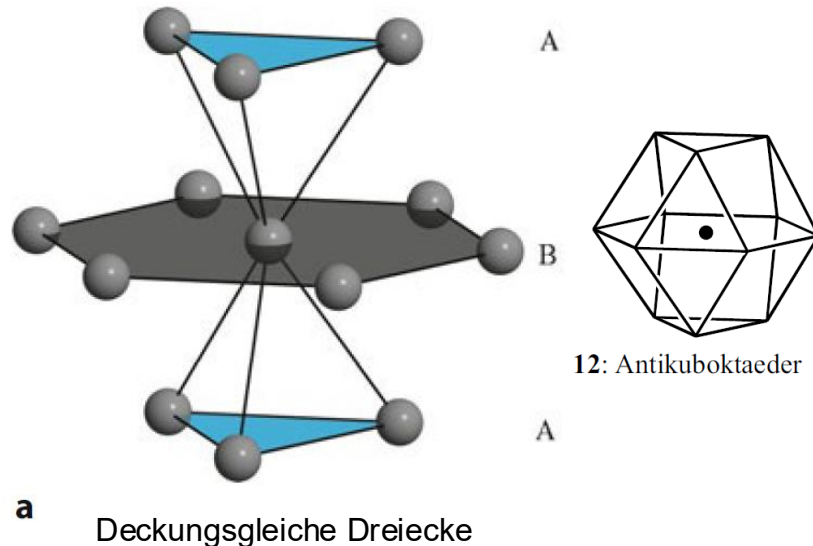
Kubisch dichteste Packung: **ABCABC...**

*ccp*



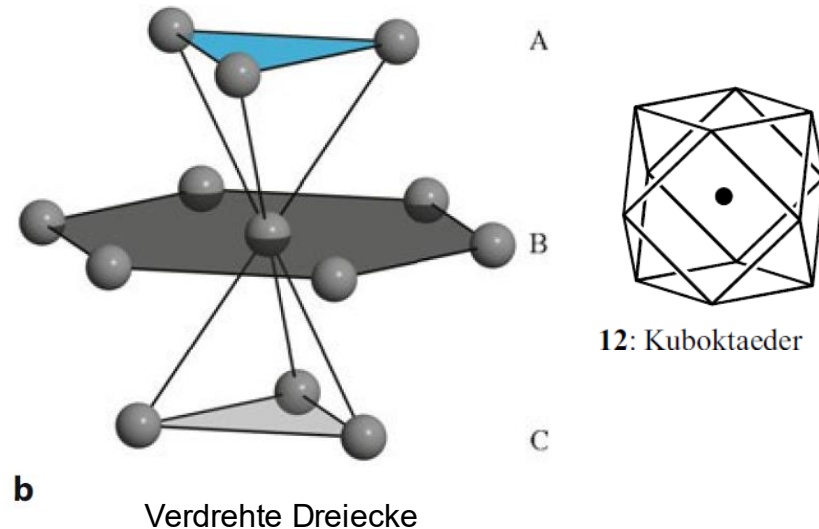
# Koordination in einer *hcp* und *ccp*

Hexagonal dichteste Packung (**hcp**): **ABABAB...**



Koordinationspolyeder: **Antikuboktaeder**

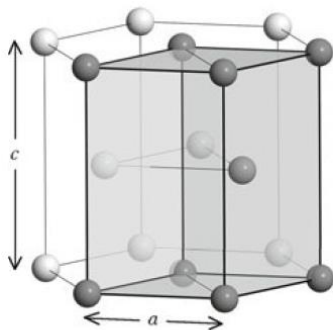
Kubisch dichteste Packung (**ccp**): **ABCABC...**



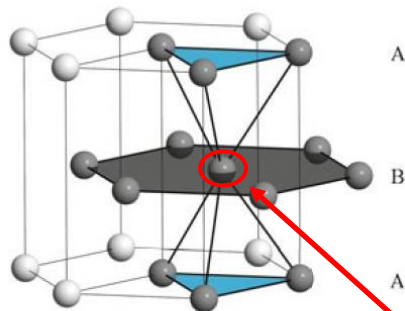
Koordinationspolyeder: **Kuboktaeder**

# Wie ist das mit Elementarzellen vereinbar?

Hexagonal dichteste Packung: **ABABAB...**

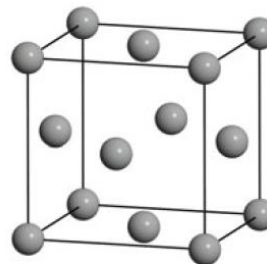


a

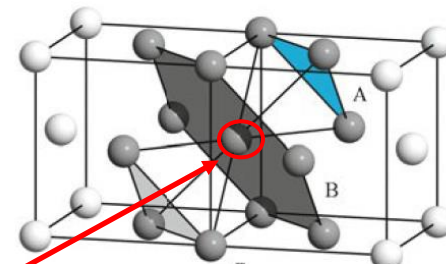


b

Kubisch dichteste Packung: **ABCABC...**



a



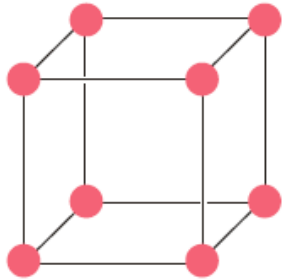
b

Koordinationszahl 12

*hcp*: hexagonal primitive Zelle

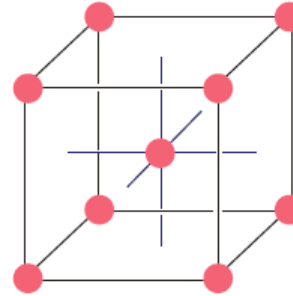
*ccp*: Kubisch flächenzentrierte Zelle

# Kubische Packungsmuster



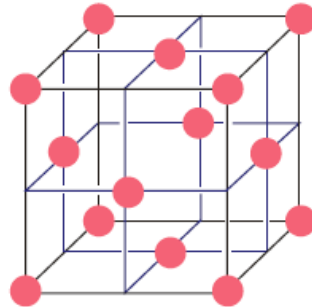
kubisch - primitiv

z.B.  $\alpha$ -Po



kubisch - innenzentriert

z.B. W



kubisch - flächenzentriert

z.B. Cu



# Welche Metalle folgen diesen Packungen?

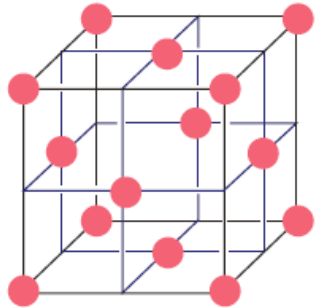
Tab. 12.2 Kristallstrukturtypen von Metallen bei Normbedingungen.

Li <i>i</i>	Be <i>h</i>													
Na <i>i</i>	Mg <i>h</i>											Al <i>c</i>		
K <i>i</i>	Ca <i>c</i>	Sc <i>h</i>	Ti <i>h</i>	V <i>i</i>	Cr <i>i</i>	Mn $\times$	Fe <i>i</i>	Co <i>h</i>	Ni <i>c</i>	Cu <i>c</i>	Zn <i>h</i> *	Ga $\times$		
Rb <i>i</i>	Sr <i>c</i>	Y <i>h</i>	Zr <i>h</i>	Nb <i>i</i>	Mo <i>i</i>	Tc <i>h</i>	Ru <i>h</i>	Rh <i>c</i>	Pd <i>c</i>	Ag <i>c</i>	Cd <i>h</i> *	In <i>c</i> *	Sn $\times$	
Cs <i>i</i>	Ba <i>i</i>		Hf <i>h</i>	Ta <i>i</i>	W <i>i</i>	Re <i>h</i>	Os <i>h</i>	Ir <i>c</i>	Pt <i>c</i>	Au <i>c</i>	Hg <i>c</i> *	Tl <i>h</i>	Pb <i>c</i>	
Fr <i>i</i>	Ra <i>i</i>		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	

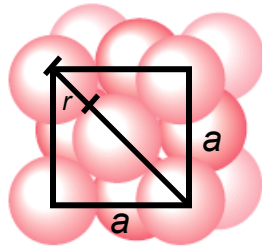
- h* = hexagonal-dichteste Kugelpackung
- c* = kubisch-dichteste Kugelpackung
- hc, hhc* = dichteste Kugelpackungen mit anderen Stapelfolgen (z.B. ABAC...)
- i* = kubisch-innenzentrierte Kugelpackung
- $\times$  = eigener Strukturtyp
- \* = etwas verzerrt

La <i>hc</i>	Ce <i>c</i>	Pr <i>hc</i>	Nd <i>hc</i>	Pm <i>hc</i>	Sm <i>hhc</i>	Eu <i>i</i>	Gd <i>h</i>	Tb <i>h</i>	Dy <i>h</i>	Ho <i>h</i>	Er <i>h</i>	Tm <i>h</i>	Yb <i>c</i>	Lu <i>h</i>
Ac <i>c</i>	Th <i>c</i>	Pa $\times$	U $\times$	Np $\times$	Pu $\times$	Am <i>hc</i>	Cm <i>hc</i>	Bk <i>c, hc</i>	Cf <i>hc</i>	Es <i>c</i>	Fm <i>c</i>	Md	No	Lr





kubisch - flächenzentriert



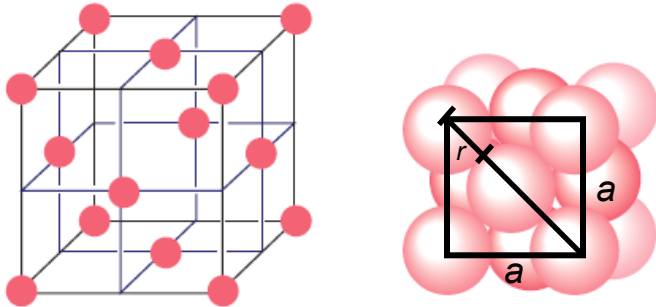
Jede dichteste Packung ist **nicht ideal** – es gibt einen gewissen ungenutzten Raum:

In der *ccp*:  $4r = \sqrt{2}a$

Das Volumen der Elementarzelle ist dann

$$V_{EZ} = a^3 = \left(\frac{4}{\sqrt{2}}\right)^3 r^3$$

Und die Elementarzelle enthält insgesamt  $Z = 8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$  effektive Basiseinheiten, also  $Z = 4$  Kugeln!



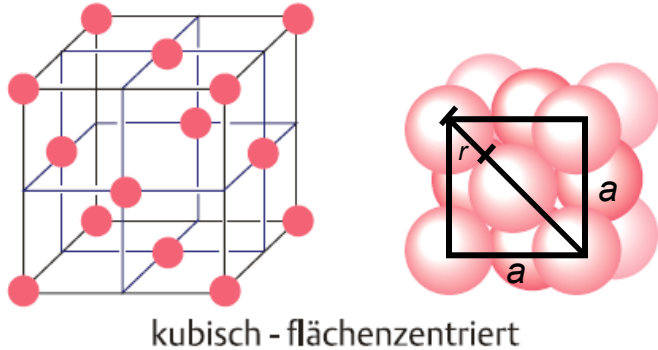
kubisch - flächenzentriert

Die Packungsdichte  $p$  ist gegeben als:

$$p = \frac{Z \cdot V_{\text{Kugel}}}{V_{\text{EZ}}(r)} = \frac{Z \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{V_{\text{EZ}}(r)}$$

$Z$  = Zahl der Formeleinheiten (also Zahl der effektiven Kugeln in der Zelle)

$V_{\text{EZ}}(r)$  = Volumen der Elementarzelle als Funktion des Kugelradius



Folglich ist die Packungsdichte in unserem Fall:

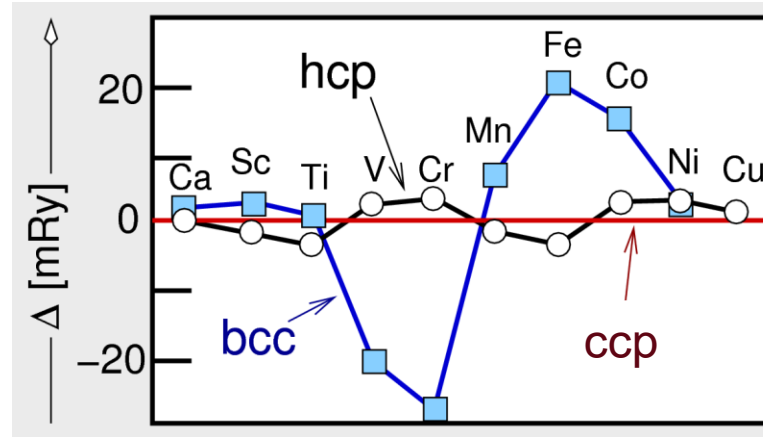
$$p = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{2}}\right)^3 \cdot r^3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi \approx 0.74$$

Die **hexagonal dichteste Packung** füllt ebenfalls lediglich **74% des gesamten Raums** aus (→ Übung!). Beide Packungsmuster im 3D sind somit nicht perfekt!

**Üben Sie, wie man die Packungsdichte ausrechnet!!**

# Exkurs: Wonach richtet sich das Kugelpackungsmuster?

Die Wahl der Kugelpackung lässt sich größtenteils energetisch verstehen, ist aber allgemein schwer vorhersagbar:

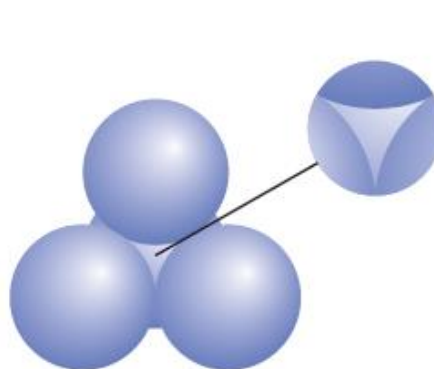
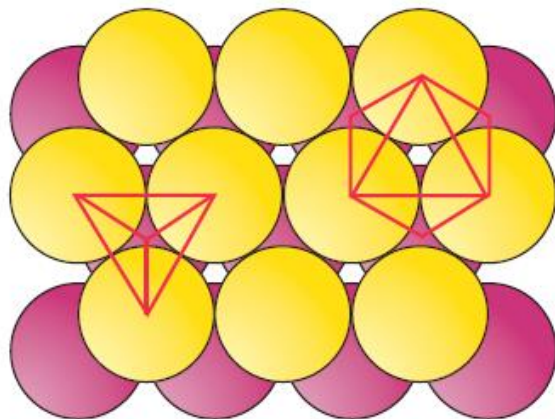


**Beobachtung:** Ca(ccp) → Sc, Ti (hcp) → V, Cr (bcc) → Ni, Cu (ccp)

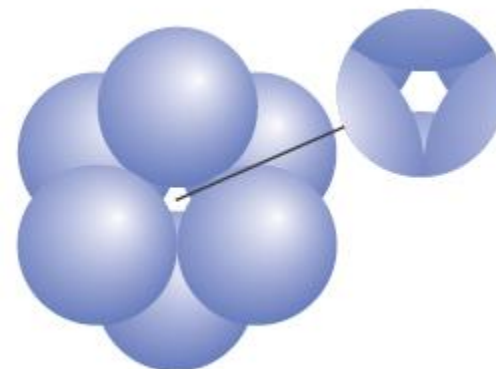
Fe und Co kristallisieren im bcc-Typ, was erst unter Berücksichtigung magnetischer Wechselwirkungen verständlich wird (später mehr dazu!)

**Hinweis:** Mn kristallisiert in einem eigenen Strukturtyp, bis heute noch nicht richtig verstanden!

Es existieren bei der Packung von Kugeln zwei Sorten von Lücken:



**Tetraederlücke**



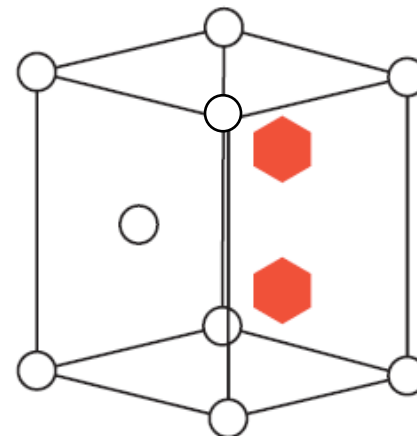
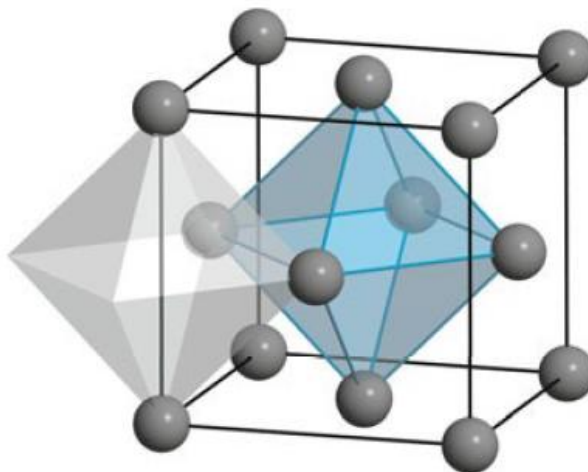
**Oktaederlücke**

## Mehratomige Festkörper:

- **Größere** Ionen/Atome bilden die dichteste Kugelpackung!
- **Kleinere** Ionen/Atome in mehratomigen Festkörpern besetzen die **Lücken**!

# Tetraeder- und Oktaederlücken

Wieviele Tetraeder- und Oktaederlücken existieren pro Elementarzelle?

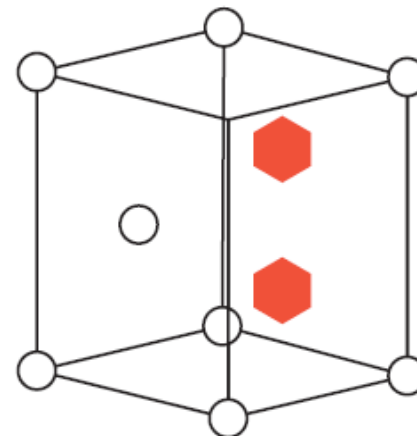
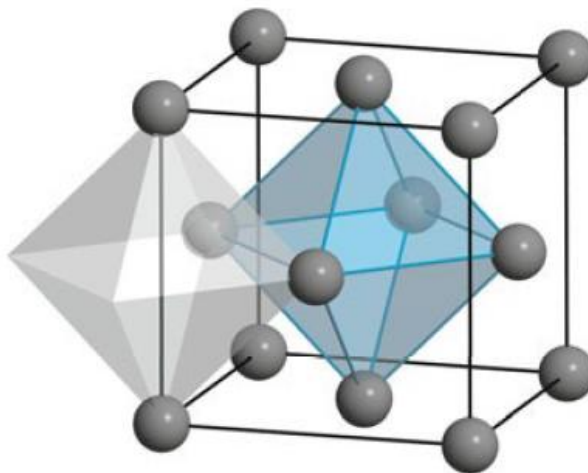
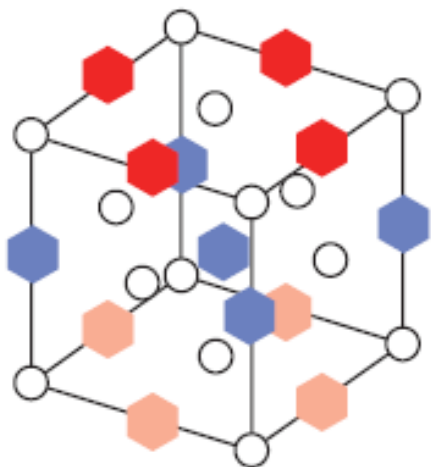


**ccp:**  $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$  Atome pro EZ  
 $12 \times 1/4 + 1 = 4$  Oktaederlücken pro EZ

**hcp:**  $8 \times 1/8 + 1 = 2$  Atome pro EZ  
2 Oktaederlücken pro EZ

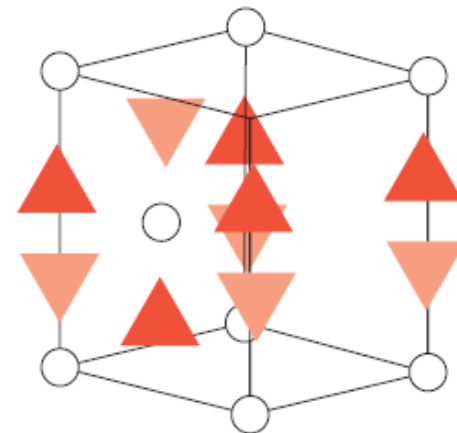
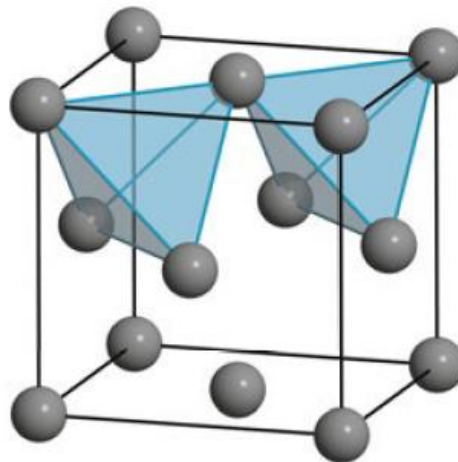
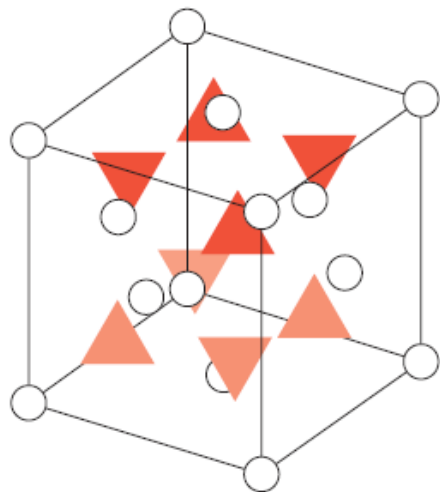
# Tetraeder- und Oktaederlücken

Wieviele Tetraeder- und Oktaederlücken existieren pro Elementarzelle?



Bei  **$N$  Atomen pro Elementarzelle** gibt es immer maximal  **$N$  Oktaederlücken**  
(sowohl in der *ccp* als auch *hcp*)!

Wieviele Tetraeder- und Oktaederlücken existieren pro Elementarzelle?

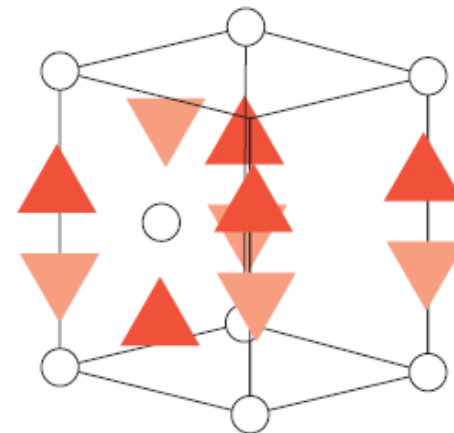
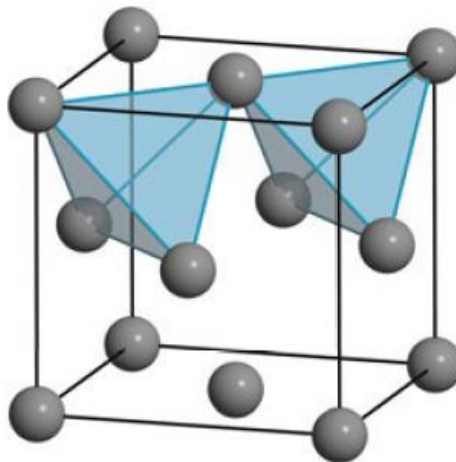
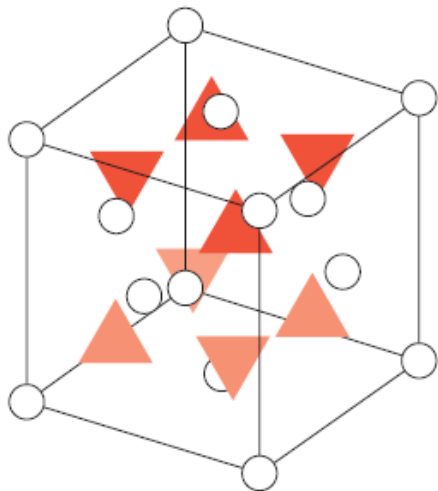


*ccp*:  $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$  Atome pro EZ  
 $8 \times 1 = 8$  Tetraederlücken pro EZ

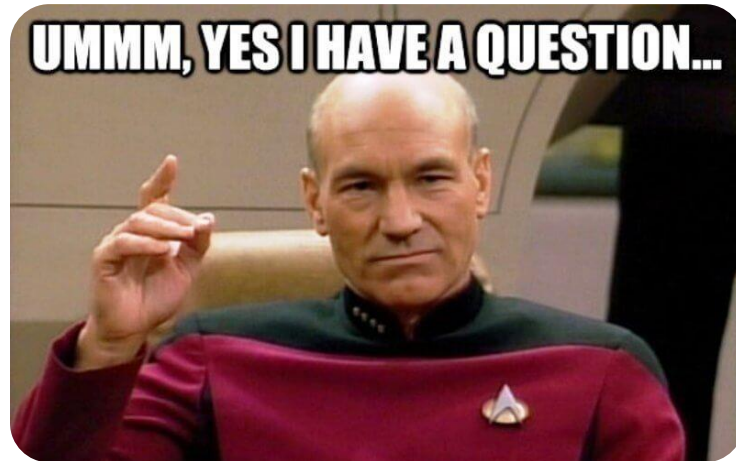
*hcp*:  $8 \times 1/8 + 1 = 2$  Atome pro EZ  
 $8 \times 1/4 + 2 = 4$  Tetraederlücken pro EZ



Wieviele Tetraeder- und Oktaederlücken existieren pro Elementarzelle?



Bei  **$N$  Atomen pro Elementarzelle** gibt es immer maximal  **$2N$  Tetraederlücken** (sowohl in der *ccp* als auch *hcp*)!



Fragen?