

**1. Erläutern Sie Paulis Gesetz zur Elektronenkonfiguration am Beispiel von  $\text{Cr}^{3+}$**

Zuerst jedes Orbital mit einem Elektron befüllen, dann Schale voll machen. Nächste Schale immer das energetisch günstigste.  $s=2e$ ,  $p=6e$ ,  $d=10e$ ,  $f=14e$

**2. Ordnen Sie die Elemente Si, Al, S, Mg nach steigendem Ionisierungspotential für die erste Ionisierungsstufe**

steigend innerhalb Periode von links nach rechts, innerhalb einer Gruppe fallend von oben nach unten. Mg, Al, Si, S

**3. Warum fallen die Ionenradien für z.B. einwertig geladenen Ionen innerhalb einer Periode?**

Innerhalb einer Periode (von links nach rechts) sinkt der Ionenradius, da die Kernladungszahl steigt, so dass die Anziehungskraft des Atomkerns auf die Elektronen größer wird und der Ionenradius abnimmt.

**4. Wie ist die Polarisierbarkeit eines Elements definiert?**

Sie ist ein Maß für die Verschiebbarkeit von positiver relativ zu negativer Ladung im Molekül/Atom beim Anlegen eines äußeren elektrischen Feldes. Es wird ein elektrisches Dipolmoment induziert. Je höher also die Polarisierbarkeit ist, desto leichter lässt sich ein Dipolmoment durch ein elektrisches Feld induzieren. → Tensor

**5. Was beschreibt die Bandlücke?**

Als Bandlücke wird der energetische Abstand zwischen Valenzband und Leitungsband eines Festkörpers bezeichnet. Dessen elektrische und optische Eigenschaften werden wesentlich durch die Größe der Bandlücke bestimmt.

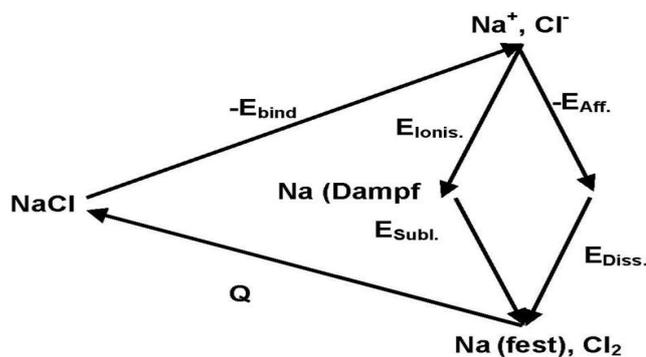
**6. Was besagt die elektrostatische Valenzregel?**

Nach der die höchste positive und höchste negative Elektrovalenz eines Elements zusammen die Zahl 8 ergeben. Sie wird auch *Abegg'sche Regel* genannt.

In einer stabilen heteropolaren Kristallstruktur soll die Summe der Bindungsstärken, die jedes Anion von den umgebenden Kationen erhält, von der Ladung dieses Anions kompensiert werden.

**7. Zur Bestimmung der Gitter-Enthalpie benutzt man den Born-Haber'schen Zyklus. Erläutern Sie diesem am Beispiel von NaCl.**

Der Kristall wird mit der notwendigen Energie  $E_{\text{bind}}$ . (Gitterenergie) in  $\text{Na}^+$ - und  $\text{Cl}^-$ -Ionen zerlegt. Werden die  $\text{Na}^+$ -Ionen in neutrale Natriumatome umgewandelt, wird die Ionisierungsenergie  $E_{\text{Ionis}}$ . frei, während bei der Umwandlung der  $\text{Cl}^-$ -Ionen in neutrale Atome Energie aufgewendet werden muss (sog. Elektronenaffinität). Geht Natrium aus der Dampfphase in den festen Zustand über, wird die Sublimationsenergie  $E_{\text{Subl}}$ . frei und bei der Bildung von Chlormolekülen aus Chloratomen die Dissoziationsenergie  $E_{\text{Diss}}$ . Der Kreisprozess wird beendet durch die Reaktion des festen Natriums mit dem gasförmigen Chlor, bei dem die Reaktionswärme  $Q$  frei wird.



**8. Erläutern Sie an Hand eines Graphen die Born-Mayer-Gleichung**

$$V = N_A e^2 z_A z_B / / 4\pi\epsilon_0 d * (1 - d'' / d) * A$$

Diese Gleichung erlaubt einen exakteren Vergleich mit exp. Gitterenthalpie- Werten, um ionischen Charakter des Materials genauer zu erfassen.

Kleine Ionen treiben Löslichkeit. Differenz der  $\Delta H$ -Werte zwischen Anion und Kation

**9.  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  ist die chemische Formel für den Spinell. Beschreiben Sie das Packungsprinzip der Kristallstruktur und gehen Sie auf das Ungewöhnliche dieser Struktur ein.**

Die Oxid-Anionen bilden eine kubisch-dichteste Kugelpackung ( $\equiv$  kubisch-

flächenzentriert), in der die Aluminium-Kationen ( $\equiv X3+$ -Kationen) die Hälfte aller in der Struktur vorhandenen Oktaederlücken besetzen und die Magnesium-Kationen ( $\equiv X2+$ -Kationen) in einem Achtel aller in der Struktur vorhandenen Tetraederlücken sitzen.

Tetraeder und Oktaeder; In die großen Lücken setzt sich das kleinere Atom, in die kleinen Lücken setzt sich das größere Atom  $\rightarrow$  2/3 oktaedrisch, 1/3 tetraedrisch

**10. Erläutern Sie die Aufhebung der Entartung der Energie der d-Orbitale in tetraedrischer Koordination mit Hilfe der Kristallfeldtheorie.**

Austausch wenn energetisch günstig. Das Ion mit der günstigsten OPSE (einem niedrigeren Wert, der angegeben wird, welche Energie beim Wechsel gemessen wird) wird die Oktaederplätze einnehmen. Zweitrangig ist der Ionenradius. Abnehmend: oktaedrische Koordination begünstigt.

**11. Wie viele Bohr'sche Magnetonen hat  $Mn^{3+}$ ?**

**12. Wann ist ein Atom/Ion diamagnetisch?**

Ein Atom/Ion ist diamagnetisch, wenn sie abgeschlossene Elektronenschalen besitzen. Einzelmomente der Elektronen heben sich auf.

**13. Was passiert bei der Phasenumwandlung von  $BaTiO_3$ -Perowskit beim Abkühlen von der kubischen Raumgruppe  $Pm3m$  in die tetragonale Raumgruppe  $P4mm$ ? Zu welchem Typ der Phasenumwandlung gehört sie?**

**14. Wie ist die Pyroelektrizität definiert und wie hängt diese Eigenschaft von der Symmetrie der Kristallstruktur des Materials ab.**

Ionenkristalle mit permanenter elektrischer Polarisierung, bei Erwärmung laden sich die gegenüberliegenden Flächen auf, die Spannung mit Elektroden an diesen Flächen abgreifen. Zwei Arten: 1. Echter Effekt: beruht auf Gitterumbau bei Änderung der Temperatur. 2. Falscher Effekt: Ändert durch Temperatur sein Volumen und somit sein Ladung/Volumen-Verhältnis  $\rightarrow$  darf kein Inversionszentrum haben

**15. Erläutern Sie die kooperative Verdrehung der Tetraederbaueinheiten bei der Hoch-/Tiefumwandlung beim Cristobalit.**

Kettenreaktion sobald ein Tetraeder gedreht wird  $\rightarrow$  geht durch gesamten Kristall

**16. In welchem Strukturtyp kristallisiert Stishovit und welches Packungsmuster ist bei dem Hochdruckmineral realisiert?**

Tetragonal. Si ist 6-fach gebunden  $\rightarrow$  oktaedrisch koordiniert

**17. Warum gibt es so viele Polymorphe des  $SiO_2$ 's aber nicht des  $NaCl$ 's?**

Aufgrund des Bindungstyps?

**18. Was sind gestopfte Derivatstrukturen des  $SiO_2$ ?**

Ioneneinbau von  $Li_2O$  und  $Al_2O_3$  oder  $ZnO$  und  $Al_2O_3$

**19. Wann tritt beim Kalifeldspat Ordnung in der Si-Al-Verteilung auf Tetraederplätzen ein?**

Beim Abkühlen entsteht Unordnung  $\rightarrow$  beim erwärmen hohe Symmetrie

**20. Welche technisch genutzten Eigenschaften weisen Zeolithe auf, die mit der Kristallstruktur und der Zusammensetzung des Material zusammenhängen?**

- Filter (Siebe): große und kleine Löcher in der Struktur

- Sortierung von Stoffen, da sich manche bevorzugt innerhalb der Zeolithe anlagern