

Beziehungen zwischen Zonen und Kristallflächen

Autor(en): **Niggli, Paul**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Schweizerische mineralogische und petrographische Mitteilungen
= Bulletin suisse de minéralogie et pétrographie**

Band (Jahr): **31 (1951)**

Heft 1

PDF erstellt am: **21.07.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-25148>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Beziehungen zwischen Zonen und Kristallflächen

Von *Paul Niggli* (Zürich)

Die in der Kristallographie auftretenden Probleme werden sehr häufig nach überlieferten Methoden behandelt und bereiten dann für Aufgaben der Kristallstrukturlehre nur ungenügend vor. Wie die Matrixdarstellung bei der Untersuchung der Winkel, die gleichwertige Flächen miteinander bilden, Verwendung finden kann, ist an anderer Stelle¹⁾ dargetan worden. In der Kristallstrukturlehre spielt die Grösse $hx + ky + lz$, bzw. deren Cosinus und Sinus, eine grosse Rolle. In der Kristallographie wird diese wichtige Grösse als $hu + kv + lw$ oft lediglich in der Zonenrechnung gebraucht. Sie ist aber fundamental für alle Beziehungen zwischen Kanten und Kristallflächen (bzw. Flächennormalen).

Gegeben sei eine Fläche (hkl) oder eine Zone $[uvw]$ und der Winkel zwischen Zonenrichtung und beliebig dazu stehender Flächennormalenrichtung. Welches ist die Beziehung der Winkel aller zu $[uvw]$ gleichwertigen Zonen, also der Richtungen der Kantenform $\langle [uvw] \rangle$, gegenüber ein und derselben Fläche (hkl) , oder, was genau der gleichen Problemstellung entspricht: welches sind die Winkel aller einander gleichwertigen Flächen einer Flächenform $\langle (hkl) \rangle$ zu ein und derselben Geraden, wenn einer dieser Winkel bekannt ist?

Die allgemeine Gleichung²⁾ lautet (bezogen auf die Kantenrichtung und Flächennormale):

$$\cos [uvw]/(hkl) = R_{[uvw](hkl)} \cdot (hu + kv + lw),$$

¹⁾ P. NIGGLI, Angular relations between equivalent planes and distances between equivalent points in symmetrical point groups. *Min. Mag.* 29 (1950) 313—328.

²⁾ P. NIGGLI, Kristallographische und strukturtheoretische Grundbegriffe. *Handbuch der Experimentalphysik* Bd. 7, I. Teil. Leipzig 1928.

wobei bezogen auf die kristallographischen Konstanten $a:l:c$; α, β, γ gilt:

$$R_{[uvw](hkl)} = \frac{a \cdot c \cdot \sqrt{A}}{T_{[uvw]} \cdot F_{(hkl)}}$$

$$A = 1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma$$

$$T_{[uvw]}^2 = a^2 u^2 + v^2 + c^2 w^2 + 2 cvw \cos \alpha + 2 ca w u \cos \beta + 2 a u v \cos \gamma$$

$$F_{(hkl)}^2 = h^2 c^2 \sin^2 \alpha + k^2 c^2 a^2 \sin^2 \beta + l^2 a^2 \sin^2 \gamma + 2 k l c a^2 \cdot$$

$$(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + 2 l h c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) + 2 h k a c^2 \cdot$$

$$(\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma).$$

Bei kristallographischen Grundelementen mit Symmetrie (übliche Achsenwahl und Aufstellung) vereinfachen sich die Formeln, und es ist sofort ableitbar, dass dann $R_{[uvw](hkl)}$ für alle gleichwertigen $\langle [uvw] \rangle$ gegenüber einer Fläche (hkl) oder für alle gleichwertigen $\langle (hkl) \rangle$ gegenüber einer Richtung $[uvw]$ eine Konstante bleibt, eben die Konstante $R_{[uvw](hkl)}$, die wir im folgenden nur noch als R bezeichnen wollen. Ist als Cos der Cosinus eines Winkels gegeben oder durch Messungen bestimmt, so lässt sich daraus das R der zugehörigen gleichwertigen Komplexe empirisch bestimmen, z. B. für $[uvw]$ und (hkl) : $R = \frac{\text{Cos}}{hu + kv + lw}$. Für trikline, monokline und orthorhombische Kristalle sind zu $[uvw]$ oder (hkl) nur Elemente gleichwertig, deren uvw bzw. hkl durch Vorzeichenwechsel (ohne Vertauschung) auseinander hervorgehen. Wir führen folgende Bezeichnungen ein:

$$hu + kv + lw = Z_1 + Z_2 + Z_3 = A_0$$

$$\overline{hu} + kv + lw = A_0 - 2Z_1 = A_1$$

$$hu + \overline{kv} + lw = A_0 - 2Z_2 = A_2$$

$$hu + kv + \overline{lw} = A_0 - 2Z_3 = A_3$$

woraus sofort resultiert:

$$\overline{hu} + \overline{kv} + \overline{lw} = \overline{Z_1} + \overline{Z_2} + \overline{Z_3} = -A_0$$

$$hu + \overline{kv} + \overline{lw} = A_0 - 2Z_2 - 2Z_3 = -(A_0 - 2Z_1) = -A_1$$

$$\overline{hu} + kv + \overline{lw} = A_0 - 2Z_1 - 2Z_3 = -(A_0 - 2Z_2) = -A_2$$

$$\overline{hu} + kv + lw = A_0 - 2Z_1 - 2Z_2 = -(A_0 - 2Z_3) = -A_3$$

Das Produkt hu bekommt als Ganzes ein Minuszeichen, wenn h negativ und u positiv oder h positiv und u negativ ist, usw., so dass Gleiches entsteht, ob wir die verschiedenen gleichwertigen Flächen gegenüber einer Geraden oder die verschiedenen gleichwertigen Zonen gegenüber einer Ebene betrachten.

Alle verschiedenen zu einer Form gehörigen Cos-Werte $\text{Cos}_1, \text{Cos}_2, \text{Cos}_3, \text{Cos}_4 \dots$ bezeichnen wir als $\langle \text{Cos} \rangle$ und erhalten sofort $\langle \text{Cos} \rangle = R \sum_1^N A_q$. Es ist N die Zahl einander gleichwertiger Richtungen. Da alle A ganze Zahlen sind, gehen aus dem einen Cosinuswert alle anderen Cosinuswerte für die gleiche Form durch Multiplikation von R mit bestimmten ganzen Zahlen hervor, die aus A_0 und den in Frage kommenden Symmetrien sofort berechenbar sind. Man erhält die verschiedenen A_q -Werte für:

$$\begin{aligned}
 C_1 &\rightarrow +A_0 \\
 C_i &\rightarrow +A_0, -A_0 \\
 C_2 &\rightarrow +A_0, -A_2 \\
 C_s &\rightarrow +A_0, +A_2 \\
 C_{2h} &\rightarrow +A_0, -A_0, +A_2, -A_2 \\
 D_2 &\rightarrow +A_0, -A_1, -A_2, -A_3 \\
 C_{2v} &\rightarrow +A_0, +A_1, +A_2, -A_3 \\
 D_{2h} &\rightarrow +A_0, -A_0, +A_1, -A_1, +A_2, -A_2, +A_3, -A_3
 \end{aligned}$$

Die verschiedenen Cos-Werte sind die Werte $R \cdot A_q$.

Wir nennen die der Symmetrie D_{2h} entsprechende Anordnung die Grundtafel G.

G

hu	+	kv	+	lw	+	A_0	
\overline{hu}		\overline{kv}		\overline{lw}	+ } - }	A_1	
hu		\overline{kv}		lw	+ } - }	A_2	
\overline{hu}		kv		\overline{lw}	+ } - }	A_3	
\overline{hu}		\overline{kv}		\overline{lw}	-	A_0	

Die einzelnen Zeilen entsprechen den verschiedenen Symmetrieoperationen von D_{2h} . Für andere in der Kristallsymmetrie auftretende Symmetrieoperationen kann man analoge zusätzliche Grundtafeln aufstellen, wobei die einzelnen Zeilen neue Summenwerte ergeben, die aus $hu + kv + lw$ durch bestimmte Symmetrieoperationen hervorgehen und die unter

sich (innerhalb der neuen Tafel) in der gleichen Beziehung D_{2h} zueinander stehen. Es sind das die G' -, G'' -, K -, K' -, K'' - und H' -, H'' -Tafeln. Dabei brauchen wir durchwegs nur vier verschiedene Zahlenwerte, da diejenigen innerhalb einer Doppelzeile in der Beziehung $+$ und $-$ zueinander stehen. Entsprechend der analogen Anordnung werden auch die Zeilen der neuen Tafeln in gleicher Reihenfolge A_0, A_1, A_2, A_3 genannt, und wir geben jetzt durch beigefügtes G, G', K usw. an, auf welche Grundtafel sich die Zeile bezieht. Kommen nun für $\langle \text{Cos} \rangle$ die gleichen A -Werte verschiedener Grundtafeln in Frage, so schreiben wir das beispielsweise:

$$A_0 [G + K], \text{ was bedeutet } A_0 [G], A_0 [K] \text{ usw.}$$

Für tetragonale Symmetrie kommt die neue Grundtafel K hinzu, die für gleichwertige uvw Vertauschung von v und u bzw. für gleichwertige hkl Vertauschung von k und h aufweist. Die $A [K]$ -Werte werden wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} A_0 [K] &= \overline{hv} + \overline{ku} + lw && \text{Kopfzeile} \\ A_1 [K] &= \overline{hv} + \overline{ku} + lw && \text{Gegenüber Kopfzeile - im ersten Glied} \\ A_2 [K] &= hv + ku + lw && \text{Gegenüber Kopfzeile - im zweiten Glied} \\ A_3 [K] &= hv + \overline{ku} + \overline{lw} && \text{Gegenüber Kopfzeile - im dritten Glied} \end{aligned}$$

Dann kommen insgesamt für die $\langle \text{Cos} \rangle$ tetragonaler Symmetrieklassen folgende A -Werte in Frage:

$$\begin{aligned} C_4 &\rightarrow (+A_0, -A_3) [G + K] \\ S_4 &\rightarrow (+A_0, -A_3) [G], (-A_0, +A_3) [K] \\ C_{4h} &\rightarrow (+A_0, -A_0, +A_3, -A_3) [G + K] \\ D_4 &\rightarrow (+A_0, -A_1, -A_2, -A_3) [G + K] \\ C_{4v} &\rightarrow (+A_0, +A_1, +A_2, -A_3) [G + K] \\ D_{2d} &\rightarrow (+A_0, -A_1, -A_2, -A_3) [G], (-A_0, +A_1, +A_2, +A_3) [K] \\ D_{4h} &\rightarrow (+A_0, -A_0, +A_1, -A_1, +A_2, -A_2, +A_3, -A_3) [G + K] \end{aligned}$$

Nach dem gleichen Algorithmus ergeben sich aus den Kopfzeilen:

$$\begin{aligned} A_0 [G'] &= hv + kw + lu \\ A_0 [G''] &= hw + ku + lv \\ A_0 [K'] &= \overline{hw} + kv + lu \\ A_0 [K''] &= hu + kw + \overline{lv} \end{aligned}$$

Die entsprechenden A_1 [], A_2 [], A_3 []-Werte entstehen wiederum durch Vorzeichenwechsel, und man erhält für die rhomboedrischen und kubischen Kristallklassen die zu benützenden A der $\langle \text{Cos} \rangle$ -Werte nach folgender Tabelle:

$$\begin{aligned}
 C_3 &\rightarrow +A_0 [G + G' + G''] \\
 C_{3i} &\rightarrow (+A_0, -A_0) [G + G' + G''] \\
 D_3 &\rightarrow +A_0 [G + G' + G''], -A_2 [K], -A_1 [K'], -A_3 [K''] \\
 C_{3v} &\rightarrow +A_0 [G + G' + G''], +A_2 [K], +A_1 [K'], +A_3 [K''] \\
 D_{3d} &\rightarrow (+A_0, -A_0) [G + G' + G''], (+A_2, -A_2) [K], (+A_1, -A_1) [K'], \\
 &\quad (+A_3, -A_3) [K''] \\
 T &\rightarrow (+A_0, -A_1, -A_2, -A_3) [G + G' + G''] \\
 T_h &\rightarrow (+A_0, -A_0, +A_1, -A_1, +A_2, -A_2, +A_3, -A_3) [G + G' + G''] \\
 O &\rightarrow (+A_0, -A_1, -A_2, -A_3) [G + G' + G'' + K + K' + K''] \\
 T_d &\rightarrow (+A_0, -A_1, -A_2, -A_3) [G + G' + G''], (-A_0, +A_1, +A_2, +A_3) \\
 &\quad [K + K' + K''] \\
 O_h &\rightarrow (+A_0, -A_0, +A_1, -A_1, +A_2, -A_2, +A_3, -A_3) [G + G' + G'' + \\
 &\quad K + K' + K'']
 \end{aligned}$$

Für die hexagonale Symmetrie ist es oft zweckmässig, die Flächen- und Kantenindizes auf orthohexagonale Aufstellung zu beziehen. Dann kommen zur Grundtafel G noch Grundtafeln H' und H'' in Frage mit

$$A_0 [H'] = hu_1 + kv_1 + lw_1 \quad \text{und} \quad A_0 [H''] = hu_2 + kv_2 + lw_2$$

Jetzt gelten für die verschiedenen Symmetrien folgende zu $\langle \text{Cos} \rangle$ gehörige A-Werte:

$$\begin{aligned}
 C_3 &\rightarrow +A_0 [G + H' + H''] \\
 C_{3i} &\rightarrow (+A_0, -A_0) [G + H' + H''] \\
 D_3 &\rightarrow (+A_0, -A_1) [G + H' + H''] \\
 C_{3v} &\rightarrow (+A_0, +A_1) [G + H' + H''] \\
 D_{3d} &\rightarrow (+A_0, -A_0, +A_1, -A_1) [G + H' + H''] \\
 C_{3h} &\rightarrow (+A_0, +A_3) [G + H' + H''] \\
 D_{3h} &\rightarrow (+A_0, -A_1, +A_2, +A_3) [G + H' + H''] \\
 C_6 &\rightarrow (+A_0, -A_3) [G + H' + H''] \\
 C_{6h} &\rightarrow (+A_0, -A_0, +A_3, -A_3) [G + H' + H''] \\
 D_6 &\rightarrow (+A_0, -A_1, -A_2, -A_3) [G + H' + H''] \\
 C_{6v} &\rightarrow (+A_0, +A_1, +A_2, -A_3) [G + H' + H''] \\
 D_{6h} &\rightarrow (+A_0, -A_0, +A_1, -A_1, +A_2, -A_2, +A_3, -A_3) \\
 &\quad [G + H' + H'']
 \end{aligned}$$

Die R sind für die drei Tafeln als $K[G]$, $K[H']$ und $K[H'']$ verschieden, stehen jedoch in enger Beziehung zueinander. Aus einem Winkelwert lassen sich die Winkelwerte der gleichwertigen Elemente zum gleichen Grundelement sofort berechnen. In verwandter Weise lassen sich Strukturfaktoren und Elektronendichten in der Kristallstrukturlehre unter Benutzung von Punktformen und Flächenformen ableiten, so dass das skizzierte Vorgehen in der beschreibenden Kristallographie hierfür eine erwünschte Vorstudie darstellt.

Eingegangen: 6. Februar 1951.