Berechnung der Dichte von Kugelpackungen

Gesucht ist die Kantenlänge a der Einheitszelle, damit man das Zellvolumen ("das Volumen vom Würfel") berechnen kann:

$V = a \cdot a \cdot a = a^3$

Das Zellvolumen wird dann mit dem Raum, der durch die Kugeln ausgefüllt wird, verglichen.

Berechnung der Kantenlängen für die verschieden Zellen

einfach kubisch

es wird davon ausgegangen, dass sich die Kugeln berühren. Jede Kugel hat den Radius r, damit beträgt die Kantenlänge a einfach 2 r.

kubisch innenzentriert

die Raumdiagonale eines Würfels beträgt: $D = a\sqrt{3}$

auf dieser Diagonalen sitzen 2 halbe Kugeln sowie eine ganze Kugel. Damit hat die Diagonale die Länge 4 r.

$4r = a\sqrt{3}$

nach a auflösen: $a = 4r / \sqrt{3}$

kubisch flächenzentriert

Die Flächendiagonale eines Würfels beträgt: $F = a\sqrt{2}$

auf dieser Diagonalen sitzen 2 halbe Kugeln sowie eine ganze Kugel. Damit hat die Diagonale die Länge 4 r.

$4r = a\sqrt{2}$

nach a auflösen: $a = 4r / \sqrt{2}$

die rechte Seite der Gleichung mit $\sqrt{2} / \sqrt{2}$ erweitern:

$a = 4r\sqrt{2} / \sqrt{2}\sqrt{2}$ ergibt dann $4r\sqrt{2} / 2$ also $a = 2r\sqrt{2}$

Berechnung der Raumausfüllung

Würfelvolumen ergibt sich aus $V = a^3$

Volumen einer Kugel beträgt $V = \frac{4\pi r^3}{3}$

Jetzt muss nur die Summe der Volumina aller Kugeln ("Metallatome") gebildet werden und mit dem Würfelvolumen (V = 100 %) verglichen werden.

einfach kubisch

Würfelvolumen= $(2r)^3$ also $8\ r^3$ = 100 % Raum

Z = 8 x 1/8 Kugel = 1

Gesamtkugelvolumen: $4{,}1887\ r^3$

leerer Raum: 4,1887 / 8 = 52 %

kubisch innenzentriert

Würfelvolumen= $(4\ r\ /\ \sqrt{3}\ )^3$ also $12{,}3168\ r^3$ = 100 % Raum

Z = 8 x 1/8 Kugel + 1 Kugel = 2

Gesamtkugelvolumen: $8{,}37758\ r^3$

leerer Raum: 8,37758 / 12,3168 = 68 %

kubisch flächenzentriert

Würfelvolumen= $(2\ r\ \sqrt{2}\ )^3$ also $22{,}627\ r^3$ = 100 % Raum

Z = 8 x 1/8 Kugel + 6 x 1/2 Kugel = 4

Gesamtkugelvolumen: $16{,}755\ r^3$

leerer Raum: 16,755 / 22,627 = 74 %

Beispielaufgabe:

Blei kristallisiert in einer kubisch-dichtesten Kugelpackung. Der Pb-Pb-Abstand beträgt im Festkörper 3,49 Å.

Berechnen Sie die Dichte von festem Blei!

Lösung

Der Abstand Pb-Pb beträgt im Festkörper 3,49 Å, der Radius eines Blei-Atoms liegt damit bei (3,49/2) Å.

$r = 1{,}745 \cdot 10^{-8}$ cm

Die Elementarzelle einer kubisch-flächenzentrierten Struktur enthält Z = 4 Atome.

Die Flächendiagonale eines Würfels beträgt: $a\sqrt{2}$

(a = Kantenlänge des Würfels). Auf dieser Diagonalen sitzen 2 halbe Kugeln sowie eine ganze Kugel. Damit hat die Diagonale die Länge 4 r.

$$4r = a\sqrt{2} \qquad \Rightarrow \qquad a = 2r\sqrt{2}$$

Damit ergibt sich für Kantenlänge der Einheitszelle von Blei: $a = 4{,}936 \cdot 10^{-8}$ cm

Das Zellvolumen beträgt damit: $V_{Zelle} = 1{,}2023 \cdot 10^{-22}\ cm^3$

Für die Dichte ergibt sich:

$$d = \frac{4 \cdot M(Pb)}{V_{Zelle} \cdot N_A}$$

$$d = \frac{4 \cdot 207{,}2\ g \cdot mol^{-1}}{1{,}023 \cdot 10^{-22}\ cm^3\ \cdot 6{,}022 \cdot 10^{23}\ mol^{-1}} = 11{,}45\ g \cdot cm^{-3}$$