

## Übungsaufgaben AC III – 4 (22.05.18)

Nachtrag zu Hume-Rothery Phasen (letzte Woche):

Elektronenkonfigurationen (Fett gedruckt: zu berücksichtigende Elektronen):

Rhodium	[Kr] 4d <sup>8</sup> <b>5s<sup>1</sup></b>	VE = 1
Zink	[Ar] 3d <sup>10</sup> <b>4s<sup>2</sup></b>	VE = 2
Kupfer	[Ar] 3d <sup>10</sup> <b>4s<sup>1</sup></b>	VE = 1
Zinn	[Kr] 4d <sup>10</sup> <b>5s<sup>2</sup> 5p<sup>2</sup></b>	VE = 4
Aluminium	[Ne] <b>3s<sup>2</sup> 3p<sup>1</sup></b>	VE = 3

### Rh<sub>5</sub>Zn<sub>21</sub>

Valenzelektronen:  $5 \cdot 1 + 21 \cdot 2 = 47$       VEK:  $47 / (5 + 21) = 47 / 26 = 1.80$

Wäre gemäß VEK im Bereich der  $\epsilon$  und  $\eta$  Phasen. ABER: Grenze des vereinfachten Modells:  $\gamma$ -Phase!

### Cu<sub>3</sub>Sn

Valenzelektronen:  $3 \cdot 1 + 1 \cdot 4 = 7$       VEK:  $7 / 4 = 1.75$        $\epsilon$ -Struktur

### CuZn<sub>3</sub>

Valenzelektronen:  $1 \cdot 1 + 3 \cdot 2 = 7$       VEK:  $7 / 4 = 1.75$        $\epsilon$ -Struktur

### Cu<sub>4</sub>Sn

Valenzelektronen:  $4 \cdot 1 + 1 \cdot 4 = 8$       VEK:  $8 / 5 = 1.6$

Wäre gemäß VEK (1.6)  $\gamma$ -Struktur, aber hier größere Phasenbreite:  $\beta$ -Struktur (allg. bis VEK 1.58).

### Cu<sub>3</sub>Al

Valenzelektronen:  $3 \cdot 1 + 1 \cdot 3 = 6$       VEK:  $6 / 4 = 1.5$        $\beta$ -Struktur

**1) Erstellen Sie eine übersichtliche Darstellung (Elementarzelle, Koordinationspolyeder, Elementsymbole) für die folgende Spinelstruktur:**

Raumgruppe F d -3 m (Nr. 277, Aufstellung FD3MZ),  $a = 8.4360 \text{ \AA}$ .

Atom	S.O.F.	x/a	y/b	z/c
Li1	0.5	1/8	1/8	1/8
Cu1	0.5	1/8	1/8	1/8
Rh1	0.5	1/2	1/2	1/2
Ru2	0.5	1/2	1/2	1/2
O1	1	0.724	0.724	0.724

Stellen Sie ihre fertige Darstellung online [#AC318FU](https://twitter.com/AC318FU) und vergleichen Sie mit Darstellungen Ihrer Kommilitonen.

Hinweis: Fehlordnungen/Statistische Verteilungen können durch Doppelfarben dargestellt werden.

Hinweis: In Diamond „New Empty Document“ – „Structure“ – „New Structure“, „Type in new structure parameters“ ...

## 2) Identifizieren Sie die folgenden Strukturtypen

a) Raumgruppe P42/m n m (Nr. 136),  $a = 4.7019(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 3.0168(1) \text{ \AA}$ .

Atom	S.O.F.	x/a	y/b	z/c
Rh1	0.5	0	0	0
Nb1	0.5	0	0	0
O1	1	0.3	0.3	0

b) Raumgruppe P b n m (Nr. 62),  $a = 5.5350(4) \text{ \AA}$ ,  $b = 5.5529(4) \text{ \AA}$ ,  $c = 7.8305(5) \text{ \AA}$ .

Atom	S.O.F.	x/a	y/b	z/c
La1	1	0.0090(7)	0.0419(3)	0.25
Ni1	0.5	0.5	0	0
Rh1	0.5	0.5	0	0
O1	1	0.2890(5)	0.2878(5)	0.0409(4)
O2	1	-0.081(1)	0.4899(6)	0.25

c) Raumgruppe R -3 c (Nr. 167, Aufstellung R3-CHR),  $a = 5.127(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 13.853(4) \text{ \AA}$ .

Atom	S.O.F.	x/a	y/b	z/c
Rh1	1	0	0	0.348(1)
O1	1	0.295(10)	0	1/4

## 3) Nennen Sie die Hauptbestandteile folgender Legierungen

- a) Elektron
- b) Monel
- c) Elektrum
- d) Schrot
- e) Bronze

## 4) Beschreiben Sie die Lindqvist-, Keggin-, und Dawson-Anionen.

## 5) Zeichnen Sie einen Ausschnitt aus der Tridymit- und Cristobalitstruktur.

## 6) Klassifizieren Sie die folgenden (Alumo-)Silikate:

- a)  $\text{Al}_2\text{Be}_3[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  (Beryll)
- b)  $\text{Ca}_2\text{Al}[(\text{Si},\text{Al})_2\text{O}_7]$  (Gehlenit)
- c)  $\text{Al}_2[(\text{F},\text{OH})_2|\text{SiO}_4]$  (Topas)
- d)  $\text{Na}_{12}[(\text{AlO}_2)_{12}(\text{SiO}_2)_{12}]$  (Zeolith A)