

Vorlesung Anorganische Strukturchemie (AC-V)

1 Die Halogene sowie die zweiatomigen Moleküle O₂ und N₂ bilden im Festkörper unterschiedliche Packungen. Welche Koordinationszahl (Zahl benachbarter Moleküle) und Koordinationspolyeder liegen vor in:

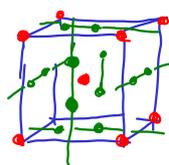
(a) α-N₂ f.c.c. (face centred cubic, Cu-Typ) / 12 Nachbarn / Kuboktaeder

(b) β-N₂ h.c.p. (hexagonal close packed, Mg-Typ) / 12 Nachbarn / Anti-Kuboktaeder

(c) γ-N₂ b.c.c. (body centred cubic, W-Typ) / 8 + 6 Nachbarn
 ↑ ↑
 Würfel Oktaeder

(d) β-F₂ (! 2 kristallographisch unterschiedliche Hanteln)

Cr₃Si-Typ:



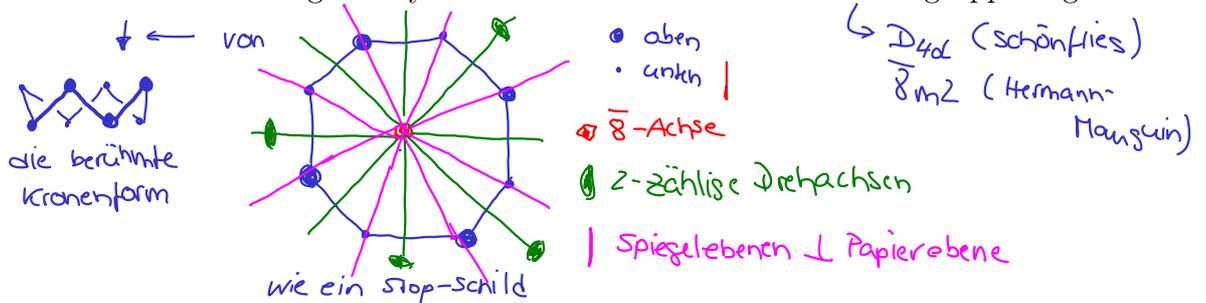
Si: 0,00 und 1/2, 1/2, 1/2 / 12 Nachbarn / Ikosaeder

Cr: 1/2, 1/2, 0 : 14 Nachbarn / 2-fach überkappedes hexagonales Antiprisma

diese Verbindung gehört zu den Laves-Phasen und kommt dort dann nochmal; beide Koordinationspolyeder sind sog. Frank-Kasper-Polyeder

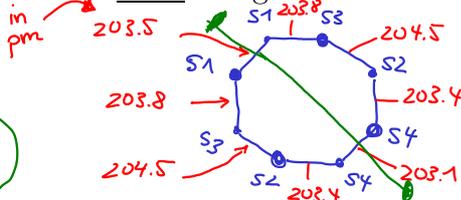
2 Schwefel bildet ziemlich viele Modifikationen.

(a) Zeichnen Sie ein S₈-Molekül in einer Seitenansicht und einer Aufsicht und zeichnen Sie die wichtigsten Symmetrieelemente ein. Welche Punktgruppe liegt vor?



(b) Messen sie (mittels ICSD) die S-S-Abstände im Ring von α-Schwefel aus. Warum sind sie nicht alle gleich? Welche Punktgruppe liegt im Kristall vor?

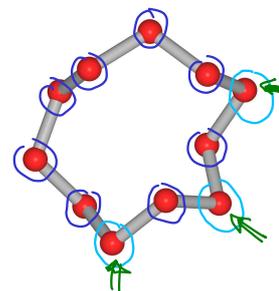
die Raumgruppe ist Fddd, die hat auch nur 2-zählige Drehachsen als nicht-translations-behaftete Symmetrieelemente



von den Symmetrieelementen bleibt im Kristall nur 2 bzw. C₂ übrig (C_{8h2} ist nicht-kristallographisch, kann also in einem Kristall nicht vorkommen)

(c) Die Abbildung zeigt das S₁₁-Molekül. Markieren Sie cisoid- und transoid-koordinierte Schwefel-Atome.

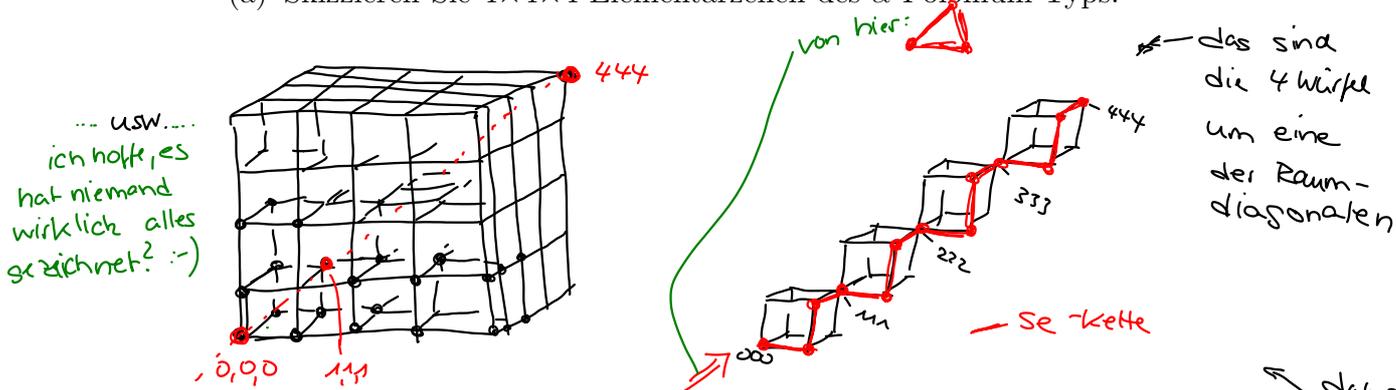
cisoid ●
 transoid ○



ist. Vertik dazu anschauen

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 α -Polonium-Typs.

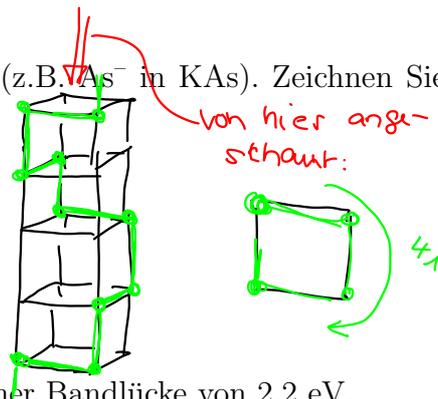


(b) Markieren Sie darin eine typische 3_1 -Schraubenkette (z.B. von Tellur).
die 3_1 -Achse verläuft über die Raumdiagonale und kommt immer an den Würfeln am $0,0,0$ / $1,1,1$ / $2,2,2$... vorbei

(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.

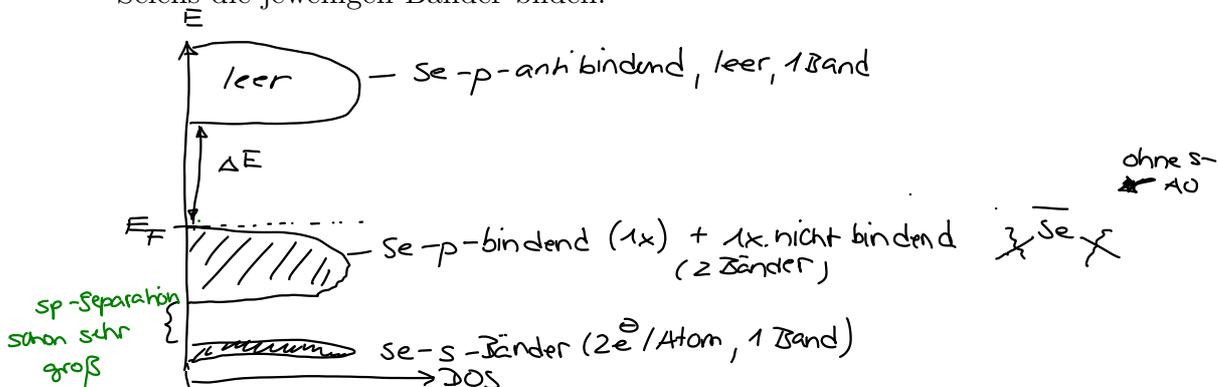
hier braucht man nur einen "Turm" aus Würfeln:

As



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 Selen die jeweiligen Bänder bilden.



(b) Passt die Farbe von Selen zur Bandlücke?

ggf. mal im AGP-Seminar "BLAU" die S. 19 anschauen

$2.2 \text{ eV} \hat{=} \sim 550 \text{ nm}$ (grün), es liegt eine Bandkante (breites LB!) vor, damit fehlen alle energiereicheren Farben, also weiß - violett/blau/grün \hookrightarrow damit bleiben nur rot(+selb) und Se sollte orange-rot sein
(die Farbe hängt von der Modifikation ab: - rotes Se } grob
- graues Se } stimmt also
..... }