

**Zeitschrift:** Helvetica Physica Acta  
**Band:** 34 (1961)  
**Heft:** III

**Erratum:** Berichtigung zum Tagungsbericht: "Über den Bindungs- und Leitungsscharakter von Verbindungen mit CdJ<sub>2</sub>-Struktur"

**Autor:** Hulliger, F.

### **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

### **Conditions d'utilisation**

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

### **Terms of use**

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

**Download PDF:** 17.01.2026

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>**

**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 tetraedisch 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.