

*Metalle  
und  
Metallbindung*

# Metalle in Periodensystem

## Periodic Table of the Elements

Main Group  
Representative Elements

1A <sup>a</sup>	
1	
H	1.00794

2A	
2	
Be	9.012182

3	4
Li	Be
6.941	9.012182

11	12
Na	Mg
22.989770	24.3050

19	20
K	Ca
39.0983	40.078

37	38
Rb	Sr
85.4678	87.62

55	56
Cs	Ba
132.90545	137.327

87	88
Fr	Ra
[223.02]	[226.03]

Von den Elementen sind **80** Metalle

Main Group  
Representative Elements

1A <sup>a</sup>		8A	
1		18	
H	1.00794	He	4.002602

2A		8A	
2		18	
He	4.002602	Ne	20.1797

3A	4A	5A	6A	7A
13	14	15	16	17
B	C	N	O	F

10.811	12.0107	14.0067	15.9994	18.998403	20.1797
26.981538	28.0855	30.973761	32.065	35.453	39.948
13	14	15	16	17	18

13	14	15	16	17	18
Al	Si	P	S	Cl	Ar
26.981538	28.0855	30.973761	32.065	35.453	39.948

13	14	15	16	17	18
Al	Si	P	S	Cl	Ar
26.981538	28.0855	30.973761	32.065	35.453	39.948

13	14	15	16	17	18
Al	Si	P	S	Cl	Ar
26.981538	28.0855	30.973761	32.065	35.453	39.948

Metals	Metalloids	Nonmetals
3B	4B	5B
3	4	5
6B	7B	8B
6	7	8
7B	8	9
7	8	10
8B	9	10
1B	11	12
12	11	12
Transition metals		
13	14	15
14	15	16
15	16	17
16	17	18
17	18	
18		
19	20	21
K	Ca	Sc
39.0983	40.078	44.955910
20	21	22
Ca	Sc	Ti
40.078	44.955910	47.867
37	38	39
Rb	Sr	Y
85.4678	87.62	88.90585
38	39	40
Sr	Y	Zr
87.62	88.90585	91.224
39	40	41
Y	Zr	Nb
88.90585	91.224	92.90638
41	42	43
Nb	Mo	Tc
92.90638	95.94	[98]
42	43	44
Mo	Tc	Ru
95.94	[98]	101.07
43	44	45
Tc	Ru	Rh
[98]	101.07	102.90550
44	45	46
Ru	Rh	Pd
101.07	102.90550	106.42
45	46	47
Rh	Pd	Ag
102.90550	106.42	107.8682
46	47	48
Pd	Ag	Cd
106.42	107.8682	112.411
47	48	49
Ag	Cd	In
107.8682	112.411	114.818
48	49	50
Cd	In	Sn
112.411	114.818	118.710
49	50	51
In	Sn	Sb
114.818	118.710	121.760
50	51	52
Sn	Sb	Te
118.710	121.760	127.60
51	52	53
Sb	Te	I
121.760	127.60	126.90447
52	53	54
Te	I	Xe
127.60	126.90447	131.293
53	54	55
I	Xe	Cs
126.90447	131.293	132.90545
54	55	56
Xe	Cs	Ba
131.293	132.90545	137.327
55	56	71
Cs	Ba	Lu
132.90545	137.327	174.967
56	71	72
Ba	Lu	Hf
137.327	174.967	180.9479
71	72	73
Lu	Hf	Ta
174.967	180.9479	183.84
72	73	74
Hf	Ta	Re
180.9479	183.84	186.207
73	74	75
Ta	Re	Os
183.84	186.207	190.23
74	75	76
Re	Os	Ir
186.207	190.23	192.217
75	76	77
Os	Ir	Pt
190.23	192.217	195.078
76	77	78
Ir	Pt	Ag
192.217	195.078	196.96655
77	78	79
Pt	Ag	Cu
195.078	196.96655	200.59
78	79	80
Ag	Cu	Hg
196.96655	200.59	204.3833
79	80	81
Cu	Hg	Tl
200.59	204.3833	207.2
80	81	82
Hg	Tl	Pb
204.3833	207.2	208.98038
81	82	83
Tl	Pb	Bi
207.2	208.98038	208.98
82	83	84
Pb	Bi	Po
208.98038	[208.98]	[208.99]
83	84	85
Bi	Po	At
[208.98]	[208.99]	[222.02]
84	85	86
Po	At	Rn
[208.99]	[222.02]	132.90545
85	86	87
At	Rn	Fr
[222.02]	132.90545	137.327
86	87	88
Rn	Fr	Ra
132.90545	137.327	[226.03]
87	88	103
Ra	Fr	104
[226.03]	[261.11]	[261.11]
88	103	105
Fr	Fr	Db
[261.11]	[261.11]	[266.12]
103	104	106
Fr	Fr	Sg
[261.11]	[266.12]	[264.12]
104	105	107
Fr	Fr	Bh
[266.12]	[264.12]	[269.13]
105	106	108
Fr	Fr	Hs
[264.12]	[269.13]	[268.14]
106	107	109
Fr	Fr	Mt
[264.12]	[269.13]	[281.15]
107	108	110
Fr	Fr	Ds
[269.13]	[281.15]	[272.15]
108	109	111
Fr	Fr	Rg
[281.15]	[272.15]	[285]
109	110	112
Fr	Fr	Cn
[281.15]	[285]	[284]
110	111	113
Fr	Fr	Fl
[281.15]	[284]	[289.2]
111	112	114
Fr	Fr	Fl
[284]	[289.2]	[288]
112	113	115
Fr	Fr	Fl
[289.2]	[288]	[293]
113	114	116
Fr	Fr	Lv
[288]	[293]	[294]
114	115	117
Fr	Fr	Lv
[288]	[294]	[294]
115	116	118
Fr	Fr	Lv
[294]	[294]	[294]

Lanthanide series	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
	138.9055	140.116	140.90765	144.24	[145]	150.36	151.964	157.25	158.92534	162.50	164.93032	167.259	168.93421	173.04
Actinide series	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102
	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No
	[227.03]	232.0381	231.03588	238.02891	[237.05]	[244.06]	[243.06]	[247.07]	[247.07]	[251.08]	[252.08]	[257.10]	[258.10]	[259.10]

# Charakteristische Metalleigenschaften

- Metallglanz
- Mechanische Verformbarkeit
- Elektrische Leitfähigkeit
- Wärmeleitfähigkeit



Kupferdraht auf Goldfolie



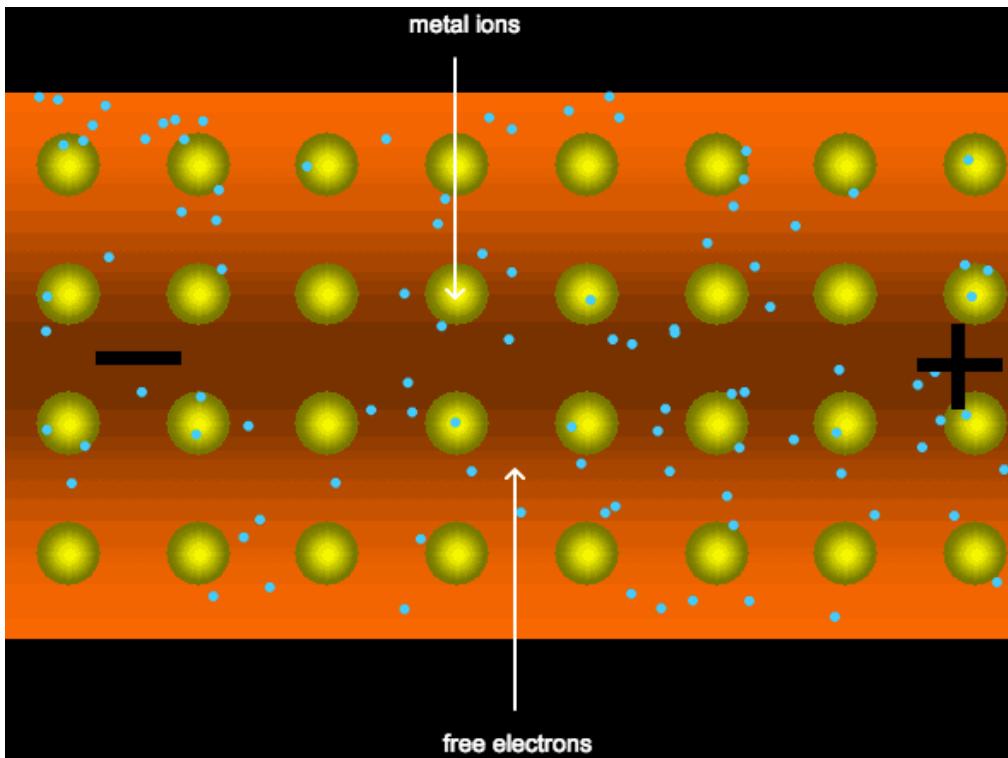
Elementares Kobalt



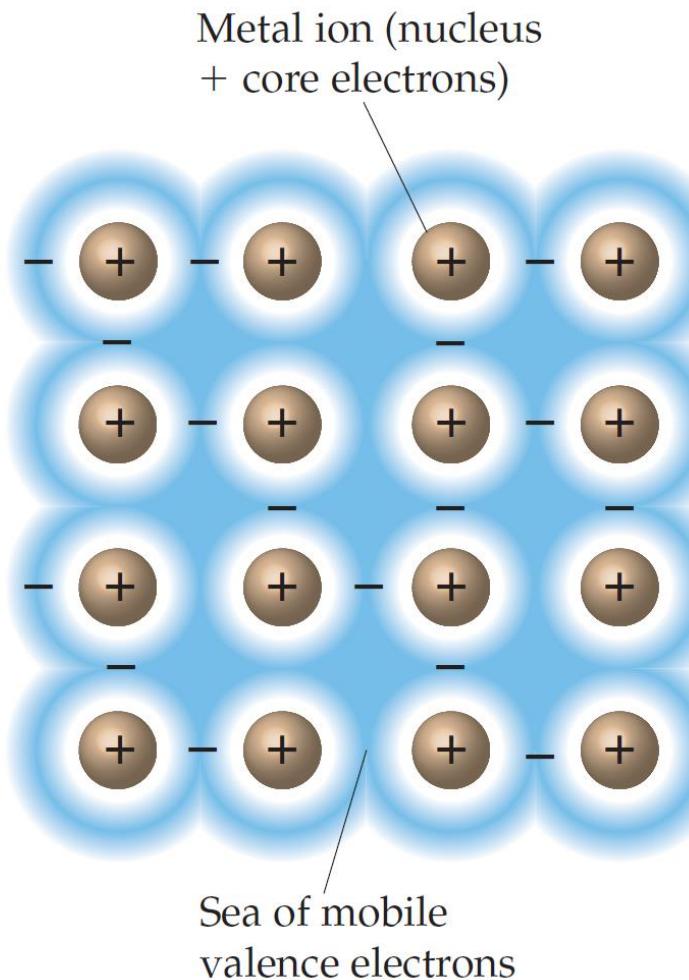
Platin Kristalle

# Metallbindung - Elektronengasmodell

- ⇒ **Valenzelektronen** locker gebunden; bilden ein **Elektronengas**
- ⇒ **Geschwindigkeit** der Elektronen im Metallgitter **sehr groß**, stoßen ständig mit Metallatomen zusammen, **ändern** dabei ihre **Richtung**.
- ⇒ Beim Anlegen einer **Spannung**: **Bewegung** in Richtung **Anode**
- ⇒ Für **Cu-Draht**, Querschnitt  $1 \text{ mm}^2$ , Strom  $1 \text{ A}$ , **30 cm / h**  
( $< 0.1 \text{ mm / sek}$ )



Drude und Lorentz (um 1900)



# Metallbindung - Bändermodell

## Beispiel: Lithium

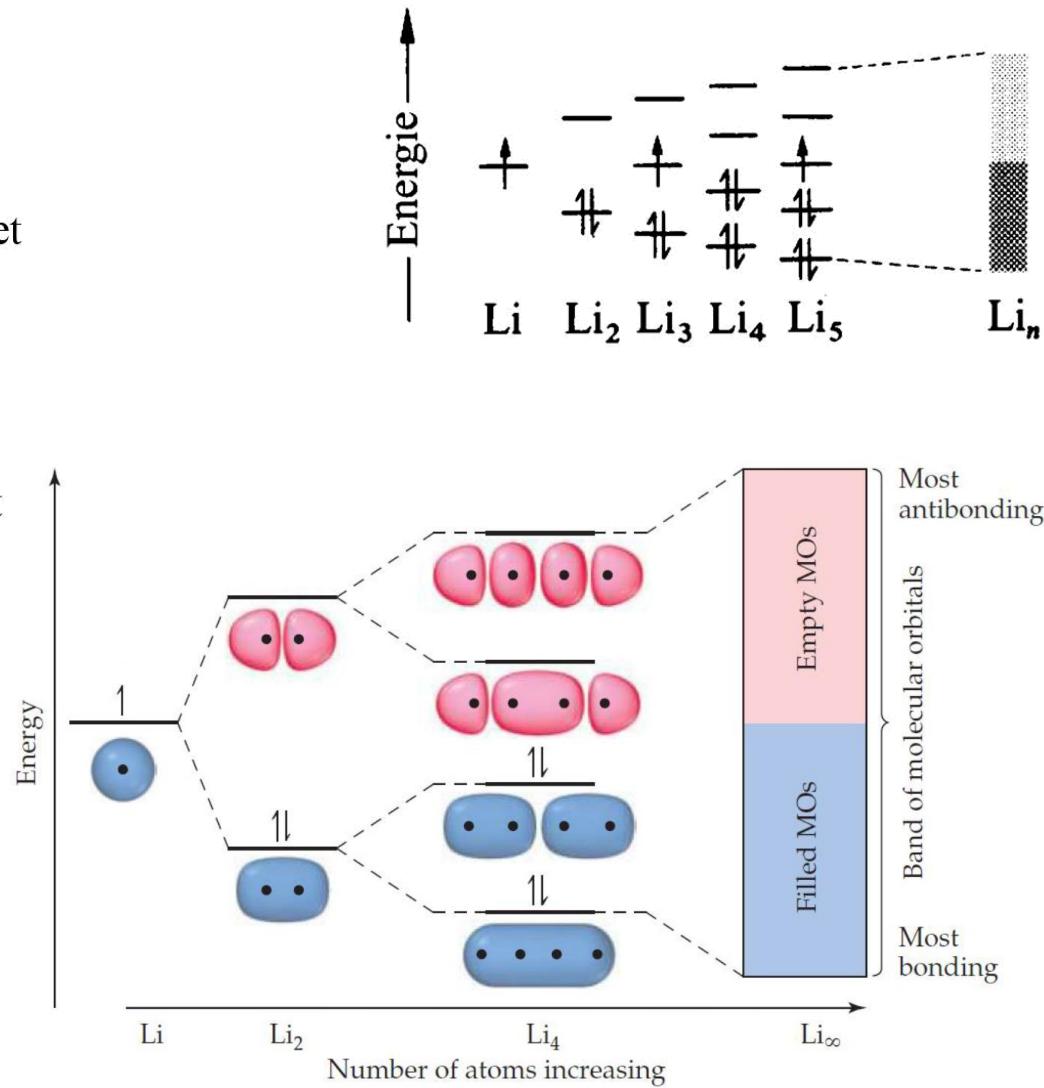
Elektronenkonfiguration:  $1s^2, 2s^1$

**Li-Kristall** wird als ein **Riesenmolekül** betrachtet

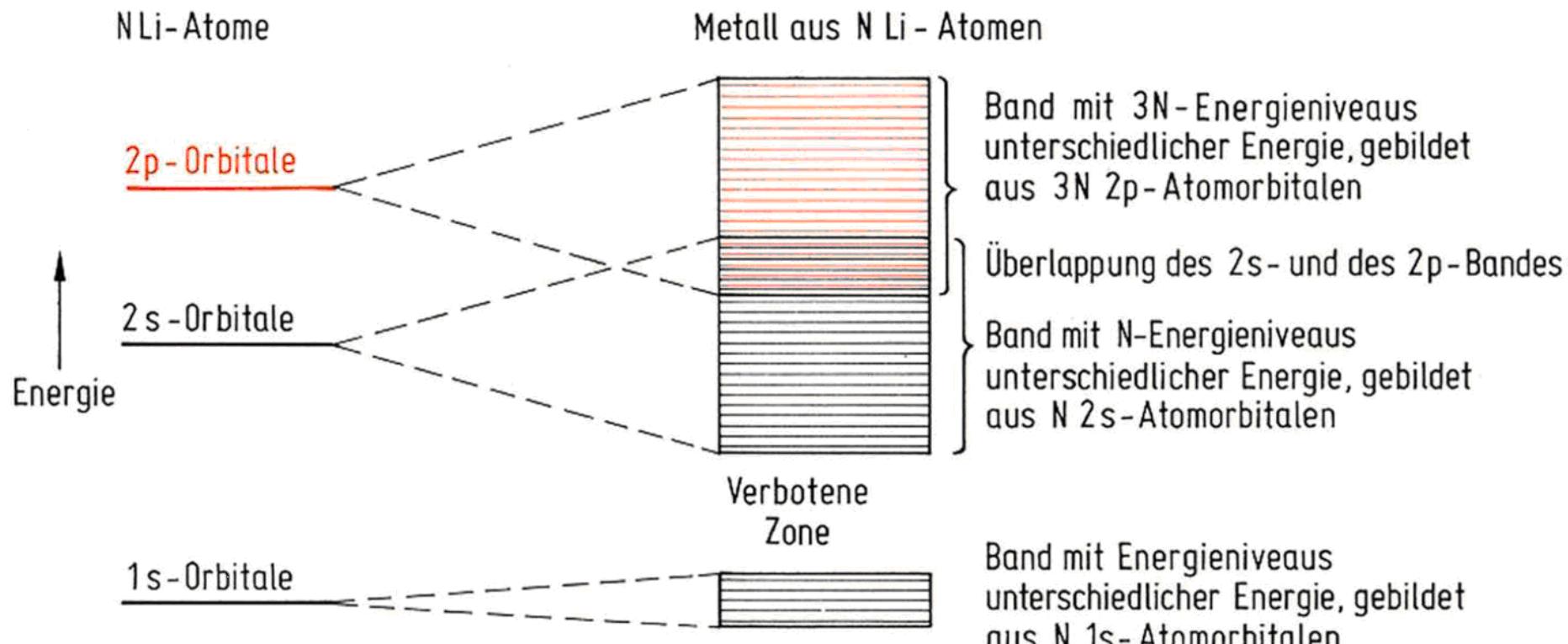
Kombination von **n s-AOs** ergibt **n MOs**,  
bei 1 Mol Li ( $\sim 10^{23}$  Atome) sind es  **$10^{23}$  MOs**

**Energiedifferenz** zwischen den MOs **nimmt** mit zunehmender Zahl der Li-Atome **ab** und wird bei **sehr großen Zahlen** von Li-Atomen **verschwindend klein**.

⇒ Es entsteht ein **Energieband**



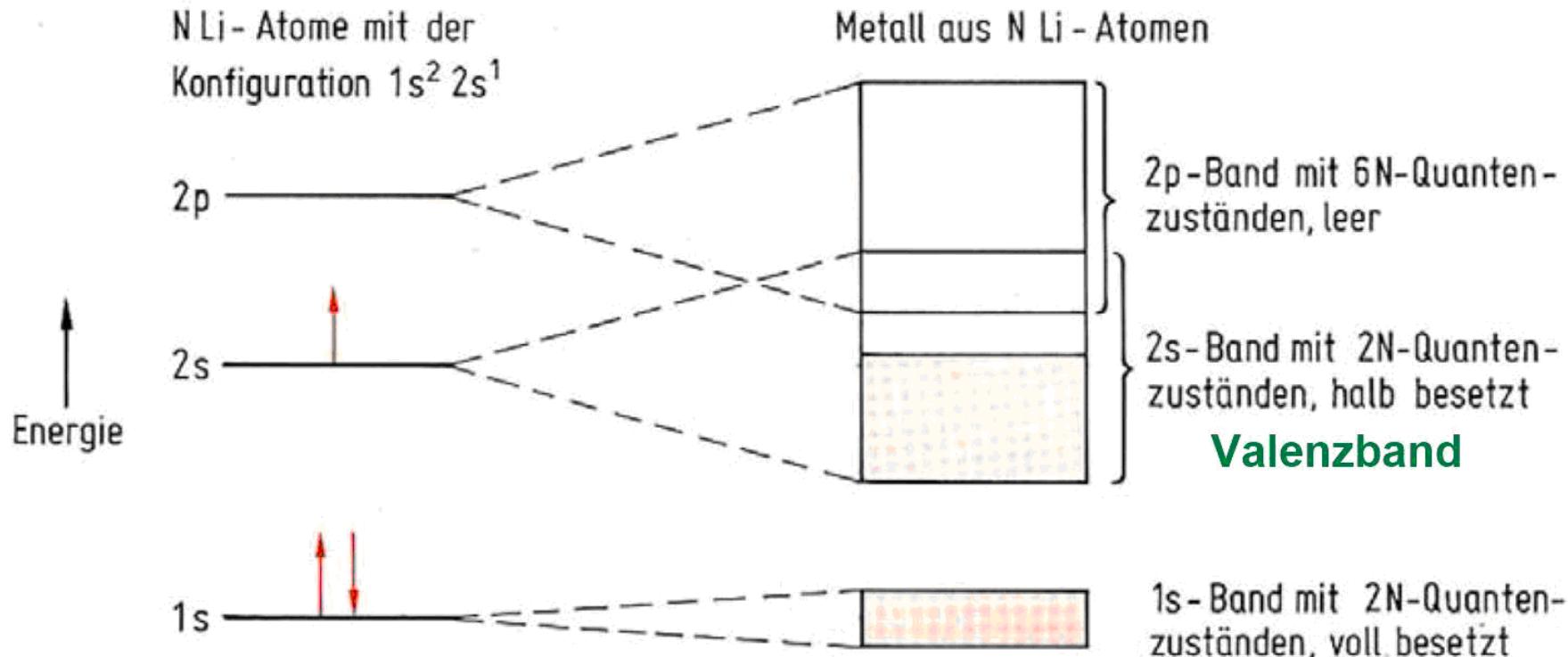
# Metallbindung - Bändermodell



**Energiebreite** der Bänder in der **Größenordnung von eV**

**Abstand** zwischen den **Energieniveaus** in den Bändern für  $N = 10^{20}$  Atomen liegt bei etwa  $10^{-20}$  eV

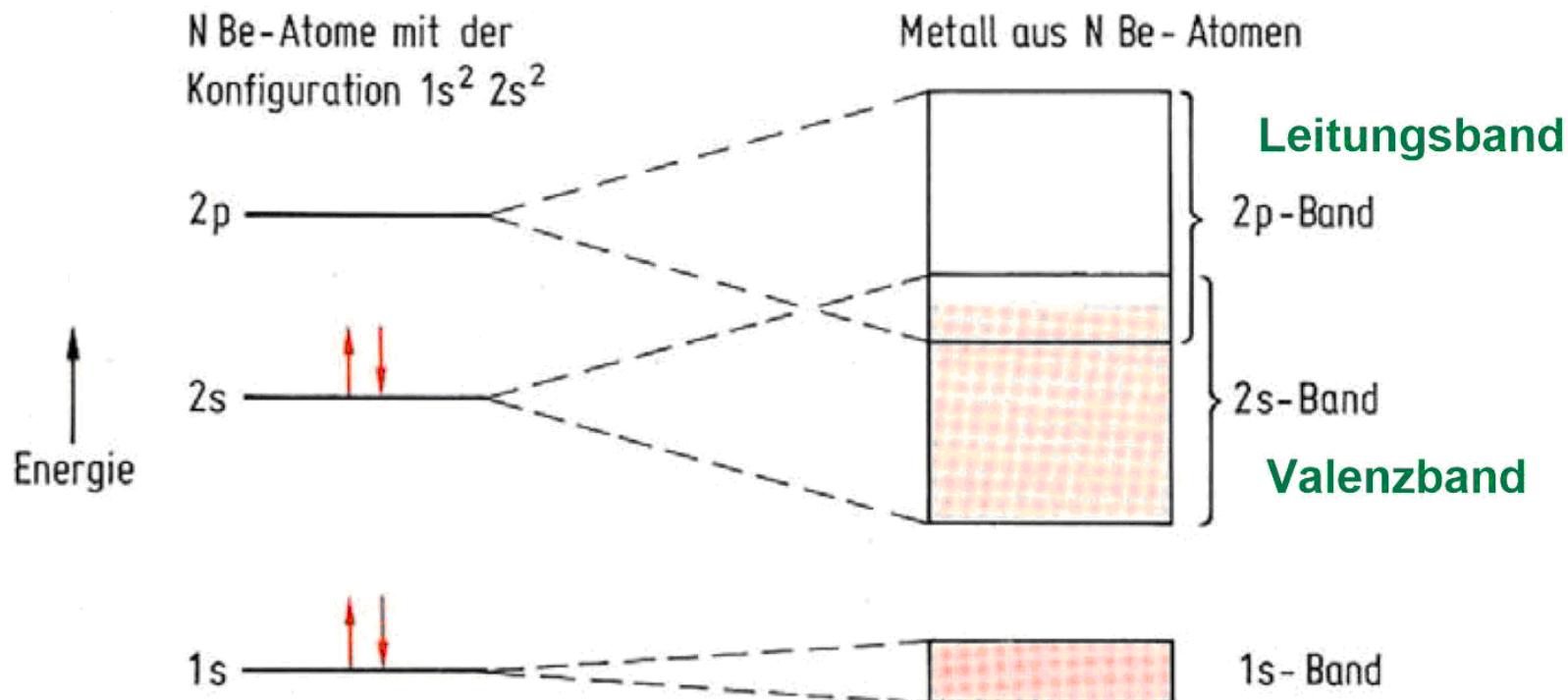
# Metallbindung - Bändermodell



Besetzung der Energieniveaus mit Elektronen; es gilt das Pauli-Prinzip.

- ⇒ **1s-Band** ist **vollständig besetzt**
- ⇒ **2s-Band** ist **halb besetzt**
- ⇒ **Energieriche Elektronen** vom **Valenzband** können leicht in einen **unbesetzten Elektronenzustand angehoben** werden und sorgen für die elektrische Leitfähigkeit.

# Metallbindung - Bändermodell

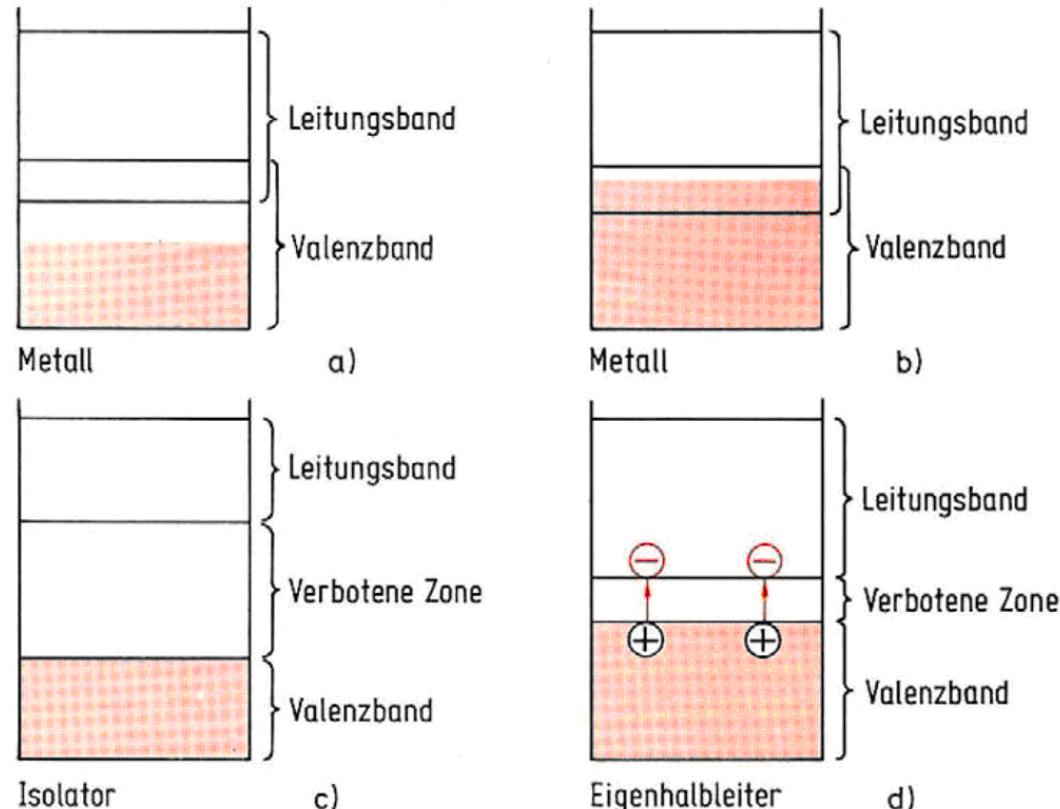


**Beispiel Beryllium:** Elektronenkonfiguration  **$1s^2, 2s^2$**

- ⇒ **1s-Band** ist **vollständig besetzt**
- ⇒ **2s-Band** ist **vollständig besetzt**
- ⇒ Volles **2s-Band** überlappt mit freiem **2p-Band**
- ⇒ Energieriche Elektronen vom **Valenzband (2s)** können leicht in einen **unbesetzten Elektronenzustand im 2p-Band (Leitungsband)** angehoben werden und sorgen für die elektrische Leitfähigkeit.

# Metallbindung - Bändermodell

- a) **Alkalimetalle:** Valenzband teilweise besetzt,  $\Rightarrow$  elektr. Leiter
- b) **Erdalkalimetalle:** Valenzband voll besetzt; überlappt mit **Leitungsband**,  $\Rightarrow$  elektr. Leiter
- c) **Diamant:** Große Energiedifferenz zwischen Valenzband und Leitungsband (5.2 eV); **verbotene Zone**  $\Rightarrow$  Isolator
- d) **Silizium:** Kleine Energiedifferenz zwischen Valenzband und Leitungsband (1.09 eV); Anregung energiereicher Elektronen in das Leitungsband möglich,  $\Rightarrow$  Eigenhalbleiter



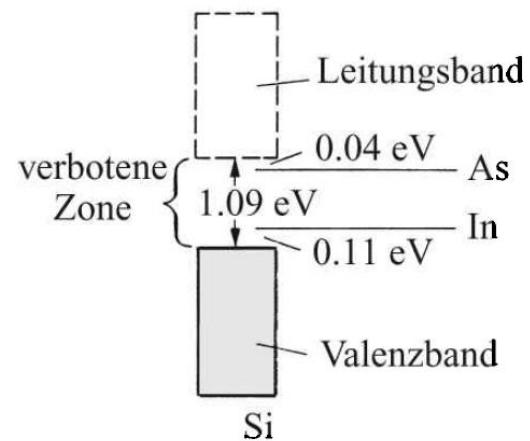
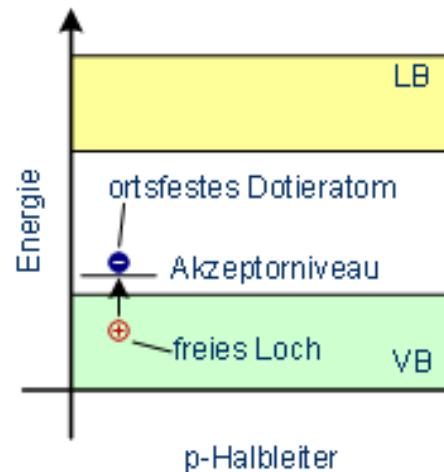
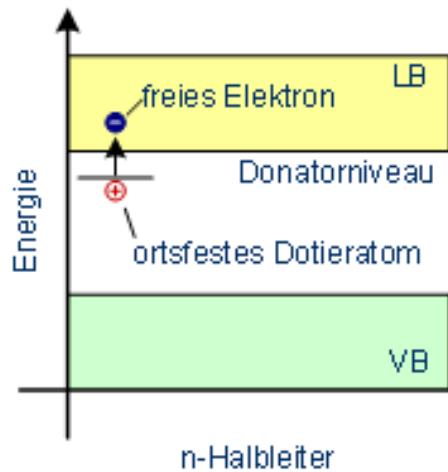
$\Rightarrow$  Bei Metallen überlappen Valenzband und Leitungsband.

# Dotierung von Halbleitern

Erhöhung der **elektrischen Leitfähigkeit** von Halbleitern durch **Dotierung**.

Einbau von Atomen mit einem **überschüssigen Elektron**  $\Rightarrow$  **n-Halbleiter**,  
**z. B. Si dotiert mit As.**

Einbau von Atomen mit einem **Elektron weniger**  $\Rightarrow$  **p-Halbleiter**,  
**z. B. Si dotiert mit In.**



**n-Dotierung:** besetztes **Donor-Niveau** in der **Nähe** vom **Leitungsband**

**p-Dotierung:** freies **Akzeptor-Niveau** in der **Nähe** vom **Valenzband**

# **Elektrische Leitfähigkeit von Metallen**

**Hohe Dichte unbesetzter Energiezustände** unmittelbar oberhalb der besetzten Energiezustände, z. B. bei **guter Überlappung** der Bänder, führt zu **hoher elektrischer Leitfähigkeit**.

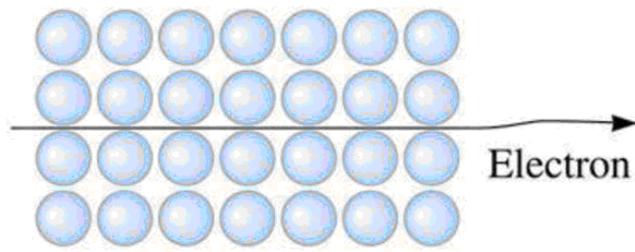
## Elektrische Leitfähigkeiten bei 0°C in 106 S/m.

Zum Vergleich: Si:  $2.5 \cdot 10^{-4}$ , Wasser: 0.05, dest. Wasser:  $5 \cdot 10^{-6}$ .

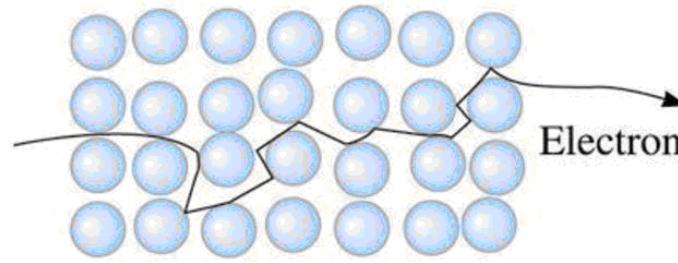
# Elektrische Leitfähigkeit von Metallen

Die elektrische Leitfähigkeit von Metallen nimmt mit steigender Temperatur ab.

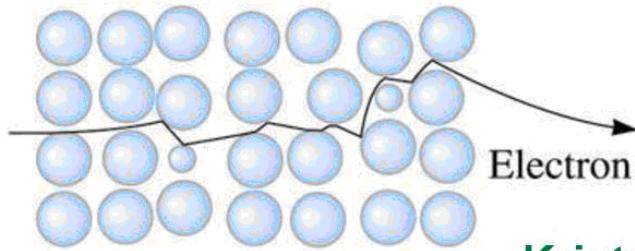
Grund: Zunahme der **thermischen Schwingungen** der **Atomrümpfe** sowie von **Gitterfehlern**.



(a) **perfekter Kristall**



(b) **Kristall bei hoher Temperatur**



(c) **Kristall mit Gitterdefekten**

Die elektrische Leitfähigkeit von Halbleitern nimmt mit steigender Temperatur zu.

Grund: Zunahme der **Anzahl von Ladungsträgern**.

# Strukturen von Metallen

**Räumliche Anordnung** der Metallatome  $\Rightarrow$  Metallgitter

Im Gitter weisen die Metallatome **hohe Koordinationszahlen** (KZ) auf: **KZ = 12** oder **8**.

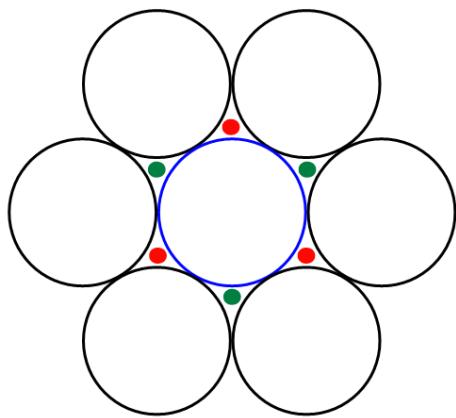
**Koordinationszahl eines Atoms: Zahl der nächsten Nachbarn, die das Atom umgeben.**

Einfaches Modell: **Metallatome als Kugeln**; so angeordnet, dass sie sich **möglichst dicht packen**.

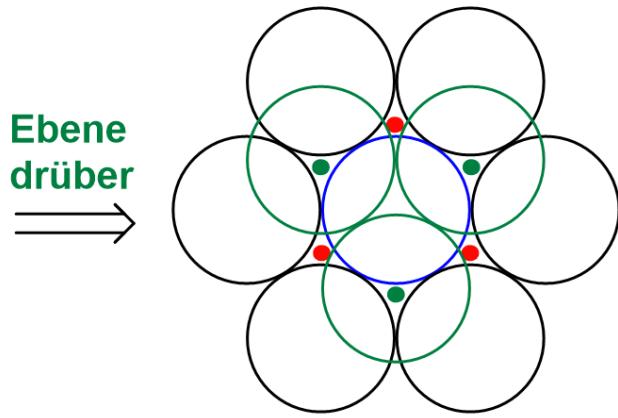
$\Rightarrow$  **Dichteste Kugelpackungen!**



# Strukturen von Metallen

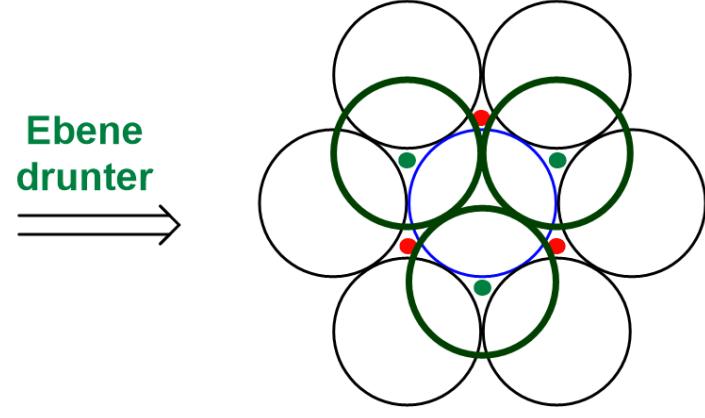


In der **Ebene**: **KZ = 6**



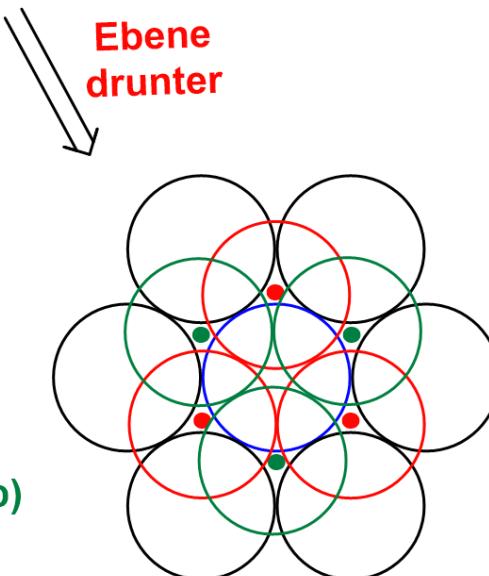
Ebene  
drüber  
⇒

Kugeln nur **in jeder**  
**zweiten** Mulde



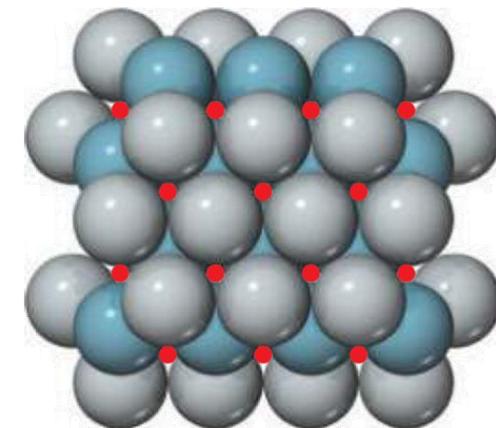
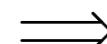
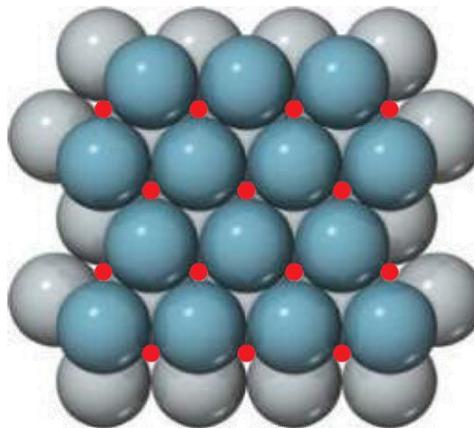
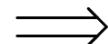
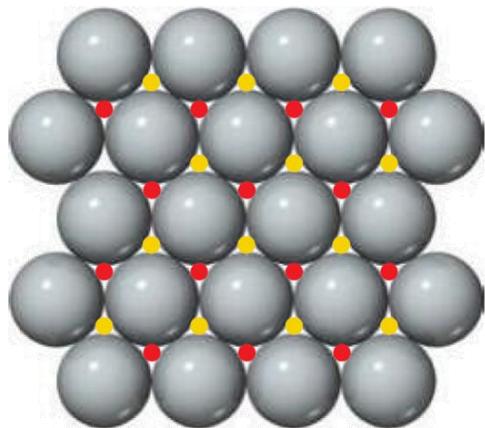
Ebene  
drunter  
⇒

**Gleiche Lage** wie in Ebene drüber  
**Schichtfolge ABABAB...**  
**Hexagonal dichteste Packung (hcp)**  
**KZ = 12**



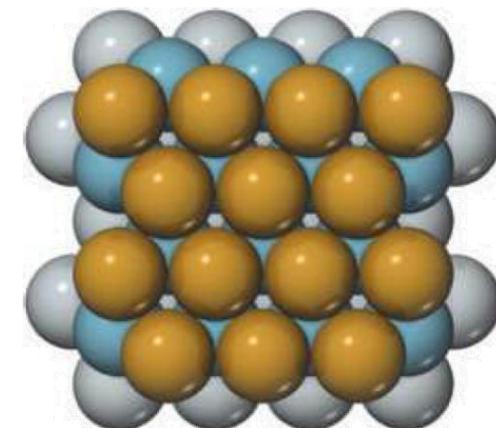
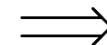
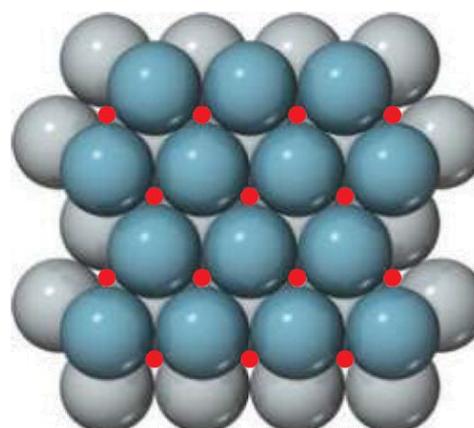
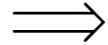
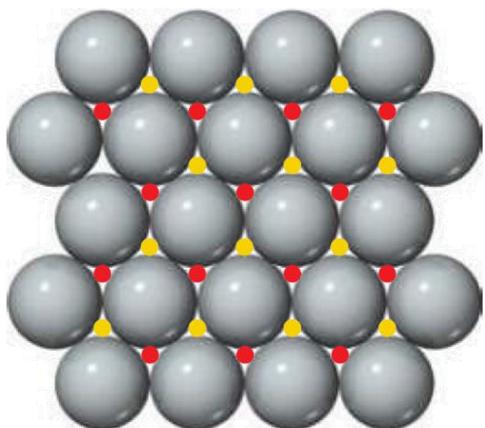
**Dritte Lage** wird besetzt  
**Schichtfolge ABCABC...**  
**Kubisch dichteste Packung (ccp)**  
**KZ = 12**

# Strukturen von Metallen



Zweite Schicht in gelb  
markierte Mulden

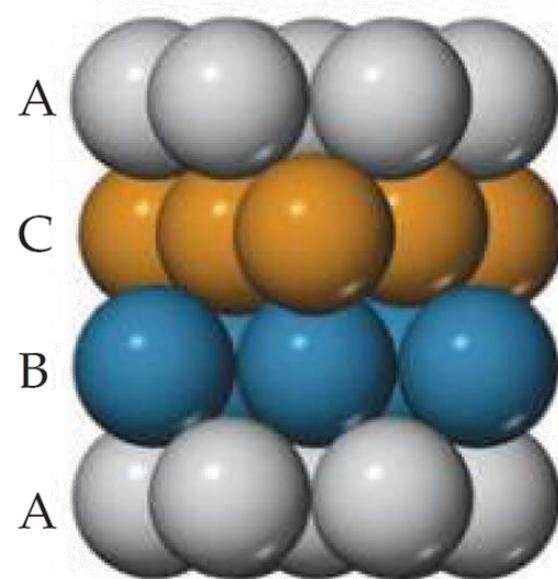
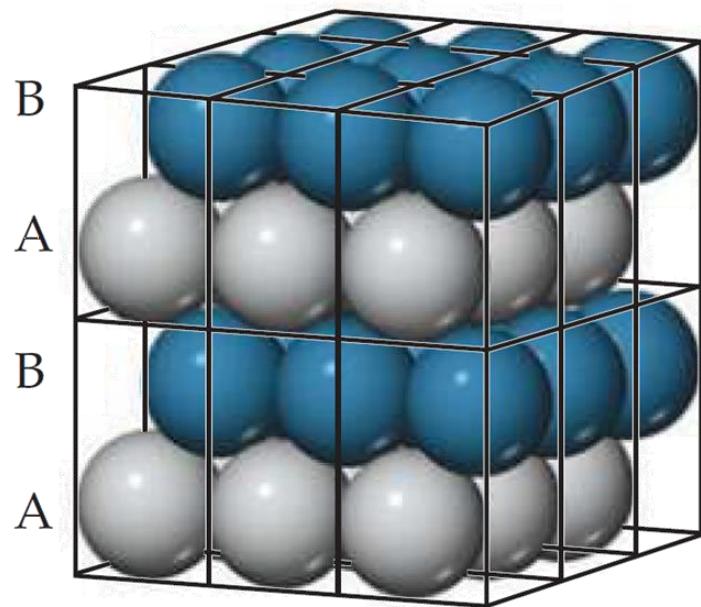
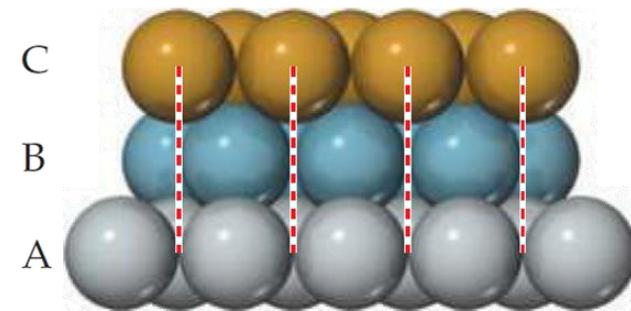
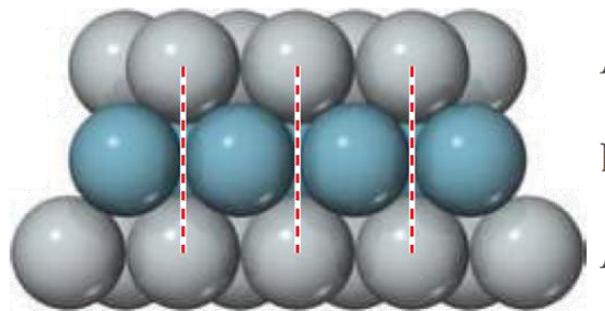
Dritte Schicht über die  
erste Schicht  
Abfolge ABAB..., hcp



Zweite Schicht in gelb  
markierte Mulden

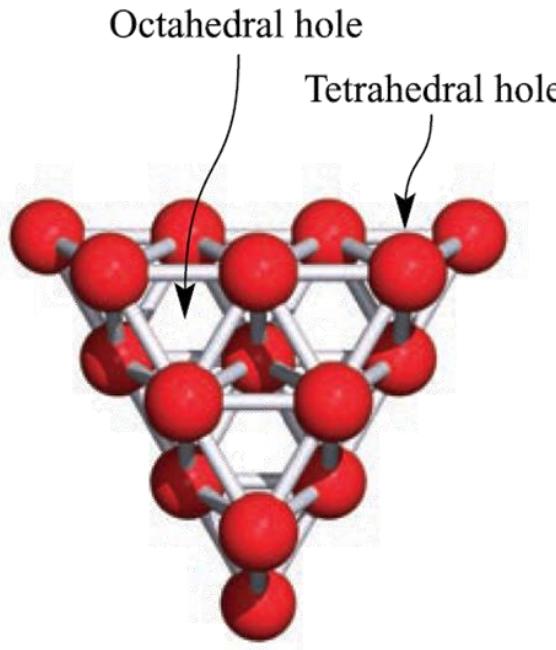
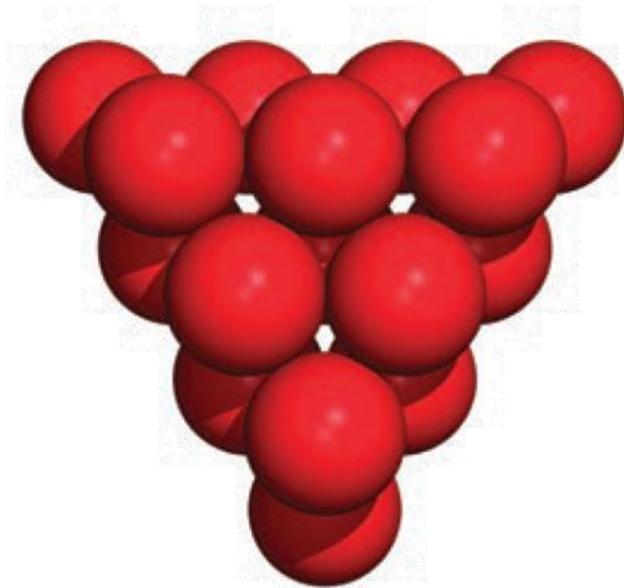
Dritte Schicht über die rot  
markierten Mulden (dritte Lage)  
Abfolge ABCABC..., ccp

# Strukturen von Metallen



# Tetraederlücken und Oktaederlücken

Hohlräume (Lücken) in den dichtesten Kugelpackungen



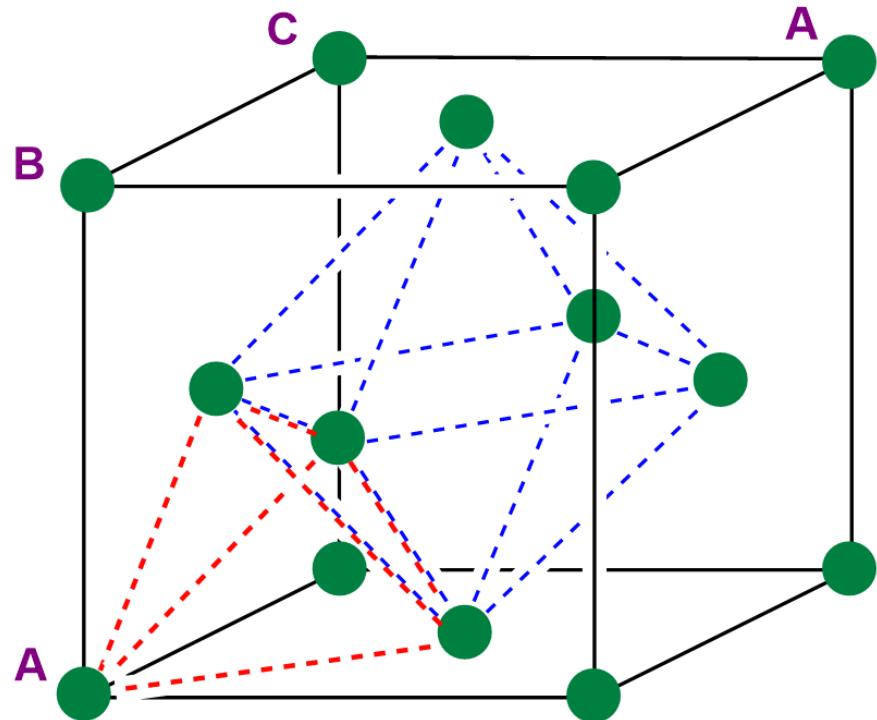
In einer dichten Kugelpackung aus **N Atomen** (Kugeln) gibt es **N Oktaederlücken** und **2N Tetraederlücken**.

Die **Oktaederlücken sind größer**: bei einem gegebenen Radius  $R$  der Kugeln der Packung passt in einer **Oktaederlücke** eine Kugel mit Radius  $< 0.41 \times R$  und in einer **Tetraederlücke** eine Kugel mit Radius  $< 0.23 \times R$ .

# Kubisch flächenzentriertes Gitter (ccp)

Die **Elementarzelle** ist die **kleinste Einheit**, aus der durch **Translation** in drei Richtungen das **Kristallgitter** aufgebaut werden kann.

## Kubisch flächenzentriertes Gitter (dichteste Kugelpackung)



Atome an den **Ecken** und den **Flächenmittnen** eines **Würfels**

Die **Elementarzelle** enthält:

$$\Rightarrow 8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4 \text{ Atome.}$$

$$\Rightarrow 1 + 12 \times 1/4 = 4 \text{ Oktaederlücken}$$

$$\Rightarrow 8 \text{ Tetraederlücken}$$

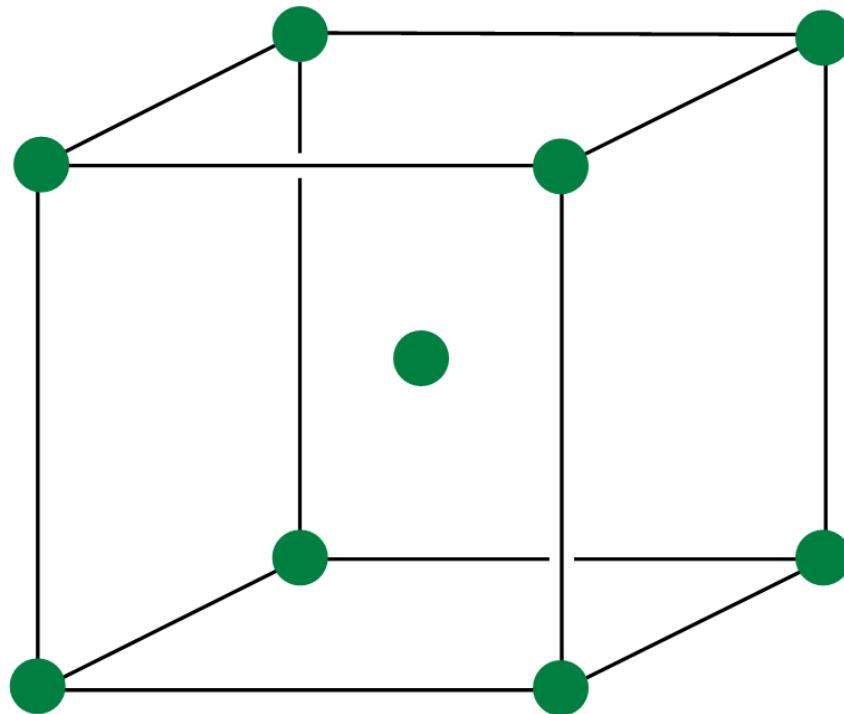
Abfolge der Schichten: **ABCABC...**

Schichten **senkrecht** zur Raumdiagonale

**Raumerfüllung: 74%**

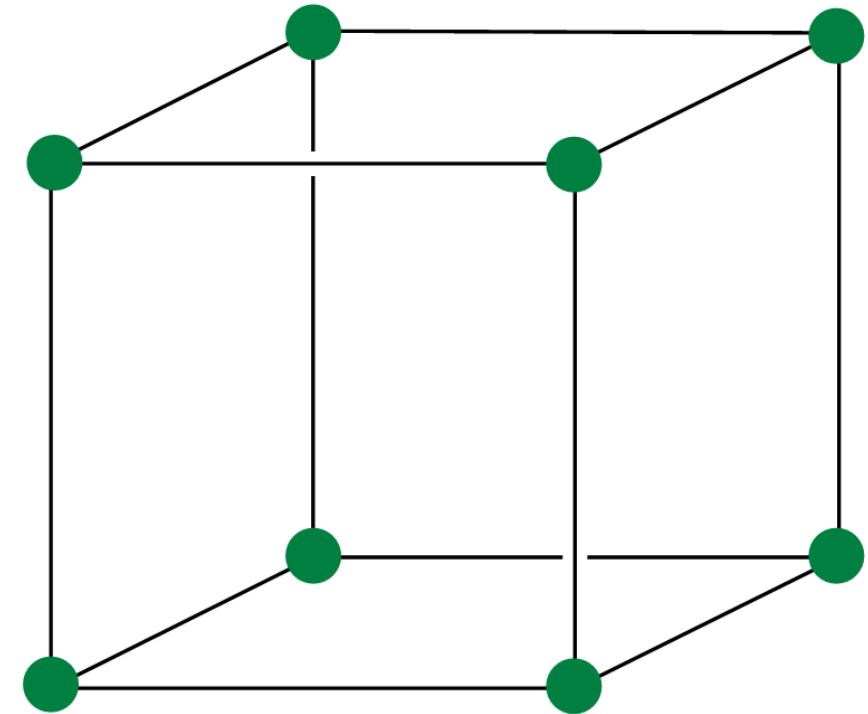
# Kubisch innenzentriertes und kubisch primitives Gitter

Kubisch innenzentriert



Atome an den **Ecken** und in  
der **Mitte** eines Würfels  
**KZ = 8, Raumerfüllung 68%**

Kubisch primitiv



Atome an den **Ecken** eines Würfels  
**KZ = 6, Raumerfüllung 52%**

**Keine dichteste Packungen!**

# Strukturen der Metalle

The figure is a 3D representation of the periodic table where each element is represented as a cube. The color of the cube indicates the element's crystal structure according to the following legend:

- b.c.c. (Body-Centred Cubic): Red cubes. Elements include Li, Be, Na, Mg, K, Ca, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Cs, Ba, La, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, and Bi.
- h.c.p. (Hexagonal Close-packed): Green cubes.
- f.c.c. (Face-Centred Cubic): Blue cubes.
- eigene Typ (Own Type): White cubes.

## Kubisch flächenzentriert (fcc): Cu-Typ, Al-Typ, A1-Typ

## Hexagonal dichteste Kugelpackung (hcp): Mg-Typ, A3-Typ

## Kubisch innenzentriert (bcc): W-Typ, A2-Typ

Metalle sind oft **di-** oder **polymorph**; d.h. sie kristallisieren in **mehreren Gittern**, z. B. Co: in hexagonal und kubisch dichteste Packung.

**Polymorphie:** das Auftreten eines Elements oder einer Verbindung in mehreren Kristallformen.

Beispiel: **Diamant** und **Graphit** sind **polymorphe Formen** des **Kohlenstoffs**.