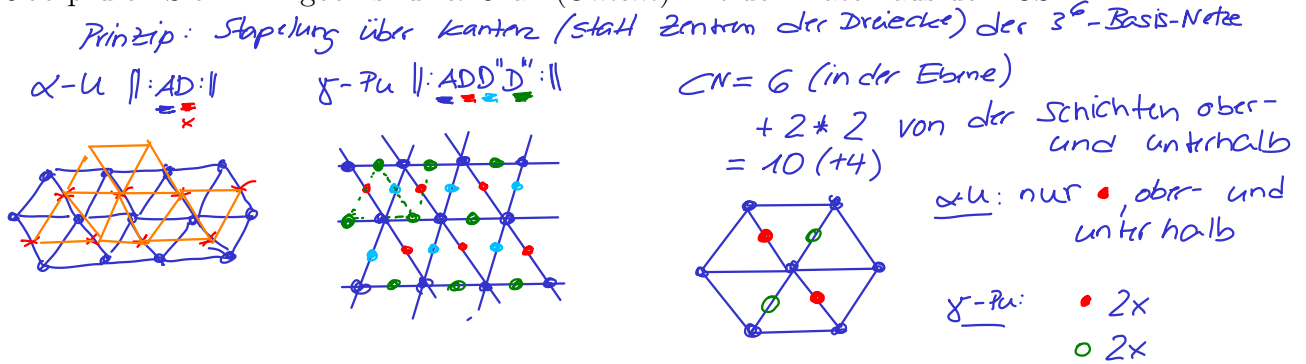
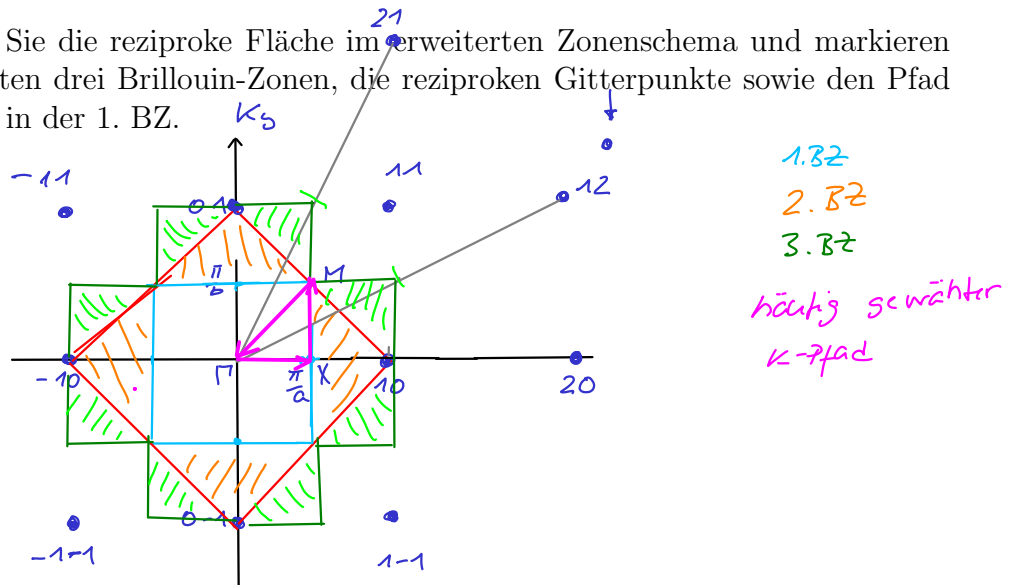


- 1 Die **Stapelung über Kanten** ist das Prinzip der Atompackungen in den Strukturen von γ -Plutonium und α -Uran. Skizzieren Sie das Prinzip dieser Packungen. Welche Koordinationszahlen und -geometrien haben die Atome in den beiden Strukturen? Überprüfen Sie Ihr Ergebnis für α -Uran ($Cmcm$) mit den Daten aus der ICSD.



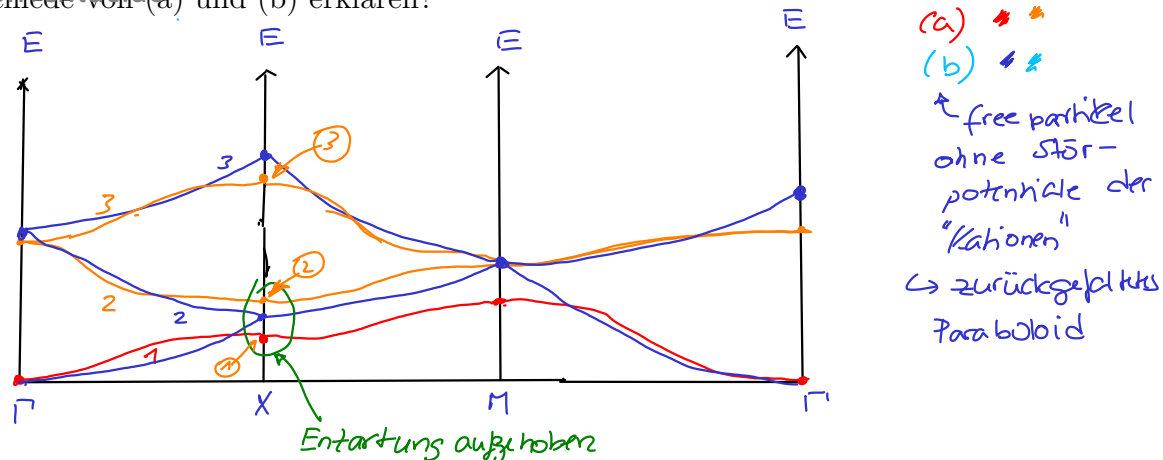
- 2 Das 2D-Modellsystem **Squarium** kann man mit dem Programm *qm2dcrystal* (s. Webseite) selber 'erkunden'.

- (a) Skizzieren Sie die reziproke Fläche im erweiterten Zonenschema und markieren Sie die ersten drei Brillouin-Zonen, die reziproken Gitterpunkte sowie den Pfad Γ -X-M- Γ in der 1. BZ.

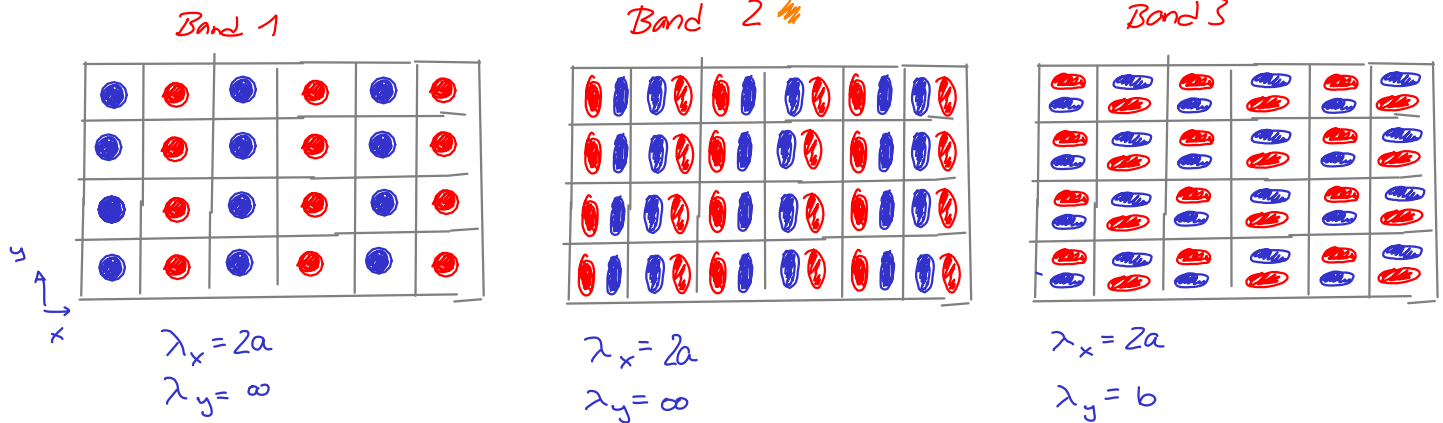


- (b) Plotten Sie mit dem genannten Programm die Bandstruktur für (a) 'potential rectangular wells' und (b) 'free particle' und übertragen Sie die untersten drei Bänder in einen 'Spaghetti-Plot' (dem o.g. Pfad folgend). Wie lassen sich die Unterschiede von (a) und (b) erklären?

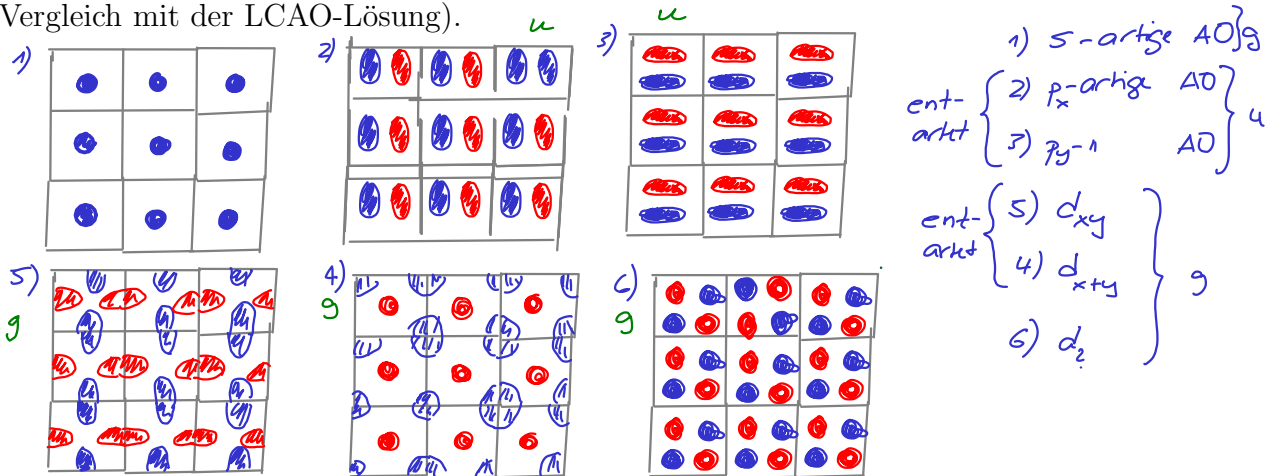
dgk-conference@conventus.de



- (c) Zeichnen Sie für diese drei Bänder (mit Einstellung 'potential rectangular wells') den Verlauf der Vorzeichen der PW in der Nähe des Punktes X im Realraum (z.B. 4x6 Elementarzellen). Welche Wellenlängen λ_x und λ_y haben die PW?



- (d) Skizzieren Sie analog die Vorzeichenverläufe für die untersten sechs Bänder am Γ -Punkt. Welchen Atom-Orbitalen entsprechen – bzgl. Vorzeichenwechsel und Symmetrie – diese sechs Bänder? (! Das Atom liegt hier in der Mitte der Zelle! Vergleich mit der LCAO-Lösung).



- (e) Wie begründen sich Verlauf und Entartung für diese sechs Bänder, wenn man von Γ nach X läuft? Betrachten Sie dazu die Orbitale aus (d) bezüglich σ - und π -Charakter der Bindung.

Band 1: von $\Gamma \rightarrow X$ steigend, da von σ -bindend zu σ -antibindend übergeht
 Band 2: p-artig, von $\Gamma \rightarrow X$ fallend, da Anteil σ -ab zu σ -bindend zunimmt
 Band 3: p-artig " " steigend, da von π -bindend zu π^* verlaufend
 (Bänder mit geringerer Dispersion, da nur π -NW)

bei X entartet {
 Band 4: d-artig } beide von $\Gamma \rightarrow X$ steigend σ -NW u. d-Orbitalen
 " 5: " } nimmt ab nach X / mit mehr Vorzeichenwechsel
 Band 6: d-artig, von $\Gamma \rightarrow X$ fallend, bei Γ π^* -ab, bei X π -bindend

- 3 Vom Element **Calcium** wissen wir aus der letzten Übung, dass es polymorph ist. Wie läßt sich die Polymorphie gerade bei diesem Element begründen?

V der Fermikugel $\cong V$ der 1. BZ, da 2 v.e. / Atom
 \hookrightarrow Fermikugel berührt die BZ-Ränder, die sich bei den beiden Strukturtypen nicht gleich, aber ähnlich weit vom Γ -Punkt entfernt befinden