

Vorlesung Festkörperchemie I (Einführung) - Anorganische Chemie 5

Prof. Dr. Wolfgang Schnick

1. Einführung

- 1.1. Was leistet die Festkörperchemie? Abgrenzung Festkörper-/Molekülchemie, interdisziplinärer Bezug zu Kristallographie, Kristallphysik, Festkörperphysik, Materialwissenschaften.
- 1.2. Wer macht(e) wo Festkörperchemie? Historie der Festkörperchemie in Deutschland, Universitäten/Max-Planck-Institute, Festkörperchemie international; Nobelpreise im Zusammenhang mit der Festkörperchemie
- 1.3. Festkörperchemie in der chemischen Fachliteratur: Journals und Lehrbücher.
- 1.4. Beispiele typischer Festkörperverbindungen/aktuelle Entwicklungen: Supraleiter, Superionenleiter, optische und NLO-Materialien, Superharte Materialien, C_3N_4 , mikro- und nanoporöse Materialien. Cs_3O , Rb_9O_2 und $Cs_{11}O_3$, Li_3N/Na_3N , MgB_2 ; $CrCl_2/MoCl_2$, Chevrel-Phasen; Krogmanns Salz, Ferroelektrikum $BaTiO_3$; ZrW_2O_8

2. Präparation und Kristallzucht

2.1. Festkörperreaktionen (fest-fest)

- 2.1.1. Thermodynamik: spez. Wärme von Festkörpern, Dulong-Petit-Grenzwert, Regel von Neumann-Kopp, Konsequenzen für Ablauf und Ausbeute von Festkörperreaktionen, Lux-Flood-Konzept, Tammann-Regel.
- 2.1.2. Kinetik: kinetische Hemmungen von Festkörperreaktionen, parabolisches Wachstumsgesetz, Diffusionskoeffizienten, Erhöhung der Volumendiffusion, Ausnutzen von Phasenumwandlungen oder Zersetzungsreaktionen, Einfluss von Temperatur und Druck (Mechanochemie, Tribochemie), Defektchemie, Punktdefekte, Defekt-Typen (Frenkel, Schottky), Versetzungen.
- 2.1.3. Diffusion im Festkörper: Ionenleiter (AgI , β -Alumina, Na-Schwefel-Batterie, Zirconia, λ -Sonde, Li_3N , NASICON).
- 2.1.4. Phasenumwandlungen im Festkörper: Polymorphie/Allotropie, Klassifizierung von Phasenumwandlungen, Einfluss von Temperatur und Druck.

2.2. Festkörper-Synthesen aus Lösungen und Schmelzen (fest-flüssig)

- 2.2.1. Phasendiagramme (fest-flüssig-Systeme), Einstoff-, Zweistoff-, Dreistoff-Systeme, mit und ohne Mischbarkeit im Festen/Flüssigen, Dystektikum, Eutektikum, Peritektikum, Monotektikum, Mischkristallbildung.
- 2.2.2. Kristallzucht aus der Schmelze: Keimbildung, Keimwachstum, Übersättigung, Ostwald-Miers-Bereich, Bridgman-, Czochralski-Methode, Flux-Verfahren, Verneuil-Verfahren, technische Beispiele; VLS- und VS-Mechanismus.

2.3. Festkörpersynthesen aus der Gasphase (fest-gas)

- 2.3.1. Beispiele: Pt-Tiegel, Kohlefaden-Lampe, Halogenlampe, Mond-Prozess, Verfahren nach Arkel-de Boer.
- 2.3.2. Chemischer (Gasphasen)-Transport (CT), Unterscheidung CT/Sublimation, Beispiele, Anwendungen des CT
- 2.3.3. Hydrothermalsynthese, SiO_2 (Quarz), CrO_2 ; Ammonothermal-Synthese, Solvothermalsynthese,
- 2.3.4. Chemische Gasphasenabscheidung (CVD)

3. Strukturen ionischer Festkörper

- 3.1. Historie der Strukturaufklärung: Laue, Bragg, Pauling
- 3.2. Radienverhältnisse in ionischen Festkörpern
- 3.3. Koordinationspolyeder, platonische Körper, reziproke Polyeder, archimedische Polyeder, Catalan-Polyeder.
- 3.4. Kugelpackungen (kub. prim., kub. innenzentriert (bcc), kub. dichtest/flächenzentriert (fcc, ccp), hex. dichtest (hcp), Raumerfüllung, Elementstrukturen (Metalle), kompliziertere Stapelfolgen (Lanthanoide, Jagodzinski-Notation).
- 3.5. Lücken in Kugelpackungen: Oktaederlücken (OL), Tetraederlücken (TL).
- 3.6. Von den Kugelpackungen abgeleitete Grundstrukturen: $NaCl$, CaF_2 , $NiAs$, ZnS (Blende, Wurtzit), Anatas, $CdCl_2$, CdI_2 , $AlCl_3$, BiI_3 , $CsCl$, NbO , InI_3 , $AlBr_3$, (PtI_4 , SnI_4 , α - NbI_4 , $SnBr_4$), α - Al_2O_3 , α - Mn_2O_3 (Bixbyit), $A-La_2O_3$, ReO_3 , $CaTiO_3$ (Perowskit, Goldschmidt'scher Toleranzfaktor), hex. Perowskit, Anti-Perowskite, TiO_2 , K_2NiF_4 , $MgAl_2O_4$, Spinell (normal, invers, gemischt), Rutil, Li_3Bi , $MnCu_2Al$ (Heusler-Phasen).