

## GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

### Lösung zur 9. Übung: Koordinationspolyeder/Radienquotienten

#### Aufgabe 1:

##### 1. Tetraeder (Abb. 1):

Die Anionen berühren sich entlang der Flächendiagonale  $d$  des Würfels mit der Kantenlänge  $a$ , so dass gilt:  $d = 2 \cdot R_A$ . Außerdem ist  $d = \sqrt{a^2 + a^2} = \sqrt{2} \cdot a$ .

Durch Umstellen und Einsetzen ergibt sich:  $a = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot d = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 2 \cdot R_A = \sqrt{2} \cdot R_A$ .

Da sich das Kation und die Anionen auf der Diagonalen berühren gilt:  $1/2$  Raumdiagonale des Würfels  $\overline{AB} = r_K + R_A = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{3} \cdot a = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{3} \cdot \sqrt{2} \cdot R_A = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{6} \cdot R_A$ .

$$\Rightarrow r_K = \left(\frac{1}{2} \cdot \sqrt{6} - 1\right) \cdot R_A$$

$$\Rightarrow \frac{r_K}{R_A} \approx \underline{\underline{0.225}}$$

##### 2. Oktaeder (Abb. 2):

Die Anionen berühren sich entlang der Kanten, sodass gilt:  $\overline{DG} = 2 \cdot R_A$ .

Das Kation und die Anionen berühren sich in der Flächendiagonale  $\overline{DE}$  des Quadrates  $DFEG$ :  $\overline{DE} = 2 \cdot r_K + 2 \cdot R_A$ .

Außerdem gilt:  $\overline{DE} = \sqrt{2} \cdot \overline{DG} = 2 \cdot \sqrt{2} \cdot R_A$ .

$$\Rightarrow r_K = (\sqrt{2} - 1) \cdot R_A$$

$$\Rightarrow \frac{r_K}{R_A} \approx \underline{\underline{0.414}}$$

##### 3. Würfel (Abb. 3):

Die Anionen berühren sich entlang der Würfelkante:  $\overline{HI} = 2 \cdot R_A$ .

Entlang der Raumdiagonale  $\overline{HK}$  des Würfels berühren sich Kation und Anionen:

$$\overline{HK} = 2 \cdot R_A + 2 \cdot r_K.$$

Außerdem gilt:  $\overline{HK} = \sqrt{3} \cdot \overline{HI} = \sqrt{3} \cdot 2 \cdot R_A$ .

$$\Rightarrow r_K = (\sqrt{3} - 1) \cdot R_A$$

$$\Rightarrow \frac{r_K}{R_A} \approx \underline{\underline{0.732}}$$

#### 4. Trigonales Prisma (Abb. 4):

Grundsätzlich gilt, dass die Höhe des Prismas gleich der Kantenlänge der Dreiecksflächen ist. Da sich die Anionen auf allen Kanten berühren, benutzt man das rechtwinklige Dreieck  $ABC$  (Abb. 5a). Um die Länge  $\overline{BC}$  zu bestimmen, wird das gleichseitige Dreieck  $BEF$  (Abb. 5b) genutzt, dessen Höhe (und Seitenhalbierende) ist  $\overline{BD}$ .

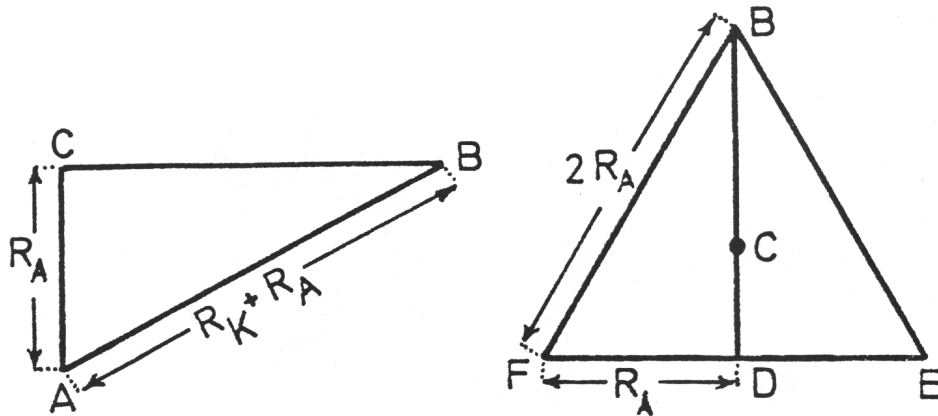


Abb. 5

Im Dreieck  $BEF$  kann die Länge von  $\overline{BD}$  bestimmt werden über:

$$\overline{BD} = \sqrt{\overline{BF}^2 - \overline{DF}^2} = \sqrt{(2 \cdot R_A)^2 - (R_A)^2} = \sqrt{3} \cdot R_A.$$

Nach dem Schwerpunktsatz ergibt sich die Strecke  $\overline{BC}$  zu  $2/3$  der Strecke  $\overline{BD}$ . Damit ist  $\overline{BC} = \frac{2}{3} \cdot \overline{BD} = \frac{2}{3} \cdot \sqrt{3} \cdot R_A$ .

Jetzt lässt sich im Dreieck  $ABC$  folgende Gleichung aufstellen:  $\overline{AB}^2 = \overline{AC}^2 + \overline{BC}^2$ .

$$\Rightarrow (r_K + R_A)^2 = R_A^2 + \left(\frac{2}{3} \cdot \sqrt{3}\right)^2 \cdot R_A^2 = \left(1 + \frac{4}{9} \cdot 3\right) \cdot R_A^2 = \frac{7}{3} \cdot R_A^2$$

$$\Rightarrow r_K = \left(\sqrt{\frac{7}{3}} - 1\right) \cdot R_A$$

$$\Rightarrow \frac{r_K}{R_A} \approx \underline{\underline{0.528}}$$