

Aufgabe	1	2	3	4	5
Punkte (je 10)					

Klausurteil II: *Anorganische Strukturchemie*

26.02.2024

Name: _____ Vorname: _____ Matrikel-Nr. _____

Hinweis: Verwenden Sie für die Antworten den hinter den Fragen freigelassenen Raum. Falls dieser nicht ausreichen sollte, benutzen Sie die Blattrückseiten und machen Sie bei der Frage einen Verweis.

- ❶ Beschreiben Sie die folgenden **Begriffe** aus der Kristallchemie der **Ionenkristalle** und erläutern Sie diese jeweils anhand eines konkreten **Beispiels** .

(a) SHANNON-Radien

(b) MADELUNG-Konstante

(c) Octahedral Site Preference Energy (Oktaeder-Bevorzugungs-Energie)

- ② Das **Element Phosphor** zeichnet sich durch viele Allotrope aus, von denen bei weitem nicht alle strukturell vollständig geklärt sind.
- (a) Skizzieren Sie das gemeinsame Bauelement des HITTORF'schen und des faserförmigen Phosphors (das auch die Basis vieler amorpher Phosphor-Modifikationen ist).
- (b) Beschreiben Sie (Zeichnung nicht erforderlich!) die weitere Verknüpfung dieser Baugruppe im Fall des HITTORF'schen Phosphors.
- (c) Skizzieren Sie die Struktur der thermodynamisch stabilen schwarzen Form von Phosphor.
- (d) Erläutern Sie die Druck-Homologen-Regel sowie das Druck-Abstands-Paradoxon am Beispiel zweier Hochdruck-Formen von Phosphor (Trends der Atomabstände ausreichend!).

③ Das Metall **Calcium** kristallisiert, abhängig von Druck und Temperatur, in den drei Basisstrukturen einfacher Metalle.

(a) Skizzieren Sie die Elementarzellen der drei Modifikationen.

PEARSON-Symbol: $cF4$

$cI2$

$hP2$

Gitterparameter: $a = 561.2$ pm

$a=448.0$ pm

$a = 400$ pm, $c= 660$ pm

(b) Welche Koordinationszahlen und -polyeder haben die Ca-Atome in den drei Formen?

(c) Mit Zinn und Zink bildet Calcium intermetallische Phasen CaM_2 , die zwei unterschiedlichen Klassen angehören. Benennen Sie diese und beschreiben Sie die Bauprinzipien und Strukturen von $CaSn_2$ und $CaZn_2$. Welche Koordinationszahlen und -polyeder haben die Zn- bzw. Sn-Atome in den beiden Phasen?

- $CaSn_2$

- $CaZn_2$

- ④ **Perowskite** (z.B. SrTiO_3) sind praktisch sehr wichtige Salze mit zwei verschiedenen Metall-Kationen, anhand derer sich die PAULING-Regeln demonstrieren lassen.
- (a) Skizzieren Sie die Elementarzelle von SrTiO_3 und geben Sie die Koordinationspolyeder der beiden Kationen an. Welche idealen Radienverhältnisse zum Oxid-Ion erwarten Sie? Warum gelingt die Beschreibung über eine dichteste Anionen-Packung in diesem Fall nicht?
- (b) Zeigen Sie die Gültigkeit der 2. PAULING-Regel für SrTiO_3 .
- (c) PbTiO_3 kristallisiert in einer verzerrten Variante der idealen Perowskit-Struktur. Wie lässt sich diese Beobachtung begründen?
- (d) FeTiO_3 (Illmenit) stellt dagegen eine Überstrukturvariante der Korund-Struktur dar.
- Was versteht man unter einer Überstruktur?
 - Beschreiben Sie die Kristallstruktur von Illmenit (Anionen-Packung, KKP's und deren Verknüpfung). Welche der PAULING-Regeln ist hier verletzt?

⑤ **Strukturzusammenhänge bei kovalenten Verbindungen** lassen sich besonders schön bei den 3D-Raumnetzen des kubischen bzw. hexagonalen **Diamanten** demonstrieren.

(a) Ergänzen Sie hierzu die Tabelle:

	kubischer Diamant	hexagonaler Diamant
Bezug zu dichtesten Kugelpackungen		
Skizze der Elementarzelle		zu gemein !
C-Ringe inkl. Konformation		
Bindungsaufgefüllte Variante		
Lückenaufgefüllte Variante		

(b) Beschreiben Sie die Strukturen von zwei weiteren wichtigen Modifikationen von Kohlenstoff. Welche Lücken- und Bindungsaufgefüllten Varianten kennen Sie hierzu?