

erste Überlegungen zu Kristallsystemen, Elementarzelle**Elementarzelle, Begriff**

Sie ist der kleinstmögliche Ausschnitt eines räumlichen Kristallgitters, der bereits alle physikalischen und chemischen Eigenschaften der Substanz (des Minerals) enthält.

Eigenschaften, die eine Elementarzelle erfüllt

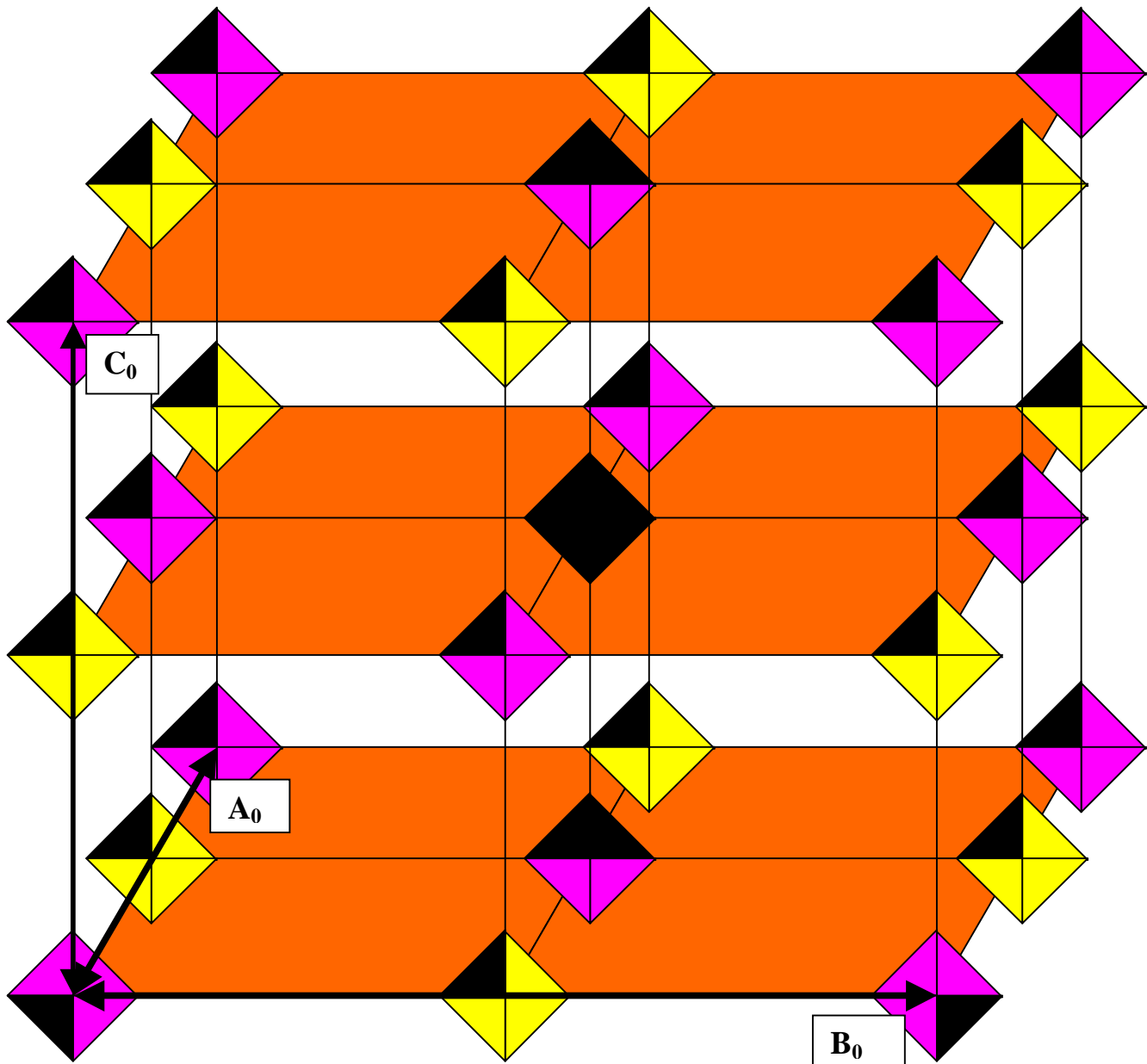
- Die Elementarzelle zeigt sämtliche Symmetrieelemente des Kristalls auf.
- Die Kanten der Elementarzelle verlaufen parallel zu den kristallographischen Achsen des Kristalls.
- Die Verhältnisse der Achsenabschnitte in der Elementarzelle entsprechen den Achsenverhältnissen des Kristalls selbst.
- Die Anzahl der Atome oder Ionen in einer Elementarzelle ist immer ein ganzzahliges Vielfaches der Anzahl an Atomen oder Ionen, die die Substanz gemäß ihrer chemischen Formel definieren.

Fazit

Die Elementarzelle einer Substanz ist die kleinste vorstellbare kristalline Ausbildung dieser Substanz, die aber die ihr von ihrem Kristallsystem (ihrer Kristallklasse) her zugeordnete Tracht ideal abbildet.

Vereinbarungen

- Atome und Ionen auf den Außenflächen der Elementarzelle werden dieser Elementarzelle hälftig zugerechnet.
- Atome und Ionen auf den Kanten oder Ecken der Elementarzelle werden je nach Gittersymmetrie mehreren Elementarzellen anteilig zugerechnet.
- Die Abmessungen der Elementarzelle (Länge der Achsenabschnitte) werden in Einheiten von Angström gemessen. Dabei entspricht ein Angström 0,0000001 cm).
- Die Zahl der Formeleinheiten je Elementarzelle wird durch den Buchstaben *Z* angegeben.

Ein einfaches Beispiel: Steinsalz, Halit, Natriumchlorid, NaCl

Magentafarbene Ionen sind Natrium, gelbe Ionen sind Chlor. Die Anzahl der schwarzgefärbten Quadranten gibt an, welcher Anteil eines Ions der gezeichneten Elementarzelle zugerechnet wird. Bei dem komplett schwarz eingefärbten Ion handelt es sich um Chlor (gelb). Das Bild zeigt, dass sich Natrium-Ionen und Chlor-Ionen in allen drei Raumrichtungen immer abwechselnd aneinander legen.

Es gilt für die Anzahl der Formeleinheiten: $Z = 4$. Die Zeichnung macht deutlich, dass insgesamt 4 Natrium- und 4 Chlor-Ionen der Elementarzelle zugeordnet sind.

erste Überlegungen zu Kristallsystemen, Elementarzelle

Die Winkel zwischen den 3 Achsen sind identisch und betragen $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Die Kanten der Elementarzelle verlaufen also parallel zu den Koordinatenachsen.

Die Gitterkonstanten a_0, b_0, c_0 sind gleich lang und betragen 5,64 Angstrom. Damit ist Natriumchlorid dem kubischen Kristallsystem zuzuordnen.

Das schwarz eingefärbte Chlor-Ion, ist das Symmetrie-Zentrum der Elementarzelle: Geht man von diesem Punkt aus in einer beliebigen Richtung an die Oberfläche der Elementarzelle, dann gibt es genau entgegengesetzt einen Punkt, der morphologisch (gleicher Abstand) und physikalisch (gleiches Ion) identisch ist.

Durch die Elementarzelle lassen sich drei Symmetrie-Ebenen legen, die parallel zu den Flächen verlaufen und sechs Symmetrie-Ebenen, die durch die Diagonalen des Würfels verlaufen. Insgesamt hat die Elementarzelle also 9 Symmetrie-Ebenen.

Die Elementarzelle ist darüber hinaus durch 13 Symmetrie-Achsen gekennzeichnet: drei vierzählige Achsen verlaufen senkrecht durch die Flächenmitten. Daneben gibt es vier dreizählige und sechs zweizählige Symmetrie-Achsen.

Mit einem Symmetrie-Zentrum, 9 Symmetrie-Ebenen und 13 Symmetrie-Achsen ist Natriumchlorid innerhalb des kubischen Kristallsystems der hex'oktaedrischen Kristallklasse zugeordnet.