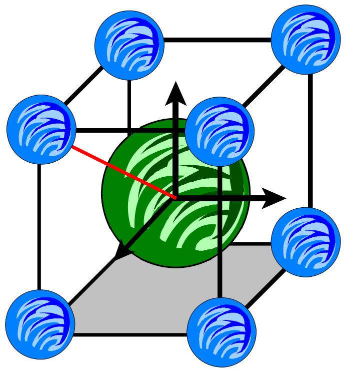
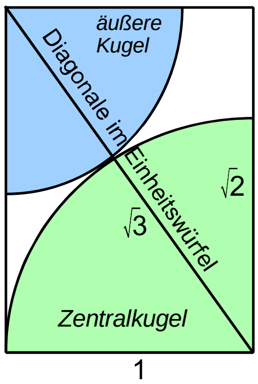
Aufgabe 7: Elementarzelle

Ein Würfel mit der Kantenlänge $a = 2$ heiße Elementarzelle.
Diese Elementarzelle wird in einem Koordinatensystem so angeordnet, dass ihr Zentrum im Koordinatenursprung liegt und die Würfelkanten parallel zu den Koordinatenachsen angeordnet sind.

Acht gleich große Kugeln werden jetzt so angebracht, dass ihre Mittelpunkte je einen der Eckpunkte der Elementarzelle bilden.
Die neunte Kugel, die Zentralkugel, hat ihren Mittelpunkt im Zentrum der Elementarzelle, also im Ursprung des Koordinatensystems. Die Zentralkugel berührt alle anderen acht Kugeln. Ihr Radius sei mit r bezeichnet.



schematische Darstellung



a) Beschreiben Sie, warum dann die äußeren Kugeln den Radius $r_a = \sqrt{3} - r$ aufweisen.
Geben Sie den Definitionsbereich von r an.

b) Bestimmen Sie zunächst r so, dass das nicht von den neun Kugeln eingenommene Volumen in der Elementarzelle maximal ist. (Bedenken Sie dabei, dass die äußeren acht Kugeln nicht vollständig in der Elementarzelle liegen!)

c) Bestimmen Sie dann r so, dass die gesamte Oberfläche der neun Kugeln in der Elementarzelle extremal wird. Um welche Art von Extremum handelt es sich?

d) Die hier behandelten Elementarzellen mit ihren Kugeln sind eine Darstellung eines bestimmten Kristalltyps, und zwar des so genannten kubisch-raumzentrierten Kristalls. (Ein Kristall „entsteht“ aus der Elementarzelle, indem man in alle Raumrichtungen dieselbe Elementarzelle immer wieder neu ansetzt.)
Steinsalz – also NaCl – kristallisiert in dieser Form, bildet also kubisch-raumzentrierte Kristalle. Ersichtlich kommen in einem Steinsalzkristall Natriumatome und Chloratome in gleicher Anzahl vor.

Begründen Sie, dass in einer Elementarzelle ebenfalls gleich viel Kugeln des Typs „Zentralkugel“ und des Typs „äußere Kugel“ vorkommen.

Beim Steinsalzkristall verhalten sich die Radien der Na-Atome und der Cl-Atome wie 43 : 57. Welcher Volumenanteil der Elementarzelle wird von den Atomen eingenommen?
Beurteilen Sie dieses Radienverhältnis im Lichte Ihrer bisherigen Ergebnisse.

Aufgabe 7: Elementarzelle

	Lösungsskizze	Zuordnung, Bewertung		
		I	II	III
a)	Die Elementarzelle kann man sich in vier Einheitswürfel unterteilt denken. Die Raumdiagonale eines Einheitswürfels hat die Länge $d=\sqrt{3}$. Da der Berührungspunkt der äußeren Kugel und der Zentralkugel auf dieser Diagonalen liegt, müssen sich die beiden Radien r und r_a zu $\sqrt{3}$ ergänzen. Wenn die äußeren Kugeln sich (auf der Oberfläche der Elementarzelle) berühren, haben sie den größtmöglichen Radius von $r_a = 1$. Wenn die Zentralkugel bis zur Oberfläche der Elementarzelle reicht, hat ihr Radius den größtmöglichen Wert von $r=1$. Damit gilt: $\sqrt{3}-1 \le r \le 1$.	15		
b)	Die acht Kugelanteile der äußeren Kugeln, die in der Elementarzelle liegen, bilden zusammen eine Kugel mit dem Radius r_a. Damit ergibt sich die Volumenfunktion V zu $V(r)=\frac{4}{3}\pi\cdot(r_a^{\,3}+r^3)=\frac{4}{3}\pi\cdot((\sqrt{3}-r)^3+r^3)$. Ausmultipliziert ergibt sich $V(r)=4\sqrt{3}\cdot\pi\cdot\left(r^2-\sqrt{3}r+1\right)$. *(Die Volumenfunktion ist also eine einfache quadratische Funktion von r!)* Nicht von den Kugeln eingenommen wird damit $V_{Rest}(r)=8-4\sqrt{3}\cdot\pi\cdot\left(r^2-\sqrt{3}r+1\right)$. Da der Graph dieser Funktion eine nach unten geöffnete Parabel ist, muss die einzige Nullstelle der Ableitung (oder: der Scheitelpunkt der Parabel) eine Maximalstelle der Funktion sein. Mit $V'_{Rest}(r)=-4\sqrt{3}\cdot\pi\cdot\left(2r-\sqrt{3}\right)$ ergibt sich: Das Restvolumen ist bei $r=\frac{\sqrt{3}}{2}\approx 0{,}8660$ maximal und hat einen Wert von $V_{Rest}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)=8-\pi\cdot\sqrt{3}\approx 2{,}5586$.		35	
c)	Die acht Kugelanteile der äußeren Kugeln, die in der Elementarzelle liegen, bilden zusammen eine Kugel mit dem Radius r_a. Damit ergibt sich die Oberflächenfunktion A zu $A(r)=4\pi\cdot(r_a^{\,2}+r^2)$ $\quad=4\pi\cdot\left((\sqrt{3}-r)^2+r^2\right)$ $\quad=8\pi\cdot(r^2-\sqrt{3}\cdot r+1{,}5)$. Auch ohne abzuleiten kann sofort gesehen werden, dass der Graph von A eine nach oben geöffnete Parabel und deswegen der Scheitelpunkt von A das einzige Minimum der Funktion ist. Es ergibt sich: $r_{\min}=\frac{\sqrt{3}}{2}\approx 0{,}8660$ und damit $A(r_{\min})=6\pi\approx 18{,}8496$.			

	Lösungsskizze	Zuordnung, Bewertung		
		I	II	III
	Dass V und A an derselben Stelle ihr Extrem aufweisen und dass die Extremalstelle genau in der Mitte der Diagonalen liegt, ist dann nicht mehr weiter verwunderlich, wenn man bedenkt, dass bei dieser Anordnung der Kugeln Zentralkugel und Randkugeln austauschbar sind, siehe e).		25	
d)	Da in einer Elementarzelle eine Zentralkugel und von den acht äußeren Kugeln jeweils ein Achtel (nämlich ein Kugeloktant) liegen, liegen in einer Elementarzelle je eine Kugel vom Typ Zentralkugel und eine vom Typ äußere Kugel. *(Daraus ergibt sich auch, dass beim kubisch-raumzentrierten Kristall die Rollen von Zentralkugel und von Außenkugel austauschbar sind – eine Verschiebung der Elementarzelle um eine halbe Kantenlänge kehrt die Rollen um. Damit ist natürlich auch die Symmetrie der Funktionen V und A bezüglich r verständlich.)* Da $0{,}43 > \frac{\sqrt{3}-1}{\sqrt{3}} \approx 0{,}4227$, liegt das Verhältnis von 43:57 (noch) im Definitionsbereich von *r*, die „Atomkugeln“ können sich also tatsächlich berühren. Das Restvolumen ergibt sich zu 2,2387 oder zu etwa 87,5 % des maximalen Restvolumens. Die Oberfläche ergibt sich zu 19,219, sie liegt damit etwa 2 % über der minimalen Oberfläche.		10	15
	Insgesamt 100 BWE	15	70	15