

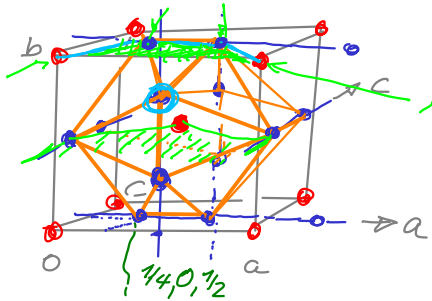
♡-Willkommen zur Übung!

heute bearbeiten wir das Blatt
zur Woche 12, nochmal ein bisschen
etwas Intermetallisches.

ich muss leider ~ 12³⁰ schon
schliessen, weil wir heute Gremien-
sitzungen haben.

1 Die intermetallische Phase Nb_3Sn , ein praktisch sehr wichtiger Supraleiter, gehört zu den FRANK-KASPER-Phasen.

(a) Skizzieren Sie mit Hilfe der Daten aus der ICSD die kleine kubische Elementarzelle der Struktur.



kubisch

$a = 600 \text{ pm}$

RG $Fm\bar{3}n$

$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2 \leftarrow Sn: 0,0,0$

$\frac{12}{2} = 6 \leftarrow Nb: \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$

$= 1:3$

(b) Zeichnen Sie die beiden FRANK-KASPER (FK) Polyeder um Sn und Nb ein, benennen Sie die Polyeder und die Koordinationszahl (als Hilfe: Web-Seite *Intermetallische Phasen*, Kap. 7.3.).

um Sn — CN=12 Icosaeder $Sr_2 Nb_{12}$ FK-12

um Nb — CN=14 2-fach überkappes hex. Antiprisma

$Nb: 10 Nb + 4 Sn = 14$

FK-14



(c) Verdeutlichen Sie sich (z.B. eine Skizze) das FK(12)-Polyeder (Icosaeder) als

• überkapptes pentagonales Antiprisma.

2-fach

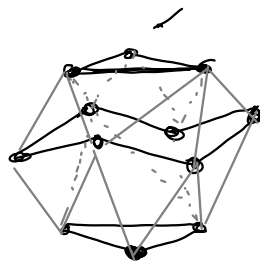
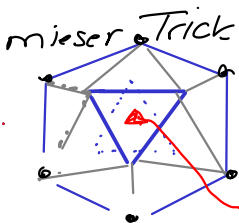


1 \leftarrow Kappe

5 } pentagonale Antiprisma

1 \leftarrow Kappe

• gestrecktes trigonales Antiprisma mit umgebendem 6-Ring in Sesselkonformation.



3

6 (sessel)

3



trig. Antiprisma

vgl: Kuboktaeder

analog,

aber

ebener

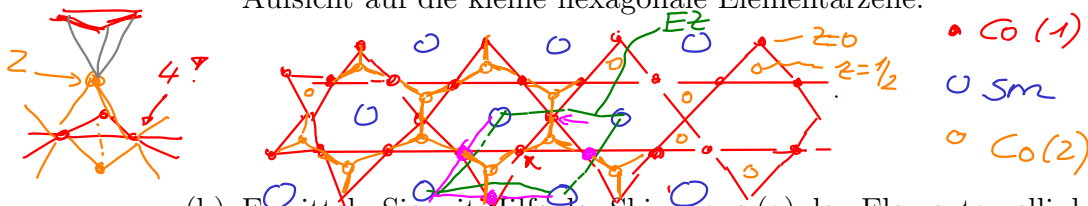
6-Ring!

• eingeschrieben in einen Würfel, entsprechend (b).

S.O.

2 **SmCo₅** ist ein wichtiges hartmagnetisches Material, das im sog. CaCu₅-Typ kristallisiert, der mit den LAVES-Phasen nahe verwandt ist.

(a) In SmCo₅ sind die Co-Kagomé-Netze identisch übereinander (| :AA: |) gestapelt, zwischen allen Dreiringen befinden sich weitere Co-Atome. Skizzieren Sie eine Aufsicht auf die kleine hexagonale Elementarzelle.



(b) Ermitteln Sie mit Hilfe der Skizze aus (a) den Elementarzellinhalt und bestätigen Sie damit die Summenformel.

$$\begin{array}{l}
 \text{Sm } \circ \quad 8 \cdot \frac{1}{8} = 1 \\
 \text{Co(1)} \bullet \quad 2 \cdot \frac{1}{2} + 8 : 4 = 3 \\
 \text{Co(2)} \circ \quad 2
 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{Sm} \\ \text{Co(1)} \\ \text{Co(2)} \end{array}} \right\} = 5$$

(c) Welche Koordinations-Zahl und -Polyeder haben die Sm und die beiden kristallographisch unterschiedlichen Co-Atome?

Abb. folgt {

$$\begin{array}{l}
 \text{Sm: } 6 + 6 + 6 + 2 \text{ Sm} = 20 \\
 \text{Co: } 6 \text{ Co} + 6 \text{ Sm} \\
 \text{Co: } 8 \text{ Co} + 4 \text{ Sm}
 \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{Sm} \\ \text{Co} \\ \text{Co} \end{array}} \right\} \text{FK } 12 \hat{=} 12 \text{ Kosubeder}$$

$15 \text{ Sm} + 6 \text{ Co(2)} + 6 \text{ Co(1)} + \text{Co(2)} + 15 \text{ Sm}$
 (antiprism.)

(d) Wie sind die leeren Co₄-Tetraeder verknüpft? Formulieren Sie die Zusammensetzung in einer NIGGLI-Formel.



3 Im NaZn₁₃-Strukturtyp finden sich Zn-gefüllte Zink-Ikosaeder und Na-Atome mit einer Koordinationszahl von 24 !.

(a) Wie läßt sich das Na-Koordinationspolyeder (Snub-Cube) konstruieren? (keine Skizze!) - Würfel, alle 8 Ecken so abstrneiden, dass reguläre 3- und 4-Ecke entstehen

(b) Warum ist dieses Polyeder kein FK-Polyeder?

⇒ Web-Site
keine Vierecke erlaubt

(c) Zusätzlich zu Ikosaedern und Snub-Cubes gibt es noch kleinere Lücken in dieser Struktur, sog. Tetraeder-Sterne (TS). Zeichnen Sie einen solchen. Warum überrascht es wenig, dass TS bei den FK-Phasen sehr häufig auftreten?

