

Kristallehre

Aufgaben

Dr. Dobránszky János anyagainak felhasználásával



1. a) Berechnen Sie der Anzahl der Atomen in einen cm^3 Aluminium



➤ Dichte von Al: $\rho_{\text{Al}} = 2,699 \text{ (g/cm}^3\text{)}$

➤ Molare Masse von Al: $M_{\text{Al}} = 26,98 \text{ (g/mol)}$

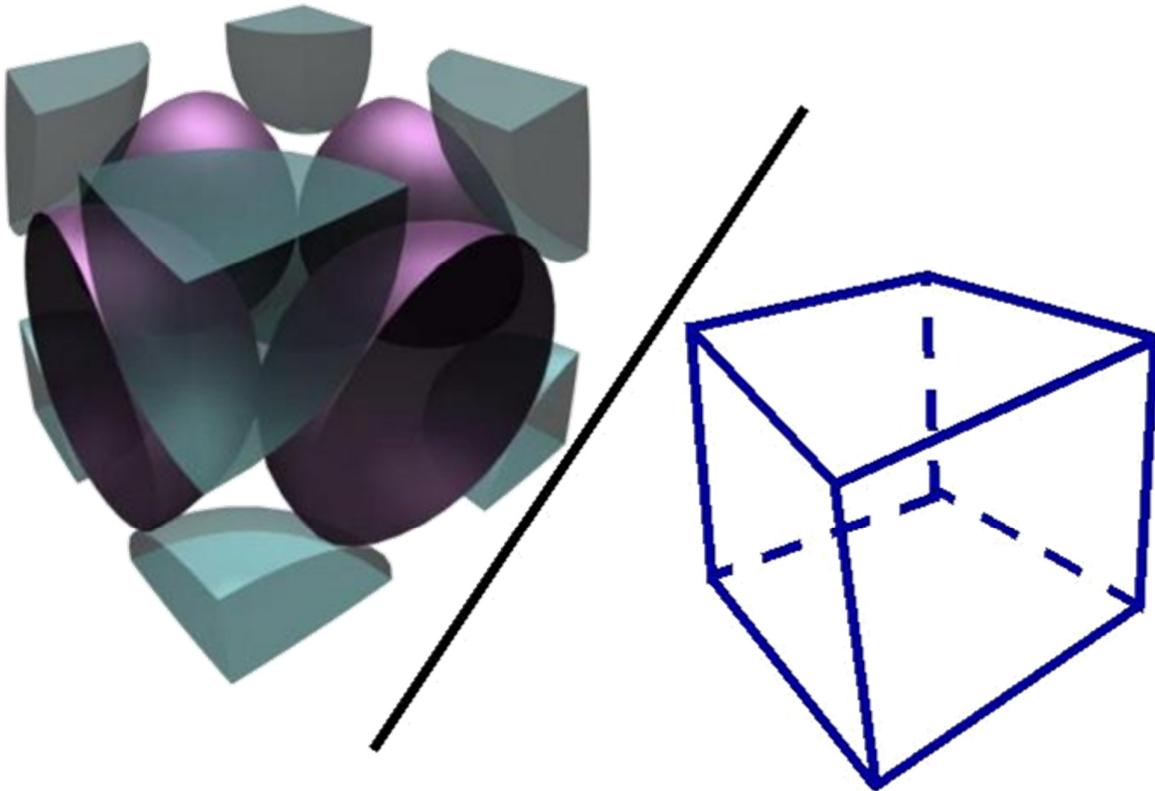
$$\boxed{? \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}}$$

$$\boxed{1 \text{ Mol} = 6,022 \times 10^{23} \text{ Atome}}$$

$$n_V = \frac{\rho_{\text{Al}} \left(\frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right)}{M_{\text{Al}} \left(\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)} N_A \left(\frac{\text{Atome}}{\text{mol}} \right) = \left(\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3} \right)$$

$$\boxed{n_V = \frac{2,699 \text{ (g/cm}^3\text{)}}{26,98 \text{ (g/mol)}} 6,022 \times 10^{23} \text{ (Atome/mol)} = 6,024 \times 10^{22} \left(\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3} \right)}$$

für das Gitter von Aluminium



Folie: 3

$$PD_{KFZ} = \frac{V_{\text{Atome}}}{V_{\text{Elementarzelle}}} = \frac{N_{\text{Atome}} \times V_{1\text{Atom}}}{V_{\text{Elementarzelle}}} = 4 \frac{d_{\text{Atom}}^3 \pi / 6}{a^3}$$

$$2d = a\sqrt{2}, \quad d = a \frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$PD_{KFZ} = 4 \frac{\left(a \frac{\sqrt{2}}{2}\right)^3 \pi / 6}{a^3} = 4 \frac{a^3 2\sqrt{2} \pi / 6}{8 a^3} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0,74 \Rightarrow 74\%$$

Folie: 4

2. a) Berechnen Sie der Anzahl der Atomen in einen cm^3 Chrom

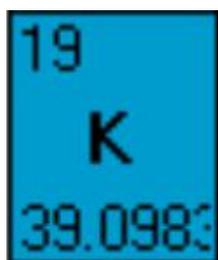
2. b) Berechnen Sie die Packungsdichte für das Gitter von Chrom

- Dichte von Cr: $\rho_{\text{Cr}} = 7,14 \text{ g/cm}^3$
- Molare Masse von Cr: $M_{\text{Cr}} = 51,996 \text{ g/mol}$
- Atomradius von Cr: $R_{\text{Cr}} = 0,125 \text{ nm}$



Folie: 5

3. Wie groß ist die Dichte von Kalium wenn 1 cm^3 Material $1,32 \times 10^{22}$ Atome enthält ?



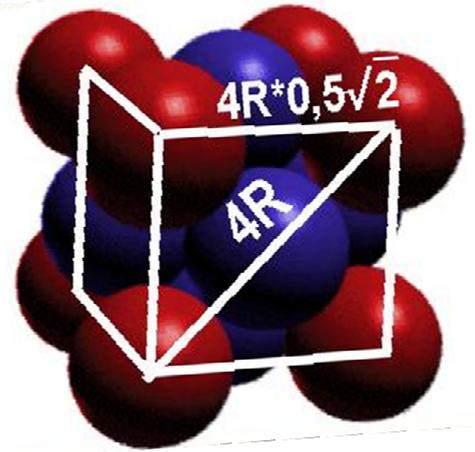
$$\rho = N_V \left(\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3} \right) \times \frac{M_K \left(\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)}{N_A \left(\frac{\text{Atome}}{\text{mol}} \right)} = \left(\frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right)$$

- Molare Masse von K: $M_K = 39,1 \text{ g/mol}$

$$1,32 \times 10^{22} \left(\frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3} \right) \times \frac{39,1}{6,022 \times 10^{23}} \left(\frac{\text{g}}{\text{Atome}} \right) = 0,86 \left(\frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right)$$

Folie: 6

- Mol.masse von Pb: $M_{Pb} = 207,2 \text{ g/mol}$
- Atomradius von Pb: $R_{Pb} = 0,175 \text{ nm}$
- in einer Elementarzelle 4 Atome



Masse der Atome in der EZ,

$$m_{EZ} = 4 (\text{Atome/EZ}) \times 207,2 \text{ (g/mol)} / 6,022 \times 10^{23} \text{ (Atome/mol)} = 1,38 \times 10^{-21} \text{ (g/EZ)}$$

Volumen der EZ, $\sqrt{2}a = 2d$

$$V_{EZ} = a = (2 \times 2 \times 1,75 \times 10^{-8} / \sqrt{2})^3 = 1,21 \times 10^{-22} \text{ (cm}^3\text{)}$$

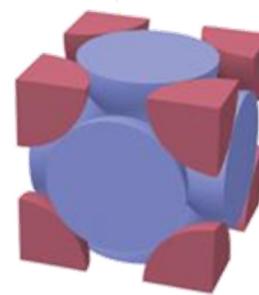
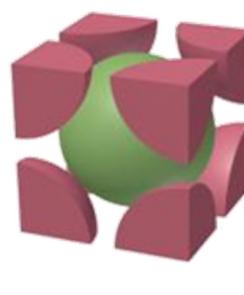
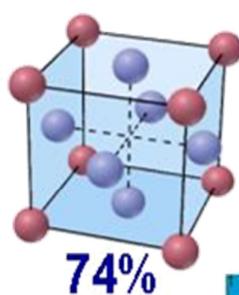
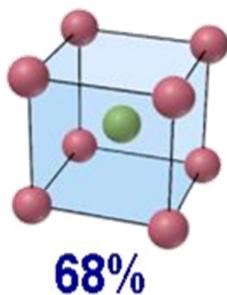
$$\Rightarrow \rho_{PB} = m_{EZ} / V_{EZ} = 11,4 \text{ (g/cm}^3\text{)}$$

Folie: 7

5. Berechnen Sie die spezifische Volumenänderung bei der Umwandlung von KFZ Austenit

ins KRZ Ferrit!
Gitterparameters:

$$a_{\alpha} = 0,2861 \text{ nm} \quad a_{\gamma} = 0,359 \text{ nm}$$



Molare Masse von

Fe:

$$M_{Fe} = 55,85 \text{ (g/mol)}$$

I																II									
1																2									
H																He									
3																4									
Li																Be									
5																6									
7																8									
8																9									
9																10									
11																12									
12																13									
13																14									
14																15									
15																16									
16																17									
17																18									
18																19									
19																20									
20																21									
21																22									
22																23									
23																24									
24																25									
25																26									
26																27									
27																28									
28																29									
29																30									
30																31									
31																32									
32																33									
33																34									
34																35									
35																36									
36																37									
37																38									
38																39									
39																40									
40																41									
41																42									
42																43									
43																44									
44																45									
45																46									
46																47									
47																48									
48																49									
49																50									
50																51									
51																52									
52																53									
53																54									
54																55									
55																56									
56																57									
57																58									
58																59									
59																60									
60																61									
61																62									
62																63									
63																64									
64																65									
65																66									
66																67									
67																68									
68																69									
69																70									
70																71									
71																72									
72																73									
73																74									
74																75									
75																76									
76																77									
77																78									
78																79									
79																80									
80																81									
81																82									
82																83									
83																84									
84																85									
85																86									
86																87									
87																88									
88																89									
89																90									
90																91									
91																92									
92																93									
93																94									
94																95									
95																96									
96																97									
97																98									
98																99									
99																100									
100																101									
101																102									
102																103									
103																104									
104																105									
105																106									
106																107									
107																108									
108																109									
109																110									
110																111									
111																112									
112																113									
113																114									
114																115									
115																116									
116																117									
117																118									
118																119									
119																120									
120																121									
121																122									
122																123									
123																124									
124																125									
125																126									
126																127									
127																128									
128																129									
129																130									
130																131									
131																132									
132																133									
133																134									
134																135									
135																136									
136																137									
137																138									
138																139									
139																140									
140																141									
141																142									
142																143									
143																144									
144																145									
145																146									
146																147									
147																148									
148																149									
149																150									
150																151									
151																152									
152																153									
153																154									
154																155									
155																156									
156																157									
157																158									
158																159									
159																160									
160																161									
161																162									
162																163									
163																164									
164																165									
165																166									
166																167									
167																168									
168																169									
169																170									
170																171									
171																172									
172																173									
173																174									
174																175									
175																176									
176																177									
177																178									
178																179									
179																180									
180																181									
181																182									
182																183									
183																184									
184																185									
185																186									
186																187									
187																188									
188																189									
189																190									
190																191									
191																192									
192																193									
193																194									
194																195									
195																196									
196																197									
197																198									
198																199									
199																200									
200																201									
201																202									
202																203									
203																204									
204																205									
205																206									
206																207									
207																208									
208																209									
209																210									
210																211									
211																212									
212																213									
213																214									
214																215									
215																216									
216																217									
217																218									
218																219									
219																220									
220																221									
221																222									
222																223									
223																224									
224																225									
225																226									
226																227									
227																228									
228																229									
229																230									
230																231									
231																232									
232																233									
233																234									
234																235									
235																236									
236																237									
237																238									
238																239									
239																240									
240																241									
241																242									
242																243									
243																244									
244																245									
245																246									
246																247									
247																248									
248																249									
249																250									
250																251									
251																252									
252																253									
253																254									
254																255									
255																256									
256																257									
257																258									
258																259									
259																260									
260																261									
261																262									
262																263									
263																264									
264																265									
265																266									
266																267									
267																268									
268																269									
269																270									
270																271									
271																272									
272																273									
273																274									
274																275									
275																276									
276																277									
277																278									
278																279									
279																280									
280																281									
281																282									
282																283									
283																284									
284																285									
285																286									
286																287									
287																288									
288																289									
289																290									
290																291									
291																292									
292																293									
293																294									
294																295									
295																296									
296																297									
297																298									
298																299									
299																300									

Folie: 8

Umwandlung von KFZ Austenit ins KRZ Ferrit!

- Was ändert sich nicht?
 - Anzahl der Atome (N)
 - Durchmesser der Atome (d)
- Was ändert sich?
 - Anzahl der Elementarzellen (n_{KFZ} und n_{KRZ})
 - Volumen der Elementarzellen (a^3_{KFZ} und a^3_{KRZ})

Folie: 9

Umwandlung von KFZ Austenit ins KRZ Ferrit!

$$\Delta V = \frac{V_{KRZ} - V_{KFZ}}{V_{KFZ}}$$

$$V_{KFZ} = n_{KFZ} \cdot V_{EZ_{KFZ}} = n_{KFZ} \cdot a^3_{KFZ}$$

$$V_{KRZ} = n_{KRZ} \cdot V_{EZ_{KRZ}} = n_{KRZ} \cdot a^3_{KRZ}$$

$$a_{KFZ} = \frac{2}{\sqrt{2}} d \qquad a_{KRZ} = \frac{2}{\sqrt{3}} d$$

$$\begin{aligned} \Delta V &= \frac{\frac{N}{2} \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{3}} d\right)^3 - \frac{N}{4} \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{2}} d\right)^3}{\frac{N}{4} \cdot \left(\frac{2}{\sqrt{2}} d\right)^3} = \frac{\frac{N}{2} \cdot \frac{8d^3}{3\sqrt{3}} - \frac{N}{4} \cdot \frac{8d^3}{2\sqrt{2}}}{\frac{N}{4} \cdot \frac{8d^3}{2\sqrt{2}}} = \frac{\frac{4}{3\sqrt{3}} - \frac{2}{2\sqrt{2}}}{\frac{2}{2\sqrt{2}}} = \\ &= \frac{4}{3\sqrt{3}} \cdot \frac{2\sqrt{2}}{2} - 1 = \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} - 1 = 0.0886 \Rightarrow 8.9\% \end{aligned}$$

Folie: 10

Umwandlung von KFZ Austenit ins KRZ Ferrit!

- Gitterparameter: $a_\alpha = 0,2861 \text{ nm}$ $a_\gamma = 0,359 \text{ nm}$
- $N_{\text{Austenit}(\gamma)} = 4$
- $N_{\text{Ferrit}(\alpha)} = 2$

$$\rho_{\text{Zelle}} = \frac{N \cdot M_{FE}}{a^3} \text{Elementarvolumen } V = \frac{1}{\rho}$$

$$\Delta V_{\text{rel.}} = \frac{V_{\text{KRZ}} - V_{\text{KFZ}}}{V_{\text{KFZ}}}$$

Folie: 11

5. Berechnen Sie die relative Änderung der spezifische Volumen bei der Umwandlung von KFZ Austenit ins KRZ Ferrit!

- Gitterparameter: $a_\alpha = 0,2861 \text{ (nm)}$ $a_\gamma = 0,359 \text{ (nm)}$
- $N_{\text{Austenit}(\gamma)} = 4$ $N_{\text{Ferrit}(\alpha)} = 2$

$$\text{Dichte der KFZ Zelle: } \frac{4 \times 55,85 / 6,022 \times 10^{23}}{(3,59 \times 10^{-8})^3} = 8,018 \text{ g / cm}^3$$

$$\rightarrow 0,124721 \text{ cm}^3 / \text{g}$$

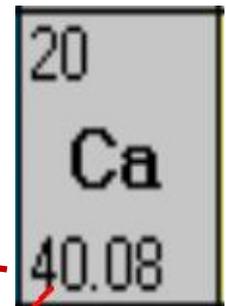
$$\text{Dichte der KRZ Zelle: } \frac{2 \times 55,85 / 6,022 \times 10^{23}}{(2,861 \times 10^{-8})^3} = 7,921 \text{ g / cm}^3$$

$$\rightarrow 0,126253 \text{ cm}^3 / \text{g}$$

$$\frac{0,126253 \text{ (cm}^3 / \text{g)} - 0,124721 \text{ (cm}^3 / \text{g)}}{0,124721 \text{ (cm}^3 / \text{g)}} = 0,012283 = +1,2\%$$

Folie: 12

- Gitterparameter von Kalzium: $a_{Ca} = 0,557 \text{ nm}$
- Dichte: $\rho_{Ca} = 1,55 \text{ g/cm}^3$



Dichte = Masse / Volumen

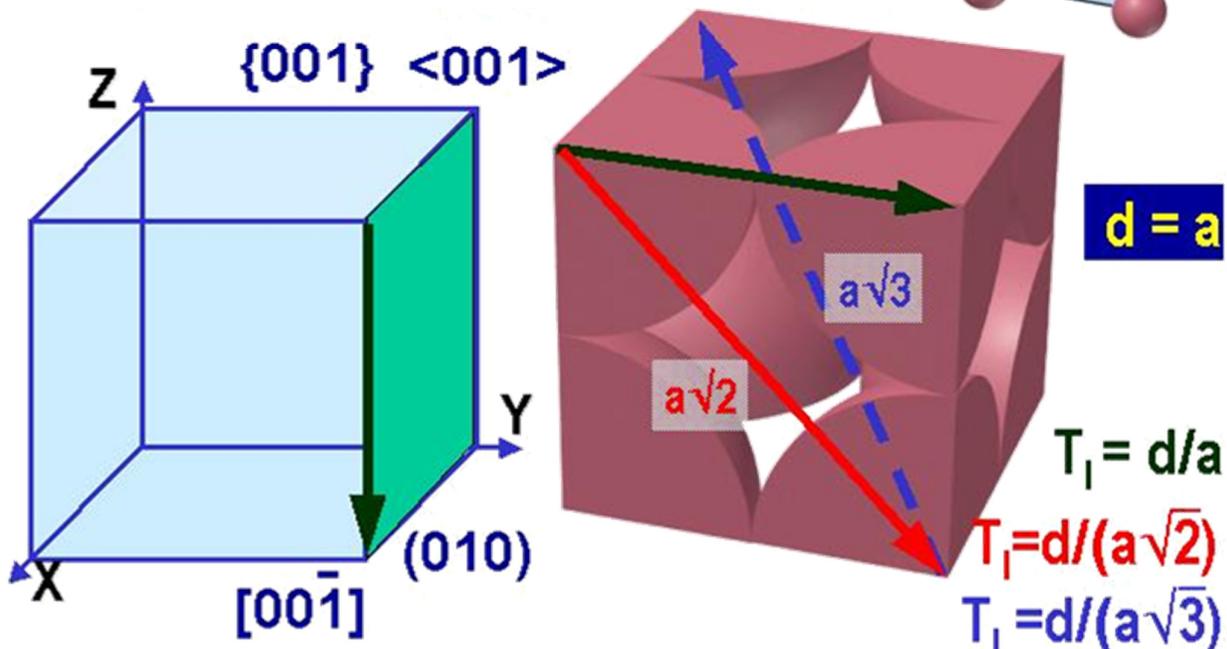
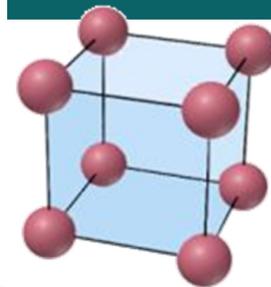
$$1,55 \left(\frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right) = \frac{n(\text{Atome}) \times 40,08 \left(\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right) / 6,022 \times 10^{23} \left(\frac{\text{Atome}}{\text{mol}} \right)}{(5,57 \times 10^{-8})^3 (\text{cm}^3)} \Rightarrow n = 4$$

6b) Was für kubisches Gitter hat Ca: PK, **KFZ**, KRZ ?

Folie: 13

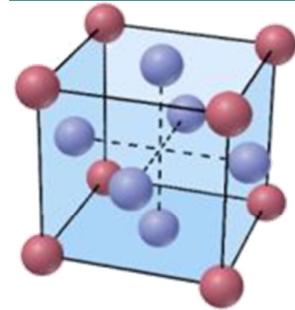


- Zeichnen Sie die Elementarzelle fürs Po!
- Zeichnen Sie in der Elementarzelle eine dichtest gepackte Ebene!
- Geben Sie die Millersche Indizes für diese Ebene an!
- Rechnen Sie die Liniendichte für die **Kannte**, **Flächendiagonale** und **Raumdiagonale** der Zelle aus!

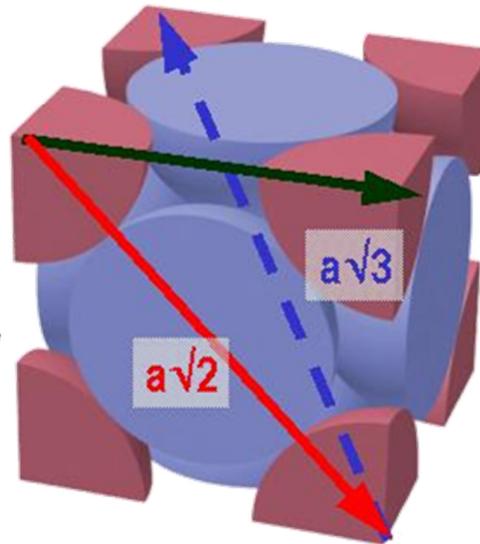
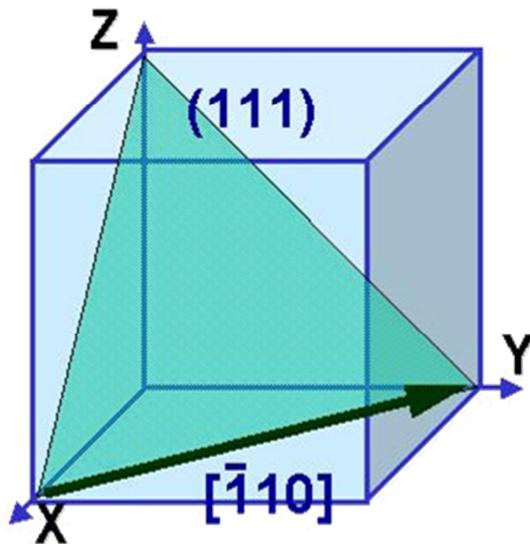


Folie: 14

8. a) Zeichnen Sie die Elementarzelle fürs Austenit!
 b) Zeichnen Sie in der Elementarzelle eine dichtest gepackte Ebene!
 c) Geben Sie die Millersche Indizes für diese Ebene an!
 d) Rechnen Sie die Liniendichte für die Kante, Flächendiagonale und Raumdiagonale der Zelle aus!

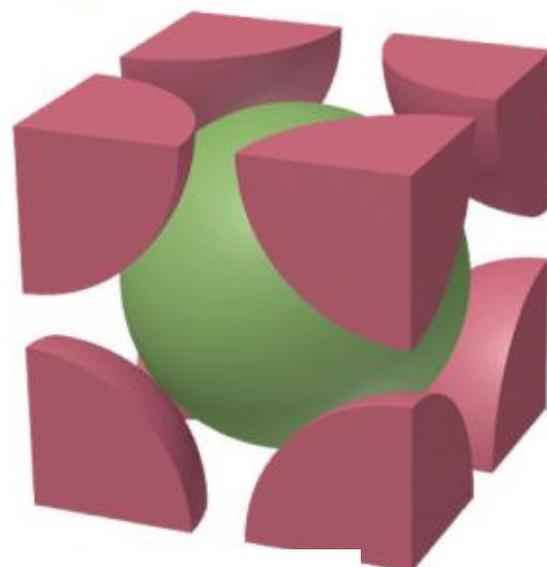
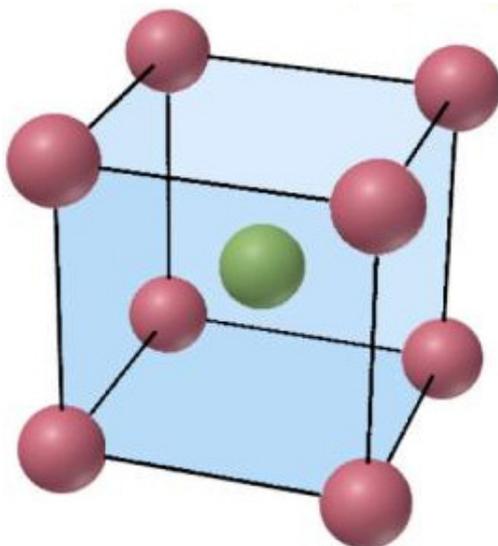


{111} <110>

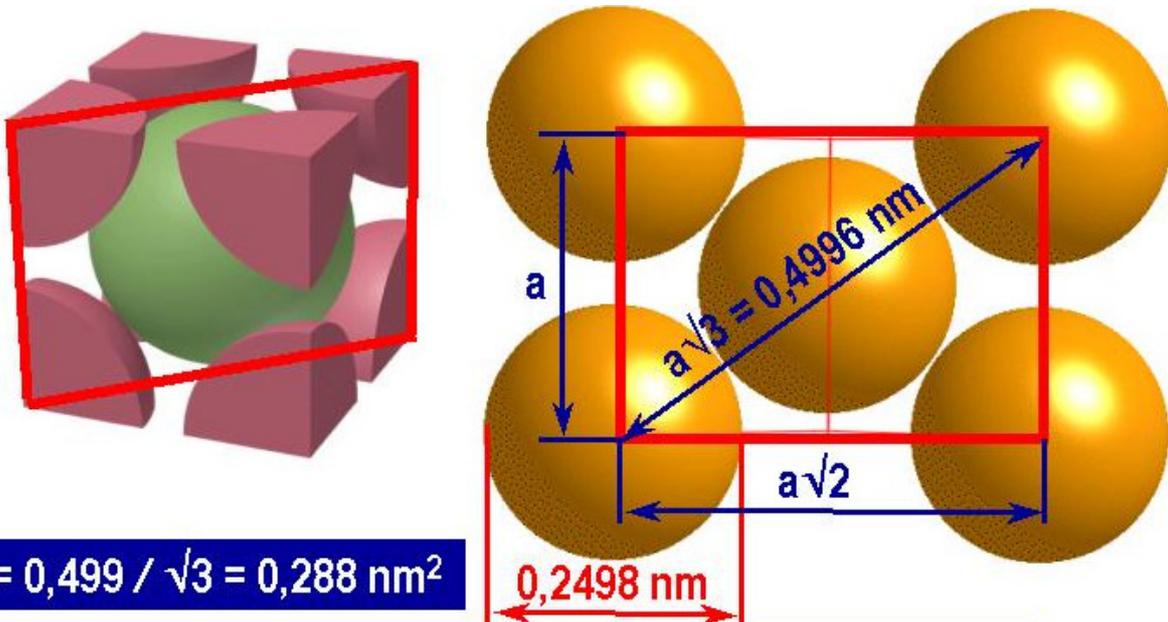


$d \neq a$
 $d = \frac{1}{2} a \sqrt{2}$
 d/a
 $\frac{2d}{(a\sqrt{2})}$
 $\frac{d}{(a\sqrt{3})}$

9. a) Zeichnen Sie die Elementarzelle fürs Ferrit!
 b) Zeichnen Sie in der Elementarzelle eine dichtest gepackte Ebene!
 c) Geben Sie die Millersche Indizes für diese Ebene an!
 d) Rechnen Sie die Liniendichte für die Kante, Flächendiagonale und Raumdiagonale der Zelle aus!



10. Rechnen Sie die Oberflächenatomdichte ρ_{Cr} von Cr mit KRZ Gitter parallel mit der dichtest gepackte Ebene aus! $R_{Cr}=0,1249$ nm



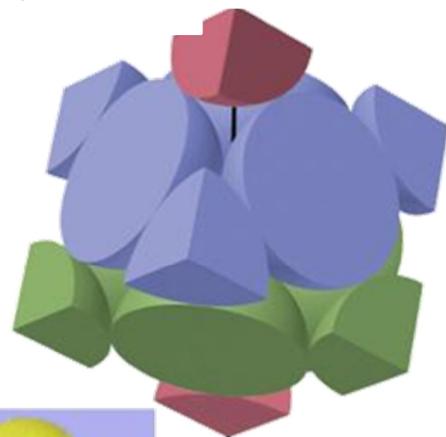
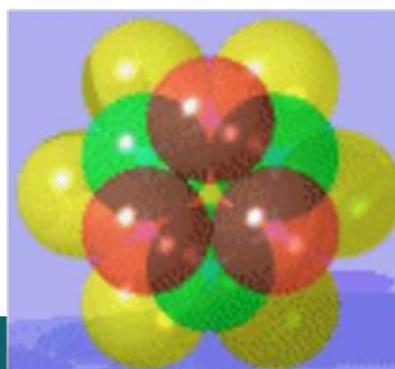
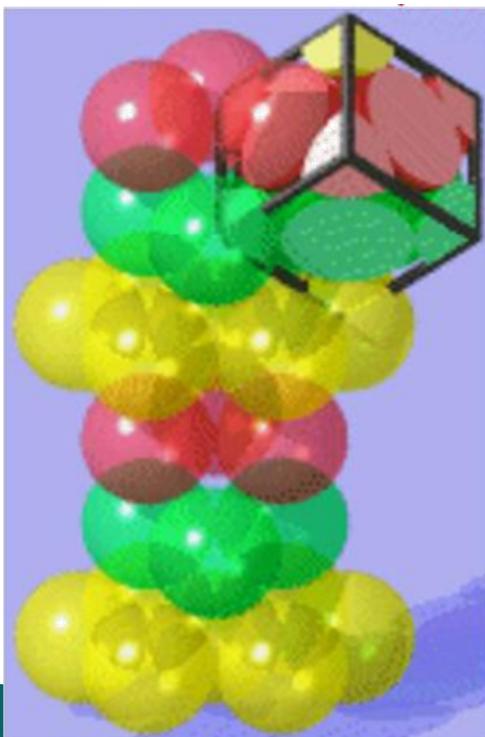
$$a = 0,499 / \sqrt{3} = 0,288 \text{ nm}^2$$

$$\rho_s = 2 \text{ atom} / [(0,288 \text{ nm})^2 \sqrt{2}] = 1,7 \times 10^{15} \text{ atom/cm}^2$$

Folie: 17

11. Berechnen Sie der Distanz von dichtest gepackten benachbarten Ebenen fürs Ferrit und Austenit

➤ Gitterparameter: $a_\alpha=0,2861$ nm $a_\gamma=0,359$ nm



Folie: 18

➤ Gitterparameter: $a_\alpha=0,2861$ nm $a_\gamma=0,359$ nm

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

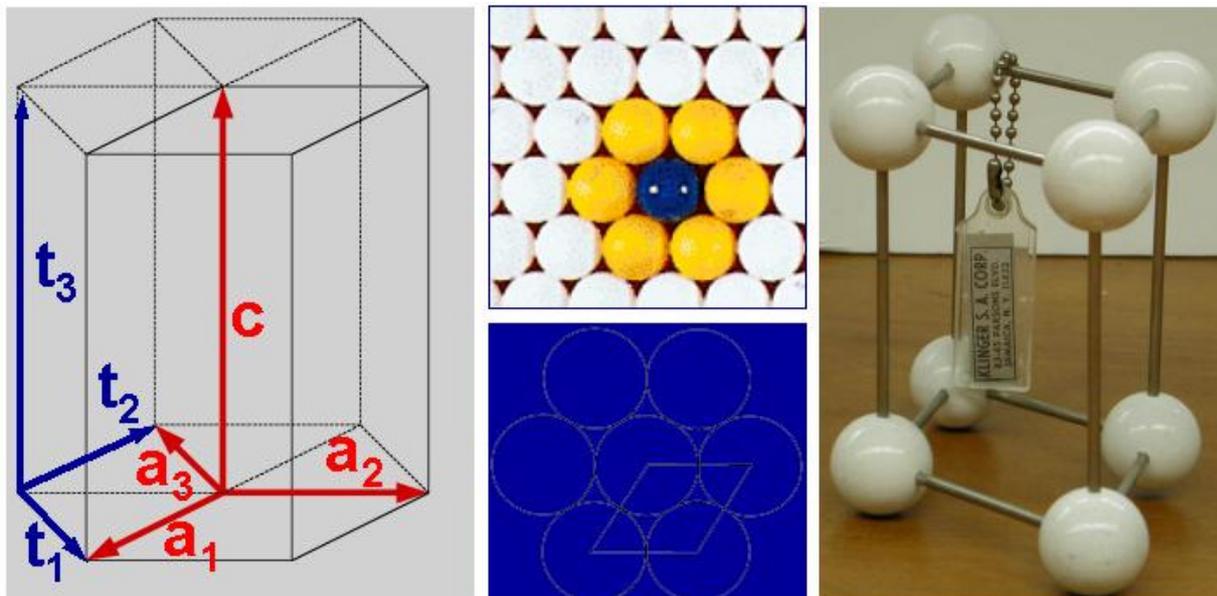
{110}

$$d_{\text{Ferrit}} = \frac{0,2861}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} = 0,2023 \text{ nm}$$

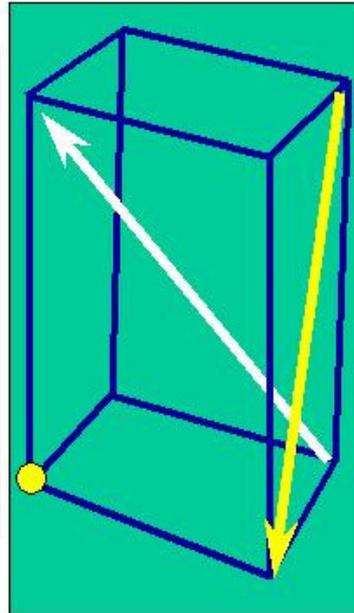
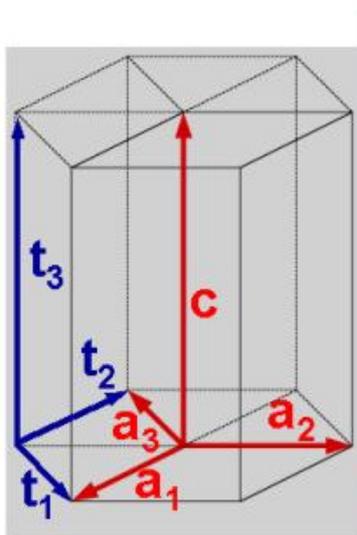
{111}

$$d_{\text{Austenit}} = \frac{0,359}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}} = 0,2072 \text{ nm}$$

12. Zeichnen Sie die Elementarzelle der einfachen Hexagonalen Gitter, geben Sie die Millersche Indizes einer Flächendiagonale und einer Raumdiagonale mit drei und vier Inizies an!



12. Zeichnen Sie die Elementarzelle der einfachen Hexagonalen Gitter, geben Sie die Millersche Indizes einer Flächendiagonale und einer Raumdiagonale mit drei und vier Inizies an!



$$[uvw] = [UVWT]$$

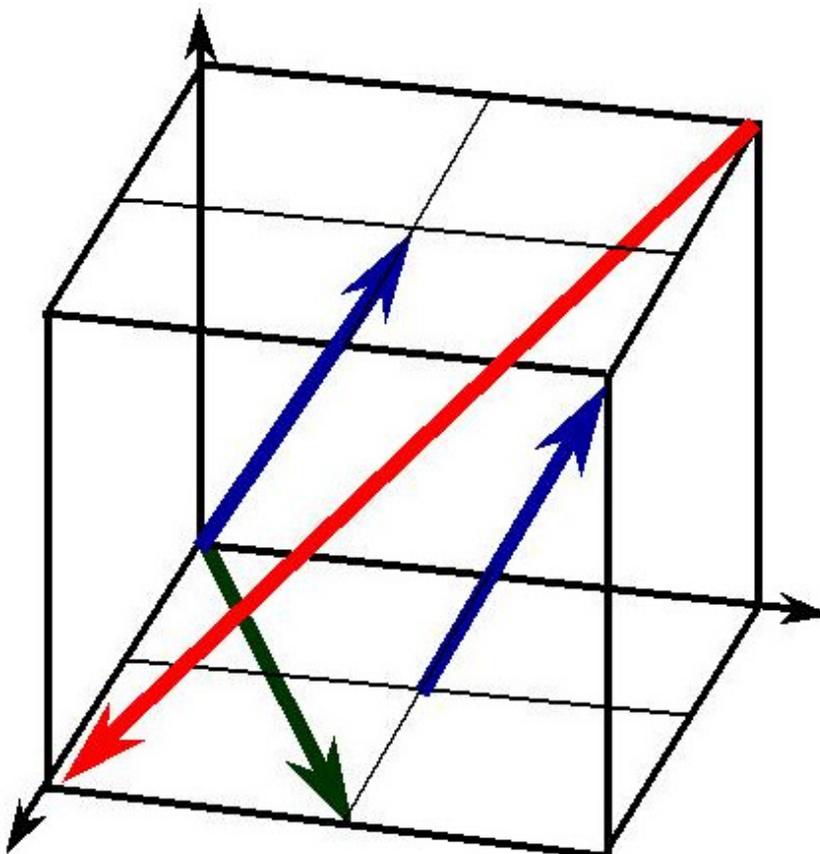
$$u = U - T, \quad U = (2u - v) / 3$$

$$v = V - T, \quad V = (2v - u) / 3$$

$$w = W, \quad T = -(u + v)$$

$$[0\bar{1}\bar{1}] = \frac{a}{3} [1\bar{2}\bar{3}\bar{3}]$$

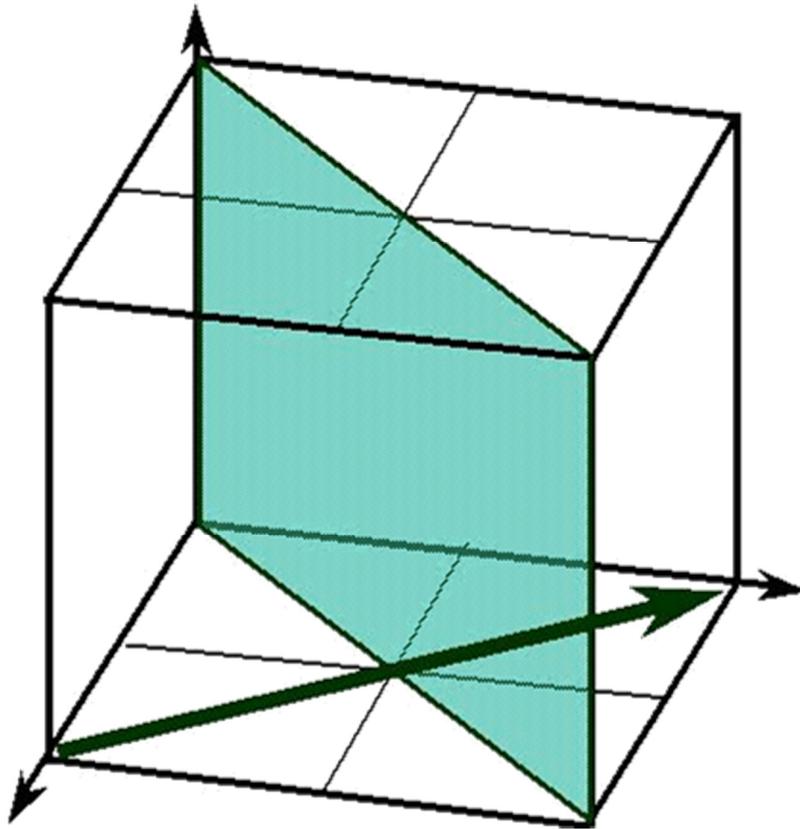
13. Zeichnen Sie im Würfel die folgende Vektoren:



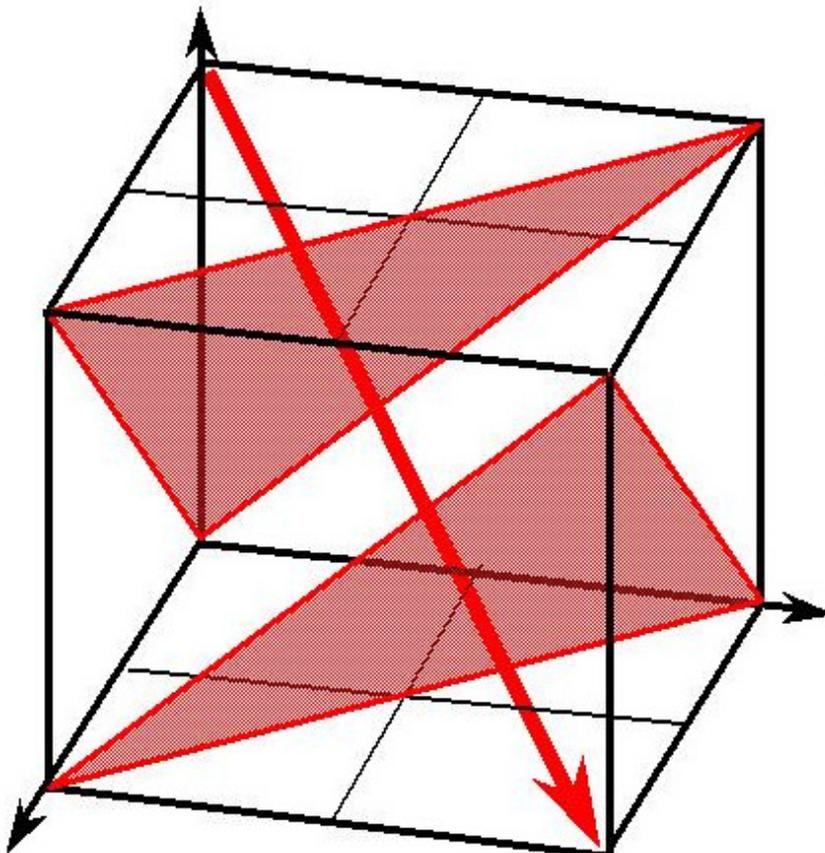
$$[1\bar{1}\bar{1}]$$

$$[210]$$

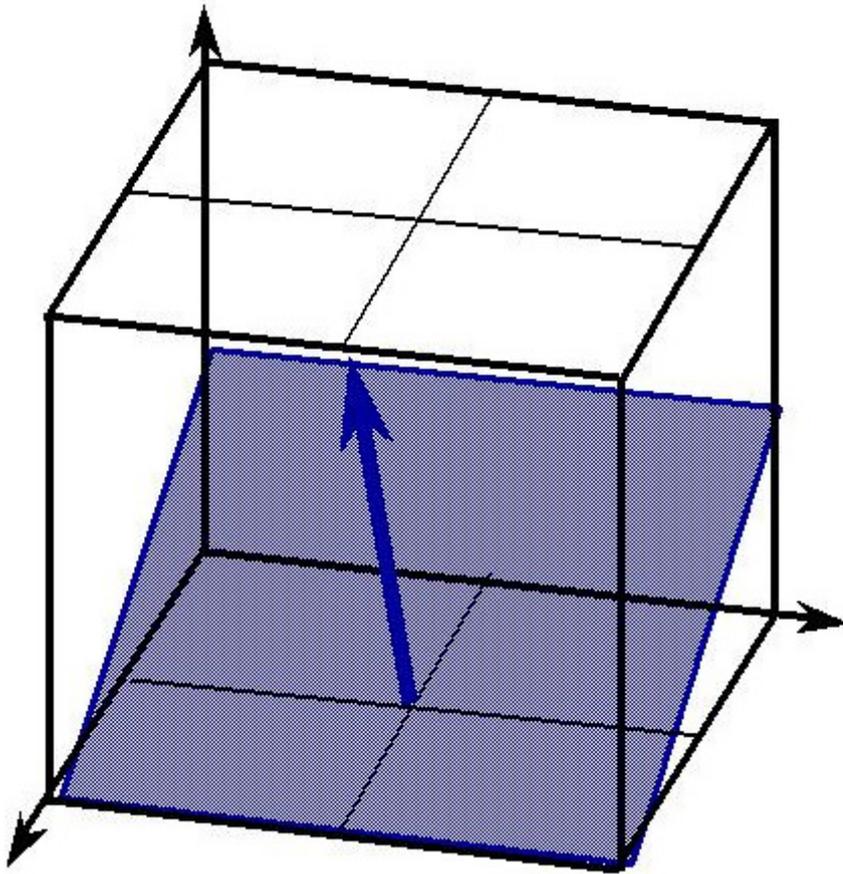
$$[112]$$



$$\left(\bar{1} 1 0 \right)$$

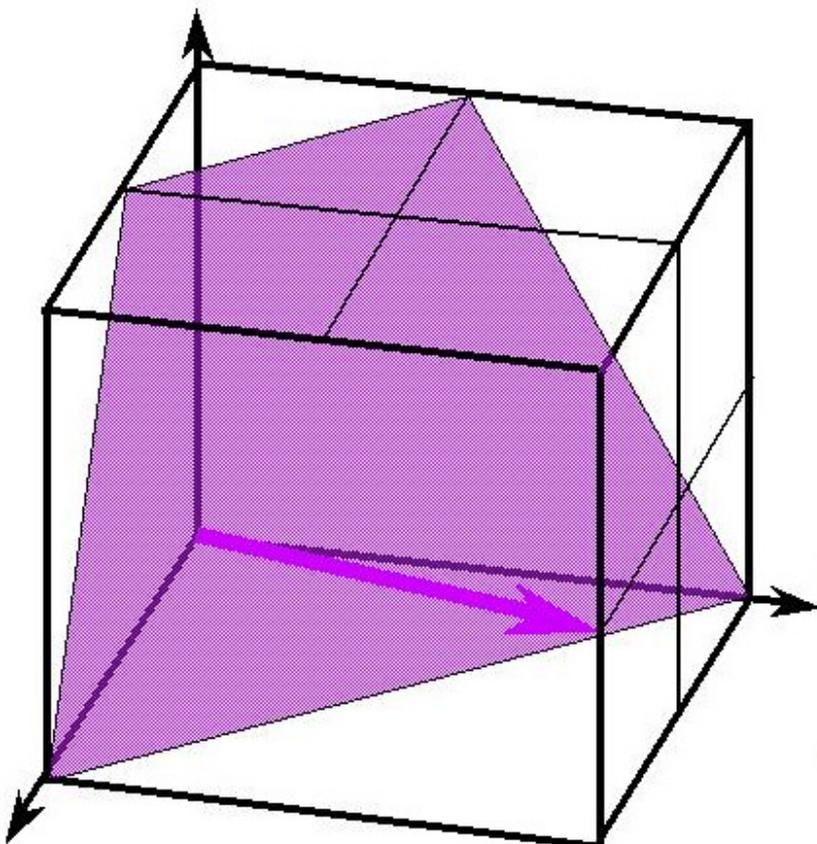


$$\left(1 1 \bar{1} \right)$$



(102)

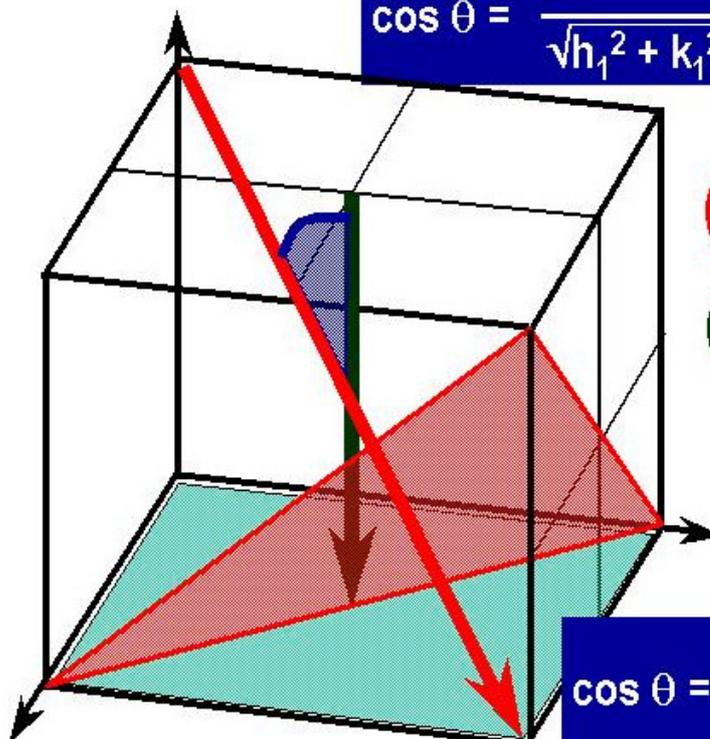
Folie: 25



(221)

Folie: 26

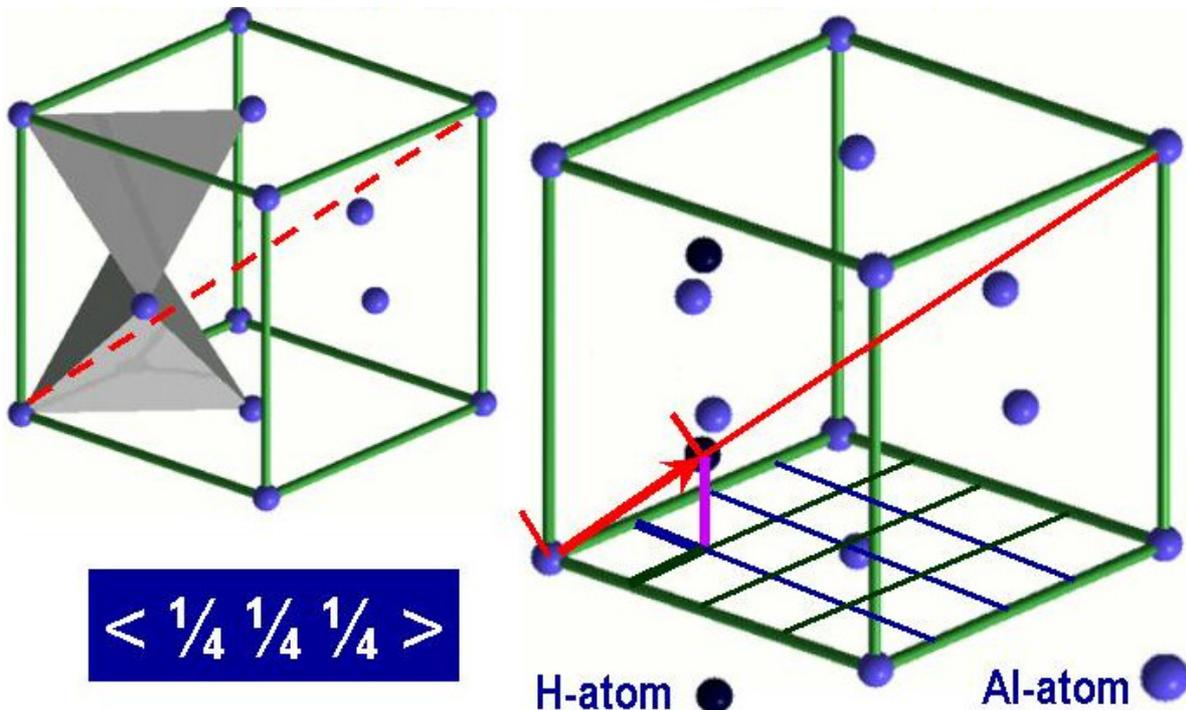
$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} + \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$



$(11\bar{1})$
 $(00\bar{1})$

$$\cos \theta = \frac{0 + 0 + 1}{\sqrt{1+1+1} + \sqrt{0+0+1}} = 0,5$$

➤ Atomradien $R_H=0,046$ nm und $R_{Al}=0,143$ nm

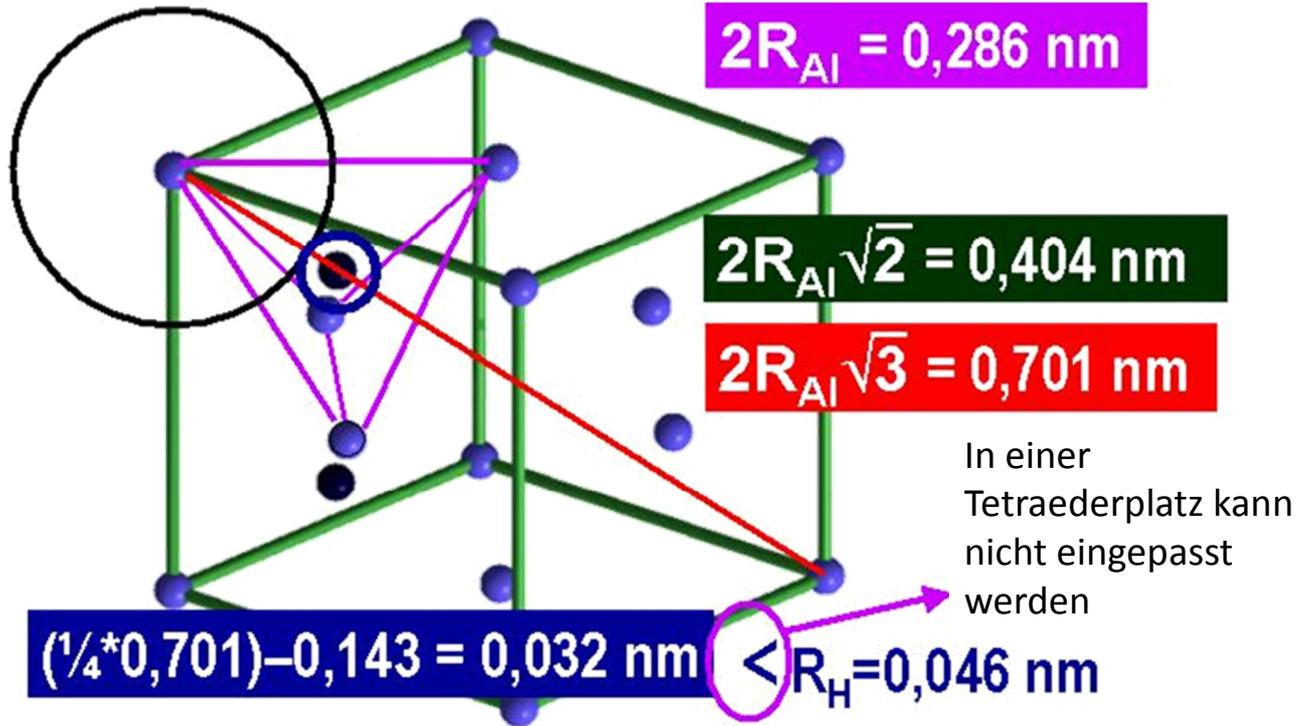


$$\langle \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4} \rangle$$

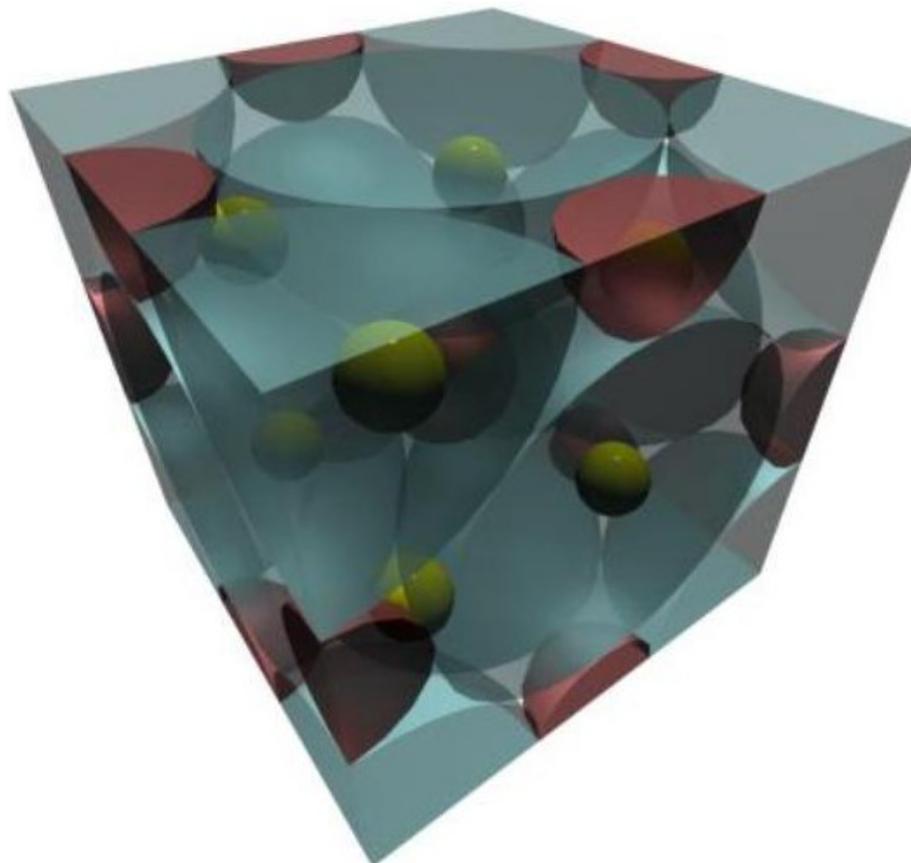
H-atom
Al-atom

19. Berechnen Sie, ob ein H-Atom ins Gitter des Al in einer Tetraederplatz oder Oktaederplatz passt?

➤ Atomradien $R_H=0,046$ nm und $R_{Al}=0,143$ nm



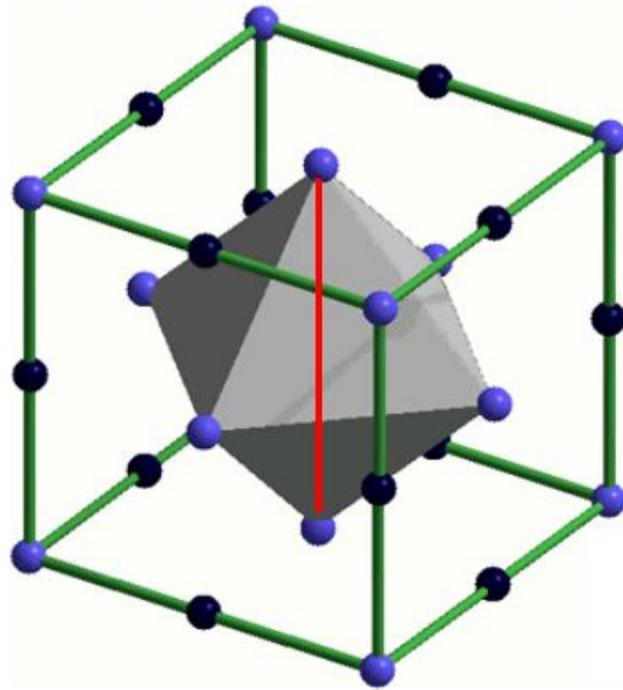
Folie: 29



Folie: 30

19. Berechnen Sie, ob ein H-Atom ins Gitter des Al in einer Tetraederplatz oder Oktaederplatz passt?

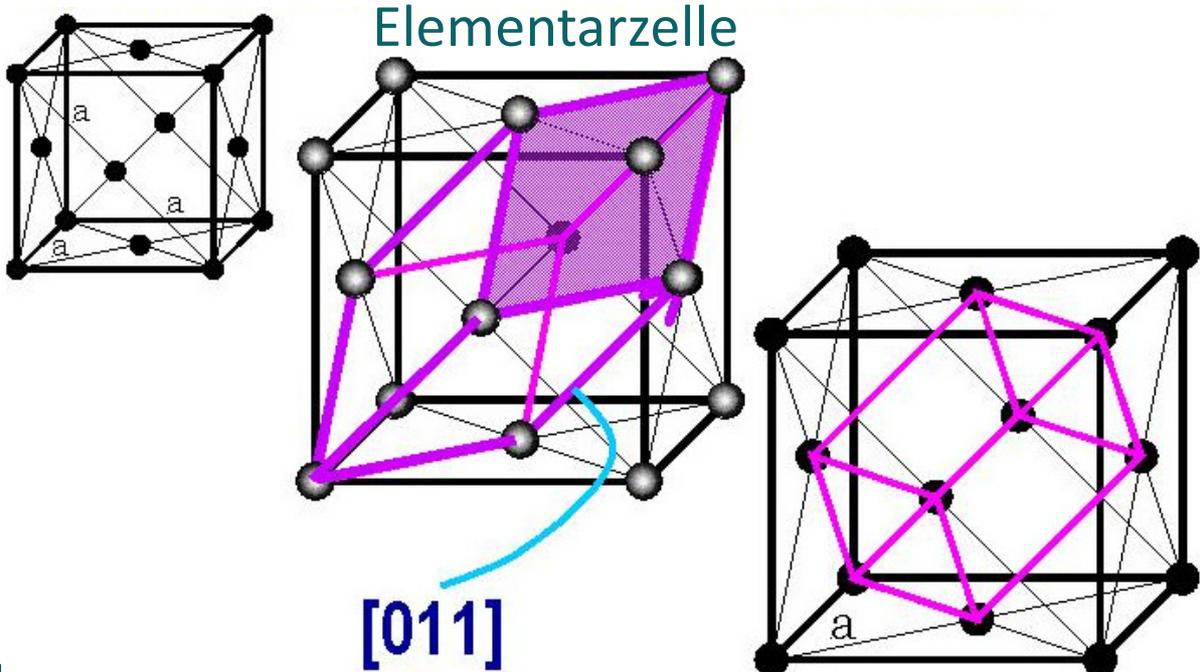
➤ Atomradien $R_H=0,046$ nm und $R_{Al}=0,143$ nm



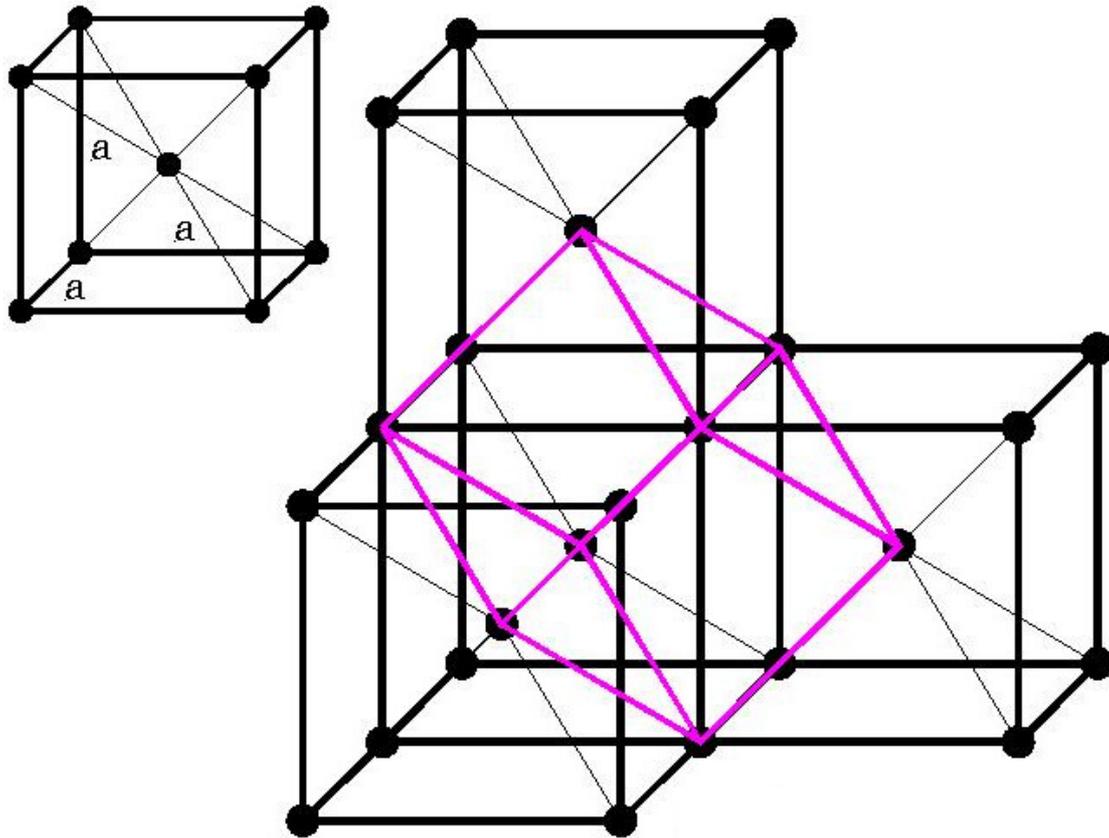
$\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle$
 $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$

Folie: 31

20. Zeichnen Sie eine Möglichkeit der Primitive Zelle von KFZ Gitter, geben Sie die Millersche Indizes einer Kante dieser Zelle in der Koordinatensystem der Elementarzelle



Folie: 32



Danke für die Aufmerksamkeit!