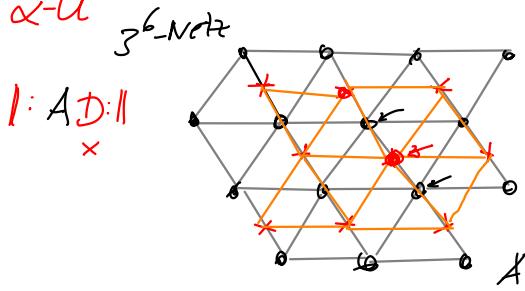
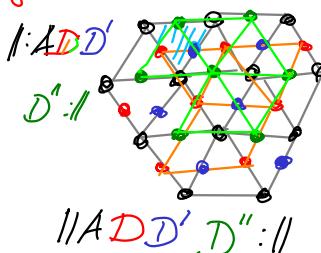
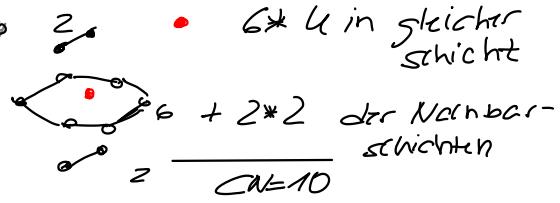


- ① Die **Stapelung über Kanten** ist das Prinzip der Atompackungen in den Strukturen von γ -Plutonium und α -Uran. Skizzieren Sie das Prinzip dieser Packungen. Welche Koordinationszahlen und -geometrien haben die Atome in den beiden Strukturen? Überprüfen Sie Ihr Ergebnis für α -Uran ($Cmcm$) mit den Daten aus der ICSD/COD.

 $\alpha\text{-U}$  $\gamma\text{-Pu}$  $\omega\text{-U} \quad CN \text{ der U-Atome}$ 

- ② Die intermetallischen '3:1'-Phasen Cu₃Au und Fe₃Al sind Überstrukturvarianten einfacher Metall-Packungen.

- (a) Sind die Kriterien für die Ausbildung einer solchen Art von Legierung erfüllt?

- v.c. Zahl gleich
- $\Delta r \approx 15\%$
- (DEN klein)
- isotyp Elementstrukturen

(1) Cu₃Au : v.c. gleich V; $\Delta r \approx 15\% V$; beide isotyp ✓

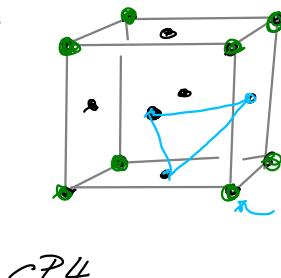
(2) Fe₃Al : v.c. = 3 bei Al \rightarrow immer Al^{3+}
v.c. = 3 bei Fe? \rightarrow üblich Fe^{2+} (d^5)
 $\Delta r \approx 5\%$; beide isotyp? Al: f.c.c.
Fe: b.c.c.; HT-Form f.c.c.

- (b) Skizzieren Sie die Elementarzellen der beiden Strukturen und geben Sie das PEARSON-Symbol dazu an.

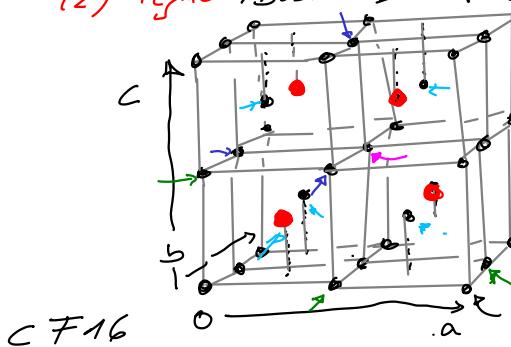
(1) Cu₃Au

$$Au: 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$$

$$Cu: 6 \cdot \frac{1}{2} = 3$$



CP4

(2) Fe₃Al : Basis b.c.c. 2x2x2-Übergitter

CF16

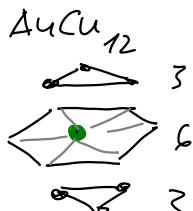
- Fe 12 * 3
- Al 4 *
- EZ-Inhalt / Pearson
- Al: 4 *

$$\begin{aligned} & 8 \cdot \frac{1}{8} = 1 \quad 12 \cdot \frac{1}{4} = 3 \\ & 6 \cdot \frac{1}{2} = 3 \quad + 1 \\ & \quad \quad \quad + 4 \\ & \quad \quad \quad 12 \end{aligned}$$

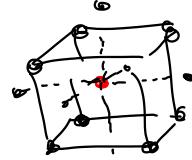
- (c) Welches gemeinsame Prinzip ist für beide Überstrukturen erfüllt? Skizzieren Sie die entsprechenden Koordinationspolyeder von Au bzw. Al.

Minoritätsk. möglichst von anderer Atomsorte koordiniert

• Cu₃Au Kuboktaeder



• Fe₃Al



Fe₃Al-Würfel $CN = 8 \quad \{ 8+6 \}$
+ Fe₄-Oktaeder $CN = 6 \quad \{ 8+6 \}$

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

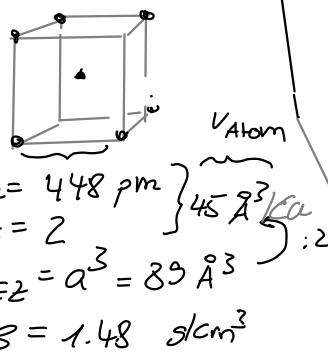
(a) Zeichnen Sie die drei Strukturen und berechnen Sie die Volumina der Elementarzellen und die Dichte ($M_{\text{Ca}}=40.08 \text{ g/mol}$).

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

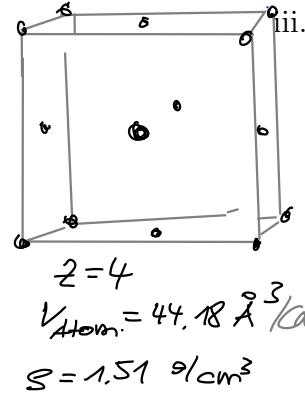
ii. f.c.c./Cu-Typ ($F\bar{m}\bar{3}m$, $a=561.2 \text{ pm}$)

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

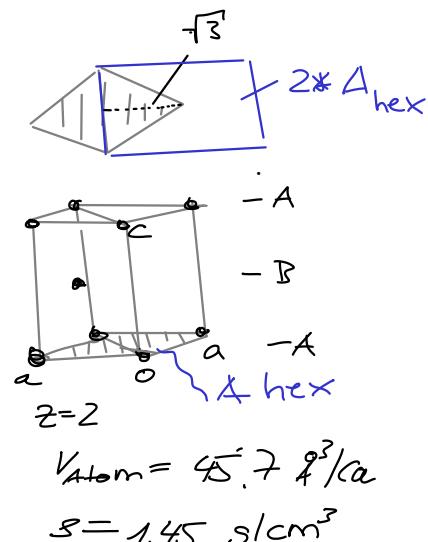
i.



ii.



iii.



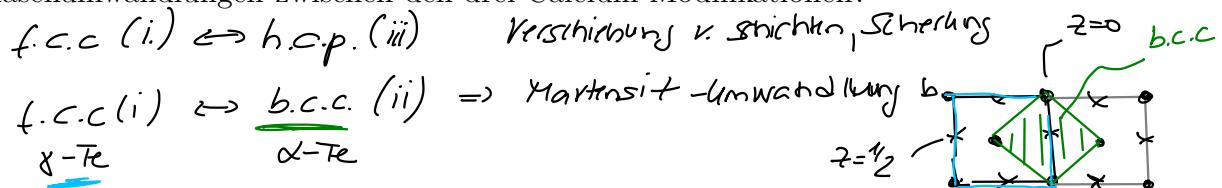
(b) Welche Konsequenzen ergeben sich aus den Werten aus (a) für die Phasenbeziehungen zwischen den allotropen Formen von Calcium?

b.c.c. fT -Form (kleinere Dichte)

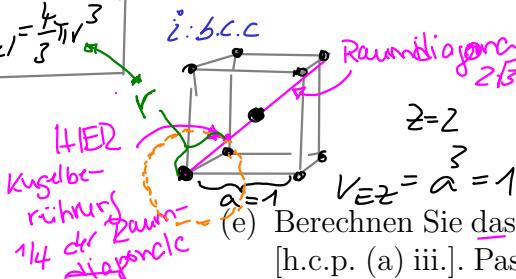
f.c.c. dT -Form

h.c.p. nur stabil mit minimalen Ti-Gehalten ($\sim 0.3\%$)

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

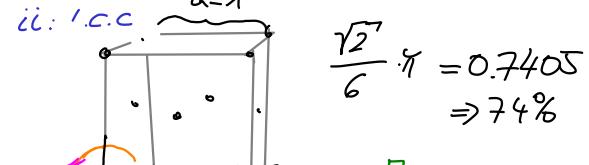


(d) Berechnen Sie die Raumerfüllung der ersten beiden Strukturen aus Aufgabe (a).



$$\frac{2V_{\text{Kugel}}}{V_{\text{EZ}}} = \frac{\sqrt{3}}{8} \pi = 0.68$$

$$\Rightarrow 68\%$$



(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?

