

- 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/COD.
- ②** Die intermetallischen '3:1'-Phasen Cu₃Au und Fe₃Al sind Überstrukturvarianten einfacher Metall-Packungen.
- Sind die Kriterien für die Ausbildung einer solchen Art von Legierung erfüllt?
 - Skizzieren Sie die Elementarzellen der beiden Strukturen und geben Sie das PEARSON-Symbol dazu an.
 - Welches gemeinsame Prinzip ist für beide Überstrukturen erfüllt? Skizzieren Sie die entsprechenden Koordinationspolyeder von Au bzw. Al.

③ Das Metall **Calcium** kann je nach Temperatur und Druck in allen drei Basis-Strukturen der Metalle kristallisieren.

(a) Zeichnen Sie die drei Strukturen und 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 ($P6_3/mmc$, $a=400$, $c=660 \text{ pm}$)

i.

ii.

iii.

.

(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?