

Übung 4

Festkörper- und Materialchemie

(WiSe 2025/2026)

Jun.-Prof. Dr. M. Suta – Photoaktive Materialien – HHU Düsseldorf

Aufgabe 1

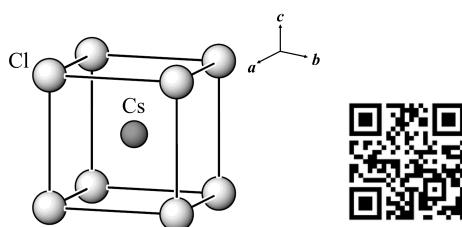
Ermitteln Sie, ob die folgenden Gruppe-Untergruppe-Beziehungen (der Übersicht halber ohne Nummern lt. International Tables) translationengleich, klassengleich, oder isomorph sind. Wenn die Elementarzelle der Untergruppe vergrößert wird, ist dies im Pfeil angegeben. Ändert sich beim jeweiligen Symmetrieverlust das Kristallsystem?

- (a) $Cmcm \rightarrow Pmcm$
- (b) $P2_1/c \rightarrow P\bar{1}$
- (c) $P6_3/mcm \rightarrow P6_322$
- (d) $C12/m1-a,b,c \rightarrow C12/m1$

Aufgabe 2

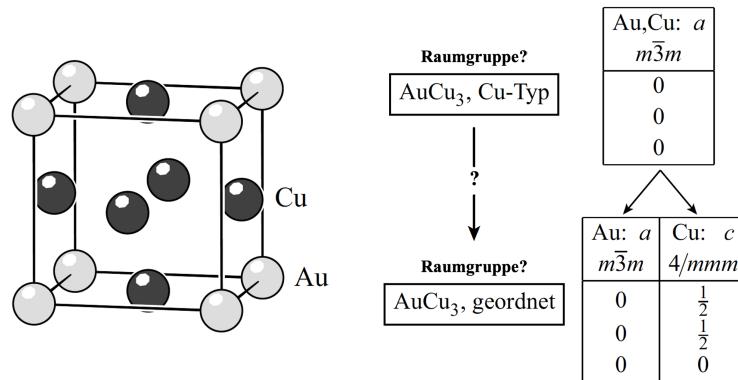
Unten finden Sie eine Darstellung der Elementarzelle des in der Anorganischen Strukturchemie wichtigen CsCl-Strukturtyps.

- (a) Warum ist die Struktur des CsCl nicht kubisch innenzentriert? Begründen Sie in **max. einem Satz**.
- (b) Leiten Sie die ersten vier Terme der Madelungskoeffizienten α des CsCl-Strukturtyps her. Als Hilfe können Sie hierzu die Strukturdarstellung unter dem ebenfalls unten gezeigten QR-Code nutzen.



Aufgabe 3

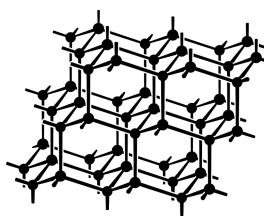
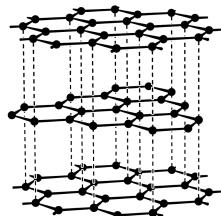
Die Legierung AuCu_3 kristallisiert einmal in einer ungeordneten Variante im Cu-Strukturtyp, bei dem statistisch Au und Cu die Lagen einer kubisch flächenzentrierten Zelle besetzen. Demgegenüber existiert noch ein sogenannter **ausgeordneter** Strukturtyp (s. auch Abbildung unten), bei dem die Au-Atome ausschließlich die Ecken und die Cu-Atome die Flächenmitten der Elementarzelle besetzen. Einer der beiden Strukturtypen kristallisiert im Raumgruppentyp $Fm\bar{3}m$ (Nr. 225), der andere im Raumgruppentyp $Pm\bar{3}m$ (Nr. 221).



- Ordnen Sie die Raumgruppentypen den passenden Strukturen (mischbesetzt vs. geordnet) zu.
- Welcher der beiden Strukturtypen ist wohl bei niedrigerer und welcher bei höherer Temperatur stabil? Begründen Sie Ihre Wahl in **max. einem Satz**.
- Oben sehen Sie auch Teile des Bärnighausen-Stammbaums für diesen Phasenübergang. Ergänzen Sie darin die Multiplizitäten der Lagen und ermitteln Sie, um was für einen Symmetrieübergang es sich hier handelt. Was für eine Art von Phasenübergang liegt also hier vor (*displaziv* oder *rekonstruktiv*)?
- Leiten Sie anhand der hergeleiteten Multiplizität der Cu-Lage in der geordneten Phase nun die Ordnung h der Punktgruppe $4/mmm = D_{4h}$ her.

Aufgabe 4

Unten sehen Sie Strukturausschnitte zweier Allotrope des Kohlenstoffs, Graphit (*links*) und Diamant (*rechts*).



- (a) Eines der Allotrope kristallisiert in der Raumgruppe $P6_3/mmc$ (Nr. 194), das andere in der Raumgruppe $Fd\bar{3}m$ (Nr. 227). Ordnen Sie die richtige Raumgruppe mit kurzer Begründung (**max. ein Satz**) dem richtigen Allotrop zu.
- (b) Diese Allotrope lassen sich durch externe Stimuli ineinander umwandeln. Die eine Umwandlung erfolgt unter erhöhtem Druck, die andere unter erhöhte Temperatur. Ordnen Sie die Richtung dem richtigen Stimulus zu und begründen Sie Ihre Wahl in **max. zwei Sätzen**.
- (c) Handelt es sich bei der Phasenumwandlung der beiden Allotrope um einen displaziven oder rekonstruktiven Phasenübergang? Lässt sich der Phasenübergang durch eine Gruppe-Untergruppe-Beziehung beschreiben? Begründen Sie Ihre Aussage in **max. einem Satz**.