

Festkörper- und Materialchemie

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

22.10.2025



www.photoaktivematerialien.hhu.de



markus.suta@hhu.de



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

1. Organisatorisches

2. Lernziel für heute:

- Grundlagen der Kristallstrukturbeschreibung
- Nächste Woche: Kugelpackungen und Lücken

Organisatorisches

Vorlesung: **Donnerstags, 08:30 Uhr – 10:00 Uhr, Hörsaal 6E (Geb. 26.11)**

Vorlesungszeit im WS 2024/2025: **13.10.2025 – 06.02.2026**

Vorlesungsfrei zwischen 22.12.2025 und 02.01.2026 (Weihnachtsferien)



Übungen:

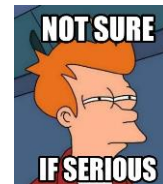
Mittwochs, 10:30 Uhr – 12:00 Uhr, Hörsaal 6H (Geb. 26.41)

Die Übungen zur Festkörper- und Materialchemie finden planmäßig **alle 2 Wochen** statt und werden von **Marco Gurbisz** geleitet.



Marco

Start der Übungen für diesen Teil ab **22.10.2025**



Aktive Beteiligung in den Übungen sinnvoll – hilfreich bei Klausur...

Wie Sie mich erreichen:



Jun.-Prof. Dr. Markus Suta

Arbeitsgruppenleiter

+49 211 81-13147

markus.suta@hhu.de

Universitätsstraße 1

Gebäude:26.42

Etage/Raum:01.21

Keine Scheu, bitte bei Unsicherheiten fragen!!!

Aber bitte auch:

- Anliegen in Mail höflich und klar mit Anrede und Schlussfloskel formulieren
- Verständnis dafür haben, dass ich nicht immer sofort antworten kann – ich lese meine Mails sehr gründlich!
- Im Zweifel vorbeikommen oder einfach nach der Vorlesung runterkommen!

<https://www.photoaktivematerialien.hhu.de/>

Auszug aus Modulhandbuch

2. Festkörper- und Materialchemie:

- Synthesemethoden der Festkörperchemie: Thermodynamik und Kinetik, Bedeutung von Temperatur und Druck
- Allgemeine und spezielle Punktlagen, Wyckoff-Notation, Relation zwischen Kristall- und Lagesymmetrien.
- Strukturverwandtschaften, Grundzüge von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen.
- Einblick in Röntgendiffraktion als Charakterisierungstechnik.
- Polyederverknüpfungen.
- Zintl-Klemm-Busmann-Konzept und Vorhersage bestimmter Struktur motive anhand von Elektronenzahlen.
- Grundlegende Beschreibung von Kristallstrukturen: Basis, Gitter, Struktur, Bravais-Gitter, Raumgruppentypen.
- Einfache Strukturtypen binärer und ternärer anorganischer Verbindungen.
- Bedeutung der Natur der chemischen Bindung.
- Beschreibung von Bandstrukturen, elektronische Eigenschaften von Festkörpern (Metalle, Halbleiter).
- Grundzüge des Magnetismus, Supraleitung.

Auszug aus Modulhandbuch

2. Festkörper- und Materialchemie:

- Synthesemethoden der Festkörperchemie: Thermodynamik und Kinetik, Bedeutung von Temperatur und Druck
- Allgemeine und spezielle Punktlagen, Wyckoff-Notation, Relation zwischen Kristall- und Lagesymmetrien.
- Strukturverwandtschaften, Grundzüge von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen.
- Einblick in Röntgendiffraktion als Charakterisierungstechnik.
- Polyederverknüpfungen.
- Zintl-Klemm-Busmann-Konzept und Vorhersage bestimmter Struktur motive anhand von Elektronenzahlen.
- Grundlegende Beschreibung von Kristallstrukturen: Basis, Gitter, Struktur, Bravais-Gitter, Raumgruppentypen.
- Einfache Strukturtypen binärer und ternärer anorganischer Verbindungen.
- Bedeutung der Natur der chemischen Bindung.
- Beschreibung von Bandstrukturen, elektronische Eigenschaften von Festkörpern (Metalle, Halbleiter).
- Grundzüge des Magnetismus, Supraleitung.

- Folien zu einer Lerneinheit werden auf ILIAS vor Behandlung in der Vorlesung bereitgestellt
- Zusätzliche Links zu Videos, Online-Material und weitere Features ebenfalls auf ILIAS – nutzen Sie das!
- Vorlesung wird aufgezeichnet als zusätzliches Lernmaterial, Videos stehen dann auch auf ILIAS zur Verfügung

Erste Klausurtermine für diese Vorlesung nach der Vorlesungszeit im WS 2025/2026:

1) Montag, 23.02.2024, 09:00 Uhr – 11:00 Uhr (HS 5L, 6C; Teil 1)

2) Freitag, 27.02.2024, 09:00 Uhr – 11:00 Uhr (HS 6J; Teil 2)

Bitte auch weiterhin im HIS-LSF nach Updates schauen (unter Modulprüfungen)!

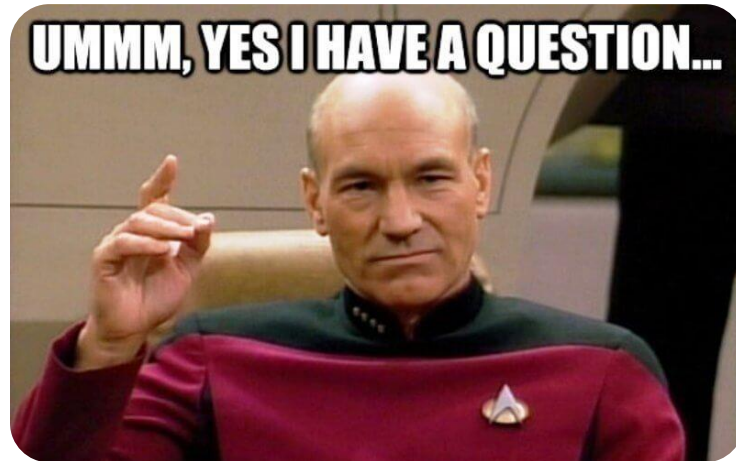
Schauen Sie auch online unter:

<https://www.chemiestudium.hhu.de/>

<https://www.wirtschaftschemie.hhu.de/studium-und-lehre/masterstudium>

Empfohlene Lehrbücher für die Festkörper- und Materialchemie:

- **U. Müller, *Anorganische Strukturchemie*, 6. Auflage, Vieweg & Teubner, 2008**
- U. Müller, *Symmetriebeziehungen zwischen Kristallstrukturen*, 2. Auflage, Springer, 2023
- **C. Janiak, H.-J. Meyer, D. Gudat, P. Kurz, *Moderne Anorganische Chemie*, 5. Auflage, de Gruyter, 2018**
- **F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer, 2016**
- A. R. West, *Solid State Chemistry and Its Applications*, 2nd ed., Wiley, 2022



Fragen?

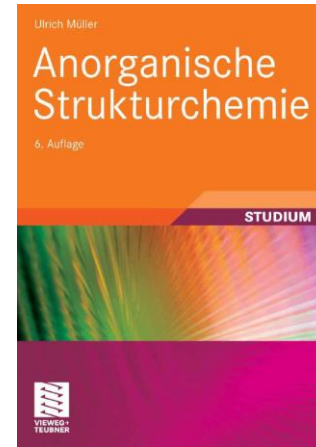
1. Kristallstrukturen und ihre Beschreibung

Lehrbuchempfehlungen:



Springer Verlag, Kapitel 2

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



Vieweg & Teubner Verlag, Kapitel 2

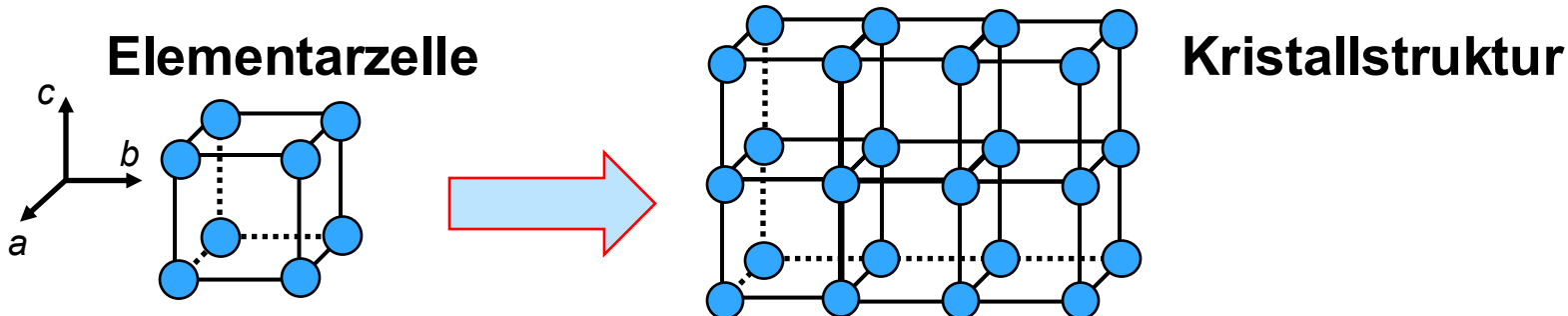
Was ist ein Kristall und eine Kristallstruktur?

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

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

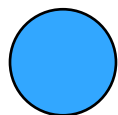
Jeder kristalline Festkörper kann aus einer kleinsten periodischen Baueinheit konstruiert werden, die alle nötigen Symmetrieinformationen enthält.

Diese Einheit wird **Elementarzelle** genannt.



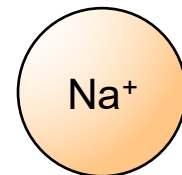
Was genau ist eine Kristallstruktur?

Eine Kristallstruktur besteht aus zwei Dingen:

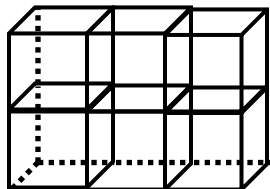
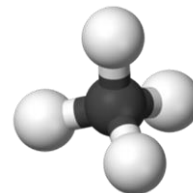


Basis

Das können Atome/Ionen



oder ganze Moleküle sein



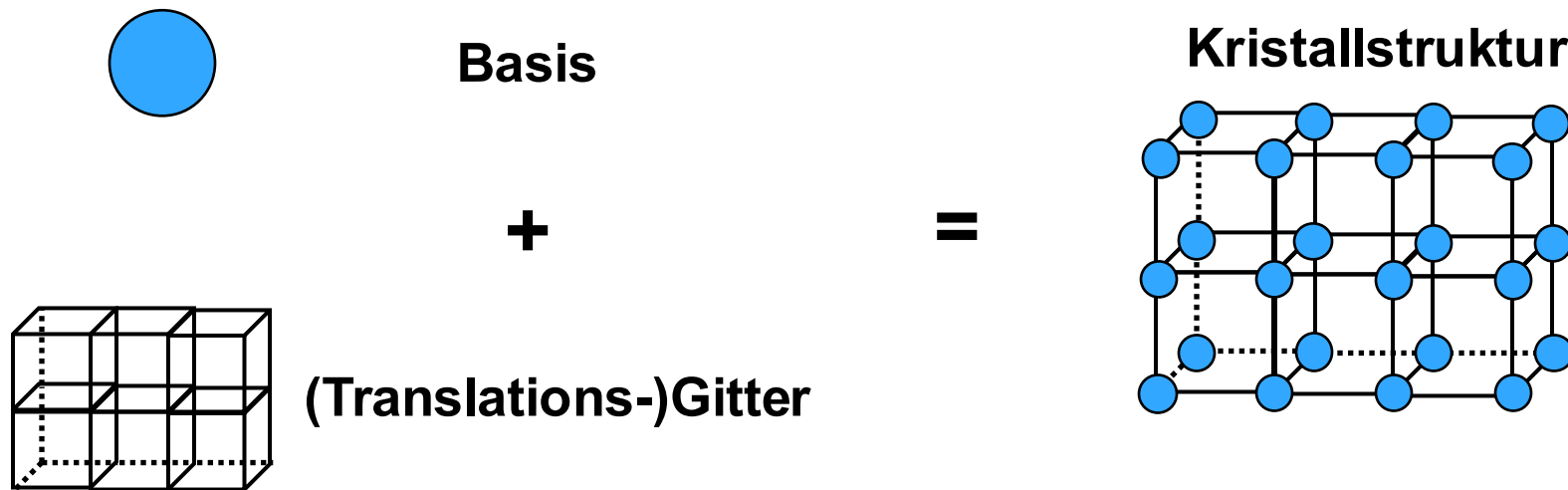
(Translations-)Gitter

Das ist ein **rein mathematisches** Konstrukt, das nur die Periodizität der Struktur darstellt.

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

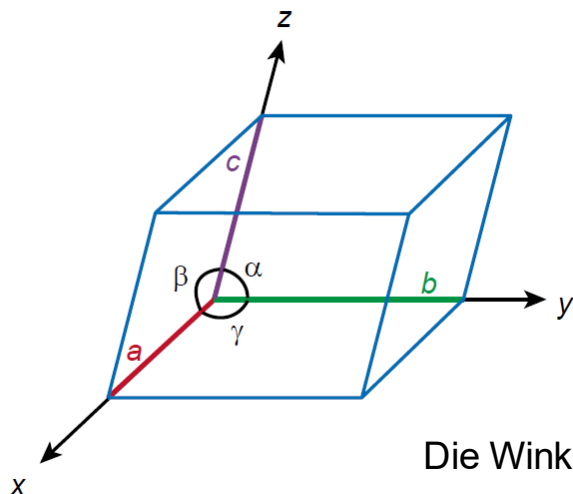
Was genau ist eine Kristallstruktur?

Also symbolisch:



Betrachten wir zunächst nur das Gitter:

Die Wiederholungseinheit einer Kristallstruktur ist die Elementarzelle. Diese hat eine sog. **Metrik**



3 Achsen: a, b, c

3 Winkel: α, β, γ

α ist der Winkel zwischen den Achsen b und c

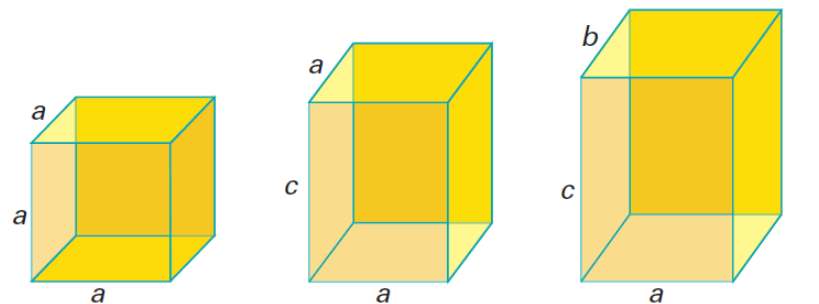
β ist der Winkel zwischen den Achsen a und c

γ ist der Winkel zwischen den Achsen a und b

Die Winkel müssen nicht 90° betragen, die können auch ganz allgemein sein!

Sieben Metriken im 3D

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

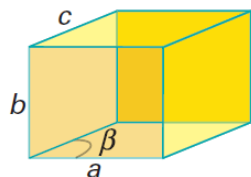


kubisch (**c**)

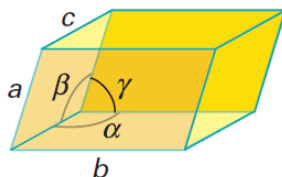
tetragonal (**t**)

orthorhombisch (**o**)

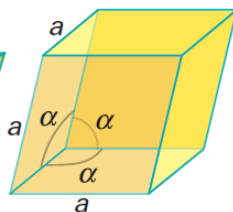
Die Namen dieser sieben Metriken **gut merken!**



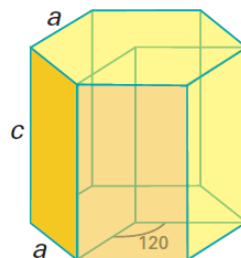
monoklin (**m**)



triklin (**a**)



rhomboedrisch (**h**)



hexagonal (**h**)

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

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

Die sieben Kristallsysteme im 3D

In jedem Kristallsystem gibt es Restriktionen an die Metrik:

Kristallsystem	Restriktionen bzgl. der	
	Achsenlängen	Winkel der Zelle
triklin	<i>keine*</i>	<i>keine*</i>
monoklin	<i>keine*</i>	$\alpha = \gamma = 90^\circ$
orthorhombisch	<i>keine*</i>	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonal	$a = b$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
trigonal	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
hexagonal	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
kubisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

*d.h. die entsprechenden Parameter können *beliebige* Werte annehmen.

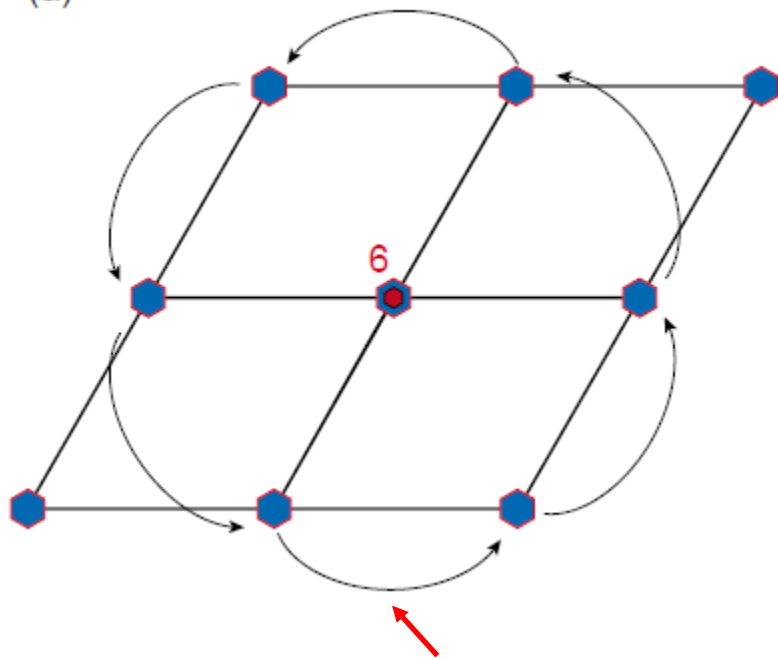
Kleiner Hinweis:

rhomboedrisch ist eine spezielle Wahl einer **Zelle** des **trigonalen Kristallsystems** mit

$$a = b; \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

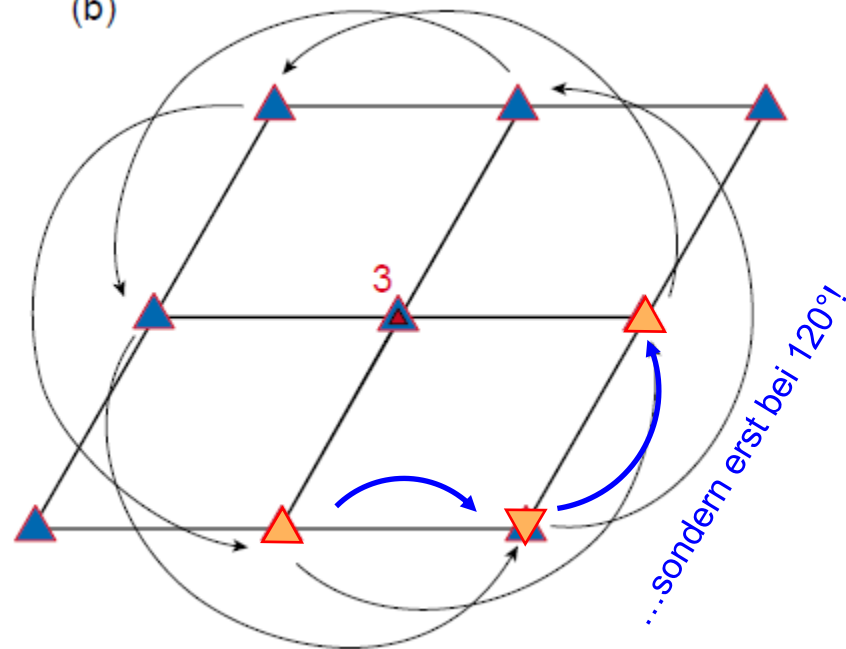
Der Sonderfall eines trigonalen Kristallsystems

(a)



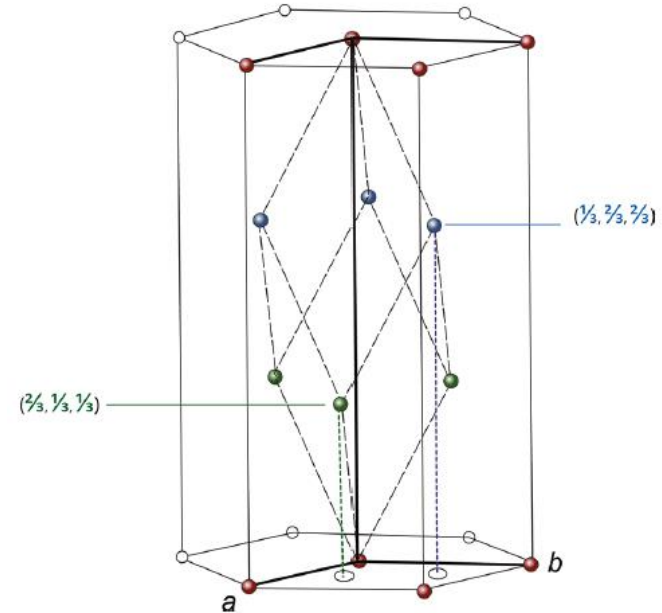
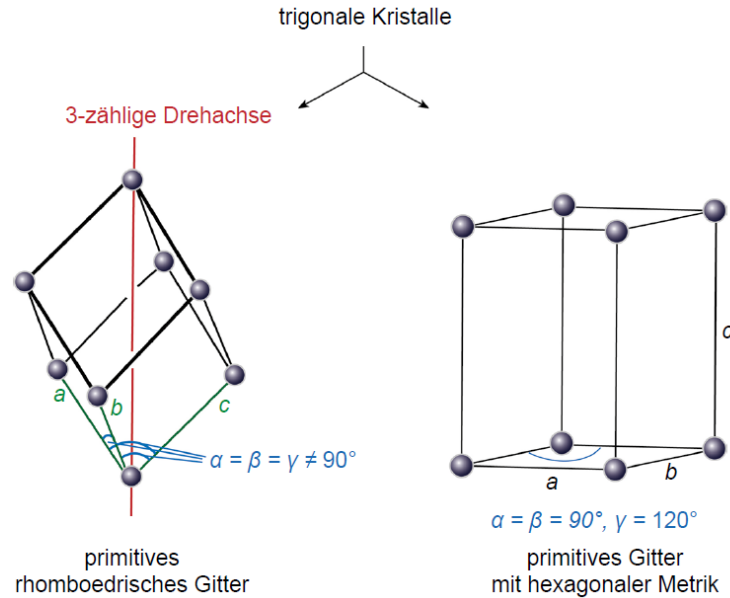
Sechsring bildet sich auf sich selbst ab!

(b)



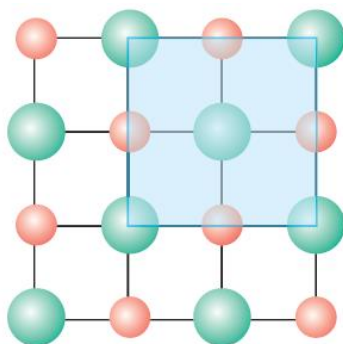
Dreieck bildet sich nicht auf sich selbst ab bei 60°-Drehung...

Der Sonderfall eines trigonalen Kristallsystems

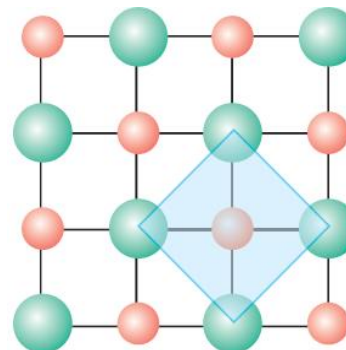


Salopp: Hat eine **Struktur** sechszählige Symmetrie, dann auch automatisch dreizählige Symmetrie, aber nicht umgekehrt!

Die Wahl der Elementarzelle grundsätzlich nicht eindeutig, weil sie ja erstmal nur durch Translation die Struktur ergeben soll. Ein Beispiel:



oder

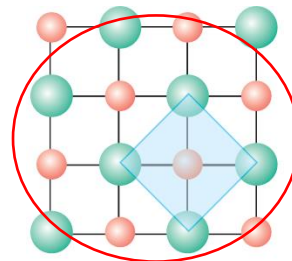
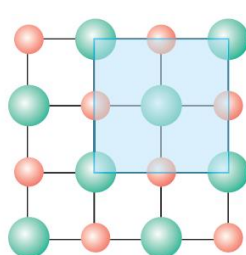


Welche der beiden Zellen ist zu bevorzugen?

Grundsätzlich gilt (in der gezeigten Hierarchie):

- 1) Die Elementarzelle soll die Symmetrie des Kristalls kenntlich machen, d.h. die Basisvektoren verlaufen am besten parallel zu Symmetrieachsen oder senkrecht zu Spiegelebenen
- 2) Das Zellvolumen sollte möglichst klein und möglichst viele Winkel nahe 90° sein – dann lassen sich Translationen besonders einfach beschreiben
- 3) Falls die Winkel von 90° abweichen, sollten sie alle in die gleiche Richtung abweichen ($<$ oder $>$)

In unserem Fall von eben:

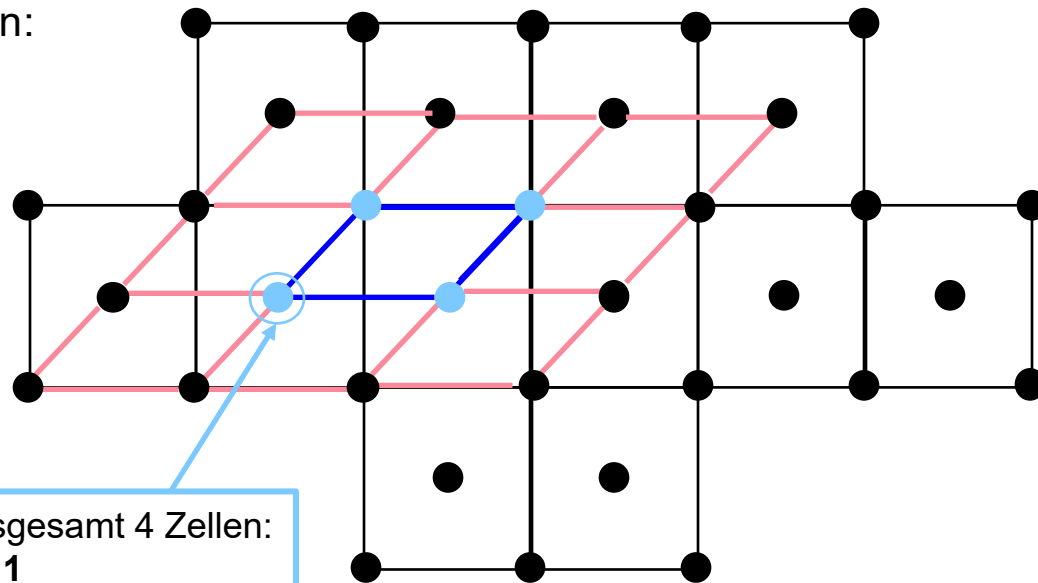
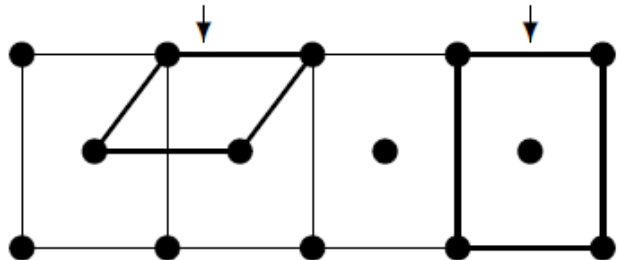


Diese Wahl erfüllt die ersten zwei Kriterien!

Primitive vs. zentrierte Elementarzellen

Es gibt Unterscheidungen bei den Zellen:

primitive Zelle zentrierte Zelle



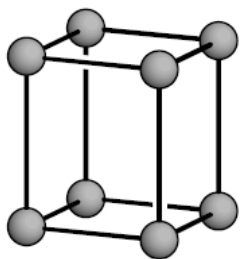
Jeder Punkt gehört zu insgesamt 4 Zellen:
 $4 \times 1/4 = 1$

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

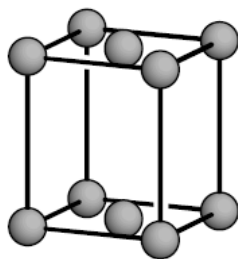
Arten der Zentrierung im 3D

In den sieben Kristallsystemen gibt es folgende Möglichkeiten der Zentrierung:

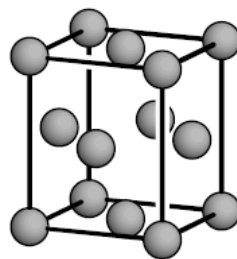
Separat betrachtet wird:



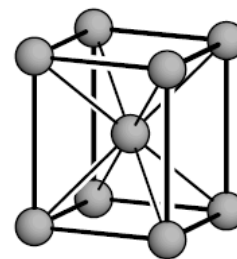
primitiv
P



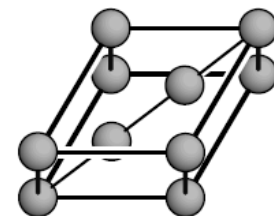
basis-
zentriert
C (od. *A*, *B*)



flächen-
zentriert
F



innen-
zentriert
I



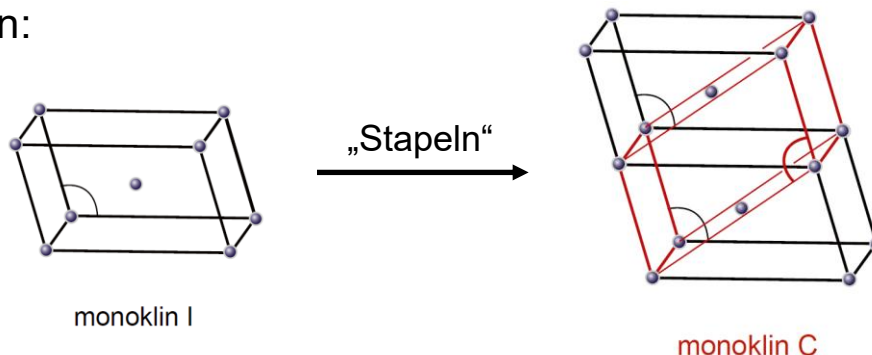
rhomboedrisch
R

Die 14 Bravais-Gitter im 3D

Mit den sieben Kristallsystemen und den vier Arten der Zentrierung bei Elementarzellen sollten wir also alle dreidimensionalen Gittertypen bilden können!

Erwartung: Es müsste **7 x 4 = 28 Gittertypen** geben??

Nein, denn einige dieser Gittertypen sind jedoch hinfällig und lassen sich geschickt in andere transformieren:



Auguste Bravais
(1811-1863)

https://en.wikipedia.org/wiki/Auguste_Bravais
(Zugriff: 20.04.2022)

Insgesamt findet man so nur noch **14** unabhängige Gittertypen, die **Bravais-Gitter**.

Die 14 Bravais-Gitter im 3D

Abkürzungen für die Systeme:

triklin: **a**
monoklin: **m**
orthorhombisch: **o**
tetragonal: **t**
hexagonal: **h**
trigonal: **h**
kubisch: **c**

Zentrierungsart

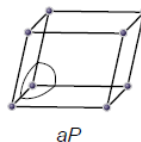
P

C

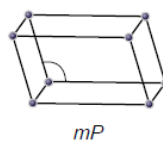
I

F

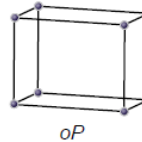
triklin



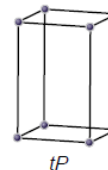
monoklin



orthorhombisch



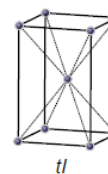
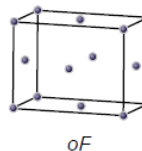
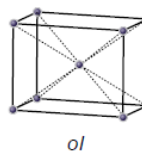
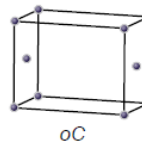
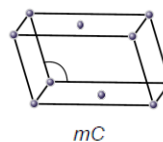
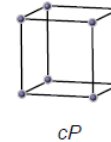
tetragonal



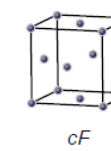
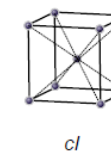
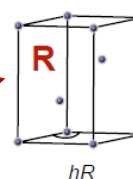
hexagonal/trigonal

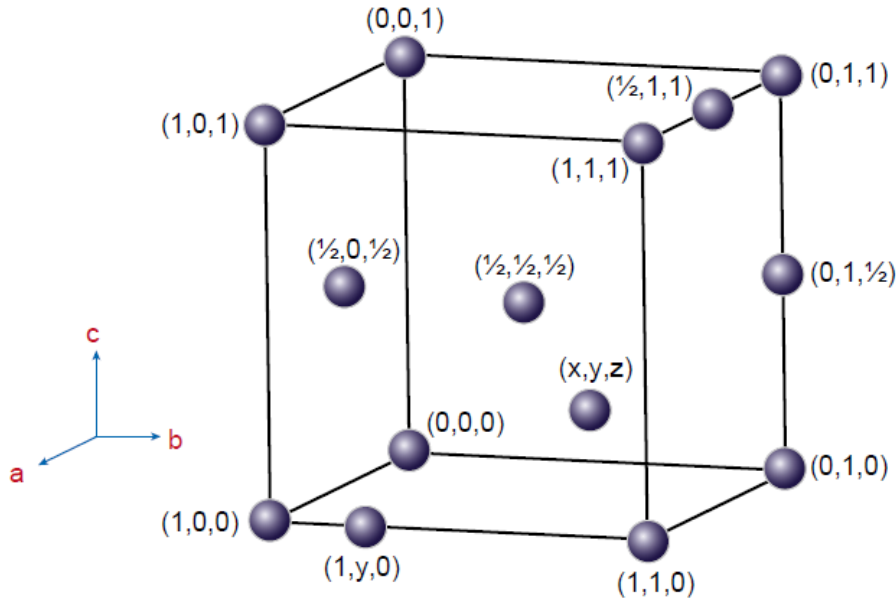


kubisch



rhomboedrisch/trigonal





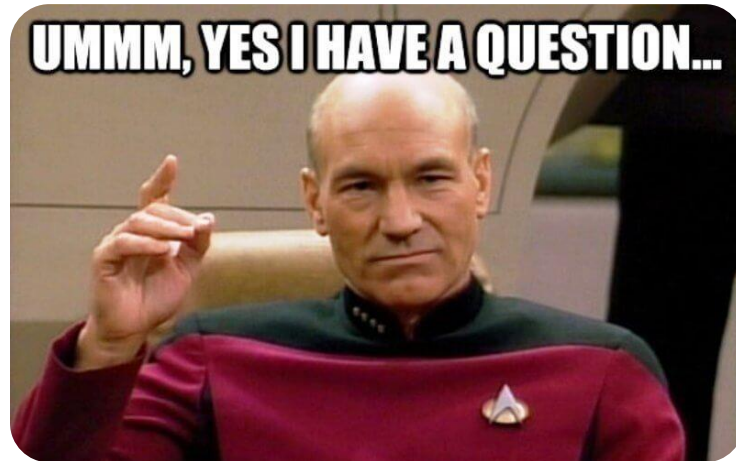
Jeder Punkt in einem Gitter kann formal mit einem Gittervektor \mathbf{u}

$$\mathbf{u} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}$$

angesteuert werden.

Die Koordinaten (x, y, z) geben dann die Lage der Atome innerhalb der Elementarzelle (und damit auch im gesamten Gitter) an!

x , y und/oder z können auch Brüche sein →
fraktionale Koordinaten



Fragen?