Zusammenfassung 5 - Kristallstrukturen, Dichte

→ Kurz zu Aggregatzuständen: Gase, Flüssigkeiten, Festkörper

- Gase sind amorph, kompressibel und besitzen eine hohe Wärmeausdehnung. Bei Gasen sind fast keine zwischenatomaren Kräfte vorhanden. Ideale Gasgleichung: $\boxed{p \cdot V = n_m R \cdot T}$ mit $R = 8{,}31 \frac{J}{mol\,K}$ (Gaskonst.) ⇒ Es gilt: $\boxed{R = k_B \cdot N_A}$ mit Boltzmannkonst. $k_B = 1{,}38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$, Avogadrokonst. $N_A = 6{,}022 \cdot 10^{23}\,mol^{-1}$
- Flüssigkeiten nehmen ein best. Volumen ein, sind wenig komprimierbar und besitzen eine geringe Wärmeausdehnung. Durch thermische Bewegung ihrer Moleküle entsteht immer eine Gasphase über die Flüssigkeit.
- Festkörper besitzen starre Bindungen und behalten ihre Gestalt ohne Krafteinwirkung. Wenn Festkörper aus sich wiederholenden Aufbaus bestehen, dann sind sie einkristallin. Wenn sie aus verschiedenen solchen Gebieten bestehen, dann sind sie polykristallin. Wenn diese sich wiederholende Struktur ganz eingeschränkt ist, dann sind diese Festkörper amorph.

- Kristallstrukturen: Kristalle sind Festkörper, die aus sich räumlich wiederholenden Anordnungen der Atome bestehen.

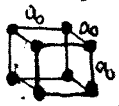
⇒ Es gibt eine Art Elementarzelle, die sich wiederholt. Den Aufbau dieser Elementarzelle zu wissen ist ganz <u>wichtig</u> (auch für Prüfung), da man damit viele Eigenschaften des entsprechenden Werkstoffs bestimmen kann:

- Zahl der nächsten Nachbarn: Suche zwei Teilchen, deren Abstand in der Elementarzelle nicht unterlegen werden kann. Dann wähle eins von diesen Teilchen und zähle die nächsten Nachbarn. Denke auch an die benachbarten Zellen.
- Abstand der nächsten Nachbarn: Dieser ist genau der oben bestimmte Abstand.
- Zahl der Gitterpunkte: Summe der in der Elementarzelle liegenden Teile der Atome. Bspw. bei einfach kubischer Zelle ist nur $\frac{1}{8}$ des Atoms in der Ecke in der Elementarzelle (geometrisch vorstellen). Es gibt 8 solche Atome in den 8 Ecken.

⇒ Zahl der Gitterpunkte $= 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$.

→ Es gibt viele verschiedene Arten der Elementarzellen. (siehe Skript, alte Prüfungen, ZÜ). Im Folgenden werden 4 ganz wichtige Typen diskutiert:

1) Einfach kubische Zelle (simple cubic = sc):



- Zahl der Gitterpunkte: Es gibt 8 Atome in den Ecken. Die Oberflächen des Würfels sind Quadern mit Winkeln 90°. Da Atome als Kugel aufgefasst werden und der Mittelpunkt der Kugel genau im Eckpunkt ist liegt $\frac{90°}{360°} = \frac{1}{4}$ dieser Kugel oberhalb und unterhalb dieser Fläche. Eigentlich genau die Hälfte der Kugel liegt oberhalb und die Hälfte unterhalb. Also in der EZ liegt nur $\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4} = \frac{1}{8}$ des Atoms in der Ecke des Würfels. ⇒ <u>Zahl der Gitterp. $= 8 \cdot \frac{1}{8} = 1$</u>
- <u>Abst. der nächst. Nachb. $= a_0$</u>
- Zahl der nächst. Nachb.: Man soll sich hier den gesamten Kristall vorstellen, also nicht nur eine EZ. Deshalb ⇒ <u>Zahl d. n. N. = 6</u>

2) Kubisch raumzentrierte Zelle (body centered cubic = bcc):

- Zahl der Gitterp.: Das in der Mitte liegende Atom ist vollständig drinnen, die anderen nur $\frac{1}{8}$ ⇒ <u>Z. d. GP. $= 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$</u>
- Abst. der nächst. Nachb.: Vorsicht! Hier nicht a_0, da die Kombination eines Eckatoms mit dem mittleren Atom kleineren Abstand erzeugt mit: <u>Abst. d. n. N. $= \frac{a_0 \sqrt{3}}{2}$</u>
- <u>Zahl der nächst. Nachb. = 8</u>

3) Kubisch flächenzentrierte Zelle (face centered cubic = fcc):

- Zahl der Gitterp.: Es gibt 8 Atome in den Ecken die nur zu $\frac{1}{8}$ drinnen sind. Die Atome an den Flächen sind zur Hälfte drinnen und davon sind 6 Stück vorhanden. ⇒ <u>Z. d. GP. $= 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$</u>
- <u>Abst. der nächst. Nachb. $= \frac{a_0 \sqrt{2}}{2}$</u> (Vorsicht! Nicht a_0)
- <u>Zahl d. nächst. Nachb. = 12</u> (umliegende EZen auch berücksichtigen!)

4) Hexagonale EZ: (siehe Skript für Aufbau)

- Zahl der GP: Es gibt 3 Teilchen, die total drinnen liegen. Es gibt 2 auf den hexagonalen Oberflächen liegende Atome, die nur zur Hälfte drinnen sind. Es gibt außerdem 12 Atome in den Ecken der beiden Sechsecke. Die Winkel bei diesen Sechsecken sind 120°. Deshalb liegen diese Eckatome zur $\frac{120°}{360°} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{6}$ drinnen ($\frac{1}{2}$, da die Hälfte oberhalb bzw. unterhalb liegt).

⇒ <u>Zahl d. GP $= 3 \cdot 1 + 2 \cdot \frac{1}{2} + 12 \cdot \frac{1}{6} = 6$</u>

- <u>Abst. d. nächst. Nachb. $= a_0$</u> (Länge einer Kante des Sechsecks)
- <u>Zahl d. n. N. = 12</u> (eigentlich abhängig von dem Abstand zwischen beiden hexagonalen Oberflächen. Wenn dieser Abstand so groß ist, dass die total drinnen liegenden Teilchen den Abstand a_0 zu den Teilchen an den hex. Oberfläche haben, dann gilt 12.)

→ Mithilfe der Größe „Anzahl der Gitterpunkte" kann man folgende weitere Größen ausrechnen:

- Stoffmenge n_m in [mol]: $n_m = \frac{\text{Anz. d. GP}}{N_A}$ mit Avogadro-Konst. $= N_A = 6{,}022 \cdot 10^{23} \frac{1}{mol}$
- Teilchendichte n_T in [cm^{-3}]: $n_T = \frac{\text{Anz. d. GP}}{V_{EZ}}$ mit V_{EZ} := Volumen der Elementarzelle
- Packungsdichte P: $P = \frac{V_{Atome}}{V_{EZ}}$ mit V_{Atome} = „Anz. d. GP" $\cdot \frac{4}{3}\pi r^3$, wobei r den Radius eines Atoms bezeichnet.

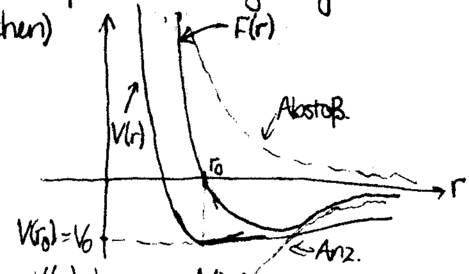
- Dichte: Es gilt Dichte: $\rho = \frac{m}{V} = \frac{m_{EZ}}{V_{EZ}}$ mit $m_{EZ} = m_{Atom} \cdot$ „Anz d. GP", wobei m_{Atom} die Masse eines Atoms ist und mit $m_{Atom} = A_r \cdot \underbrace{1{,}6605 \cdot 10^{-27} kg}_{= u \text{ (atomare Masseneinh.)}}$ aus A_r: relative Atommasse des jew. Element berechnet werden kann.

$$\Rightarrow \rho = \frac{m_{Atom} \cdot \text{„Anz. d. GP"}}{V_{EZ}}$$

oder über Packungsdichte: $\rho = \frac{m_{Atom} \cdot P}{\frac{4}{3}\pi r^3}$

- Mikroskopische Elastizität: Folgt aus den anziehenden und abstoßenden interatomaren Kräften. Die Bindungsenergie $V(r)$ kann aus anziehenden und abstoßenden Anteilen wie folgt aufgestellt werden: (r ist Abstand der Teilchen)

$$\boxed{V(r) = \underbrace{\frac{-\alpha}{r^n}}_{\text{anziehend}} + \underbrace{\frac{\beta}{r^m}}_{\text{abstoßend}}}$$ mit $m > n$, da abstoß. Kräfte sehr kurzreichweitig sind.



→ Die Kraft kann man daraus einfach durch Ableitung berechnen: $\boxed{F(r) = \frac{-dV(r)}{dr}}$

Es gibt ein sogenannter Gleichgewichtsabstand r_0, wobei gilt: • $F(r_0) = 0$ und • $V(r)$ hat ein Minimum.

→ Den Elastizitätsmodul kann man wie folgt berechnen: (siehe Skript für die Herleitung)

$$\boxed{E = \frac{-1}{r_0} \cdot \frac{dF(r)}{dr}\bigg|_{r=r_0} = n(m-n) \cdot \frac{\alpha}{r_0^{n+3}}}$$