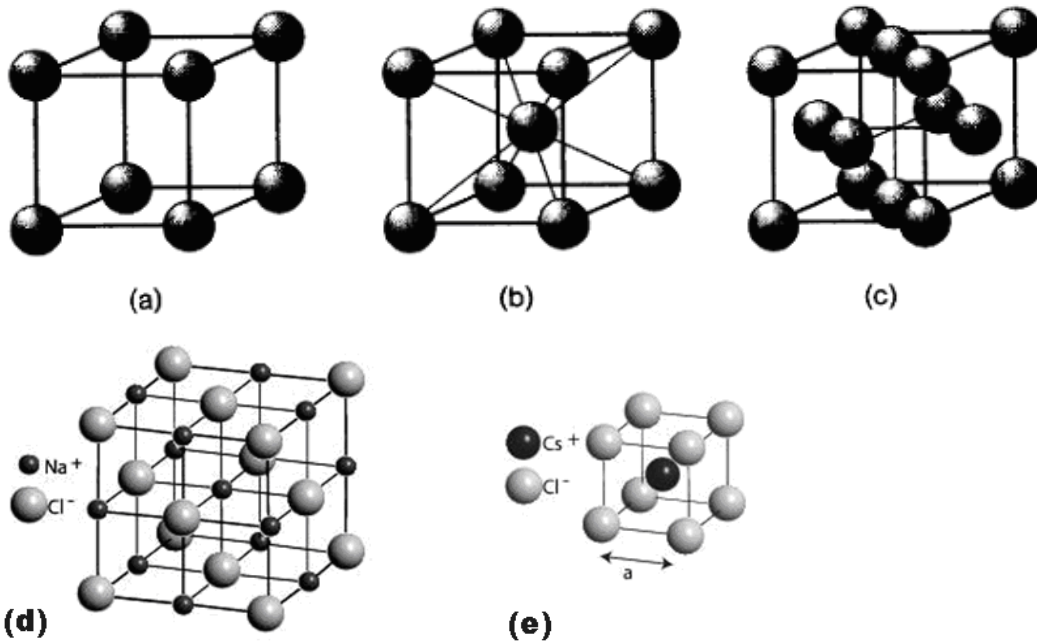


**Aufgabe 0)**

**(a0a)**

Es sollen aus folgenden kubischen Einheitszellen in allen Raumrichtungen unendlich periodisch fortgesetzte Festkörper aufgebaut werden:



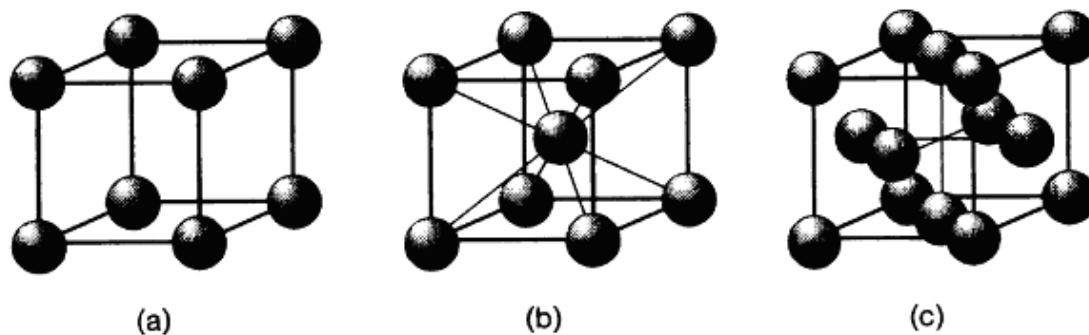
Geben sie an, wie viele Atome sich genau in einer solchen Einheitszelle befinden müssen, damit beim periodischen Fortsetzen, keine Atome doppelt gezählt werden!

---

**Aufgabe 1 )**

**(a47)**

In der Abbildung sind die drei kubischen Bravais-Gitter abgebildet. Berechnen Sie die maximale Raumerfüllung, welche sich nach dem Modell harter Kugeln (die sich gerade so berühren) für diese drei Gitter ergibt.



**Abb. 1.1.** Einheitszellen des (a) primitiv kubischen, des (b) innenzen-triert kubischen und des (c) flächenzentriert kubischen Gitters.

---

**Aufgabe 2 )****(a75)**

Wie ist der Raumfüllungsfaktor im tetragonal-primitiven Gitter mit  $a=b=c/2$ , wenn sich benachbarte Atome, die durch Kugeln beschrieben werden, gerade berühren?

---

**Aufgabe 3 )****(a33)**

Nehmen Sie an, dass identische Kugeln mit dem Radius  $R$  in einer hexagonal dichtesten Kugelpackung angeordnet sind. Welcher Teil des gesamten Volumens der Elementarzelle wird durch die Kugeln eingenommen?

---

**Aufgabe 4 )****(a5)**

Geben Sie für einen Eisenkristall (kubisch-raumzentriert,  $a = 2.87 \text{ \AA}$ ) die Anzahl und Abstände der nächsten bis viertnächsten Nachbarn an.

---

**Aufgabe 5 )****(a1)**

Berechnen Sie die Gitterkonstanten der folgenden Metalle:

(a) Eisen (kubisch-raumzentriert;  $7,874 \text{ g/cm}^3$ )

(b) Nickel (kubisch-flächenzentriert;  $8,908 \text{ g/cm}^3$ )

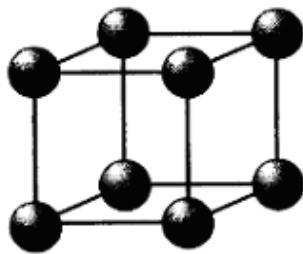
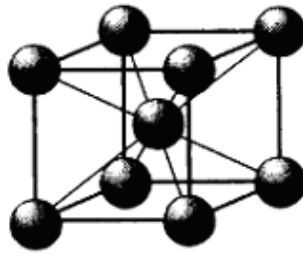
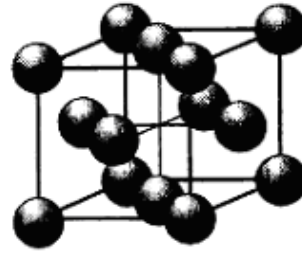
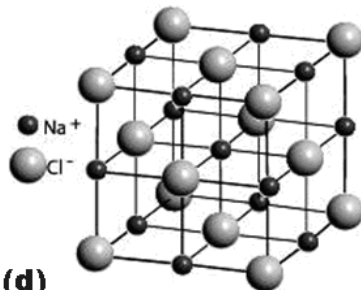
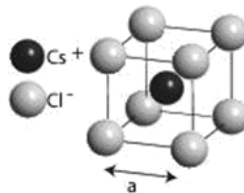
( Massszahlen:  $\text{Fe} = 55.85$ ,  $\text{Ni} = 58.71$  )

---

---

**Aufgabe 6 )****(a0b)**

Es sollen aus folgenden kubischen Einheitszellen in allen Raumrichtungen unendlich periodisch fortgesetzte Festkörper aufgebaut werden:

**(a)****(b)****(c)****(d)****(e)**

Geben sie an, wie viele Atome sich genau in primitiven Elementarzelle befinden müssen, damit beim periodischen Fortsetzen, keine Atome doppelt gezählt werden! Welche Form und welche Gittervektoren hat die primitive Elementarzelle?

---

**Aufgabe 7 )****(a42)**

Das Bravais-Gitter von NaCl ist kubisch flächenzentriert (fcc) mit einer Basis bestehend aus einem Natrium-Ion bei 0 und einem Chlorid-Ion im Zentrum der (konventionellen) kubischen Elementarzelle (2-atomige Basis). Die kubische Zelle wird durch die Vektoren  $\mathbf{a} = (a, 0, 0)$ ;  $\mathbf{b} = (0, a, 0)$ ;  $\mathbf{c} = (0, 0, a)$  aufgespannt mit  $a = 5.64 \text{ \AA}$ .

a) Wieviele  $\text{Na}^+$  und  $\text{Cl}^-$  Ionen sind in der kubischen Elementarzelle enthalten? Finden Sie die Lage dieser Ionen im System xyz.

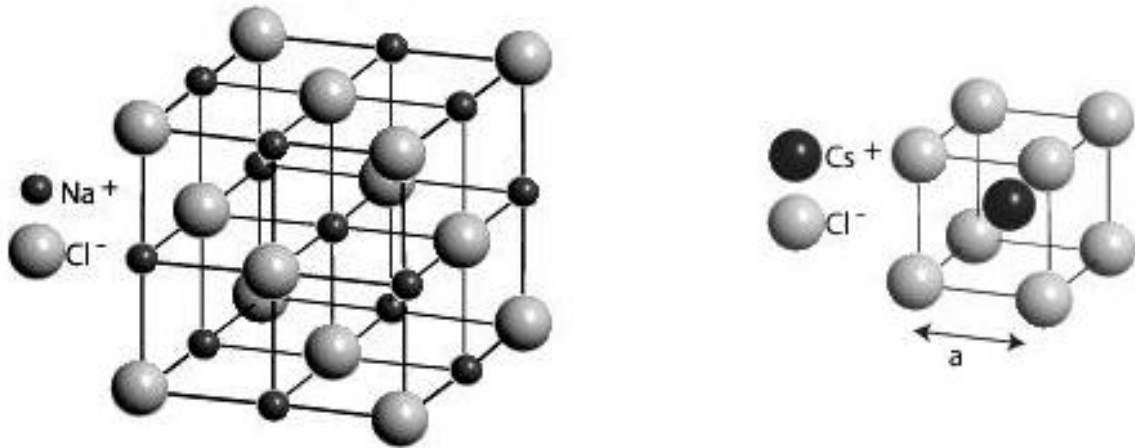
b) Finden Sie die Elementarzelle mit dem kleinsten Volumen (d. h. die primitive Einheitszelle), mit der an durch Translationen entlang der Gittervektoren die NaCl-Struktur konstruieren kann. Bestimmen Sie das Vektortripel, das diese Zelle aufspannt, die Lage aller Ionen in der Zelle und berechnen Sie das Volumen der Einheitszelle. Machen Sie eine Skizze!

---

---

**Aufgabe 8 )****(a34)**

Wichtige Ionenkristall-Strukturen sind die NaCl- und die CsCl-Struktur (siehe Abbildung)



- a) Beschreiben Sie die Unterschiede der Atomanordnungen in beiden Verbindungen benennen Sie die Gittertypen.
- b) Wovon hängt es ab, in welcher Struktur ein ionischer Festkörper kristallisiert; wann tritt die NaCl-, wann die CsCl-Struktur auf?

---

**Aufgabe 9 )****(a35)**

Berechnen Sie, bei welchen Verhältnissen der Radien der beteiligten Atome  $r_1/r_2$  die NaCl bzw. die CsCl Struktur zur dichteren Packung führt.

---

**Aufgabe 10 )****(a12)**

- a) Welche Spiegelebenen existieren in einem einfach-kubischen Gitter?
- b) In welchen der Richtungen  $[100]$ ,  $[110]$  und  $[111]$  liegen Drehachsen des einfach-kubischen Gitters? Wie hoch ist jeweils ihre Zähligkeit? Wie hoch ist jeweils die Zahl äquivalenter Achsen?
-

---

**Aufgabe 11 )****(a11)**

Geben Sie die **primitive** Elementarzelle sowie die Chemische Formel für die folgenden periodisch angeordneten linearen Ketten an:

- a) ...-A-B-C-A-B-C-A-B-C-A...
- b) ...-A-B-C-B-A-B-C-B-A-B-...
- c) ...-A-B-C-C-B-A-B-C-C-B-...
- d) ...-A-B-C-C-B-A-A-B-C-C-...

Fassen Sie A, B und C als dichtgepackte farbige Kugeln mit identischem Durchmesser  $d$  auf. Wie groß sind die Gitterkonstanten für die 4 Strukturen? Welche der Strukturen besitzen Inversionszentren und wo liegen diese?

---

**Aufgabe 12 )****(a2)**

Gegeben ist eine zweidimensionale Kristallstruktur, deren Atome auf den Ecken eines Honigwabengitters liegen.

- (a) Warum ist dieses Gitter kein Bravaisgitter?
- (b) Wählen Sie eine Basis, so dass sich ein Bravaisgitter ergibt. Welches Bravaisgitter erhält man?
- (c) Skizzieren Sie zwei Möglichkeiten für primitive Elementarzellen.

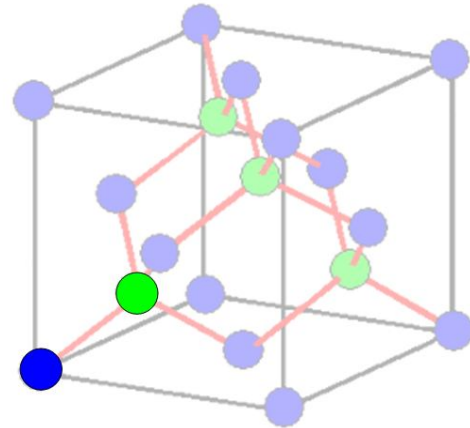
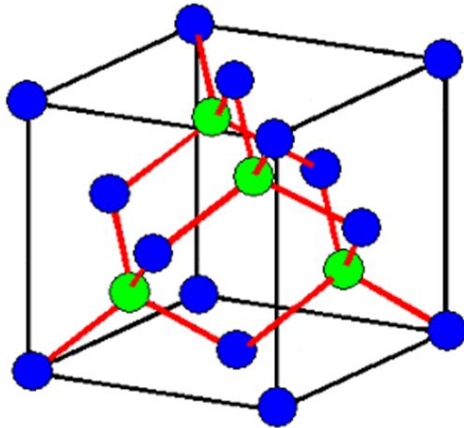
---

**Aufgabe 13 )****(a4)**

Die Diamantstruktur kann als kubisch-flächenzentriertes Bravaisgitter aufgefasst werden, dessen Basis aus Kohlenstoffatomen bei  $(0,0,0)$  und  $(1/4,1/4,1/4)$  besteht (siehe Skizze...)

- (a) Zeichnen Sie die  $(1\bar{1}0)$  und  $(001)$  Ebene (die  $(xyz)$  Ebene stehe senkrecht auf dem Vektor  $(x,y,z)$  und enthalte den Ursprung). Die Gitterkonstante der gewöhnlichen Einheitszelle von Diamant ist  $a = 3.57 \text{ \AA}$ . Wie groß ist der minimale Abstand zwischen Kohlenstoffatomen in der  $(001)$  Ebene? Wie groß ist der Abstand nächster Nachbarn in der Diamantstruktur?
- (b) Wie viele Atome gehören zur gewöhnlichen Einheitszelle?
- (c) Wieso kann unter der Annahme einer einatomigen Basis kein Bravaisgitter gefunden werden?

## Diamantstruktur:



- Struktur fcc-abgeleitet durch Besetzung von **Tetraederplätzen**
- lockere Packung basierend auf  **$sp^3$ -Hybridbindung**

Aufgabe 14 )

(a83)

Warum kommt bei den Bravaisgittern im 3-dimensionalen das raumzentrierte monokline Gitter nicht vor?

Aufgabe 15 )

(a84)

Warum ist bei den Bravaisgittern im 3-dimensionalen im orthorhombischen System die Zentrierung von nur zwei Rechteckflächen nicht erlaubt?

Aufgabe 16 )

(a61)

Konstruieren Sie die Wigner-Seitz-Zelle in dem Bild der Gitterpunkte eines Flächengitters!

○ ○ ○

○ ○ ○

○ ○ ○