

IA																				VIII									
1 H hcp																				2 He hcp									
3 Li bcc		4 Be hcp																5 B rhom.	6 C diam.	7 N kub.	8 O	9 F	10 Ne fcc						
11 Na bcc		12 Mg hcp																13 Al fcc	14 Si diam.	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar fcc						
19 K bcc	20 Ca fcc	21 Sc hcp	22 Ti hcp	23 V bcc	24 Cr bcc	25 Mn kub.	26 Fe bcc	27 Co hcp	28 Ni fcc	29 Cu fcc	30 Zn hcp	31 Ga	32 Ge diam.	33 As rhom.	34 Se hex.	35 Br	36 Kr fcc												
37 Rb bcc	38 Sr fcc	39 Y hcp	40 Zr hcp	41 Nb bcc	42 Mo bcc	43 Tc hcp	44 Ru hcp	45 Rh fcc	46 Pd fcc	47 Ag fcc	48 Cd hcp	49 In tetr.	50 Sn diam.	51 Sb rhom.	52 Te hex.	53 I	54 Xe fcc												
55 Cs bcc	56 Ba bcc	57 La hex.	72 Hf hcp	73 Ta bcc	74 W bcc	75 Re hcp	76 Os hcp	77 Ir fcc	78 Pt fcc	79 Au fcc	80 Hg rhom.	81 Tl hcp	82 Pb fcc	83 Bi rhom.	84 Po sc	85 At	86 Rn												
87 Fr	88 Ra	89 Ac																											

Tabelle 2.1: Kristallstrukturen der Elemente. Die angeführte Werte gelten für die gewöhnlichsten Formen bei Zimmertemperatur.

ZUM NACHDENKEN:

- Wieviele Elemente kristallisieren in den Kristallstrukturen sc, bcc, fcc, hdp und wieviele in Anderen?

Aus der Tabelle ist sofort ersichtlich, daß die Metalle fast ausnamslos in einer kubischen, oder hexagonal dicht gepackten Struktur kristallisieren. Diese Strukturen werden im nun Folgenden näher behandelt.

Das kubische Gitter

Unter den Metallen kommt das kubische Gitter am häufigsten vor. Wie bereits erwähnt, werden drei Gitter unterschieden, nämlich das einfach kubische Gitter (sc), das kubisch raumzentrierte Gitter (bcc) und das kubisch flächenzentrierte (fcc) Gitter. Diese drei Gitter sind noch einmal in Abbildung 2.2 gezeigt.

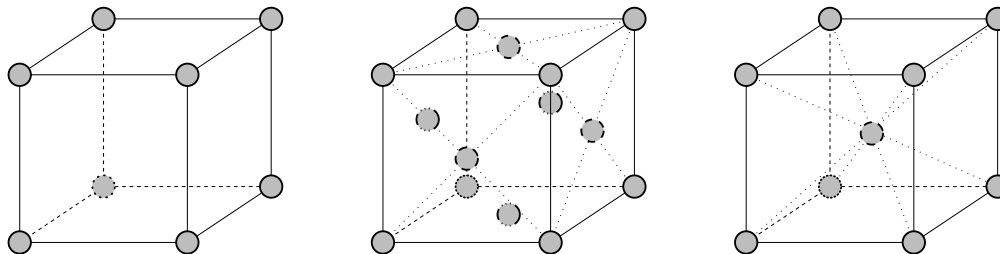


Abbildung 2.2: Die kubische Raumgitter. Die gezeigten Einheitszellen sind die gebräuchlichen Zellen.

Die wichtigsten Eigenschaften der drei kubischen Gitter sind in Tabelle 2.2 einander gegenübergestellt.

	einfach kubisch	raumzentriert	flächenzentriert
Volumen der gebräuchlichen Einheitszelle	a^3	a^3	a^3
Anzahl der Gitterpunkte pro Einheitszelle	1	2	4
Volumen der primitiven Zelle	a^3	$1/2 a^3$	$1/4 a^3$
Anzahl der Gitterpunkte pro Einheitsvolumen	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
Anzahl der nächsten Nachbarn	6	8	12
Abstand zweier nächster Nachbarn	a	$\sqrt{3}a/2 = 0.866a$	$a/\sqrt{2} = 0.707a$
Anzahl der übernächsten Nachbarn	12	6	6
Abstand zum übernächsten Nachbarn	$\sqrt{2}a$	a	a
Pakungsverhältnis	$1/6 \pi = 0,524$	$1/8 \pi\sqrt{3} = 0,68$	$1/6 \pi\sqrt{2} = 0,74$

Tabelle 2.2: Charakteristische Eigenschaften der kubischen Gitter.

Hierin bedeuten die Anzahl der nächsten Nachbarn die auch oft für diesen Zusammenhang verwendete Koordinationszahl. Die Koordinationszahl ist ein Maß für die Packungsdichte einer Struktur. In kubischen Strukturen mit nur einem Atom pro Gitterpunkt ergibt sich die Koordinationszahl direkt aus der Gitterstruktur. Das Packungsverhältnis berechnet sich gemäß Gleichung 2.1; es gibt den von den Atomen besetzten Raumanteil an, unter der Annahme, daß sich die Atome wie feste Kugeln verhalten.

$$\text{Packungsverhältnis} = \frac{(\text{Anzahl der Atome pro Zelle}) (\text{Volumen der Atome})}{\text{Volumen der Elementarzelle}} \quad (2.1)$$

Lediglich das einfach kubische Gitter stellt eine primitive Zelle dar. Weder das kubisch raumzentrierte, noch das kubisch flächenzentrierte Gitter sind primitiv, da für den Aufbau dieser Gitter 2 beziehungsweise 4 Atome pro Elementarzelle nötig sind (s. Tab. 2.2). Die nicht-primitive Zelle weist jedoch eine deutlichere Beziehung zu den Symmetrieoperationen auf. Abbildung 2.3 zeigt die primitive Elementarzelle eines kubisch raumzentrierten Gitters. In Abbildung 2.4 sind die primitiven Translationsvektoren des kubisch raumzentrierten Gitters dargestellt. Die primitive Zelle des kubisch raumzentrierten Gitters ist ein Rhomboeder mit der Seitenlänge $\sqrt{3}/2 a$ und der Winkel zwischen den schneidenden Kanten beträgt $109^\circ 28'$.

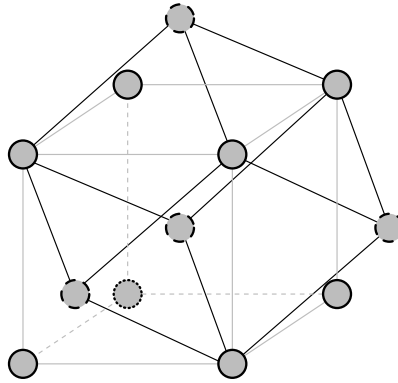


Abbildung 2.3: Kubisch raumzentriertes Gitter mit primitiver Elementarzelle. Die dargestellte primitive Elementarzelle ist ein Rhomboeder mit der Seitenlänge $1/2\sqrt{3}a$; der Winkel zwischen sich schneidenden Kanten beträgt $109^\circ 28'$.

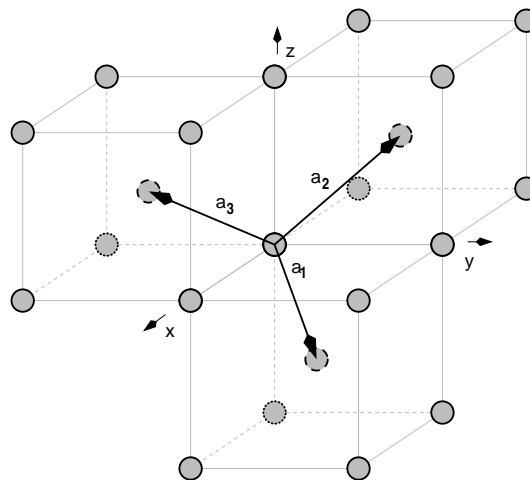


Abbildung 2.4: Primitive Translationen des kubisch raumzentrierten Gitters; diese Vektoren verbinden den Gitterpunkt am Ursprung mit dem Gitterpunkt in der Würfelmittle. Die primitive Gitterzelle erhält man aus diesen Achsen ein vollständiges Rhomboeder aufbaut.

Die primitive Gitterzelle erhält man aus diesen Achsen ein vollständiges Rhomboeder aufbaut. Stellt man die primitiven Translationen als Funktion der Kantenlänge a des Würfels dar, ergeben sie sich zu

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{y} - \vec{z}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(-\vec{x} + \vec{y} + \vec{z}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(\vec{x} - \vec{y} + \vec{z})\end{aligned}\quad (2.2)$$

Die primitive Zelle des kubisch flächenzentrierten Gitters ist ebenfalls ein Rhomboeder. Die primitiven Translationen \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 verbinden den Gitterpunkt am Ursprung mit den Gitterpunkten in den Flächenmittelpunkten. Wie sich aus der Abbildung 2.5 ergibt, sind die primitiven Translationsvektoren:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{y}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(\vec{y} + \vec{z}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{z})\end{aligned}\quad (2.3)$$

Die Winkel zwischen den Achsen betragen 60° . Hierin sind \vec{x} , \vec{y} und \vec{z} die kartesischen Einheitsvektoren.

ZUM NACHDENKEN:

- Wie viele Gitterpunkte gibt es jeweils in den kubischen Strukturen?

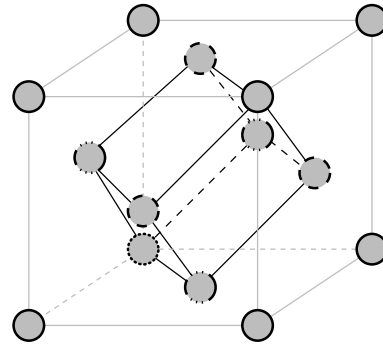


Abbildung 2.5: Die primitive Zelle des kubisch flächenzentrierten Gitters ist ein Rhomboeder. Die primitiven Translationen \vec{a}_1 , \vec{a}_2 und \vec{a}_3 verbinden den Gitterpunkt am Ursprung mit den Gitterpunkten in den Flächenmittelpunkten.

Das hexagonale Gitter

Im hexagonalen System ist die primitive Einheitszelle ein rechtwinkliges Prisma mit einem Rhombus mit einem eingeschlossenen Winkel von 120° als Basisfläche

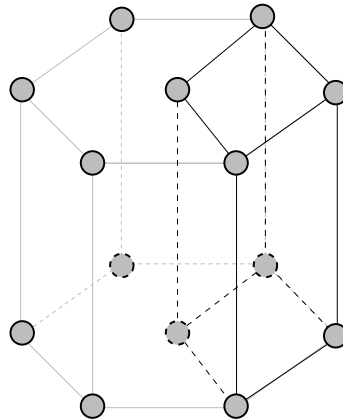


Abbildung 2.6: Zusammenhang zwischen der primitiven Zelle im hexagonalen System (dicke Linien) und einem Prisma mit hexagonaler Symmetrie.

Eine besondere Form des hexagonalen Gitters ist die hexagonal dichtest gepackte Struktur. In diesem Fall enthält die Basis zwei Atome. Diese Atome bilden eine zusätzliche Ebene in der Mitte zwischen den hexagonalen Basisebenen, wobei die Atome in dieser Ebene um den Vektor \vec{r} verschoben sind.

$$\vec{r} = \frac{2}{3}\vec{a}_1 + \frac{1}{3}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3$$

Das Besondere an dieser Struktur liegt in der Packungsdichte, diese beträgt 0,74 und weist damit exakt den gleichen Wert auf wie die des kubisch flächenzentrierten Gitters. Dies kann man sich wie folgt veranschaulichen.

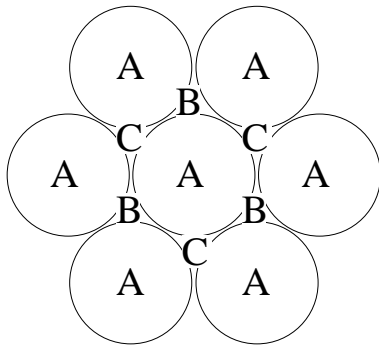


Abbildung 2.7: Zur Stapelreihenfolge dichtest gepackter Schichten von Kugeln.

Abbildung 2.7 zeigt eine dichtest gepackte Schicht von Kugeln, deren Mittelpunkte mit den Punkten \textcircled{A} zusammenfallen. Eine zweite identische Schicht von Kugeln kann so über dieser angeordnet werden, daß deren Kugelmittelpunkte über die Punkte \textcircled{B} gelangen. Es gibt zwei nicht gleichwertige Möglichkeiten für die dritte Schicht. Man kann sie über \textcircled{A} oder \textcircled{C} anordnen. Wenn man sie über \textcircled{A} anordnet, lautet die Reihenfolge ABABAB..., und die Struktur ist hexagonal dichtest gepackt. Wenn man die dritte Schicht über \textcircled{C} anordnet, ist die Reihenfolge ABCABCABC..., und die Struktur ist kubisch flächenzentriert; die Ebene ist dann eine (111)-Ebene.

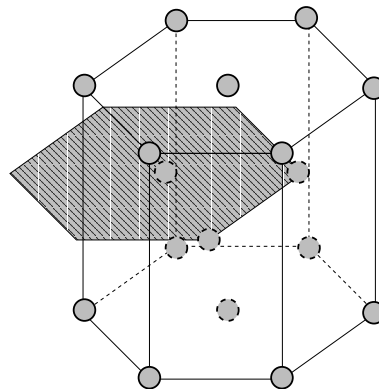


Abbildung 2.8: Die hexagonal dichtest gepackte Struktur. Die Orte der einzelnen Atome ergeben kein Raumgitter. Das Raumgitter ist einfach hexagonal mit zwei identischen Atomen als Basis auf jedem Gitterpunkt.

ZUM NACHDENKEN:

- Warum sind die Packungsdichten für fcc und hcp gleich - und wie werden sie berechnet?
- Eine typische Büroklammer wiegt 0,59 g und besteht aus bcc Eisen. Wie viele Elementarzellen und Atome enthält die Klammer?