

**Übungsaufgaben AC III – 5 (29.05.18)**

**1) Geben Sie die möglichen Farbzentren für die Bedampfung von NaCl mit K in der Kroeger-Vink-Notation an.  $e_{Cl}^x + Cl'_v + K'_v$**

**2) Geben Sie die Kroeger-Vink-Notation für folgende Defekte an:**

- a) Mit As dotiertes Silizium.  $As_{Si}^x$
- b) Shottky-Defekt in Rutil.  $Ti_{V}^{''''} + O_{V}^{''} + V_{Ti}^{''''} + V_{O}^{''}$
- c) Anti-Frenkel Defekt in Wurzit.  $S_{i}^{''} + V_{S}^{''}$

**3) Vergleichen Sie Fern- und Nahordnung von**

- a) Gläsern, ionischen Flüssigkeiten, amorphe Festkörper / alle Nahordnung
- b) Intermetallischen Phasen, Legierungen, Nanostrukturen (alle Nahordnung und – begrenzte – Fernordnung)
- c) Polymere, COFs, MOFs (Alle Nahordnung, MOFs mit Fernordnung)

**4) Nennen Sie je zwei homoatomare und heteroatomare Nanostrukturen die von technischer oder wissenschaftlicher Relevanz sind.**

**5) Leiten Sie die Madelungkonstante für CsCl her. Berechnen Sie die Gitterenergie unter Annahme rein ionischer Wechselwirkungen.**

**6) Schlagen Sie einen Strukturtyp für folgende Verbindungen vor:**

- NaI     NaCl
- Na<sub>2</sub>O   CaF<sub>2</sub>
- CsF     NaCl
- CsI     CsCl
- BeF<sub>2</sub>   kovalent
- BeI<sub>2</sub>   kovalent
- BeO     Wurzit
- BeTe    Zinkblende

Gegebene Größen:

$\epsilon_0$	$8.85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Jm}$
$e$	$1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
$N$	$6.022 \cdot 10^{23}$
$h$	$6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

Ionenradien:

$Na^+$	102 pm
$Cs^+$	167 pm
$Be^{2+}$	31 pm
$F^-$	133 pm
$Cl^-$	181 pm
$I^-$	220 pm
$O^{2-}$	140 pm
$Te^{2-}$	221 pm

Min. Radienquotienten nach Pauling:

CN 3	0.155
CN 4	0.225
CN 6	0.414
CN 7	0.592
CN 8 (quadr. Antiprisma)	0.642
CN 8 (Kubus)	0.732
CN 12	1