

B.Sc. – ACIII (Teil Anorganische Chemie)

Übungsaufgaben 1 zu ACIII (Symmetrie, Kristallographie)

1. Erklären Sie die Begriffspaare homogen/inhomogen und isotrop/anisotrop.
2. Erklären Sie (mit Beispielen) die Größen E , C_n , S_n , i , σ_h , σ_v , σ_d .
3. Bestimmen Sie die Symmetrieelemente und Punktgruppen (Schönflies und Hermann-Mauguin) der in den Übungen 1 und 2 angegebenen Polyeder bzw. Moleküle.
4. Was sind Translations- und Atomlagenvektoren und wie sind sie definiert?
5. Was sind kristallographische Punktsymmetrieelemente bzw. -operationen und welche gibt es (in Notation nach Schönflies und Hermann-Mauguin).
6. Was versteht man unter Koppelung bzw. Kombination von Symmetrieeoperationen?
7. Erklären Sie die Begriffe Elementarzelle, Raumgitter, Basis, Kristallklasse, Kristallsystem, Kristallstruktur (kurze Definitionen) und ihre Beziehungen.
8. Welche Kristallsysteme gibt es, wonach werden sie eingeteilt und wie sind sie definiert?
9. Was sind Bravaisgitter? Wie viele gibt es? Wie werden sie bezeichnet und welche Typen treten in den verschiedenen Kristallsystemen auf?
10. Erklären Sie die Begriffe Netzebene, Netzebenenchar, Netzebenenabstand und Miller-Indizes.
11. Zeichnen Sie die Netzebenen (110), (111), (123), (302), (-112), (320) jeweils in einen mit den Kristallachsen versehenen Kubus ein.
12. Bestimmen Sie die Miller-Indizes der in Übung 3 angegebenen Netzebenen.
13. Was versteht man unter Morphologie? Was ist eine Kristallstruktur? Welche Beziehung besteht zwischen Morphologie und Kristallstruktur?
14. Was versteht man unter Gleitspiegelung und Schraubung? Geben Sie Beispiele.
15. Was sind Punktgruppen bzw. Kristallklassen, was beschreiben sie, und welcher Zusammenhang besteht zwischen Punktgruppen und Kristallklassen?
16. Was sind Raumgruppen, was beschreiben sie, und welcher Zusammenhang besteht zwischen Raumgruppen und Kristallklassen?

Übungsaufgaben 2 zu ACIII (Strukturchemie)

1. Berechnen Sie die Raumerfüllungen für eine ccp- und eine bcc-Packung.
2. Nennen Sie vier Kristallsysteme und beschreiben Sie die Elementarzellen.
3. Formulieren Sie geometrische Beziehungen für folgende Abstände bezüglich der jeweiligen Gitterkonstante(n):
 - a) Abstand des Mittelpunktes einer Tetraeder- bzw. Oktaederlücke in einer kubisch dichten Kugelpackung vom Mittelpunkt des nächst benachbarten Atoms der Kugelpackung
 - b) ibid. in einer hexagonal dichten Kugelpackung
4. In einer hexagonal dichten Kugelpackung von A-Atomen seien $\frac{2}{3}$ der Oktaederlücken durch Atome der Sorte B besetzt. Welche allgemeine Formel hat die resultierende Verbindung? Machen Sie einen Vorschlag für eine Verbindung, die diese Struktur im festen Zustand haben könnte.
5. In der kubisch dichtesten Kugelpackung von Atomen der Sorte X seien 50% der Oktaederlücken durch B-Atome und 12,5 % der Tetraederlücken durch A-Atome besetzt. Welche chemische Formel hat die resultierende Verbindung?
6. Welche Formel hat Perowskit? Beschreiben Sie die Perowskitstruktur auf der Basis einer dichtesten Kugelpackung.
7. Gegeben sei eine Struktur, die nur aus eckenverknüpften Tetraedern der Sorte X besteht. Im Zentrum aller Tetraeder sitzen Atome der Sorte A. Jede Tetraederecke X gehört zu genau zwei A-Atomen. Welche chemische Zusammensetzung resultiert? Welcher Stoff könnte eine solche Struktur haben?
8. Gegeben sei eine Struktur, die nur aus eckenverknüpften Oktaedern besteht. Jede Oktaederecke gehört zu genau zwei Oktaeder. Welche chemische Formel resultiert? Welche Beziehung besteht zwischen einer solchen Struktur und der Perowskitstruktur?
9. Gegeben sei eine Struktur, die nur aus eckenverknüpften Würfeln der Sorte X besteht. Im Zentrum aller Würfel sitzen Atome der Sorte A. Jede Würfecke X gehört zu genau zwei A-Atomen. Welche allgemeine chemische Formel AX_n resultiert?
10. Beschreiben Sie die Flussspat- und die Rutilstruktur.
11. Vergleichen Sie die NiAs- und die NaCl-Struktur.
12. Welche Bedeutung haben die Abkürzungen ccp, hcp und fcc?
13. Vergleichen Sie die Perowskit- und die Kochsalz-Struktur. Beschreiben Sie die Lückenbesetzungen und die Koordinationsverhältnisse (Koordinationszahlen und -polyeder) und erläutern Sie die Beziehungen dieser Strukturen zu dichtesten Kugelpackungen.

Übungsaufgaben 3 zu ACIII (Elektromagnetische Strahlung und Strukturbestimmungsmethoden)

1. Nennen Sie die Charakteristika elektromagnetischer Strahlung sowie ihre jeweiligen Beziehungen (mit Formeln und Definitionen).
2. Die Frequenz- bzw. Wellenlängenbereiche der zur Strukturanalyse verwendeten elektromagnetischen Strahlung liegt bei 10^6 - 10^{20} Hz bzw. 10^{-12} – 10^2 m. Geben Sie die Frequenzen (Hz), Wellenlängen (m) und Energien (eV und kJ/mol) der jeweiligen Bereiche für γ -, Röntgen-, UV/VIS-, Infrarot- (IR), Mikro-, Radiowellen-Strahlung an.
3. Wie lassen sich Röntgen-, UV/VIS-, IR- und Mikrowellenstrahlung erzeugen? Geben Sie die jeweiligen Energien, Wellenlängen und Frequenzen an.
4. Welche Wechselwirkungen zwischen elektromagnetischer Strahlung und Materie kennen Sie? Nennen und beschreiben Sie die wichtigsten Effekte (ggf. mit den zugehörigen Termschemata), die damit verbundenen Energien und die daraus resultierenden Anwendungsmöglichkeiten (z. B. Analyseverfahren).
5. Was versteht man unter elastischer, inelastischer, kohärenter, inkohärenter Streuung?
6. Was ist Rayleigh-Streuung? Was ist Compton-Streuung?
7. Was läßt sich aus den Wellenlängen bzw. Frequenzen und was aus den Phasen elektromagnetischer Wellen bestimmen?
8. Nennen und beschreiben Sie drei wichtige Strukturbestimmungsmethoden.
9. Beschreiben Sie die prinzipiellen Unterschiede zwischen Strukturbestimmungsmethoden, die auf spektroskopischen bzw. Beugungs-Effekten beruhen.
10. Mit welchen Methoden und wie können Sie funktionelle Gruppen bestimmen?
11. Wie unterscheiden sich phasen- und energiesensitive Strukturbestimmungsmethoden hinsichtlich Prinzip und Ergebnis?
12. Bei der Umsetzung von MgCO_3 mit SO_2 in wässriger Lösung erhalten Sie einen feinkristallinen, weißen Niederschlag. Ist es möglich, die Zusammensetzung dieses Niederschlags röntgenographisch zu ermitteln? Welche röntgenographischen Methoden wenden Sie an? Wie gehen Sie vor?
13. Bei der Umsetzung von NH_4Cl mit PCl_5 erhalten Sie eine Verbindung der Zusammensetzung PCl_2N . Mit welchen röntgenographischen Methoden und unter welchen Voraussetzungen können Sie die Konfiguration und die Molekülstruktur dieser Verbindung bestimmen?

Übungsaufgaben 4 zu ACIII (Röntgenbeugung)

1. Welche Wechselwirkungen zwischen Röntgenstrahlen und Materie kennen Sie? Beschreiben Sie die wichtigsten Effekte und die daraus resultierenden Gefahren, Anwendungsmöglichkeiten und Analyseverfahren.
2. Wovon hängt die Lage der Intensitätsmaxima beim kontinuierlichen und beim charakteristischen Röntgenspektrum ab?
3. Erklären Sie die Linienstruktur von Röntgen-Emissionsspektren und die Kantenstruktur von Röntgen-Absorptionsspektren.
4. Was versteht man unter Röntgenbeugung, und was sind die Streuzentren bei der Röntgenbeugung?
5. Skizzieren Sie die Unterschiede in den Röntgenbeugungsbildern eines monoatomaren Gases, einer monomolekularen Flüssigkeit und einer kristallinen Probe anhand geeigneter $I(\theta)$ - vs. θ -Diagramme und erklären Sie die Gründe für die Unterschiede.
6. W.L. Bragg deutete die Beugung von Röntgenstrahlen an kristallinen Proben als „Reflexion“ an den Netzebenen des Kristalls. Wie lautet die nach ihm benannte „Reflexionsbedingung“ bzw. "Gleichung"? Erklären Sie die verwendeten Größen.
7. Nach P.P. Ewald lässt sich die "Bragg'sche Gleichung“ graphisch darstellen. Geben Sie diese Darstellung wieder. Erklären Sie die Bedeutung der verwendeten Größen.
8. Was bedeuten die Begriffe „reziprokes Gitter“ und „Reflexionskugel“?
9. Beschreiben Sie den Beugungsvorgang bzw. die „Reflexion“ von Röntgenstrahlen mit Hilfe der "Ewald"- bzw. „Reflexionskugel“.
10. Was ist ein Röntgenreflex? Was ist ein Beugungs-/Interferenzmuster eines Kristalls?
11. Wie unterscheidet sich das Beugungsmuster eines kristallinen Pulvers von dem eines Einkristalls? Welche Konsequenzen resultieren daraus für die Strukturbestimmung?
12. Sie haben für ein orthorhombisches Kristallpulver folgende d-Werte bestimmt: $d_{010} = 9.519 \text{ \AA}$; $d_{002} = 2.769 \text{ \AA}$; $d_{110} = 6.698 \text{ \AA}$. Wie lauten die Gitterkonstanten a, b, c?
13. Welche röntgenographischen Strukturbestimmungsverfahren kennen Sie? Was lässt sich mit den jeweiligen Verfahren am besten bestimmen?
14. Was lässt sich aus den Lagen und was aus den Intensitäten von Röntgenreflexen ableiten?
15. Erklären Sie die Begriffe Atomformfaktor und Strukturfaktor. Welche Streubeiträge werden durch sie beschrieben und wovon hängt ihre Größe jeweils ab?
16. Was ist das „Phasenproblem“ der Röntgenstrukturanalyse?