

Struktur der Elemente

Lernziele

- Sie erkennen, wie sich der Aufbau der Elemente innerhalb einer Periode ändert
- Sie lernen erste Schritte im Umgang mit dem Programm VESTA und in der Untersuchung von Kristallstrukturen

Die für die folgenden Aufgaben benötigten Kristallstrukturdaten werden Ihnen zur Verfügung gestellt, sind aber auch über die Crystallography Open Database zugänglich: <https://www.crystallography.net/>

Im folgenden Text bezeichnen Wörter in **Blau** Websites, Dateien oder Programme, welche ausgeführt werden müssen, Wörter in **Magenta** weisen auf Schaltflächen o.ä. hin, welche Sie im Programm anwählen können/müssen.

Installation der Software

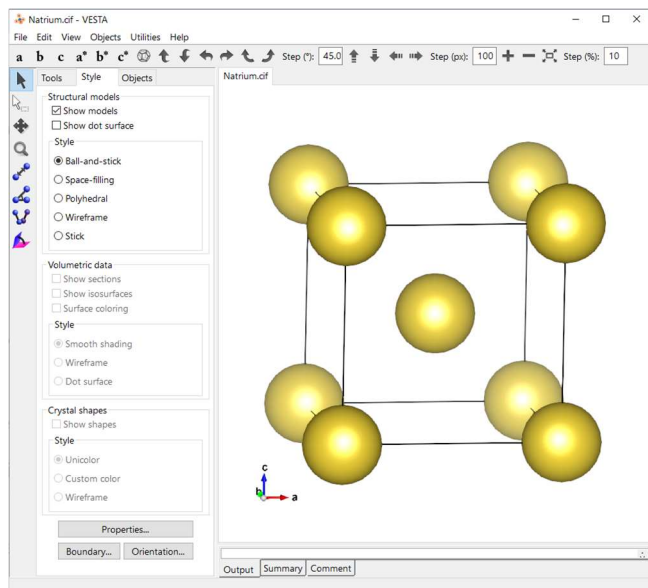
Die Untersuchung der Strukturen erfolgt mit dem Programm VESTA:
<https://jp-minerals.org/vesta/en/download.html>

Laden Sie den entsprechenden Ordner herunter und entpacken Sie diesen an einen Ort Ihrer Wahl. Um das Programm zu öffnen müssen Sie den Ordner öffnen und dann mit Doppelklick auf die Datei **VESTA.exe** ausführen. Dies gilt für jedes Mal, wenn Sie das Programm starten möchten; es erscheint nicht in der Liste der installierten Programme Ihres Computers.

elements	✓	18.04.2024 21:07
img	✓	18.04.2024 21:07
Library_License	✓	18.04.2024 21:07
PowderPlot	✓	18.04.2024 21:07
STRUCTURE_TIDY	✓	18.04.2024 21:07
style	✓	18.04.2024 21:07
tmp	✓	18.04.2024 21:07
asfcd	✓	18.04.2024 17:13
bvparam2020.cif	✓	18.04.2024 17:13
elements.ini	✓	18.04.2024 17:13
libcairo-2.dll	✓	18.04.2024 17:13
libiomp5md.dll	✓	18.04.2024 17:13
LICENSE	✓	18.04.2024 17:13
make.exe	✓	18.04.2024 17:13
mshpgr.dat	✓	18.04.2024 17:13
RIETAN.bat	✓	18.04.2024 17:13
spgra.dat	✓	18.04.2024 17:13
spgro.dat	✓	18.04.2024 17:13
STRUCTURE_TIDY.bat	✓	18.04.2024 17:13
style.ini	✓	18.04.2024 17:13
template.ins	✓	18.04.2024 17:13
VESTA.exe	✓	18.04.2024 17:13
VESTA.ini	✓	18.04.2024 17:13
VESTA_def.ini	✓	18.04.2024 17:13
wyckoff.dat	✓	18.04.2024 17:13

Arbeiten mit .cif-Dateien in VESTA

Das Crystallographic Information File (CIF) ist ein Standard-Textdateiformat zur Darstellung kristallographischer Daten, das von der International Union of Crystallography (IUCr) herausgegeben wird. Um .cif-Dateien in VESTA öffnen, können



Sie diese einfach per drag&drop in das Hauptfenster ziehen. Machen Sie dies, so sehen Sie als erstes die sogenannte Elementarzelle, welche durch die dünnen Linien begrenzt wird. Sie stellt das kleinstmögliche Element dar, aus welchem sich durch Verschiebung entlang von Translationsvektoren die Kristallstruktur erzeugen lässt. Die Atome oder Moleküle, die in einer Elementarzelle liegen, bilden die Basis des Kristalls.

Beachten Sie, dass Teile von Atomen, welche ausserhalb der Linien, welche die Elementarzelle begrenzen, nicht mehr zu dieser dazu gehören. In der Abbildung links gehört also jeweils nur 1/8 der Atome an den Ecken der Elementarzelle dazu.

Um mehr von der Kristallstruktur als nur die Elementarzelle zu sehen, kann diese entlang ihrer Achsen multipliziert werden. Hierfür wählt man im Hauptfenster unten links die Schaltfläche **Boundary** aus. Im dann erscheinenden Fenster kann man dann die Werte für $x(\min)/(\max)$, $y(\min)/(\max)$ und $z(\min)/(\max)$ anpassen. Wertepaare von 0/2 reichen typischerweise aus; wählt man grosse Zahlen, so wird das Bild sehr unübersichtlich.

Wählen Sie abschliessend **Apply** um die neuen Werte zu verwenden.

Wählt man unten im Hauptfenster die Schaltfläche **Summary** aus, so erhält man Informationen zu den Eigenschaften der Elementarzelle. Für spätere Aufgaben benötigen Sie hier die Angabe zum **Volumen V** der Elementarzelle.

Beachten Sie die hier verwendete Einheit Å (Ångstrom). Dies ist die in der Kristallographie typische Masseinheit für Distanzen, wobei $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ Metern}$ entspricht (oder anders ausgedrückt: $1 \text{ Å} = 10 \text{ Picometer}$).

Aufgabe 1:

Betrachten Sie die Elementarzellen von Elementen aus der 3. Periode. Erstellen Sie von jeder Elementarzelle einen Screenshot (zum Beispiel mit dem **Snipping-Tool** in Windows) und fügen Sie dieses in die Tabelle ein.

Welche Schlüsse können Sie anhand der Strukturen ziehen? Wie könnte sich dies in den Eigenschaften der Elementarstoffe widerspiegeln?

Natrium	Magnesium	Aluminium	Silicium
Phosphor	Schwefel	Chlor	Argon

Bemerkungen

Die Symmetrie im Kristallgitter von Magnesium ist nicht einfach zu interpretieren (hexagonal dichteste Kugelpackung) und leider ergibt sich auch durch Vergrösserung der Struktur kein übersichtliches Bild.

Aufgabe 2a:

Recherchieren Sie die Dichte dieser acht Elementarstoffe bei Standardbedingungen und ergänzen Sie die Tabelle mit den entsprechenden Werten.

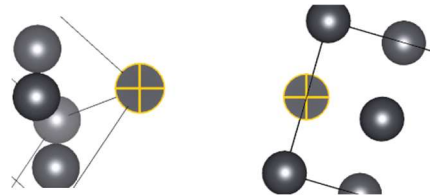
	Natrium	Magnesium	Aluminium	Silizium	Phosphor	Schwefel	Chlor	Argon
Dichte [g/cm ³]								

Wovon könnte die Dichte eines Elements im Festkörper abhängen? Überlegen Sie sich Faktoren, welche die Dichte innerhalb der Elementarzelle bestimmen, ohne Berücksichtigung von Druck und Temperatur. Erkennen Sie gewisse Trends?

Aufgabe 2b:

Berechnen Sie anhand der kristallographischen Daten die Dichte von Natrium *oder* Aluminium und die Dichte von Chlor *oder* Argon und vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem in **Aufgabe 2a** ermittelten Literaturwert.

Zuerst müssen Sie ermitteln, wie viele Atome wirklich innerhalb der Elementarzelle liegen. In den meisten Fällen befinden sich an den Ecken oder Seitenflächen nur Teilvolumen eines Atoms – diese müssen auch dementsprechend gezählt werden. Betrachtet man das markierte Atom in der folgenden Abbildung, so stellt man fest, dass nur $1/8$ von dessen Volumen innerhalb der Elementarzelle liegt und für die Berechnung der Dichte auch nur mit $1/8$ berücksichtigt werden darf. Ein anderes Atom liegt genau zur Hälfte auf der Fläche und wird somit mit auch als $1/2$ Atom gezählt.



Zur Berechnung der Dichte benötigen Sie:

- das Volumen der Elementarzelle, diese finden Sie in VESTA bei Summary, der Wert bezieht sich auf die Einheit Kubikangstrom \AA^3
- Die Anzahl Atome je Elementarzelle (siehe Erklärung oben)
- Das Gewicht eines einzelnen Atoms (Molare Masse geteilt durch Avogadro-Konstante $6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$)

Element	Natrium <i>oder</i> Aluminium
Volumen Elementarzelle (-> Summary)	
Anzahl Atome in der Elementarzelle	
Atomare Masse in Gramm	
Berechnete Dichte	
Literaturwert	

