

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<sub>2</sub>-Struktur

⇒ BiLi<sub>3</sub>-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

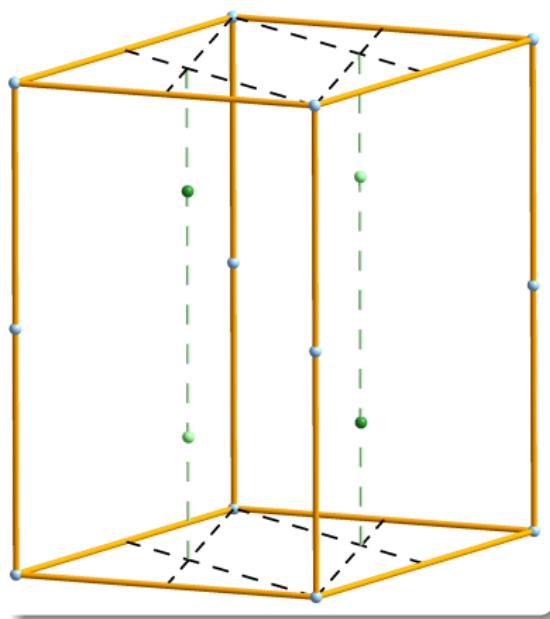
---

## Hexagonal $P6_3/mmc$

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

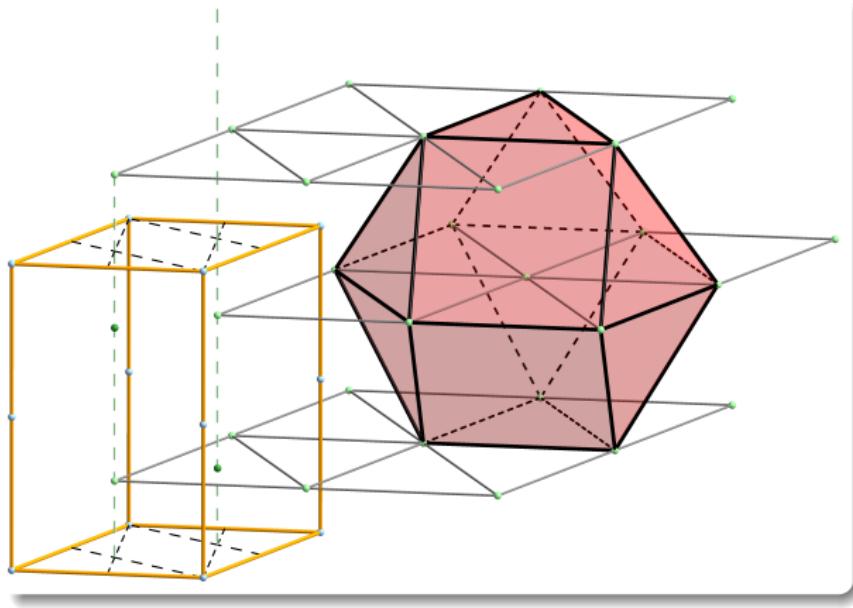
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



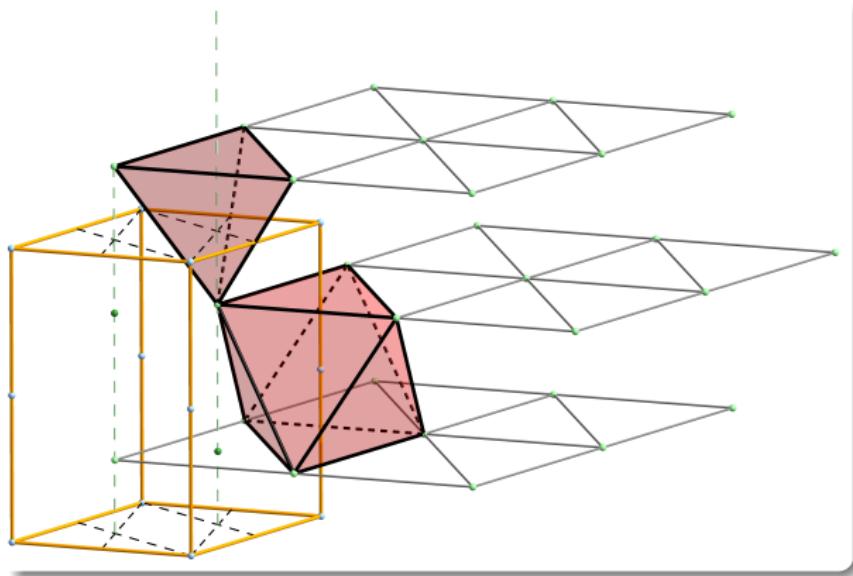
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



# Strukturtypen

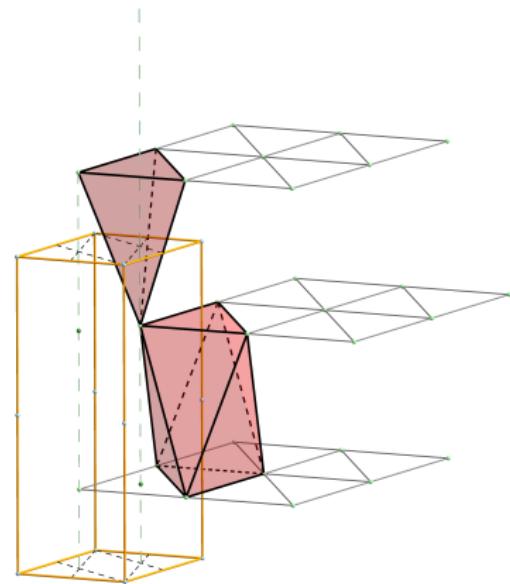
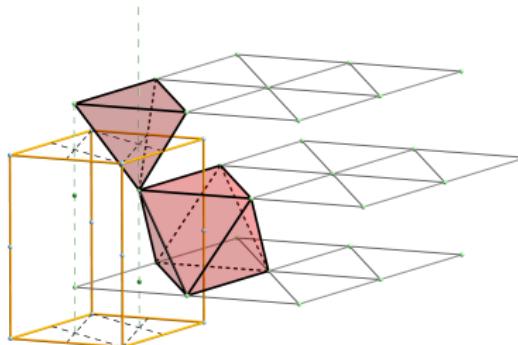
Hexagonal  $P6_3/mmc$



# Strukturtypen

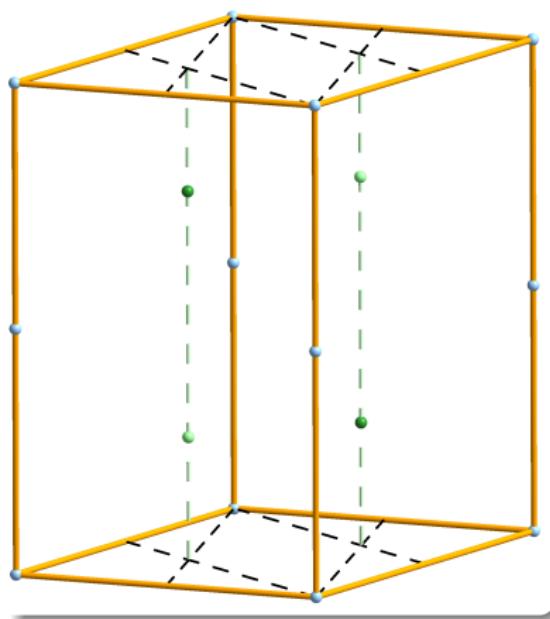
## Oktaeder vs. trigonales Antiprisma

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



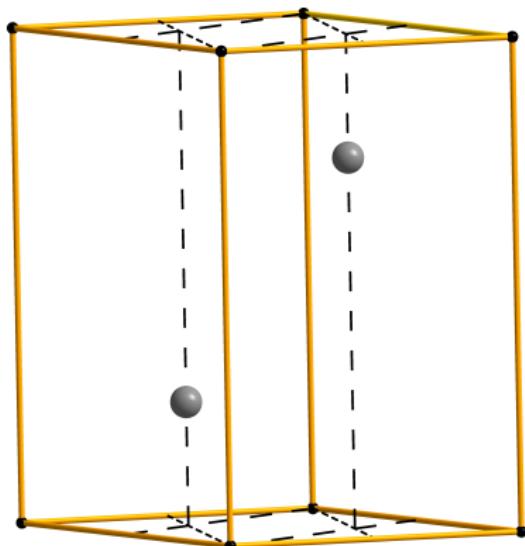
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



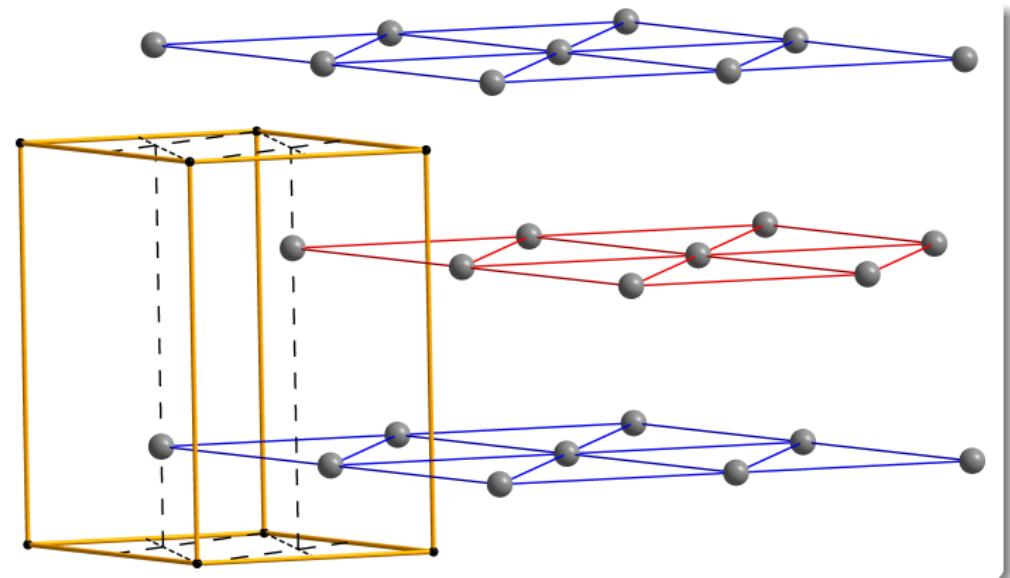
# Zn auf 2c

# Struktur vieler Metalle

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

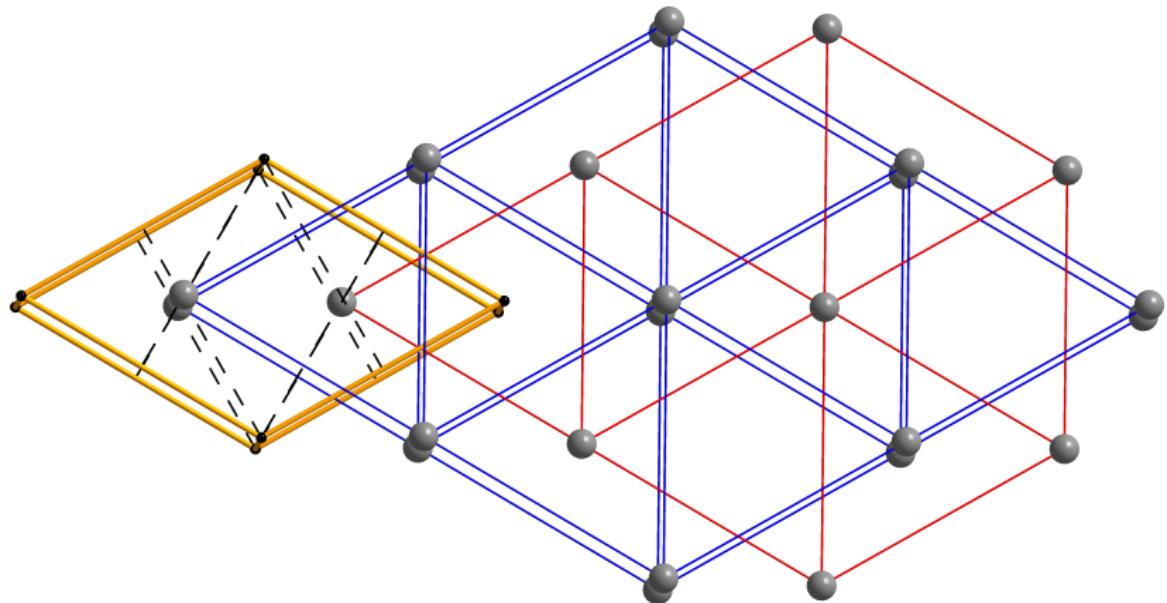
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



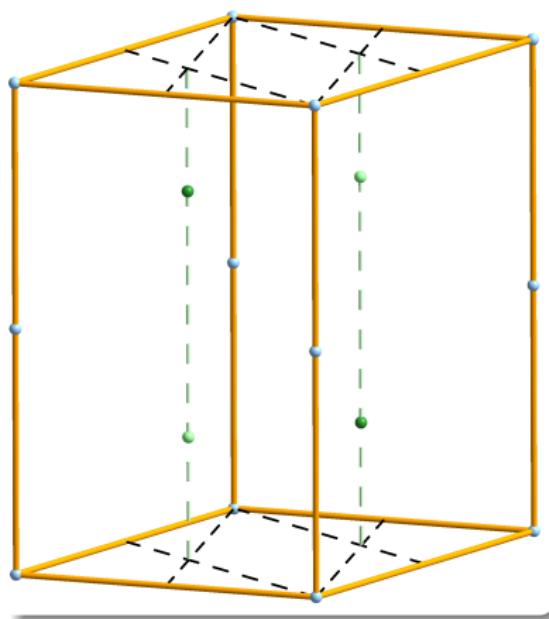
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



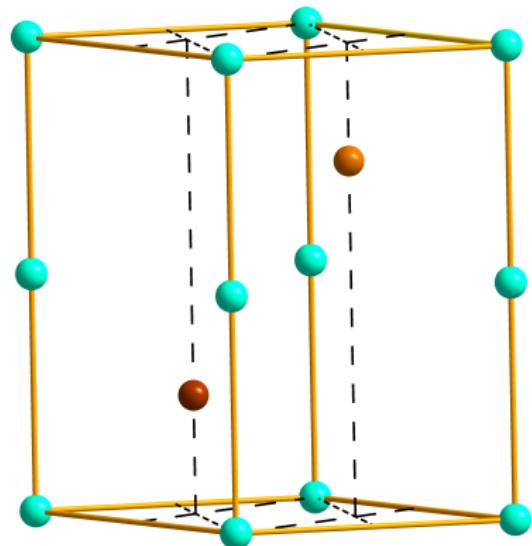
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$

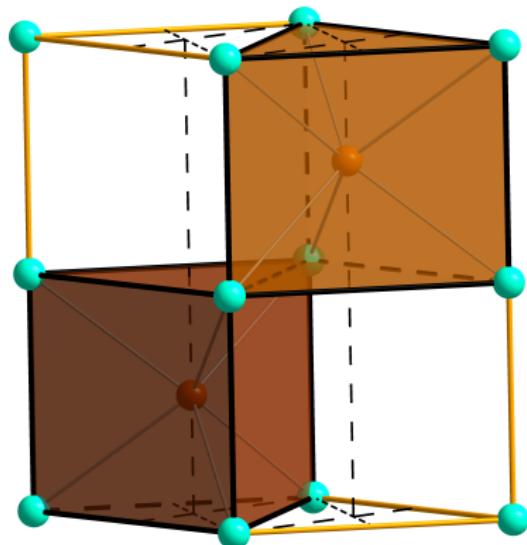


Ni      Schicht A As  
Schicht B

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

# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$

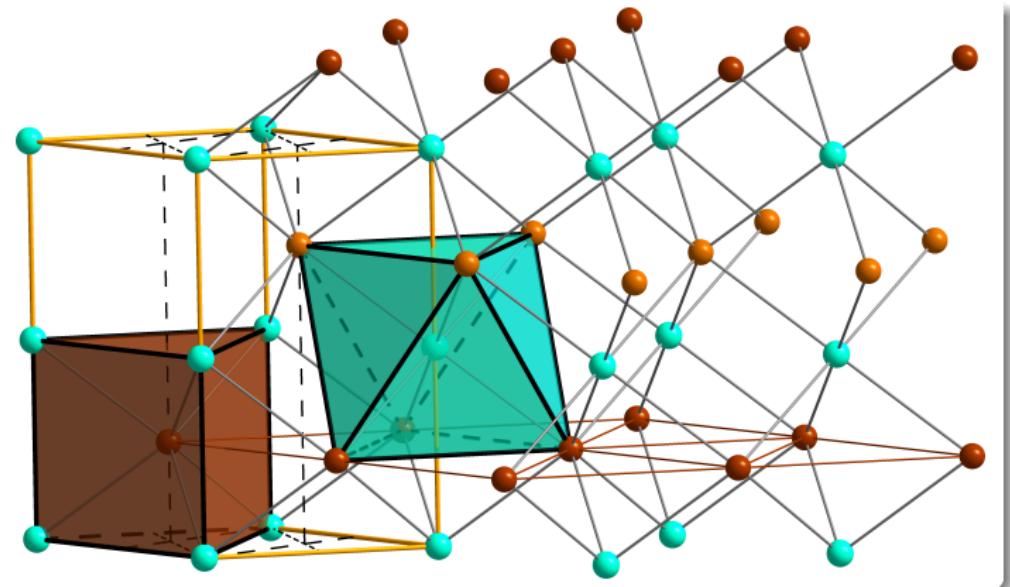


Ni      Schicht A As  
Schicht B

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

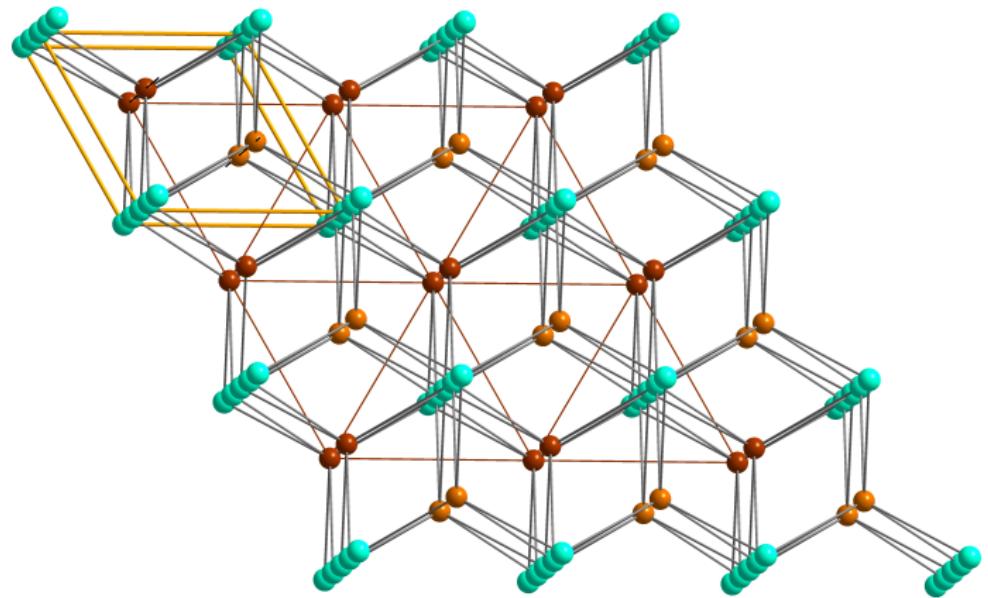
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



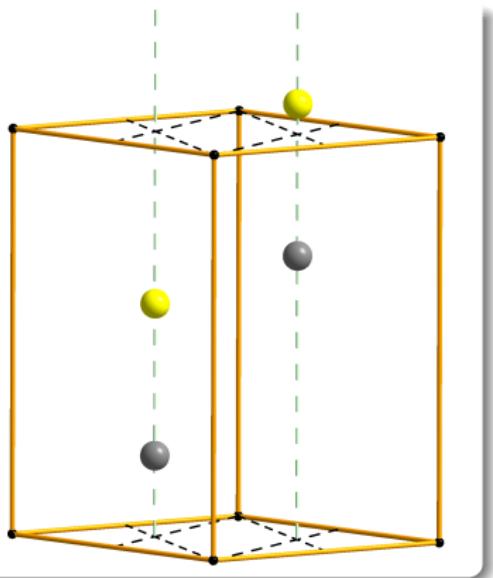
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3/mmc$



# Strukturtypen

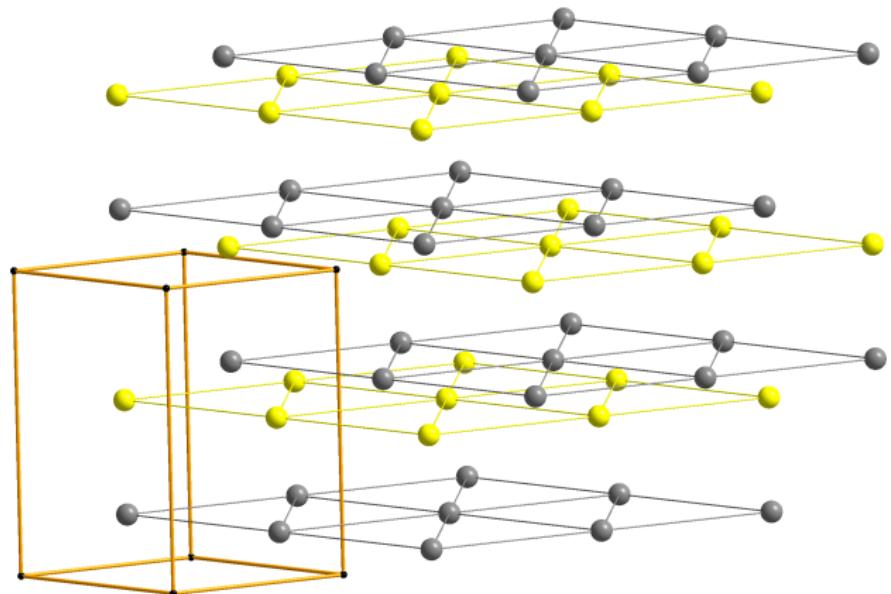
Hexagonal  $P6_3mc$



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

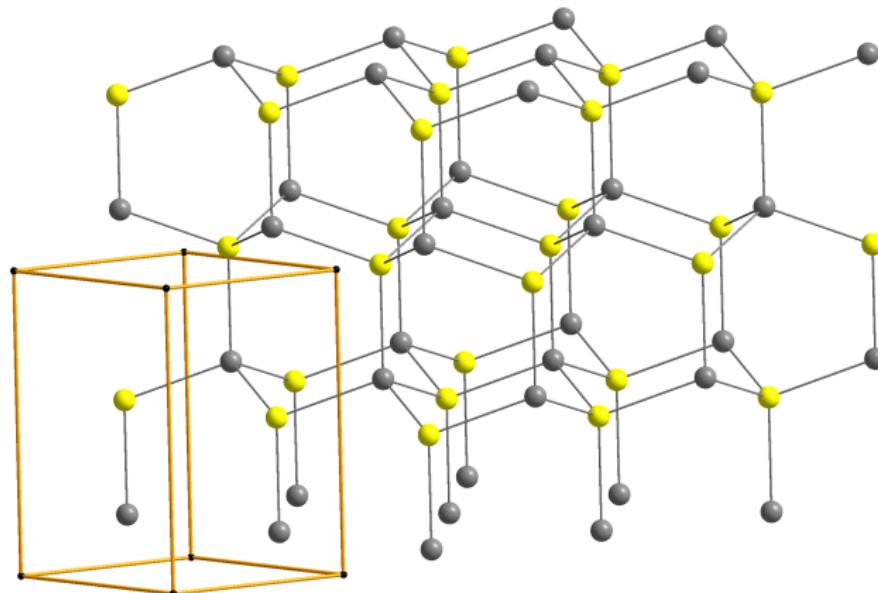
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3mc$



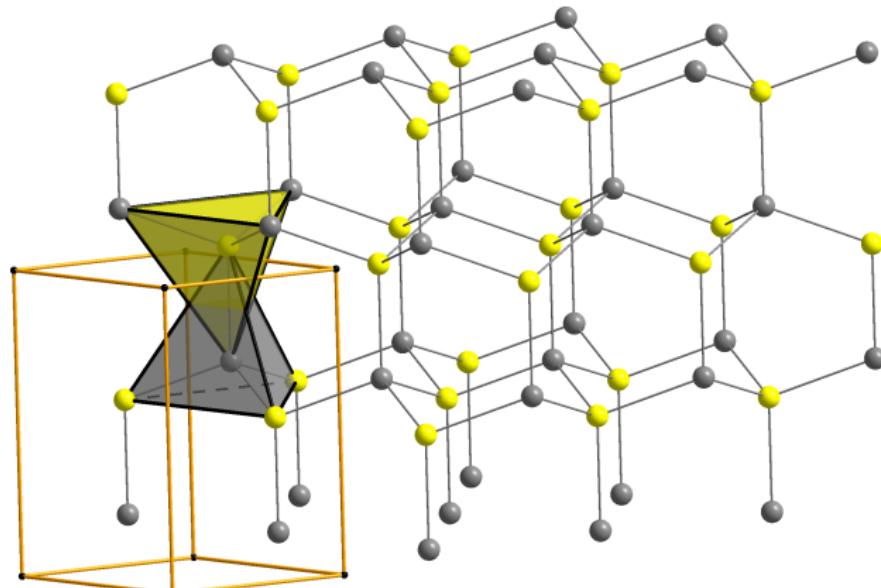
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3mc$



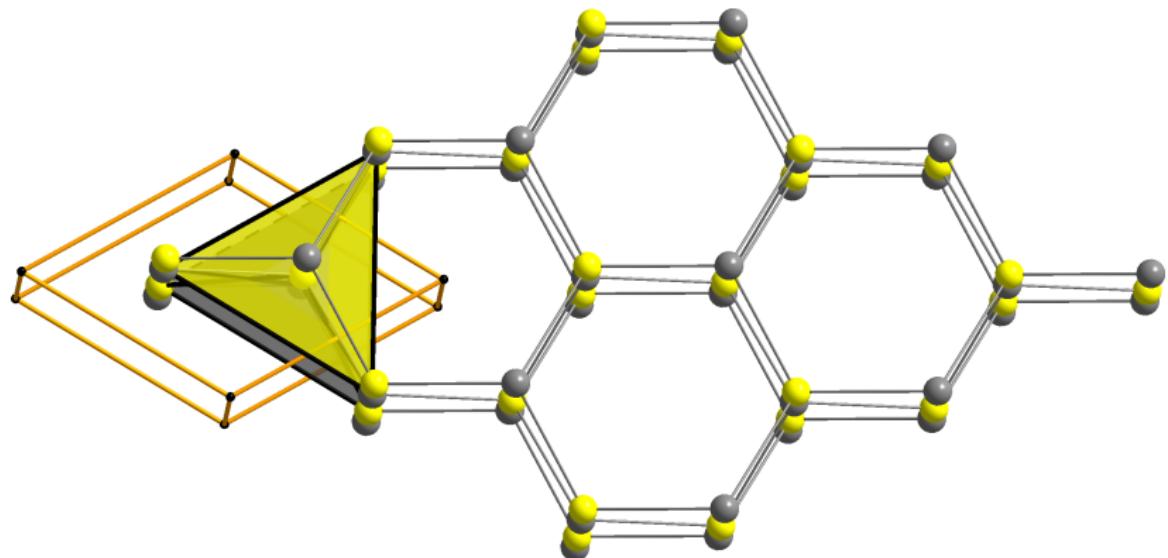
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3mc$



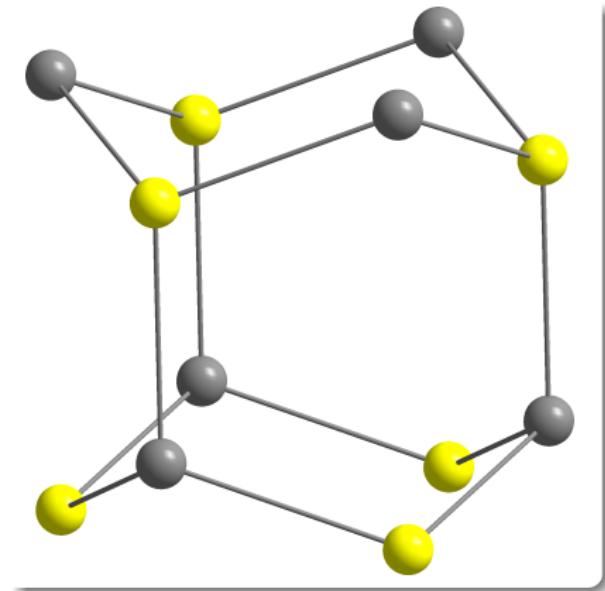
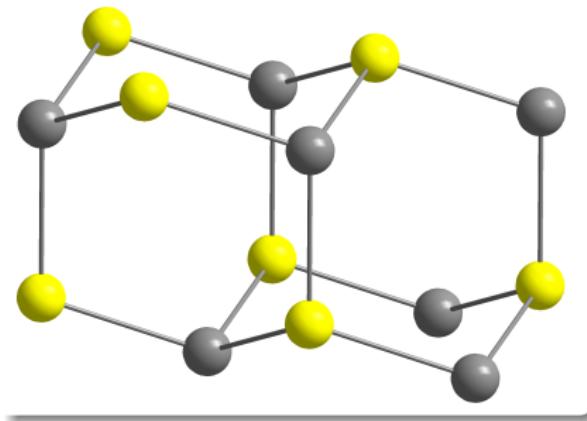
# Strukturtypen

Hexagonal  $P6_3mc$



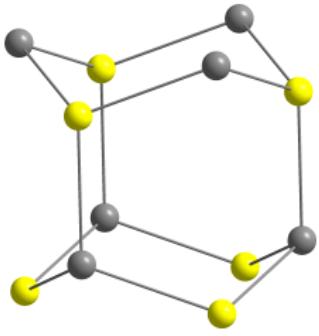
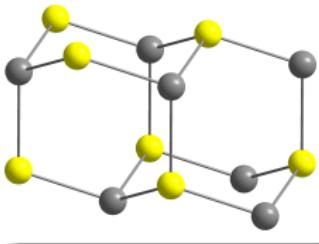
# Strukturtypen

Zinkblende und Wurtzit



# Strukturtypen

## Zinkblende und Wurtzit



# gleiche Koordinationzahlen  
→ jeweils 4 bei „tetraedischer“ Koordinantion

# verschiedene Konformation der Sechsringe  
→ Zinkblende nur Sesselkonformation  
→ Wurtzit Sessel- und Wannenkonformation

# verschiedene Stapelung der Ringe  
→ Zinkblende immer „auf Lücke“