

❶ 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.

(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.).

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

- überkapptes pentagonales Antiprisma.

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

- eingeschrieben in einen Würfel, entsprechend (b).

- 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.
- (c) Welche Koordinations-Zahl und -Polyeder haben die Sm und die beiden kristallographisch unterschiedlichen Co-Atome?
- (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!)
- (b) Warum ist dieses Polyeder kein FK-Polyeder?
- (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?