

3.2 Einige wichtige Kristalle

3.2.1 Dichteste Kugelpackungen

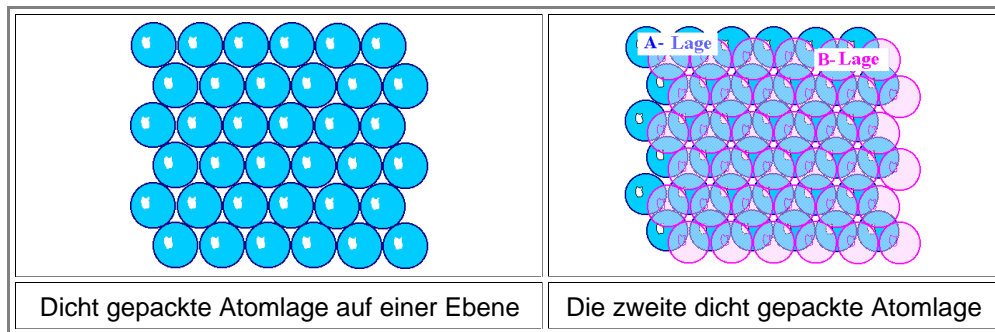
Dichteste Kugelpackungen sind uns schon mehrfach begegnet. Sie sollten automatisch auftreten, falls Atome der gleichen Sorte *ungerichtete* Bindungen eingehen. Wir haben auch schon gesehen, dass eine dichteste Kugelpackung in zwei Varianten vorkommt:

- Kubisch-flächenzentriertes Gitter mit einem Atom in der Basis.
- Hexagonales Gitter mit zwei Atomen in der Basis.

Hier schauen wir uns diese beiden Varianten schnell noch etwas genauer an.

Wir verwenden eine neue Methode, um einen dicht gepackten Kristall zu bilden: Wir arrangieren seine Bausteine (die Basis) erst mal in einer Ebene (hier also schlicht Atome derselben Sorte), und wir packen sie gleich noch so dicht als möglich.

Das sieht ohne Zweifel so aus wie unten links gezeigt.

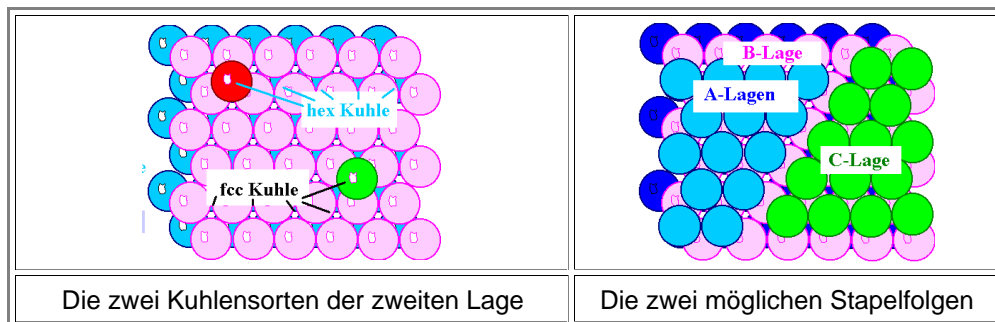


Danach legen wir einfach die nächste Atomlage auf die schon vorhandene erste Lage. Die Atome wollen möglichst dicht zusammenhocken; damit sitzen die Atome der 2. Lage ganz natürlich in den Kehlen der 1. Lage; so wie oben rechts gezeigt.

Um die Lagen auseinanderhalten zu können, nennen wir die erste Lage die "A"-Lage, die zweite Lage die "B"-Lage.

Und so weiter. Die 3. Lage kommt auch wieder "auf Kuhle".

Ja, schon – aber auf welche? Wenn wir genau hinschauen, gibt es jetzt *zwei* grundsätzlich verschiedene Kuhlensorten, wie unten links gezeigt.



Unterhalb der "hex-Kuhlen" liegt ein *Atom* der A-Lage, unterhalb der "fcc-Kuhlen" liegt eine *Kuhle* der A-Lage. Wenn wir das nicht berücksichtigen, sondern einfach an verschiedenen Stellen mal ein Atom der dritten Ebene draufpacken (wie oben rechts gezeigt) und dann weitermachen, wird es ein Problem geben – wie oben rechts gezeigt.

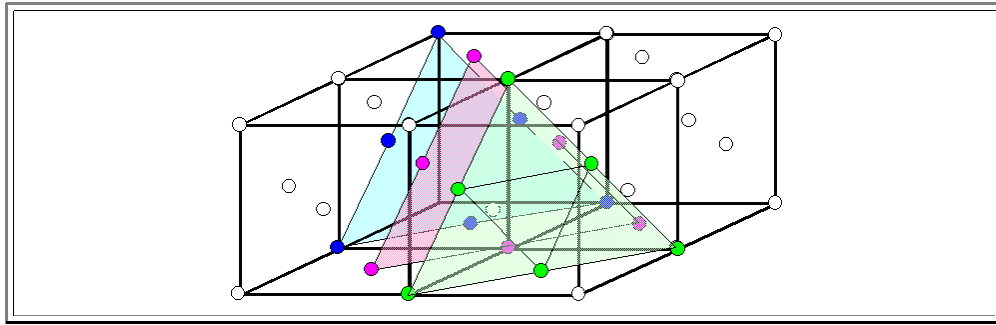
Falls wir Atomlagen, die exakt übereinandersetzen, den gleiche Buchstaben geben, haben wir die Stapelfolgen **ABA...** und **ABCAB...** realisiert, denn im Bild oben links müssen wir den grünen Atomen einen eigenen Buchstaben als Lagenkennzeichnung geben; sie liegen *nicht* über den A- oder B-Lagenatomen.

Wie geht's weiter? In Prinzip könnte man jede Stapelfolge machen, die eine Kopf-auf-Kopf-Situationen vermeidet, also zum Beispiel **ABCABACBABCABAC...**; nicht aber zum Beispiel **ABCABCCB...**. Das ist dann aber möglicherweise kein Kristall mehr, falls es "nach oben" keine Periodizität mehr gibt. (Mit unterschiedlich großen Perioden kommt sowas in der Natur aber durchaus vor, siehe z.B. die vielen **Polytypen** des **SiC** [vgl. [hier](#)]!)

Mutter Natur hat es oft (aber nicht immer) einfach und ordentlich und macht deshalb (fast) nur diese Stapelfolgen:

- **ABABABAB...** = "Hexagonal close packed" (**hcp**): Kristall gebildet aus dem hexagonalen **Gitter** mit zwei Atomen in der **Basis** (bei $(0,0,0)$ und bei $(S,S,\frac{1}{2})$).
- **ABCABCABC...** = **fcc-Gitter** mit einem Atom in der **Basis**.

- Es ist automatisch klar, dass die **Packungsdichte** (= durch Kugeln besetztes Volumen der Elementarzelle in %) in beiden Fällen exakt gleich ist - es sind **74 %**. Mehr geht nicht – weniger schon. Ein **bcc**-Kristall mit einem Atom in der Basis liegt zum Beispiel bei **68 %**.
- Wer die [Übungsaufgabe](#) schon gemacht hat, weiß, warum das so ist. Wer die Aufgabe nicht gemacht hat, schaut sich das Bild unten an und kommt selbst zum Schluss, dass die **ABCABC...**-Stapelfolge wie oben gezeichnet nichts anderes ist als ein Blick auf die **{111}**-Ebenenschar des **fcc**-Kristalls.



➤ Mit *einem* Atom in der Basis des **fcc**-Gitters, das dann auf den Ecken und Seitenmitten des Würfels sitzt, kristallisieren z.B. **Al, Ni, Cu, Pd, Ag, Pt, Au** sowie alle Edelgase. Das deckt etwas weniger als **30 %** der Elemente ab. Etwa **35 %** aller Elemente kristallisieren in einem **hcp**-Kristall, darunter beispielsweise **Mg, Re, Co, Zn, Cd, C** (als Graphit), aber auch z.B. **N** bei tiefer Temperatur.

- Das ist eigentlich klar, denn z.B. alle Metalle sollten wegen ihrer ungerichteten [Metallbindung automatisch](#) in einer dichtesten Kugelpackung kristallisieren.

➤ Zwei Fragen dürfen sich jetzt aufdrängen:

1. Warum tun das nicht *alle*? Was hindert die ca. **30 %** der Elementmetalle im Periodensystem (z. B. **K, Rb, Cs, V, Nb, Ta, Cr, Mo** und **W**) daran, in einer dichtesten Kugelpackung zu kristallisieren?
2. Nach welchen Kriterien wählt Mutter Natur zwischen den beiden dichtesten Kugelpackungen aus? Warum hat Nickel (**Ni**) die **fcc**-Struktur, das sehr ähnliche Kobalt (**Co**) aber die hexagonale?

➤ Die Antwort ist nicht einfach – wir werden später darauf zurückkommen. Es hat etwas mit **Entropie** zu tun, dem Grad der Unordnung, und damit auch etwas mit der Temperatur.

- Mutter Natur macht die Sache sogar noch spannender: Nicht ganz wenig Metalle ändern ihre Kristallstruktur mit der Temperatur. Zwei Beispiele:

- [Eisen](#) (**Fe**): Schmelzpunkt (**1535 °C**) – **1402 °C**: **bcc**;
1402 °C – **910 °C**: **fcc**;
910 °C – **273 °C**: **bcc**.
- [Kobalt](#) (**Co**): Schmelzpunkt (**1495 °C**) – **440 °C**: **fcc**;
440 °C – **273 °C**: **hcp**.

- Das ist nicht nur "interessant", sondern hat gewaltige technische Konsequenzen für die "metal bending industry"! Da uns die aber nicht so toll interessiert, gehen wir hier nicht darauf ein.

➤ Hier noch eine etwas anspruchsvollere Übung zur dichtesten Kugelpackung im **fcc**-Gitter:

Übungsaufgabe
Aufgabe 3.2-1
Fragebogen
Schnelle Fragen zu 3.2