RHEINISCH-
WESTFÄLISCHE
TECHNISCHE
HOCHSCHULE
AACHEN
INSTITUT FÜR KRISTALLOGRAPHIE

Postadresse: D-52056 Aachen, Germany
Institut: Jägerstraße 17-19, D-52066 Aachen
Telefon: ++49 241 80 96900
Telefax: ++49 241 80 92184
http://www.xtal.rwth-aachen.de

GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

Lösung zur 8. Übung: Kugelpackungen

Aufgabe 1:

a) Die Mitten der Kugeln in der ersten Schicht der Stapelung befinden sich in den Lagen A (Abb. 1). Die Kugeln der 2. Schicht können über den „Zwickeln“ B liege.Die 3. Schicht kann entweder in den „Zwickeln“ A oder in C liegen. Damit ergeben sich die folgenden beiden einfachen dichtesten Kugelpackungen:
<u>Schichtfolge $\ldots ABABAB \ldots$</u>: Wiederholung nach zwei Schichten; hexagonal dichteste Packung (kurz: hdp; engl.: hexagonal closed-packed, kurz: hcp).
<u>Schichtfolge $\ldots ABCABC \ldots$</u>: Wiederholung nach drei Schichten; kubisch dichteste Packung (kurz: kfz; engl.: face centered cubic, kurz: fcc).

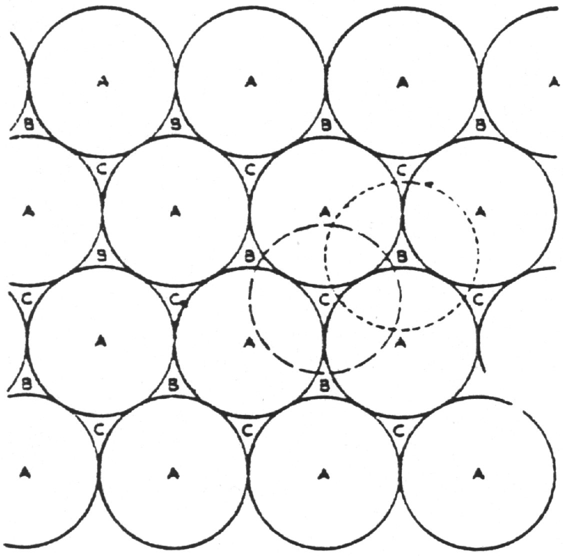

Abb. 1

Beispiele für Elemente, die kubisch dichteste (kubisch flächenzentrierte), hexagonal dichteste, sowie kubisch innenzentrierte (<u>keine</u> dichteste Kugelpackung!!!) Strukturen bilden:

kubisch dicht.	kubisch innen.	hexag. dicht.
Cu, Al, Ag	K, Cr, Rb	Mg, Be
Pt, Au, Pd	Mo, Cs, W	Ti, Zr
Pb, Ni, γ-Fe	Ba, V, Nb	Hf, Zn
	Ta, α-Fe	

b) Die hexagonale Elementarzelle der hexagonal dichtesten Kugelpackung enthält zwei Atome mit den Lagekoordinaten $0, 0, 0$ und $\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}$ (Abb. 2).
Die dreizähligen Achsen und die 6_3-Schraubenachsen verlaufen senkrecht zu den dichtesten Schichten. Koordinaten der Schnittpunkte mit den Schichten:

Achsen 6_3 (Symbol ⬢): $x = \frac{1}{3}\,, \quad y = \frac{2}{3}$ (Abb. 3)
Achsen 3 (Symbol ▲): $x = 0\,, \quad y = 0$ und $x = \frac{2}{3}, \quad y = \frac{1}{3}$

Kristallklasse der hexagonal dichtesten Kugelpackung: $\frac{6}{m}\,\frac{2}{m}\,\frac{2}{m}$ (kurz: $6/mmm$)

Raumgruppe der hexagonal dichtesten Kugelpackung: $P\,\frac{6_3}{m}\,\frac{2}{m}\,\frac{2}{c}$ (kurz: $P6_3/mmc$)

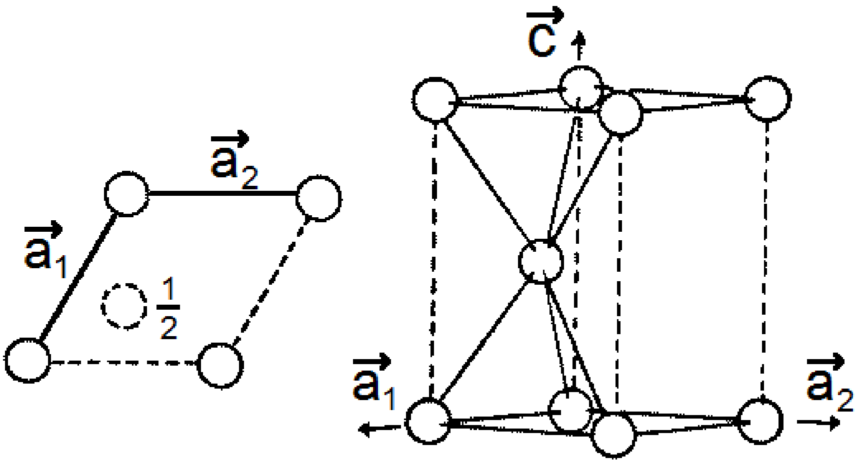

Abb. 2

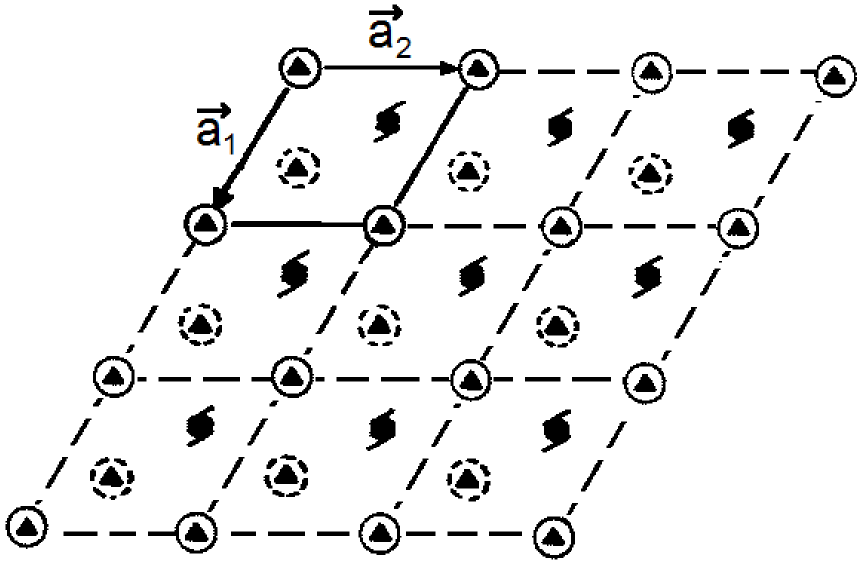

Abb. 3

c) Kubisch dichteste Kugelpackung:

Zahl der Atome in der Elementarzelle: 4 (Abb. 4).

Koordinaten der Atome: $0, 0, 0$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$; $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.

Bravais-Gitter: kubisch flächenzentriert.

Kristallklasse der kubisch dichtesten Kugelpackung: $\frac{4}{m}\,\bar{3}\,\frac{2}{m}$ (kurz: $m\bar{3}m$)

Raumgruppe der kubisch dichtesten Kugelpackung: $F\,\frac{4}{m}\,\bar{3}\,\frac{2}{m}$ (kurz: F$m\bar{3}m$)

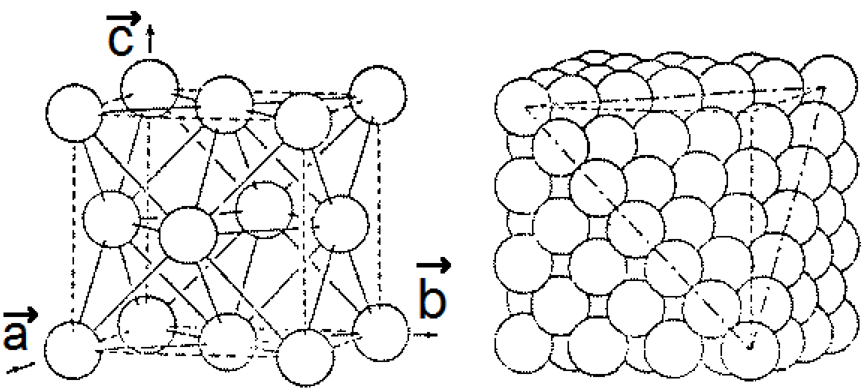

Abb. 4

Aufgabe 2: Koordinationspolyeder (Abb. 5):

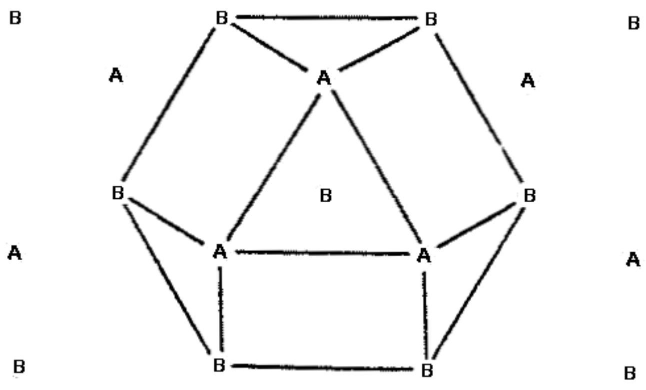

Abb. 5a:

Hexagonal dichteste Packung, Koordinationspolyeder: *Antikubooktaeder*
Koordinationszahl: 12
Packungsdichte: 74 %

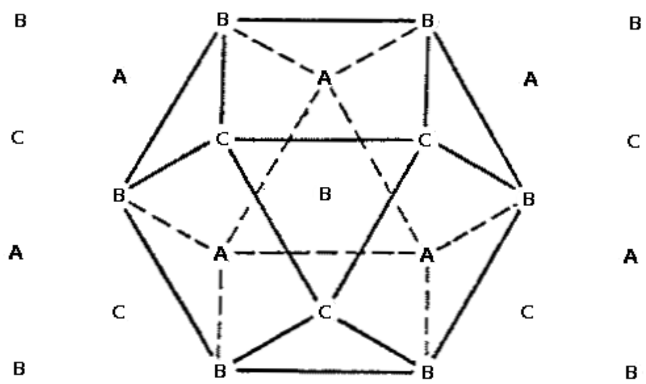

Abb. 5b:

Kubisch dichteste Packung, Koordinationspolyeder: *Kubooktaeder*
Koordinationszahl: 12
Packungsdichte: 74 %

$\longrightarrow$ beide Strukturen haben die gleiche Packungsdichte.

Berechnung der Packungsdichte der kubisch dichtesten Packung:

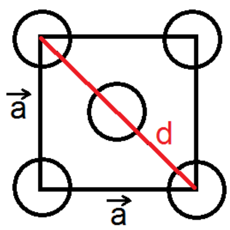

Abb. 6

Die Diagonale d (Abb.6) der Würfelfläche berechnet sich: $d = \sqrt{a^2 + a^2} = \sqrt{2}a$. Die Kugeln berühren sich in der kubisch dichtesten Packung entlang der Diagonalen, sodass gilt: $d = 4r$. Durch Gleichsetzen der beiden Gleichungen und Umstellen ergibt sich: $a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$.

Die Packungsdichte ist das Verhältnis des Volumens aller Kugeln innerhalb der Elementarzelle zum Gesamtvolumen der Elementarzelle: $\frac{n_{Kugeln} \cdot V_{Kugeln}}{V_{EZ}}$. Da die Anzahl der Atome in der Elementarzelle 4 entspricht (siehe auch Aufgabe 1c), ergibt sich folgende Formel:

$$\frac{n_{Kugeln} \cdot V_{Kugeln}}{V_{EZ}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$$

Durch Einsetzen von a kann nun die Packungsdichte berechnet werden (Zwischenschritte sind nicht angegeben): $\frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{4r}{\sqrt{2}}^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = \underline{\underline{0.74}}$

Aufgabe 3:

a) Es gibt in beiden Kugelpackungen zwei verschiedene Typen von Lücken. Sie sind von Oktaedern oder Tetraedern umgeben. Betrachtet man eine Kugeldoppelschicht bei der die Kugelmittelpunkte die Positionen A bzw. B (gemäß Abb. 1) besetzen, so befinden sich die *Tetraederlücken* (Abb. 6a) oberhalb bzw. unterhalb einer jeden Kugel einer Schicht (bei einem Schichtenpaar AB Positionen A und B), während sich die *Oktaederlücken* (Abb. 6b) in den unbesetzten Zwickeln (Positionen C) befinden.

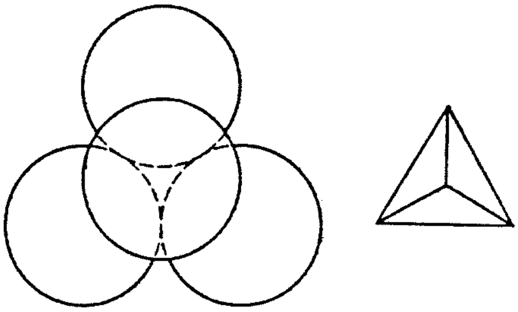

Abb. 6a

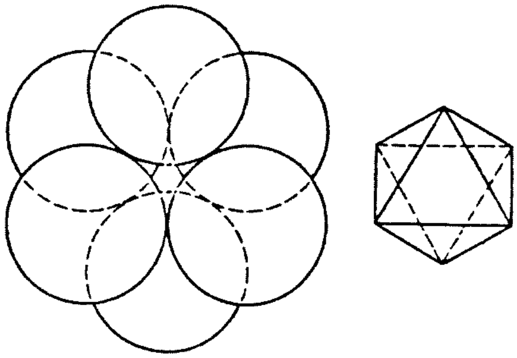

Abb. 6b

b) Kubisch dichteste Packung:
Die Elementarzelle enthält 4 Oktaeder- und 8 Tetraederlücken. Die Struktur besitzt also *eine* Oktaeder- und *zwei* Tetraederlücken pro Atom.

Hexagonal dichteste Packung:
Die Elementarzelle enthält 2 Oktaeder- und 4 Tetraederlücken. Auch hier entfallen auf ein Atom *eine* Oktaeder- und *zwei* Tetraederlücken pro Atom.

c) Koordinaten der Lückenmittelpunkte:
Kubisch dichteste Packung:

Oktaederlücken:	0, 1/2, 0 ;	1/2, 0, 0 ;	0, 0, 1/2 ;	1/2, 1/2, 1/2 .
Tetraederlücken:	1/4, 1/4, 1/4 ;	1/4, 1/4, 3/4 ;	1/4, 3/4, 1/4 ;	1/4, 3/4, 3/4 ;
	3/4, 1/4, 1/4 ;	3/4, 1/4, 3/4 ;	3/4, 3/4, 1/4 ;	3/4, 3/4, 3/4 .

Hexagonal dichteste Packung:

Oktaederlücken:	1/3, 2/3, 1/4 ;	1/3, 2/3, 3/4 .		
Tetraederlücken:	0, 0, 3/8 ;	0, 0, 5/8 ;	2/3, 1/3, 1/8 ;	2/3, 1/3, 7/8 .