

Seminar zur Vorlesung

Anorganische Chemie III

Wintersemester 2017/18

Christoph Wölper

Institut für Anorganische Chemie der Universität Duisburg-Essen

Wiederholung

Was bisher geschah

kubische Strukturtypen basierend auf dichtesten Packungen

→ $Fm\bar{3}m$

⇒ Cu-Struktur

⇒ NaCl-Struktur

⇒ CaF_2 -Struktur

⇒ BiLi_3 -Struktur

→ $F\bar{4}3m$

⇒ Zinkblende-Struktur

→ $Fd\bar{3}m$

⇒ Diamant-Struktur

kubische Strukturen basierend auf dichten Packungen

→ $Pm\bar{3}m$

⇒ CsCl-Struktur

Strukturtypen

Hexagonale Strukturtypen

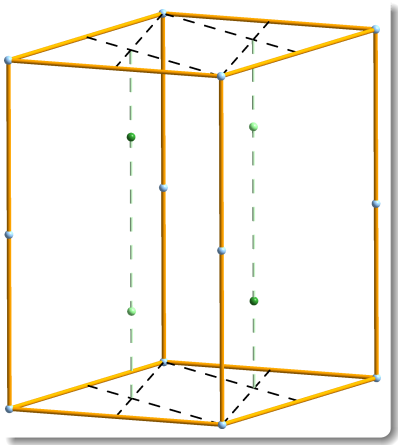
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$

- # Spezielle Lage (2c) bei $\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{4}$, äquivalent bei $\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{3}{4}$
 - bildet dichteste Packung bei korrektem c/a -Verhältnis
 - trigonal-prismatische Punktsymmetrie
- # Spezielle Lage (2d) bei $\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{3}{4}$, äquivalent bei $\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{4}$ mit identischen Eigenschaften
- # Spezielle Lage (2a) bei 0 0 0 und äquivalent bei 0 0 $\frac{1}{2}$
 - trigonal anti-prismatische Punktsymmetrie
 - bei c/a -Verhältnis einer dichtesten Packung oktaedrische Metrik der Umgebung
- # Spezielle Lage (4f) bei $\frac{1}{3} \frac{2}{3} z$, äquivalent bei $\frac{2}{3} \frac{1}{3} -z$, $\frac{1}{3} \frac{2}{3} -z + \frac{1}{2}$, $\frac{2}{3} \frac{1}{3} z + \frac{1}{2}$
 - Symmetrieelement ist eine Achse mit dreizähliger Symmetrie
 - bei c/a -Verhältnis einer dichtesten Packung ergibt sich für $z = \frac{3}{8}$ eine tetraedrische Metrik der Umgebung

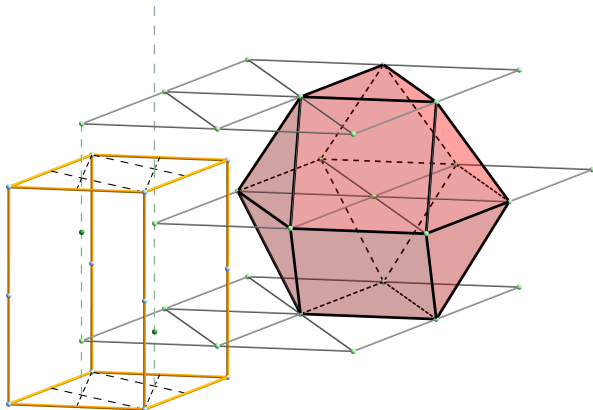
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



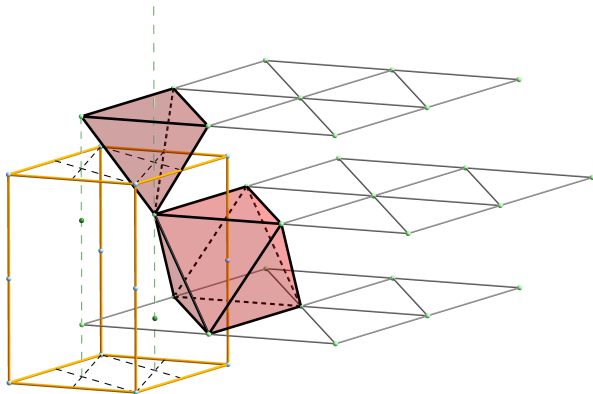
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



Strukturtypen

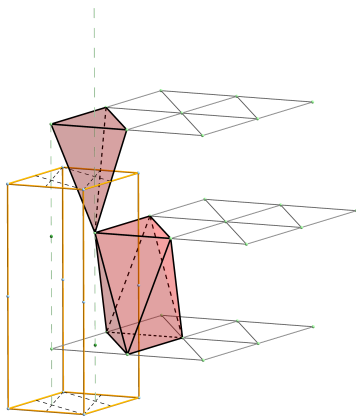
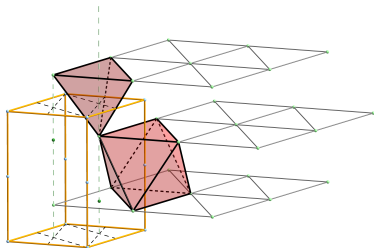
Hexagonal $P6_3/mmc$



Strukturtypen

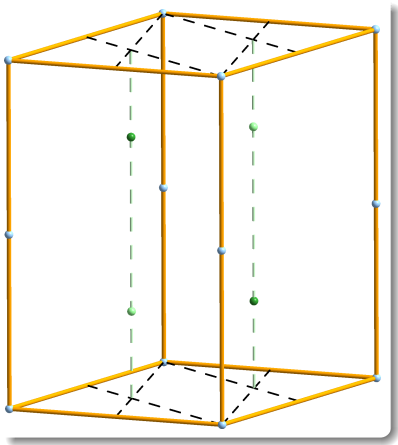
Oktaeder vs. trigonales Antiprisma

- # nur lokal 4-zählige Symmetrie
- # global nur $\bar{3}$ -Symmetrie und $2/m$ Symmetrie



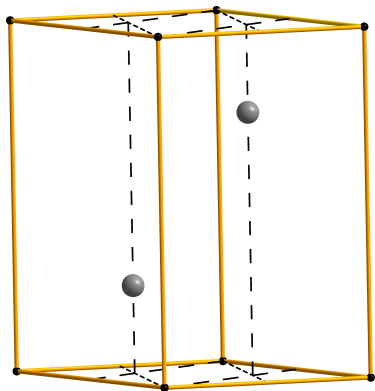
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



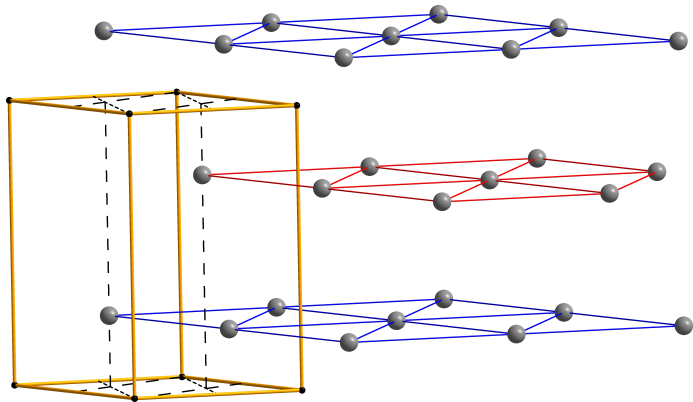
Zn auf 2c

Struktur vieler Metalle

- Beryllium, Magnesium
- Scandium-Gruppe
- Titan-Gruppe
- Technetium, Rhenium
- Ruthenium, Osmium
- Cobalt
- Zink, Cadmium
- Thallium

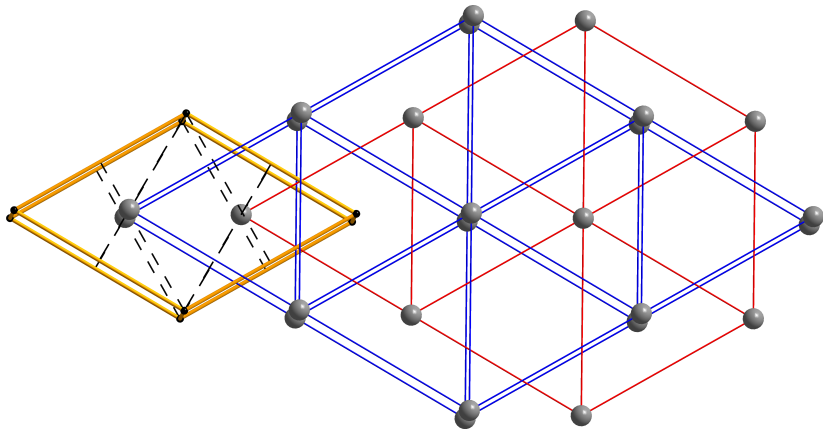
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



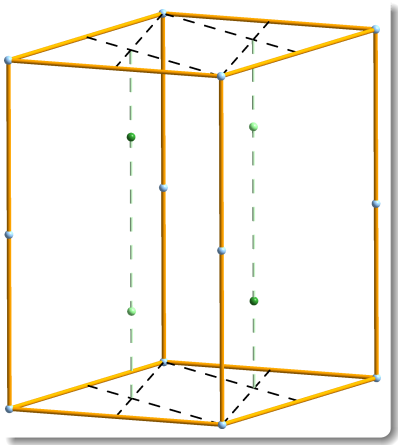
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



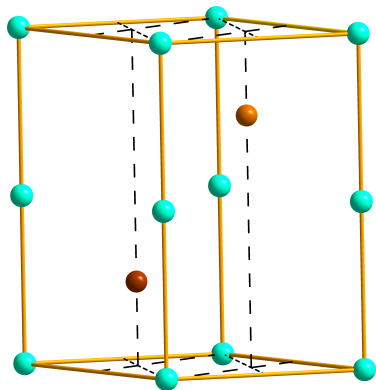
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



Strukturtypen

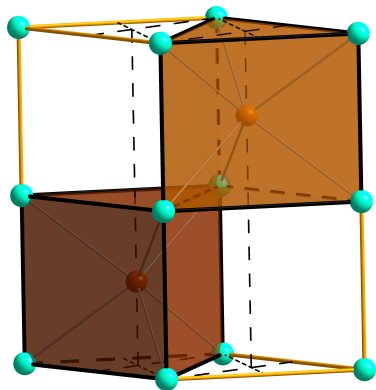
Hexagonal $P6_3/mmc$



- # As auf 2c bildet dichteste Packung
- # Ni auf 2a in den „Oktaederlücken“

Strukturtypen

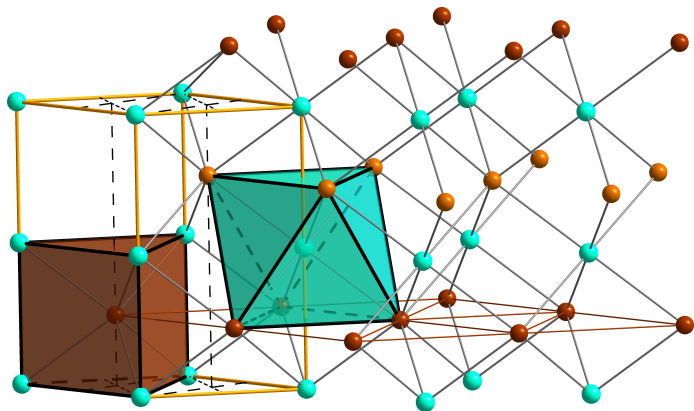
Hexagonal $P6_3/mmc$



- # As trigonal-prismatisch von Ni umgeben
- # Ni pseudo-oktaedrisch (trigonal-antiprismatisch) von As umgeben

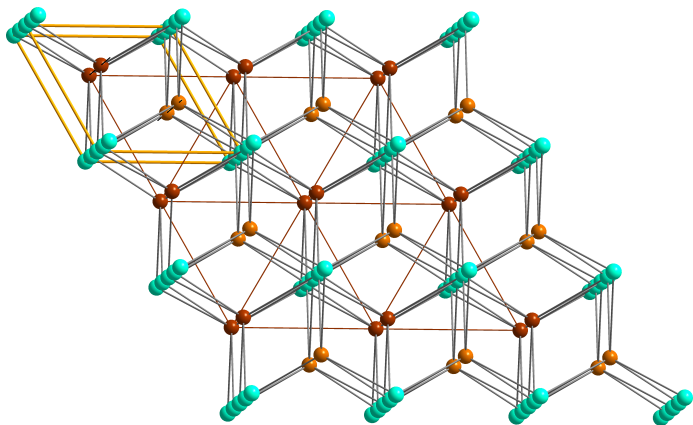
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



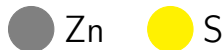
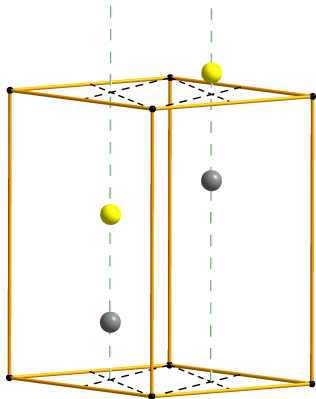
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3/mmc$



Strukturtypen

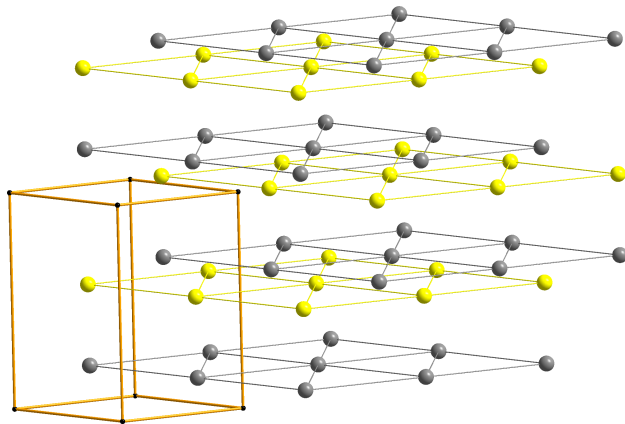
Hexagonal $P6_3mc$



- # Zn und S bilden jeweils eine dichteste Packung
- # $m \perp c$ entfällt. $4f \mapsto 2b$
- # Atome besetzen jeweils die „Tetraederlücken“ der anderen dichtesten Packung

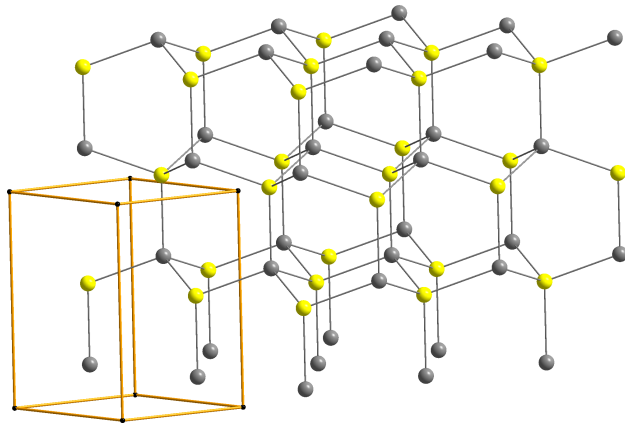
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3mc$



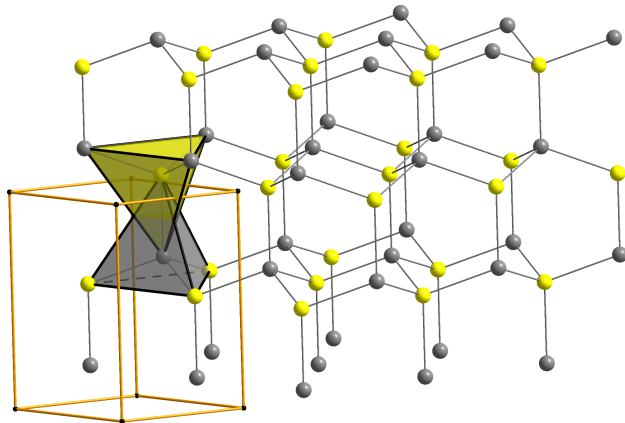
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3mc$



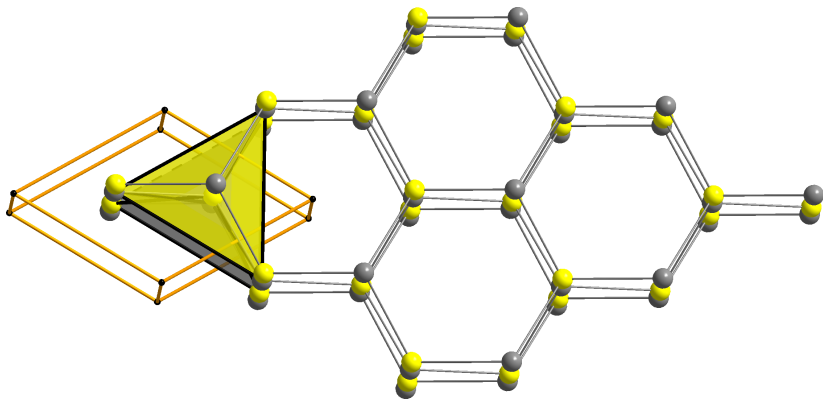
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3mc$



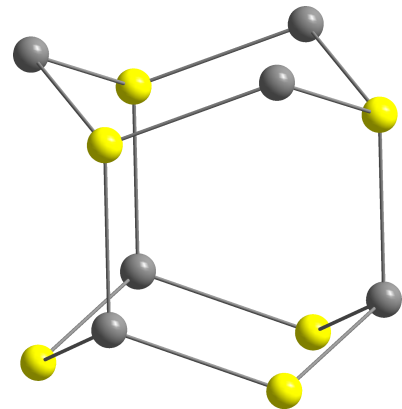
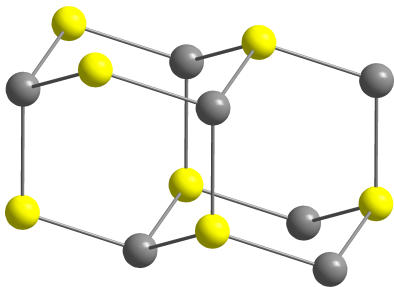
Strukturtypen

Hexagonal $P6_3mc$



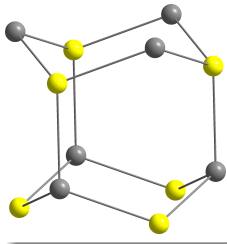
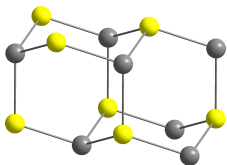
Strukturtypen

Zinkblende und Wurtzit



Strukturtypen

Zinkblende und Wurtzit



- # gleiche Koordinationszahlen
 - jeweils 4 bei „tetraederischer“ Koordination
- # verschiedene Konformation der Sechsringe
 - Zinkblende nur Sesselkonformation
 - Wurtzit Sessel- und Wannenkonformation
- # verschiedene Stapelung der Ringe
 - Zinkblende immer „auf Lücke“