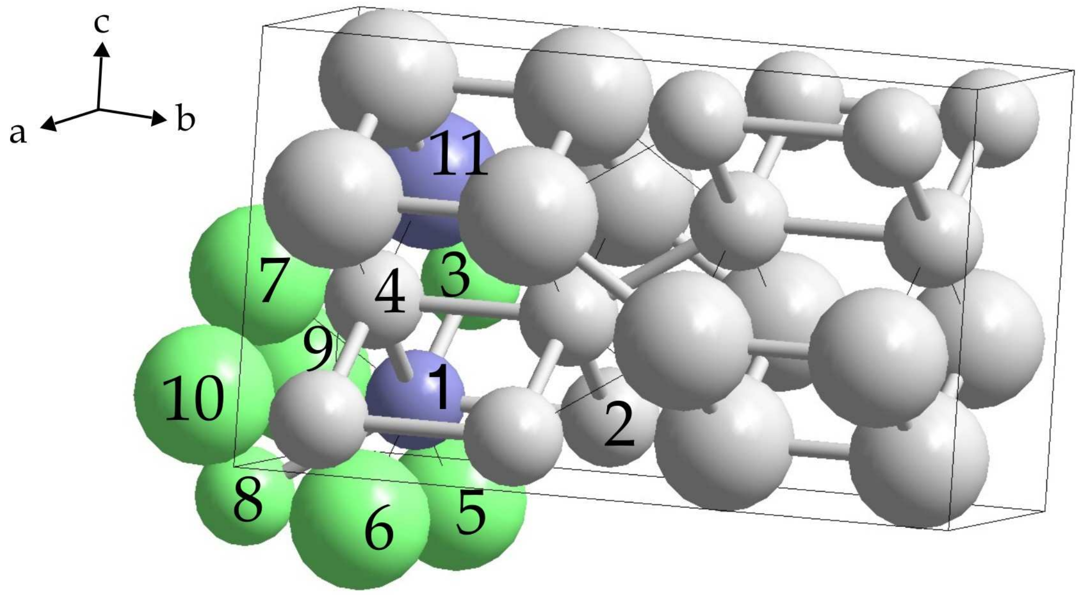
Packungen von Kugelpackungen (*Packings of Sphere Packings*) PSP-24 und PSP-25: Zur Berechnung der Gitter- und des Lageparameters

Marek Petrik, Philipps-Universität Marburg, Germany
(Mai/August 2018)



(3 und 5-10 außerhalb dieser Elementarzelle.)

System: orthorhombisch.

Raumgruppe: Pnma (62).

Gitterparameter: *a*, *b*, *c*.

Atomlagen (Lageparameter):

1 – 8d (0 *y* 0,125).
11 – 8d (0 *y* 0,625).

Abstände:

(1) $d_{1-2} = b \cdot \left(\frac{1}{2} - 2y\right)$.

(2) $d_{1-3} = d_{1-4} = d_{1-5} = d_{1-6} = \frac{1}{2}\sqrt{a^2 + (\frac{1}{2}c)^2}$.

(3) $d_{1-7} = d_{1-8} = \sqrt{(2 \cdot 0{,}125 \cdot c)^2 + (2 \cdot y \cdot b)^2}$.

(4) $d_{1-9} = d_{1-10} = \sqrt{(\tfrac{1}{2}a)^2 + (2 \cdot y \cdot b)^2}$.

(1) bis (3) sind Bestimmungsgleichungen sowohl für die interpenetrierende Kugelpackung 7/4/o1, als auch für jede der zwei sie bildenden Teilstrukturen 4/4/o1. Wird einer der vier Parameter *a*, *b*, *c*, *y* vorgegeben, etwa *y*, dann können die restlichen drei berechnet werden, etwa wie folgt:

Alle *d* seien gleich 1.

Gibt man *y* vor, so folgt aus (1):

$$b = \frac{1}{\tfrac{1}{2} - 2y} \ .$$

Aus (3) ergibt sich dann:

$c = 4 \cdot \sqrt{1 - \frac{1}{(\frac{1}{4y} - 1)^2}}$; d.h. $y \leq {}^1/_8$, da das Wurzelargument positiv sein muss.

Damit folgt aus (2):

$$a = 2 \cdot \frac{1}{\frac{1}{4y} - 1} \ .$$

Soll die Kugelpackung 9/3/t2 mit der Koordinationszahl 9 entstehen, so muss darüber hinaus (4) erfüllt sein – obige Ausdrücke für *a* und *b* werden in diesem Fall in letztere Gleichung eingesetzt, um *y* zu berechnen:

$y = \frac{1}{4\sqrt{2} + 4} \approx 0{,}10355$; kleiner darf *y* ohne Atomkollisionen nicht sein, d.h. $y \geq 0{,}10355$.

In diesem Fall berechnen sich die Gitterparameter aus obigen Ausdrücken zu

$a = \sqrt{2} = 1{,}41421$;
$b = 2+\sqrt{2} = 3{,}41421$;
$c = 2\sqrt{2} = 2{,}82843$.