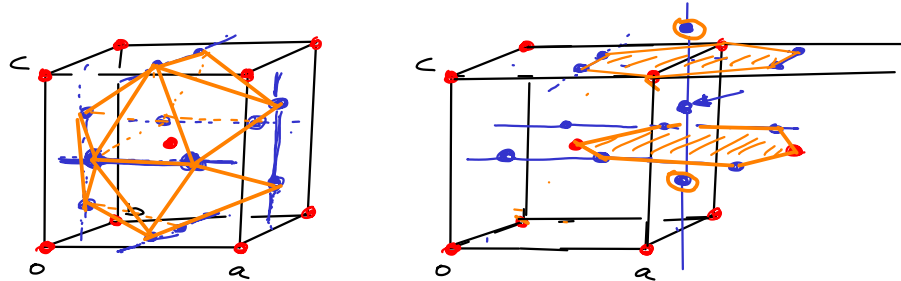


1 Die intermetallische Phase Nb_3Sn , ein praktisch sehr wichtiger Supraleiter, gehört zu den FRANK-KASPER-Phasen.

(a) Skizzieren Sie mit Hilfe der Daten aus der ICSD die kleine kubische Elementarzelle der Struktur.

RG: $Pm\bar{3}n$
 • Sn: 0,00
 • Nb: $1/4, 0, 1/2$



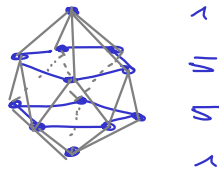
(b) Zeichnen Sie die beiden FRANK-KASPER (FK) Polyeder um Sn und Nb ein, benennen Sie die Polyeder und die Koordinationszahl (als Hilfe: Web-Seite *Intermetallische Phasen*, Kap. 7.3.).

um Sn in der Mitte der Elementarzelle $50\%_3$, nicht sehr schön
 $\rightarrow CN=12$, Icosaeder, nur aus Nb-Atomen

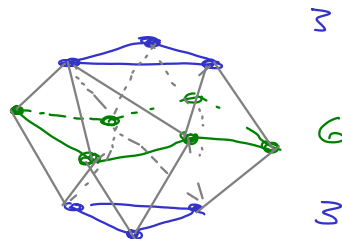
um Nb $\rightarrow CN=14$, 2* überkapptes hexagonales Antiprisma
 aus Nb+Sn-Atomen \rightarrow nur die 6-Ecke markiert

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

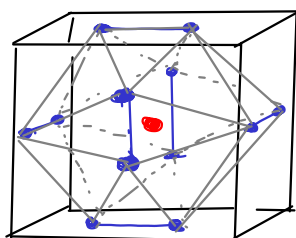
- überkapptes pentagonales Antiprisma.



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

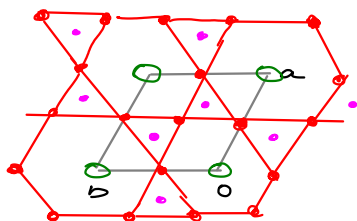


- eingeschrieben in einen Würfel, entsprechend (b).



② SmCo_5 ist ein wichtiges hartmagnetisches Material, das im sog. CaCu_5 -Typ kristallisiert, der mit den LAVES-Phasen nahe verwandt ist.

(a) In SmCo_5 sind die Co-Kagomé-Netze identisch übereinander ($| : \text{AA} : |$) gestapelt, zwischen allen Dreiringen befinden sich weitere Co-Atome. Skizzieren Sie eine Aufsicht auf die kleine hexagonale Elementarzelle.



- Co auf $z=0 + z=1$
- Sm auf $z=1/2$
- Co auf $z=1/2$

(b) Ermitteln Sie mit Hilfe der Skizze aus (a) den Elementarzellinhalt und bestätigen Sie damit die Summenformel.

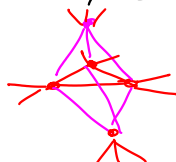
$$\begin{aligned}
 \text{Sm} &: 4 \cdot \frac{1}{4} = 1 \\
 \text{Co} &: 1 + 4 \cdot \frac{1}{2} = 3 \text{ vom Netz} \\
 \text{Co} &: 2 * = 2 \\
 & \underline{\hspace{2cm}} \\
 & \text{Sm Co}_3 \text{ Co}_2
 \end{aligned}$$

(c) Welche Koordinations-Zahl und -Polyeder haben die Sm und die beiden kristallographisch unterschiedlichen Co-Atome?

$$\begin{aligned}
 \text{Sm} &: 1 : 6 : 6 : 6 : 1 \\
 & \text{sm} \quad \text{Co/Co} \quad \text{sm} \\
 & \text{doppeltes hex. Anti-Prisma} \\
 \text{Co} &: 6 + 6 \text{ -sm} \\
 \text{Co} &: 8 + 4 \text{ -sm} \\
 & \text{oder: 8-fäch überkapptes hex. Prisma}
 \end{aligned}$$

(d) Wie sind die leere Co_4 -Tetraeder verknüpft? Formulieren Sie die Zusammensetzung in einer NIGGLI-Formel.

Co_4 über Ecken + Flächen verknüpft



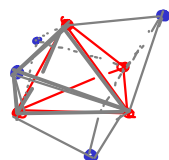
③ Im NaZn_{13} -Strukturtyp finden sich Zn-gefüllte Zink-Ikosaeder und Na-Atome mit einer Koordinationszahl von 24 !

(a) Wie läßt sich das Na-Koordinationspolyeder (Snub-Cube) konstruieren? (keine Skizze!) - Würfel alle 8 Ecken so abschneiden, dass regelmäßige Dreiecke und Vierecke entstehen

(b) Warum ist dieses Polyeder kein FK-Polyeder? es hat Vierecke als Begrenzungsflächen

(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 auftritt?

• zentrales Tetraeder + 4 Wüfel über Flächen verknüpft



sie bestehen wie die FK-Polyeder auch nur aus Tetraedern