

Name: _____ MatNr.: _____

D.1 Vergleich kovalente Bindung und metallische Bindung

1. Stellen Sie die kovalente Bindung und die metallische Bindung einander gegenüber. Arbeiten Sie Ähnlichkeiten und Gegensätze heraus und gehen Sie auf einige typische Stoffbeispiele ein.
2. Erörtern Sie dabei u.a. die Begriffe Richtungsabhängigkeit und Koordinationszahl.



D.2 Gasdichte

Berechnen Sie die Dichte von Kohlendioxidgas CO_2 bei einer Temperatur von $T = 20^\circ\text{C}$ und einem Druck von $p = 2 \text{ bar}$.

Welches Volumen steht im Mittel für ein Molekül zur Verfügung?

Für die relativen Atommassen von C und O können näherungsweise 12 und 16 angenommen werden.

Hinweis: Ideale Gasgleichung $pV = nRT$ mit n der Stoffmenge in Mol



Lösung:

Annahme eines idealen Gases:

$$pV = nRT$$

Daraus ergibt sich die Anzahl der Mole je m^3 :

$$n = \frac{2 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2 \cdot 1 \text{ m}^3}{8,31 \text{ Nm/molK} \cdot 293 \text{ K}} = 82,14 \text{ mol}$$

Dichte:

$$\rho_{\text{CO}_2} = \frac{m}{V} = \frac{n \cdot m_{\text{CO}_2}}{V} = \frac{82,14 \text{ mol} \cdot 44 \text{ g}}{1 \text{ m}^3} = 3,62 \text{ kg/m}^3$$

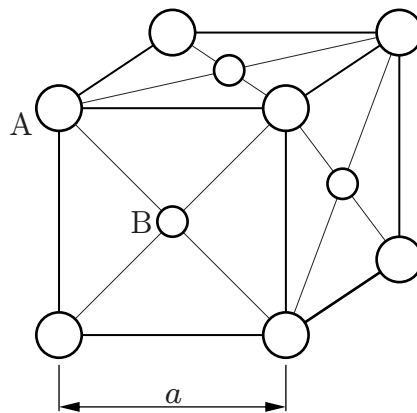
Das Volumen je Molekül ergibt sich zu:

$$V_{\text{CO}_2} = \frac{V}{n \cdot N_A} = \frac{1 \text{ m}^3}{82,14 \text{ mol} \cdot 6,022 \cdot 10^{23} / \text{mol}} = 2 \cdot 10^{-26} \text{ m}^3$$



D.3 Kubisch flächenzentriertes Gitter (fcc)

Ein kubisch flächenzentriertes Gitter ist mit zwei unterschiedlich großen Atomen A und B besetzt.



1. Wie groß ist die Packungsdichte p , wenn das Verhältnis der Atomradien $r_a/r_b = 0,8$ ist?
2. Wie erklären Sie, dass die Packungsdichte größer ist als bei den dichtesten Packungen ($p = 0,74$)?



Lösung:

Im kubisch flächenzentrierten Gitter stoßen die Atome entlang der Flächendiagonale zusammen. Daraus ergibt sich der Zusammenhang zwischen Größe der Einheitszelle und Atomradien:

$$2a^2 = (2r_A + 2r_B)^2$$

$$a = \sqrt{2}(r_A + r_B)$$

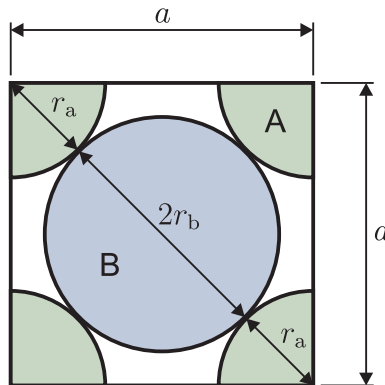


Abb. D.1: Anordnung der Atome im fcc-Gitter in einer Würfel­fläche der Einheitszelle.

Packungsdichte:

$$p = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{Zelle}}}$$

In der Einheitszelle liegen acht achteil Atome A und sechs halbe Atome B. Der Platzbedarf der Atome innerhalb der Einheitszelle ist somit:

$$V_{\text{Atome}} = \frac{8}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi r_A^3 + \frac{6}{2} \cdot \frac{4}{3} \pi r_B^3$$

$$= \frac{4\pi}{3} (r_A^3 + 3r_B^3)$$

Mit $q = r_A/r_B$ dem Verhältnis der Atomradien lassen sich die Atomradien über die Größe der Einheitszelle ausdrücken:

$$r_A = \frac{qa}{\sqrt{2}(1+q)}$$

$$r_B = \frac{a}{\sqrt{2}(1+q)}$$

Für die Packungsdichte ergibt sich damit

$$p = \frac{4\pi}{3a^3} \left(\frac{q^3 a^3}{\sqrt{2}^3 (1+q)^3} + 3 \frac{a^3}{\sqrt{2}^3 (1+q)^3} \right)$$

$$p = \frac{\sqrt{2}\pi}{3} \left(\frac{3+q^3}{(1+q)^3} \right)$$



und bei einem Radiusverhältnis von $q = 0,8$ ist die Packungsdichte $p = 0,89$. Sie liegt damit deutlich über jener der hexagonal dichtesten Packung, bei der $q = 0,74$ abgeleitet wurde. Dies wird durch die unterschiedlichen Atomradien verursacht. Bei der Ableitung der hexagonal dichtesten Packung wurden aber nur gleichgroße Atome verwendet.



D.4 Magnetisches Atommoment

Berechnen Sie aus den Atomradien und aus den Sättigungswerten der Polarisation das Atommoment in Einheiten des Bohrschen Magnetrons für a) Eisen, b) Nickel und c) Kobalt. (Skizzieren Sie die Einheitszellen.)

Tab. D.1: Werkstoffkennwerte

	I_S	Atomradius	Kristallstruktur
Eisen	2,18 Vs/m ²	1,241 · 10 ⁻¹⁰ m	bcc
Nickel	0,64 Vs/m ²	1,245 · 10 ⁻¹⁰ m	fcc
Kobalt	1,81 Vs/m ²	1,248 · 10 ⁻¹⁰ m	hcp



Lösung:

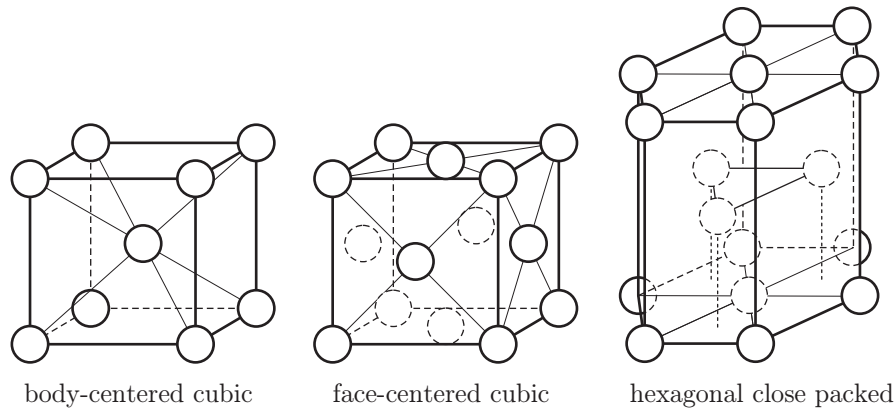


Abb. D.2: Kubisch raumzentrierte (bcc), kubisch flächenzentrierte (fcc) und hexagonal dichteste (hcp) Einheitszelle.

Die Weißsche Theorie liefert für die magnetische Polarisation I

$$I = \mu_0 m N \cdot L(\beta)$$

mit dem magnetischen Moment m des Atoms und der Teilchendichte N . Für niedrige Temperaturen wird $L(\beta) = 1$. Daraus folgt der Sättigungswert der Polarisation zu

$$I_S = \mu_0 m N.$$

Damit reduziert sich das Problem auf die Bestimmung der Teilchendichte.

1. **Eisen:** Hier liegt ein kubisch raumzentriertes Gitter vor, bei dem sich die Atome entlang der Raumdiagonale berühren.

$$4r_{\text{Fe}} = \sqrt{3}a,$$

wobei a die Seitenlänge der Einheitszelle ist. Es sind $8/8 + 1 = 2$ Atome in der Einheitszelle.

$$I_S = \mu_0 m \frac{2}{a^3}$$

$$m_{\text{Fe}} = \frac{I_S a^3}{\mu_0 2} = 2,05 \cdot 10^{-23} \text{ Am}^2$$

Mit dem Bohrschen Magneton $\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$ ergibt sich für das Eisenatom ein magnetisches Moment von $m_{\text{Fe}} = 2,21\mu_B$.

2. **Nickel:** Das kubisch flächenzentrierte Nickel besitzt $8/8 + 6/2 = 4$ Atome je Einheitszelle. Die Atome stoßen entlang der Flächendiagonale zusammen. Damit ergibt sich für die Länge der Einheitszelle $a = 2\sqrt{2}r_{\text{Ni}} = 3,52 \cdot 10^{-10} \text{ m}$.

$$m_{\text{Ni}} = \frac{I_S a^3}{\mu_0 4} = 0,60\mu_B$$



3. **Kobalt:** Beim hexagonal dichtesten Gitter handelt es sich wie beim kubisch flächenzentrierten Gitter um eine dichteste Packung. Es kann daher auch hier der kubisch flächenzentrierte Ansatz verwendet werden. $a = 2\sqrt{2}r_{\text{Co}} = 3,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$.

$$m_{\text{Co}} = \frac{I_{\text{S}} a^3}{\mu_0 4} = 1,71 \mu_{\text{B}}$$



Anhang: Konstanten

Naturkonstanten

Parameter	Wert
Absoluter Nullpunkt T_0	0 K = $-273,15\text{ }^\circ\text{C}$
Atomare Masseneinheit $1 m_u = 1 \text{ u} = 1 \text{ g}/N_A$	$1,660 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Avogadro-Konstante N_A	$6,022 \cdot 10^{23} / \text{mol}$
Boltzmann-Konstante k_B	$1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$
Elektronenmasse m_{e^-}	$9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Elementarladung e	$1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As}$
Faraday-Konstante F	96485 C/mol
Lichtgeschwindigkeit in Vakuum c	299 792 458 m/s
Elektrische Feldkonstante ϵ_0	$8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$
Magnetische Feldkonstante μ_0	$4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Vs/Am}$
Plancksches Wirkungsquantum h	$6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
Universelle Gaskonstante R	8,31 J/mol K



MatNr.: _____



MatNr.: _____



MatNr.: _____

