Notiz zur Geometrie der Koordinationszahl.

Von Gustav F. Hüttig.

Mit 1 Figur im Text.

Neben der beherrschenden Häufigkeit der Koordinationszahl 6 findet sich die Koordinationszahl 5 nur äußerst selten,[1]) weitere Fälle dieser Art sind zweifelhaft; andere darauf bezügliche Angaben der Literatur sind widerlegt.[2]) Auch die Koordinationszahl 7 ist gegenüber der 8 selten und zweifelhaft; von den höheren Koordinationszahlen scheint besonders die 12 ausgezeichnet.[3]) Eine Untersuchung, ob ähnlich ausgezeichnete Zahlen in der reinen Stereogeometrie anzutreffen sind, schien erwünscht. Über die Antwort, die z. Z. die Geometrie gibt, sei in Folgenden kurz referiert. Meine Gewährsmänner, deren gütigen Interesse an der Sache die nachstehende Auskunft zu verdanken ist, waren die Herren Professoren W. Wirtinger, Wien und H. v. Sanden, Clausthal.

Die Fragestellung war folgende: Gegeben sei eine starre Kugel (Z) vom Radius $R = 1$ (Zentralatom). Um diese Kugel sollen mehrere (n) andere, starre Kugeln (koordinativ gebundene Atome oder Atomgruppen) gelagert werden von untereinander gleichem, sonst aber unbekanntem Radius r_n. Diese angelagerten Kugeln sollen die Zentralkugel berühren. Wie groß darf dann höchstens r_n („kritischer Radius") werden, damit n-Kugeln um die Zentralkugel Platz haben?

1. Lagern sich zwei Kugeln an Z an, so kann r_n beliebig groß werden; die beiden Kugeln stören sich nicht. Ist $n = 3$, so ist r_3 bereits begrenzt; im Grenzfalle berühren sich die drei Kugeln; die Mittelpunkte der angelagerten Kugeln bestimmen ein gleichseitiges Dreieck; in den anderen Fällen die Ecken eines regelmäßigen

[1]) Vgl. R. Weinland, Einführung in die Chemie der Komplexverbindungen. Stuttgart, 1919. Insbesondere wegen des Nichtvorhandenseins der Koordinationszahlen 5 und 7, siehe S. 287.

[2]) Z. B. W. Biltz u. G. F. Hüttig, *Z. anorg. u. allg. Chem.* **109** (1919). 104.

[3]) P. Pfeiffer, *Z. anorg. u. allg. Chem.* **105** (1918). 26.

Tetraeders ($n = 4$), Oktaeders ($n = 6$), Würfels ($n = 8$), Ikosaeders ($n = 12$), Dodekaeders ($n = 20$). In der unten stehenden Tabelle sind diese Werte für r_n zusammengestellt; sie geben also an, wieviel mal größer der Radius der angelagerten Kugel sein darf als der Radius der Zentralkugel, damit dann noch n angelagerte Kugeln an Z Platz haben. Ihre Berechnung erfolgte auf dem angegebenen elementargeometrischen Wege. Für die Fälle $n = 5, 7, 9, 10, 11$ ist indessen die Aufgabe keineswegs trivial und eine allgemeine Lösung vermag man gegenwärtig überhaupt noch nicht zu geben. Umso erfreulicher ist es, daß für den chemisch bedeutsamen Fall: $n = 5$ ein Beweis erbracht ist: „Eine Anordnung von 5 Kugeln ist nicht durch einen kritischen Radius ausgezeichnet. Der maximale Radius, bei dem 5 Kugeln gerade Platz haben, läßt auch die Anordnung von 6 mit gleichem Radius zu.“ (v. SANDEN.) Für eine gleiche Beziehung für $n = 7$, 8 einerseits, 10, 11, 12 andererseits, ist ein Beweis noch nicht gefunden.

Tabelle.[1]

n	r_n
2	∞
3	6,464 berechnet aus gleichseitigem Dreieck
4	4,449 „ „ Tetraeder
5	2,414 „ „ $r_5 = r_6$
6	2,414 „ „ Oktaeder
8	1,549 „ „ archimedischen Antiprisma
12	1,108 „ „ Ikosaeder
20	0,5547 „ „ Dodekaeder

Anlagerung von 4 Kugeln und 6 Kugeln ist also kritisch begrenzt, Anlagerung von 5 Kugeln nicht. Die Chemie zeigt, daß die Reihe der Koordinationszahlen, die von jeher als Raumzahl gedeutet wurde, den Wert 5 ausläßt und es erscheint daher verlockend, hier mehr als eine zufällige Übereinstimmung zu sehen.

2. Für $n = 8$ sind zwei Möglichkeiten der Anordnung vorhanden, für $n = 10$ ebenfalls zwei und für $n = 12$ mindestens fünf verschiedene Anordnungen. (WIRTINGER.)

Die nächstliegende für $n = 8$ ist die Anordnung der Kugeln nach den Würfelecken. r_8 wird dann 1,366. Man kann aber zweitens 8 Kugeln um die Zentralkugel so anordnen, daß sie die

[1]) Eine Nachkontrollierung der angegebenen Zahlen verdanke ich Herrn STOLLENWERK (Clausthal).

Ecken eines archimedischen Antiprismas besetzen. Ein archimedisches Antiprisma entsteht aus einem Würfel, wenn man eine Quadratfläche des Würfels gegen die parallel gegenüberliegende um 45° dreht, diese beiden Quadrate einander bis auf die Distanz

$$h = \frac{a}{\sqrt[4]{2}}$$

nähert und die Quadratecken verbindet. (Fig. 1.) Es bildet sich ein Vieleck, das durch zwei Quadrate und acht gleichseitige Dreiecke begrenzt ist. r_8 wird bei dieser Anordnung der Kugeln: 1,549. Da nach der Höchstgrenze der Radien gefragt ist, wurde dieser Wert in der Tabelle aufgenommen. In ähnlicher, freilich bereits komplizierterer Weise lassen sich die Möglichkeiten der Anordnung von 10, 12 und mehr Kugeln behandeln.

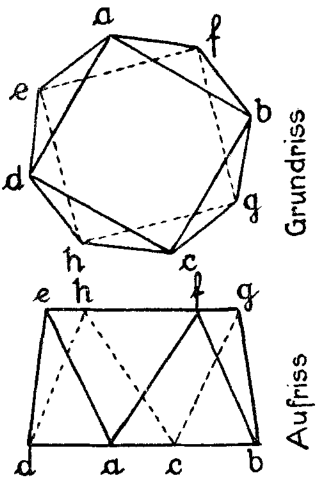

Fig. 1.

Für den Chemiker könnte von Bedeutung werden, daß die Möglichkeit neuartiger Isomerien gezeigt ist und zwar bei gleichartiger Beschaffenheit sämtlicher Substituenten. Tiefgreifende Unterschiede dürften bei diesen Isomerien nicht zu erwarten sein und eine Frage der Zukunft ist es, ob sie — etwa bei Oktaminen — überhaupt auffindbar sind.

Clausthal, Harz, *Chemisches Laboratorium der Bergakademie.*

Bei der Redaktion eingegangen am 29. Juni 1920.