# Die Modifikationen von Kohlenstoff

## Motivation

Erfahrungsgemäss bereitet die Abschätzung, ob es sich bei einem Molekül um einen Dipol handelt oder nicht, gewisse Schwierigkeiten. Insbesondere durch Vernachlässigung tetraedrischer Strukturelemente kommt es immer wieder zu falschen Ergebnissen bei der Vektoraddition.

## Voraussetzungen

* Prinzip von Kovalenzbindung und Metallbindung
* Delokalisierte Elektronen
* Typische Bindungswinkel gemäss VSEPR
* Hybridisierung am C-Atom (kann auch weggelassen werden)

## Ablauf

1. Untersuchen der Kristallstruktur von Diamant und Graphit und Bestimmung wesentlicher Parameter
2. Korrelation zwischen Elementstruktur und Stoffeigenschaftem

#### Vorteile:

* Untersuchung anhand von echten kristallographischen Daten
* Möglichkeit eine Struktur beliebig zu skalieren (im Gegensatz zu Modellen) – quasi Unendlichkeit des Atomverbandes wird erfahrbar
* Einfache Bestimmung von Bindungsparametern

#### Nachteile:

* Die Benutzeroberfläche von Mol\* ist nicht ganz einfach und tendenziell etwas überladen

### Hinweise und Einschränkungen

Man könnte auch noch C60 Fulleren mit in die Aufgabe aufnehmen. Allerdings ist die Untersuchung ein gutes Stück anspruchsvoller, wenn man eine .cif-Datei als Grundlage nimmt. Alternativ könnte man ein isoliertes C60 Molekül, z.B. anhand einer .mol-Datei verwenden. Im C60-Molekül misst man eine Vielzahl unterschiedlicher Bindungslängen und Winkel, was die Untersuchung zusätzlich erschwert.

Hinweis: Einige der folgenden Screenshots wurden mit dem Elementarstoff Phosphor als Beispiel gemacht, um nicht schon Ergebnisse vorweg zu nehmen – bei Ihnen sieht es also im zentralen Fenster etwas anders aus. Wörter in Magenta verweisen auf Felder/Buttons, welche geklickt werden müssen, Wörter in Blau auf Websites oder Dateien.

# Die Modifikationen von Kohlenstoff

|  |
| --- |
| **Lernziele**   * Sie sind mit den strukturellen Eigenschaften der beiden wichtigsten Modifikationen von Kohlenstoff vertraut * Sie sind im Umgang mit dem Programm Mol\* vertraut |

Von zwei Kohlenstoff-Modifikationen (Graphit und Diamant) stehen Ihnen die .cif-Dateien Modifikation1.cif und Modifikation2.cif zur Verfügung. Anhand dieser Daten sollen Sie die Bindungsverhältnisse in diesen Modifikationen kennenlernen. CIF-Dateien (Crystallographic Information Files) sind Archivierungsdateien für Strukturdaten, entstammen also der röntgenkristallographischen Untersuchung realer Kristalle. Derartige Daten erlauben eine präzise Untersuchung der Bindungsverhältnisse zwischen den Atomen in Festkörpern.

## Anleitung

Starten Sie das Browser-basierte Programm Mol\* (Molstar.org), klappen Sie links den Tab Open Files auf und wählen Sie beispielsweise die Datei Modifikation1.cif aus, welche zusammen mit einer weiteren .cif-Dateien auf Teams abgelegt ist. Klicken Sie dann auf Apply um die Struktur zu laden - je nach gewählter Datei ist nach diesem Schritt fürs erste nur ein einziges Atom sichtbar.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Die Atome in einem Kristall sind in einem Kristallgitter angeordnet. Die Kristallstruktur ist eine dreidimensional periodische Wiederholung der Basis beziehungsweise eines Motivs. Die **Elementarzelle** (Unit Cell) ist hierbei das kleinste Raumelement, aus welchem durch Verschiebung in alle Raumachsen das gesamte Kristallgitter erzeugt werden kann. Die .cif-Datei enthält die Koordinaten der Atome in der Elementarzelle sowie Informationen zur genauen Symmetrie der untersuchten Struktur. Um nun einen Eindruck über die Kristallstruktur zu erhalten, muss nun aus der Elementarzelle eine Superzelle erzeugt werden.

#### Aufgabe 1

Untersuchen Sie die beiden vorliegenden Modifikationen von Kohlenstoff und bestimmen Sie, wie weiter unten beschrieben, die Bindungslängen, Bindungswinkel und im Fall von Modifikation 2 auch den Schichtabstand.

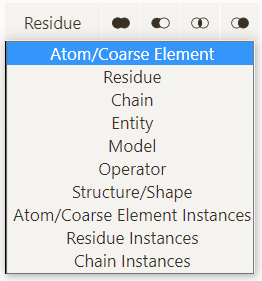
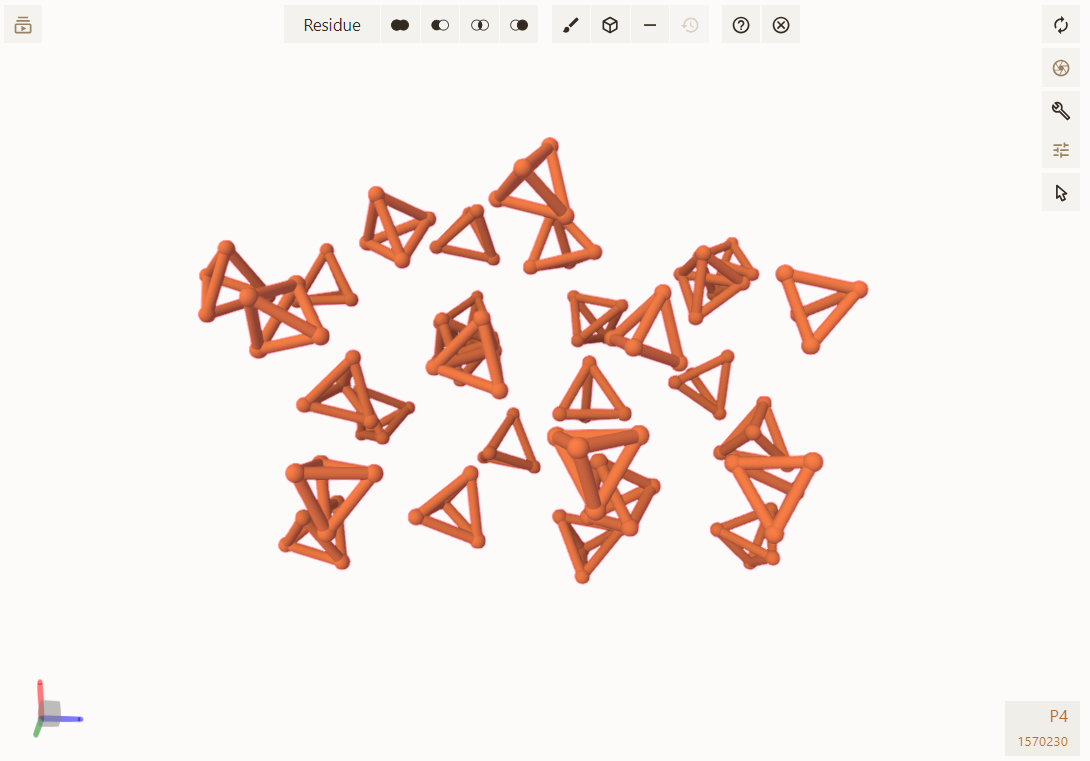
|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Modifikation 1 | Modifikation 2 |
| C-C-Bindungslänge | 1.54 Å | 1.42 Å |
| C-C-C-Bindungswinkel | 109.47° | 120° |
| Hybridisierung am C-Atom | sp3 | sp2 |
| Schichtabstand |  | ca. 3.35 Å |

Worauf deutet der gemessene Wert beim Schichtabstand von Modifikation 2 hin?

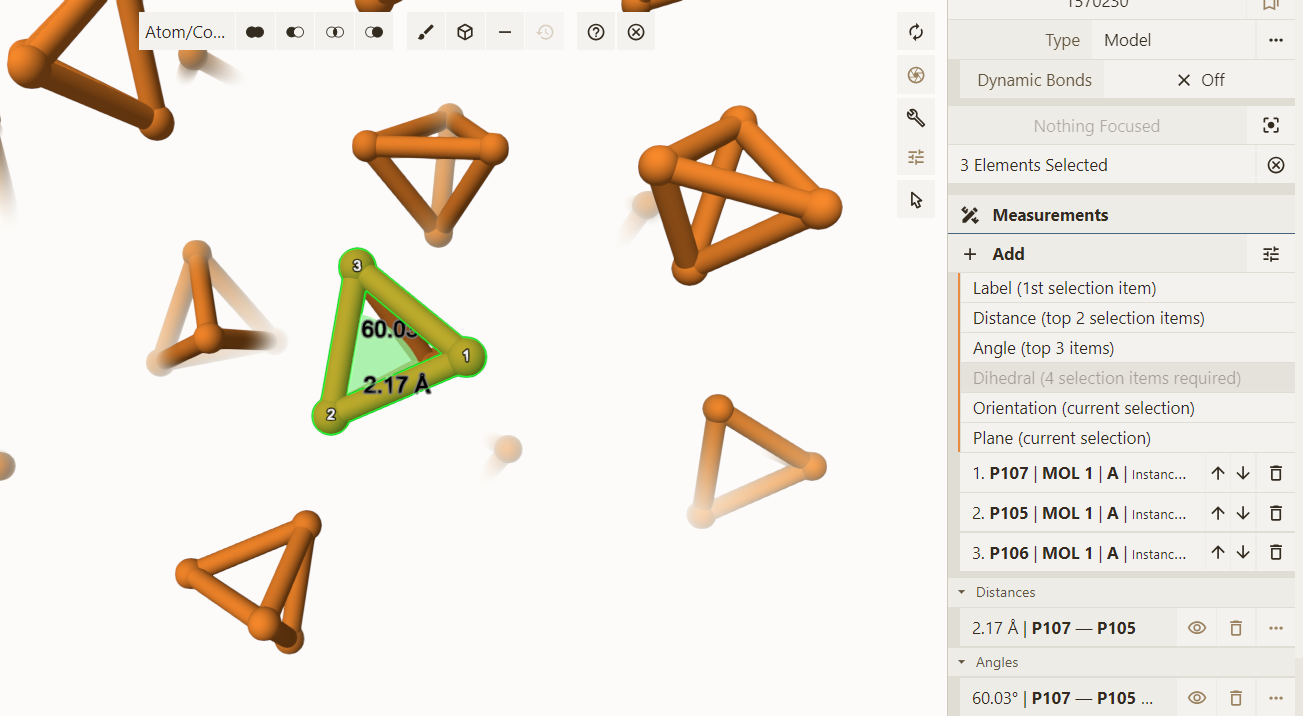
Der Schichtabstand ist ein Vielfaches der C-C-Bindungslänge was bedeutet, dass zwischen den Schichten keine Atombindungen vorliegen und somit die Kräfte zwischen den Schichten eher schwach sind.

|  |  |
| --- | --- |
|  | Wählen Sie oben rechts neben der Nummer der Struktur das Symbol aus und wählen Sie dann Super Cell – ein grösserer Ausschnitt aus der Struktur sollte nun sichtbar sein. |
|  | Durch Ändern der Werte bei Min IJK / Max IJK kann der sichtbare Ausschnitt weiter vergrössert / verkleinert werden.  Die unterschiedlichen Farben entsprechen den jeweiligen Elementarzellen, welche nun aneinandergereiht wurden. |
|  | Um die Farbe der Atome zu ändern, klicken Sie auf der linken Seite auf den Eintrag Ball&Stick und wählen Sie unter Update 3D Representation bei Color Theme den Eintrag Atom Id aus. |

* Wenn Sie den Mauszeiger in das Anzeigefenster bringen und die Maus bei gedrückter Links-Taste bewegen, kann der Atomverband rotiert werden.
* Durch Wischen mit zwei Fingern auf dem Trackpad kann die Struktur skaliert werden
* Bei gedrückter Shift-Taste kann die Struktur um eine Achse rotiert werden, bei gedrückter Control-Taste seitlich verschoben werden.
* Um Messungen vornehmen zu können, müssen Sie zuerst auf das Pfeil-Icon klicken und dann aus den erscheinenden Schaltflächen unter Residue den Eintrag Atom/Coarse Element auswählen.



* Wählen Sie nun für Distanz-Messungen zwei Atome aus (diese werden, ebenso wie die zugehörige Bindung grün) und wählen Sie dann im rechten Fenster unter Add den Eintrag Distances aus: Die Bindungslänge wird nun im Fenster in der Einheit Angström 1 A = 10-10 Meter angezeigt. Analog können Sie durch Auswahl dreier Atome unter Add mit dem Eintrag Angle den Winkel zwischen drei Atomen messen.



Beachten Sie hierbei, dass per Default immer der Abstand zwischen den beiden zuletzt ausgewählten Atomen angezeigt wird; analog der Winkel zwischen den drei zuletzt ausgewählten Atomen. Für jede neue Messung müssen Sie wieder auf Add klicken und dann entweder Distance oder Angle wählen. Achten Sie bei der Winkelmessung auf die korrekte Reihenfolge der ausgewählten Atome: Es wird der Winkel um das als zweites gewählte Atom bestimmt. Mit dem Mülleimer-Symbol können die Messungen jeweils gelöscht werden.

Wenn Sie mit der Untersuchung einer Struktur fertig sind, dann löschen Sie die Daten, indem Sie oben links bei StateTree auf das Mülleimer-Symbol klicken.

#### Aufgabe 2

Überlegen Sie sich, was für Materialeigenschaften Sie aus den beiden Strukturen ableiten können … recherchieren Sie gegebenenfalls die Eigenschaften von Graphit und Diamant.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Modifikation 1 | Modifikation 2 |
| Härte des Feststoffes | Extrem hart | Eher weich |
| Elektrische Leitfähigkeit | Nicht leitend | Elektrisch leitend |
| Metallischer Glanz | - | Ja |
| Transparenz | Ja | - |
| Wärmeleitfähigkeit | Extrem hoch | gut |
| Dichte | 3.52 | 2.1 – 2.3 |

#### Aufgabe 3

Künstliche Diamanten können bei hohen Temperaturen (ca. 2000 °C) und hohem Druck (über 50 kbar) aus Graphit hergestellt werden. Erklären Sie mit Hilfe der Struktur von Graphit und Diamant, warum ein hoher Druck nötig ist.

Durch den hohen Druck werden die Schichten des Graphits gegeneinander gepresst. Die delokalisierten Elektronen “sehen“ die Kerne der nächsten Schicht und bilden eine kovalente Bindung aus. Die Bildung einer kovalenten Bindung kostet Energie, die in diesem Fall in Form von Wärme und Druck zugefügt wird.

#### Aufgabe 4

Erklären Sie mit Hilfe der Struktur, warum Graphit als Schmiermittel verwendet werden kann

Zwischen den einzelnen Schichten des Graphitgitters wirken nur schwache, nicht kovalente Kräfte. Deshalb lassen sich die relativ weit auseinanderliegenden Schichten leicht gegeneinander verschieben. Dies erklärt die geringe Härte des Graphits sowie seine Verwendung als Gleit- und Schmiermittel.

#### Aufgabe 5

Erklären Sie mit Hilfe der Struktur, warum Graphit den elektrischen Strom parallel zu den Schichtebenen leitet, nicht jedoch senkrecht zur den Schichtebenen.

Der Kohlenstoff hat vier Valenzelektronen. Im Graphit werden jeweils drei Valenzelektronen für die kovalenten Bindungen innerhalb der Schichten verwendet. Die “vierten“ Valenzelektronen bauen ein über die ganze Schicht reichendes delokalisiertes Elektronensystem auf. Darin können sich die Elektronen frei bewegen. Es findet ein Stromfluss statt.