

**1) Erstellen Sie eine übersichtliche Darstellung (Elementarzelle, Koordinationspolyeder, Elementsymbole) für die folgende Spinellstruktur:**

Raumgruppe F d -3 m (Nr. 277, Aufstellung FD3MZ), a = 8.4360 Å.

| Atom | S.O.F. | x/a   | y/b   | z/c   |
|------|--------|-------|-------|-------|
| Li1  | 0.5    | 1/8   | 1/8   | 1/8   |
| Cu1  | 0.5    | 1/8   | 1/8   | 1/8   |
| Rh1  | 0.5    | ½     | ½     | ½     |
| Ru2  | 0.5    | ½     | ½     | ½     |
| O1   | 1      | 0.724 | 0.724 | 0.724 |

Stellen Sie ihre fertige Darstellung online [#AC318FU](#) und vergleichen Sie mit Darstellungen Ihrer Kommilitonen.

Hinweis: Fehlordnungen/Statistische Verteilungen können durch Doppelfarben dargestellt werden.

Hinweis: In Diamond „New Empty Document“ – „Structure“ – “New Structure”, “Type in new structure parameters” ...

**2) Identifizieren Sie die folgenden Strukturtypen**

a) Raumgruppe P42/m n m (Nr. 136), a = 4.7019(1) Å, c = 3.0168(1) Å. Rutil

| Atom | S.O.F. | x/a | y/b | z/c |
|------|--------|-----|-----|-----|
| Rh1  | 0.5    | 0   | 0   | 0   |
| Nb1  | 0.5    | 0   | 0   | 0   |
| O1   | 1      | 0.3 | 0.3 | 0   |

b) Raumgruppe P b n m (Nr. 62), a = 5.5350(4) Å, b = 5.5529(4) Å, c = 7.8305(5) Å. Perowskit

| Atom | S.O.F. | x/a       | y/b       | z/c       |
|------|--------|-----------|-----------|-----------|
| La1  | 1      | 0.0090(7) | 0.0419(3) | 0.25      |
| Ni1  | 0.5    | 0.5       | 0         | 0         |
| Rh1  | 0.5    | 0.5       | 0         | 0         |
| O1   | 1      | 0.2890(5) | 0.2878(5) | 0.0409(4) |
| O2   | 1      | -0.081(1) | 0.4899(6) | 0.25      |

c) Raumgruppe R-3c (Nr. 167, Aufstellung R3-CHR),  $a = 5.127(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 13.853(4) \text{ \AA}$ . Spinell

| Atom | S.O.F. | x/a       | y/b | z/c      |
|------|--------|-----------|-----|----------|
| Rh1  | 1      | 0         | 0   | 0.348(1) |
| O1   | 1      | 0.295(10) | 0   | 1/4      |

**3) Berechnen Sie die Raumaufüllung einer imaginären Metallstruktur, die mC kristallisiert. Gegeben:**  
 $a = b$ ,  $c = 2a$ ,  $\beta = 86^\circ$ . 18.5%

**4) Bestimmen Sie, wie folgende Hume-Rothery-Phasen kristallisieren:**

- a)  $\text{Rh}_5\text{Zn}_{21}$
- b)  $\text{Cu}_3\text{Sn}$
- c)  $\text{CuZn}_3$
- d)  $\text{Cu}_4\text{Sn}$
- e)  $\text{Cu}_3\text{Al}$

**6) Nennen Sie die Hauptbestandteile folgender Legierungen**

- a) Elektron      Mg (+Al)
- b) Monel        Ni (+Cu)
- c) Elektrum    Au (+Ag)
- d) Schrot       Pb (+Sb)
- e) Bronze        Cu (+Sn)