

A large, faint silhouette of a person's head and shoulders, facing right, with a flame-like shape above it, is positioned on the left side of the slide.

Festkörper- und Materialchemie

22.10.2025

Jun.-Prof. Dr. Markus Suta

Anorganische Photoaktive Materialien
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf



www.photoaktivematerialien.hhu.de



markus.suta@hhu.de



@markussuta.bsky.social

1. Organisatorisches

2. Lernziel für heute:

- Grundlagen der Kristallstrukturbeschreibung
- Nächste Woche: Kugelpackungen und Lücken

Organisatorisches

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 Strukturmotive 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 Strukturmotive 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

Organisatorisches

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:

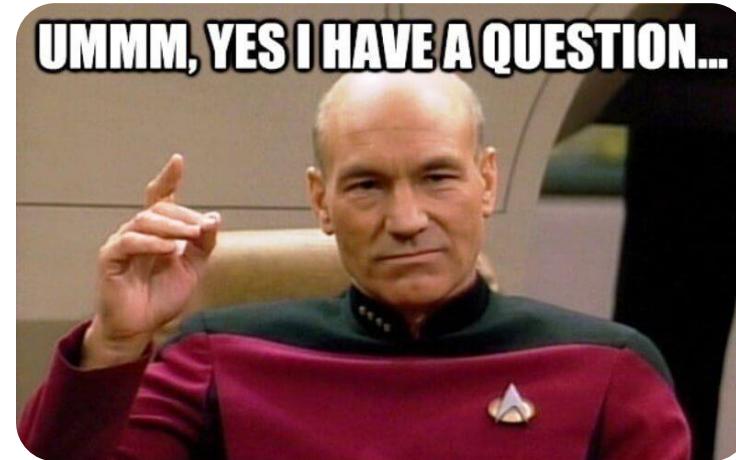
<https://www.chemiestudium.hhu.de/>

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

Organisatorisches

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?

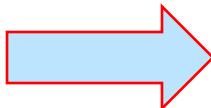
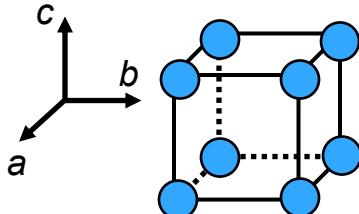
Kristalle: Dreidimensionale Festkörper, deren Bausteine sich in allen drei Raumrichtungen in bestimmter Weise wiederholen

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

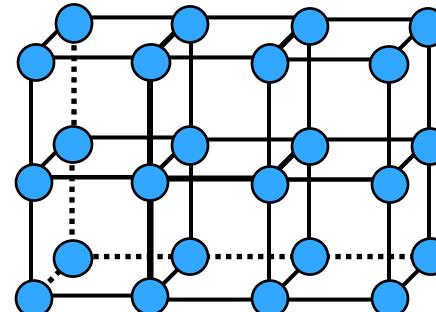
Jeder kristalline Festkörper kann aus einer kleinsten periodischen Baueinheit konstruiert werden, die alle nötigen Symmetrieinformationen enthält.

Diese Einheit wird **Elementarzelle** genannt.

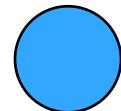
Elementarzelle



Kristallstruktur

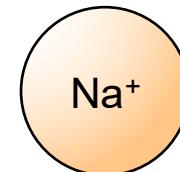


Eine Kristallstruktur besteht aus zwei Dingen:

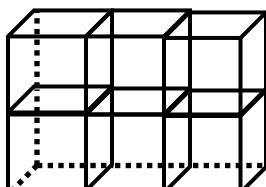
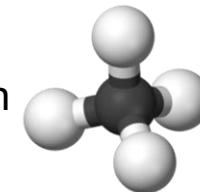


Basis

Das können Atome/Ionen



oder ganze Moleküle sein



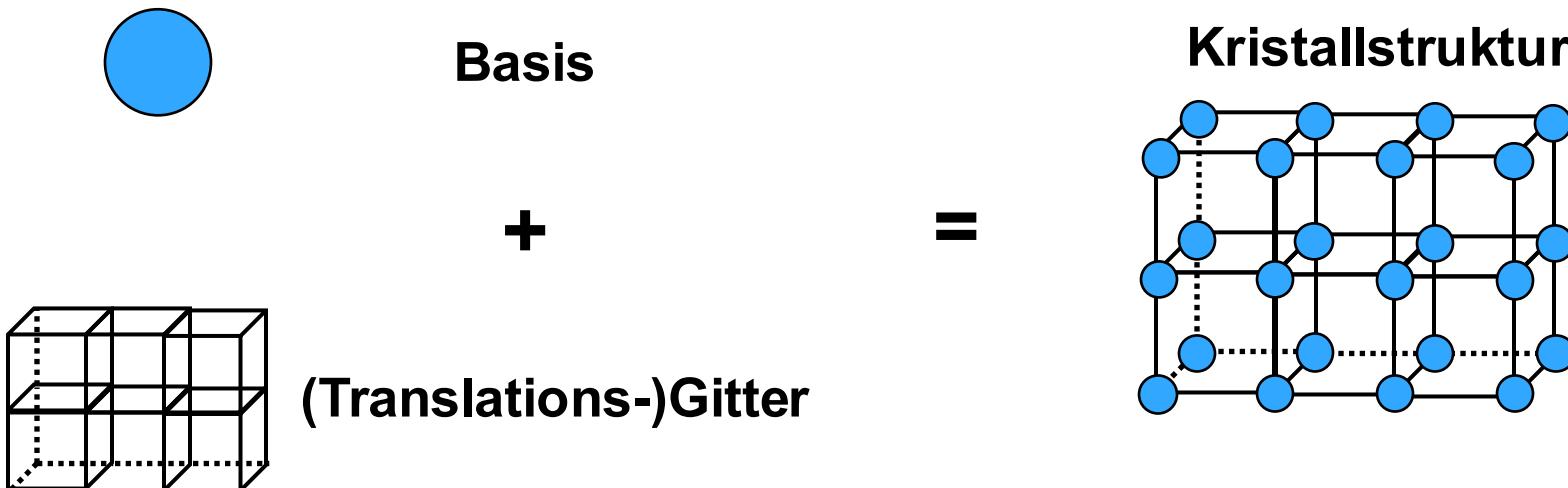
(Translations-)Gitter

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!

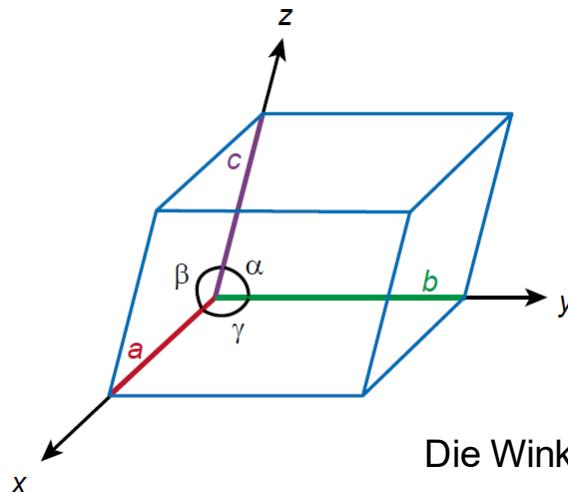
Was genau ist eine Kristallstruktur?

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*

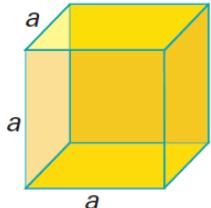
β ist der Winkel zwischen den Achsen *a* und *c*

γ ist der Winkel zwischen den Achsen *a* und *b*

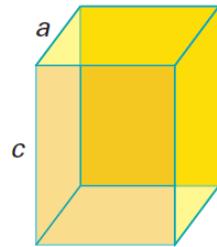
Die Winkel müssen nicht 90° betragen, die können auch ganz allgemein sein!

Sieben Metriken im 3D

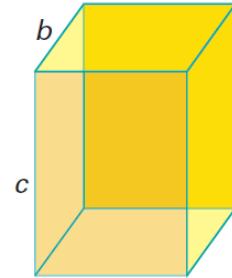
Für die Kristallsysteme gibt es ein paar **Restriktionen** an die **Metrik**:



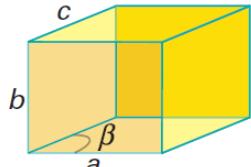
kubisch (**c**)



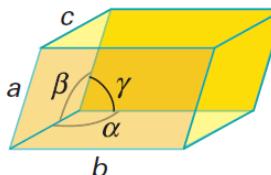
tetragonal (**t**)



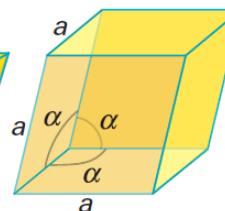
orthorhombisch (**o**)



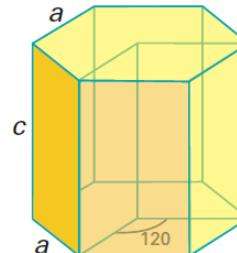
monoklin (**m**)



triklin (**a**)



rhomboedrisch (**h**)



hexagonal (**h**)

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

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

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

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.

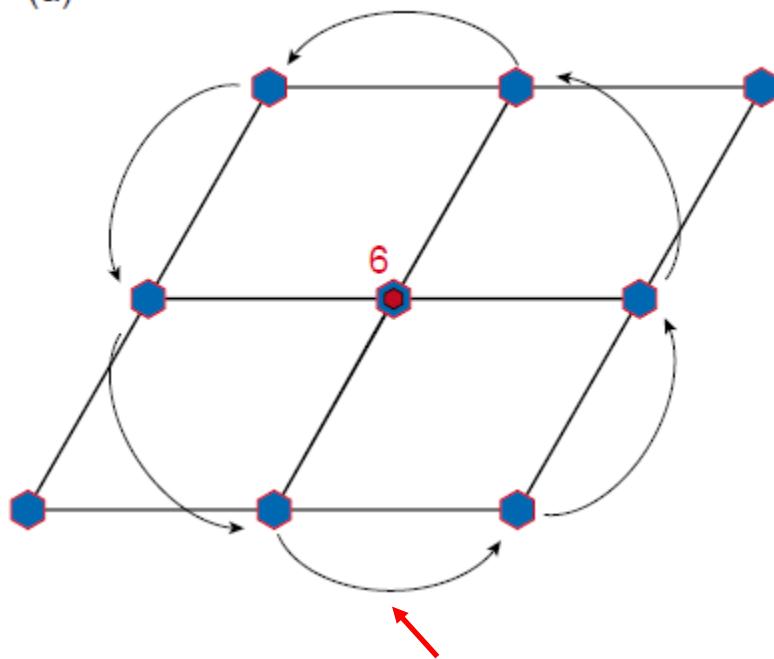
Kleiner Hinweis:

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

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

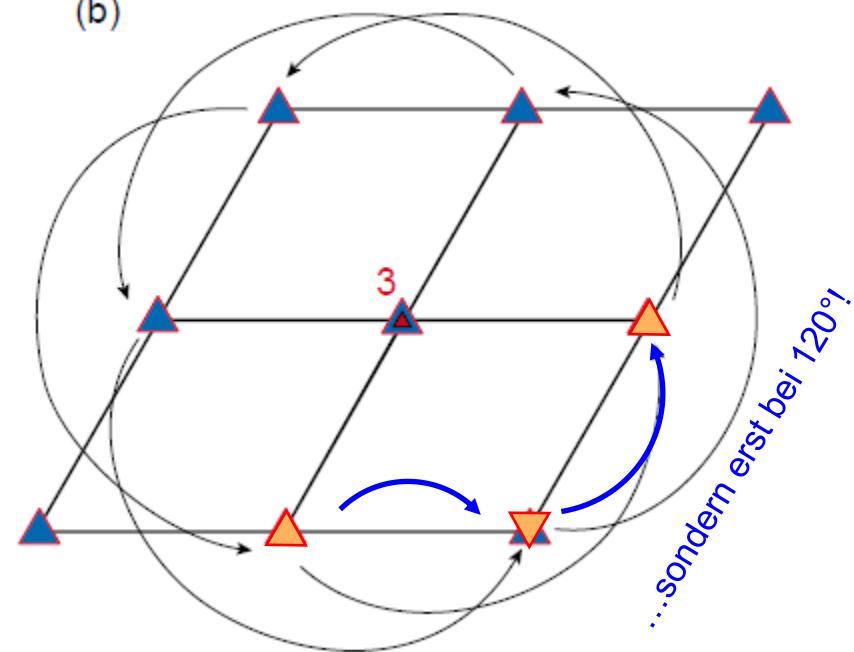
Der Sonderfall eines trigonalen Kristallsystems

(a)



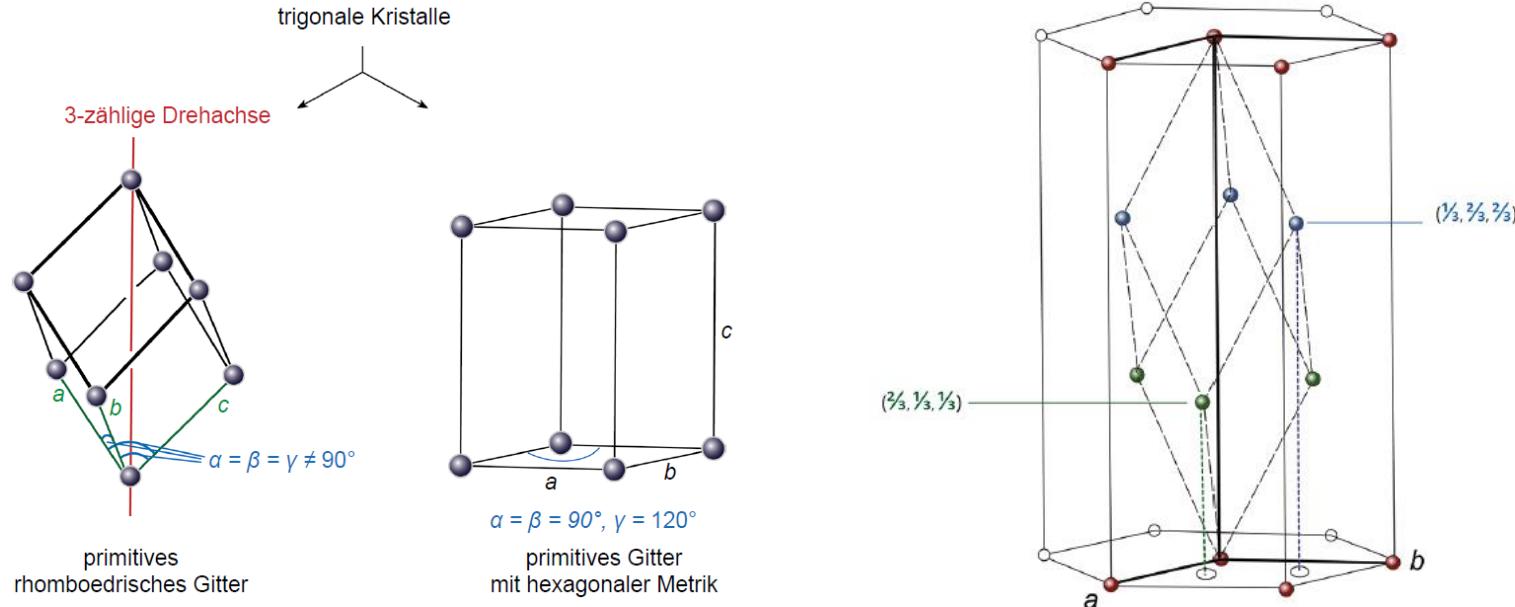
Sechsring bildet sich auf sich selbst ab!

(b)



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

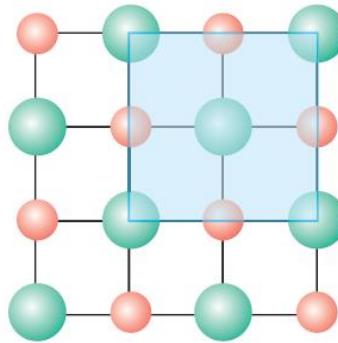
Der Sonderfall eines trigonalen Kristallsystems



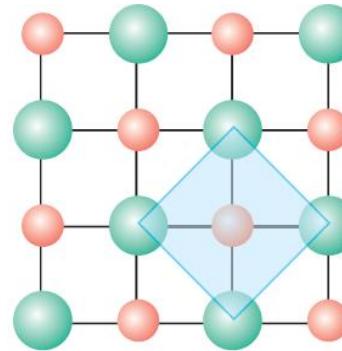
Salopp: Hat eine **Struktur** sechszählige Symmetrie, dann auch automatisch dreizählige Symmetrie, aber nicht umgekehrt!

Wahl der Elementarzelle

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



oder

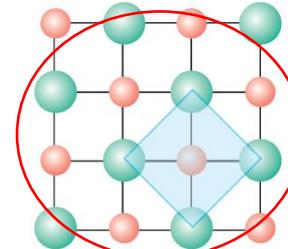
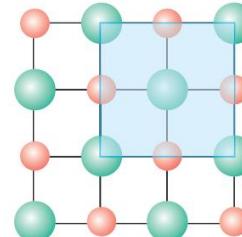


Welche der beiden Zellen ist zu bevorzugen?

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 Symmetrieeachsen 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:

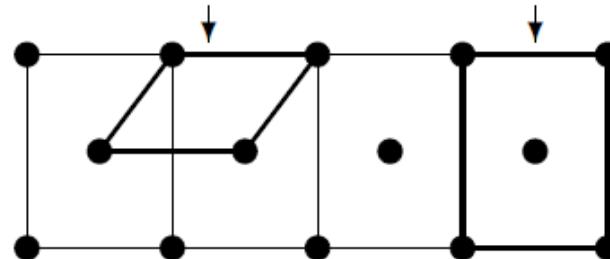


Diese Wahl erfüllt die ersten zwei Kriterien!

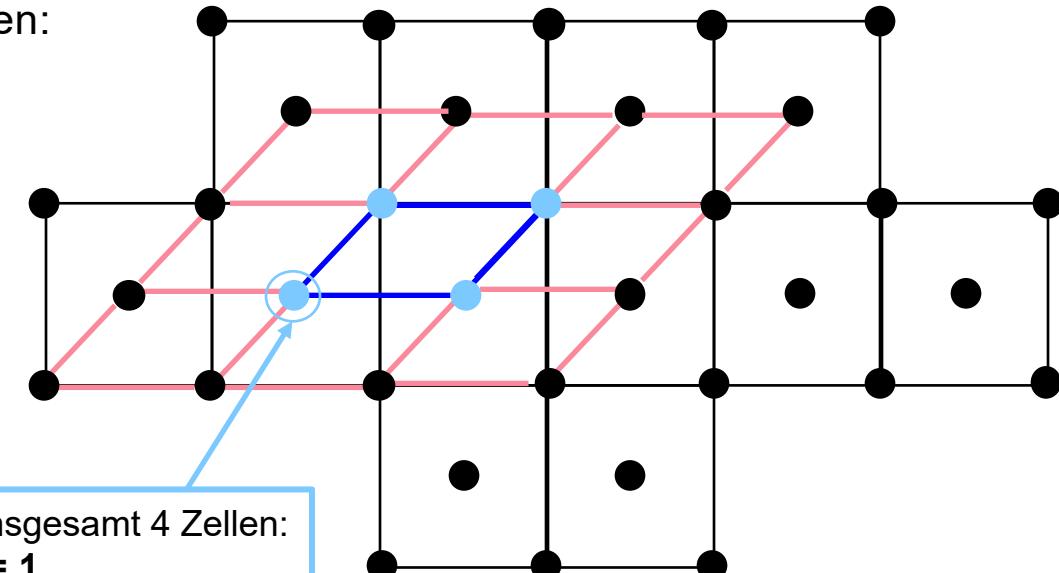
Primitive vs. zentrierte Elementarzellen

Es gibt Unterscheidungen bei den Zellen:

primitive Zelle



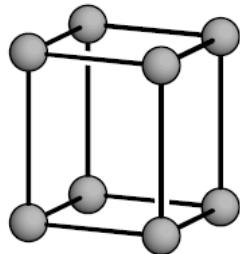
zentrierte Zelle



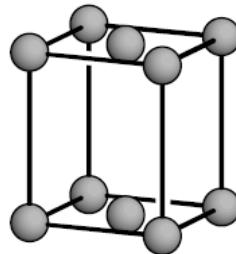
Eine **primitive Elementarzelle** ist die kleinste Zelle mit exakt **einem Basismotiv pro Zelle!**

Arten der Zentrierung im 3D

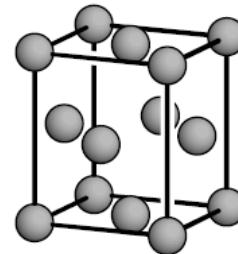
In den sieben Kristallsystemen gibt es folgende Möglichkeiten der Zentrierung:



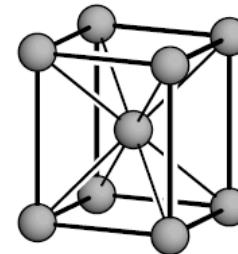
primitiv
P



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

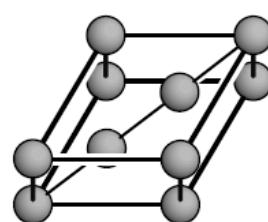


flächen-
zentriert
F



innen-
zentriert
I

Separat betrachtet wird:



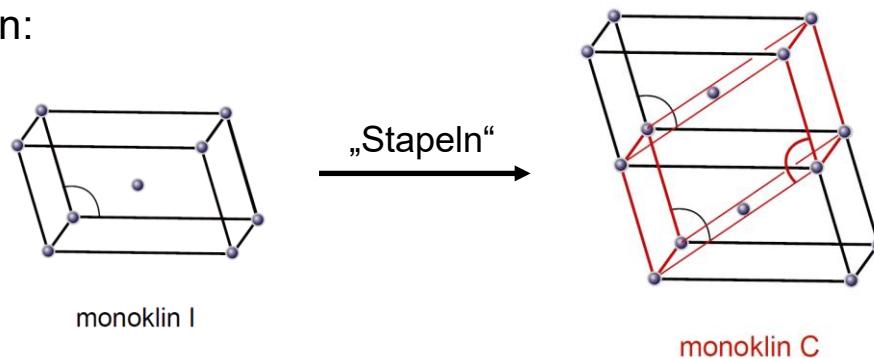
rhomboedrisch
R

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

triklin



aP

monoklin:

m

monoklin



mP

orthorhombisch:

o

orthorhombisch



oP

tetragonal:

t

tetragonal



tP

hexagonal:

h

hexagonal/trigonal



hP

trigonal:

h

kubisch

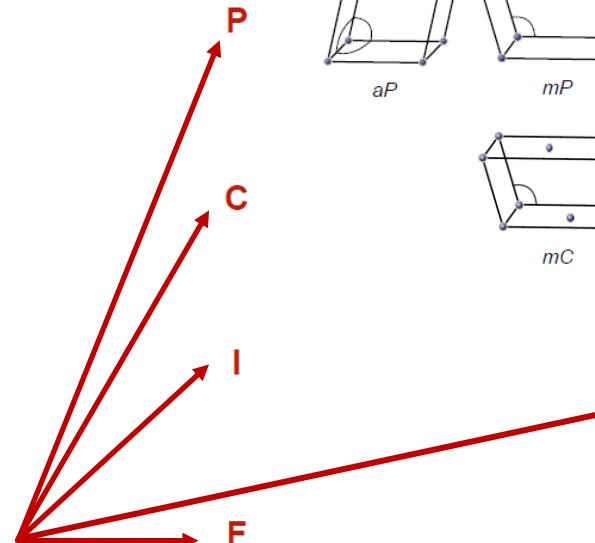


cP

kubisch:

c

Zentrierungsart



triklin



aP

monoklin



mP

orthorhombisch



oP

tetragonal



tP

hexagonal/trigonal



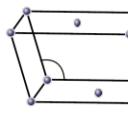
hP

kubisch



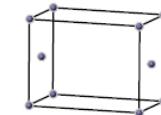
cP

monoklin



mC

orthorhombisch



oC

tetragonal



tI

hexagonal/trigonal



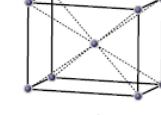
hR

kubisch



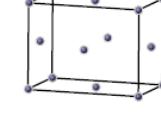
cI

orthorhombisch

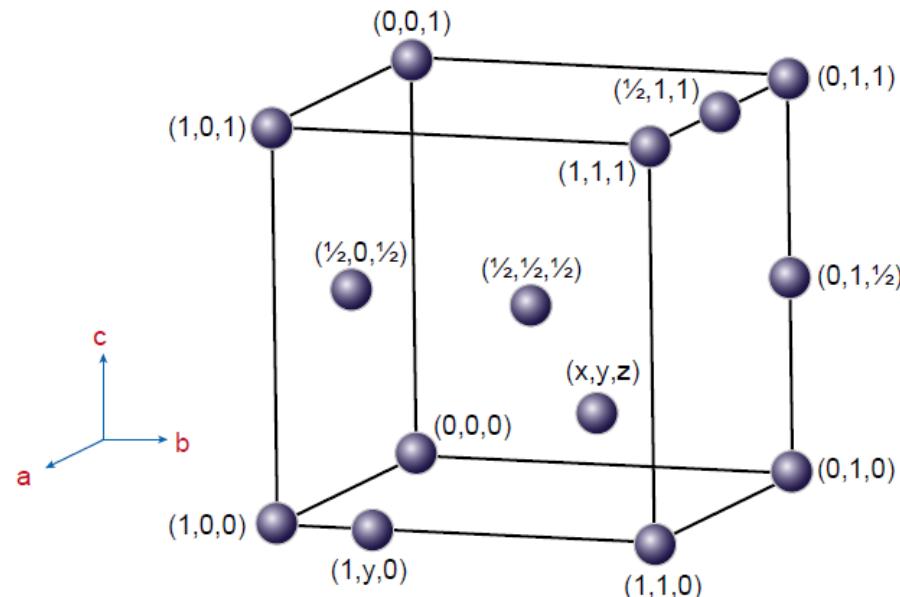


oI

hexagonal/trigonal



hF



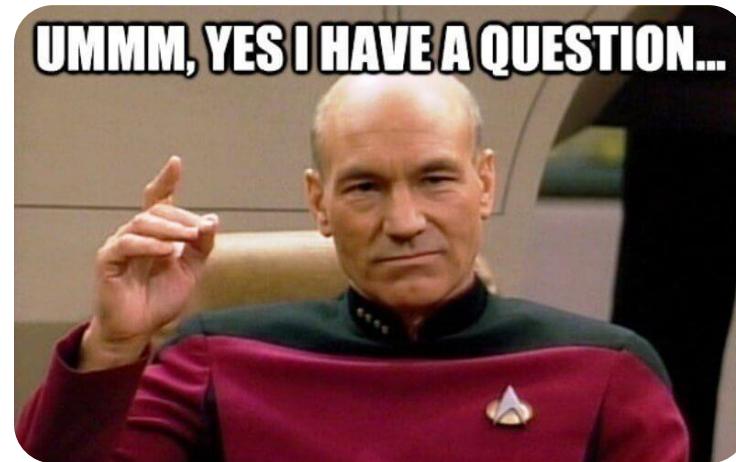
Jeder Punkt in einem Gitter kann formal mit einem Gittervektor \mathbf{u}

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

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 → **fraktionelle Koordinaten**



Fragen?