

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

Raumgruppe F d -3 m (Nr. 277, Aufstellung FD3MZ), $a = 8.4360 \text{ \AA}$.

| 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), $a = 4.7019(1) \text{ \AA}$, $c = 3.0168(1) \text{ \AA}$.

| 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), $a = 5.5350(4) \text{ \AA}$, $b = 5.5529(4) \text{ \AA}$, $c = 7.8305(5) \text{ \AA}$.

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

| 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:
 $a = b$, $c = 2a$, $\beta = 86^\circ$.

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

- a) $\text{Rh}_5\text{Zn}_{21}$
- b) Cu_3Sn
- c) CuZn_3
- d) Cu_4Sn
- e) Cu_3Al

6) Nennen Sie die Hauptbestandteile folgender Legierungen

- a) Elektron
- b) Monel
- c) Elektrum
- d) Schrot
- e) Bronze