Aufgabe 1.2

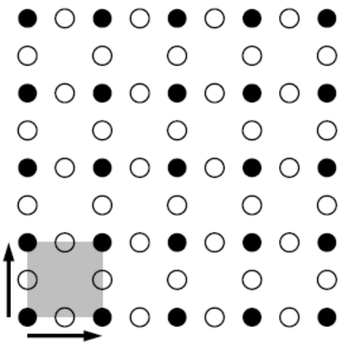


Abbildung 1: Zu a)

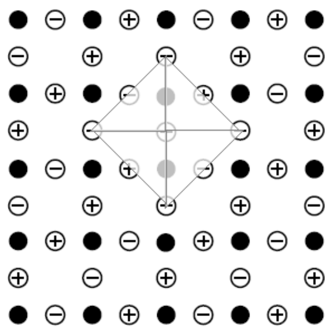


Abbildung 2: Zu c).

a)

Das Bravaisgitter ist quadratisch. Die primitiven Gittervektoren sind in der Abbildung dargestellt, sie haben die Länge a. Ebenfalls in der Abbildung gekennzeichnet ist die primitive Einheitszelle mit der Basis. Letztere besteht aus zwei Sauerstoffatomen und einem Kupferatom. Es liegt vierzählige Rotationssymmetrie vor.

b)

Es ist ebenfalls ein primitiv quadratisches Gitter.

c)

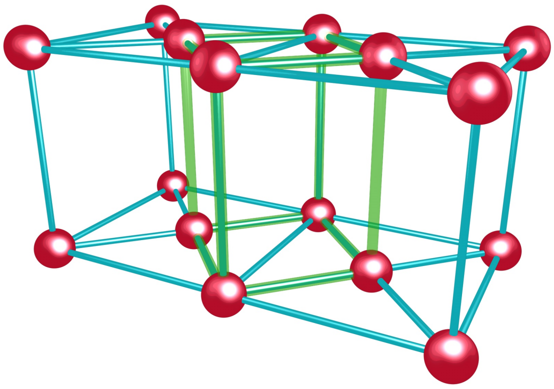
Es ist erneut ein quadratisches Gitter, mit zweizähliger Rotationssymmetrie. Die primitive Einheitszelle inklusive Basis ist in der Abbildung zu sehen. Die Gitterkonstante ist in diesem Fall $\sqrt{2}a$.
In der Abbildung nicht eingezeichnet sind die primitiven Gittervektoren. Die Gittervektoren sind orthogonal und sind parallel zu den Seiten der eingezeichneten Einheitszelle, es stimmt ebenfalls die Länge überein.

Aufgabe 1.3

Bei Betrachtung von zwei nebeneinanderliegenden Gittern erkennt man, dass sich diese Struktur mit der eines tetragonalen Gitters (grün markiert) identisch ist. Dieses Gitter hat dabei die Seitenlängen a und $\frac{a}{\sqrt{2}}$.

Aufgabe 1.4

Betrachte für jede Struktur jeweils Würfelkante, Flächendiagonale, Raumdiagonale. Diese haben die Länge $a, \sqrt{2}a, \sqrt{3}a$. Zur Verringerung der Schreibweise wird festgelegt: $r_m := r_{\mathrm{M}^+}$, $r_x := r_{\mathrm{X}^-}$



a)

Offensichtlich wird der Radius der Chloridionen durch die Kantenlänge vorgegeben, die Betrachtung der Flächendiagonalen ist überflüssig:

$$2r_x = a \tag{1}$$

Für die Raumdiagonale gilt:

$$2r_m + 2r_x = \sqrt{3}a \Rightarrow 2r_m = a\left(\sqrt{3} - 1\right) \tag{2}$$

Somit folgt für das Verhältnis:

$$r_m/r_x = \sqrt{3} - 1 \approx 0{,}732 \tag{3}$$

b)

Der Radius der Chloridionen wird durch die Flächendiagonale festgelegt:

$$4r_x = \sqrt{2}a \tag{4}$$

Auf der Raumdiagonalen und der Würfelkante liegt die gleiche Anordnung vor, entsprechend ist letztere entscheidend für das Größenverhältnis:

$$2r_m + 2r_x = \sqrt{3}a \Rightarrow 4r_m = a\left(2 - \sqrt{2}\right) \tag{5}$$

$$r_m/r_x = \frac{2 - \sqrt{2}}{\sqrt{2}} = \sqrt{2} - 1 \approx 0{,}414 \tag{6}$$

c)

Die Größe der Sulfationen wird durch die Flächendiagonale festgelegt:

$$4r_x = \sqrt{2}a \tag{7}$$

Die Raumdiagonale kann durch Symmetrieüberlegungen so betrachtet werden, als würden auf ihr zwei komplette Zn Ionen liegen, sowie zwei S Ionen:

$$4r_m + 4r_x = \sqrt{3}a \Rightarrow 4r_m = a\left(\sqrt{3} - \sqrt{2}\right) \tag{8}$$

Somit folgt für das Verhältnis:

$$r_m/r_x = \frac{\sqrt{3} - \sqrt{2}}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \approx 0{,}225 \tag{9}$$