Gitterfehlordnung und physikalische Eigenschaften hexagonaler und kubischer Eiskristalle

Doctoral Thesis**Author(s):**

Gränicher, W. H. Heini

Publication date:

1958

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000091992>

Rights / license:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

Prom. Nr. 2765

Gitterfehlordnung und physikalische Eigenschaften hexagonaler und kubischer Eiskristalle

Von der

EIDGENÖSSISCHEN
TECHNISCHEN HOCHSCHULE
IN ZÜRICH

zur

Erlangung der Würde eines Doktors
der Naturwissenschaften

genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

Vorgelegt von

HEINI GRÄNICHER

von Bern und Zofingen

Referent: Herr Prof. Dr. P. Scherrer • Korreferent: Herr Prof. Dr. F. Laves

1958

Wiesbaden-Kohlheck

Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH

Gitterfehlordnung und physikalische Eigenschaften hexagonaler und kubischer Eiskristalle

Von **H. GRÄNICHER**

Mit 10 Abbildungen im Text

(Eingegangen am 8. Januar 1958)

(Der E. T. H. als Promotionsarbeit eingereicht am 19. Juli 1957)

Abstract

The structural evidence on hexagonal and cubic ice crystals and their physical properties which strongly depend on the hydrogen arrangement are summarized. All possibilities of configurational changes in the ideal and in the real crystal are studied. It is shown that the electric properties can only be explained by the coexistence of ionized states (H_3O^+ and OH^-) and of orientational defects (doubly-occupied and vacant bonds). These typical lattice imperfections also account for the line breadth of the proton magnetic resonance, the mechanical relaxation and the thermal behaviour (zero-point entropy). For the self-diffusion other independent processes, presumably SCHOTTKY defects, must be essential. The theoretical considerations have been extended to the case of cubic (diamond) ice and several predictions are made.

Auszug

Die Kenntnisse über die Struktur hexagonaler und kubischer Eiskristalle sowie ihre physikalischen Eigenschaften, welche empfindlich von der Anordnung des Wasserstoffatome abhängen, werden zusammengefaßt. Alle Möglichkeiten für Konfigurationsänderungen im Ideal- und Realkristall werden untersucht. Er läßt sich eindeutig zeigen, daß die elektrischen Eigenschaften nur durch die gleichzeitige Existenz von Ionenzuständen (H_3O^+ und OH^-) und Orientierungsfehlern (doppeltbesetzte und leere Bindungen) gedeutet werden können. Durch diese charakteristischen Eigengitterfehler können auch die Linienbreite der Protonenspinresonanzen, die mechanische Relaxation und das thermische Verhalten (Nullpunksentropie) erklärt werden. Für die Selbstdiffusion dagegen sind andere Prozesse — vermutlich SCHOTTKY-Fehlordnung — maßgebend. Die entwickelten Vorstellungen gestatten einige theoretische Voraussagen für das kubische (Diamant-)Eis.

1. Einleitung

Wasser und seine feste Phase, das Eis, sind für das gesamte Naturgeschehen von zentraler Bedeutung. In ihren Eigenschaften weichen sie stark von den als normal zu bezeichnenden Flüssigkeiten und