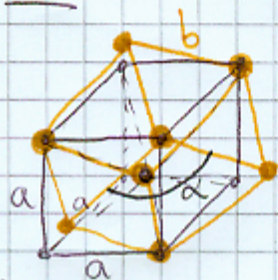
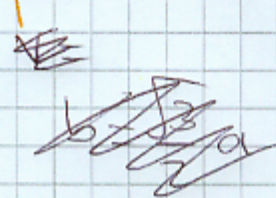


A1



$$\alpha = 109^{\circ} 28'$$

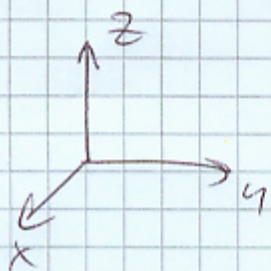
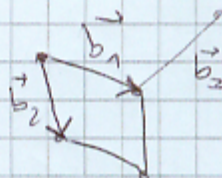
primitive Ez



kubische Elementarzelle

$$V_k = a^3$$

Grundfläche



$$\vec{a}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} a$$

$$\vec{b}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} a, \quad \vec{b}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} a$$

$$V_p = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)| = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} a^3 = + \frac{1}{2} a^3$$

$$\rightarrow \frac{V_k}{V_p} = 2$$

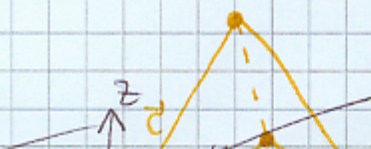
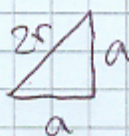
A2

a)



$$(2r)^2 = 2a^2$$

$$\rightarrow r^2 = \frac{a^2}{2} \rightarrow r = \frac{a}{\sqrt{2}}$$



A2

b) primitive EZ = Wigner-Seitz-EZ

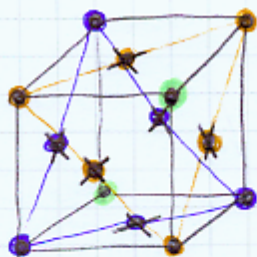
$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} a/2$$

$$\vec{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} a/2$$

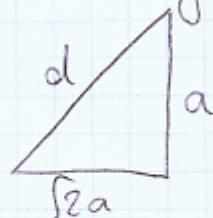
$$\vec{b}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} a/2$$

$$V_1 = \frac{a^3}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{a^3}{4}$$

A2 c)



Abstand der Lager
Raumdiagonale/3:



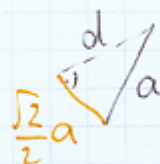
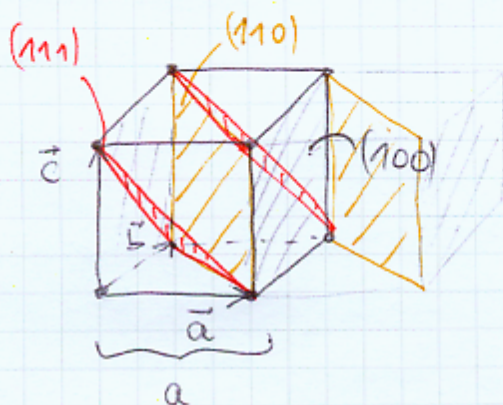
$$d^2 = a^2 + 2a^2$$

$$d = \sqrt{3}a$$

$$\rightarrow \text{Abstand } \frac{\sqrt{3}}{3} a = \frac{\sqrt{6}}{3} r = \sqrt{\frac{2}{3}} r$$

d)

i)



$$d^2 = a^2 - \frac{1}{2}a^2$$

$$= \frac{1}{2}a^2$$

$\rightarrow$ (100): min. Abstand a

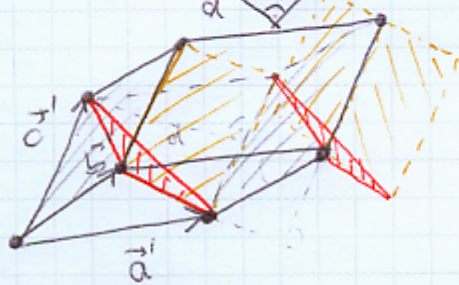
(110): $\frac{a}{\sqrt{2}}$

(111): $\frac{a}{\sqrt{3}}$

ii)

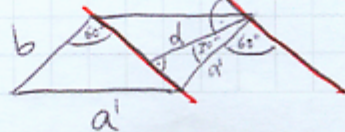
(100):

$$a' = \frac{a}{\sqrt{2}} \rightarrow d = \frac{\sqrt{3}}{2} a' = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} a = \sqrt{\frac{3}{8}} a$$



(110): $\frac{d}{a'} = \cos 30^\circ \rightarrow d = \sqrt{\frac{3}{8}} a$

(111): $d = \frac{2}{3} a' = \frac{2a}{\sqrt{6}} = \sqrt{\frac{2}{3}} a$



$$|\vec{c}| = |\vec{b}| = |\vec{a}| = a' = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

A3

a) ~~4x~~A 2xA, 4xB, 6xC

b) $A_2 B_4 C_6$

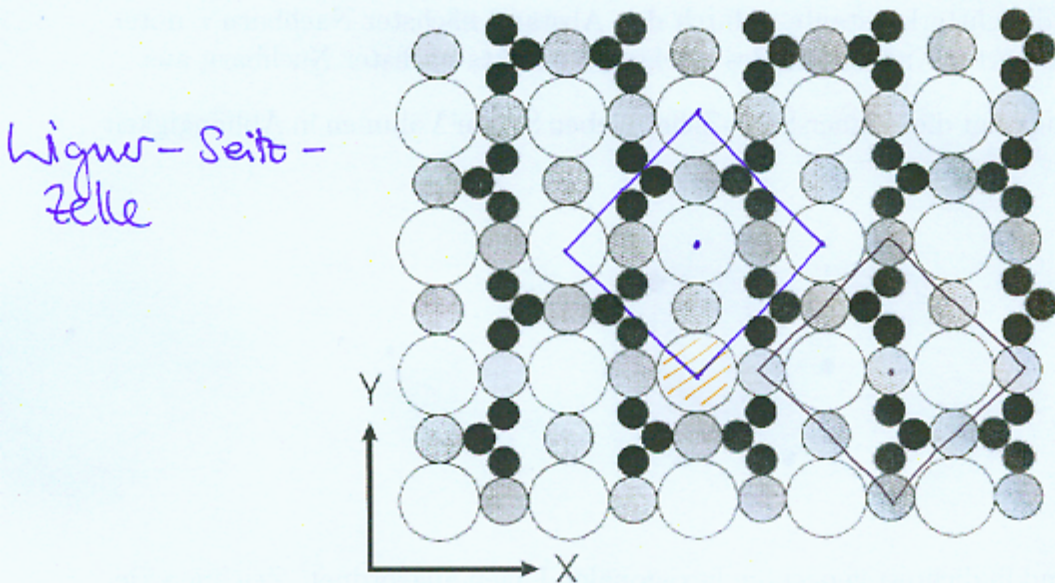
c) $\vec{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

d) quadratisch

Aufgabe 3

Die gezeigte zweidimensionale Struktur (siehe nächste Seite) 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).

- Wieviele Atome jedes Typs befinden sich in der primitiven Elementarzelle?
- Geben Sie die chemische Formeleinheit $A_nB_mC_r$ des Kristalls an.
- Geben Sie Basisvektoren einer primitiven Elementarzelle an.
- Welche Form hat die Wigner-Seitz-Zelle?
- Zeichnen Sie die Symmetrie-Elemente ein. Welches 2D-Bravais-Gitter könnte der Struktur zugrunde liegen?



primitive EZ

- Ze) : Drehachse 2. Ordnung $\parallel \hat{e}_z$
Punktsymmetrie z.B. an $\cdot$ oder $\cdot$
Spiegelachsen $\parallel \hat{e}_x, \parallel \hat{e}_y$
2D-Bravais-Gitter: quadratisch primitiv
mit 12-Atom-Basis ($\odot$ + alle Atome in der Wigner-Seitz-Zelle)