

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](https://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.



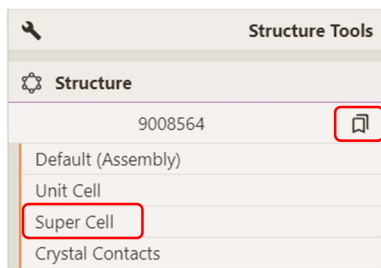
Die Atome in einem Kristall sind in einem Kristallgitter angeordnet. Die Kristallstruktur ist eine dreidimensionale periodische Wiederholung der Basis beziehungsweise eines Motivs. Die **Elementarzelle** (Unit Cell) ist hierbei das kleinste Raumelement, aus welchem durch Verschiebung in alle Raumachsen 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

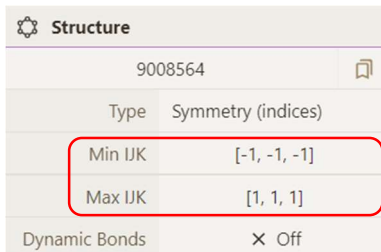
Untersuchen Sie die beiden vorliegenden Modifikationen von Kohlenstoff und bestimmen Sie, wie weiter unten beschrieben, die Bindungslängen, Bindungswinkel und im Fall von Modifikation 2 auch den Schichtabstand.

	Modifikation 1	Modifikation 2
C-C-Bindungslänge		
C-C-C-Bindungswinkel		
Hybridisierung am C-Atom		
Schichtabstand		

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

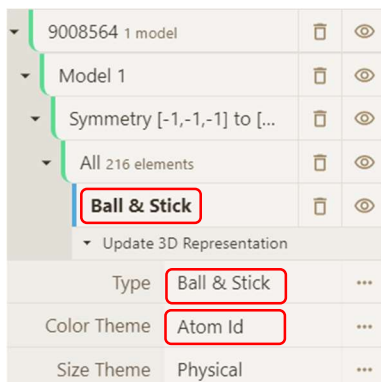


Wählen Sie oben rechts neben der Nummer der Struktur das Symbol  aus und wählen Sie dann **Super Cell** – ein grösserer Ausschnitt aus der Struktur sollte nun sichtbar sein.



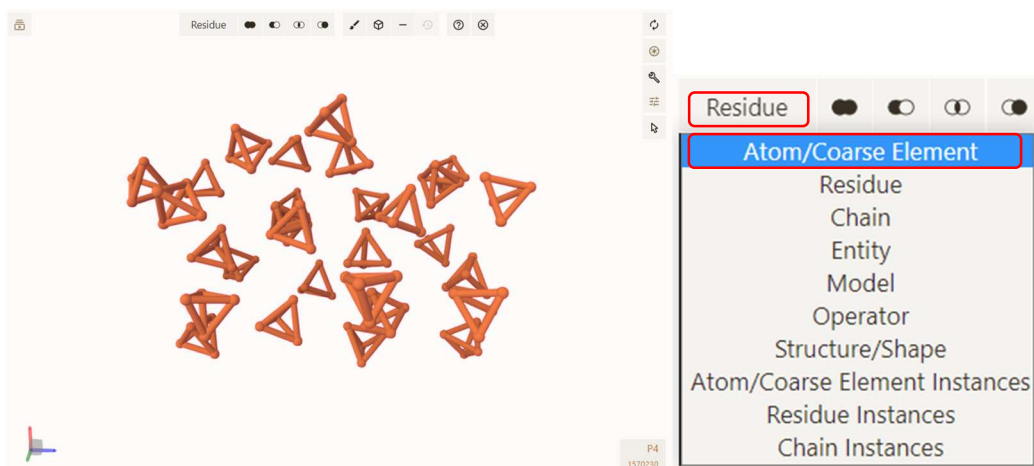
Durch Ändern der Werte bei **Min IJK** / **Max IJK** kann der sichtbare Ausschnitt weiter vergrössert / verkleinert werden.

Die unterschiedlichen Farben entsprechen den jeweiligen Elementarzellen, welche nun aneinandergereiht wurden.

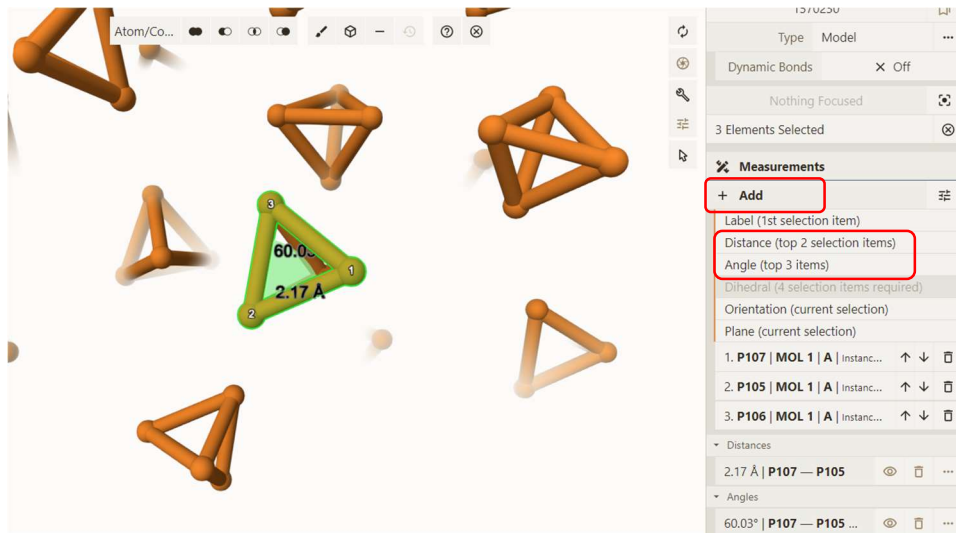


Um die Farbe der Atome zu ändern, klicken Sie auf der linken Seite auf den Eintrag **Ball&Stick** und wählen Sie unter **Update 3D Representation** bei **Color Theme** den Eintrag **Atom Id** aus.

- 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 $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ Meter}$ 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 **State Tree** 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		
Elektrische Leitfähigkeit		
Metallischer Glanz		
Transparenz		
Wärmeleitfähigkeit		
Dichte		

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.

Aufgabe 4

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

Aufgabe 5

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