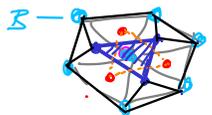
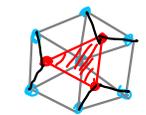


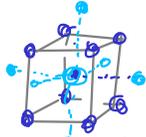
ausgefüllt in ZBB-Session am 14.11.24  
(Nachträgliche Korrekturen in LLA!)

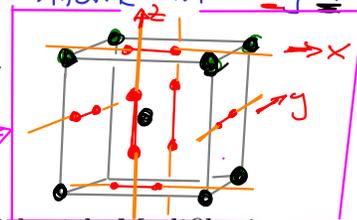
08.11.2024 **Übung zur 3. Woche** C. Röhr  
Vorlesung **Anorganische Strukturchemie/Festkörperchemie II**

1 Die Halogene sowie die zweiatomigen Moleküle O<sub>2</sub> und N<sub>2</sub> bilden im Festkörper unterschiedliche Packungen. Welche Koordinationszahl (Zahl benachbarter Moleküle) und Koordinationspolyeder liegen vor in:

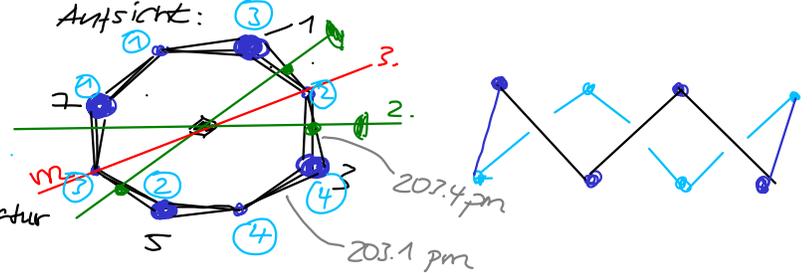
(a) α-N<sub>2</sub> X<sub>2</sub> nach dem Motiv des α-Typs/f.c.c. angeordnet (1:ABC:1)  

 $3 \Rightarrow C$   $CN=12$   
 $6 \Rightarrow B$  Polyeder: Kuboktaeder  
 $3 \Rightarrow A$  3+4 Ecken als Flächen

(b) β-N<sub>2</sub> X<sub>2</sub> nach dem Motiv des Mg-Typs/h.c.p. angeordnet (1:AB:1)  

 $3 \Rightarrow A$   $CN=12$ : Antikuboktaeder  
 $6 \Rightarrow B$   
 $3 \Rightarrow A$

(c) γ-N<sub>2</sub> X<sub>2</sub> " " " " W-Typs/b.c.c.  

 $CN=3 + 6 \leftarrow \text{Oktaeder} = 14$   
 $\hookrightarrow$  Würfel  $\hookrightarrow$  Rhombendodekaeder

(d) β-F<sub>2</sub> (! 2 kristallographisch unterschiedliche Hanteln)  

 $X_2$  wie Atome in Cr<sub>3</sub>Si, Nb<sub>3</sub>Sr  $\Rightarrow$  5. VZML letzten Freitags  
 $CN=14$  (Icosaeder)  
 $12$  2-fach überlappendes Pentagone Aniprisma  
 $2$  verschiedene Koordiniert  
 $Cr_2$ -Ketten auf Flächen  
 $Cr$ -Ketten entlang aller 3 Richtungen  
 $\Rightarrow$  Frank-Kasper-Phasen  
 $6 \times (2) = 12$  (Icosaeder)  
 $= 14$  hex. Aniprisma 2\* überlappt

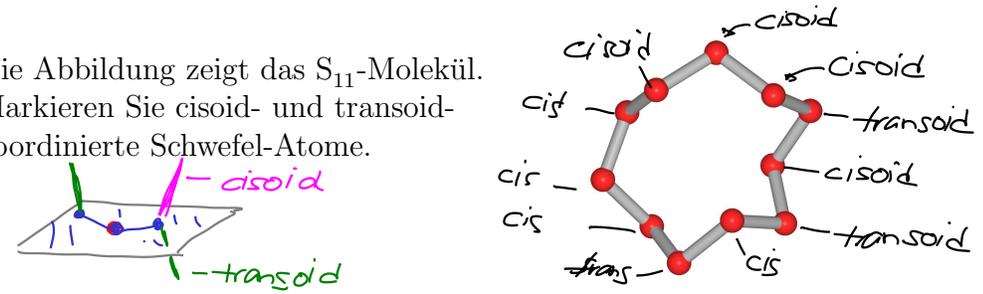
(a) Zeichnen Sie ein S<sub>8</sub>-Mölekül in einer Seitenansicht und einer Aufsicht und zeichnen Sie die wichtigsten Symmetrieelemente ein. Welche Punktgruppe liegt vor?

• 4-zählige Drehachse: 1-3-5-7  
 $D_{4d}$   
 Schönflies-Nomenklatur  
 Hermann-Mauguin  $\bar{8} 2m$   
 Drehinversionsachse 1  $\rightarrow$  6  

 203.4 pm  
 203.1 pm

(b) Messen sie (mittels COD/ICSD) die S-S-Abstände im Ring von α-Schwefel aus. Warum sind sie nicht alle gleich? Welche Punktgruppe liegt im Kristall vor?  
 $S(1)-S(4)$  P6: C<sub>2</sub> 12 (Untergruppe von  $\bar{3}2m$ )

8-zählige Drehachsen NICHT kristallographisch

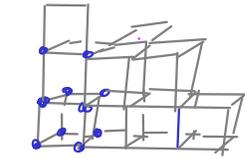
(c) Die Abbildung zeigt das S<sub>11</sub>-Mölekül. Markieren Sie cisoid- und transoid-koordinierte Schwefel-Atome.



cisoid  
transoid

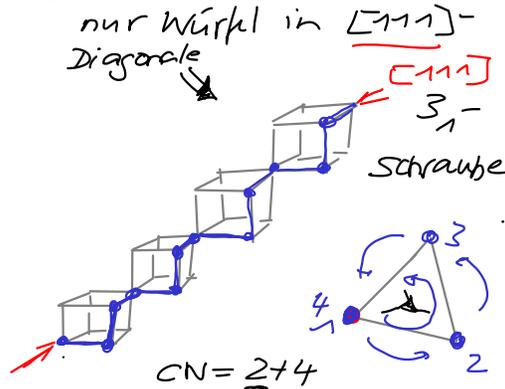
3 Die Druckhomologen-Regel erlaubt es auch, einen Bezug zwischen den Elementstrukturen von Se, Te und Po herzustellen.

(a) Skizzieren Sie  $4 \times 4 \times 4$  Elementarzellen des  $\alpha$ -Polonium-Typs.



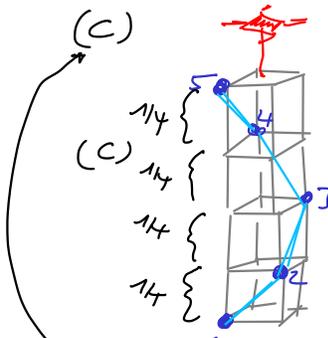
$\overline{P}_6$ : CN=6

komplette  
Zeichnung  
unnötig

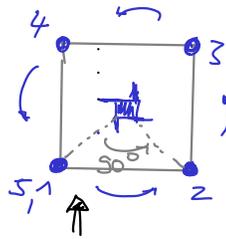


Se, Te-Ketten  
 $3_1$ -Schrauben  
 $\hookrightarrow$  in  $[111]$ -Richtung

(b) Markieren Sie in der Abbildung (a) eine typische  $3_1$ -Schraubenkette (z.B. von Tellur).



$4_1$  Translation um  $1/4$ , Drehung um  $360/4$  °



isoelektronisch  
zu Se  
(6 v.e.)  $\Rightarrow$  Zindig

(c) Es gibt auch Beispiele für  $4_1$ -Schraubenketten (z.B.  $As^-$  in KAs). Zeichnen Sie auch eine solche Kette in den Po-Typ ein.

$\hookrightarrow$  Zink-Phase

4 Elementares Selen ist ein wichtiger Halbleiter mit einer Bandlücke von 2.2 eV.

(a) Skizzieren Sie die Zustandsdichte und geben Sie an, welche Atomorbitale des Selens die jeweiligen Bänder bilden.

! nach Einschub über Bandstrukturen I (LCAO im  $\infty$ -Fall)  
(Exkurs)

(b) Passt die Farbe von Selen zur Bandlücke?