

Lesley Smart  
Elaine Moore

# **Einführung in die Festkörperchemie**

Aus dem Englischen übersetzt  
von Arno Martin

Mit einem Geleitwort von Wolfgang Schnick



# Inhaltsverzeichnis

Geleitwort zur deutschen Auflage .....	V
Vorwort zur zweiten Auflage .....	VI
Vorwort zur ersten Auflage .....	VII
Die sieben SI-Basisgrößen .....	IX
Abgeleitete SI-Einheiten mit speziellen Namen und Symbolen .....	X
SI-Präfixe .....	XI
Fundamentalkonstanten .....	XII
Verwendete Symbole .....	XIII
Periodisches System der Elemente .....	XIV
Griechisches Alphabet .....	XVI
<b>1 Einfache Kristallstrukturen .....</b>	<b>1</b>
1.1 Einführung .....	1
1.2 Dichteste Kugelpackungen .....	1
1.3 Raumzentrierte und primitive Strukturen .....	5
1.4 Symmetrie .....	6
1.4.1 Rotationsachsen .....	9
1.4.2 Symmetrieebenen .....	9
1.4.3 Inversion .....	9
1.4.4 Inversionsdrehung und Drehspiegelung .....	10
1.4.5 Die Symmetrie von Kristallen .....	11
1.5 Gitter und Elementarzellen .....	12
1.5.1 Gitter .....	13
1.5.2 Zweidimensionale Gitter .....	13
1.5.3 Ein- und zweidimensionale Elementarzellen .....	13
1.5.4 Symmetrieelemente mit Translation .....	16
1.5.5 Dreidimensionale Elementarzellen .....	18
1.5.6 Miller-Indizes .....	23
1.5.7 Abstand zwischen Ebenen in Kristallen .....	24
1.5.8 Packungsdiagramme .....	25
1.6 Kristalline Festkörper .....	27
1.6.1 Ionische Festkörper der Zusammensetzung MX .....	28
1.6.2 Festkörper der Zusammensetzung MX <sub>2</sub> .....	35
1.6.3 Andere wichtige Kristallstrukturen .....	38
1.6.4 Ionenradien .....	42
1.6.5 Kovalente Kristalle .....	49
1.6.6 Molekülkristalle .....	54
1.6.7 Silicate .....	56

1.7	Gitterenergie .....	58
1.7.1	Der Born-Haber-Kreisprozeß .....	58
1.7.2	Berechnung der Gitterenergie .....	60
1.7.3	Berechnungen mit Hilfe von thermochemischen Kreisprozessen und von Gitterenergien .....	66
1.8	Zusammenfassung .....	68
	Weiterführende Literatur .....	69
	Fragen .....	69
<b>2</b>	<b>Röntgen-Streuung .....</b>	<b>74</b>
2.1	Einleitung .....	74
2.2	Erzeugung von Röntgenstrahlung .....	74
2.3	Die Beugung von Röntgen-Strahlen .....	76
2.4	Röntgen-Streuung an Pulvern .....	78
2.4.1	Die Aufzeichnung von Pulverdiffraktogrammen .....	78
2.4.2	Systematische Auslöschung durch Gitterzentrierung .....	80
2.4.3	Systematische Auslöschung durch Schraubenachsen und Gleitebenen ...	84
2.4.4	Die Zahl der Formeleinheiten $Z$ in der Elementarzelle .....	86
2.4.5	Die Identifizierung von Verbindungen durch Pulverdiffraktogramme ...	87
2.4.6	Die Bedeutung der Linienintensitäten .....	87
2.5	Röntgenstreuung an Einkristallen .....	93
2.6	Strukturaufklärung mit Einkristallen .....	96
2.6.1	Die Patterson-Funktion und ihre Auswertung .....	97
2.6.2	Direkte Methoden .....	98
2.6.3	Differenz-Darstellung .....	98
2.7	Strukturverfeinerung .....	99
2.7.1	Temperaturfaktoren .....	99
2.7.2	Der $R$ -Wert .....	99
2.8	Röntgen-Kristallstrukturen in der Literatur .....	100
2.9	Neutronenbeugung .....	102
2.9.1	Anwendung der Neutronenbeugung .....	102
2.9.2	Nachteile der Neutronenbeugung .....	104
	Weiterführende Literatur .....	105
	Fragen .....	105
<b>3</b>	<b>Präparative Methoden .....</b>	<b>108</b>
3.1	Einleitung .....	108
3.2	Keramische Methoden .....	108
3.2.1	Samariumsulfid .....	109
3.2.2	Nachteile .....	109

3.3	Synthesen mit Hilfe von Mikrowellen .....	110
3.3.1	Der Supraleiter $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ .....	110
3.4	Die Sol-Gel-Methode .....	111
3.4.1	Lithiumniobat $\text{Li}_3\text{NbO}_3$ .....	112
3.4.2	Dotiertes Zinndioxid $\text{SnO}_2$ .....	112
3.4.3	Kieselglas für optische Fasern .....	113
3.4.4	Herstellung eines Biosensors .....	114
3.5	Die Precursor-Methode .....	114
3.5.1	Bariumtitanat $\text{BaTiO}_3$ .....	115
3.6	Hydrothermalverfahren .....	115
3.6.1	Quarz .....	116
3.6.2	Chromdioxid $\text{CrO}_2$ .....	117
3.6.3	Zeolithe .....	117
3.6.4	Yttrium-Aluminium-Granat $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ .....	117
3.7	Chemische Gasphasenabscheidung (CVD) .....	118
3.7.1	Gasphasenepitaxie (VPE) .....	119
3.7.2	Molekularstrahlepitaxie (MBE) .....	120
3.8	Chemische Transportreaktionen .....	121
3.8.1	Magnetit .....	121
3.9	Methodenauswahl .....	121
	Weiterführende Literatur .....	122
	Fragen .....	123
<b>4</b>	<b>Bindungen in Festkörpern und elektronische Eigenschaften .....</b>	<b>124</b>
4.1	Einleitung .....	124
4.2	Bindungen in Festkörpern – das Bändermodell .....	124
4.3	Elektrische Leitfähigkeit – einfache Metalle .....	127
4.3.1	Theorie des freien Elektrons .....	127
4.3.2	Elektronische Leitfähigkeit .....	132
4.4	Eigenhalbleiter .....	134
4.4.1	Silicium und Germanium .....	134
4.4.2	Fotoleiter .....	135
4.5	Dotierte Halbleiter .....	136
4.5.1	Der <i>p-n</i> -Kontakt – photovoltaische Zellen .....	138
4.6	Bänder in Verbindungen – Galliumarsenid .....	139
4.6.1	Halbleiter-Flüssigkeits-Zellen .....	140
4.7	Bänder in Verbindungen von <i>d</i> -Elementen – die Monoxide von Übergangsmetallen .....	140
4.7.1	Titandioxid und Titandisulfid .....	141
	Weiterführende Literatur .....	143
	Fragen .....	143

<b>5 Defekte und Nichtstöchiometrie .....</b>	<b>145</b>
5.1 Einleitung .....	145
5.2 Defekte und ihre Konzentration .....	145
5.2.1 Eigenfehler .....	145
5.2.2 Die Defektkonzentration .....	148
5.2.3 Fremdfehler .....	151
5.3 Ionenleitung in Festkörpern .....	152
5.4 Festelektrolyte .....	157
5.4.1 Schnelle Ionenleiter .....	158
5.4.1.1 $\alpha$ -Silberiodid .....	158
5.4.1.2 $\text{RbAg}_4\text{I}_5$ .....	160
5.4.1.3 Stabilisiertes Zirkoniumdioxid .....	161
5.4.1.4 $\beta$ -Aluminiumoxid .....	163
5.5 Der fotografische Prozeß .....	167
5.6 Farbzentren .....	168
5.7 Nichtstöchiometrische Verbindungen .....	169
5.7.1 Einleitung .....	169
5.7.2 Nichtstöchiometrie im Wüstit .....	171
5.7.2.1 Elektronische Defekte im Wüstit .....	173
5.7.2.2 Die Struktur von FeO .....	173
5.7.3 Urandioxid .....	175
5.7.4 Die Struktur von Titanmonoxid .....	177
5.8 Flächendefekte .....	179
5.8.1 Kristallographische Scherebenen .....	179
5.8.2 Ebene Verwachsungen .....	182
5.9 Dreidimensionale Defekte .....	185
5.9.1 Blockstrukturen .....	185
5.9.2 Pentagonale Säulen .....	186
5.9.3 Unendliche angepaßte Strukturen .....	187
5.10 Elektronische Eigenschaften nichtstöchiometrischer Oxide .....	188
5.11 Schlußbemerkungen .....	193
Weiterführende Literatur .....	193
Fragen .....	193
<b>6 Ein- und zweidimensionale Festkörper .....</b>	<b>198</b>
6.1 Einleitung .....	198
6.2 Eindimensionale Festkörper .....	198
6.2.1 Polyacetylen und verwandte Verbindungen .....	198
6.2.2 Kettenförmige Platinverbindungen .....	202
6.2.3 Andere eindimensionale Festkörper und molekulare Metalle .....	206

6.3	Zweidimensionale Festkörper .....	209
6.3.1	Graphit .....	209
6.3.2	Intercalationsverbindungen des Graphits .....	209
6.3.3	Titandisulfid und die Li-TiS <sub>2</sub> -Batterie .....	211
	Weiterführende Literatur .....	214
	Fragen .....	214
<b>7</b>	<b>Zeolithe und verwandte Strukturen .....</b>	<b>215</b>
7.1	Einleitung .....	215
7.2	Zusammensetzung und Struktur .....	215
7.2.1	Netzwerke .....	215
7.2.2	Das Si:Al-Verhältnis .....	218
7.2.3	Austauschbare Kationen .....	218
7.2.4	Hohlräume und Kanäle .....	221
7.3	Herstellung von Zeolithen .....	226
7.4	Strukturaufklärung .....	226
7.5	Verwendung von Zeolithen .....	229
7.5.1	Trockenmittel .....	229
7.5.2	Ionenaustauscher .....	229
7.5.3	Adsorbentien .....	230
7.5.4	Katalysatoren .....	232
7.5.5	Neue Materialien .....	238
7.6	Andere Netzwerkstrukturen .....	240
7.7	Tonminerale .....	240
7.8	Nachbemerkung .....	243
	Weiterführende Literatur .....	244
	Fragen .....	244
<b>8</b>	<b>Optische Eigenschaften von Festkörpern .....</b>	<b>247</b>
8.1	Einleitung .....	247
8.2	Die Wechselwirkung zwischen Licht und Atomen .....	247
8.2.1	Der Rubinlaser .....	250
8.2.2	Phosphore für Leuchtstofflampen .....	252
8.3	Strahlungsabsorption und -emission durch Halbleiter .....	253
8.3.1	Lichtemittierende Dioden .....	255
8.3.2	Der Galliumarsenidlaser .....	256
8.3.3	Der Quanten-Kaskade-Laser .....	258
8.4	Optische Fasern .....	259
8.4.1	Optische Schalter .....	261
	Weiterführende Literatur .....	262
	Fragen .....	262

<b>9</b>	<b>Magnetische und dielektrische Eigenschaften .....</b>	<b>265</b>
9.1	Einleitung .....	265
9.2	Die magnetische Suszeptibilität .....	265
9.3	Der Paramagnetismus von Metallkomplexen .....	269
9.4	Ferromagnetische Metalle .....	270
9.4.1	Ferromagnetische Domänen .....	273
9.4.2	Permanentmagnete .....	276
9.5	Ferromagnetische Verbindungen – Chromdioxid .....	276
9.5.1	Tonbandgeräte .....	276
9.6	Antiferromagnetismus – Übergangsmetallmonoxide .....	277
9.7	Ferrimagnetismus und Ferrite .....	279
9.7.1	Computerspeicher .....	281
9.8	Elektrische Polarisaton .....	283
9.9	Piezoelektrische Kristalle – $\alpha$ -Quarz .....	284
9.10	Der ferroelektrische Effekt .....	285
9.10.1	Keramische Vielschichtkondensatoren .....	288
	Weiterführende Literatur .....	290
	Fragen .....	290
<b>10</b>	<b>Supraleitfähigkeit .....</b>	<b>291</b>
10.1	Einleitung .....	291
10.2	Die Entdeckung der Supraleiter .....	291
10.3	Die magnetischen Eigenschaften von Supraleitern .....	292
10.4	Die Theorie der Supraleitung .....	294
10.5	Josephson-Effekte .....	296
10.6	Die Suche nach Hochtemperatursupraleitern .....	296
10.7	Die Kristallstruktur der Hochtemperatursupraleiter .....	296
10.8	Anwendung von Hochtemperatursupraleitern .....	303
	Weiterführende Literatur .....	305
	Fragen .....	306
	<b>Antworten .....</b>	<b>307</b>
	<b>Sachwortverzeichnis .....</b>	<b>335</b>