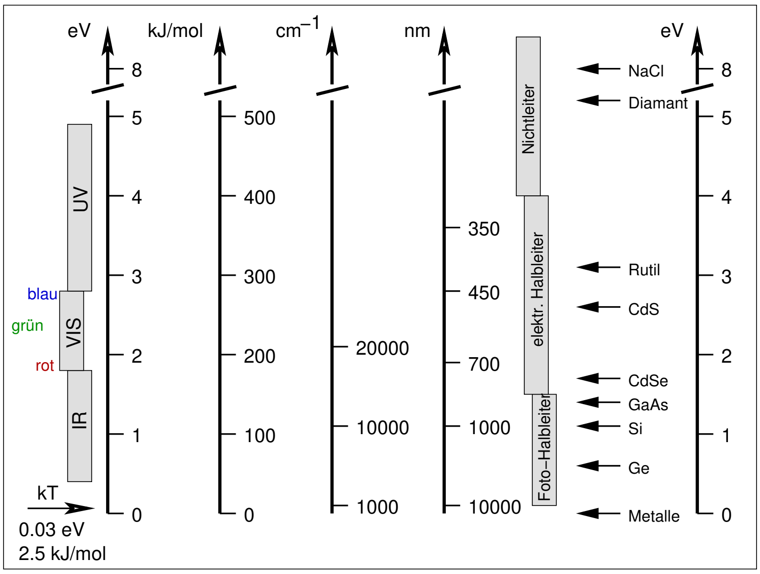
1. Bau von Festkörpern: Atomare und elektronische Strukturen

1.1. Idealkristall

1.1.1. Bindung, strukturbestimmende Größen

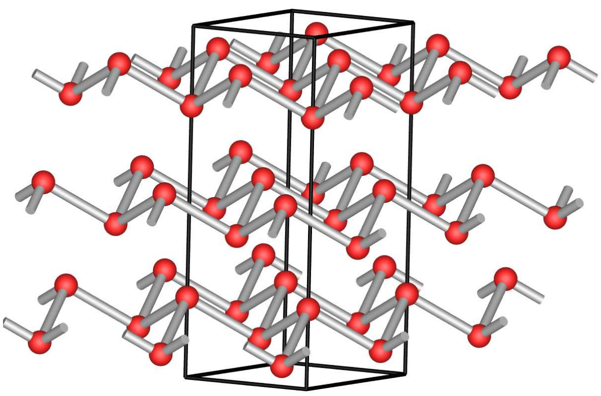
Bindung	kovalent	ionisch	metallisch
Σ EN Δ EN	groß klein	mittel groß	klein klein
Energiegew.	LCAO (je 2 AO)	IE, EA, Coulomb	LCAO (alle AO)
Reichweite	kurz (2 At.)	mittel	lang
Bindung	gerichtet	ungerichtet	
CN	1 bis 4	4 bis 8	8 bis 24
'Radien'	kov. Einfachbindungsradien vdW-Radien	Ionenradien	metallische Radien
einfache Struktur-Konzepte	8-N-Regel VSEPR Wade-Regeln	Pauling-Regeln dichte Packungen der Anionen mit besetzten Lücken	dichteste Packung
Darstellung der Struktur	Valenzstrichformeln Stick-and-Ball	kondensierte Kationen-Koordinations-Polyeder (kKP)	?
Eigenschaften Bauverbände	meist anisotrop 1-, 2- oder 3-dimensional	seltener anisotrop meist 2- oder 3-dimensional	meist isotrop nur 3-dimensional
Eigenschaft bei 3-dim. Verb.	sehr hart Isolatoren bis HL	hart, spröde elekt. Isolatoren	duktil Leiter



Bandlücken in verschiedenen Energieeinheiten

1.1.2. Kovalente Festkörper

Beispiel: Pnicogene



	d^1_{X-X} intramol. [pm]	d^2_{X-X} interm. [pm]	$\angle_{X-X-X}$ [°]	Band-lücke [eV]
P_4	221		60	
P (Hittorf)	222		100.9	
P (schwarz)	222	331	96-102	
P (83 kbar)	213	327	105	
P (111 kbar)	238	238	90	
As (A7)	252	312	97	klein
Sb (A7)	291	336	95	0
Sb (85 kbar)	296	296	90	0
Bi (A7)	307	353	95	0