

☆ Weihnachts-Stunde mit kleiner Stern(en)kunde ☆

Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

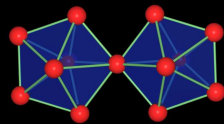
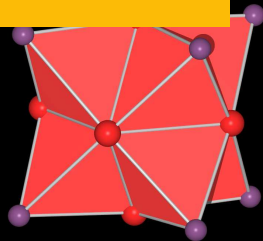
Tetraeder-☆

Iksaeder-☆

Caroline Röhr

AGP-Begleit'vorlesung' (AC-III)

18. Dezember 2024





Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

1 Hochsymmetrische Polyeder

2 Cluster, Polyeder und ihre Sterne (chemisch!?)

3 Oktaeder-☆

4 Tetraeder-☆

5 Ikosaeder-☆

6 Zusammenfassung



Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

1 Hochsymmetrische Polyeder

2 Cluster, Polyeder und ihre Sterne (chemisch!?)

3 Oktaeder-☆

4 Tetraeder-☆

5 Ikosaeder-☆

6 Zusammenfassung

Platonische und archimedische Körper; Dualität



Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆



Platonische Körper (reguläre Polyeder)



Symmetrische Polyeder

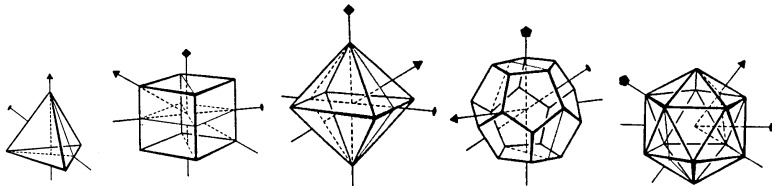
Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆

	Name	Punktgruppe	Anzahl der			
			Seiten/Fl.	Ecken	Kanten	Flächen
a	Tetraeder	$\bar{4}3m$	3	4	6	4
b	Würfel	$m\bar{3}m$	4	8	12	6
c	Oktaeder	$m\bar{3}m$	3	6	12	8
d	Pentagondodekaeder	$\bar{5}\bar{3}\frac{2}{m}$	5	20	30	12
e	Ikosaeder	$\bar{5}\bar{3}\frac{2}{m}$	3	12	30	20



Archimedische Körper (halbbreguläre Polyeder): Übersicht



	Name	Flächen	Ecken
	a abgestumpftes Tetraeder	4 6-Ecke, 4 3-Ecke	12
	b abgestumpftes Oktaeder	8 6-Ecke, 6 4-Ecke	24
	c abgestumpftes Ikosaeder	20 6-Ecke, 12 Fünfecke	60
	d abgestumpfter Würfel	6 8-Ecke, 8 3-Ecke	24
	e abgestumpftes Dodekaeder	12 10-Ecke, 20 3-Ecke	60
	f Rhombenkuboktaeder	18 4-Ecke, 8 3-Ecke	24
	g Kuboktaeder	8 3-Ecke, 6 4-Ecke	12
	h Ikosidodekaeder	20 3-Ecke, 12 5-Ecke	30
	i abgeschrägter Würfel	32 3-Ecke, 6 4-Ecke	24
	j abgeschrägtes Dodekaeder	80 3-Ecke, 12 5-Ecke	60
	k abgestumpftes Kuboktaeder	6 8-Ecke, 8 6-Ecke, 12 4-Ecke	48
	l abgestumpftes Ikosidodekaeder	12 10-Ecke, 20 6-Ecke, 30 4-Ecke	120
	m Rhombenikosidodekaeder	12 5-Ecke, 20 3-Ecke, 30 4-Ecke	60
	n archimedische Prismen	2 N -Ecke, N Vierecke	$2N$
	o archimedische Antiprismen	2 N -Ecke, $2N$ Dreiecke	$2N$

Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆

Archimedische Körper (halbreguläre Polyeder): Schematisch



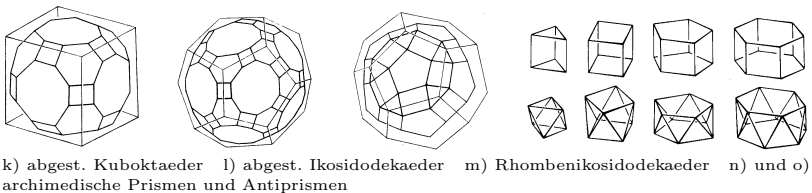
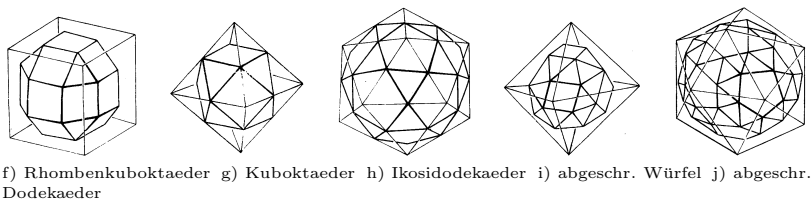
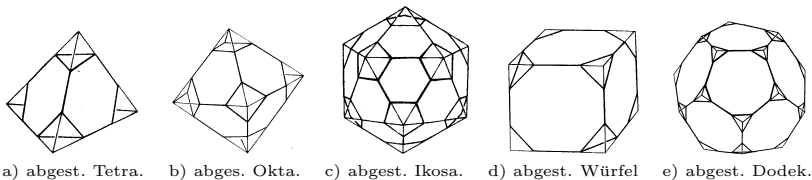
Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder

Tetraeder

Ikosaeder





Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

1 Hochsymmetrische Polyeder

2 Cluster, Polyeder und ihre Sterne (chemisch!?)

3 Oktaeder-☆

4 Tetraeder-☆

5 Ikosaeder-☆

6 Zusammenfassung

Koordinationszahlen und -polyeder (gefüllt)



Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆



Cluster: Borane, Metall-Carbonyl (leer)

☆

Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆



☆ als 'bekrönte' Polyeder



Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆





Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

1 Hochsymmetrische Polyeder

2 Cluster, Polyeder und ihre Sterne (chemisch!?)

3 Oktaeder-☆

4 Tetraeder-☆

5 Ikosaeder-☆

6 Zusammenfassung

Oktaeder-☆ und dichteste Kugelpackungen



Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆



'Tiling'/Parkettierung des 3D-Raums

☆

Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

- **eine Polyedersorte** (unterschiedliche Orientierung möglich), z.B.
 - N Würfel (CsCl, Po)
 - N quadratische, trigonale oder hexagonale Prismen (PbO, WC, AlB_2)
 - N gekappte Oktaeder (t.o.; β -Käfige; Tetrakaidekaeder: Ultramarin, Metalle/Legierungen s.u.)
 - N Rhombendodekaeder (b.c.c.)
 - N elongierte Dodekaeder (BaAl_4)
- **zwei verschiedene Polyedersorten**, z.B.
 - N Oktaeder und $2N$ Tetraeder (Salze, dichteste Kugelpackungen)
 - N verz. Ikosaeder und $3N$ verz. Tetraeder (Nb_3Sn)
 - $2N$ Tetraeder und N gekappte Tetraeder (LAVES-Phasen)
 - N Kuboktaeder (oder Antikuboktaeder) und N Oktaeder (Perowskite)
 - N gekappte Würfel und N Oktaeder (CaB_6)
 - $3N$ Pentagondodekaeder und N Hexakaidekaeder (Clathrate)
 - $2N$ Pentagondodekaeder und N $[\text{5}^{12}\text{6}^4]$ -Polyeder (Dodecasil 3C)
- **mehr als zwei Polyedersorten**, z.B.
 - N Ikosaeder, N 'Snub-Cubes' (abgeschrägte Würfel), $12N$ Tetraeder ($3N$ Tetraedersterne) (NaZn_{13})
 - N gekappte Tetraeder, N gekappte Oktaeder, $2N$ Kuboktaeder (UB_{12})
 - viele viele weitere Beispiele s. z.B. Zeolith-Strukturen, komplexere intermetallische Phasen ...

Oktaeder-☆ im Cu-Typ (f.c.c.)

☆

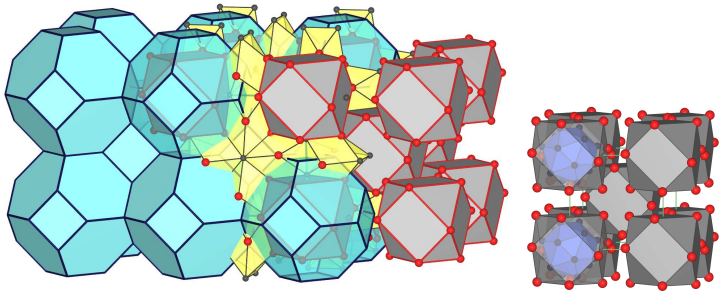
Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

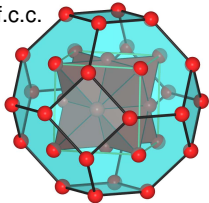
Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

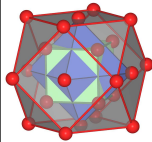


f.c.c.



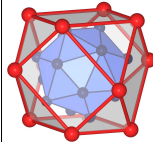
O+C+TO

b.c.c.



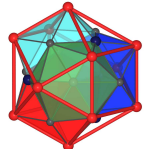
c+C+O+CO
27 Atome/TO

α-Mangan



c+TT+T+CO
29 Atome/TO

γ-Messing



iT+oT+O+CO
26 Atome/TO



Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

1 Hochsymmetrische Polyeder

2 Cluster, Polyeder und ihre Sterne (chemisch!?)

3 Oktaeder-☆

4 Tetraeder-☆

5 Ikosaeder-☆

6 Zusammenfassung

Tetraeder-☆: einfache Beispiele



Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

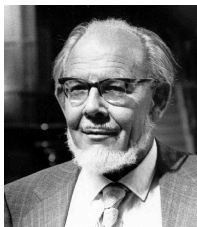
Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆



Erinnerung: FRANK-KASPER-Phasen

FRANK-KASPER-Strukturen

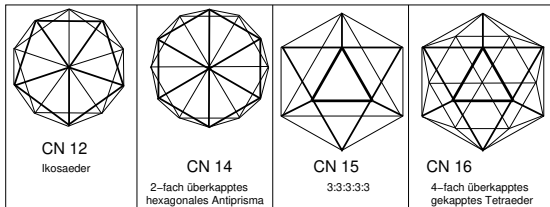


Frederick Charles Frank*

(1911 – 1998)

J. S. Kasper*

- Unterschiede der Metallradien $>15\%$
- dichteste Packungen ungleich großer Kugeln
- Idee: Vermeidung der großen Oktaederlücken \mapsto Tetraederpackungen
- Koordinationspolyeder ausschließlich mit Dreiecksflächen (= aus Tetraedern bestehend!)
 \mapsto **FRANK-KASPER-Polyeder**



* F. C. Frank, J. S. Kasper, Acta Crystallogr. 11, 184 (1958). ibid. 12, 483 (1959).

Erinnerung: Nb₃Sn: Kristallstruktur



Symmetrische Polyeder

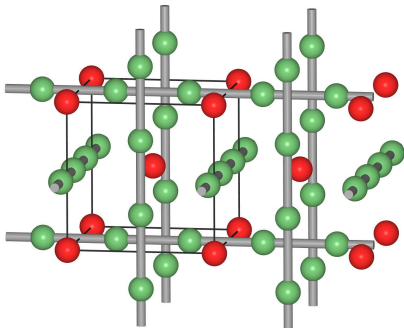
Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder
☆

Tetraeder
☆

Ikosaeder
☆

- Cr₃Si-Typ, kubisch, Raumgruppe $Pm\bar{3}n$
- $d_{\text{Nb-Nb}} = 264.3 \text{ pm}$ ($2 \times$)
↳ Nb-Ketten mit starker $d-d$ -Wechselwirkung
- einander durchdringende FK-Polyeder
 - $\text{CN}_{\text{Sn}} = 12$ (Ikosaeder, FK-12)
 - $\text{CN}_{\text{Nb}} = 14$ (doppelt überkapptes hexagonales Antiprisma, FK-14)
- VRMLs der Strukturen:
 - ohne Polyeder
 - mit Ikosaeder
 - beide Polyeder



Erinnerung: Nb₃Sn: Kristallstruktur



Symmetrische Polyeder

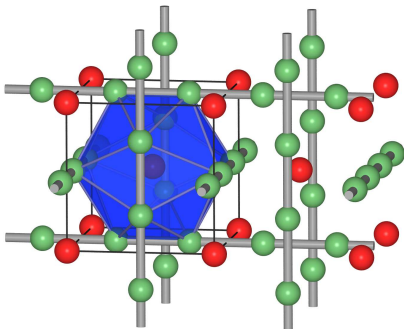
Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder

Tetraeder

Ikosaeder

- Cr₃Si-Typ, kubisch, Raumgruppe $Pm\bar{3}n$
- $d_{\text{Nb-Nb}} = 264.3 \text{ pm}$ ($2 \times$)
↳ Nb-Ketten mit starker $d-d$ -Wechselwirkung
- einander durchdringende FK-Polyeder
 - $\text{CN}_{\text{Sn}} = 12$ (Ikosaeder, FK-12)
 - $\text{CN}_{\text{Nb}} = 14$ (doppelt überkapptes hexagonales Antiprisma, FK-14)
- VRMLs der Strukturen:
 - ohne Polyeder
 - mit Ikosaeder
 - beide Polyeder



Erinnerung: Nb₃Sn: Kristallstruktur



Symmetrische Polyeder

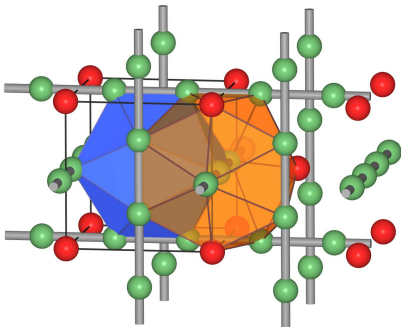
Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder
☆

Tetraeder
☆

Ikosaeder
☆

- Cr₃Si-Typ, kubisch, Raumgruppe $Pm\bar{3}n$
- $d_{\text{Nb-Nb}} = 264.3 \text{ pm}$ ($2 \times$)
↳ Nb-Ketten mit starker $d-d$ -Wechselwirkung
- einander durchdringende FK-Polyeder
 - $\text{CN}_{\text{Sn}} = 12$ (Ikosaeder, FK-12)
 - $\text{CN}_{\text{Nb}} = 14$ (doppelt überkapptes hexagonales Antiprisma, FK-14)
- VRMLs der Strukturen:
 - ohne Polyeder
 - mit Ikosaeder
 - beide Polyeder



'Tiling'/Parkettierung des 3D-Raums

☆

- **eine Polyedersorte** (unterschiedliche Orientierung möglich), z.B.
 - N Würfel (CsCl, Po)
 - N quadratische, trigonale oder hexagonale Prismen (PbO, WC, AlB_2)
 - N gekappte Oktaeder (t.o.; β -Käfige; Tetrakaidekaeder: Ultramarin, Metalle/Legierungen s.u.)
 - N Rhombendodekaeder (b.c.c.)
 - N elongierte Dodekaeder (BaAl_4)
- **zwei verschiedene Polyedersorten**, z.B.
 - N Oktaeder und $2N$ Tetraeder (Salze, dichteste Kugelpackungen)
 - N verz. Ikosaeder und $3N$ verz. Tetraeder (Nb_3Sn)
 - $2N$ Tetraeder und N gekappte Tetraeder (LAVES-Phasen)
 - N Kuboktaeder (oder Antikuboktaeder) und N Oktaeder (Perowskite)
 - N gekappte Würfel und N Oktaeder (CaB_6)
 - $3N$ Pentagondodekaeder und N Hexakaidekaeder (Clathrate)
 - $2N$ Pentagondodekaeder und N $[\text{5}^{12}\text{6}^4]$ -Polyeder (Dodecasil 3C)
- **mehr als zwei Polyedersorten**, z.B.
 - N Ikosaeder, N 'Snub-Cubes' (abgeschrägte Würfel), $12N$ Tetraeder ($3N$ Tetraedersterne) (NaZn_{13})
 - N gekappte Tetraeder, N gekappte Oktaeder, $2N$ Kuboktaeder (UB_{12})
 - viele viele weitere Beispiele s. z.B. Zeolith-Strukturen, komplexere intermetallische Phasen ...

Charakteristisches Phasendiagramm A^I -Zn/Cd: System Na-Zn

☆

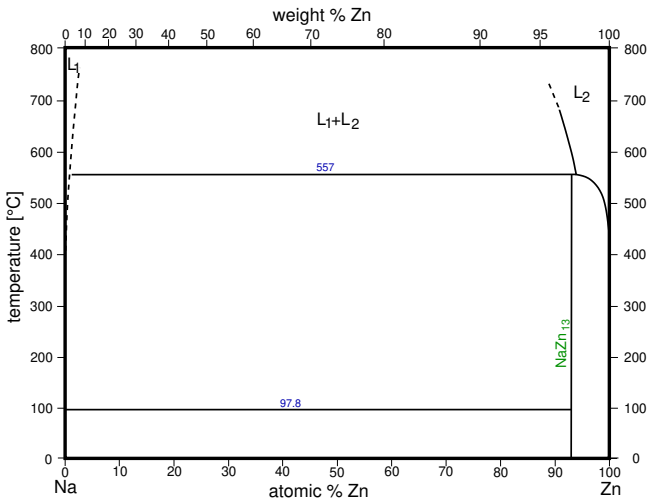
Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder
☆

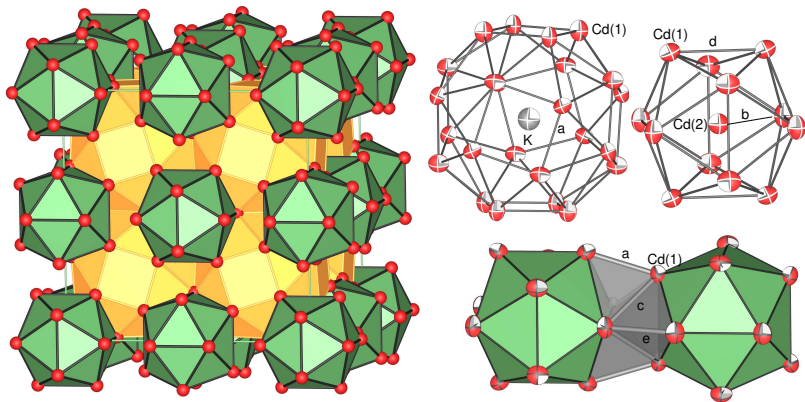
Tetraeder
☆

Ikosaeder
☆



NaZn₁₃-Strukturtyp (v.e./ $M=2.077-2.154$)

☆

Symmetrische
PolyederCluster,
Polyeder
und ihre
SterneOktaeder
☆Tetraeder
☆Ikosaeder
☆

- kubisch, $cF112$, Raumgruppe $Fm\bar{3}c$, $a \approx 1200$ pm
- $CN_A = 24$ (Snub-cube)
- $CN_{M(2)} = 12$; $CN_{M(1)} = 10 + 2$ (jeweils Ikosaeder)
- Tetraederstern (TS) zwischen Ikosaedern (kürzeste Bindung: a)

'Tiling' bei dicht(est)en Kugelpackungen: f.c.c. und b.c.c.

☆

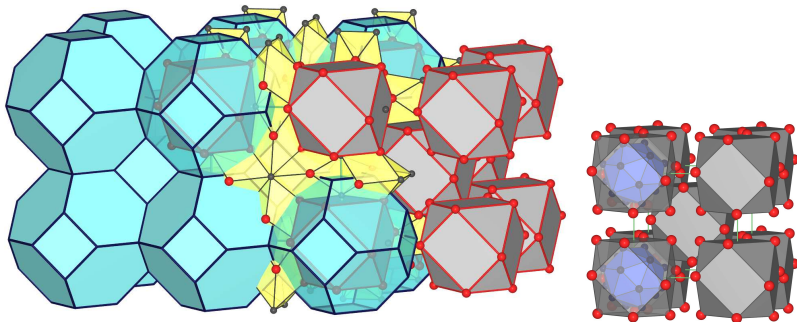
Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

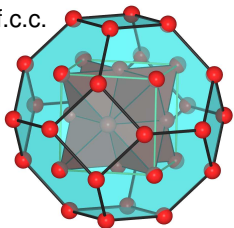
Oktaeder ☆

Tetraeder ☆

Ikosaeder ☆

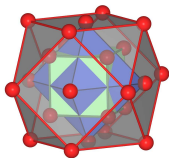


f.c.c.



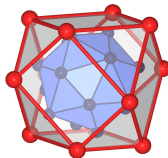
O+C+TO

b.c.c.



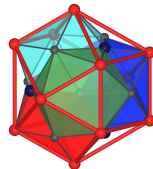
c+C+O+CO
27 Atome/TO

α -Mangan



c+TT+T+CO
29 Atome/TO

γ -Messing



iT+oT+O+CO
26 Atome/TO

'Tiling' bei dicht(est)en Kugelpackungen: γ -Messing



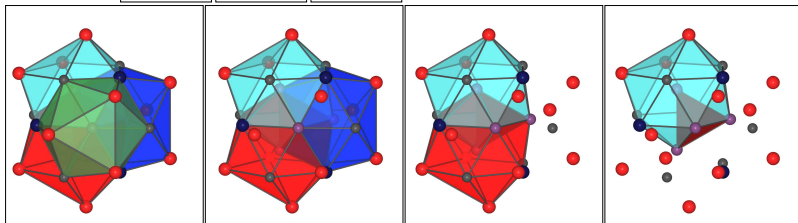
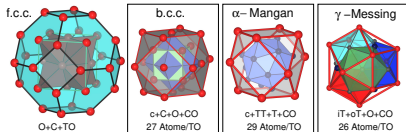
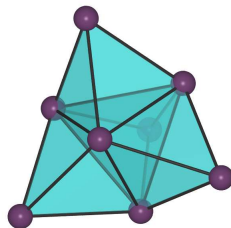
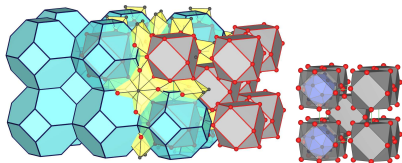
Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder

Tetraeder

Ikosaeder



$$28\text{-er Cluster in } \gamma\text{-Messing: } iT + oT + O + CO = TS + O + CO$$



Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

1 Hochsymmetrische Polyeder

2 Cluster, Polyeder und ihre Sterne (chemisch!?)

3 Oktaeder-☆

4 Tetraeder-☆

5 Ikosaeder-☆

6 Zusammenfassung



Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆

- zentrales Ikosaeder mit 20 Tetraeder-'Zacken'
- Punktgruppe $\bar{5}3\frac{2}{m}$ (nicht-kristallographisch!)
- Ikosaeder \mapsto Pentagondodekaeder

vollständige Ikosaeder-☆



Symmetrische
Polyeder

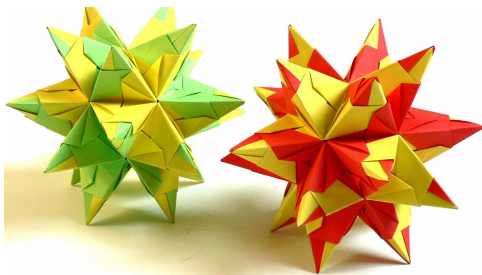
Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆

- zentrales Ikosaeder mit 20 Tetraeder-'Zacken'
- Punktgruppe $\bar{5}3 \frac{2}{m}$ (nicht-kristallographisch!)
- Ikosaeder \mapsto Pentagondodekaeder
- 'BASCETTA'-Sterne: www.mathematische-basteleien.de
- z.B. Video bei www.besserbasteln.de ↓



unvollständige Ikosaeder-☆



Symmetrische Polyeder

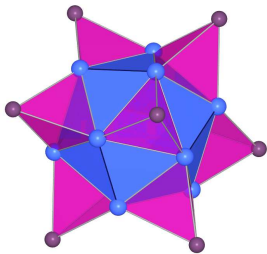
Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

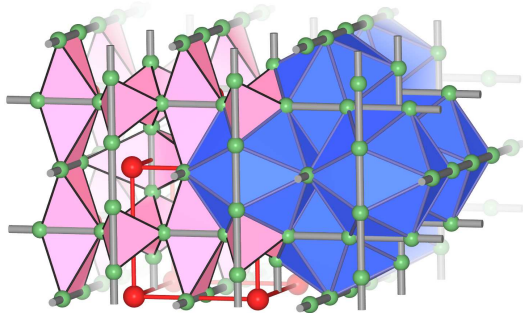
Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

- zentrales Ikosaeder mit nur 8 Tetraeder-'Zacken'
- Punktgruppe = Untergruppe: $\frac{2}{m}\bar{3}$ (kristallographisch!)
- s.a. Nb₃Sn-Struktur



Ikosaedersterne mit 8 Zacken (z.B. in Mg₂Zn₁₁)



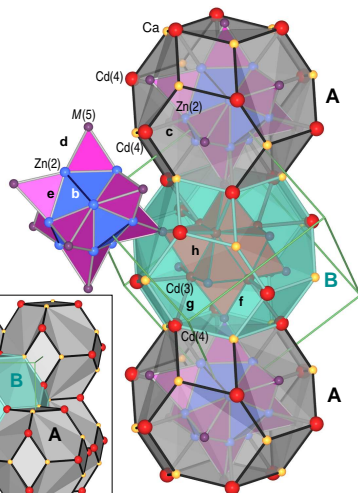
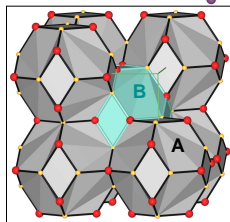
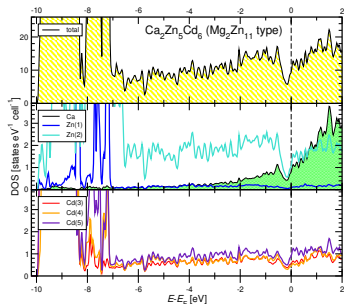
Ikosaeder(sterne) in Nb₃Sn
(Raumparkettierung mit verzerrten Tetraedern!)

Ca₂Zn_{5.1}Cd_{5.8} (v.e./M=2.364)

☆
Symmetrische Polyeder
Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Verbindung	Ca ₂ Zn _{5.1} Cd _{5.8}	
Strukturtyp	Mg ₂ Zn ₁₁	
Pearson-Symbol	cP39-δ	
Kristallsystem	kubisch	
Raumgruppe	Pm $\bar{3}$, Nr. 200	
Gitterparameter [pm] <i>a</i>	918.1(1)	
<i>V</i> _{EZ} [10 ⁶ pm ³]	773.9(4)	
<i>Z</i>	3	
<i>R</i> -Werte	<i>R</i> 1	0.0349
	<i>wR</i> 2	0.0662

Oktaeder ☆
Tetraeder ☆
Ikosaeder ☆



Mg₂Zn₁₁-Typ: Übersicht, mit 'Coloring'

☆

Symmetrische
Polyeder

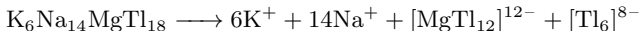
Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder
☆

Tetraeder
☆

Ikosaeder
☆

Wyckoff Position	A	M(1)	M(2)	M(3)	M(4)	M(5)
Punktgruppe	6f	1a	12j	6h	6g	8i
Struktur- element ⇒	mm2	m $\bar{3}$	m	mm2	mm2	3
TO	A	A	B	TO	A+B	
cI	cI		OS (f.c.c.)	OS (f.c.c.), C		
CN ($n_I+n_{II}+n_A$) →	16+1	12+0+0	9+0+3	6+4+2	4+4+4	6+3+3
<i>Bader</i> Ldg. →	+1.285	-0.045	-0.269	-0.143	-0.323	-0.205
V_{BB} [10 ⁶ pm ³] ¹ →	14.91	13.06	17.64	21.96	24.28	22.68
Ca ₂ Zn _{5.07} Cd _{5.83} ¹	Ca	71 % Zn	Zn	Cd	Cd	69 % Cd
Na ₂ Cd ₁₁ ²	Na	Cd	Cd	Cd	Cd	Cd
Ca ₂ Cu ₂ Cd ₉ ³	Ca	Cu	42 % Cu	Cd	Cd	Cd
Mg ₂ Cu ₆ (Al/Ga) ₅ ⁴	Mg	Al/Ga	Cu	Cu	Al/Ga	Al/Ga
Mg ₂ Zn ₁₁ ⁵	Mg	70 % Zn	Zn	Zn	Zn	Zn
Na ₂ Au ₆ In ₅ ⁶	Na	In	Au	Au	In	In
K ₆ Na ₁₄ MgTl ₁₈ ⁷	K	Mg (Zn)	Tl	Tl	Na	Na



¹M. Schwarz, M. Wendorff, C.R., *Z. Kristallogr.* **232**, 515 (2017); ²V. Mihajlov, C.R., *Z. Anorg. Allg. Chem.* **636**, 1792 (2010); ³N. A. Harris, A. B. Hadler, D. C. Fredrickson, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **637** (2011); ⁴Q. Lin, J. D. Corbett, *Inorg. Chem.* **42** 8762 (2003); ⁵H. Euchner, M. Mihalković, G. Gähler, M. R. Johnson, H. Schober, S. Rols, E. Suard, A. Bosak, S. Ohhashi, A.-P. Tsai, S. Lidin, C. P. Gómez, J. Clusters, S. Paschen, M. Boissieu *Phys. Rev. B* **83**, 144202 (2011); ⁶U. Zachwieja *J. Alloys Compd.* **235**, 7 (1996); ⁷Z.-C. Dong, J. D. Corbett *Angew. Chem.* **35**, 1006 (1996).



Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder-☆

Tetraeder-☆

Ikosaeder-☆

1 Hochsymmetrische Polyeder

2 Cluster, Polyeder und ihre Sterne (chemisch!?)

3 Oktaeder-☆

4 Tetraeder-☆

5 Ikosaeder-☆

6 Zusammenfassung

Zusammenfassung



Symmetrische
Polyeder

Cluster,
Polyeder
und ihre
Sterne

Oktaeder-
☆

Tetraeder-
☆

Ikosaeder-
☆

- gefüllte Tetraeder und Oktaeder aufgrund von 8-*N*-Regel bzw. Ionenradienverhältnissen dominierend bei kovalenten Verbindungen bzw. Salzen
- leere kleine Platonische Körper \mapsto Cluster (Borane/Boride bzw. Metall-Carbonylen) (e^- -Mangel, WADE-MINGOS-Regeln)
- Verknüpfung leerer Tetraeder und Oktaeder über Flächen \mapsto Metall-Strukturen (Raumparkettierung)
- dichtere Packungen bei FRANK-KASPER-Phasen (LAVES, Nb_3Sn)
- \mapsto ausschliesslich Tetraeder(lücken) ! (= 'Strahlen' der Sterne)
- damit als Strukturelemente in FRANK-KASPER-Phasen
TS: zentrales Tetraeder
IS: zentrales Ikosaeder (20 Tetraeder)
- dagegen in 'normalen' dichtesten Kugelpackungen
OS: zentrales Oktaeder \mapsto Ausschnitt aus f.c.c.

...



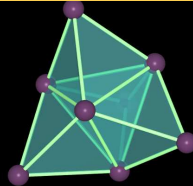
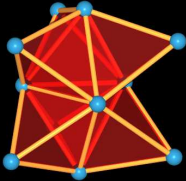
Symmetrische Polyeder

Cluster, Polyeder und ihre Sterne

Oktaeder ☆

Tetraeder ☆

Ikosaeder ☆



DANKE

und schöne Weihnachtsfeiertage

