

# **Berichtigung zum Tagungsbericht: "Über den Bindungs- und Leitungscharakter von Verbindungen mit CdJ\_2-Struktur"**

Autor(en): **Hulliger, F.**

Objektyp: **Corrections**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **34 (1961)**

Heft III

PDF erstellt am: **12.07.2024**

## **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

## **Haftungsausschluss**

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

**Berichtigung zum Tagungsbericht:  
«Über den Bindungs- und Leitungscharakter  
von Verbindungen mit CdJ<sub>2</sub>-Struktur»**

von **F. Hulliger**

Laboratorium für Festkörperphysik ETH, Zürich

(17. II. 1961)

Leider hat sich in den Tagungsbericht \*) ein Fehler eingeschlichen, den wir richtig stellen möchten. Bei der Diskussion der Jones-Zone von nichtmetallischen Verbindungen vom C6-Typ wurden die Verbindungen vom Wurtzit- und NiAs-Typ als Beispiele genannt, für welche dieselbe Jones-Zone massgebend sei. Dies ist aber nur richtig für nichtmetallische Verbindungen vom NiAs-Typ, da nur in diesen die Valenzkonfiguration der Anionen vom selben Typus ist. Wohl kann auch der Wurtzit-Typ wie der CdJ<sub>2</sub>- und NiAs-Typ von einem hexagonalen Anionengrundgitter abgeleitet werden. Beim Wurtzit-Typ jedoch sitzen die Kationen nicht in den Oktaederlücken, sondern in den Tetraederlücken des Anionengitters. Jedes Atom ist somit tetraedrisch von 4 Nachbarn der andern Art umgeben. Die 8 Valenzelektronen pro Anion sind deshalb völlig gleichwertig, die *s*- und *p*-Wellenfunktionen der Valenzelektronen von Anion und Kation zu *sp*<sup>3</sup>-Funktionen hybridisiert. Aus den Valenzfunktionen des Anions (oder aus den «bonding states» der MO-Theorie) entsteht aber durch Berücksichtigung der Wechselwirkungen im Kristall das Valenzband, wie man aus dem stetigen Übergang zum Grenzfall einer Verbindung mit reiner Ionenbindung sofort ersieht. Das Valenzband besteht bei Verbindungen vom Wurtzit-Typ deshalb aus 4 Teilbändern, enthält somit 8 Elektronenzustände pro Anion, genau gleich wie in der analog aufgebauten kubischen Struktur, dem Zinkblende-Typ.

In den nichtmetallischen Verbindungen vom CdJ<sub>2</sub>- und NiAs-Typ hingegen sind die Anionen von 3 bzw. 6 Kationen umgeben, so dass eine trigonale Pyramide mit dem Anion als Spitze bzw. ein Prisma entsteht. In diese Symmetrie passen die hybridisierten *p*-Atomfunktionen der Anionen. Die *s*-Schale der Anionen ist mit den 2 verbleibenden Elektronen

---

\*) Helv. Phys. Acta 33, 959 (1960).

vollständig gefüllt und liegt energetisch tiefer, obwohl natürlich auch eine zufällige Überlappung mit den  $p$ -Bändern möglich ist. Das Valenzband solcher Verbindungen geht also aus den 3  $p$ -Teilbändern hervor und enthält damit 6 Elektronenzustände pro Anion. Dreidimensional betrachtet muss somit die Energiezone oder Jones-Zone bei den nichtmetallischen Verbindungen vom  $\text{CdJ}_2$ - und  $\text{NiAs}$ -Typ 6 Elektronenzustände, bei den Verbindungen vom Wurtzit-Typ aber 8 Elektronenzustände pro Anion aufweisen.

Wie aus diesen Überlegungen überdies hervorgeht, ist eine Diskussion der chemischen Bindung weit aufschlussreicher als die Kenntnis der Jones-Zone.