

- 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. Web-Seite) 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?

(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.

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