

## 6.6 Einige wichtige Gittertypen

Die Kristalle mit den im folgenden abgebildeten Gittern wachsen nach allen Richtungen gleichmäßig, „isometrisch“, also nicht in Plättchen, die Schichtstrukturen ergeben, oder in Ketten, die zu nadelförmigen Kristallen führen. Details zu den Strukturen: [Landolt-Börnstein Online](#)

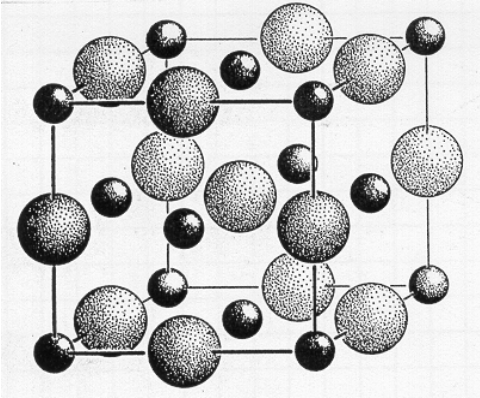
B1 NaCl-Typ		NaF	KCl
		NaCl	AgF
		NaBr	AgCl
		NaI	AgBr
		LiF	AgJ
		CaO	CdO
		CaS	PuO
		CaSe	AmO
		CaTe	

Abbildung 1 NaCl Gitter, aufgebaut aus zwei ineinandergestellten F-zentrierten Gittern in (000), (001/2)

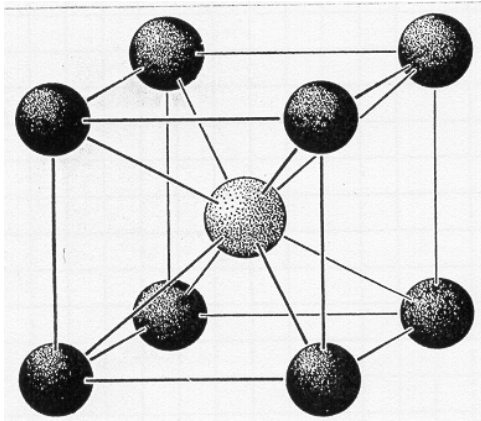
B2 CsCl-Typ		CsCl	SrMg
		CsBr	LaMg
		CsI	ClMg
		NH <sub>4</sub> Cl	PrMg
		NH <sub>4</sub> Br	NdAl
		TeCl	FeAl
		TeJ	FeTi
		CaSe	
		CaTe	

Abbildung 2 CsCl Gitter, aufgebaut aus zwei ineinandergestellten primitiven Gittern in (000), (1/2,1/2,1/2)

Die Zinkblende und Wurtzit Gitter unterscheiden sich erst in den übernächsten Nachbarn. Analog zur hexagonal- und kubisch dichtesten Kugelpackung kann man sie auch durch unterschiedliche Schichtfolgen ABABA bzw. ABCABC beschreiben. Wurtzit ist ein wichtiges Zinkerz und kommt meist mit Zinkblende verwachsen vor. In einem Kristallgitter kann es Fehlordnung durch Stapel mit unterschiedlichen Schichtfolgen geben.(Polytypie).

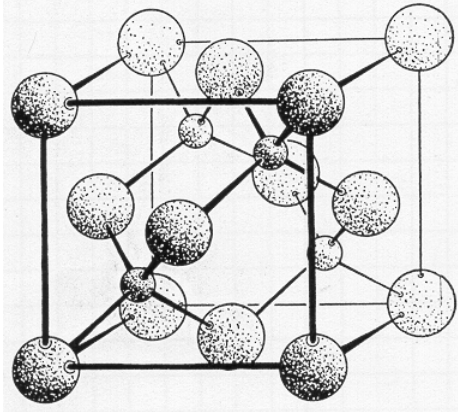
<p>B3 Zinkblende ZnS -Typ</p>		$A^{III}B^V$	$A^{II}B^{IV}$	$A^I B^{VI}$
		AlP	BeS	CuF
		AlAs	BeSe	CuCl
		GaP	BeTe	CuBr
		GaAs	ZnO	CuJ
		InP	ZnS	AgJ
		InAs	ZnTe	
		InSb	CdS	
			CdSe	
			CdTe	
			HgS	
			HgTe	

Abbildung 3 Zinkblende Gitter, aufgebaut aus zwei ineinandergestellten F-zentrierten Gittern in (000),  $(1/4, 1/4, 1/4)$

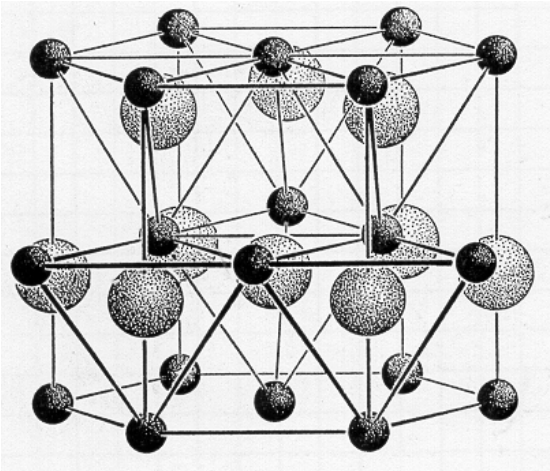
<p>B4 Wurtzit-Typ</p>		ZnO
		GaN
		InN
		BeO
		MgTe
		AlN
		NH <sub>4</sub> F

Abbildung 4 Wurtzit Gitter, aufgebaut aus zwei ineinandergestellten hexagonalen Gittern in (000),  $(0,0,3/8)$

Rotnickelkies, NiAs, heißt so, weil die Bergleute aus dem kupferroten Mineral vergeblich Kupfer gewinnen wollten und die Ursache in einem Kobold (Nickel) vermuteten.

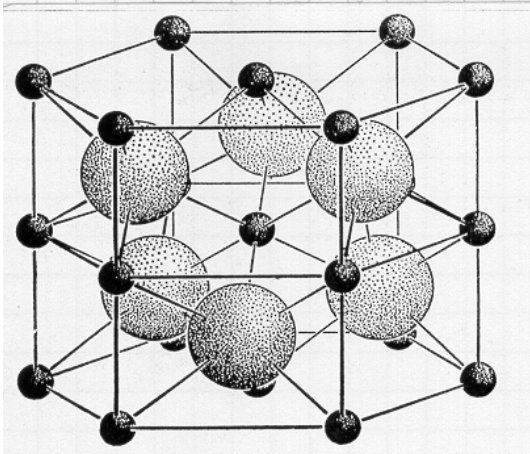
B8 NiAs-Typ		NiAs	CoS	PdTe
		CrS	CoSe	PdSb
		CrSe	CoTe	PtSb
		CrTe	CoSb	
		MnTe	NiS	
		MnAs	NiSe	
		MnSb	NiTe	
		FeS	NiAs	
		FeSe	NiSb	
		FeTe		

Abbildung 5 NiAs Gitter, aufgebaut aus zwei ineinandergestellten hexagonalen Gittern in  $(000)$ ,  $(2/3, 1/3, 1/4)$ )

Das Mineral Flußspat kommt oft in Erzgängen vor und fördert das Fließen der Schmelzen. In vielen Farben, dient farblos zu Herstellung apochromatischer, d. h. Farbfehler-freier Linsen



Abbildung 6 Flußspat Mineral

Bei höherer Temperatur wird  $\text{Ca}_2\text{F}$  elektrisch leitfähig, wie in Gasen oder Schmelzen wird der Strom durch Ionenwanderung transportiert.

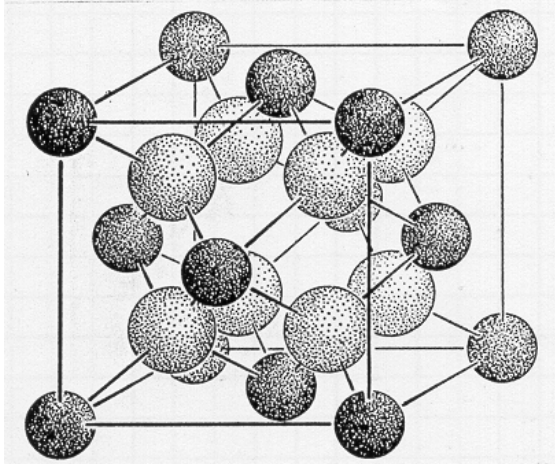
C1 $\text{CaF}_2$ -Typ				Super- ionenleiter
		$\text{Li}_2\text{O}$	$\text{K}_2\text{O}$	$\text{Ca}_2\text{F}$
		$\text{Li}_2\text{S}$	$\text{UN}_2$	$\text{SrF}_2$
		$\text{Li}_2\text{Se}$	$\text{PuO}_2$	$\text{BaF}_2$
		$\text{Li}_2\text{Te}$	$\text{In}_2\text{Pt}$	$\text{CrCl}_2$
		$\text{Na}_2\text{O}$	$\text{In}_2\text{An}$	$\text{BaCl}_2$
		$\text{Na}_2\text{S}$	$\text{GeMg}_2$	$\text{SrBr}_2$
		$\text{Na}_2\text{Se}$		
		$\text{Na}_2\text{Te}$		
		$\text{CaTe}$		

Abbildung 7  $\text{CaF}_2$ -Gitter, Flußspat-Gitter

$\sigma = A \cdot e^{-\frac{B}{T}}$	Van't Hoffsche Formel für die Leitfähigkeit $\sigma$ in Ionenleitern
$A, B$	Materialkonstante

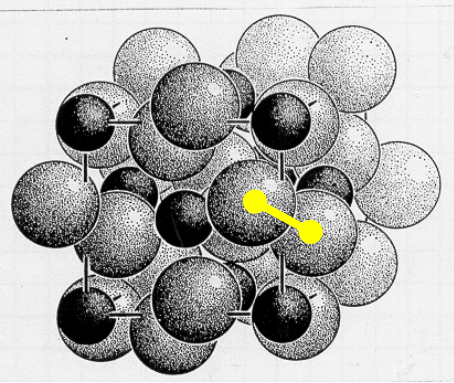
C2 FeS <sub>2</sub> -Typ		MnS <sub>2</sub>	PdAs <sub>2</sub> O	N <sub>2</sub> O
		MnSi <sub>2</sub>	PdSb <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>
		MnTe <sub>2</sub>	OsS <sub>2</sub>	
		FeS <sub>2</sub>	OsSe <sub>2</sub>	
		CoS <sub>2</sub>		
		CoSe <sub>2</sub>		
		NiS <sub>2</sub>		
		NiSe <sub>2</sub>		

Abbildung 8 FeS<sub>2</sub>-Gitter, Pyrit-Typ, Eisen- oder Schwefelkies. Eine der hantelförmigen Sulfelanionen-Gruppen ist Gelb gekennzeichnet. Das Eisen bildet ein F-zentriertes Gitter.

Im Gegensatz zu den oben gezeigten Gittertypen wächst Rutil nadelförmig. Das Mineral ist rötlich, rötlich-gelb bis schwarz (Nigrin)



Abbildung 9 Rutil in Quarz

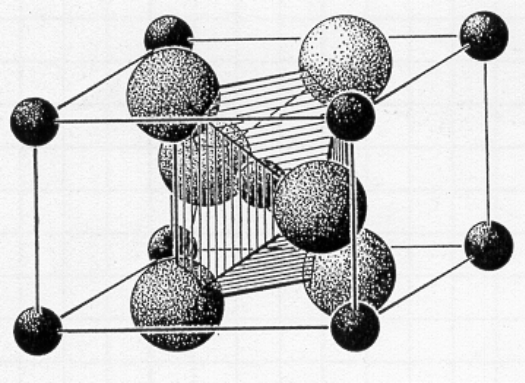
C4 Rutil TiO <sub>2</sub> - Typ		Antiferromagnete		
			T <sub>N</sub> [K]	
		MgF <sub>2</sub>	MnF <sub>2</sub>	67
		TiO <sub>2</sub>	FeF <sub>2</sub>	78.3
		ZnF <sub>2</sub>	CoF <sub>2</sub>	37.7
	NiF <sub>2</sub>	73		

Abbildung 10 Rutil Gitter

In zwischenmetallischen Verbindung mit der Stöchiometrie 2:1, mit weitgehend metallischer Bindung, gibt es eine Familie mit drei Strukturtypen, den „Laves Phasen“. Sie sind aus äquivalenten Schichten aufgebaut, unterscheiden sich aber in der Stapelfolge. Eine dieser Strukturen ist der  $\text{Cu}_2\text{Mg}$  Typ.

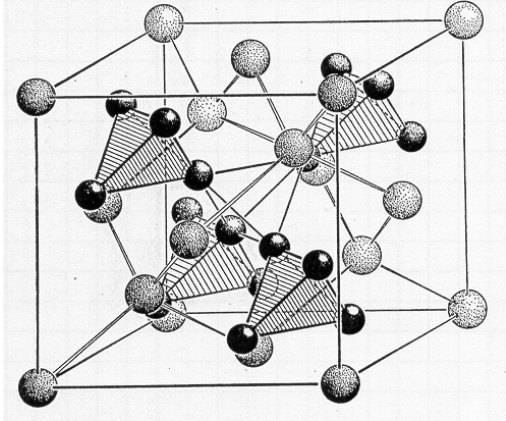
<p>C15 <math>\text{Cu}_2\text{Mg}</math>-Typ</p>		$\text{Al}_2\text{Ca}$
		$\text{Al}_2\text{U}$
		$\text{Mn}_2\text{Gd}$
		$\text{Fe}_2\text{Ce}$
		.....

Abbildung 11  $\text{Cu}_2\text{Mg}$  Gitter

Das Kupferkies Gitter (Chalkopyrit,  $\text{CuFeS}_2$ ) entsteht aus dem Zinkblende Gitter, wenn man die  $c$ -Achse verdoppelt und zwei Zn durch Cu und Fe ersetzt. Kupferkies ist eines der häufigsten Mineralien.

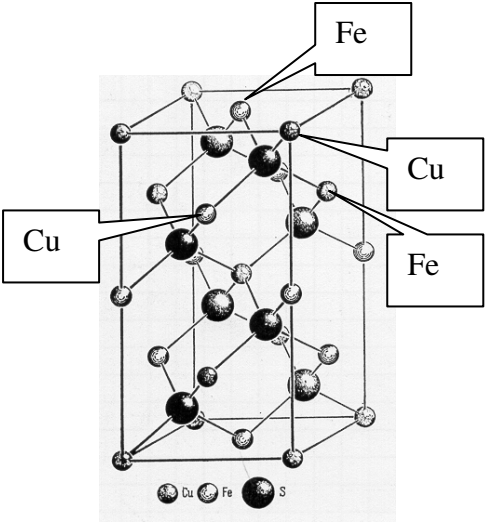
<p>C15 <math>\text{CuFeS}_2</math>-Typ</p>		<p><math>\text{CuFeS}_2</math></p>
--	---	------------------------------------

Abbildung 12  $\text{CuFeS}_2$  Gitter, Chalkopyrit-Typ

Im Perowskit Gitter sind Oktaeder in benachbarten Zellen über die Ecken verknüpft. Deshalb sind nur kollektive Drehungen des Oktaedernetzwerks in einer Ebene möglich. Diese bevorzugten Bewegungsmuster erkennt man auch im Beugungsbild in Form charakteristischer „Diffuser Streaks“ im Untergrund. Die mittlere Lage dieser Schwingungen entspricht dem vollsymmetrischen, ruhenden Oktaeder. Bei einem Soft mode Phasenübergang nimmt die Frequenz dieser Schwingungen mit der Temperatur ab, bei der Umwandlungstemperatur  $T_c$  verlagert sich die mittlere Lage der Oktaeder schließlich aus der vollsymmetrischen Position zu der eines ausgelenkten Oktaeders.

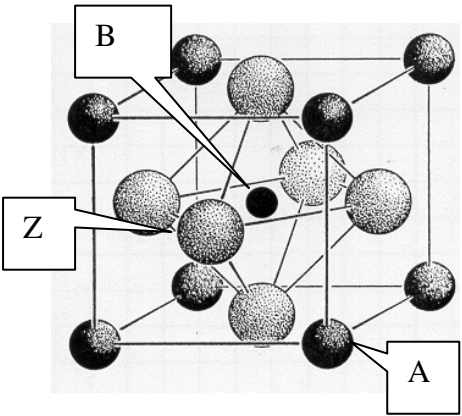
E2 <sub>1</sub> CaTiO <sub>3</sub> -Typ			Ferroelektrikum, Modellsubstanz für Soft Mode Übergänge
		FeLaO <sub>3</sub>	BaTiO <sub>3</sub>
		MnLaO <sub>3</sub>	SrTiO <sub>3</sub>

Abbildung 13 CaTiO<sub>3</sub>-Gitter, Perowskit-Gitter

Die Stabilität der Perowskite lässt sich über den Goldschmidt'schen Toleranzfaktor abschätzen. Dahinter steht die Erkenntnis, dass sich die Struktur so bildet, dass die Teilchen auf Kontakt zueinander liegen. Allerdings gibt es Ausnahmen, bei denen die Teilchen durch starke Bewegung im Mittel einen größeren Raum ausfüllen als ihrem Volumen bzw. Radius entspricht.

$t = \frac{r_A + r_Z}{\sqrt{2} \cdot (r_B + r_Z)}$	Toleranzfaktor: Verhältnis von zwei Längen, die unter der Voraussetzung, dass sich alle Teilchen berühren, identisch sind ( $t = 1$ ).
$2(r_A + r_Z)$	Flächendiagonale als Summe der Ionenradien der Teilchen in der Seitenfläche
$2\sqrt{2} \cdot (r_B + r_Z)$	Flächendiagonale, errechnet aus den Ionenradien der Teilchen in Richtung der Zellkante
$0,97 < t < 1,03$	Bedingung für idealen, kubischen Perowskit, sonst verzerrt die Struktur

Tabelle 1 Goldschmidt'scher Toleranzfaktor in der Perowskit Familie



Die folgende Struktur heißt Antifluorit-Struktur, weil, im Vergleich mit dem Flußspat-Gitter  $\text{CaF}_2$  (Fluorit), das Kation  $\text{K}^+$  auf den Plätzen des Anions  $\text{F}^-$  liegt. Anstelle von Ca liegen hier die  $\text{PtCl}_6$  Oktaeder. Obwohl nicht über die Ecken verknüpft, bilden die Oktaeder wie in den Perowskiten ein in der (001)-Ebene über die Cl-Ionen verzahntes Netzwerk, so dass nur kollektive Drehschwingungen möglich sind. Analog ist auch das Beugungsbild. In manchen dieser Substanzen gibt es mit der Drehung der Oktaeder verbundene Phasenübergänge.

$I1_1$ $\text{K}_2\text{PtCl}_6$ -Typ		$\text{K}_2\text{PtCl}_6$
		$\text{K}_2\text{SnCl}_6$
		$\text{K}_2\text{SiF}_6$
		$(\text{NH}_4)_2\text{SiF}_6$
		$(\text{NH}_4)_2\text{SnCl}_6$

Abbildung 14  $\text{K}_2\text{PtCl}_6$ -Gitter

Ähnliche Eigenschaften zeigt der Kryolith, bei dem die Tetraederlücken und die Oktaederlücken des F-zentrierten Gitters mit dem gleichen Kation besetzt sind.

$I2_1$ $\text{AlF}_6(\text{NH}_4)_3$ -Typ		$\text{AlF}_6(\text{NH}_4)_3$
		$\text{VF}_6(\text{NH}_4)_3$
		$\text{CrF}_6(\text{NH}_4)_3$
		$\text{FeF}_6\text{Li}_3$
		$\text{AlF}_6\text{Na}_3$

Abbildung 15  $\text{AlF}_6(\text{NH}_4)_3$ -Gitter, Kryolith  $\text{AlF}_6\text{Na}_3$ -Typ