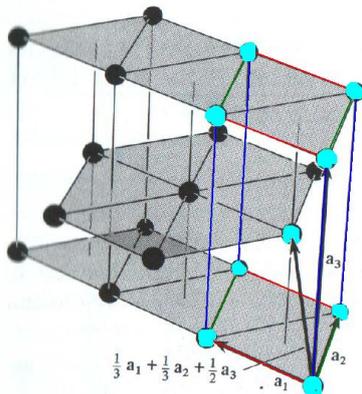


1) Kristallstrukturen und deren Raumfüllung (1 + 1 + 1 + 1,5 + 1,5) 5 Punkte

Wir stellen uns vor, dass die Kristallgitter aus harten, sich berührenden Kugeln aufgebaut sind. Dabei ist a die Gitterkonstante und R ist der Kugelradius. Nächste Nachbarn sollen sich direkt berühren. Mit „Raumfüllung“ ist nun das Verhältnis des mit Kugel gefüllten Volumens in Bezug auf das Gesamtvolumen einer Einheitszelle gemeint.

Berechnen Sie die Raumfüllung der folgenden Strukturen. Wie hängt R jeweils von der Gitterkonstante a ab? Machen Sie sich gegebenenfalls eine Skizzen.

- (a) einfach-kubische (sc) Struktur
- (b) kubisch-raum-zentrierte (bcc) Struktur
- (c) kubisch-flächenzentrierte (fcc) Struktur
- (d) hexagonal-dichteste (hcp) Struktur. Wie groß ist das Verhältnis c/a für die hexagonal dichteste (hcp) Kugelpackung?



Hinweis: der Übersicht wegen sind die Kugel in der Skizze so gezeichnet, dass Sie sich nicht berühren, obwohl Sie das für die Berechnung der Raumfüllung (für nächste Nachbarn) annehmen sollen. $|\vec{a}_1| = a$ und $|\vec{a}_3| = c$.

- (e) Welche Dichte haben unter dieser Annahme (harte, sich berührende Kugeln) folgende drei Elemente:

Ba (bcc) mit Gitterkonstante $a_{\text{Ba}} = 0.502 \text{ nm}$ und Molmasse $m_{\text{Ba}} = 137.34 \text{ g/mol}$; Pb (fcc), $a_{\text{Pb}} = 0.495 \text{ nm}$, $m_{\text{Pb}} = 207.19 \text{ g/mol}$ und Mg (hcp), $a_{\text{Mg}} = 0.321 \text{ nm}$, $m_{\text{Mg}} = 24.312 \text{ g/mol}$?

2) Kubisch-Raumzentrierte Struktur (3 Punkte)

Stellen Sie das kubisch-raumzentrierte (bcc) Gitter einmal durch eine kubische (konventionelle) Zelle (2 Atome pro EZ (=Einheitszelle)), mit Gitterkonstante a des Würfels) und durch eine (primitive) Elementarzelle (1 Atom pro EZ) dar. Wie groß ist das Verhältnis der Volumina beider Zellen?

3) Begriffe aus der Vorlesung (Zur Diskussion direkt in der Übung)

Was versteht man unter: Kristallstruktur, Punktgitter, Elementarzelle, Basis, Wigner-Seitz-Zelle, Bravais-Gitter?

4) 2D-Kristallstruktur (Zum Bearbeiten direkt in der Übung)

Die gezeigte zweidimensionale Struktur beschreibt eine Verbindung mit drei Elementen A, B, C der Atomradien $r_A = 2 \text{ \AA}$ (weiße Kreise), $r_B = 1.2 \text{ \AA}$ (graue Kreise), und $r_C = 0.8 \text{ \AA}$ (schwarze Kreise).

- Finden Sie die konventionelle Einheitszelle, die primitive Einheitszelle und die Wigner-Seitz-Zelle und zeichnen Sie diese in das Gitter ein.
- Wie viele Atome jeden Typs befinden sich in der primitiven Elementarzelle? Geben Sie die chemische Formeleinheit $A_nB_mC_r$ des Kristalls an.
- Welche Symmetrie-Elemente erkennen Sie in dieser Struktur?

