

- ❶ 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.
- ❷ Die intermetallischen '3:1'-Phasen Cu_3Au und Fe_3Al sind Überstrukturvarianten einfacher Metall-Packungen.
- (a) Sind die Kriterien für die Ausbildung einer solchen Art von Legierung erfüllt?
- (b) Skizzieren Sie die Elementarzellen der beiden Strukturen und geben Sie das PEARSON-Symbol dazu an.
- (c) 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 ($m_{\text{Ca}}=40.08 \text{ g/mol}$).
- b.c.c./W-Typ ($Im\bar{3}m$, $a=448.0 \text{ pm}$)
 - f.c.c./Cu-Typ ($Fm\bar{3}m$, $a=561.2 \text{ pm}$)
 - 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?