

Kristallstrukturen der Metalle

Die dichteste Anordnung von Kugeln in der Ebene führt zu einer Schicht in der jede Kugel sechs Nachbarkugeln berührt (hexagonale Schicht, **erste Schicht**). Jedes Atom bildet mit zwei benachbarten Atomen ein Dreieck in dessen Vertiefungen (oberhalb und unterhalb der betrachteten Schicht) jeweils eine Kugel der nächsten Schicht paßt. Jedes Atom bildet mit seinen sechs Nachbarkugeln einer Ebene 6 solcher Vertiefungen (+ weitere 6 unterhalb der betrachteten Schicht). Die Vertiefungen einer Schicht (z.B. die der oberen Schicht) werden abwechselnd mit B und C bezeichnet. Von einem B zum nächsten B, also zur übernächsten Lücke, ist der Abstand genauso groß wie von Kugelmitte zu Kugelmitte. Deshalb können die Kugeln einer **zweiten Schicht** nur die Hälfte der Lücken besetzen (also entweder alle B- oder alle C-Lücken). Daraus ergeben sich zwei Stapelfolgen:

Mg-Typ (Magnesium)

Andere Bezeichnungen: Hexagonal dichteste Kugelpackung (hdp), hcp (hexagonal close-packing)

Die **dritte Schicht** ist mit der ersten Schicht auf Deckung. Die Stapelfolge ist AB, AB

Koordinationspolyeder jedes Atoms: Antikuboktaeder

Beispiele: Mg, Ti, Co, Zn

Cu-Typ (Kupfer)

Andere Bezeichnungen: Kubisch-dichteste Kugelpackung (kdp), ccp (cubic close-packing), fcc (face-centered cubic), kubisch flächenzentriert

Die **dritte Schicht** ist mit der ersten Schicht auf Lücke. Die Stapelfolge ist ABC, ABC

Die Schichten liegen senkrecht zu den Raumdiagonalen der kubischen Elementarzelle.

Koordinationspolyeder: Kuboktaeder

Beispiele: Cu, Ca, Sr, Ni, Al, Pb

Bei Kuboktaeder und Antikuboktaeder sind die oberen Dreiecke 60° zueinander verdreht.

Die Koordinationszahl von dichtesten Packungen ist 12. Innerhalb einer Ebene ist jede Kugel von sechs Atomen umgeben, dazu kommen (in die sechs Lücken oben und unten) drei Kugeln oberhalb und unterhalb. Die Raumfüllung von dichtesten Packungen beträgt 74%.

W-Typ (Wolfram)

Andere Bezeichnungen: Kubisch innenzentriert, bcc (body-centered cubic), krz (kubisch raumzentriert)

Raumfüllung: 68%

Die Eckpunkte und das Zentrum der kubischen Elementarzelle sind mit Atomen besetzt.

Koordinationszahl: 8 („nächste Nachbarn“) bzw. 8+6 (6 „weitere Nachbarn“ = innenzentrierte Kugeln der benachbarten sechs Elementarzellen).

Beispiele: W, Alkalimetalle, Fe, Cr

α -Po (Alpha Polonium)

Andere Bezeichnungen: Kubisch primitiv, sc (simple-cubic)

Die Eckpunkte der kubischen Elementarzelle sind mit Atomen besetzt.

Raumfüllung: 52%

Koordinationszahl: 6

Indium

Indium liegt in einer tetragonal verzerrten „kubisch dichtesten Packung“ vor. Es treten vier kürzere und vier längere In-In-Abstände auf

Die meisten Metalle kristallisieren in hdp, kdp oder krz.

krz: z.B. Alkalimetalle, Elemente der 5. u. 6. Nebengruppe

kdp: z.B. 1. u. 2 sowie 10 Nebengruppe

hdp: z.B. Zn, Cd, 4.Nebengruppe

Literatur

Ulrich Müller, Anorganische Strukturchemie, Teubner Verlag, 4. Aufl. 2004, Kap.2+13

Holleman-Wiberg, Lehrbuch d. anorganischen Chemie, 102. Aufl, S.115-119

Charles E. Mortimer, Chemie, 8.Aufl., S.180f.

E. Riedel, Anorganische Chemie, 5.Aufl., S.168f.

Fragen

- 1.) In welchen Kristallstrukturen kommen Metalle vor? Nennen Sie auch Beispiele.
- 2.) Welche Stapelfolge tritt in der hdp, welche in der kdp auf?
- 3.) Welche Koordinationszahlen treten für die konstituierenden Atome in folgenden Strukturen auf: krz, kp, hdp, hdp?