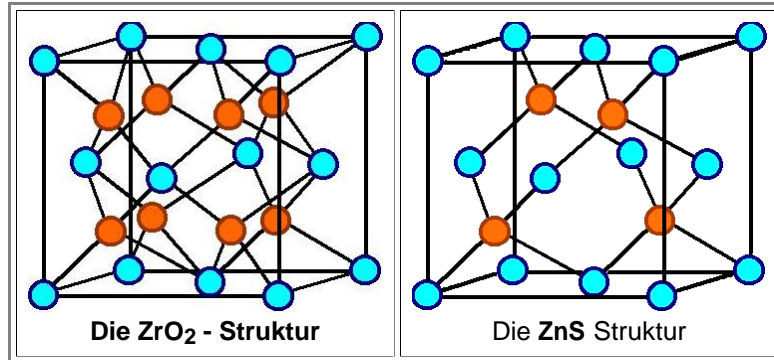


Lösungen zur Übung 3.3-4

Der Kristallstrukturtyp von ZrO_2 (Kubisches Zirkonoxid)

Illustration

- Gehört der ZrO_2 Kristall zur Gruppe der Kristalle mit [ZnS - Struktur](#)? Was ist das Bravaisgitter? Wie sieht die Basis aus? Was macht den Unterschied zum GaAs ?
- Vergleichen wir erst mal die beiden Kristalltypen



- Die blauen Atome "passen". Das Bravaisgitter ist also identisch: Wir haben ein **fcc** Gitter.
- Aber es gibt doppelt so viele rote (Sauerstoff)atome links wie "innere" Atome rechts.
 - Wir haben also beim ZrO_2 **zwei** Sauerstoffatome in der Basis, eines - wie bei der ZnS Struktur bei $(1/4, 1/4, 1/4)$, das zweite sitzt bei $(1/4, 3/4, 1/4)$.
 - Wir haben also **keine** ZnS Struktur.
- Die Bindungsstruktur ist im übrigen auch völlig anders.
 - Während im GaAs jedes Ga oder As Atom immer vier nächste Nachbarn der jeweils anderen Sorte hat, sieht ein Zr Atom **8** nächste Sauerstoffnachbarn, während ein Sauerstoffatom im Zentrum eines Tetraeders aus **4** Zr Atomen sitzt.
 - Das ist nicht ganz leicht zu sehen; das Bild unten hilft.

