

❶ In der Übung zur Woche 1 haben wir gesehen, dass das Metall **Calcium** alle drei Basis-Strukturen der Metalle einnimmt.

(a) Zeichnen Sie die drei Strukturen, berechnen Sie die Volumina der Elementarzellen und die Dichte ($m_{\text{Ca}}=40.08 \text{ g/mol}$).

i. b.c.c./W-Typ ($Im\bar{3}m$, $a=448.0 \text{ pm}$)

ii. f.c.c./Cu-Typ ($Fm\bar{3}m$, $a=561.2 \text{ pm}$)

iii. h.c.p./Mg-Typ ($P6_3/mmc$, $a=400$, $c=660 \text{ pm}$)

(b) Welche Konsequenzen ergeben sich aus den Werten aus (a) für die Phasenbeziehungen zwischen den allotropen Formen von Calcium?

(c) Welche 'Mechanismen' (Verzerrungen, Verschiebungen o.ä.) ergeben sich für die Phasenumwandlungen zwischen den drei Calcium-Modifikationen?

(d) Berechnen Sie die Raumerfüllung der ersten beiden Strukturen aus Aufgabe (a).

(e) Berechnen Sie das ideale $c:a$ -Verhältnis für die hexagonal dichteste Kugelpackung [h.c.p. (a) iii.]. Passt der Wert zu den Angaben aus (a) für diese Ca-Modifikation?

② 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.