

# Grundlage der Kristallographie

Gerhard Heide

Institut für Mineralogie

Professur für Allgemeine und Angewandte Mineralogie  
Brennhausgasse 14

03731-39-2665 oder -2628

[gerhard.heide@mineral.tu-freiberg.de](mailto:gerhard.heide@mineral.tu-freiberg.de)

donnerstags, 14–15:30 Uhr  
nicht am 9. November 2006

*Kristallographie ist die Wissenschaft vom kristallinen Zustand der Materie.*

## Kristalle

- ▶ Natur- oder Kunstprodukte
- ▶ anorganische oder organische Verbindungen
- ▶ Einkristalle oder kristalline Aggregate

## Gegenstand

- ▶ atomaren Bau
- ▶ Symmetrieeigenschaften
- ▶ physikalischen und chemischen Eigenschaften
- ▶ Wachstum und Kristallisation

## Teilgebiete

- ▶ Morphologie und Kristallwachstum
- ▶ geometrische und theoretische Kristallographie
- ▶ Strukturanalyse
- ▶ Kristallchemie
- ▶ Kristallphysik (z. B. Kristalloptik, Piezoelektrizität, Magnetismus)

*Brockhaus, 19. Auflage, Bd. 24*

## Ein Gestein ist ein

- ▶ vielkörniges (heterogenes),
- ▶ natürliches
- ▶ Mineralaggregat,
- ▶ mit einem homogenen Gefüge.
- ▶ Gesteine treten geologisch selbstständig auf.

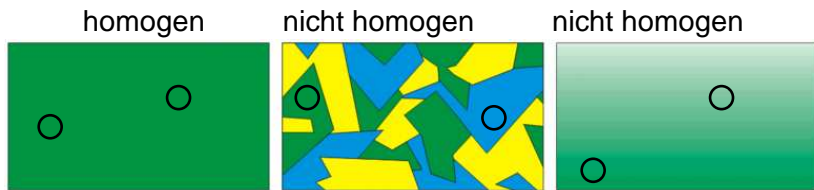
## Ein Mineral ist ein

- ▶ natürlicher,
- ▶ anorganischer,
- ▶ makroskopisch homogener
- ▶ meistens kristalliner Festkörper.

## Ein Kristall ist

- ▶ ein Festkörper, der
- ▶ unabhängig von seiner äußeren Gestalt
- ▶ einen reell-homogenen,
- ▶ anisotropen,
- ▶ diskontinuierlichen atomarem Aufbau aufweist.
- ▶ Die Bausteine (Atome, Ionen, Moleküle) sind räumlich-periodisch angeordnet.

*Brockhaus, 19. Auflage, Bd. 24*



*Eigenschaft* <sub>$x,y,z$</sub>



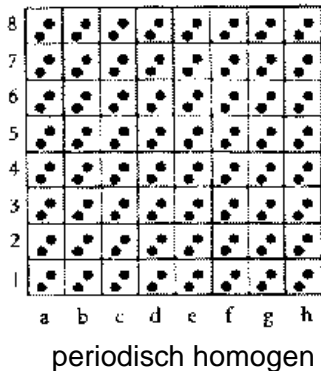
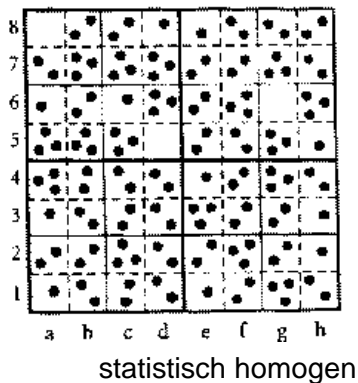
=

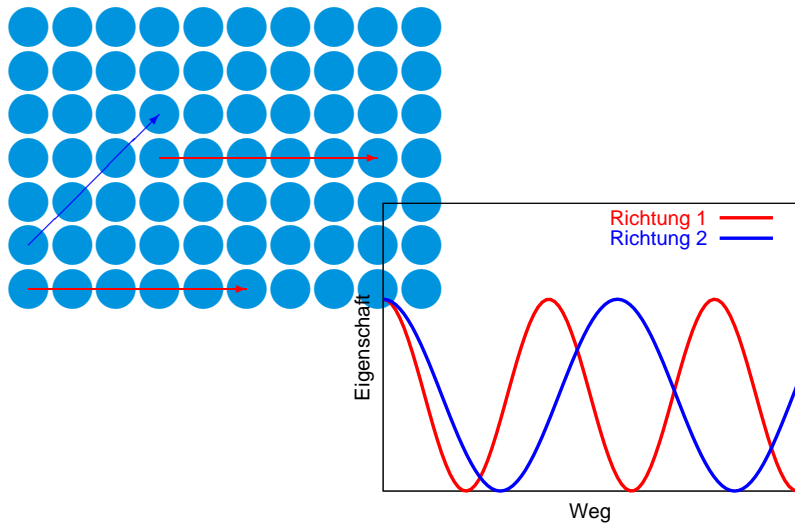
≠

≠

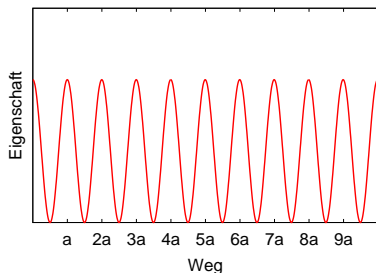
*Eigenschaft* <sub>$x+\Delta x,y+\Delta y,z+\Delta z$</sub>







$$\text{Eigenschaft}_{x,y,z} = \text{Eigenschaft}_{x+n\cdot\vec{a},y+m\cdot\vec{b},z+n\cdot\vec{c}}$$



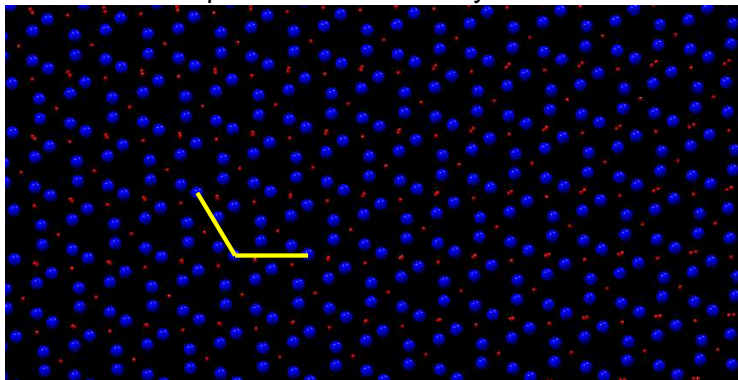
- ▶ invariant gegen Verschiebung (Deckung)
- ▶ des Kristalls oder des Beobachtungsortes
- ▶ um Basisvektoren  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  und/oder  $\vec{c}$

⇒ Fernordnung

⇒ Fundamentale Eigenschaft der Kristalle



- ▶ Kristall: Festkörper mit Translationssymmetrie

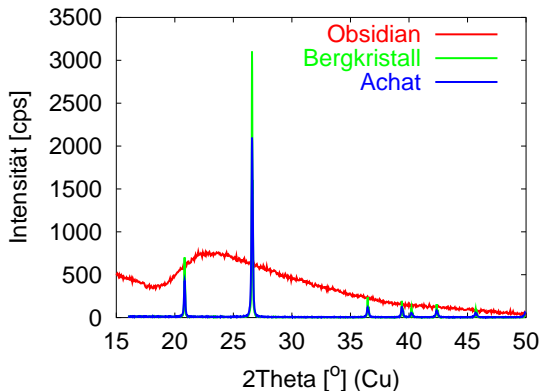


*Quarz-Struktur*

Stufe:  $\approx 150 \text{ cm}^3$ ,  $\approx 400 \text{ g}$ ,  $\approx 4.3 \text{ mol}$ ,  $\approx 2.6 \cdot 10^{24} \text{ SiO}_2$

## Praktisches Kriterium

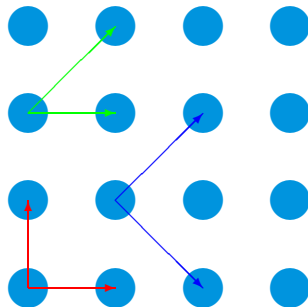
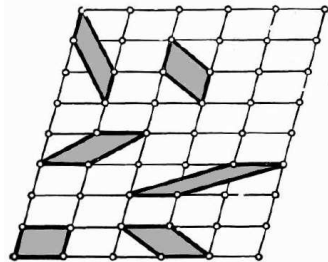
- ▶ „scharfe“ *Bragg*-Reflexe:  
Beugung von  
Röntgen-, Elektronen- oder Neutronen-Strahlung



## Basisvektoren $\vec{a}$ , $\vec{b}$ , $\vec{c}$ ?

- ▶ unendlich viele, aber
- ▶ linear unabhängig, nicht-koplanar
- ▶ möglichst rechtwinklig
- ▶ möglichst kurz

→ Elementarzelle

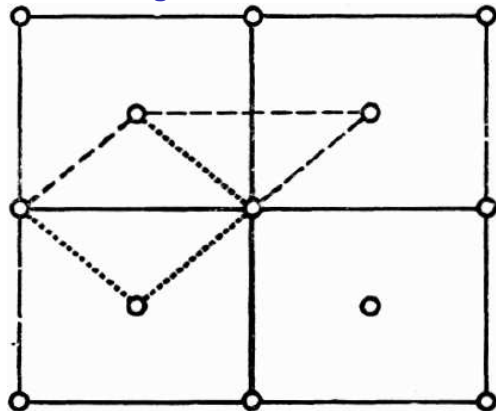


## 7-Kristallsysteme – 7 „primitive“ Elementarzellen

Gitterkonstanten (Bedingungen)

Achsen	Winkel	unabh. Konst.	Kristallsystem
–	–	6	triklin
–	$\alpha = \gamma = 90^\circ$	4	monoklin
$ \vec{a}  =  \vec{b} $	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	2	hexagonal
$ \vec{a}  =  \vec{b}  =  \vec{c} $	$\alpha = \beta = \gamma$	2	trigonal
–	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3	rhomisch
$ \vec{a}  =  \vec{b} $	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2	tetragonal
$ \vec{a}  =  \vec{b}  =  \vec{c} $	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	1	kubisch

Zentrierungen?



tetragonal-  
flächenzentriert

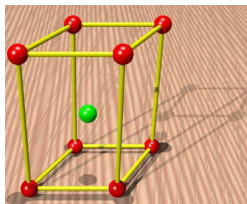
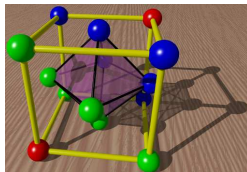
## 7 zentrierte Elementarzellen

I – Innenzentrierung

F – allseitige Flächenzentrierung

A, B, C – einseitige Flächenzentrierung

- ▶ kubisch innenzentriert
- ▶ kubisch flächenzentriert
- ▶ tetragonal innenzentriert
- ▶ rhombisch C-zentriert
- ▶ rhombisch F-zentriert
- ▶ rhombisch I-zentriert
- ▶ monoklin B-zentriert



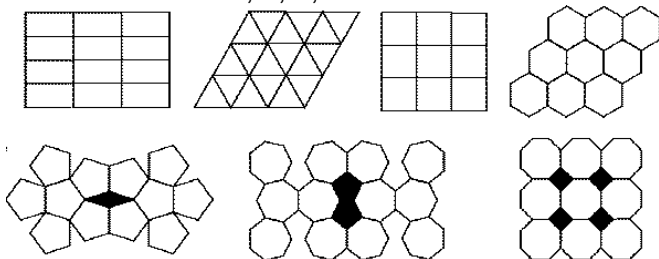
## Symmetrie

- ▶ Symmetrie:  
gesetzmäßige Wiederholung eines Motivs
- ▶ Symmetrieelement: Deckoperation
- ▶ Symmetrieelement: Bildungsvorschrift  
14 Bravais-Gitter = 14 Translationsgitter  
14 Translationssymmetrie-Vorschriften



## Raumausfüllung und Symmetrie

- ▶ 14 Parallel-Epipede:  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$
- ▶ lückenloses Ausfüllen des Raumes durch Translation
- ▶  $\Rightarrow$  starke Einschränkung für weitere Symmetrieelemente  
Drehachsen: nur 2, 3, 4, 6

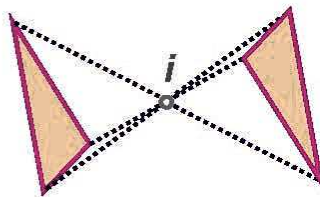
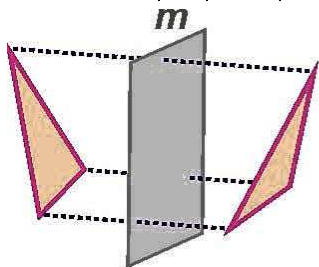


$\phi$		n	Symbol
$0^\circ$	—	Identi-	—
$360^\circ$	$= \frac{360}{1}$	tät	1
▶ $180^\circ$	$= \frac{360}{2}$	2	◐
$120^\circ$	$= \frac{360}{3}$	3	▲
$90^\circ$	$= \frac{360}{4}$	4	◆
$60^\circ$	$= \frac{360}{6}$	6	●

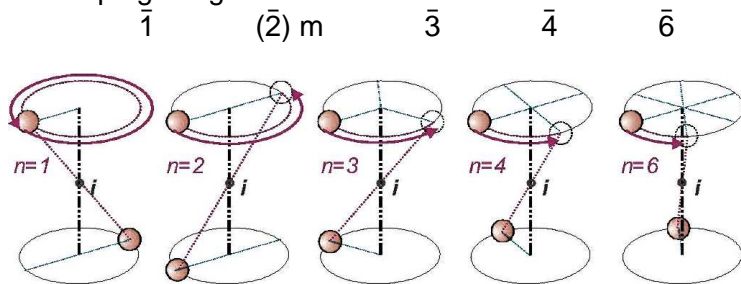
- ▶ eigentliche, kongruente Symmetrieoperation  
Symmetrieelemente I. Art

- ▶ uneigentliche (enantimorphe), keine kongruente Symmetrieelemente II. Art
- Kopplung** von Drehung und Inversion

$\phi$	n		Symbol
$0^\circ$	2	$1, i$	$\circ$
$360^\circ$	2	$\bar{1}, i$	$\circ$
▶ $180^\circ$	2	$\bar{2}$	$\diamond m$
$120^\circ$	6	$\bar{3}$	$\triangle$
$90^\circ$	4	$\bar{4}$	$\blacklozenge \blacklozenge$
$60^\circ$	6	$\bar{6}$	$\blacklozenge \blacklozenge$



- ▶ Drehinversionsachsen: Kombination Drehung und Punktspiegelung



## Symmetrieelemente – Gruppen – Untergruppen

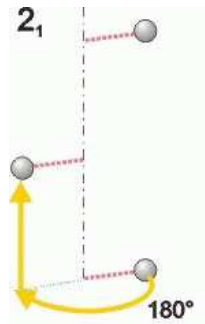
- ▶ 1: 1 triklin-pedial
- ▶ 2: 1, 2 monoklin-sphenoidisch
- ▶ 3: 1, 3 trigonal-pyramidal
- ▶ 4: 1, 2, 4 tetragonal-pyramidal
- ▶ 6: 1, 2, 3, 6 hexagonal-pyramidal
- ▶  $\bar{1}$ : 1,  $\bar{1}$  triklin-pinakoidal
- ▶ m: 1, m monoklin-domatisch
- ▶  $\bar{3}$ : 1,  $\bar{1}$ , 3,  $\bar{3}$  trigonal-rhomboedrisch
- ▶  $\bar{4}$ : 1, 2,  $\bar{4}$  tetragonal-disphenoidisch
- ▶  $\bar{6}$ : 1, m, 3,  $\bar{6}$  hexagonal-dipyramidal

triklin	1, $\bar{1}$
monoklin	1, 2, m, $\bar{1}$
rhombisch	1, 2, m, $\bar{1}$
tetragonal	1, 4, $\bar{4}$ , 2, m, $\bar{1}$
trigonal	1, 3, $\bar{3}$ , 2, m, $\bar{1}$
hexagonal	1, 6, $\bar{6}$ , 2, m, $\bar{1}$
kubisch	1, 3, 4, 2, m, $\bar{1}$

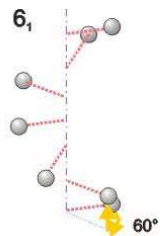
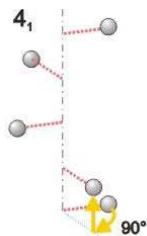
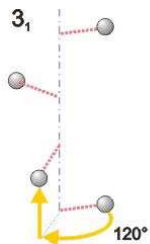
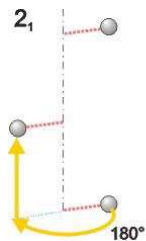
- ▶ vereinbar mit Translationssymmetrie der 14 Bravais-Gitter
- ▶ Symmetrieelemente ohne Translationsanteil
- ▶ anwendbar auf atomare Struktur und Kristallmorphologie

- ▶ Schraubenachsen: Kombination Drehung und Translation
- ▶ Identität nach n Symmetrieeoperationen
- ▶ Translationsrichtung  $\parallel$  Drehachse (Invarianz der Achse)
- ▶ Translationsbetrag \* Zähligkeit n = Identitätsabstand  $\tau * \lambda$   
 $\nu = \text{Translationsbetrag} / \text{Identitätsabstand} = \lambda / \text{Zähligkeit}$

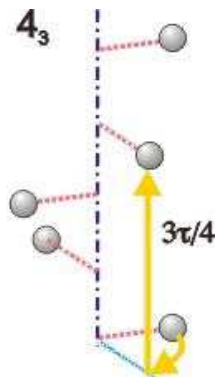
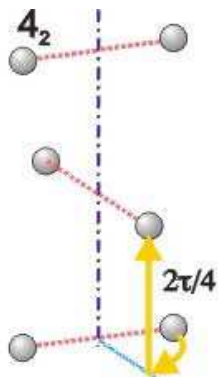
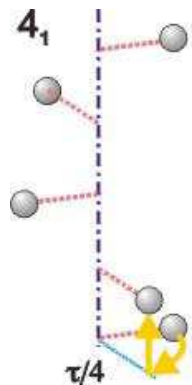
Zähligkeit n	$\lambda$	$\nu$	SE	Symbol
2	0	0	2	●
	1	1/2	$2_1$	⌘
	2	1	2	●



Zähligkeit $n$	kleinstes $\nu$
2	$1/2$
3	$1/3$
4	$1/4$
6	$1/6$

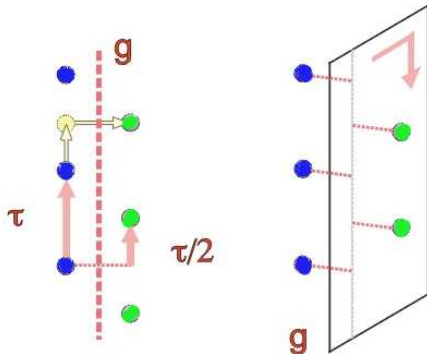


Zähligkeit n	$\lambda$	$\nu$	SE	Symbol
3	0	0	3	▲
	1	1/3	3 <sub>1</sub>	▲
	2	2/3	3 <sub>2</sub>	▲
	3	1	3	▲
4	0	0	4	◆
	1	1/4	4 <sub>1</sub>	◆
	2	1/2	4 <sub>2</sub>	◆
	3	3/4	4 <sub>3</sub>	◆
	4	1	4	◆



Zähligkeit n	$\lambda$	$\nu$	SE	Symbol
6	0	0	6	●
	1	1/6	6 <sub>1</sub>	↻
	2	1/3	6 <sub>2</sub>	↻
	3	1/2	6 <sub>3</sub>	↻
	4	2/3	6 <sub>4</sub>	↻
	5	5/6	6 <sub>5</sub>	↻
	6	1	6	●

- ▶ Gleitspiegelebene Kombination Spiegelung und Translation
- ▶ Identität nach 2 Symmetrieoperationen:  $\nu = 1/2$
- ▶ Translationsrichtung  $\parallel$  Spiegeleben (Invarianz der Ebene)  
 $\nu = \text{Translationsbetrag} / \text{Identitätsabstand} = \lambda / \text{Zähligkeit}$



SE	$\vec{r}$		⊥
<i>a</i>	$\vec{a}/2$	---	.....
<i>b</i>	$\vec{b}/2$		
<i>c</i>	$\vec{c}/2$		
<i>n</i>	$\frac{\vec{a} + \vec{b}}{2}, \frac{\vec{b} + \vec{c}}{2}, \frac{\vec{c} + \vec{a}}{2},$		
	nur tetragonal und kubisch:	$\frac{\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}}{2}$	
<i>d</i>	$\frac{\vec{a} + \vec{b}}{4}, \frac{\vec{b} + \vec{c}}{4}, \frac{\vec{c} + \vec{a}}{4},$		
	nur tetragonal und kubisch:	$\frac{\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}}{4}$	

- ▶ Translationssymmetrie-Elemente  
in den 7 Kristallsystemen

Christian Samuel Weiss (1780-1856)

- ▶ 7 primitive Bravais-Gitter P
- ▶ 7 zentrierte Bravais-Gitter I, F, A, B, C

Auguste Bravais (1811-1863)

- ▶ Symmetrie-Elemente ohne Translationsanteil

- ▶ 4 Drehachsen I. Art 2, 3, 4, 6
- ▶ Inversion und 4 Drehachsen II. Art  $\bar{1}$ , m,  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$ ,  $\bar{6}$

- ▶ Symmetrie-Elemente mit Translationsanteil

- ▶ 11 Schraubenachsen  $2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3$   
 $6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$
- ▶ 11 Gleitspiegelebenen a, b, c, n, d

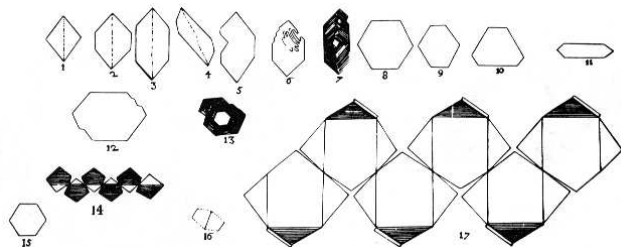
- ▶ Symmetrie-Elemente ohne Translationsanteil
  - ⇒ 32 Punktgruppen (32 Kristallklassen)  
J. C. F. Hessel (1796–1872)
  - ⇒ Invarianz eines Punktes  
(Schnittpunkt der Symmetrieelemente)
  - ⇒ Beschreibung von äußeren Kristallformen
- ▶ Symmetrie-Elemente mit Translationsanteil
  - ⇒ 230 Raumgruppen  
A. M. Schönflies (1853–1928)  
E. S. Federov (1853–1919)
  - ⇒ Invarianz des Raumes
  - ⇒ Beschreibung der atomaren Kristallstruktur

**Nicolaus Steno (1638-1686)**

**(Niels Stensen)**

1669 Gesetz der Winkelkonstanz

⇒ Winkel zwischen gleichen Flächen eines Minerals ist immer gleich, unabhängig von Bildungsbedingungen und Ausbildung



Skizzen von Bergkristall und Hämatit

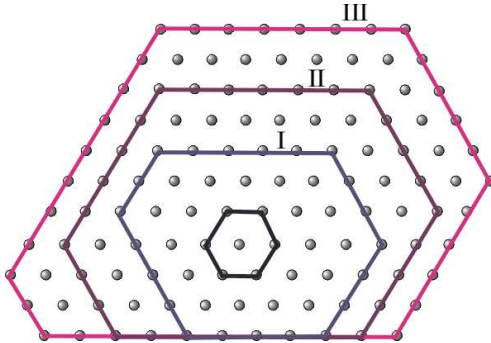
## 1688 Guglielmini

- ▶ Gesetz der Winkelkonstanz: viele weitere Kristalle
- ▶ Konstanz der Spaltbarkeit

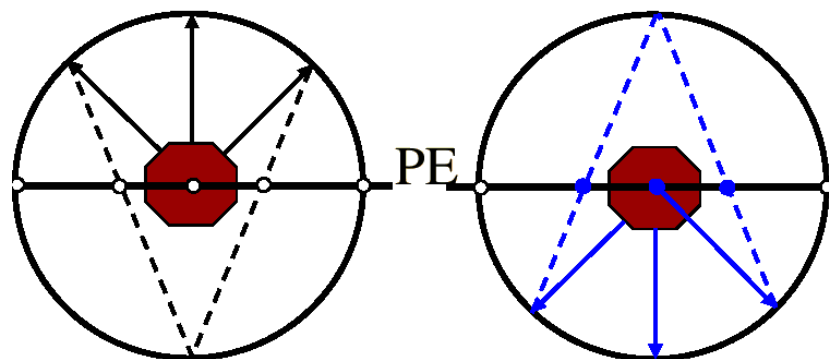
⇒ Winkeltreue Projektion eines Kristalls

⇒ Stereographische Projektion mit Wulfschen Netz

# Gesetz der Winkelkonstanz – Kristallwachstum 35

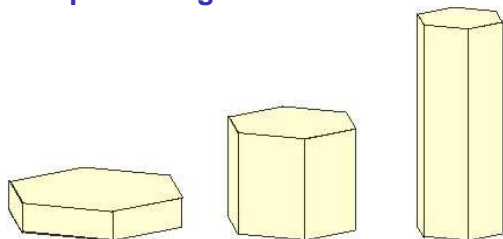


- ▶ Anisotropie der Wachstumsgeschwindigkeit
- ▶ Wachstumsform  $\neq$  Gleichgewichtsform
- ▶ Bestimmung des Normalenwinkels

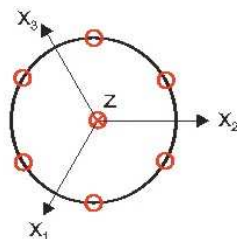


- ▶ Errichtung der Flächennormalen vom Ursprung
- ▶ Projektion des Durchstoßpunkts durch die Kugel auf den Südpol
- ▶ Durchstoßpunkt durch Projektionsebene
- ▶ Poldistanz  $\rho$ , Azimut  $\phi$

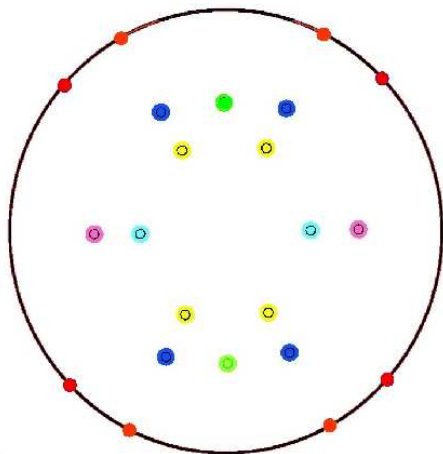
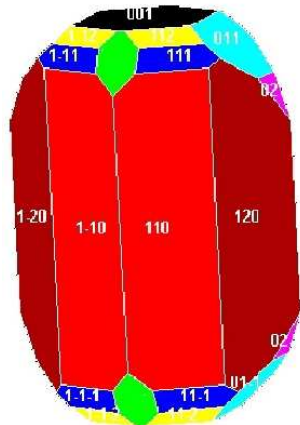
## Beispiel Hexagonales Prisma



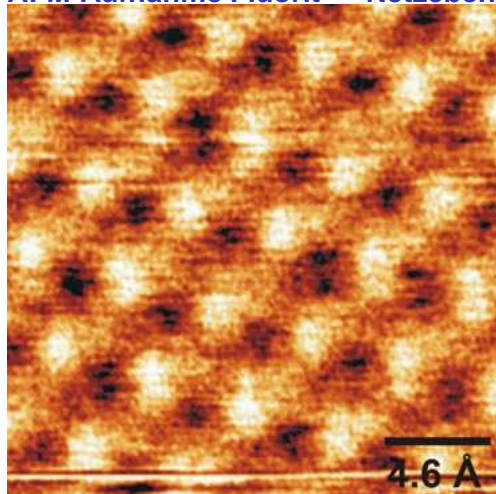
$\rho$	90	90	90	90	90	90	0	180
$\phi$	30	90	150	210	270	330	0	0



## Beispiel Topas



AFM-Aufnahme Fluorit → Netzebenen



# Kristallflächen

40

## Rationalitätengesetz

- ▶ Translationsgitter
- ▶ Netzebene: 3 Gitterpunkte
- ▶ Netzebenennormale OM

$$\cos \xi_a = \frac{\overline{OM}}{\overline{OA}}$$

$$\cos \xi_b = \frac{\overline{OM}}{\overline{OB}}$$

$$\cos \xi_c = \frac{\overline{OM}}{\overline{OC}}$$

- ▶ Verhältnis

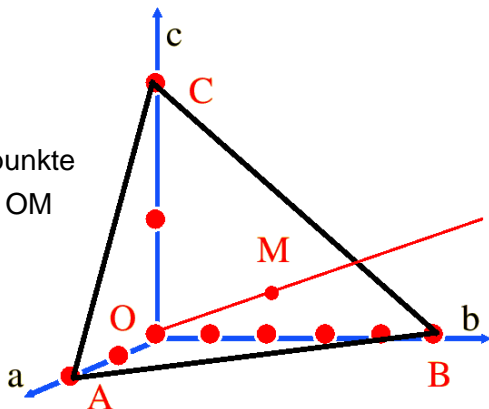
$$\cos \xi_a : \cos \xi_b : \cos \xi_c$$

$$= \frac{1}{\overline{OA}} : \frac{1}{\overline{OB}} : \frac{1}{\overline{OC}}$$

$$= \frac{1}{ma} : \frac{1}{nb} : \frac{1}{pc}$$

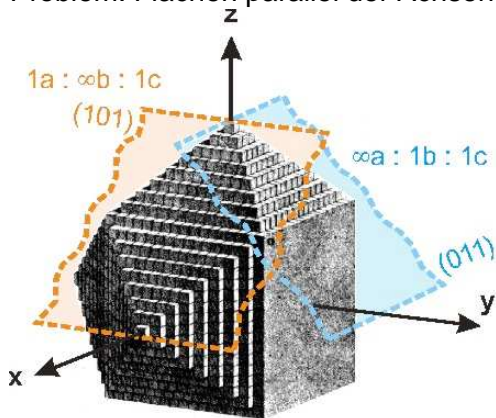
- ▶ 1810: Christian Samuel Weiss

Achsenabschnitte  $m, n, p$ : ganze oder rationale (kleine) Zahlen



## Rationalitätengesetz

- ▶ Winkelmessung  $\Rightarrow \frac{a}{b} : 1 : \frac{c}{b}$
- ▶ Problem: Flächen parallel der Achsen (Schnittpunkt  $\infty$ )



## Millersche Indizes

- ▶ Ersetzung (Miller 1846)

$$h = \frac{1}{m}$$

$$k = \frac{1}{n}$$

$$l = \frac{1}{p}$$

$$\cos \xi_a : \cos \xi_b : \cos \xi_c = \frac{h}{a} : \frac{k}{b} : \frac{l}{c}$$

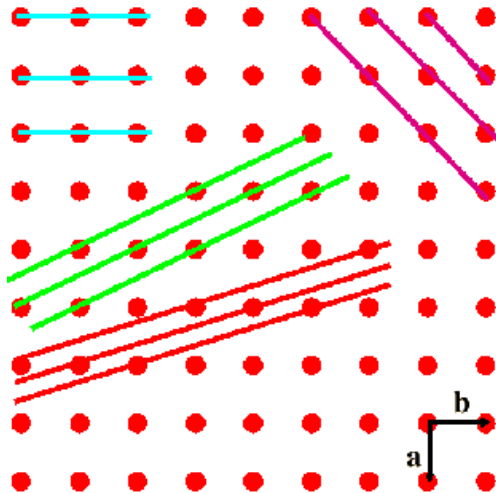
- ▶ (hkl) reziproken ganzzahligen teilerfremden

Achsenabschnitte

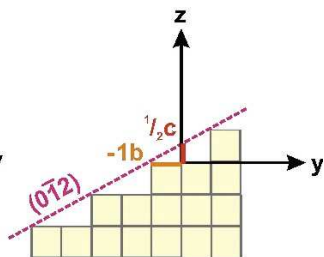
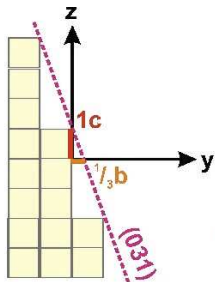
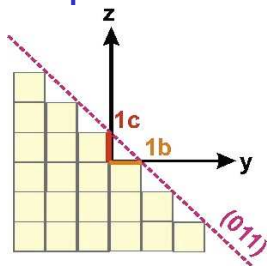
einer Netzebene bzw.

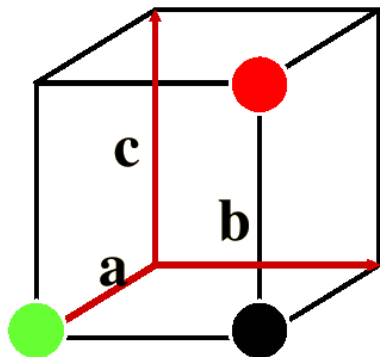
eine Schar unendlich vieler paralleler Netzebenen

## Beispiele



## Beispiele





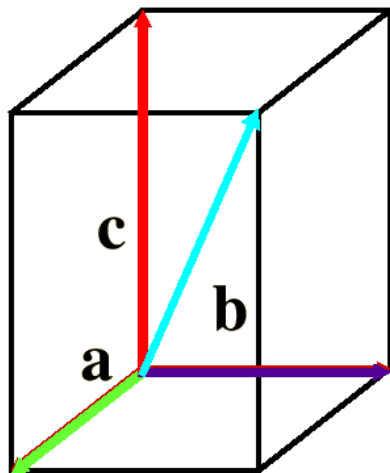
▶ ●  $\cdot 100 \cdot$

▶ ●  $\cdot 110 \cdot$

▶ ●  $\cdot 111 \cdot$


▶  $\vec{R} = u \cdot \vec{a} + v \cdot \vec{b} + w \cdot \vec{c}$

▶  $\cdot uvw \cdot$



▶  $\lambda \cdot \vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$

▶  [100]

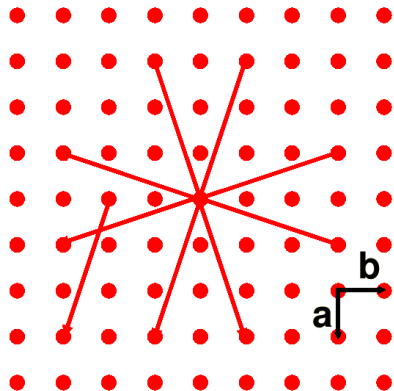
▶  [001]


▶  [010]

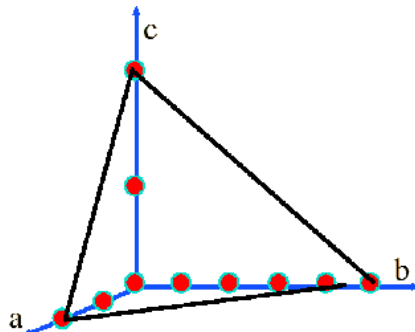
▶  [111]

▶  $\vec{R} = u \cdot \vec{a} + v \cdot \vec{b} + w \cdot \vec{c}$

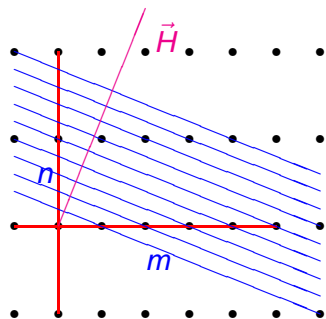
▶ [uvw]



- ▶   $[3\bar{1}0]$
- ▶ Schar symmetrisch äquivalenter Gittergeraden:  
 $\langle 310 \rangle$



- ▶  $m=2, n=5, p=2$   
 $\Rightarrow \frac{1}{2}, \frac{1}{5}, \frac{1}{2} \Rightarrow \frac{10}{2}, \frac{10}{5}, \frac{10}{2}$   
 $\Rightarrow (525)$
- ▶  $\vec{H} = h \cdot \vec{a}^* + k \cdot \vec{b}^* + l \cdot \vec{c}^*$   
 $\perp (hkl)$   
 nur im Kubischen:  
 $\vec{H}_{ijk} \parallel \vec{R}_{ijk}!$



Achsenabschnitte  $m$  und  $n$

$$y = q \cdot x + n$$

$$y = -\frac{n}{m}x + n$$

$$1 = \frac{x}{m} + \frac{y}{n}$$

$$m = 4.0, n = 0.8$$

$$m = 5.0, n = 1.0$$

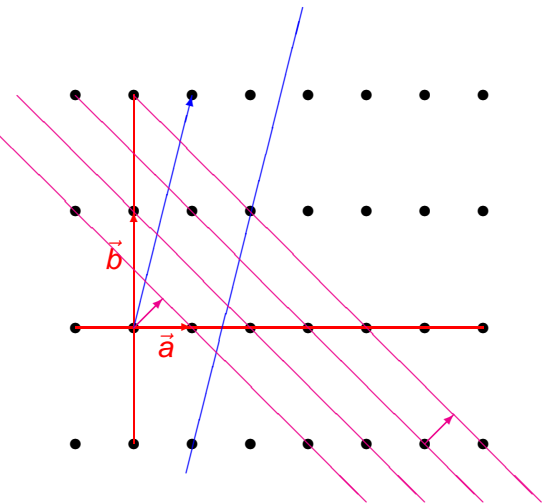
$$m = 1.0, n = 0.2$$

$$y_H = \frac{m}{n}x$$

$$1 = m \cdot x - n \cdot y$$

$$y_H = 5.0 \cdot x$$

Netzebenen-  
normale  $\vec{H}$



Gitterpunkt  $\cdot u v w \cdot [1 2 0]$

$$\vec{R} = u \cdot \vec{a} + v \cdot \vec{b} + w \cdot \vec{c}$$

Gittergerade  $[u v w] [1 2 0]$

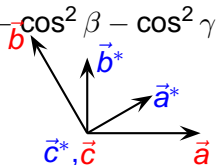
$$\lambda \vec{R} = \vec{R}_2 - \vec{R}_1$$

Netzebene  $(h k l) (1 2 0)$

$$\vec{H} = h \cdot \vec{a}^* + k \cdot \vec{b}^* + l \cdot \vec{c}^*$$

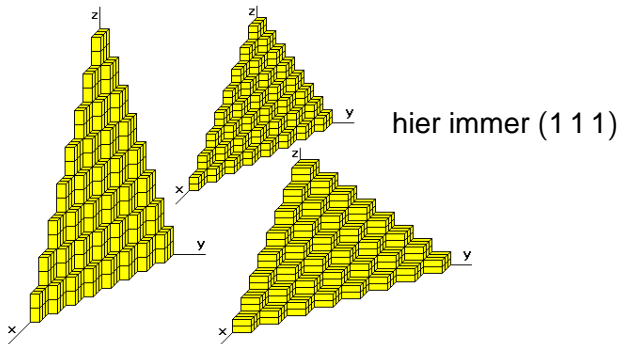
$$|\vec{H}| = 1/d \quad (\text{„d-Wert“})$$

- ▶  $\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$   $\perp \vec{b} - \vec{c}$ -Ebene
- ▶  $\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$   $\perp \vec{c} - \vec{a}$ -Ebene
- ▶  $\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$   $\perp \vec{a} - \vec{b}$ -Ebene
- ▶  $V_{EZ} = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$  (Spatprodukt)  
 $= Qabc$  mit  
 $Q^2 = 1 + 2 \cdot \cos \alpha \cdot \cos \beta \cdot \cos \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma$
- ▶  $V_{EZ}^* = 1/V_{EZ} = \vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \times \vec{c}^*)$



## Millersche Indizes

- ▶ immer ganze Zahlen
- ▶ fast immer klein (meist  $< 10$ )
- ▶ kein  $\infty$
- ▶ unabhängig von der Metrik der Elementarzelle



## d-Werte

▶  $1/d = |\vec{H}| = |h \cdot \vec{a}^* + k \cdot \vec{b}^* + l \cdot \vec{c}^*|$

▶ kubisch:  $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$

▶ tetragonal:  $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$

▶ rhombisch:  $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$

▶ monoklin:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2 \cdot \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \cdot \sin^2 \beta} - \frac{2 \cdot h \cdot l \cdot \cos \beta}{a \cdot c \cdot \sin^2 \beta}$$

▶ d-Werte: „Fingerabdruck“ eines Kristalls

⇒ Identifizierung durch Röntgenbeugung

## Winkel zwischen Netzebenen

- ▶  $\cos \phi = \frac{\vec{H}_1 \cdot \vec{H}_2}{H_1 H_2}$
- ▶  $\cos \phi = d_1 \cdot d_2 \cdot$   
 $(h_1 h_2 a^{*2} + k_1 k_2 b^{*2} + l_1 l_2 c^{*2}$   
 $+ (h_1 k_2 + h_2 k_1) a^* b^* \cos \gamma^*$   
 $+ (k_1 l_2 + k_2 l_1) b^* c^* \cos \alpha^*$   
 $+ (l_1 h_2 + l_2 h_1) c^* a^* \cos \beta^*)$

## Winkel zwischen Netzebenen: kubisches Kristallsystem

$$\blacktriangleright \cos \phi = d_1 \cdot d_2 \cdot \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2}$$

$$\blacktriangleright \cos \phi = \frac{a}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}} \cdot \frac{a}{\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \cdot \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2}$$

$$\blacktriangleright \cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

$$\blacktriangleright \angle((100), (111))? \quad \cos \phi = \frac{1}{\sqrt{1 \cdot 3}}, \phi = 54.73^\circ$$

$$\blacktriangleright \angle((110), (111))? \quad \cos \phi = \frac{2}{\sqrt{2 \cdot 3}}, \phi = 35.26^\circ$$

$$\blacktriangleright \angle((111), (\bar{1}11))? \quad \cos \phi = \frac{1}{3}, \phi = 70.52^\circ$$

## Zonen

- ▶ Schnittkante von zwei Netzebenen: Gitterrichtung

$$\vec{R} = \vec{H}_1 \times \vec{H}_2$$

- ▶  $\vec{R} = \frac{1}{F}$

$$\left( (k_1 l_2 - k_2 l_1) \vec{a} + (l_1 h_2 - l_2 h_1) \vec{b} + (h_1 k_2 - h_2 k_1) \vec{c} \right)$$

- ▶  $\vec{R} = \frac{1}{F} \begin{vmatrix} \vec{a} & \vec{b} & \vec{c} \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix}$

## Zonen

▶  $u : v : w = (k_1 l_2 - k_2 l_1) : (l_1 h_2 - l_2 h_1) : (h_1 k_2 - h_2 k_1)$

▶ Zonengleichung:

$h_1$	$k_1$	$l_1$	$h_1$	$k_1$	$l_1$
	↘		↘		
$h_2$	$k_2$	$l_2$	$h_2$	$k_2$	$l_2$
	[	u	v	w	]

↘ „+“, ↙ „-“

▶ Eine Netzebene gehört zu einer Zone, wenn  
 $h \cdot u + k \cdot v + l \cdot w = 0$

## Zonengleichung

Fläche zwischen 2 Richtungen

▶  $\vec{H} = \vec{R}_1 \times \vec{R}_2$

▶  $\vec{H} = F \cdot$

$$\left( (v_1 w_2 - v_2 w_1) \vec{a}^* + (w_1 u_2 - w_2 u_1) \vec{b}^* + (u_1 v_2 - u_2 v_1) \vec{c}^* \right)$$

▶ Zonengleichung:

$u_1$	$v_1$	$w_1$	$u_1$	$v_1$	$w_1$
	$\swarrow$	$\swarrow$	$\swarrow$		
$u_2$	$v_2$	$w_2$	$u_2$	$v_2$	$w_2$
	$[h \quad k \quad l]$				

## Tracht

Art der Flächen an einem Kristall

### Calcit



Prisma  
{11 $\bar{2}$ 0}



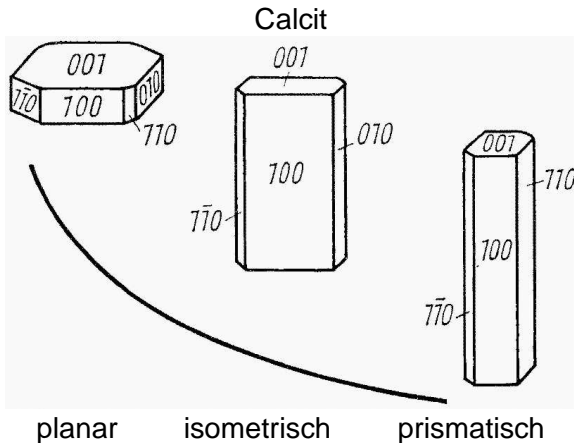
Skalenoeder  
{21 $\bar{3}$ 1}



Rhomboeder  
{10 $\bar{1}$ 1}

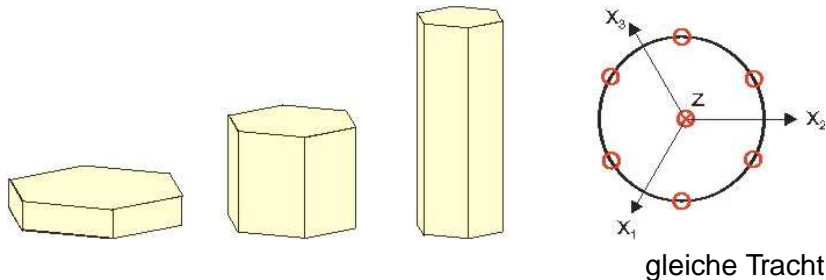
## Habitus

relatives Größenverhältnis der Flächen an einem Kristall

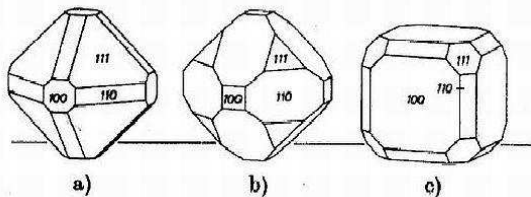


## Habitus

relatives Größenverhältnis der Flächen an einem Kristall



## verschiedener Habitus – gleiche Tracht Galenit



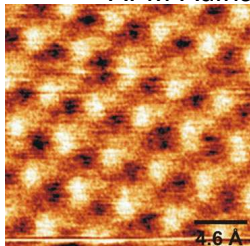
## Habitus

- ▶ planar:  
blättrig, schuppig, plattig, dicktafelig
- ▶ isometrisch
- ▶ prismatisch:  
säulig (kurzsäulig), stenglig, nadelig, fasrig, Whisker

## Korrespondenz von Struktur und Morphologie

- ▶ Jede morphologische Kristallfläche verläuft parallel zu einer Schar von Netzebenen.

AFM-Aufnahme Fluorit → Netzebenen



- ▶ Symmetrie einer Kristallform ist höher oder gleich der Symmetrie der Struktur

## Definition

- ▶ Kombination von Symmetrieelementen  
⇒ unabhängiges Auftreten
- ▶ kristallographische Anordnung ⇒ 7 Kristallsysteme
- ▶ Gruppe von Symmetrieelemente ⇒ Gruppentheorie
- ▶ Invarianz der Punkte
  - ▶ Gruppe von Symmetrieelementen, durch die alle Objekte (Punkte, Kanten, Flächen) nach einer bestimmten Anzahl von Symmetrieelementen in sich selbst überführt werden.
  - ▶ Gruppe von Symmetrieelementen, bei der 1 Punkt unverändert bleibt.  
(Mittelpunkt des Kristalls, Koordinatenursprung, Schnittpunkt der Symmetrieelemente)
- ▶ Name: äußere Form der allgemeinen Fläche
- ▶ internationales Symbol nach Herman-Mauguin

## Allgemeine Form

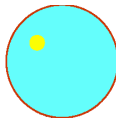
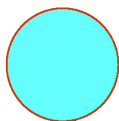
- ▶ Form: Wirkung von Symmetrieelementen  $\Rightarrow$  neue Flächen
- ▶ Menge aller symmetrisch äquivalenter Flächen:  $\{hkl\}$
- ▶ Allgemeine Form: Flächen mit Symmetrie 1  
 $\Rightarrow$  Flächepole nicht auf Symmetrieelementen
- ▶ Spezielle Form: Flächen mit speziellen Lagen
  - ▶ verminderte Zähligkeit
  - ▶ Flächepole liegen auf Symmetrieelementen
  - ▶ Flächensymmetrie  $> 1$
- ▶ Grenzform:  $\rho$  bzw.  $\phi$  Grenzwerte ( $0^\circ$ ,  $90^\circ$ , etc.)
  - ▶ gleiche Zähligkeit
  - ▶ gleiche Flächensymmetrie
- ▶ FACES 3.7, crystal drawing  
[http://un2sg4.unige.ch/athena/html/sc\\_prg.html](http://un2sg4.unige.ch/athena/html/sc_prg.html)

## **Triklines Kristallsystem**

- ▶  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  beliebig
- ▶ Aufstellung:  $c < a < b, \alpha, \beta > 90^\circ$
- ▶ mögliche Symmetrieelemente:  $1, \bar{1}$

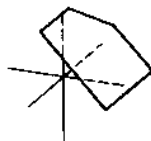
## Triklin-pediale Klasse: 1

- ▶ Symmetrieelemente: 1

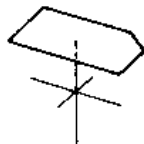


- ▶ Zähligkeit 1

- ▶ geschlossene Form: mindestens 4 Pedien

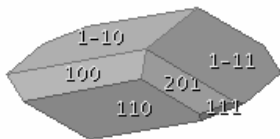


Pedion  
(hkl)



Basis- (001),  
seitliches (010),  
vorderes (100)

Pedion



Magnesio-Axinit

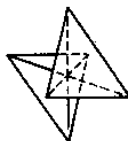
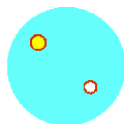
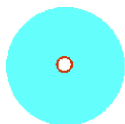
## **Triklin-pediale Klasse: 1**

Beispiele: 52 Minerale  $\approx$  1 %

- ▶ Kaolinit,  $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ , Schichtsilicat, VIII/H.25-10  
5.1400, 8.9300, 7.3700, 91.80, 104.50, 90.01
- ▶ Magnesio-Axinit,  $\text{Ca}_2\text{MgAl}_2(\text{BO}_3)\text{Si}_4\text{O}_{12}(\text{OH})$ , Ringsilicat, VIII/E.06-10  
8.9330, 9.1550, 7.1210, 102.59, 98.28, 88.09
- ▶ Analcim,  $\text{NaAlSi}_2\text{O}_6 \cdot (\text{H}_2\text{O})$ , Zeolith, VIII/J.27-10  
13.7100, 13.7044, 13.7063, 90.15, 89.56, 89.54  
(pseudo-kubisch)

## Triklin-pinakoidale Klasse $\bar{1}$

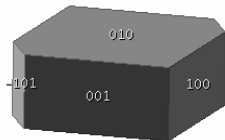
- ▶ Symmetrieelemente: 1,  $\bar{1}$
- ▶ Pinakoid: jede Fläche – parallele Gegenfläche (Flächenpaar)  
keine Pedien



- ▶ Zähligkeit 2
- ▶ geschlossene Form: 3 Pinakoide

Pinakoid  
(hkl)

seitliches (010),  
vorderes (100),  
Basis- (001)  
Pinakoid



Albit

## **Triklin-pinakoidale Klasse: $\bar{1}$**

296 Minerale  $\approx 7\%$

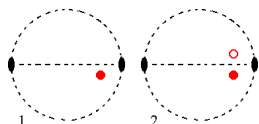
Beispiele:

- ▶ Albit, Anorthit und Plagioklase
- ▶ Lopezit,  $K_2Cr_2O_7$ , VI/F.05-10  
7.500, 13.400, 7.380, 98.00, 90.85, 96.21
- ▶ Cyanit (Disthen)  $Al_2SiO_5$ , VIII/B.02-40  
7.1120, 7.8440, 5.5740, 90.12, 101.10, 105.90

## Monoklines Kristallsystem

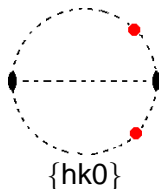
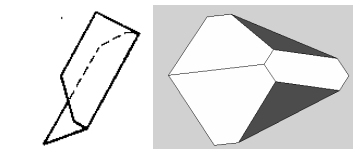
- ▶  $a, b, c, \beta$  beliebig,  $\alpha = \gamma = 90^\circ$
- ▶ kein „biklines“ Gitter: 2-zählige Achse
- ▶ Aufstellung:  $\beta > 90^\circ$   
 $\vec{c}$  vertikal,  $\vec{b}$  horizontal  
2 || bzw.  $m \perp \vec{b}$ : monokliner Winkel  $\beta$
- ▶ Blickrichtung:  $\vec{b}$ -Achse
- ▶ mögliche Symmetrieelemente: 1,  $2_{polar}$ , m, 2,  $\bar{1}$

## Monoklin-sphenoidische Klasse: 2



- ▶ allgemeine Zähligkeit 2
- ▶ Sphenoid  $\{hkl\}$ : „Keil“ (Sphen)  
rechte linke Sphenoide

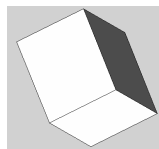
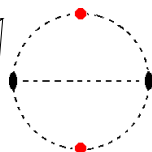
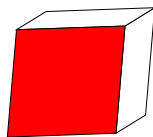
$\{0kl\}$	$\{0\bar{k}l\}$
$\{hk0\}$	$\{h\bar{k}0\}$
$\{hkl\}$	$\{h\bar{k}l\}$



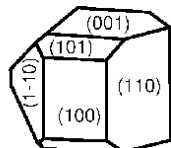
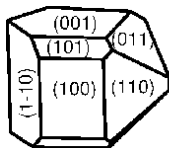
- ▶ polare Achse: unterschiedliche Flächen in Richtung und Gegenrichtung  
⇒ Links- und Rechtsform: Enantimorphie (chiral)

## Monoklin-sphenoidische Klasse: 2

- ▶ Grenzform: Pinakoid  $\{h0l\}$   
vordere Pinakoid  $\{100\}$ , Basispinakoid  $\{001\}$ ,
- ▶ spezielle Form:  
seitliches rechtes Pedion  $(010)$ ,  
seitliches linkes Pedion  $(0\bar{1}0)$
- ▶ 76 Minerale  $\approx 2\%$



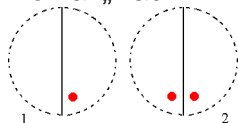
Weinsäure:



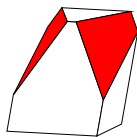
spiegelbildliche Körper

### Monoklin-domatische Klasse: $m$

- ▶ Symmetrieelemente: 1,  $m$
- ▶ Doma: „Dach“



allgemeine Zähligkeit: 2



- ▶  $m \perp \vec{b}$ : monokliner Winkel  $\beta$
- ▶ Grenzform: seitliche Pinakoid  $\{010\}$
- ▶ spezielle Form: Pedien  $(h0l)$ ,  $(100)$ ,  $(001)$

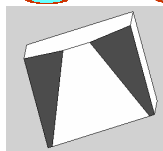
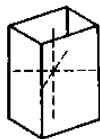
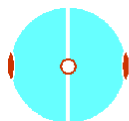
**Monoklin-prismatische Klasse: 2/m**Symmetrieelemente: 1, 2 (nicht polar), m,  $\bar{1}$ 

Kombinationstabelle

	1	m	2	$\bar{1}$
1	1	m	2	1
m	m	1	$\bar{1}$	2
2	2	$\bar{1}$	1	m
$\bar{1}$	$\bar{1}$	2	m	1

Monoklin-prismatische Klasse:  $2/m$ 

- ▶ monokline Prismen  $\{hkl\}$



Zähligkeit: 4

- ▶  $m \perp \vec{b}$ : monokliner Winkel  $\beta$

## Monoklin-prismatische Klasse: 2/m

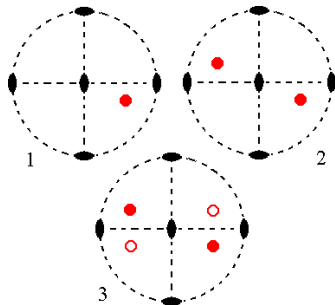
- ▶ spezielle Form: Pinakoid  $\{h0l\}$   
vordere Pinakoid  $\{100\}$ , seitliche Pinakoid  $\{010\}$ ,  
Basispinakoid  $\{001\}$
- ▶ Grenzformen: Prismen  $\parallel \vec{a} \{0kl\}$ , Vertikalprismen  $\{hk0\}$
- ▶ Beispiele: 1196 Minerale  $\approx 28\%$ 
  - ▶ Gips, 5.6800, 15.1800, 6.2900, 113.83
  - ▶ Orthoklas, 8.6250 12.9960 7.1930 116.01
  - ▶ Sanidine
  - ▶ Klino-Pyroxeno
  - ▶ Realgar

## Rhombisches bzw. Orthorhombisches Kristallsystem

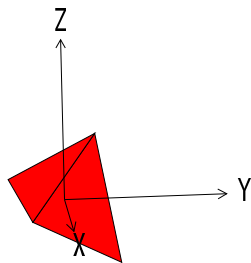
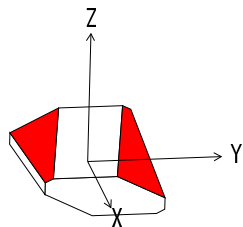
- ▶  $a, b, c$ , beliebig,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$   
⇒ Elementarzelle: Quader
- ▶ mögliche Symmetrieelemente: 1, 2, m,  $\bar{1}$   
⇒ 3 senkrecht zueinanderstehende Richtungen
- ▶ Aufstellung:  $c < b < a$
- ▶ 1. Blickrichtung:  $\vec{a}$ -Achse
- ▶ 2. Blickrichtung:  $\vec{b}$ -Achse
- ▶ 3. Blickrichtung:  $\vec{c}$ -Achse

## Rhombisch-disphenoide Klasse: 222

- ▶  $2 \parallel \vec{a}$
- ▶  $2 \parallel \vec{b}$
- ▶  $2 \parallel \vec{c}$



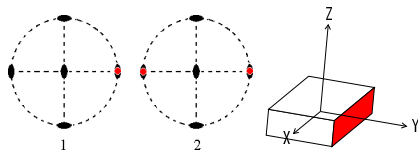
▶ Zähligkeit: 4



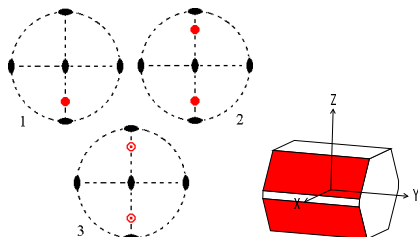
Disphenoid (geschlossen)

## Rhombisch-disphenoide Klasse: 222

- spezielle Form:  
rhombische Pinakoide  
 $\{100\}$ ,  $\{010\}$ ,  $\{001\}$   
Zähligkeit: 2



- Grenzform:  
rhombische Prismen  
 $\{0kl\}$ ,  $\{h0l\}$ ,  $\{hk0\}$   
Zähligkeit: 4



- kein Pedion

## Rhombisch-disphenoide Klasse: 222

## ▶ Kombinationstabelle

	1	$2_a$	$2_b$	$2_c$
1	1	$2_a$	$2_b$	$2_c$
$2_a$	$2_a$	1	$2_c$	$2_b$
$2_b$	$2_b$	$2_c$	1	$2_a$
$2_c$	$2_c$	$2_b$	$2_a$	1

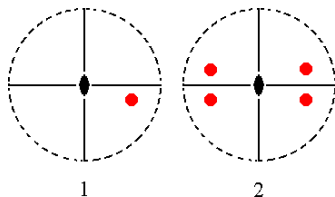
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ keine polaren Achsen
- ▶ 85 Minerale  $\approx 2\%$
- ▶ Epsomit  $\text{Mg}(\text{SO}_4) \cdot 7(\text{H}_2\text{O})$   
 $a = 11.86 \text{ \AA}$ ,  $b = 11.99 \text{ \AA}$ ,  $c = 6.858 \text{ \AA}$

VI/C.07-10

Rhombisch-pyramidale Klasse:  $mm2$ 

▶  $m \perp \vec{a}$

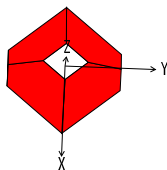
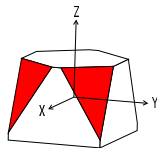
▶  $m \perp \vec{b}$



1

2

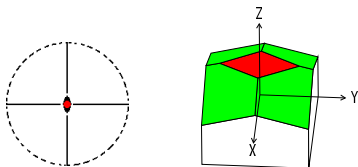
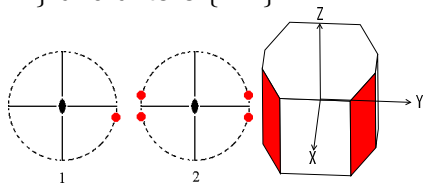
▶ Zähligkeit: 4



rhombische Pyramide (offen)

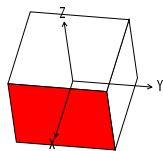
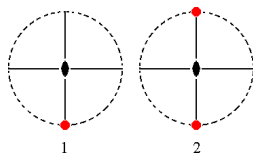
Rhombisch-pyramidale Klasse:  $mm2$ 

- ▶ allgemeine Form: obere  $\{hkl\}$  und untere  $\{hk\bar{l}\}$   
rhombische Pyramide
- ▶ Grenzform:  
rhombisches Prisma  
 $\{hk0\}$   
Zähligkeit: 4
- ▶ spezielle Form:  
Basis-Pedion  
 $\{001\}$ ,  $\{00\bar{1}\}$   
Zähligkeit: 1

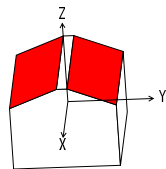
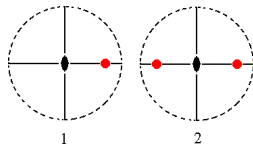


Rhombisch-pyramidale Klasse:  $mm2$ 

- spezielle Form:  
Pinakoide  
vorderes  $\{100\}$ ,  
seitliches  $\{010\}$   
Zähligkeit: 2



- spezielle Form:  
Domen  
obere  $\{0kl\}$ ,  $\{h0l\}$ ,  
untere  $\{0k\bar{l}\}$ ,  $\{h0\bar{l}\}$   
Zähligkeit: 2



Rhombisch-pyramidale Klasse:  $mm2$ 

## ▶ Kombinationstabelle

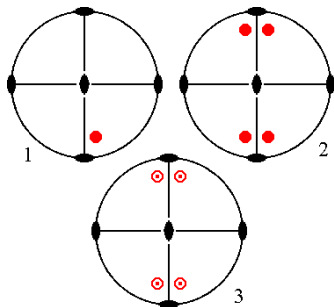
	1	$m_a$	$m_b$	$2_c$
1	1	$m_a$	$m_b$	$2_c$
$m_a$	$m_a$	1	$2_c$	$m_b$
$m_b$	$m_b$	$2_c$	1	$m_a$
$2_c$	$2_c$	$m_b$	$m_a$	1

- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ polare 2-zählige Achse
- ▶ 123 Minerale  $\approx 3\%$
- ▶ Hemimorphit  $Zn_4Si_2O_7(OH)_2 \cdot (H_2O)$   
 $a = 8.37 \text{ \AA}$ ,  $b = 10.719 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.12 \text{ \AA}$

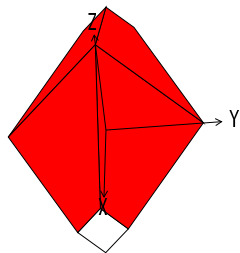
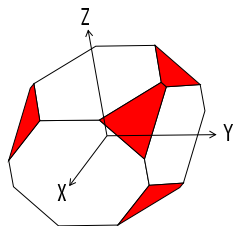
VIII/C.08-10

Rhombisch-dipyramidale Klasse:  $mmm$ 

- ▶  $m \perp \vec{a}$
- ▶  $m \perp \vec{b}$
- ▶  $m \perp \vec{c}$



▶ Zähligkeit: 8



rhombische Dipyramide  
(geschlossen)

Rhombisch-pyramidale Klasse:  $mmm$ 

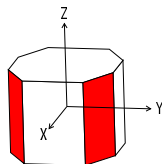
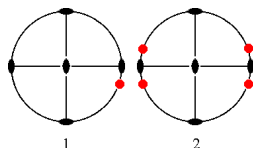
- ▶ Grenzform: nicht vorhanden

- ▶ spezielle Formen:

Prismen

$\{0kl\}$ ,  $\{h0l\}$ ,  $\{hk0\}$

Zähligkeit: 4



- ▶ spezielle Form:

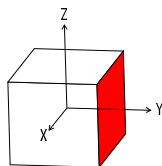
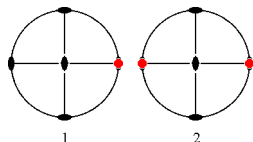
Pinakoide

vorderes  $\{100\}$ ,

seitliches  $\{010\}$ ,

Basis-  $\{001\}$

Zähligkeit: 2



Rhombisch-pyramidale Klasse:  $mmm$ 

## ► Kombinationstabelle

	1	$m_a$	$m_b$	$m_c$	$2_a$	$2_b$	$2_c$	$\bar{1}$
1	1	$m_a$	$m_b$	$m_c$	$2_a$	$2_b$	$2_c$	1
$m_a$	$m_a$	1	$2_c$	$2_b$	$\bar{1}$	$m_c$	$m_b$	$2_a$
$m_b$	$m_b$	$2_c$	1	$2_a$	$m_c$	$\bar{1}$	$m_a$	$2_b$
$m_c$	$m_c$	$2_b$	$2_a$	1	$m_b$	$m_a$	$\bar{1}$	$2_c$
$2_a$	$2_a$	$\bar{1}$	$m_c$	$m_b$	1	$2_c$	$2_b$	$m_a$
$2_b$	$2_b$	$m_c$	$\bar{1}$	$m_a$	$2_c$	1	$2_a$	$m_b$
$2_c$	$2_c$	$m_b$	$m_a$	$\bar{1}$	$2_b$	$2_a$	1	$m_c$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	$2_a$	$2_b$	$2_c$	$m_a$	$m_b$	$m_c$	1

►  $\Rightarrow 2/m 2/m 2/m$ 

erzeugende Symmetrieelemente:  $mm$

Kombination von  $m_a$  und  $m_b$

## ► keine polaren 2-zähligen Achsen

## Rhombisch-pyramidale Klasse: mmm

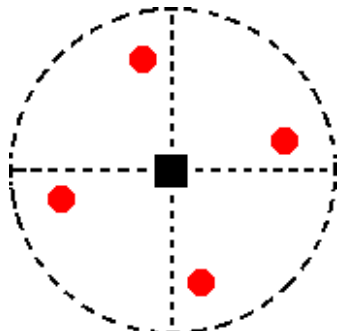
- ▶ 543 Minerale  $\approx$  13 %
- ▶ Schwefel, I/B.03-10,  $a = 10.45 \text{ \AA}$ ,  $b = 12.845 \text{ \AA}$ ,  $c = 24.46 \text{ \AA}$
- ▶ Baryt
- ▶ Markasit
- ▶ Aragonit
- ▶ Olivin
- ▶ Topas

## Tetragonales Kristallsystem

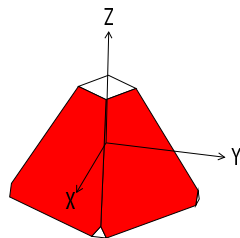
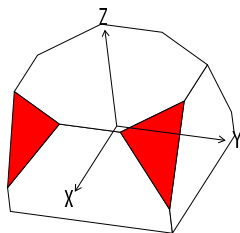
- ▶  $a = b, c$ , beliebig,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$   
⇒ Elementarzelle: quadratisches Prisma
- ▶ mögliche Symmetrieelemente: 1, 2, m,  $\bar{1}$ , 4,  $\bar{4}$
- ▶ 1. Blickrichtung:  $\vec{c}$ -Achse
- ▶ 2. Blickrichtung:  $\vec{a}$ -Achse
- ▶ 3. Blickrichtung: [110]-Richtung

## Tetragonal-pyramidale Klasse: 4

▶  $4_p \parallel \vec{c}$



▶ Zähligkeit: 4

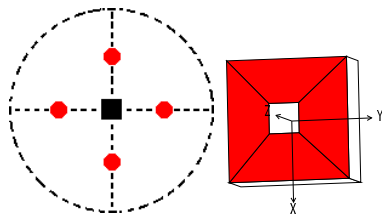


Pyramide (offen)

### Tetragonal-pyramidale Klasse: 4

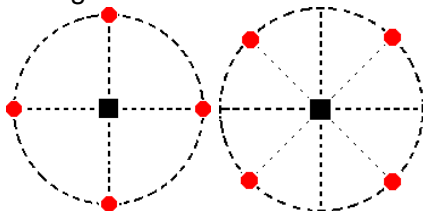
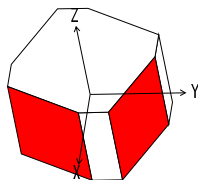
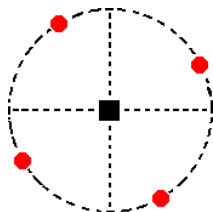
- ▶ allgemeine Form: obere  $\{hkl\}$  und untere  $\{hk\bar{l}\}$  tetragonale Pyramide (III. Stellung)

- ▶ Grenzformen:  
tetragonale Pyramiden  
 $\{h0l\}$  (II. Stellung),  
 $\{hhl\}$  (I. Stellung)  
Zähligkeit: 4



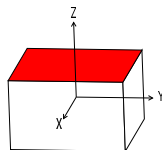
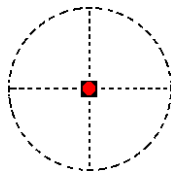
## Tetragonal-pyramidale Klasse: 4

- ▶ Grenzform:  
tetragonale Prismen  
 $\{hk0\}$  (III. Stellung)  
 $\{100\}$  (II. Stellung),  
 $\{110\}$  (I. Stellung),  
Zähligkeit: 4



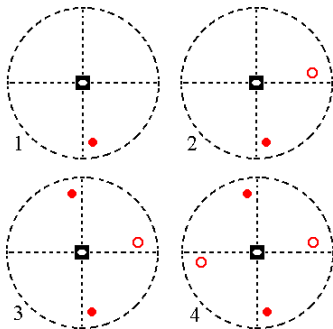
**Tetragonal-pyramidale Klasse: 4**

- ▶ spezielle Formen:  
Basis-Pedion  
 $\{001\}$ ,  $\{00\bar{1}\}$   
Zähligkeit: 1
- ▶ keine Pinakoide
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ 1 polare 4-zähligen Achse
- ▶ 5 Minerale  $\approx 0.1\%$

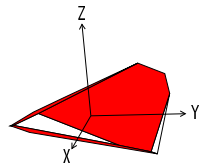
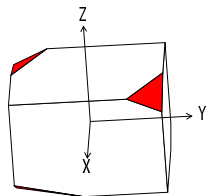


Tetragonal-Disphenoidische Klasse:  $\bar{4}$ 

▶  $\bar{4} \parallel \vec{c}$  (▣)



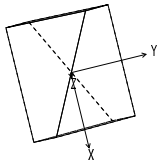
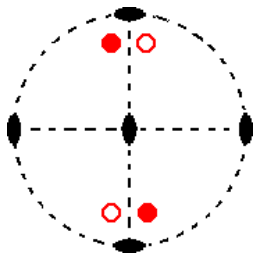
▶ Zähligkeit: 4



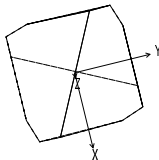
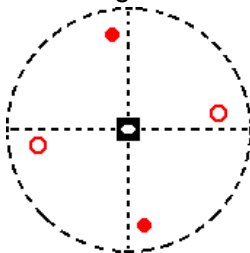
Disphenoid (geschlossen)

## Disphenoide

rhombische



tetragonale



**Tetragonal-Disphenoidische Klasse:  $\bar{4}$** 

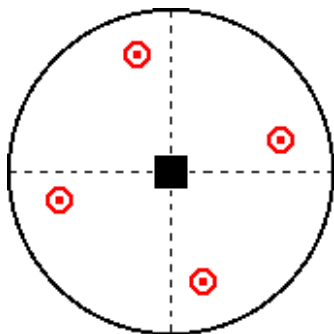
- ▶ Allgemeine Form:  
tetragonale Disphenoide  $\{hkl\}$ ,  $\{hk\bar{l}\}$   
(III. Stellung)
- ▶ Grenzformen:  
tetragonale Disphenoide  $\{h0l\}$ ,  $\{h0\bar{l}\}$  (II. Stellung)
- ▶ Grenzformen:  
tetragonale Disphenoide  $\{hhl\}$ ,  $\{hh\bar{l}\}$  (I. Stellung)
- ▶ Grenzform:  
tetragonales Prisma  
 $\{hk0\}$  (III. Stellung)  
 $\{100\}$  (II. Stellung)  
 $\{110\}$  (I. Stellung)  
Zähligkeit: 4

## Tetragonal-Disphenoidische Klasse: $\bar{4}$

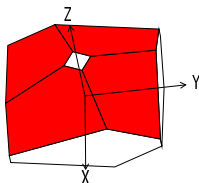
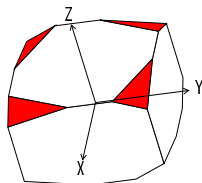
- ▶ spezielle Formen: Basispinakoid  $\{001\}$   
Zähligkeit: 2
- ▶ kein Pedion
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ 1  $\bar{4}$ -zähligen Achse
- ▶ 9 Minerale  $\approx 0.2\%$   
Schreibersit (I/A.11-20),  $(\text{Fe,Ni})_3\text{P}$ ,  $a = 9.013 \text{ \AA}$ ,  $c = 4.424 \text{ \AA}$

Tetragonal-dipyramidale Klasse:  $4/m$ 

- ▶  $4 \parallel \vec{c}$
- ▶  $m \perp \vec{c}$



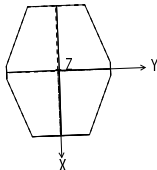
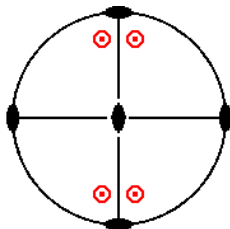
▶  
Zähligkeit: 8



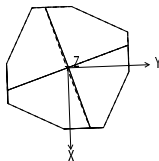
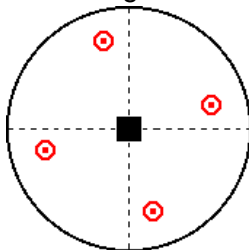
Dipyramide (geschlossen)

## Dipyramiden

rhombisch

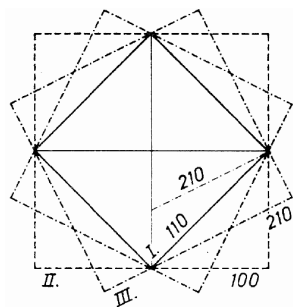


tetragonal



**Tetragonal-dipyramidale Klasse:  $4/m$** 

- ▶ Grenzform: tetragonale Dipyramiden  
 $\{h0l\}$  (II. Stellung),  $\{hhl\}$  (I. Stellung)
- ▶ spezielle Formen:  
tetragonales Prisma  
 $\{hk0\}$  (III. Stellung)  
 $\{100\}$  (II. Stellung)  
 $\{110\}$  (I. Stellung)  
Zähligkeit: 4
- ▶ spezielle Form:  
Basis-Pinakoid  $\{001\}$   
Zähligkeit: 2



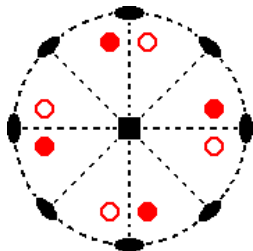
## Tetragonal-dipyramidale Klasse: $4/m$

61 Minerale  $\approx$  1.4 %

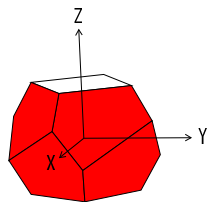
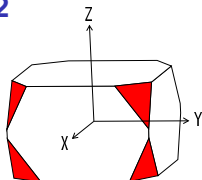
- ▶ Leucit,  $\text{KAl}[\text{Si}_2\text{O}_6]$ ,  $a = 13.0900 \text{ \AA}$ ,  $c = 13.7500 \text{ \AA}$   
VIII/J.05-10
- ▶ Powellit,  $\text{CaMoO}_4$ ,  $a = 5.2300 \text{ \AA}$ ,  $c = 11.4400 \text{ \AA}$  VI/G.01-10
- ▶ Scheelit,  $\text{CaWO}_4$ ,  $a = 5.242 \text{ \AA}$ ,  $c = 11.372 \text{ \AA}$  VI/G.01-20
- ▶ Wulfenit,  $\text{PbMoO}_4$ ,  $a = 5.435 \text{ \AA}$ ,  $c = 12.11 \text{ \AA}$  VI/G.01-30

## Tetragonal-trapezoedrische Klasse: 422

- ▶  $4_p \parallel \vec{c}$
- ▶  $2 \parallel \vec{a}$
- ▶  $2 \parallel [110]$



- ▶ Zähligkeit: 8
- ▶ keine  $\bar{1}$ , keine  $m$

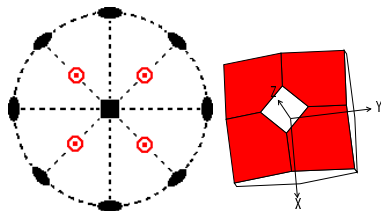


neue, eigene Form:  
Trapezoeder (geschlossen)

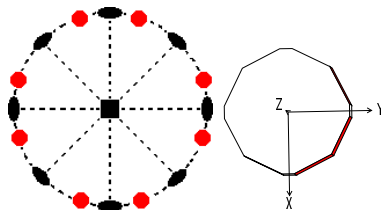
## Tetragonal-trapezoedrische Klasse: 422

- ▶ allgemeine Form: rechtes  $\{hkl\}$  und linkes  $\{khl\}$  Trapezoeder

- ▶ Grenzformen:  
tetragonale Dipyramiden  
 $\{h0l\}$  (II. Stellung),  
 $\{hhl\}$  (I. Stellung)  
Zähligkeit: 8



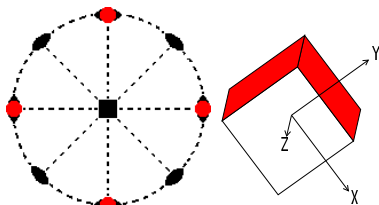
- ▶ Grenzformen:  
ditetragonale Prismen  $\{hk0\}$   
Zähligkeit: 8



## Tetragonal-trapezoedrische Klasse: 422

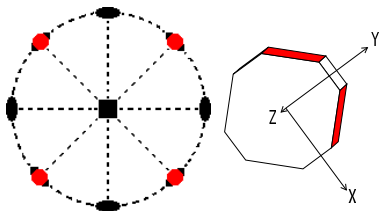
- ▶ spezielle Form:

tetragonales Prisma  
 $\{100\}$  (I. Stellung)  
 Zähligkeit: 4



- ▶ spezielle Form:

tetragonales Prisma  
 $\{110\}$  (II. Stellung)  
 Zähligkeit: 4



- ▶ spezielle Form:  
 Basispinakoid  $\{001\}$   
 Zähligkeit: 2

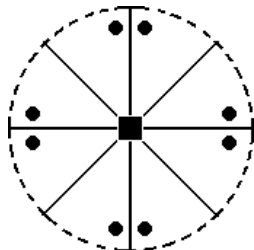
## Tetragonal-trapezoedrische Klasse: 422

Minerale: 21  $\approx$  0.5 %

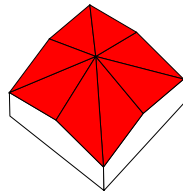
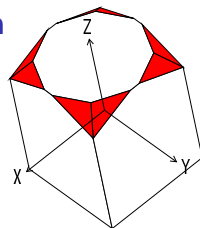
- ▶ Tief-Cristobalit,  $a = 4.9710 \text{ \AA}$ ,  $b = 6.9180 \text{ \AA}$

Ditetragonal-pyramidale Klasse:  $4mm$ 

- ▶  $4_p \parallel \vec{c}$
- ▶  $m \perp \vec{a}$
- ▶  $m \perp [110]$



- ▶ Zähligkeit: 8
- ▶ keine  $\bar{1}$ , keine 2



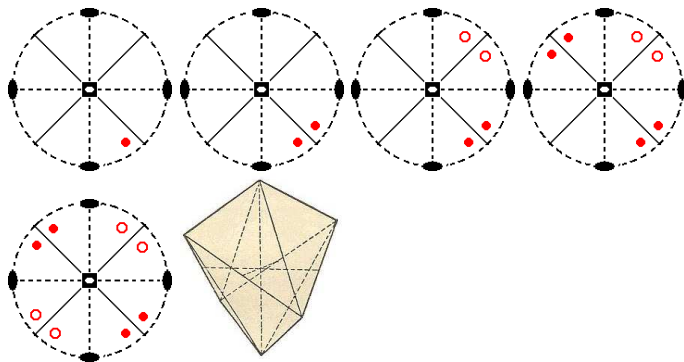
Ditetragonale Pyramide (offen)

**Ditetragonal-pyramidale Klasse:  $4mm$** 

- ▶ Grenzformen: Ditetragonales Prisma  $\{hk0\}$
- ▶ spezielle Formen
  - Pyramide II. Stellung  $\{h0l\}$  und  $\{h0\bar{l}\}$  4
  - Pyramide I. Stellung  $\{hhl\}$  und  $\{hh\bar{l}\}$  4
  - Prisma II. Stellung  $\{100\}$  4
  - Prisma I. Stellung  $\{110\}$  4
  - Basispedion  $(001)$  und  $(00\bar{1})$  1
- ▶ 5 Minerale  $\approx 0.1\%$

Tetragonal-skalenoedrische Klasse:  $\bar{4}2m$ 

- ▶  $\bar{4} \parallel \vec{c}$
- ▶  $2 \parallel \vec{a}$
- ▶  $m \perp [110]$
- ▶ Zähligkeit: 8
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ neue, eigene Form: Skalenoeder (geschlossen)



**Tetragonal-skalenoedrische Klasse:  $\bar{4}2m$** 

## ▶ Grenzformen:

tetragonale Dipyramide  $\{h0l\}$  8Ditetragonales Prisma  $\{hk0\}$  8

## ▶ spezielle Formen

Disphenoid  $\{hhl\}$  und  $\{h\bar{h}l\}$  4Prisma II. Stellung  $\{100\}$  4Prisma I. Stellung  $\{110\}$  4Basispinakoid  $\{001\}$  2

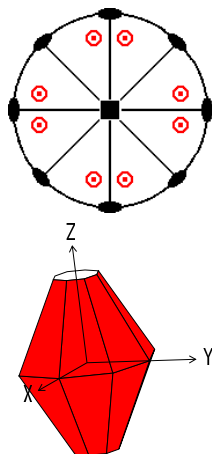
## Tetragonal-skalenoedrische Klasse: $\bar{4}2m$

Minerale: 38  $\approx$  0.9 %

- ▶ Åkermanit,  $\text{Ca}_2\text{Mg}[\text{Si}_2\text{O}_7]$ ,  $a = 7.84 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.01 \text{ \AA}$   
VIII/C.02-10
- ▶ Gehlenit,  $\text{Ca}_2\text{Al}[\text{AlSiO}_7]$ ,  $a = 7.69 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.067 \text{ \AA}$   
VIII/C.02-15
- ▶ Chalkopyrit,  $\text{CuFeS}_2$ ,  $a = 5.28 \text{ \AA}$ ,  $c = 10.41 \text{ \AA}$     II/C.03-10

Ditetragonal-dipyramidale Klasse:  $4/m\ 2/m\ 2/m$ 

- ▶  $4\parallel$  bzw.  $m\perp \vec{c}$
- ▶  $2\parallel$  bzw.  $m\perp \vec{a}$
- ▶  $2\parallel$  bzw.  $m\perp [110]$
- ▶  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 16
- ▶ Ditetragonale Dipyramide (geschlossen)



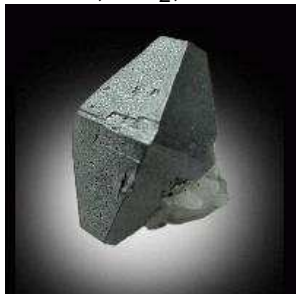
## Ditetragonal-dipyramidale Klasse: $4/m\ 2/m\ 2/m$

- ▶ Grenzformen: keine
- ▶ spezielle Formen
  - dipyramide  $\{h0l\}$  und  $\{hhl\}$  8
  - ditetragonal Prismen  $\{hkl\}$  8
  - tetragonale Prismen  $\{110\}$  und  $\{100\}$  4
  - Basispinakoid  $\{001\}$  2

## Ditetragonal-dipyramidale Klasse: $4/m\ 2/m\ 2/m$

170 Minerale: 4%

- ▶ Hausmannit,  $Mn_3O_4$ ,  $a = 5.76\ \text{\AA}$ ,  $c = 9.44\ \text{\AA}$  IV/B.05-10
- ▶ Rutil,  $TiO_2$ ,  $a = 4.594\ \text{\AA}$ ,  $c = 2.958\ \text{\AA}$  IV/D.02-10
- ▶ Anatas,  $TiO_2$ ,  $a = 3.7930\ \text{\AA}$ ,  $b = 9.5100\ \text{\AA}$  IV/D.14-10



- ▶ Xenotim,  $YPO_4$ ,  $a = 6.89\ \text{\AA}$ ,  $c = 6.03\ \text{\AA}$  VII/A.14-10
- ▶ Zirkon,  $ZrSiO_4$ ,  $a = 6.604\ \text{\AA}$ ,  $c = 5.979\ \text{\AA}$  VIII/A.09-10

## Trigonales (Rhomboedrisches) Kristallsystem

- ▶ rhomboedrische Aufstellung

$$a = b = c$$

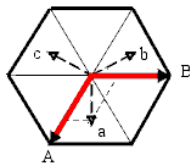
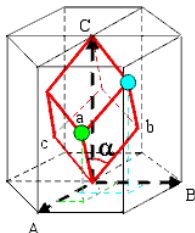
$$\alpha = \beta = \gamma$$

- ▶ hexagonale Aufstellung

$$a = b \text{ bzw.}$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

- ▶  $a_1 = a_2 = a_3$



- ▶  $\{hkil\}$  mit  $i = -h - k$
- ▶  $[111]_{rh} = [0001]_{hex}$
- ▶  $\{111\}_{rh} = \{0001\}_{hex}$
- ▶  $3 \parallel \vec{c}$

- ▶ mögliche Symmetrieelemente: 1,  $\bar{1}$ , 2, m, 3,  $\bar{3}$

## Trigonal-pyramidale Klasse: 3

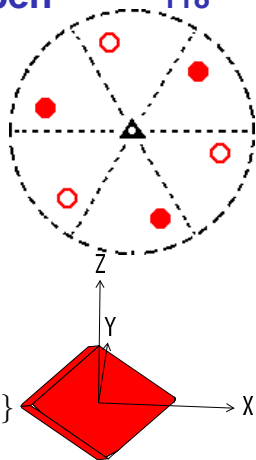
- ▶  $3_p \parallel \vec{c}$
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 3
- ▶ trigonale Pyramiden (offen)
- ▶ Grenzform: trigonales Prismen  $\{hki0\}$ , Zähligkeit 3
- ▶ spezielle Form: Basispedien  $\{0001\}$  und  $\{000\bar{1}\}$
- ▶ 39 Minerale  $\approx 0.9\%$   
Jarosit,  $\text{KFe}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$

# 32 Kristallklassen / 32 Punktgruppen

118

## Rhomboedrische Klasse: $\bar{3}$

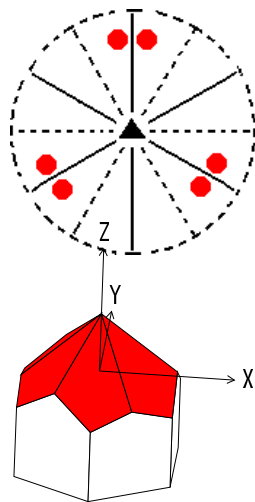
- ▶  $\bar{3} \parallel \vec{c}$
- ▶  $\bar{1}$
- ▶  $3 \parallel \vec{c}$
- ▶ Zähligkeit: 6
- ▶ Rhomboeder (geschlossen)
- ▶ Grenzformen: Prismen  $\{hki0\}$
- ▶ spezielle Formen: Basispinakoid  $\{0001\}$
- ▶ 73 Minerale  $\approx 1\%$ 
  - ▶ Dolomit  $\text{MgCa}(\text{CO}_3)_3$
  - ▶ Ankerit  $\text{FeCO}_3$
  - ▶ Ilmenit  $\text{FeTiO}_3$



- ▶ Dioptas  $\text{CuSiO}_2(\text{OH})_2$
- ▶ Phenakit  $\text{Be}_2\text{SiO}_4$
- ▶ Willemite  $\text{Zn}_2\text{SiO}_4$

**Ditrigonal-pyramidale Klasse:  $3m$** 

- ▶  $3_p \parallel \vec{c}$
- ▶  $m \perp \vec{a}$
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 6
- ▶ Ditrigonale Pyramide (offen)





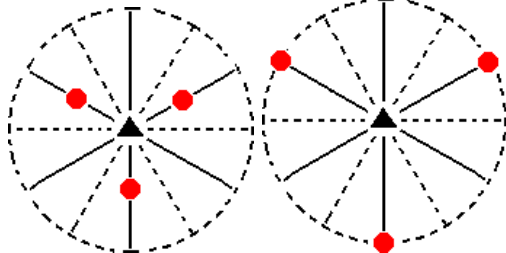
Ditrigonal-pyramidale Klasse:  $3m$ 

- ▶ spezielle Formen

trigonale Pyramide    trigonale Prismen

$$\{h0\bar{h}l\}$$

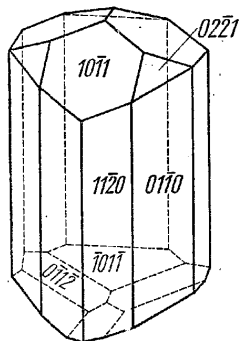
$$\{10\bar{1}0\}, \{01\bar{1}0\}$$



Pedien  $(0001), (000\bar{1})$

## Ditrigonal-pyramidale Klasse: 3m

101 Minerale  $\approx$  2%

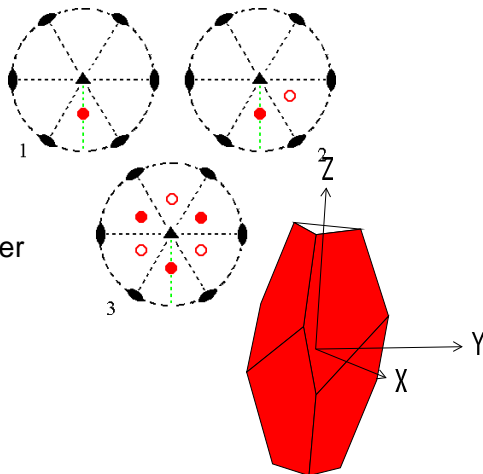


- ▶ Turmalin-Gruppe
- ▶ Pyrargyrit  $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$
- ▶  $\text{LiNbO}_3$

nichtlineare optische Effekte  
piezzo- und pyroelektrisch

### Trigonal-trapezoedrische Klasse: 32

- ▶  $3 \parallel \vec{c}$
- ▶  $2_p \parallel \vec{a}$
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Enantiomorphie
- ▶ Zähligkeit: 6
- ▶ trigonales Trapezoeder (geschlossen)

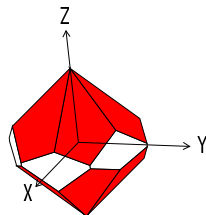
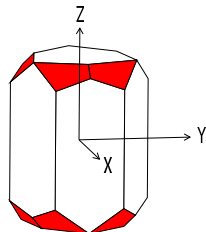
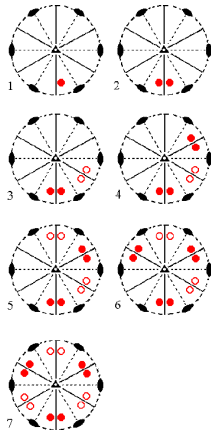


## Trigonal-trapezoedrische Klasse: 32

- ▶ Grenzformen:
  - Rhomboeder  $\{h0\bar{h}l\}$ ,  $\{0k\bar{k}l\}$
  - trigonale Dipyramiden  $\{hh2\bar{h}l\}$ ,  $\{2h\bar{h}\bar{h}l\}$
  - ditrigonale Prismen  $\{hki0\}$
  - hexagonales Prisma  $\{10\bar{1}0\}$
- ▶ spezielle Formen:
  - trigonale Prismen  $\{\bar{2}110\}$ ,  $\{11\bar{2}0\}$
  - Basispinakoid  $\{0001\}$
- ▶ 35 Minerale  $\approx 0.8\%$ 
  - Quarz (Raumtemperatur)
  - Zinnober HgS

Ditrigonal-skalenoedrische Klasse:  $\bar{3}m$  $(\bar{3}2/m)$ ▶  $\bar{3} \parallel \vec{c}$ ▶  $2 \parallel \vec{a}$ ▶  $m \perp \vec{a}$ ▶  $\bar{1}$ 

▶ Zähligkeit: 12

▶ trigonale  
Skalenoeder  
(geschlossen)

Ditrigonal-skalenoedrische Klasse:  $\bar{3}m$ 

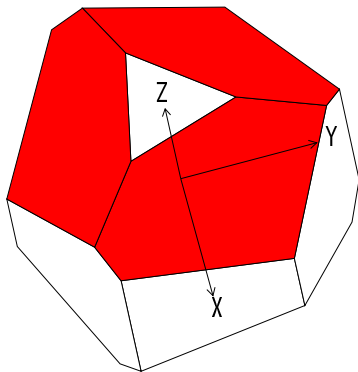
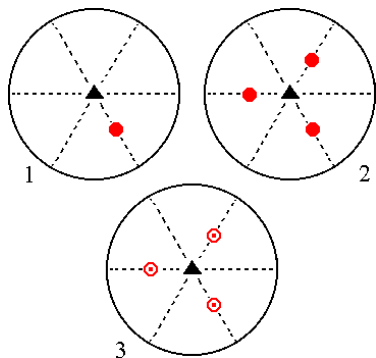
- ▶ Grenzformen:
  - dihexagonale Prismen  $\{hki0\}$
  - hexagonale Dipyramiden  $\{hh2\bar{h}l\}$
- ▶ spezielle Formen:
  - Rhomboeder  $\{h0\bar{h}l\}$ ,  $\{0k\bar{k}l\}$
  - hexagonales Prisma I.  $\{10\bar{1}0\}$
  - hexagonales Prisma II.  $\{11\bar{2}0\}$
  - Basispinakoid  $\{0001\}$
- ▶ 194 Minerale  $\approx 5\%$ 
  - ▶ Sb, As, Bi
  - ▶ Brucit  $Mg(OH)_2$
  - ▶ Korund  $Al_2O_3$ ,
  - Eskolait  $Cr_2O_3$
  - ▶ Proustit  $Ag_3AsS_3$



- ▶ Calcit  $CaCO_3$
- Siderit  $FeCO_3$ ,
- Rhodochrosit  $MnCO_3$ ,
- Smithsonit  $ZnCO_3$

Trigonal-dipyramidale Klasse  $3/m$ 

$$3/m = \bar{6}$$

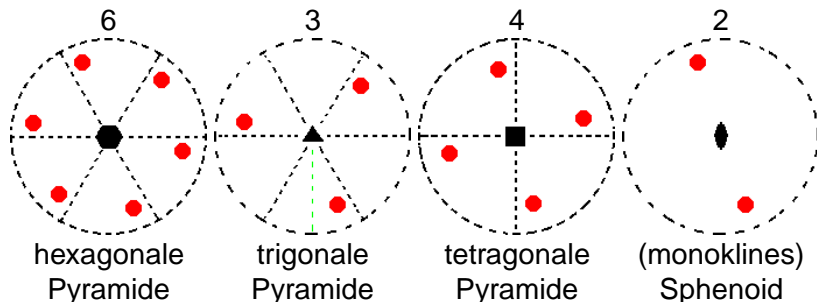


## Hexagonales Kristallsystem

- ▶  $a = b$  bzw.  $a_1 = a_2 = a_3$   $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- ▶ mögliche Symmetrieelemente: 1, 2, m,  $\bar{1}$ , 6,  $\bar{6} = 3/m$
- ▶ 1. Blickrichtung:  $\vec{c}$ -Achse
- ▶ 2. Blickrichtung:  $\vec{a}$ -Achse
- ▶ 3. Blickrichtung:  $[21\bar{3}0]$ -Richtung

## Hexagonal-pyramidale Klasse: 6

- ▶  $6_p \parallel \vec{c}$
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 6
- ▶ hexagonale Pyramide (offen)



## Hexagonal-pyramidale Klasse: 6

24 Minerale  $\approx$  0.5%

Nephelin  $(\text{Na},\text{K})_3[\text{AlSiO}_4]_4$



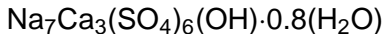
$\Rightarrow$  Ätzgruben notwendig

Trigonal-dipyramidale Klasse  $\bar{6}$ 

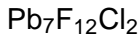
$= 3/m$

- ▶  $\bar{6} \parallel \vec{c}$
- ▶ ( $3 \parallel$  und  $m \perp \vec{c}$ )
- ▶ Zähligkeit: 6
- ▶ trigonale Dipyramide (geschlossen)
- ▶ 3 Minerale

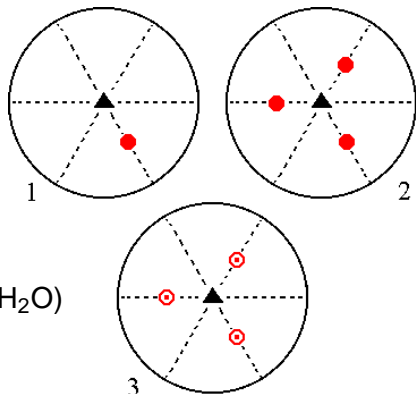
Cesantit



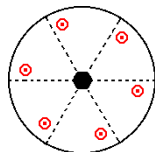
Laurelit



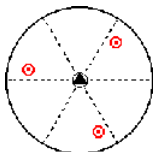
Reederit



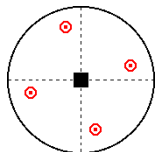
$6/m$  (12)  $\bar{6} = 3/m$  (6)  $4/m$  (8)  $2/m$  (4)



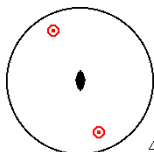
hexagonale  
Dipyramide



trigonale  
Dipyramide

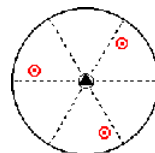


tetragonale  
Dipyramide



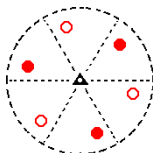
monoklines  
Prisma

$\bar{6} = 3/m$  (6)



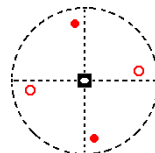
trigonale  
Dipyramide

$\bar{3}$  (6)



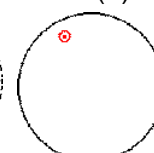
trigonales  
Rhomboider

$\bar{4}$  (4)



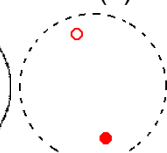
tetragonales  
Disphenoid

$\bar{2}$  (2)



monoklines  
Doma

$\bar{1}$  (2)



monoklines  
Pinakoid

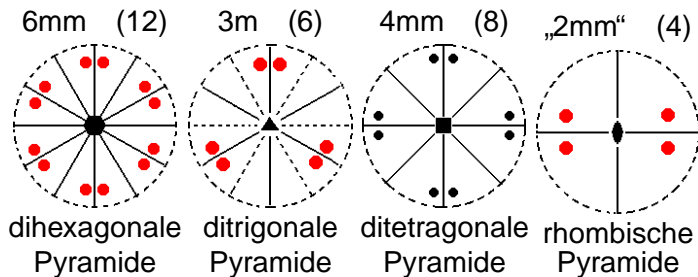
## Hexagonal-pyramidale Klasse: 6/m

- ▶  $6 \parallel \vec{c}$
- ▶  $m \perp \vec{c}$
- ▶  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 12
- ▶ spezielle Formen:  
hexagonales Prisma  
Basispinakoid
- ▶ 55 Minerale  $\approx 1\%$   
Apatit  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$   
Pyromorphit  $\text{Pb}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$



Dihexagonal-pyramidale Klasse:  $6mm$ 

- ▶  $6_p \parallel \vec{c}$
  - ▶  $m \perp \vec{a}$
  - ▶  $m \perp \langle 210 \rangle$
  - ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 12
  - ▶ Dihexagonale Pyramide (offen)



## Dihexagonal-pyramidale Klasse: 6mm

31 Minerale  $\approx 0.7\%$

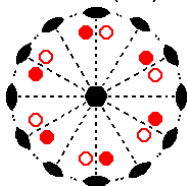
- ▶ Greenockit  $\text{CdS}$
- ▶ Wurtzit  $(\text{Zn,Fe})\text{S}$
- ▶ Zinkit  $(\text{Zn,Mn})\text{O}$



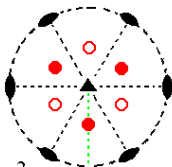
## Hexagonal-trapezoedrische Klasse: 622

- ▶  $6 \parallel \vec{c}$
- ▶  $2 \parallel \vec{a}$
- ▶  $2 \parallel \langle 210 \rangle$
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 12
- ▶ hexagonales Trapezoeder

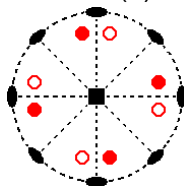
622 (12)

hexagonales  
Trapezoeder

32 (6)

trigonales  
Trapezoeder

422 (8)

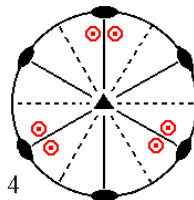
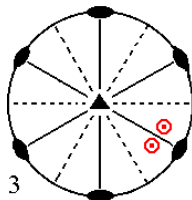
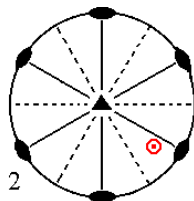
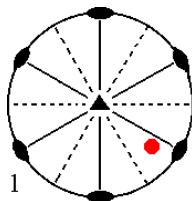
tetragonales  
Trapezoeder

- ▶ 28 Minerale  $\approx 0.6\%$

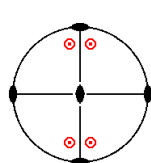
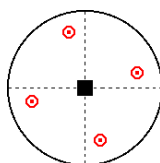
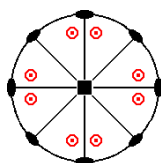
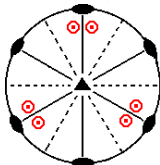
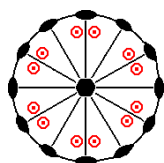
Hoch-Quarz

Ditrigonal-dipyramidale Klasse  $\bar{6}m2$ 

- ▶  $\bar{6} \parallel \vec{c}$
- ▶ ( $3 \parallel$  und  $m \perp \vec{c}$ )
- ▶  $2_p \parallel \vec{a}$
- ▶  $m \perp \langle 210 \rangle$
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 12
- ▶ Dipyramide (geschlossen)



6/mm (24)    $\bar{6}m2$  (12)   4/mmm (16)   4/m (8)   mmm (8)



dihexagonale  
Dipyramide

ditrigonale  
Dipyramide

ditetragonale  
Dipyramide

tetragonale  
Dipyramide

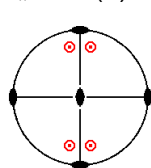
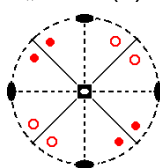
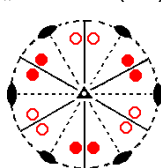
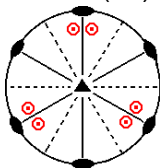
rhombische  
Dipyramide

$6m2$  (12)

„3m2“ (12)

„4m2“ (8)

„2m2“ (4)



ditrigonale  
Dipyramide

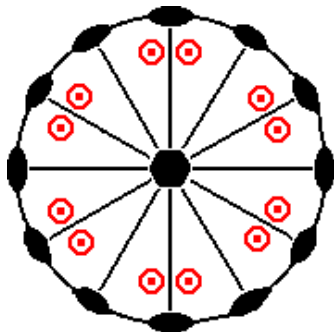
ditetragonales  
Skalenoeder

tetragonales  
Skalenoeder

rhombische  
Dipyramide

## Dihexagonal-dipyramidale Klasse 6/mmm

- ▶  $6 \parallel \vec{c}$
- ▶  $m \perp \vec{c}$
- ▶  $3 \parallel \vec{a}$
- ▶  $m \perp \vec{a}$
- ▶  $3 \parallel \langle 210 \rangle$
- ▶  $m \perp \langle 210 \rangle$
- ▶  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit: 24
- ▶ Dipyramide  
(geschlossen)



## Dihexagonal-dipyramidale Klasse 6/mmm

126 Minerale  $\approx$  3 %

- ▶ Beryll  $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$
- ▶ Graphit
- ▶ Eis
- ▶ Molybdänit  $\text{MoS}_2$
- ▶ Nickelin NiAs
- ▶ Mg, Zn, Ti, Cd

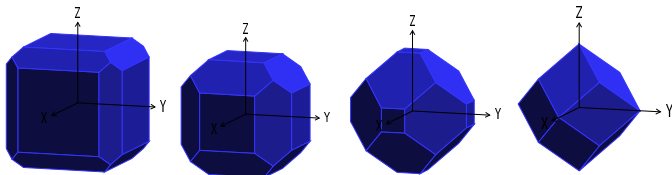
## Kubisches Kristallsystem

- ▶  $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- ▶ mögliche Symmetrieelemente: 1, 2, m,  $\bar{1}$ , 3,  $\bar{3}$ , 4,  $\bar{4}$
- ▶ 1. Blickrichtung:  $\vec{a}$ -Achse immer 2  
möglich: 4 bzw.  $\bar{4}$ , m
- ▶ 2. Blickrichtung: [111]-Richtung immer 3 bzw.  $\bar{3}$
- ▶ 3. Blickrichtung: [110]-Richtung 2 und m
- ▶ nur geschlossene Formen

## Kubisches Kristallsystem

spezielle Formen in allen kubischen Kristallsystemen

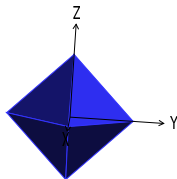
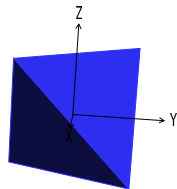
- ▶  $\{100\}$ : Hexaeder (Würfel)  
6-Flächner (Hexa-,  $\epsilon\xi\alpha$ -)  
Zähligkeit: 6
- ▶  $\{110\}$ : Rhombendodekaeder  
12-Flächner (Dodeka-,  $\delta\omega\delta\epsilon\kappa\alpha$ -)  
Flächenform: Rhombus (gleichlange Seiten)



## Kubisches Kristallsystem

### spezielle Formen

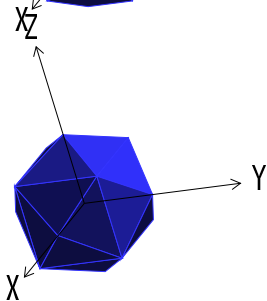
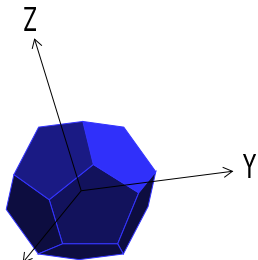
- ▶ Tetraeder:  $\{111\}$  in  $23$  und  $\bar{4}3m$   
4-Flächner  
(Tetra-,  $\tau\epsilon\tau\rho\alpha$ )  
Zähligkeit: 4
- ▶ Oktaeder:  $\{111\}$  in  $m\bar{3}$ ,  $432$ ,  $m\bar{3}m$   
8-Flächner  
(Okta-,  $\omicron\kappa\tau\alpha$ )  
Zähligkeit: 8



## Kubisches Kristallsystem

### spezielle Formen

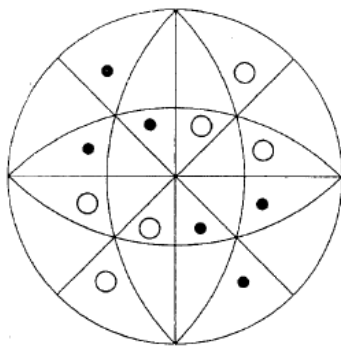
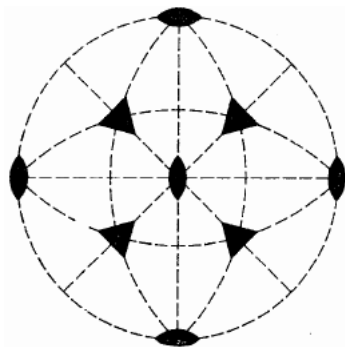
- ▶ Pentagondodekaeder:  
 $\{hk0\}$  in  $23$  und  $m\bar{3}$   
12-Flächner  
(Dodeka-:  $\delta\omega\delta\epsilon\kappa\alpha$ -)  
Flächen: 5-Eck  
(Pentagon:  $\pi\epsilon\nu\tau\alpha$ -)  
Zähligkeit: 12
- ▶ Tetrakisheptaeder  
 $\{hk0\}$  in  $432$ ,  $\bar{4}3m$ ,  $m\bar{3}m$   
24-Flächner ( $6\times 4$ )  
Zähligkeit: 24



## Tetraederisch-pentagondodekaedrische Klasse: 23

- ▶  $2 \parallel \vec{a} \Rightarrow 3 \times$
- ▶  $3_p \parallel \langle 111 \rangle \Rightarrow 4 \times$
- ▶ Zähligkeit: 12

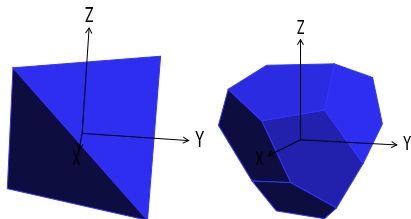
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Enantiomorphie



**Tetraederisch-pentagondodekaedrische Klasse: 23**

tetraedrisches Pentagondodekaeder:

- ▶ Grundkörper: Tetraeder
- ▶ 1 Tetraederfläche  $\Rightarrow$  3 fünfeckige Flächen  
 $4 \times 3 = 12$ -Flächen
- ▶ Fläche: 5-Eck (Pentagon)



## Tetraederisch-pentagondodekaedrische Klasse: 23

- ▶ 23 Minerale  $\approx 0.5\%$
- ▶ Cobaltin (auch rhombisch  $mm2$ )  
( $\text{CoAsS}$ )  
Pentagondodekaeder
- ▶ Gersdorffit  
 $\text{NiAsS}$
- ▶ Ullmannit  
 $\text{NiSbS}$

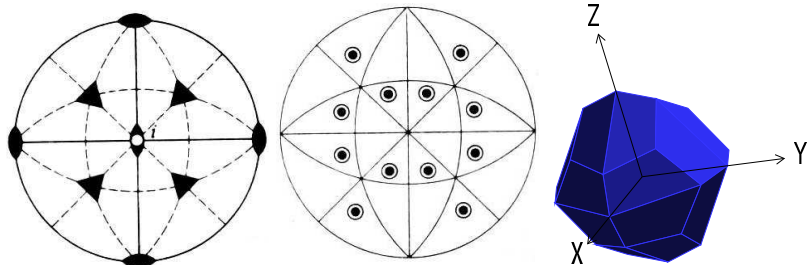


Cobaltin  
Pentagondodekaeder

Disdodekaedrische Klasse:  $m\bar{3}$ 

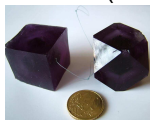
$$\left(\frac{2}{m}\bar{3}\right)$$

- ▶  $2\|\vec{a} \Rightarrow 3\times$
  - ▶  $m \perp \vec{a} \Rightarrow 3\times$
  - ▶  $\bar{3}\|\langle 111 \rangle \Rightarrow 4\times$
  - ▶  $\bar{1}$
- ▶ Zähligkeit:  $24 = 3 \times 8$   
(3 Flächen pro  
Oktaederfläche)  
(dis-dodekaedrisch:  
 $2 \times 12$ )



## Disdodekaedrische Klasse: $m\bar{3}$

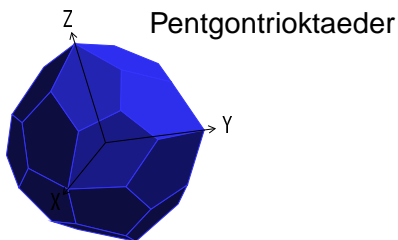
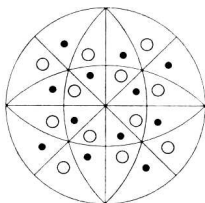
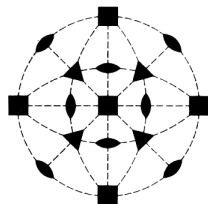
- ▶ 55 Minerale  $\approx$  1.3 %
- ▶ Pyrit,  $\text{FeS}_2$   
typisch: Hexaeder, Pentgondoeakaeder  
Streifung
- ▶ Alaune (z.B.  $\text{KAl}[\text{SO}_4]_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ )



## Pentgonositetraedrische Klasse: 432

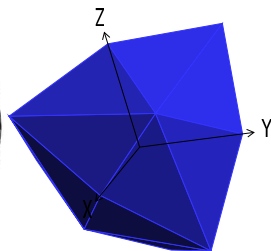
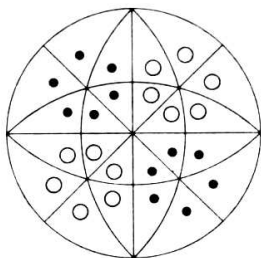
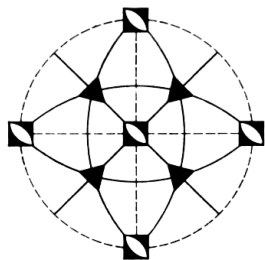
- ▶  $4 \parallel \vec{a} \Rightarrow 3 \times$
- ▶  $3 \parallel \langle 111 \rangle \Rightarrow 4 \times$
- ▶  $2 \parallel \langle 110 \rangle \Rightarrow 6 \times$
- ▶ keine  $\bar{1}$ , kein  $m$
- ▶ Enantiomorphie

- ▶ 5 Minerale
- ▶ Flächen: 5-Eck
- ▶ Zähligkeit: 24  
Ikosaeder+Tetraeder  
( $\epsilon\iota\kappa\sigma\alpha$ -)  $20 + 4$



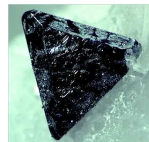
Hexakistetraedrische Klasse:  $\bar{4}3m$ 

- ▶  $\bar{4} \parallel \vec{a} \Rightarrow 3 \times$
- ▶  $(2 \parallel \vec{a} \Rightarrow 3 \times)$
- ▶  $3_p \parallel \langle 111 \rangle \Rightarrow 4 \times$
- ▶  $m \perp \langle 110 \rangle \Rightarrow 6 \times$
- ▶ keine  $\bar{1}$
- ▶ Enantiomorphie
- ▶ Zähligkeit:  $24 = 6 \times 4$



## Hexakistetraedrische Klasse: $\bar{4}3m$

- ▶ 61 Minerale  $\approx$  2.5%
- ▶ Sphalerit



- ▶ Fahlerze (Tennantit, Tetraedrit, Freibergit)
- ▶ Sodalit  $\text{Na}_8[\text{Cl}_2|\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}]$



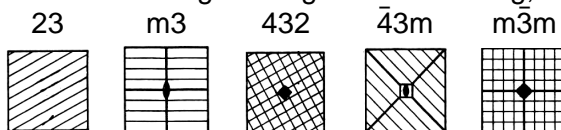
## Hexakisoktaedrische Klasse: $m\bar{3}m$

- ▶ 243 Minerale  $\approx$  5.7%
- ▶ viele Metalle (Au, Ag, Cu, Pt, Pb, Fe)
- ▶ Galenit
- ▶ Fluorit, Halit
- ▶ Spinell, Magnetit, Periklas
- ▶ Granate
- ▶ Leucit

## Symmetriemehrdeutigkeit

Hexaeder:

- ▶ Wachstumsunregelmäßigkeiten: Streifung, Vivinalflächen



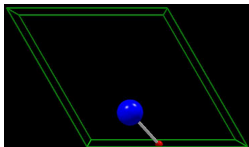
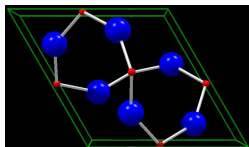
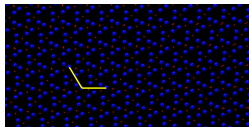
- ▶ Ätzfiguren
- ▶ physikalische Eigenschaften
  - ▶ Piezoelektrizität, wenn kein  $\bar{1}$  und nicht in 432  
20 Kristallklassen
  - ▶ Pyroelektrizität, wenn singuläre polare Achse (Pedion)  
10 Kristallklassen
  - ▶ wenn  $\bar{1}$ , dann keine optische Aktivität



- ▶ Symmetrie-Elemente ohne Translationsanteil und 7 Kristallsysteme
  - ⇒ 32 Punktgruppen (32 Kristallklassen)  
J. C. F. Hessel (1796–1872)
  - ⇒ Invarianz eines Punktes  
(Schnittpunkt der Symmetrieelemente)
  - ⇒ Beschreibung von äußeren Kristallformen
- ▶ Symmetrie-Elemente (auch) mit Translationsanteil und 14 Bravais-Gitter
  - ⇒ 230 Raumgruppen  
A. M. Schönflies (1853–1928)  
E. S. Federov (1853–1919)
  - ⇒ Invarianz des Raumes
  - ⇒ Beschreibung der atomaren Kristallstruktur

# Kristallstruktur

## Quarz



- ▶ Gitterkonstanten  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$
- ▶ relative Koordinaten der Atome  $x, y, z$
- ▶ Raumgruppe (Bravais-Gitter + Symmetrieelemente)
- ▶ 4.9140 4.9140 5.4050 90.000 90.000 120.000  
Si 0.4560 0.0000 0.6667  
O 0.3890 0.2410 0.7910  
154: P  $3_221$

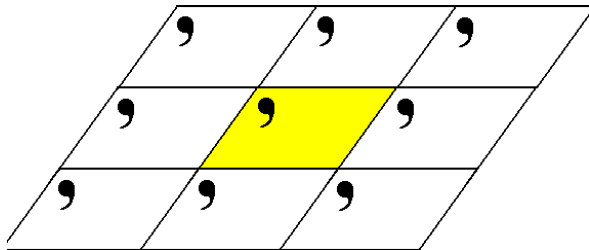
2-dimensionale Raumgruppen: nur 2, 3, 4, 6, m, a, b

**p 1**

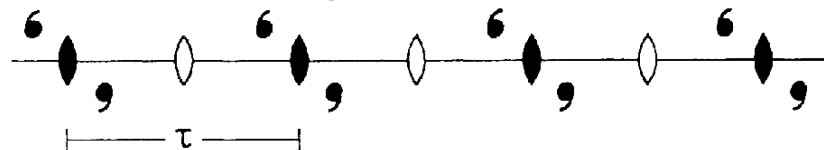
Symmetrieelemente

(PG: triklin-pedial)

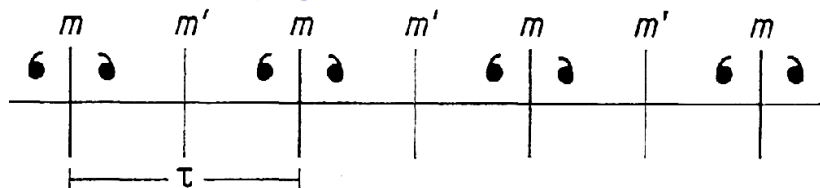
- ▶ Translation  $\vec{a}$
- ▶ Translation  $\vec{b}$



## Translation und 2-zählige Drehachse



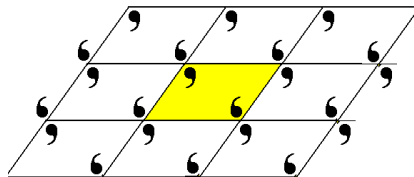
## Translation und Spiegelebene



## p 2

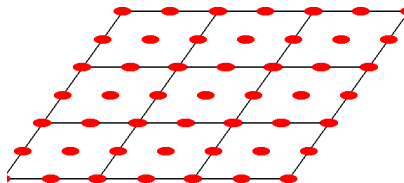
Symmetrieelemente

- ▶ Translation  $\vec{a}$
- ▶ Translation  $\vec{b}$



(PG: monoklin-sphenoidisch)

- ▶  $2_{(0,0)}$
- ▶  $\Rightarrow 2_{(\frac{1}{2},0)}, 2_{(0,\frac{1}{2})}, 2_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}$



p 4

Symmetrieelemente

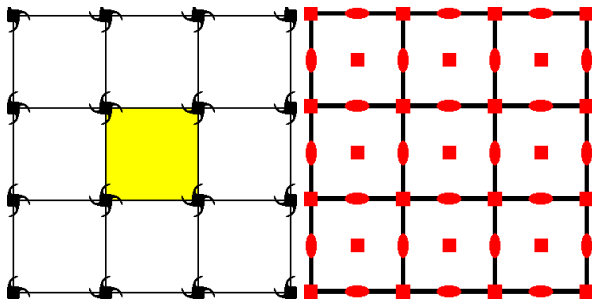
(PG: tetragonal-pyramidal)

▶ Translation  $\vec{a}$

▶  $4_{(0,0)}$

▶ Translation  $\vec{b}$

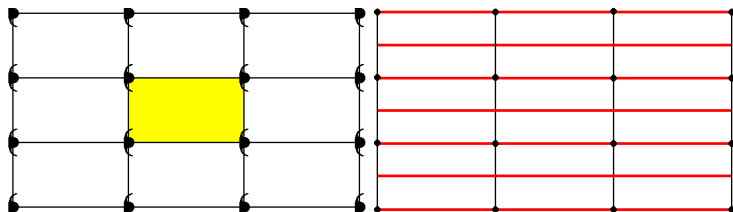
▶  $\Rightarrow 2_{(\frac{1}{2},0)}, 2_{(0,\frac{1}{2})}, 4_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}$



**p m**

Symmetrieelemente

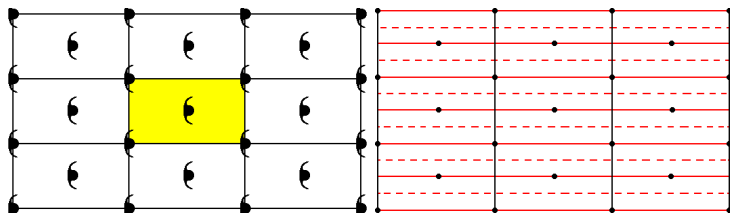
(PG: monoklin-domatisch)

▶ Translation  $\vec{a}$ ▶ Translation  $\vec{b}$ ▶  $m_{(0,y)}$ ▶  $\Rightarrow m_{(\frac{1}{2},y)}$ 

c m

Symmetrieelemente

(PG: monoklin-domatisch)

▶ Translation  $\vec{a}$ ▶ Translation  $\vec{b}$ ▶ Translation  $\frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b}$ ▶  $m_{(0,y)}$ ▶  $\Rightarrow m_{(\frac{1}{2},y)}$ ▶  $\Rightarrow b_{(\frac{1}{4},y)}$ 

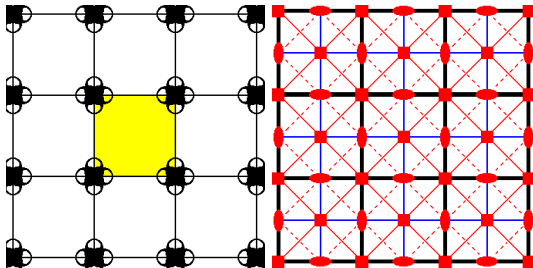
## p 4mm

Symmetrieelemente

(PG: ditetragonal-pyramidal)

- ▶ Translation  $\vec{a}$
- ▶ Translation  $\vec{b}$
- ▶  $m_{(0,y)}$  und  $m_{(0,y)}$

- ▶  $m_{(x,y)}$  und  $m_{(\bar{x},\bar{y})}$
- ▶  $\Rightarrow n_{(x+\frac{1}{2},y+\frac{1}{2})}$   
und  $n_{(\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2})}$



## Bravais-Gitter – Punktgruppe – ebene Raumgruppe

2-dim. Bravais-Gitter	2-dim. Punktgruppe	2-dim. Raumgruppe
schiefes P-Gitter	1 2	p 1 p 2
rechtwinkliges P- bzw. C-Gitter	m mm <sup>2</sup>	p m, p g, c m p mm <sup>2</sup> , p mg <sup>2</sup> , p gg <sup>2</sup> , c mm <sup>2</sup>
quadratisches P-Gitter	4 4mm	p 4 p 4mm, p 4gm
hexagonales P-Gitter	3 6 3m 6mm	p 3 p 6 p 3m1, p 31m p 6mm
5	10	17

## Literatur

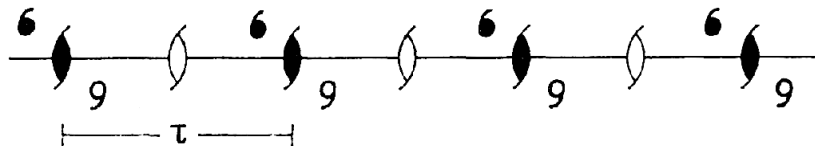
<http://home.in.tum.de/~gagern/ornament/ornament.html>

<http://escher.epfl.ch/escher/>

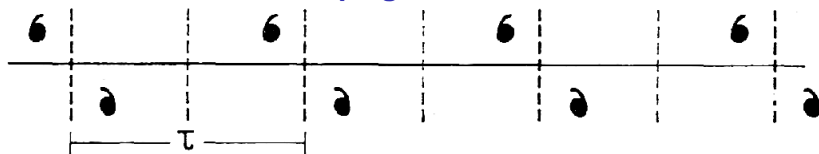
<http://journals.iucr.org/iucr-top/comm/cteach/pamphlets.html>

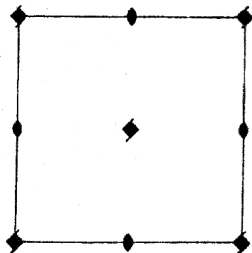
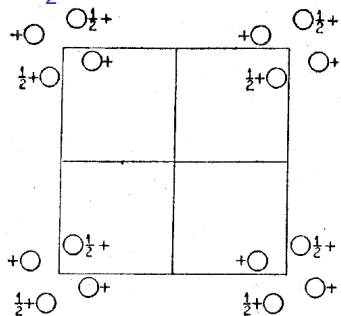
[http://de.wikipedia.org/wiki/Ebene\\_kristallographische\\_Gruppe](http://de.wikipedia.org/wiki/Ebene_kristallographische_Gruppe)

## Translation und 2-zählige Schraubenachse

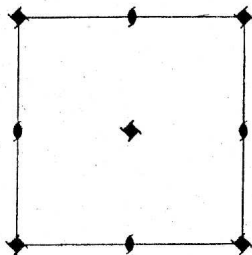
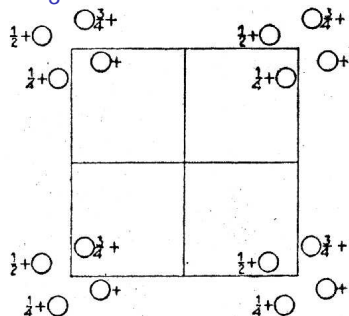


## Translation und a-Gleitspiegelebene



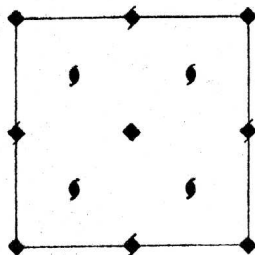
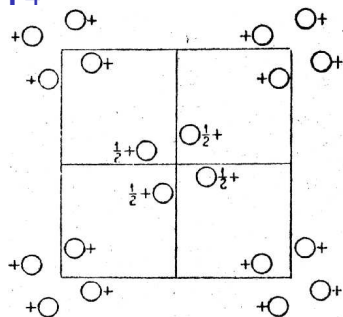
P 4<sub>2</sub>

- ▶  $(x, y, z)$
- ▶  $(\bar{x}, \bar{y}, z)$
- ▶  $4_2(0, 0, z)$
- ▶  $2_{(\frac{1}{2}, 0, z)}$
- ▶  $(\bar{y}, x, z + \frac{1}{2})$
- ▶  $(y, \bar{x}, z + \frac{1}{2})$
- ▶  $4_2(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z)$
- ▶  $2_{(0, \frac{1}{2}, z)}$

P 4<sub>3</sub>

- ▶  $(x, y, z)$
- ▶  $(\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2})$
- ▶  $4_3 (0, 0, z)$
- ▶  $2_1 (\frac{1}{2}, 0, z)$
- ▶  $(\bar{y}, x, z + \frac{3}{4})$
- ▶  $(y, \bar{x}, z + \frac{1}{4})$
- ▶  $4_3 (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z)$
- ▶  $2_1 (0, \frac{1}{2}, z)$

I 4



▶  $(x, y, z)$

▶  $(\bar{y}, x, z)$

▶  $(\bar{x}, \bar{y}, z)$

▶  $(y, \bar{x}, z)$

▶  $+(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

▶  $4(0, 0, z)$

▶  $4(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z)$

▶  $4_2(\frac{1}{2}, 0, z)$

▶  $4_2(0, \frac{1}{2}, z)$

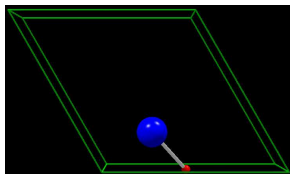
▶  $2_1(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z)$

▶  $2_1(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, z)$

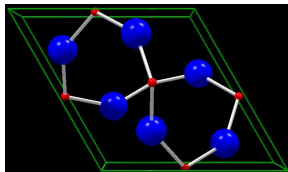
▶  $2_1(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, z)$

▶  $2_1(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, z)$

asymmetrische Einheit + Raumgruppe = Basis



+ P 3<sub>2</sub>21 =

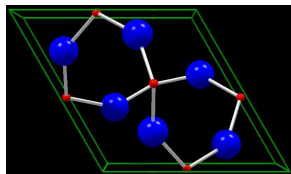


relative Koordinaten (x, y, z):

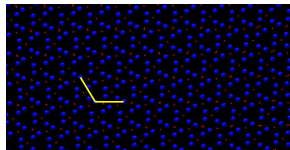
Si 0.4560 0.0000 0.6667

O 0.3890 0.2410 0.7910

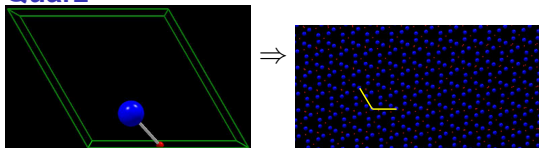
Basis + Gitter = Kristallstruktur



$$+ n \cdot (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}) =$$



## Quarz



- ▶ Gitterkonstanten  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$
- ▶ 4.9140 4.9140 5.4050 90.000 90.000 120.000
- ▶ relative Koordinaten der Atome  $x, y, z$  Si 0.4560  
0.0000 0.6667  
O 0.3890 0.2410 0.7910
- ▶ Raumgruppe (Bravais-Gitter + Symmetrieelemente)  
154: P  $3_221$

- ▶ Bewegung = Drehung + Verschiebung

$$\vec{r}' = \Omega \cdot \vec{r} + \vec{t}$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix}$$

- ▶ Gitterpunkte

- ▶ kristallographische Koordinatensysteme  $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{pmatrix} = \Omega_{\vec{a}\vec{b}\vec{c}} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$$

mit  $\vec{t} = 0$

- ▶  $u, v, w, u', v', w'$  – ganzzahlig  $\Rightarrow \Omega_{ij(\vec{a}\vec{b}\vec{c})}$  – ganzzahlig

- ▶ Translation  $\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$

## Transponierte

$$\Omega_{\vec{a}\vec{b}\vec{c}} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = (u \ v \ w) \cdot \Omega_{\vec{a}\vec{b}\vec{c}}^T$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = (u \ v \ w) \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}$$

## Inverse

$$\Omega \cdot \Omega^{-1} = 1$$

## Spur

$$Sp\Omega = \sum_{i=1}^3 a_{ii} = a_{11} + a_{22} + a_{33}$$

## Determinante

$$\begin{aligned} \text{▶ } \det \Omega &= a_{11} \cdot a_{22} \cdot a_{33} + a_{12} \cdot a_{23} \cdot a_{31} + a_{13} \cdot a_{21} \cdot a_{32} \\ &\quad - a_{13} \cdot a_{22} \cdot a_{31} - a_{11} \cdot a_{23} \cdot a_{32} - a_{12} \cdot a_{21} \cdot a_{33} \end{aligned}$$

$$\text{▶ } \det \Omega = \begin{cases} +1 & \text{mathematisch positive Drehung} \\ & \text{(Drehachsen)} \\ -1 & \text{mathematisch negative Drehung} \\ & \text{(Drehinversionsachsen)} \end{cases}$$

$$\text{▶ } \det \Omega = \det \Omega^T$$

$$\bar{1} \quad \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \quad u, v, w \Rightarrow \bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$$

$$2_{0,0,z} \quad \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad u, v, w \Rightarrow \bar{u}, \bar{v}, w \quad 2 \parallel \vec{c}$$

$$2_{x,0,0} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \quad u, v, w \Rightarrow u, \bar{v}, \bar{w} \quad 2 \parallel \vec{a}$$

$2_{x,x,0}$ 

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

$$u, v, w \Rightarrow v, u, \bar{w}$$

 $2 \parallel [110]$  $m_{x,y,0}$ 

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

$$u, v, w \Rightarrow u, v, \bar{w}$$

 $m \perp \vec{c}$

$$m_{x,y,0} = \bar{2}_{0,0,z} = 2_{0,0,z} \cdot \bar{1}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

 $\bar{2} \parallel \bar{c}$ 

### Drehinversionsachsen

$$\bar{4}_{0,0,z} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$$

$$3_{0,0,z} \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

 $3 \parallel \vec{c}$ 

$$3_{0,0,z} \cdot 3_{0,0,z} \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$3_{0,0,z} \cdot 3_{0,0,z} \cdot 3_{0,0,z} \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$3_{x,x,x}$ 

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{a} \rightarrow \vec{b}$$

$$\vec{b} \rightarrow \vec{c}$$

$$\vec{c} \rightarrow \vec{a}$$

 $3\| [111]$

**mm2**

$$m_{0,y,z} \cdot m_{x,0,z} = 2_{0,0,z}$$

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

**422**

$$2_{x,0,0} \cdot 2_{x,x,0} = 4_{0,0,z}(270^\circ)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

# Symmetrieelementen im kartesischen Koordinatensystem

184

- ▶ kartesisches Koordinatensystem  $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$

- ▶ 
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \Omega_{\vec{e}_1 \vec{e}_2 \vec{e}_3} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

mit  $\vec{t} = 0$

- ▶ Beispiel  $\vec{e}_D \parallel \vec{e}_3$ :

$$\Omega = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- ▶ lineare Transformation: kristallographische ins kartesisches Koordinatensystem  
Invariante: Spur der Matrix
- ▶  $u, v, w, u', v', w'$ : ganzzahlig  
 $\Rightarrow \text{Sp}\Omega_{\vec{a}\vec{b}\vec{c}}$ : ganzzahlig
- ▶  $\text{Sp}\Omega_{\vec{e}_1\vec{e}_2\vec{e}_3} = \cos \phi + \cos \phi + 1$
- ▶  $2 \cos \phi + 1 = G$

G	$\phi$	$\phi$	SE
-1	$\pi$	$180^\circ$	2
0	$2/3\pi$	$120^\circ$	3
▶ 1	$\pi/2$	$90^\circ$	4
2	$\pi/3$	$60^\circ$	6
3	0 bzw. $2\pi$	$0^\circ$ bzw. $360^\circ$	1

# Symmetrieelemente im kartesischen Koordinatensystem

186

 $2_{0,0,z}$ 

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{abc} \quad \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{e_1 e_2 e_3}$$

 $2 \parallel \vec{c}$  $3_{0,0,z}$ 

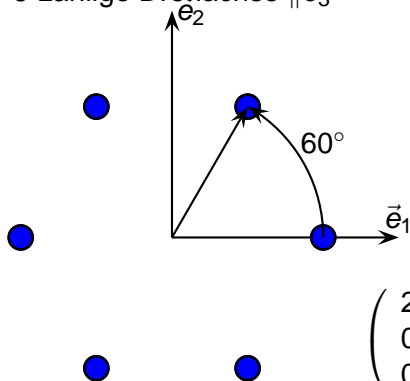
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{abc} \quad \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{e_1 e_2 e_3}$$

 $3 \parallel \vec{c}$

# Symmetrieelemente im kartesischen Koordinatensystem

187

6-zählige Drehachse  $\parallel \vec{e}_3$



$$\begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2.0 \\ 0.0 \\ 0.0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1.0 \\ 1.73 \\ 0.0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1.0 \\ 1.73 \\ 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -2.0 \\ 0.0 \\ 0.0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1.0 \\ -1.73 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1.0 \\ -1.73 \\ 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{r}' = \Omega \cdot \vec{r} + \vec{t}$$

mit  $\vec{t} = (p/n)(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})$  und  $\vec{t} \parallel \vec{e}_D$   
 und  $p = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ ,  $n$ -Zähligkeit

$4_1$  0,0,z

$4_1 \parallel \vec{c}$

▶  $x' = -y; y' = x; z' = z + \frac{1}{4}$

▶ 
$$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

▶ 
$$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

# Kartesisches Koordinatensystem: $\vec{e}_j \cdot \vec{e}_k = \delta_{jk}$

► Einheitsvektoren

$$|\vec{e}_1| = |\vec{e}_2| = |\vec{e}_3| = 1$$

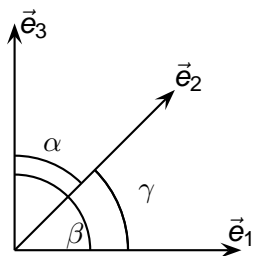
► stehen **senkrecht** aufeinander

$$\vec{e}_1 \perp \vec{e}_2 \perp \vec{e}_3$$

►  $\vec{e}_3 = \vec{e}_1 \times \vec{e}_2$  (Kreuzprodukt)

►  $\vec{e}_1 = \vec{e}_2 \times \vec{e}_3$

►  $\vec{e}_2 = \vec{e}_3 \times \vec{e}_1$



►  $\alpha = \angle(\vec{e}_2, \vec{e}_3) = 90^\circ$

$$\vec{e}_2 \cdot \vec{e}_3 = e_1 e_2 \cos(\alpha) = 1 \text{ (Skalarprodukt)}$$

$\beta = \angle(\vec{e}_3, \vec{e}_1) = 90^\circ$

$$\vec{e}_3 \cdot \vec{e}_1 = e_1 e_2 \cos(\alpha) = 1$$

$\gamma = \angle(\vec{e}_1, \vec{e}_2) = 90^\circ$

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = e_1 e_2 \cos(\alpha) = 1$$

# Kristallographische Koordinatensysteme

## Kubisches Kristallsystem

▶  $\vec{e}_1 \parallel \vec{a}$   $\vec{e}_1 \parallel [100]$

$$\vec{a} = a \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$$

▶  $\vec{e}_2 \parallel \vec{b}$   $\vec{e}_2 \parallel [010]$

$$\vec{b} = 0 \cdot \vec{e}_1 + a \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$$

▶  $\vec{e}_3 \parallel \vec{c}$   $\vec{e}_3 \parallel [001]$

$$\vec{c} = 0 \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + a \cdot \vec{e}_3$$

▶  $\bar{A}_{\alpha i} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}$   $\vec{a}_\alpha = \bar{A}_{\alpha i} \vec{e}_i \quad (\alpha, i = 1, 2, 3)$

$$\vec{a} = \vec{a}_1, \vec{b} = \vec{a}_2, \vec{c} = \vec{a}_3$$

$$\vec{e}_1 = x, \vec{e}_2 = y, \vec{e}_3 = z$$

# Kristallographische Koordinatensysteme

## Tetragonales Kristallsystem

- ▶  $\vec{e}_1 \parallel \vec{a}$   $\vec{e}_1 \parallel [100]$   
 $\vec{a} = a \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$
- ▶  $\vec{e}_2 \parallel \vec{b}$   $\vec{e}_2 \parallel [010]$   
 $\vec{b} = 0 \cdot \vec{e}_1 + a \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$
- ▶  $\vec{e}_3 \parallel \vec{c}$   $\vec{e}_3 \parallel [001]$   
 $\vec{c} = 0 \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + c \cdot \vec{e}_3$
- ▶  $\bar{A}_{\alpha i} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$

# Kristallographische Koordinatensysteme

## Rhombisches Kristallsystem

- ▶  $\vec{e}_1 \parallel \vec{a}$   $\vec{e}_1 \parallel [100]$   
 $\vec{a} = a \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$
- ▶  $\vec{e}_2 \parallel \vec{b}$   $\vec{e}_2 \parallel [010]$   
 $\vec{b} = 0 \cdot \vec{e}_1 + b \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$
- ▶  $\vec{e}_3 \parallel \vec{c}$   $\vec{e}_3 \parallel [001]$   
 $\vec{c} = 0 \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + c \cdot \vec{e}_3$
- ▶  $\bar{A}_{\alpha i} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$

# Kristallographische Koordinatensysteme

## Hexagonales/Trigonales Kristallsystem

▶  $\vec{e}_1 \parallel \vec{a}$   $\vec{e}_1 \parallel [100]$

$$\vec{a} = a \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$$

▶  $\vec{e}_2 \perp \vec{a}$   $\vec{e}_2 \perp (010)$

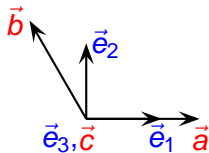
$$\vec{b} = -a \cdot \cos 60^\circ \cdot \vec{e}_1 + a \cdot \cos 30^\circ \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$$

$$\vec{b} = -\frac{a}{2} \cdot \vec{e}_1 + \frac{a\sqrt{3}}{2} \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$$

▶  $\vec{e}_3 \parallel \vec{c}$   $\vec{e}_3 \parallel [001]$

$$\vec{c} = 0 \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + c \cdot \vec{e}_3$$

▶  $\bar{A}_{\alpha i} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ -\frac{a}{2} & \frac{a\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$



# Kristallographische Koordinatensysteme

## Rhomboedrisches Kristallsystem

- ▶  $\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3 \parallel 3, \bar{3}$
- ▶  $\vec{a}_i \parallel m$  oder  $(01\bar{1}) \parallel 2$
- ▶  $\vec{e}_1 \perp (\bar{1}10)$
- ▶  $\vec{e}_2 \parallel (\bar{1}10)$
- ▶  $\vec{e}_3 \parallel [111]$
- ▶  $\bar{A}_{\alpha i} =$

$$\begin{pmatrix} a\sqrt{\frac{1}{2}(1 - \cos \alpha)} & a\sqrt{\frac{1}{6}(1 - \cos \alpha)} & a\sqrt{\frac{2}{3}(\frac{1}{2} + \cos \alpha)} \\ -a\sqrt{\frac{1}{2}(1 - \cos \alpha)} & a\sqrt{\frac{1}{6}(1 - \cos \alpha)} & a\sqrt{\frac{2}{3}(\frac{1}{2} + \cos \alpha)} \\ & 0 & a\sqrt{\frac{2}{3}(1 - \cos \alpha)} & a\sqrt{\frac{2}{3}(\frac{1}{2} + \cos \alpha)} \end{pmatrix}$$

# Kristallographische Koordinatensysteme

## Monoklines Kristallsystem (2. Aufstellung)

▶  $\vec{e}_2 \parallel \vec{b}$   $\vec{e}_2 \parallel [010]$

$$\vec{b} = 0 \cdot \vec{e}_1 + b \cdot \vec{e}_2 + 0 \cdot \vec{e}_3$$

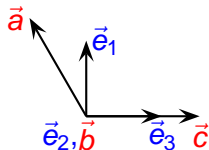
▶  $\vec{e}_3 \parallel \vec{c}$   $\vec{e}_3 \parallel [001]$

$$\vec{c} = 0 \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + c \cdot \vec{e}_3$$

▶  $\vec{e}_1 \perp (100)$

$$\vec{a} = a \cdot \sin \beta \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + a \cdot \cos \beta \cdot \vec{e}_3$$

▶  $\bar{A}_{\alpha i} = \begin{pmatrix} a \cdot \sin \beta & 0 & a \cdot \cos \beta \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$



# Kristallographische Koordinatensysteme

## Triklinen Kristallsystem ( $c < a < b$ )

▶  $\vec{e}_3 \parallel \vec{c}$

$$\vec{c} = 0 \cdot \vec{e}_1 + 0 \cdot \vec{e}_2 + c \cdot \vec{e}_3$$

$$\vec{e}_3 \parallel [001]$$

▶  $\vec{e}_2 \perp (010)$

▶  $\vec{e}_1 \parallel (010)$

▶  $\bar{A}_{\alpha i} = \begin{pmatrix} a \cdot \sin \beta & 0 & a \cdot \cos \beta \\ -b \cdot \sin \alpha \cdot \cos \gamma^* & \frac{bQ}{\sin \beta} & b \cdot \cos \alpha \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$

mit

$$\cos \gamma^* = (\cos \alpha \cdot \cos \beta - \cos \gamma) / \sin \alpha \sin \beta$$

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

# Reziprokes Gitter: $\vec{a}_i \cdot \vec{a}_k^* = \delta_{ik}$

$$\blacktriangleright \vec{a}_1^* = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\blacktriangleright \vec{a}_2^* = \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\blacktriangleright \vec{a}_3^* = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\blacktriangleright V_{EZ} = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) \text{ (Spatprodukt)}$$

$$\blacktriangleright V_{EZ}^* = 1/V_{EZ} = \vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \times \vec{c}^*)$$

$$\blacktriangleright \vec{a}^* \perp \vec{b} - \vec{c} \text{ Ebene}$$

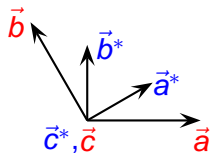
$$\blacktriangleright \vec{b}^* \perp \vec{c} - \vec{a} \text{ Ebene}$$

$$\blacktriangleright \vec{c}^* \perp \vec{a} - \vec{b} \text{ Ebene}$$

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$



# Reziprokes Gitter

$$\blacktriangleright a^* = \frac{b \cdot c \cdot \cos \alpha}{V}$$

$$\blacktriangleright b^* = \frac{c \cdot a \cdot \cos \beta}{V}$$

$$\blacktriangleright c^* = \frac{a \cdot b \cdot \cos \gamma}{V}$$

$$\blacktriangleright \cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}$$

$$\blacktriangleright \cos \beta^* = \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{\sin \gamma \sin \alpha}$$

$$\blacktriangleright \cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}$$

# Volumen der Elementarzelle

▶  $V_{EZ} = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$  (Spatprodukt)

▶  $V_{EZ} = Qabc$

mit

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

▶  $V_{EZ} = 1/V_{EZ}^*$

# Gitterpunkte, Gittergeraden, Netzebenen

- ▶ Gitterpunkte

$$\vec{R} = u \cdot \vec{a} + v \cdot \vec{b} + w \cdot \vec{c}$$

·uvw·

$$\vec{R} = \vec{A}_{\alpha i} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \text{ (im kartesischen KS)}$$

- ▶ Gittergeraden

$$\lambda \cdot \vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$$

[uvw]

- ▶ Netzebenen

$$\vec{H} = h \cdot \vec{a}^* + k \cdot \vec{b}^* + l \cdot \vec{c}^*$$

$\perp (hkl)$

nur im Kubischen:  $\vec{H}_{ijk} \parallel \vec{R}_{ijk}$ !

# Netzebenenabstände

- ▶  $|\vec{H}| = 1/d$   $\vec{H}^2 = 1/d^2$
- ▶ 
$$H^2 = h^2 \cdot \vec{a}^* \cdot \vec{a}^* + k^2 \cdot \vec{b}^* \cdot \vec{b}^* + l^2 \cdot \vec{c}^* \cdot \vec{c}^* + 2h \cdot k \cdot \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* + 2k \cdot l \cdot \vec{b}^* \cdot \vec{c}^* + 2l \cdot k \cdot \vec{c}^* \cdot \vec{a}^*$$

## Kubisches Kristallsystem

- ▶  $1/d^2 = h^2 \cdot \vec{a}^* \cdot \vec{a}^* + k^2 \cdot \vec{b}^* \cdot \vec{b}^* + l^2 \cdot \vec{c}^* \cdot \vec{c}^*$
- ▶ 
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

# Netzebenenabstände

## Tetragonales Kristallsystem

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

## Rhombisches Kristallsystem

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

## Hexagonales Kristallsystem

$$\frac{1}{d^2} = \frac{3}{4} \cdot \frac{h^2 + k^2 + hk}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

# Netzebenenabstände

## Trigonales Kristallsystem

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \cdot \sin^2 \alpha + 2 \cdot (kl + lh + hk) \cdot (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2 \cdot (1 - 3 \cdot \cos^2 \alpha + 2 \cdot \cos^3 \alpha)}$$

## Monoklines Kristallsystem

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2 \cdot \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \cdot \sin^2 \beta} - \frac{2 \cdot h \cdot l \cdot \cos \beta}{a \cdot c \cdot \sin^2 \beta}$$

# Netzebenenabstände

## Triklines Kristallsystem

$$\frac{1}{d^2} = \frac{b^2 c^2 h^2 \sin^2 \alpha + c^2 a^2 k^2 \sin^2 \beta + a^2 b^2 l^2 \sin^2 \gamma}{a^2 b^2 c^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)} \dots$$
$$\frac{+ 2abc^2 \cdot hk(\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)}{\dots}$$
$$\frac{+ 2ab^2c \cdot lh(\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)}{\dots}$$
$$\frac{+ 2a^2c \cdot kl(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)}{\dots}$$

# Netzebene von zwei Gitterrichtungen

▶  $\vec{H} = \vec{R}_1 \times \vec{R}_2$

▶  $\vec{H} = F \cdot$

$$\left( (v_1 w_2 - v_2 w_1) \vec{a}^* + (w_1 u_2 - w_2 u_1) \vec{b}^* + (u_1 v_2 - u_2 v_1) \vec{c}^* \right)$$

▶  $\vec{H} = F \begin{vmatrix} \vec{a}^* & \vec{b}^* & \vec{c}^* \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix}$

# Zonen

▶  $\vec{R} = \vec{H}_1 \times \vec{H}_2$

▶  $\vec{R} = \frac{1}{F}$

$$\left( (k_1 l_2 - k_2 l_1) \vec{a} + (l_1 h_2 - l_2 h_1) \vec{b} + (h_1 k_2 - h_2 k_1) \vec{c} \right)$$

▶  $\vec{R} = \frac{1}{F} \begin{vmatrix} \vec{a} & \vec{b} & \vec{c} \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix}$

# Winkel zwischen Netzebenen

- ▶  $\cos \phi = \frac{\vec{H}_1 \cdot \vec{H}_2}{H_1 H_2}$
- ▶  $\cos \phi = d_1 \cdot d_2 \cdot (h_1 h_2 a^{*2} + k_1 k_2 b^{*2} + l_1 l_2 c^{*2} + (h_1 k_2 + h_2 k_1) a^* b^* \cos \gamma^* + (k_1 l_2 + k_2 l_1) b^* c^* \cos \alpha^* + (l_1 h_2 + l_2 h_1) c^* a^* \cos \beta^*)$

# Winkel zwischen Netzebenen

## Kubisches Kristallsystem

$$\text{▶ } \cos \phi = d_1 \cdot d_2 \cdot \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2}$$

$$\text{▶ } \cos \phi = \frac{a}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}} \cdot \frac{a}{\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} \cdot \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{a^2}$$

$$\text{▶ } \cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

$$\text{▶ } \angle((100), (110))?$$

# Winkel zwischen Netzebenen

## Rhombisches Kristallsystem

$$\blacktriangleright \cos \phi = d_1 \cdot d_2 \cdot (h_1 h_2 a^{*2} + k_1 k_2 b^{*2} + l_1 l_2 c^{*2})$$

$$\blacktriangleright = \frac{1}{\sqrt{\frac{h_1^2}{a^2} + \frac{k_1^2}{b^2} + \frac{l_1^2}{c^2}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{h_2^2}{a^2} + \frac{k_2^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2}}} \cdot \left( h_1 h_2 \left( \frac{bc \sin \alpha}{V_{EZ}} \right)^2 + k_1 k_2 \left( \frac{ca \sin \alpha}{V_{EZ}} \right)^2 + l_1 l_2 \left( \frac{ab \sin \alpha}{V_{EZ}} \right)^2 \right)$$

# Winkel zwischen Netzebenen

## Rhombisches Kristallsystem

$$\begin{aligned} \text{▶ } \cos \phi &= \frac{1}{\frac{1}{b} \sqrt{h_1^2 \left(\frac{b}{a}\right)^2 + k_1^2 + l_1^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2}} \cdot \\ &\quad \frac{1}{\frac{1}{b} \sqrt{h_2^2 \left(\frac{b}{a}\right)^2 + k_2^2 + l_2^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2}} \cdot \\ &\quad \left( h_1 h_2 \left(\frac{1}{a}\right)^2 + k_1 k_2 \left(\frac{1}{b}\right)^2 + l_1 l_2 \left(\frac{1}{c}\right)^2 \right) \\ \text{▶ } &= \frac{b}{\sqrt{h_1^2 \left(\frac{b}{a}\right)^2 + k_1^2 + l_1^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2}} \cdot \frac{b}{\sqrt{h_2^2 \left(\frac{b}{a}\right)^2 + k_2^2 + l_2^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2}} \\ &\quad \cdot \frac{1}{b^2} \left( h_1 h_2 \left(\frac{b}{a}\right)^2 + k_1 k_2 + l_1 l_2 \left(\frac{b}{c}\right)^2 \right) \end{aligned}$$

# Winkel zwischen Netzebenen

## Rhombisches Kristallsystem

$$\blacktriangleright \cos \phi = \frac{h_1 h_2 \left(\frac{b}{a}\right)^2 + k_1 k_2 + l_1 l_2 \left(\frac{b}{c}\right)^2}{\sqrt{h_1^2 \left(\frac{b}{a}\right)^2 + k_1^2 + l_1^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2} \sqrt{h_2^2 \left(\frac{b}{a}\right)^2 + k_2^2 + l_2^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2}}$$

# Häufigkeit der Kristallsysteme

## Verteilung der Minerale

kubisch	12.2%
tetragonal	9.8%
rhombisch	22.3%
hexagonal	16.6%
monoklin	31.7%
triklin	7.4%