Stereographische Projektion

Skript zur Einführung in die Kristallographie

INHALT ▲

1 Kristallflächen und Indizes

- 1.1 Aufstellung und Indizes
- 1.2 Indizes und Gitter
- 1.3 Das hexagonale Achsensystem

2 Die stereographische Projektion

- 2.1 Umkugel und Flächenpole
- 2.2 Vom Pol zum Stereogramm
- 2.3 Die Winkel φ und ρ
- 2.4 Kreise, Winkel und das Wulffsche Netz

3 Symmetrieoperationen und Punktgruppen

- 3.1 Symmetrieoperation und Symmetrieelement
- 3.2 Kopplung und Kombination
- 3.3 Punktgruppen
- 3.4 Kristallsysteme und Kristallklassen

4 Symmetriegerüste im Stereogramm

- 4.1 Symmetrieelemente in der Projektion
- 4.2 Wohin ein Symmetrieelement einen Pol bringt
- 4.3 Die Symmetriesätze
- 4.4 Vom Pol zur Bahn
- 4.5 Pole auf Symmetrieelementen

5 Blickrichtungen

- 5.1 Was ist eine Blickrichtung?
- 5.2 Das Hermann-Mauguin-Symbol lesen
- 5.3 Volles und gekürztes Symbol
- 5.4 Zwei Aufstellungen derselben Punktgruppe VERTIEFUNG
- 5.5 Was die Punktgruppe über den Kristall verrät VERTIEFUNG

6 Kristallformen im Stereogramm

- 6.1 Was ist eine Kristallform?
- 6.2 Allgemeine Form, spezielle Form, Grenzform
- 6.3 Andere Projektionsrichtung
- 6.4 Pyrit und Galenit

7 Zonen

- 7.1 Was ist eine Zone?
- 7.2 Zonenkreis und Zonenpol
- 7.3 Die Zonengleichung
- 7.4 Flächen im Schnittpunkt zweier Zonen
- 7.5 Zonenachse und Flächennormale

8 Tracht und Habitus

8.1 Tracht
8.2 Habitus
8.3 Wie der Habitus entsteht
8.4 Was das Stereogramm zeigt
8.5 Wenn eine Form verschwindet

9 Trigonale und hexagonale Kristalle
9.1 Das Rhomboeder
9.2 Ein Beispiel: Quarz
9.3 Rhomboedrische Achsen VERTIEFUNG
9.4 Vier Indizes für Flächen VERTIEFUNG

VERTIEFUNGEN

10 Lagen, Flächensymmetrie und Multiplizität
10.1 Die Lage eines Pols
10.2 Das orientierte Symbol
10.3 Multiplizität
10.4 Richtungen
10.5 Lage und Flächenform
10.6 Erzeugende Symmetrie und Eigensymmetrie
10.7 Ausblick: Punktlagen in Raumgruppen

11 Symmetrieändernde Verzerrungen
11.1 Was bei einer Verzerrung erhalten bleibt
11.2 Streckung entlang ⟨100⟩
11.3 Streckung entlang ⟨111⟩
11.4 Streckung entlang ⟨110⟩
11.5 Streckung oder Polarisation
11.6 Ein reales Beispiel: Bariumtitanat

Begriffe nach Borchardt-Ott & Sowa, *Kristallographie* (2018).

SO IST DAS SKRIPT AUFGEBAUT

Skript und App sind aus der Vorlesung Kristallographie an der ETH Zürich entstanden. Sie richten sich an alle, die eine Einführung in die Kristallographie hören oder einen vergleichbaren Hintergrund haben.

Der Text ohne Kennzeichnung behandelt den Grundstoff. Vertiefungen zeigen, wie diese Inhalte weitergehen; beim ersten Lesen kann man sie überspringen.

Vertiefung	Kasten oder Abschnitt, der über den Grundstoff hinausführt. Der erste Satz sagt, woran er anknüpft und wozu man ihn braucht; bei ganzen Kapiteln steht das im Kasten „Voraussetzungen“.
Grundlagen	Kurz zusammengefasstes Grundwissen, auf dem der Text aufbaut, etwa zu Miller'schen Indizes oder Gruppen. Es gehört zum Haupttext.
In der App	Hinweis zur Bedienung der App.

1 Kristallflächen und Indizes

Um die Flächen und Kanten eines Kristalls zu beschreiben, legt man ein Achsensystem in den Kristall. Auf seine Achsen beziehen sich die Indizes von Flächen und Richtungen.

LERNZIELE

- die Miller'schen Indizes einer Fläche aus ihren Achsenabschnitten bestimmen und Richtungen mit [*uvw*] bezeichnen
- erklären, warum eine Fläche ihre Indizes behält, wenn sich das Gitter ändert, und was sich dabei ändert
- das hexagonale Achsensystem beschreiben und Richtungen darin einzeichnen

1.1 Aufstellung und Indizes

Jede Kristallfläche verläuft parallel zu einer Schar von Netzebenen des Kristallgitters. Ihre Lage lässt sich deshalb mit den Miller'schen Indizes (*hkl*) angeben, jede Kante als Richtung [*uvw*]. Parallele Gegenflächen gehören zur selben Netzebenenschar, man unterscheidet sie aber als (*hkl*) und ($\bar{h}\bar{k}\bar{l}$).

GRUNDLAGEN · **Miller'sche Indizes**

Eine Fläche schneidet die Achsen *a*, *b* und *c* nach *m*, *n* und *p* Achseneinheiten. Ihre Miller'schen Indizes (*hkl*) sind die kleinsten ganzen Zahlen im Verhältnis der Kehrwerte $1/m : 1/n : 1/p$. Die Fläche in Abb. 1.1 schneidet die Achsen bei 2, 1 und 3; die Kehrwerte ½, 1, ⅓ ergeben, mit 6 multipliziert, (362).

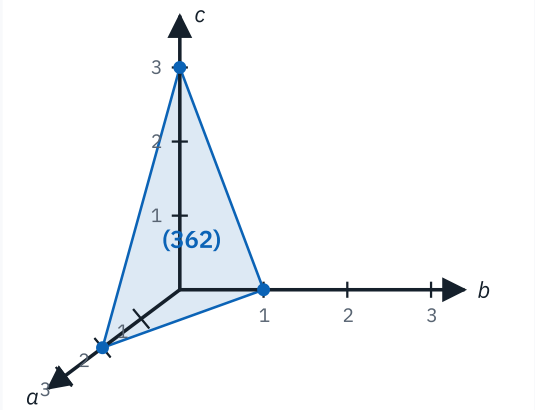


Abb. 1.1 Eine Fläche mit den Achsenabschnitten 2*a*, 1*b* und 3*c* hat die Miller'schen Indizes (362) (nach Borchardt-Ott Abb. 3.9).

- Verläuft eine Fläche parallel zu einer Achse, liegt der Achsenabschnitt im Unendlichen, und der Index ist 0: (100) schneidet nur *a*, (110) verläuft parallel zu *c*.
- Ein negativer Index erhält einen Strich über der Ziffer, z. B. ($\bar{1}$00) für die Gegenfläche von (100).
- Eine Richtung [*uvw*] führt vom Ursprung zum Gitterpunkt $ua + vb + wc$, wieder mit den kleinsten ganzen Zahlen. [100] ist die Richtung von *a*.
- {*hkl*} steht für eine Fläche und alle zu ihr symmetrisch gleichwertigen Flächen (Kapitel 6), ⟨*uvw*⟩ entsprechend für Richtungen (Kapitel 5).

Dass sich alle Flächen und Kanten eines Kristalls mit kleinen, teilerfremden ganzen Zahlen bezeichnen lassen, ist das **Gesetz der rationalen Indizes**, zuerst formuliert von René-Just Haüy. Es ist eine Folge des periodischen Aufbaus: Kristallflächen liegen parallel zu Netzebenen des Gitters. Je kleiner die Indizes, desto dichter ist die Netzebene in der Regel mit Gitterpunkten besetzt; Kristallflächen haben deshalb meist kleine Indizes (Kapitel 8).

Man stellt einen Kristall üblicherweise so auf, dass *a* nach vorn, *b* nach rechts und *c* nach oben zeigt.

1.2 Indizes und Gitter: Was sich ändert und was nicht

Miller'sche Indizes messen nicht in Ångström oder Millimetern, sondern in Einheiten der Achsen des Kristalls. Die Fläche (111) schneidet *a*, *b* und *c* jeweils bei einer Einheit, gleich wie lang diese Einheiten sind. Ändern sich die Längen der Achsen oder die Winkel zwischen ihnen, ändert sich der Massstab mit, und die Indizes bleiben dieselben. Man kann sich das Achsensystem als kariertes Gummituch vorstellen: Zieht man das Tuch in die Länge, bleibt ein Punkt im selben Kästchen, auch wenn sich sein Abstand in Millimetern ändert. Ebenso bezeichnen [100], [010] und [001] immer die Richtungen der drei Achsen, ob das Achsensystem kubisch, orthorhombisch oder rhomboedrisch ist.

Was sich ändert, sind die Winkel zwischen den Flächen. Abb. 1.2 zeigt die tetragonale Dipyramide {111} bei drei Achsenverhältnissen *c*/*a*. Jede ihrer Flächen schneidet die drei Achsen bei einer Einheit, und sie heisst in allen drei Kristallen gleich. Je länger *c* im Vergleich zu *a* ist, desto steiler stehen die Flächen: Gegen die Ebene von *a* und *b* ist (111) um 42,2° (*c*/*a* = 0,64, wie beim Rutil), um 54,7° (*c*/*a* = 1) bzw. um 70,5° geneigt (*c*/*a* = 2).

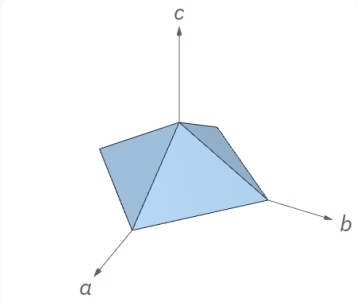
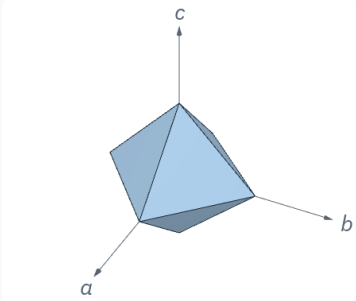
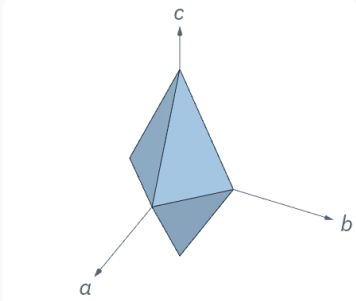


Abb. 1.2a *c*/*a* = 0,64: flach, (111) um 42,2° geneigt.
In der App öffnen →



b *c*/*a* = 1: 54,7°, wie beim Oktaeder.
In der App öffnen →



c *c*/*a* = 2: steil, 70,5°.
In der App öffnen →

Abb. 1.2 Die tetragonale Dipyramide {111} bei drei Achsenverhältnissen; die vordere obere Fläche ist jeweils (111). Die Flächen heissen in allen drei Kristallen gleich, aber ihre Neigung ändert sich. Ziehen dreht die Ansicht.

Drei Arten von Veränderung muss man deshalb auseinanderhalten:

WAS SICH ÄNDERT	INDIZES	WINKEL ZWISCHEN DEN FLÄCHEN
Flächen parallel verschoben (Habitus, Kapitel 8)	gleich	gleich
Kristall gedreht	gleich	gleich
Gitter: Achsenlängen oder Achsenwinkel	gleich	ändern sich

Im Stereogramm (Kapitel 2) zeigt sich das so: Im ersten Fall bleibt es gleich, im zweiten sieht es anders aus, aber die Winkel zwischen den Polen bleiben (Kapitel 6), und erst im dritten rücken die Pole gegeneinander.

Kennt man das Gitter eines Kristalls nicht, legt man die Einheiten auf den Achsen über eine seiner Flächen fest. Eine Fläche, die alle drei Achsen schneidet, meist eine grosse, erhält die Indizes (111); sie heisst **Einheitsfläche**. Ihre Achsenabschnitte sind die Einheiten auf *a*, *b* und *c* und ergeben das **Achsenverhältnis** *a* : *b* : *c*, eine Materialkonstante des Kristalls. Alle übrigen Flächen werden auf diese Einheiten bezogen. Am Kristall in Abb. 1.3 sind die grossen Flächen die Einheitsflächen {111}. Eine Fläche der kleineren Dipyramide schneidet die Achsen bei 2*a*, 2*b* und ⅔*c*; die Kehrwerte ½, ½, 3/2 ergeben (113).

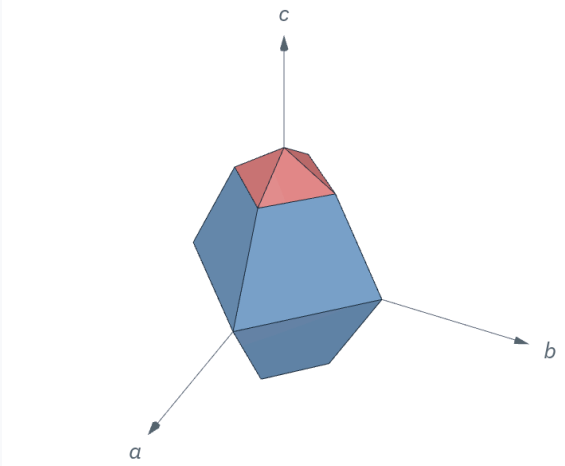


Abb. 1.3 Kristall aus zwei tetragonalen Dipyramiden (nach Hoffmann Abb. 2.22): Die grossen Flächen {111} sind die Einheitsflächen, die kleinen {113}.
In der App öffnen →

IN DER APP

Unter „Gitter“ lässt sich c/a verändern. Mit „Indizes (hkl)“ sieht man, dass die Flächen ihre Namen behalten, während sich ihre Neigung ändert.

1.3 Das hexagonale Achsensystem

Trigonale und hexagonale Kristalle haben eine 3-, $\bar{3}$-, 6- oder $\bar{6}$-zählige Hauptachse. Man beschreibt sie mit einem eigenen Achsensystem und legt c parallel zu dieser Hauptachse. Senkrecht dazu liegen a und b, gleich lang und im Winkel von 120° zueinander: $a = b$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$. Wegen der Hauptachse gibt es in dieser Ebene noch eine dritte, gleichwertige Achse: Man schreibt a_1, a_2, a_3, je 120° voneinander (Abb. 1.4). Als Richtungen sind das [100], [010] und $[1\bar{1}0]$, denn $a_1 + a_2 + a_3 = 0$.

Die Richtungen ⟨210⟩ halbieren die Winkel zwischen benachbarten Achsenrichtungen $\pm a_1$, $\pm a_2$, $\pm a_3$: $[210] = 2a_1 + a_2$ liegt zwischen a_1 und $-a_3$ und steht senkrecht auf a_2. Genau in der Mitte zwischen a_1 und a_2 liegt dagegen $[110] = -a_3$, eine Richtung der Familie ⟨100⟩. ⟨100⟩ und ⟨210⟩ sind die 2. und 3. Blickrichtung des hexagonalen Systems (Kapitel 5). Richtungen gibt dieses Skript mit drei Indizes [uvw] an.

Eine Richtung und die Normale der gleich indizierten Fläche fallen hier im Allgemeinen nicht zusammen (Kapitel 7): Die Fläche (100) ist parallel zu a_2 und c, ihr Pol liegt deshalb nicht auf a_1, sondern in Richtung [210] (im Stereogramm unten, Abb. 9.2).

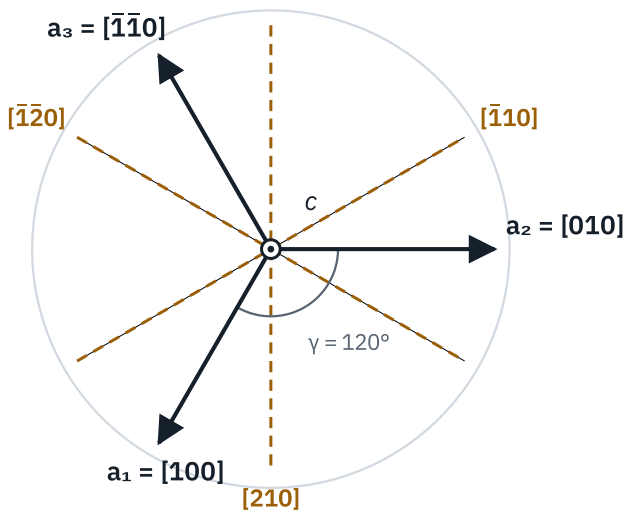


Abb. 1.4 Hexagonale Achsen, Blick entlang c (wie im Stereogramm der App): a_1, a_2 und $a_3 = -(a_1 + a_2)$ im Winkel von 120°; die Geraden ⟨210⟩ (gestrichelt) halbieren die Winkel zwischen den Achsenrichtungen.

ZUSAMMENFASSUNG

- Flächen bezeichnet man mit Miller'schen Indizes (hkl), den kleinsten ganzen Zahlen im Verhältnis der Kehrwerte ihrer Achsenabschnitte; Kanten und andere Richtungen mit $[uvw]$. Parallele Gegenflächen sind (hkl) und $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$.
- Indizes zählen in Einheiten der Achsen des Kristalls. Ändert sich das Gitter, behalten die Flächen ihre Indizes, aber die Winkel zwischen ihnen ändern sich.
- Hexagonale Achsen: $a = b$, $\gamma = 120°$, c senkrecht dazu entlang der Hauptachse; drei gleichwertige Achsen a_1, a_2, $a_3 = -(a_1 + a_2)$.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 3.3 (Aufstellung, S. 13), 3.4.2 und 3.4.3 (Gittergerade $[uvw]$, negative Indizes, Miller'sche Indizes, S. 14–17, Abb. 3.9), 5.1 (Kristallflächen und Netzebenen, S. 33–34), 5.7 (Einheitsfläche und Achsenverhältnis, S. 54–55), 6.4.2 (Schreibweisen $\langle uvw \rangle$ und $\{hkl\}$, S. 78), 7.1 (hexagonales P-Gitter, Tab. 7.2, S. 88), 7.2.5 (Achsen a_1, a_2, a_3, Richtungen ⟨100⟩ und ⟨210⟩, S. 107–109, Abb. 7.22), Tab. 7.4 (S. 115).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 2.2 (Miller-Indices, negative Indices, Netzebenendichte, Einheitsfläche, S. 42–52, Abb. 2.22 und 2.23).
- D. Schwarzenbach, *Kristallographie*, Springer, Berlin (2001), Abschn. 1.3.2 (Gesetz der rationalen Indizes, Festlegung von $a : b : c$ durch eine vierte Fläche, Miller-Indizes, S. 11–12).
- Neigung von (111) bei verschiedenen Achsenverhältnissen mit dem Code der App berechnet.

2 Die stereographische Projektion

Kristalle sind dreidimensionale Körper. Die stereographische Projektion stellt die Orientierung aller ihrer Flächen eindeutig und übersichtlich in einer Ebene dar.

LERNZIELE

- den Flächenpol einer Kristallfläche konstruieren und in die Projektionsebene projizieren
- Pole der oberen und der unteren Halbkugel unterscheiden
- die Lage eines Pols mit den Winkeln φ und ρ angeben

ZUR VERTIEFUNG

- Normalenwinkel und Flächenwinkel unterscheiden
- begründen, warum Winkel im Stereogramm nur auf Grosskreisen abgelesen werden dürfen

Eine perspektivische Zeichnung eines Kristalls ist oft unübersichtlich: Flächen verdecken sich, und manche Körper sehen aus einer Richtung fast gleich aus. Um die Flächen eines Kristalls und ihre Winkel zu beschreiben, kommt es aber nicht auf Grösse und Lage der Flächen an, sondern nur auf ihre **Orientierung**. Das zeigt das Gesetz der Winkelkonstanz: An verschiedenen Kristallen derselben Art sind die Winkel zwischen entsprechenden Flächen gleich (bei gleichem Druck und gleicher Temperatur). Der Grund: Wächst ein Kristall verzerrt, verschieben sich seine Flächen nur parallel, und die Winkel zwischen ihnen bleiben gleich. Deshalb genügt es, jede Fläche durch die Richtung ihrer Normalen darzustellen.

2.1 Umkugel und Flächenpole

Man denkt sich den Kristall im Mittelpunkt einer Kugel, der **Umkugel**. Vom Mittelpunkt aus zieht man zu jeder Fläche die **Flächennormale**, also die Gerade senkrecht zur Fläche. Wo sie die Kugeloberfläche durchstösst, liegt der **Flächenpol** der Fläche.

Der Flächenpol hängt nur davon ab, wie die Fläche orientiert ist. Ob die Fläche gross oder klein ist und wie weit sie vom Mittelpunkt entfernt liegt, spielt keine Rolle. Parallele Gegenflächen, etwa (100) und ($\bar{1}$00), haben Pole an gegenüberliegenden Stellen der Kugel.

Der Bogen zwischen zwei Flächenpolen auf der Kugel ist der Winkel zwischen den Flächennormalen.

MERKE

Jede Kristallfläche wird durch ihren Flächenpol vertreten: den Durchstosspunkt ihrer Normalen durch die Umkugel. Der Winkel zwischen zwei Polen ist der Winkel zwischen den Flächennormalen.

VERTIEFUNG · **Normalenwinkel und Flächenwinkel**

Im Stereogramm stehen die Pole für die Normalen. Wer Winkel am Kristall selbst misst oder Literaturwerte vergleicht, muss wissen, welcher Winkel gemeint ist.

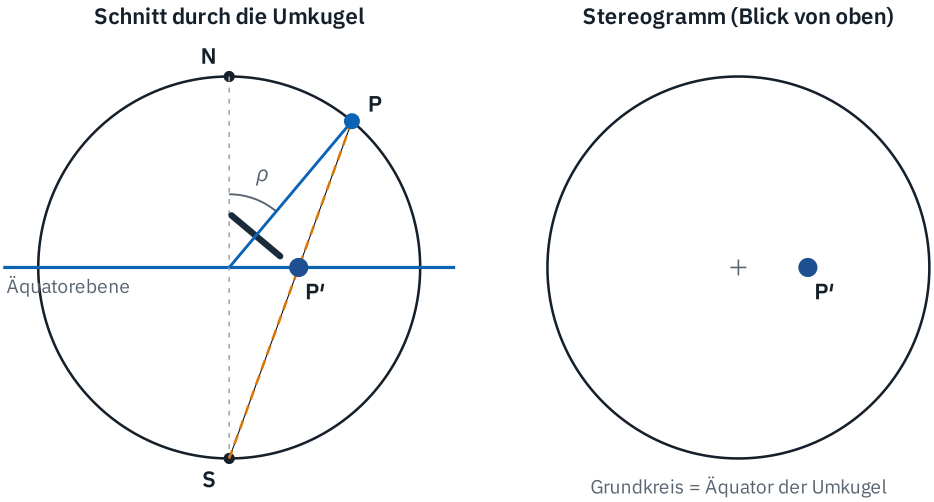
Der Winkel zwischen den Flächennormalen heisst **Normalenwinkel** n. Er ist nicht der Winkel, den die beiden Flächen an ihrer gemeinsamen Kante bilden, der **Flächenwinkel** f. Beide ergänzen sich zu 180°: $n = 180° - f$. Am Würfel stehen benachbarte Flächen senkrecht aufeinander, beide Winkel sind 90°. Am Oktaeder bilden benachbarte Flächen an ihrer Kante den Flächenwinkel 109,47°; ihre Pole liegen 70,53° auseinander.

2.2 Vom Pol zum Stereogramm

Die Pole liegen noch auf einer Kugel. Um sie in die Ebene zu bringen, betrachtet man die Umkugel wie einen Globus: mit Nordpol N oben, Südpol S unten und der **Äquatorebene** als Projektionsebene. Jeden Pol der Nordhalbkugel verbindet man mit dem Südpol; wo diese Verbindungslinie die Äquatorebene schneidet, liegt sein Bildpunkt. Die Pole der Südhalbkugel verbindet man entsprechend mit dem Nordpol.

So landen alle Bildpunkte innerhalb des Äquatorkreises oder auf ihm, dem **Grundkreis** des Stereogramms. Damit man die beiden Halbkugeln unterscheiden kann, zeichnet man Pole der oberen Halbkugel als Punkt ● und Pole der unteren Halbkugel als Kreis ○. Pole auf dem Äquator liegen auf dem Grundkreis und werden als Punkt gezeichnet. (Borchardt-Ott

verwendet für Pole der oberen Halbkugel auch ein Kreuz, Abschn. 5.4.)



Poldistanz ρ

ρ = 40° (obere Halbkugel: Strahl zum Südpol, Punkt ●). Abstand vom Mittelpunkt: 36 % des Radius.

Abb. 2.1 Links ein Schnitt durch die Umkugel: Die Normale der Fläche (dunkel) trifft die Kugel im Flächenpol P; der Strahl zum Südpol (bei Polen der unteren Halbkugel zum Nordpol) schneidet die Äquatorebene im Bildpunkt P′. Rechts derselbe Bildpunkt im Stereogramm. Mit dem Regler wandert der Pol über die Kugel. *Im PDF ein fester Zustand; interaktiv in der Online-Version.*

Am Regler lässt sich ablesen: Ein Pol am Nordpol landet im Mittelpunkt des Stereogramms, ein Pol auf dem Äquator auf dem Grundkreis. Dazwischen rücken die Bildpunkte nicht gleichmässig nach aussen. Ein Schritt von 10° Poldistanz ist am Rand fast doppelt so lang wie in der Mitte. Abstände im Stereogramm sind deshalb kein direktes Mass für Winkel. Genau gilt für den Abstand r des Bildpunkts vom Mittelpunkt $r = R \cdot \tan(\rho/2)$, mit dem Radius R des Grundkreises: Der Strahl zum Südpol in Abb. 2.1 schliesst mit der Achse der Kugel den halben Winkel $\rho/2$ ein. Ein Pol mit $\rho = 45°$ liegt also bei $r \approx 0{,}41\,R$, noch nicht auf halbem Weg zum Grundkreis.

Abb. 2.2 zeigt die Konstruktion für einen ganzen Kristall, den Galenit (PbS) mit Würfel, Oktaeder und Rhombendodekaeder. Jede Fläche hat ihre Normale und ihren Pol; die Projektionsstrahlen führen zum Süd- bzw. Nordpol. Abb. 2.3 ist das fertige Stereogramm. Die Flächen (111) oben und $(11\bar{1})$ unten liegen genau übereinander, deshalb erscheint ihr Bild als Punkt im Kreis.

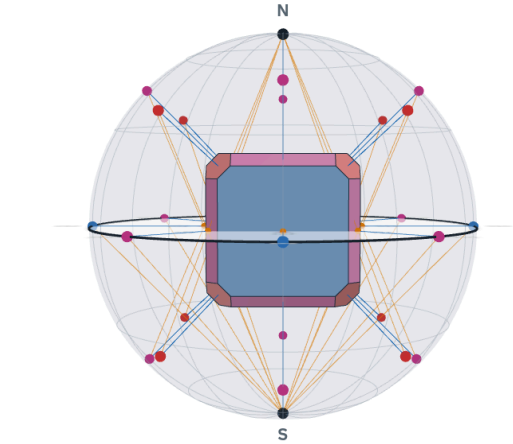


Abb. 2.2 Galenit im Mittelpunkt der Umkugel, seitlich gesehen. Ziehen dreht die Ansicht. In der App öffnen →

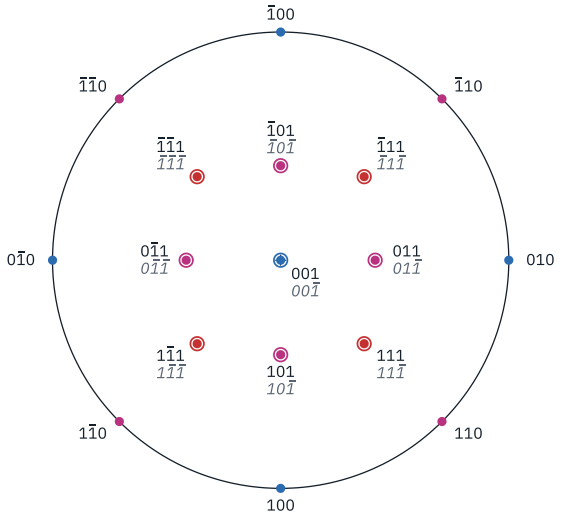


Abb. 2.3 Stereogramm des Galenits: ● obere, ○ untere Halbkugel. Farben wie in Abb. 2.2: Würfel {100}, Oktaeder {111}, Rhombendodekaeder {110}.
In der App öffnen →

MERKE

Pole der oberen Halbkugel werden zum Südpol hin projiziert und als Punkt ● gezeichnet, Pole der unteren Halbkugel zum Nordpol hin und als Kreis ○.

2.3 Die Winkel φ und ρ

Für das Stereogramm stellt man den Kristall wie in Kapitel 1 auf (*a* nach vorn, *b* nach rechts, *c* nach oben) und blickt von oben entlang *c*. Bei rechtwinkligen Achsen liegt dann der Pol von (001) im Mittelpunkt, (100), die nach vorn weisende Fläche, unten auf dem Grundkreis und (010) rechts. Bei schiefwinkligen Achsen (monoklin, triklin, hexagonal) weichen einzelne dieser Pole davon ab, weil die Normale einer Fläche nicht mehr entlang der gleich benannten Achse liegen muss: hexagonal liegt (010) nicht rechts, sondern 30° tiefer, monoklin mit *b* als eindeutiger Achse liegt (001) nicht im Mittelpunkt. Alle Flächen, die parallel zu *c* verlaufen, also (*hk*0), stehen senkrecht auf der Projektionsebene; ihre Pole liegen auf dem Grundkreis.

Die Lage eines Pols lässt sich mit zwei Winkeln angeben, ähnlich wie geographische Länge und Breite auf dem Globus:

- Die **Poldistanz** ρ ist der Winkel zwischen dem Pol und dem Nordpol, für Pole der oberen Halbkugel also 0° bis 90°. Für Pole der unteren Halbkugel misst man vom Südpol aus und setzt ein Minuszeichen: −90° bis 0°.
- Der **Azimut** φ ist der Drehwinkel um die Projektionsrichtung, von 0° bis 360°. Er wird vom rechten Rand des Grundkreises aus im Uhrzeigersinn gezählt. Bei rechtwinkligen Achsen liegt (010) also bei φ = 0° und die nach vorn weisende Fläche (100) unten bei φ = 90°.

Am Galenit liegt der Pol von (111) bei φ = 45° und ρ = 54,74°, der Pol der Gegenfläche ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) bei φ = 225° und ρ = −54,74°. Würfel- und Rhombendodekaederflächen, die senkrecht auf der Projektionsebene stehen, haben ρ = 90°.

VERTIEFUNG · **Das Reflexionsgoniometer**

Woher kommen die Winkel φ und ρ eines echten Kristalls? Sie werden gemessen, und das Messgerät liefert sie gleich in der Form, die das Stereogramm braucht.

Gemessen werden solche Winkel mit dem Reflexionsgoniometer. Es misst Normalenwinkel. Das zweikreisige Reflexionsgoniometer dreht den Kristall um zwei zueinander senkrechte Achsen, bis eine Fläche das Licht reflektiert, und zeigt bei justiertem Kristall auf seinen beiden Kreisen direkt φ und ρ an. Die Werte lassen sich unmittelbar ins Stereogramm eintragen.

IN DER APP

φ und ρ erscheinen als Tooltip über jedem Pol und in der Infobox, sobald man eine Fläche oder einen Pol antippt.

2.4 Kreise, Winkel und das Wulffsche Netz

Die stereographische Projektion hat zwei Eigenschaften, die sie für die Kristallographie so nützlich machen:

- **Kreistreue:** Jeder Kreis auf der Kugel wird wieder als Kreis oder Kreisbogen abgebildet. Grosskreise, also Kreise, deren Mittelpunkt der Kugelmittelpunkt ist, werden zu Kreisbögen, die den Grundkreis in zwei gegenüberliegenden Punkten treffen. Grosskreise durch Nord- und Südpol werden zu Geraden durch den Mittelpunkt. Auch ein Kleinkreis wird ein Kreis. Streng gilt die Kreistreue für jede Halbkugel für sich: Die untere Hälfte eines geneigten Grosskreises wird zum Nordpol hin projiziert und erscheint als zweiter Bogen durch dieselben Randpunkte, zur anderen Seite gekrümmt. Bei Zonenkreisen und Winkelbögen zeichnet die App diese untere Hälfte gestrichelt.
- **Winkeltreue:** Die Winkel, unter denen sich zwei Kreise auf der Kugel schneiden, bleiben in der Projektion erhalten. So schneiden sich Längen- und Breitenkreise im Wulffschen Netz (Abb. 2.4, Vertiefung unten) wie auf dem Globus rechtwinklig.

Die Projektion ist nicht längentreu (Regler in Abb. 2.1). Grosskreise sind besonders wichtig: Die Pole vieler Flächen eines Kristalls liegen auf wenigen Grosskreisen. Solche Flächen bilden eine Zone (Kapitel 7).

VERTIEFUNG · **Kleinkreise, Winkel und das Wulffsche Netz**

Kreis- und Winkeltreue helfen, ein Stereogramm zu lesen. Wer Winkel selbst ablesen oder ein Stereogramm von Hand konstruieren will, muss wissen, wo das Bild eines Kreises liegt und auf welchen Kreisen Winkel stimmen, und braucht eine Winkelskala.

Der Mittelpunkt eines Kleinkreises im Stereogramm ist im Allgemeinen nicht das Bild seines Mittelpunkts auf der Kugel (eine Ausnahme sind Kleinkreise um den Nord- oder den Südpol).

Die Normalen zweier Flächen spannen die Ebene eines Grosskreises auf. Nur dessen Bogen zwischen den beiden Polen ist der Normalenwinkel, ein Bogen auf einem Kleinkreis durch dieselben Pole ist es nicht. Deshalb dürfen Winkel nur auf Grosskreisen abgetragen oder abgelesen werden. Weil die Projektion zudem nicht längentreu ist, braucht man dafür eine Winkelskala, das Wulffsche Netz, und kein Lineal.

Zum Zeichnen von Hand benutzt man das **Wulffsche Netz** (Abb. 2.4). Es ist die stereographische Projektion des Gradnetzes eines Globus, dessen Achse in der Projektionsebene liegt: Die Längenkreise sind Grosskreise, die Breitenkreise (ausser dem Äquator des Globus) Kleinkreise. Man zeichnet auf Transparentpapier, das über dem Netz um den Mittelpunkt drehbar ist, und dreht zwei Pole auf denselben Längenkreis, um ihren Winkel abzulesen.

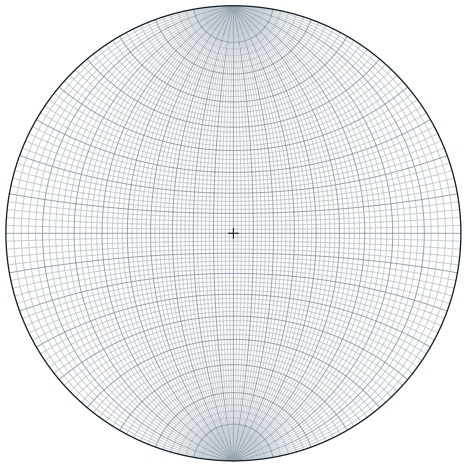


Abb. 2.4 Wulffsches Netz mit Linien im Abstand von 2°, kräftig alle 10°. Die App blendet es unter „Darstellung“ ein und kann es drehen. In der App öffnen →

IN DER APP

Das Werkzeug „Winkel“ misst den Normalenwinkel zwischen zwei angetippten Polen oder Flächen und zeichnet den Grosskreisbogen dazu. Im Modus „Punktgruppen“ nennt es auch die Operation, die den einen Pol in den anderen überführt.

ZUSAMMENFASSUNG

- Jede Fläche wird durch ihren Flächenpol auf der Umkugel vertreten. Er hängt nur von der Orientierung der Fläche ab.
- Pole der oberen Halbkugel werden zum Südpol hin auf die Äquatorebene projiziert (●), Pole der unteren Halbkugel zum Nordpol hin (○).
- Die Lage eines Pols beschreiben der Azimut φ und die Poldistanz ρ.
- Die Projektion ist kreistreu und winkeltreu, aber nicht längentreu.

ZUR VERTIEFUNG

- Der Normalenwinkel ergänzt den Flächenwinkel an der Kante zu 180°: $n = 180° - f$.
- Der Winkel zwischen zwei Polen ist der Bogen auf dem Grosskreis durch beide Pole; von Hand misst man ihn mit dem Wulffschen Netz.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 3.3 (Aufstellung, S. 13), 5.3 (Gesetz der Winkelkonstanz, S. 38–39), 5.4 (Stereographische Projektion, S. 40–43, Abb. 5.9–5.12), 5.5 (Reflexionsgoniometer, S. 43–45, Abb. 5.15), 5.6 (Wulffsches Netz, Winkelkoordinaten, Kreis- und Winkeltreue, S. 45–47, Abb. 5.16–5.19), 5.8 (Abb. 5.33, S. 56: mathematische Beziehung der Projektion).
- Winkelkoordinaten des Galenits: Borchardt-Ott & Sowa (2018), Aufgabe 5.13, Tab. 5.2 (S. 63–64).

3 Symmetrieoperationen und Punktgruppen

Die Symmetrie eines Kristalls beschreibt man durch die Operationen, die ihn mit sich selbst zur Deckung bringen. Zusammen bilden sie eine Gruppe, die Punktgruppe des Kristalls.

LERNZIELE

- Symmetrieoperation und Symmetrieelement unterscheiden und die Punktsymmetrieoperationen mit ihren Symbolen angeben
- Kopplung und Kombination unterscheiden und angeben, welche Drehinversionsachsen ein Inversionszentrum oder eine Spiegelebene enthalten
- Verknüpfungen von Symmetrieoperationen bestimmen und Erzeugende und Untergruppen einer Punktgruppe angeben
- eine Punktgruppe ihrem Kristallsystem zuordnen

ZUR VERTIEFUNG

- Operationen erster und zweiter Art unterscheiden
- Drehspiegelachsen in Drehinversionsachsen übersetzen und Schoenflies-Symbole lesen

3.1 Symmetrieoperation und Symmetrieelement

Ein Würfel, den man um 90° um die Achse durch zwei gegenüberliegende Flächenmitten dreht, sieht danach genauso aus wie vorher. Eine solche Bewegung, die ein Objekt mit sich selbst zur Deckung bringt, heisst **Symmetrieoperation**. Der Punkt, die Gerade oder die Ebene, auf die sie sich bezieht und die sie als Ganzes in sich überführt, ist das zugehörige **Symmetrieelement**, hier eine 4-zählige Drehachse. Meist bleibt das Element dabei Punkt für Punkt am Ort; nur bei der Drehinversion bleibt allein der Inversionspunkt auf der Achse fest (Tabelle). An einem Symmetrieelement können mehrere Operationen wirken: Um dieselbe Achse kann man den Würfel um 90°, 180° oder 270° drehen.

Für die äussere Gestalt eines Kristalls kommen nur Operationen in Frage, die mindestens einen Punkt festhalten, die **Punktsymmetrieoperationen**:

OPERATION	SYMMETRIEELEMENT	SYMBOL	BLEIBT AM ORT
Identität (Drehung um 360°)	–	1	jeder Punkt
Drehung um 360°/n	n-zählige Drehachse	2, 3, 4, 6	die Achse
Spiegelung	Spiegelebene	m	die Ebene
Inversion (Punktspiegelung)	Inversionszentrum	$\bar{1}$	das Zentrum
Drehinversion	Drehinversionsachse	$\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$	nur der Inversionspunkt auf der Achse

Drehachsen gibt es in Kristallen nur als 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Achsen. Nur diese Drehungen sind mit einem periodischen Gitter vereinbar: Eine 5-zählige Drehachse etwa erzeugt aus einem Gitterpunkt ein Fünfeck, und daraus lässt sich keine Netzebene aufbauen. Ebenso wenig sind Achsen mit einer Zähligkeit über 6 möglich.

MERKE

Eine Symmetrieoperation bringt ein Objekt mit sich selbst zur Deckung; das Symmetrieelement ist der Ort, an dem sie ausgeführt wird: Achse, Ebene oder Punkt. In Kristallen gibt es nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Dreh- und Drehinversionsachsen.

3.2 Kopplung und Kombination: Drehinversionsachsen

Zwei Symmetrieoperationen lassen sich auf zwei Arten verknüpfen. Bei einer **Kombination** bleiben beide Operationen erhalten, und jede für sich bringt das Objekt zur Deckung. Bei einer **Kopplung** führt man beide als *einen* Vorgang aus: Nur die gekoppelte Operation ist eine Symmetrieoperation, die beiden Teile einzeln müssen es nicht sein.

Abb. 3.1 zeigt den Unterschied für eine 4-zählige Drehung und die Inversion. Gekoppelt ergeben sie die **Drehinversion** $\bar{4}$: Drehung um 90° und sofort anschliessend Inversion an einem Punkt der Achse. Ein Pol wird dabei viermal abgebildet und wechselt mit jedem Schritt die Halbkugel; eine 4-zählige Drehachse und ein Inversionszentrum gibt es nicht. Kombiniert dagegen bleiben 4 und $\bar{1}$ beide erhalten; sie erzeugen zusätzlich eine Spiegelebene senkrecht zur Achse, und aus einem Pol werden acht (4/*m*).

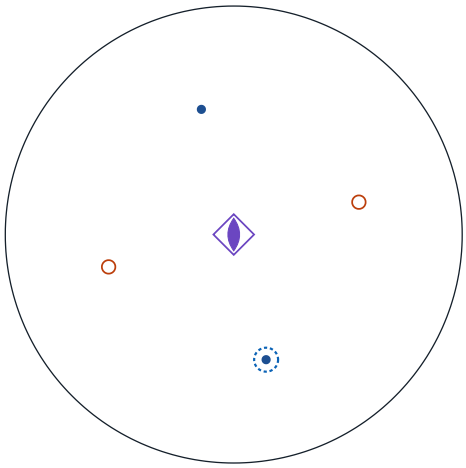


Abb. 3.1a Kopplung: $\bar{4}$. Vier Pole, abwechselnd oben (●) und unten (○). In der App öffnen →

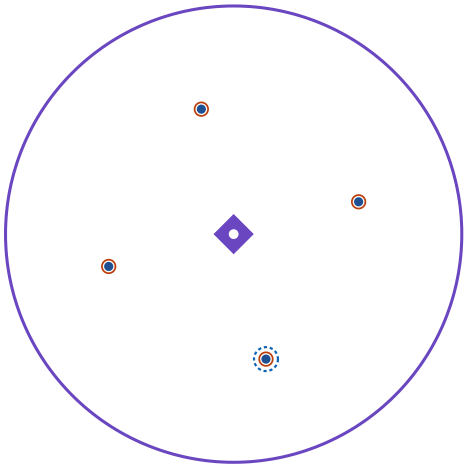


Abb. 3.1b Kombination: 4 und $\bar{1}$ bleiben erhalten, dazu kommt *m* senkrecht zur Achse (4/*m*). Acht Pole. In der App öffnen →

Blau: Pole, die aus dem Ausgangspol (gestrichelter Ring) durch eine Drehung hervorgehen; orange: Pole, die durch eine Operation entstehen, die ein Spiegelbild erzeugt (Operationen erster und zweiter Art, Vertiefung am Ende des Abschnitts 3.3 „Punktgruppen“).

Weil nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehungen vorkommen, gibt es fünf Drehinversionsachsen (Abb. 3.2). Zwei davon sind nichts Neues: $\bar{1}$ ist die Inversion, und $\bar{2}$ ist eine Spiegelung an der Ebene senkrecht zur Achse. Die übrigen drei enthalten einfachere Elemente:

DREHINVERSIONSACHSE	POLE	ENTSPRICHT BZW. ENTHÄLT
$\bar{1}$	2	Inversionszentrum
$\bar{2}$	2	Spiegelebene senkrecht zur Achse (*m*)
$\bar{3}$	6	3 und $\bar{1}$ ($\bar{3}$ = 3 + $\bar{1}$)
$\bar{4}$	4	enthält 2, aber weder 4 noch $\bar{1}$
$\bar{6}$	6	3 und senkrecht dazu *m* ($\bar{6}$ = 3/*m*)

Daraus lassen sich drei Regeln ablesen:

- Ungeradzählige Drehinversionsachsen ($\bar{1}$, $\bar{3}$) enthalten ein Inversionszentrum. Bei ihnen ist die Kopplung gleich der Kombination.
- Geradzählige Drehinversionsachsen enthalten eine Drehachse halber Zähligkeit: $\bar{4}$ enthält 2, $\bar{6}$ enthält 3.
- Geradzählige Drehinversionsachsen, deren Zähligkeit nicht durch 4 teilbar ist ($\bar{2}$, $\bar{6}$), enthalten eine Spiegelebene senkrecht zur Achse.

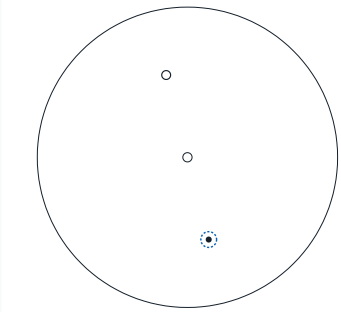
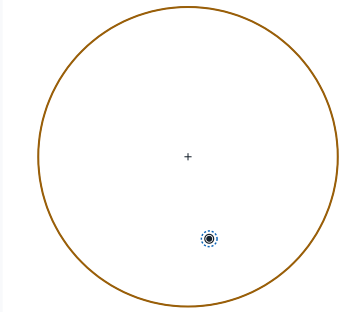
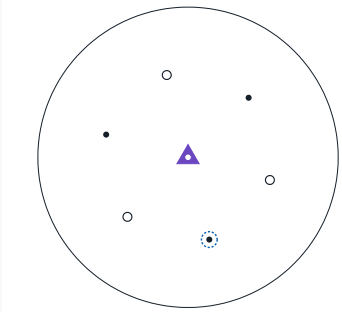


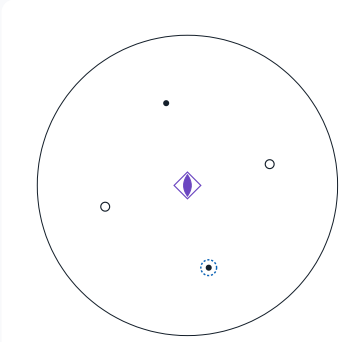
Abb. 3.2a $\bar{1}$ App →



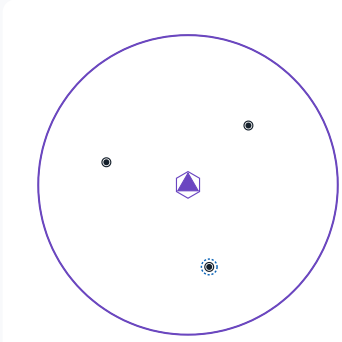
b $\bar{2} = m$ App →



c $\bar{3}$ App →



d $\bar{4}$ App →



e $\bar{6}$ App →

Abb. 3.2 Die fünf Drehinversionsachsen, jeweils senkrecht zur Projektionsebene, mit der Bahn eines Pols in allgemeiner Lage, also eines Pols, der auf keinem Symmetrieelement liegt. Bei $\bar{2}$ (b) ist die Spiegelebene der Grundkreis, bei $\bar{6}$ (e) ebenfalls; $\bar{3}$ (c) enthält das Inversionszentrum. Die Symbole erklärt Kapitel 4.

MERKE

Bei einer Kombination bleiben die einzelnen Operationen erhalten, bei einer Kopplung entsteht eine neue. $\bar{1}$ ist die Inversion, $\bar{2} = m$, $\bar{3} = 3 + \bar{1}$, $\bar{6} = 3/m$; $\bar{4}$ enthält 2. Nur ungeradzählige Drehinversionsachsen enthalten ein Inversionszentrum.

3.3 Punktgruppen

Ein Kristall hat meist nicht nur eine Symmetrieoperation, sondern eine ganze Menge davon. Führt man zwei von ihnen nacheinander aus, kommt der Kristall wieder mit sich selbst zur Deckung; das Ergebnis ist also wieder eine seiner Symmetrieoperationen. Und jede Operation lässt sich durch eine andere wieder rückgängig machen. Die Symmetrieoperationen eines Kristalls bilden deshalb eine **Gruppe**.

GRUNDLAGEN · **Gruppe**

Eine Menge von Elementen bildet mit einer Verknüpfung eine Gruppe, wenn gilt:

- **Abgeschlossenheit:** Die Verknüpfung zweier Elemente ist wieder ein Element der Menge.
- **Assoziativgesetz:** $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$.
- **Neutrales Element:** Es gibt ein Element, das jedes andere unverändert lässt.
- **Inverses Element:** Zu jedem Element gibt es eines, das seine Wirkung aufhebt.

Bei einer Symmetriegruppe sind die Elemente die Symmetrieoperationen, nicht die Symmetrieelemente, und die Verknüpfung ist das Nacheinanderausführen. $b \circ a$ heisst: zuerst a, dann b. Neutrales Element ist die Identität 1; eine Spiegelung, eine 2-zählige Drehung und die Inversion sind ihr eigenes Inverses. Die Reihenfolge darf nicht vertauscht werden: In *mmm* spielt sie keine Rolle, in 3*m* dagegen ergibt eine Spiegelung mit anschliessender Drehung um 120° eine andere Operation als dieselbe Drehung mit anschliessender Spiegelung.

Die Zahl der Operationen ist die **Ordnung** der Gruppe. Oft genügen wenige Operationen, um alle anderen durch Nacheinanderausführen zu erzeugen; sie heissen **Erzeugende**. 3*m* hat die Ordnung 6 und wird von der Drehung um 120° und einer Spiegelung erzeugt (Abb. 3.3).

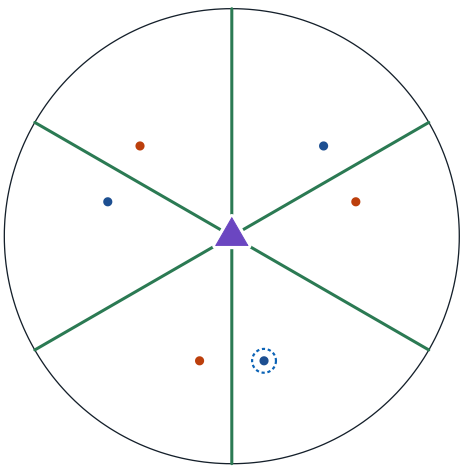


Abb. 3.3 Die sechs Operationen von 3*m* bringen den Ausgangspol (gestrichelter Ring) an sechs Stellen: blau durch die Drehungen um 0°, 120° und 240°, orange durch die Spiegelungen an den drei Spiegelebenen.
In der App öffnen →

Die Symmetrieoperationen eines Kristalls lassen alle einen gemeinsamen Punkt fest, den Mittelpunkt des Kristalls; alle seine Symmetrieelemente schneiden sich dort. Eine solche Gruppe heisst **Punktgruppe**. Ihre Ordnung ist zugleich die Zahl der Pole, die aus einem Pol in allgemeiner Lage entstehen (Kapitel 4).

GRUNDLAGEN · **Untergruppe**

Eine Teilmenge der Operationen einer Gruppe, die für sich allein wieder eine Gruppe ist, heisst **Untergruppe**; die grössere Gruppe heisst **Obergruppe**. Die Identität 1 allein ist Untergruppe jeder Gruppe. Lässt man aus *mmm* (Ordnung 8) Operationen weg, so dass die übrigen noch eine Gruppe bilden, erhält man z. B. die Untergruppen *mm*2 und 222 (je Ordnung 4). Im Stereogramm zeigt sich das so: Das Symmetriegerüst der Untergruppe (das Stereogramm ihrer Symmetrieelemente, Kapitel 4) ist ein Teil des Gerüsts der Obergruppe, und ein Pol in allgemeiner Lage hat weniger Bilder (Abb. 3.4).

Untergruppen kommen im Skript immer wieder vor: Jede Punktgruppe eines Kristallsystems ist eine Untergruppe seiner höchstsymmetrischen Punktgruppe (Abschnitt 3.4 „Kristallsysteme und Kristallklassen“), und eine Verzerrung senkt die Symmetrie eines Kristalls auf eine Untergruppe (Kapitel 11).

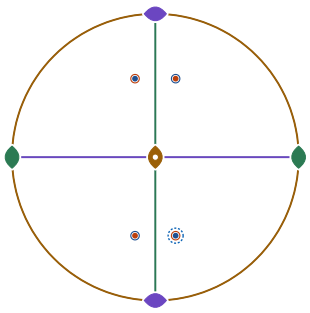
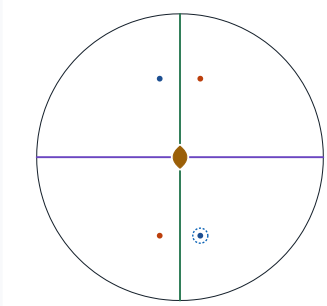
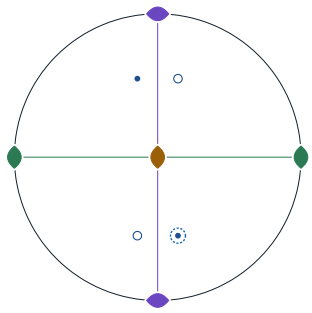


Abb. 3.4a *mmm*: Ordnung 8.
In der App öffnen →



b Untergruppe *mm*2: Ordnung 4.
In der App öffnen →



c Untergruppe 222: Ordnung 4.
In der App öffnen →

Abb. 3.4 *mmm* und zwei ihrer Untergruppen. *mm*2 behält die beiden senkrechten Spiegelebenen und die 2-zählige Achse entlang *c*, 222 die drei 2-zähligen Achsen. Die Pole der Untergruppen sind jeweils die Hälfte der Pole von *mmm*.

VERTIEFUNG · **Operationen erster und zweiter Art**

Die Farben in Abb. 3.1, 3.3 und 3.4 unterscheiden zwei Arten von Operationen. Der Unterschied entscheidet darüber, ob es einen Kristall in einer Links- und einer Rechtsform geben kann, wie den Quarz.

Man stelle sich vor, die Operation wirke auf eine rechte Hand. Eine Drehung bewegt die Hand nur; sie bleibt eine rechte Hand. Drehungen, einschliesslich der Identität, heissen deshalb **Operationen erster Art**: Sie erhalten die Händigkeit. Spiegelung, Inversion und Drehinversion machen aus der rechten Hand eine linke, also ihr Spiegelbild; sie heissen **Operationen zweiter Art**. Bild und Spiegelbild lassen sich durch keine Drehung zur Deckung bringen, so wenig wie man einen rechten Handschuh durch Drehen in einen linken verwandeln kann. Führt man zwei Operationen zweiter Art nacheinander aus, ist das Ergebnis wieder das Original, nur gedreht: eine Operation erster Art. Deshalb erzeugen zwei Spiegelungen eine Drehung (Symmetriesatz II, Kapitel 4). In Abb. 3.3 liegen blaue Pole dort, wohin Drehungen den Ausgangspol bringen, orange Pole dort, wohin Spiegelungen ihn bringen. 222 enthält nur Drehungen, alle Pole in Abb. 3.4c sind blau.

IN DER APP

„Pole nach Händigkeit färben“ unter „Darstellung“ färbt die Pole jeder Punktgruppe so.

3.4 Kristallsysteme und Kristallklassen

Weil nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Achsen vorkommen und sich die Symmetrieelemente nur auf bestimmte Weisen kombinieren lassen, gibt es genau 32 kristallographische Punktgruppen. Sie heissen auch **Kristallklassen**: Jeder Kristall gehört nach seiner Symmetrie zu einer von ihnen.

Die 32 Punktgruppen verteilen sich auf sieben **Kristallsysteme**. Alle Kristalle eines Kristallsystems lassen sich auf dasselbe Achsensystem beziehen, und welches das ist, bestimmt die Symmetrie: Eine 4-zählige Achse etwa macht zwei Achsen gleichwertig, also gleich lang. Kennzeichnend für ein System ist deshalb die Zähligkeit seiner Dreh- oder Drehinversionsachsen:

KRISTALLSYSTEM	KENNZEICHNENDE SYMMETRIE	ACHSENSYSTEM	PUNKTGRUPPEN
Triklin	nur 1 oder $\bar{1}$	a, b, c; α, β, γ beliebig	$\bar{1}$, 1
Monoklin	eine 2 oder m	α = γ = 90°	$2/m$, m, 2
Orthorhombisch	drei zueinander senkrechte 2 oder m	α = β = γ = 90°	mmm, $mm2$, 222
Tetragonal	eine 4 oder $\bar{4}$	$a = b$; α = β = γ = 90°	$4/mmm$, $\bar{4}2m$, $4mm$, 422, $4/m$, 4, $\bar{4}$
Trigonal	eine 3 oder $\bar{3}$	$a = b$; α = β = 90°, γ = 120°	$\bar{3}m$, $3m$, 32, $\bar{3}$, 3
Hexagonal	eine 6 oder $\bar{6}$	$a = b$; α = β = 90°, γ = 120°	$6/mmm$, $\bar{6}m2$, $6mm$, 622, $6/m$, 6, $\bar{6}$
Kubisch	vier 3 oder $\bar{3}$ entlang ⟨111⟩	$a = b = c$; α = β = γ = 90°	$m\bar{3}m$, $\bar{4}3m$, 432, $m\bar{3}$, 23

Zwei Einträge verdienen einen zweiten Blick. Kubisch ist ein Kristall nicht wegen 4-zähliger Achsen, sondern wegen der vier 3-zähligen Achsen entlang der Raumdiagonalen; 23 und $m\bar{3}$ haben gar keine 4-zählige Achse. Und trigonale und hexagonale Kristalle haben dasselbe Achsensystem; sie unterscheiden sich durch die Hauptachse. $\bar{6}$ und $\bar{6}m2$ gehören zum hexagonalen System, obwohl ihre höchstzählige Drehachse nur 3-zählig ist.

Die erste Punktgruppe jeder Zeile ist die **höchstsymmetrische** des Systems: Sie hat die Symmetrie, die ein Gitterpunkt im Gitter dieses Systems besitzt (im trigonalen System gilt das nur für das rhomboedrische Gitter; ein hexagonales Gitter hat am Gitterpunkt $6/mmm$). Alle anderen Punktgruppen desselben Systems sind ihre Untergruppen.

IN DER APP

Im Tab „Punktgruppen“ sind die 32 Punktgruppen nach Kristallsystemen geordnet. Die Infobox nennt zu jeder das Kristallsystem und die Ordnung.

VERTIEFUNG · **Drehspiegelachsen und Schoenflies-Symbole**

Die Symbole dieses Skripts sind die internationalen nach Hermann und Mauguin. In der Chemie und Physik, etwa für die Symmetrie von Molekülen, sind die Symbole nach Schoenflies verbreitet; die App zeigt sie neben dem Hermann-Mauguin-Symbol an.

Statt der Drehinversion verwendet Schoenflies die **Drehspiegelung** S_n: Drehung um $360°/n$, gekoppelt mit einer Spiegelung an der Ebene senkrecht zur Achse. Sie liefert nichts Neues, nur die Zähligkeit kann anders sein: $S_1 = m$, $S_2 = \bar{1}$, $S_3 = \bar{6}$, $S_4 = \bar{4}$, $S_6 = \bar{3}$. Die Operationen und Elemente heissen bei Schoenflies E (Identität), C_n (Drehachse), σ (Spiegelebene), i (Inversionszentrum) und S_n (Drehspiegelachse).

Ein Schoenflies-Symbol beschreibt die Anordnung der Elemente um eine Hauptachse: C_n nur eine n-zählige Drehachse; C_{nh} dazu eine Spiegelebene senkrecht zur Achse (horizontal); C_{nv} n Spiegelebenen, die die Achse enthalten (vertikal); D_n n 2-zählige Achsen senkrecht zur Hauptachse; D_{nh} dazu eine horizontale Spiegelebene, D_{nd} dazu n diagonale Spiegelebenen zwischen den 2-zähligen Achsen; T und O stehen für die Drehgruppen des Tetraeders (23) und des Oktaeders (432); Indizes ergänzen die übrigen kubischen Gruppen: $T_h = m\bar{3}$, $T_d = \bar{4}3m$, $O_h = m\bar{3}m$. Ohne Hauptachse sind $C_i = \bar{1}$ und $C_s = m$; $C_{3i} = \bar{3}$. Beispiele: $2/m = C_{2h}$, $mm2 = C_{2v}$, $4mm = C_{4v}$, $mmm = D_{2h}$, $\bar{4}2m = D_{2d}$, $m\bar{3}m = O_h$.

ZUSAMMENFASSUNG

- Eine Symmetrieoperation bringt ein Objekt mit sich selbst zur Deckung; das Symmetrieelement wird dabei als Ganzes in sich überführt. Punktsymmetrieoperationen: 1, Drehung 2, 3, 4, 6, Spiegelung m, Inversion $\bar{1}$, Drehinversion $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$.
- Kombination: Die einzelnen Operationen bleiben erhalten. Kopplung: Nur die gekoppelte Operation ist eine Symmetrieoperation. $\bar{2} = m$, $\bar{3} = 3 + \bar{1}$, $\bar{6} = 3/m$, $\bar{4}$ enthält 2.
- Die Symmetrieoperationen eines Kristalls bilden eine Gruppe, die Punktgruppe. Ihre Ordnung ist die Zahl der Operationen; Erzeugende sind Operationen, aus denen alle anderen folgen; eine Untergruppe ist eine Teilmenge, die selbst eine Gruppe ist.
- Es gibt 32 Punktgruppen (Kristallklassen) in sieben Kristallsystemen. Das System erkennt man an der Zähligkeit der Dreh- und Drehinversionsachsen, kubische Kristalle an den vier 3-zähligen Achsen.

ZUR VERTIEFUNG

- Operationen erster Art (Drehungen) erhalten die Händigkeit eines Objekts; Operationen zweiter Art (Spiegelung, Inversion, Drehinversion) erzeugen sein Spiegelbild.
- Drehspiegelachsen sind Drehinversionsachsen anderer Zähligkeit: $S_3 = \bar{6}$, $S_4 = \bar{4}$, $S_6 = \bar{3}$.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Kap. 6 (Symmetrieoperation und Symmetrieelement, S. 67–69; mögliche Drehachsen, S. 70–73, Tab. 6.1; Koppelung und Kombination, Abb. 6.13, S. 75–76; Drehinversionsachsen, Abb. 6.14, S. 76–78; Drehspiegelachsen und Punktsymmetrieelemente, S. 78), 8 (Kristallsysteme, Tab. 8.1, S. 125–126), 9.1 (Punktgruppen, Kristallklassen, Untergruppen der höchstsymmetrischen Punktgruppen, Tab. 9.2, Abb. 9.3, S. 127–130; Schönflies-Symbolik, Tab. 9.3, S. 131–132), 9.5 (Bild und Spiegelbild, S. 169), 11.2 (Gruppenaxiome, Ordnung, Untergruppe, Abelsche Gruppen, S. 263–265).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 3.1–3.2 (Symmetrieoperation und Symmetrieelement, die fünf Punktsymmetrie-Elemente, Drehinversionen und ihre Regeln, Drehspiegelungen, Tab. 3.1, S. 94–108), 3.3.3 (Kristallsystem und Kristallklasse, Tab. 3.3, S. 118–121), 5.2.1 (Händigkeit, Bild und Spiegelbild, S. 170), 6.2.3 (Erzeugendensystem, S. 215), 6.4 (Gruppenbegriff, S. 218–219).
- D. Schwarzenbach, *Kristallographie*, Springer, Berlin (2001), Abschn. 2.2.2 (Gruppen, S. 29–30), 2.2.3 (Drehung, Drehspiegelung, Drehinversion; Operationen erster und zweiter Art, Händigkeit, S. 30–31).

4 Symmetriegerüste im Stereogramm

Das Stereogramm zeigt nicht nur die Flächen eines Kristalls, sondern auch seine Symmetrieelemente. Zusammen erklären sie, warum die Pole so liegen, wie sie liegen.

LERNZIELE

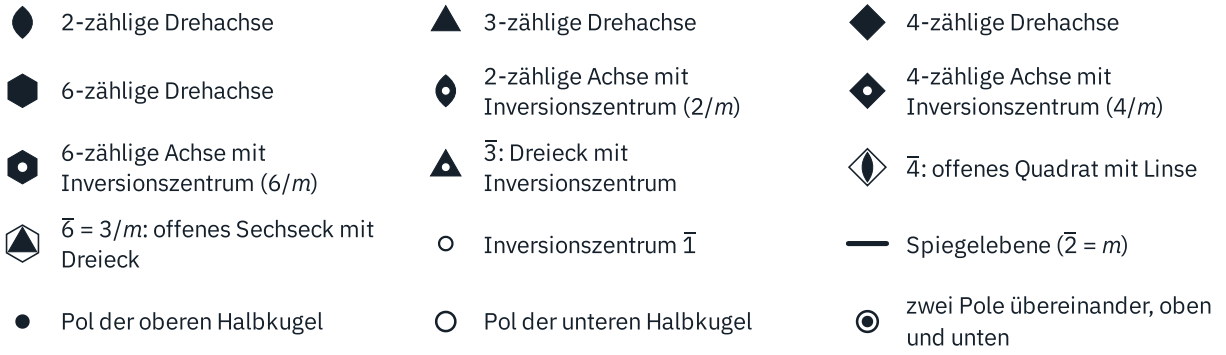
- die Symmetrieelemente einer Punktgruppe ins Stereogramm einzeichnen
- einzeichnen, wohin ein Symmetrieelement einen beliebigen Pol abbildet
- mit den Symmetriesätzen bestimmen, welches Symmetrieelement zwei gegebene erzeugen
- ein Stereogramm einer Symmetrie zuordnen

4.1 Symmetrieelemente in der Projektion

Für Symmetrieelemente weicht man vom Prinzip der Flächenpole ab. Man projiziert bei Drehachsen und Drehinversionsachsen die Punkte, an denen sie die Umkugel durchstossen, und bei Spiegelebenen den Grosskreis, in dem sie die Kugel schneiden. Das ergibt:

- **Drehachse senkrecht zur Projektionsebene:** ein Symbol im Mittelpunkt. Die Symbole sind eine Linse für 2-zählige, ein Dreieck für 3-zählige, ein Quadrat für 4-zählige und ein Sechseck für 6-zählige Drehachsen; Drehinversionsachsen haben eigene Symbole (Übersicht unten).
- **Drehachse in der Projektionsebene:** zwei Symbole an gegenüberliegenden Stellen des Grundkreises, in der App mit einer dünnen Linie verbunden.
- **Geneigte Drehachse** (z. B. die 3-zähligen Achsen ⟨111⟩ im Würfel): Symbole im Inneren des Grundkreises.
- **Spiegelebene:** ein kräftiger Grosskreis. Enthält sie die Projektionsrichtung, ist es eine Gerade durch den Mittelpunkt; liegt sie geneigt, ein Kreisbogen; liegt sie in der Projektionsebene, ist sie der kräftig gezeichnete Grundkreis. Im Symmetriegerüst zeichnet man von einer geneigten Spiegelebene nur einen Bogen; bei Zonenkreisen zeigt die App auch die untere Hälfte, gestrichelt (Kapitel 7).
- **Inversionszentrum:** ein kleiner Kreis im Mittelpunkt.

Die Symbole im Überblick, gezeichnet wie in der App (nach den International Tables):



Das Stereogramm aller Symmetrieelemente einer Punktgruppe ist ihr **Symmetriegerüst**. Die Legende der App erklärt jedes Symbol, das gerade zu sehen ist.

4.2 Wohin ein Symmetrieelement einen Pol bringt

Abb. 4.1 zeigt für die einfachsten Symmetrieelemente, was mit einem Pol in allgemeiner Lage geschieht. Man kann es am Stereogramm ablesen, ohne die Kugel zu zeichnen:

- Ein **Inversionszentrum** $\bar{1}$ bringt den Pol an die gegenüberliegende Stelle und auf die andere Halbkugel.
- Eine **2-zählige Drehachse senkrecht zur Projektionsebene** dreht ihn um 180°; er bleibt auf seiner Halbkugel.
- Eine **2-zählige Drehachse in der Projektionsebene** spiegelt sein Bild an der Achse und bringt ihn auf die andere Halbkugel.
- Eine **Spiegelebene senkrecht zur Projektionsebene** spiegelt das Bild an ihrer Spur; der Pol bleibt auf seiner Halbkugel.

- Eine **Spiegelebene in der Projektionsebene** lässt das Bild an seiner Stelle und bringt den Pol auf die andere Halbkugel: Aus ● wird ○ an derselben Stelle.

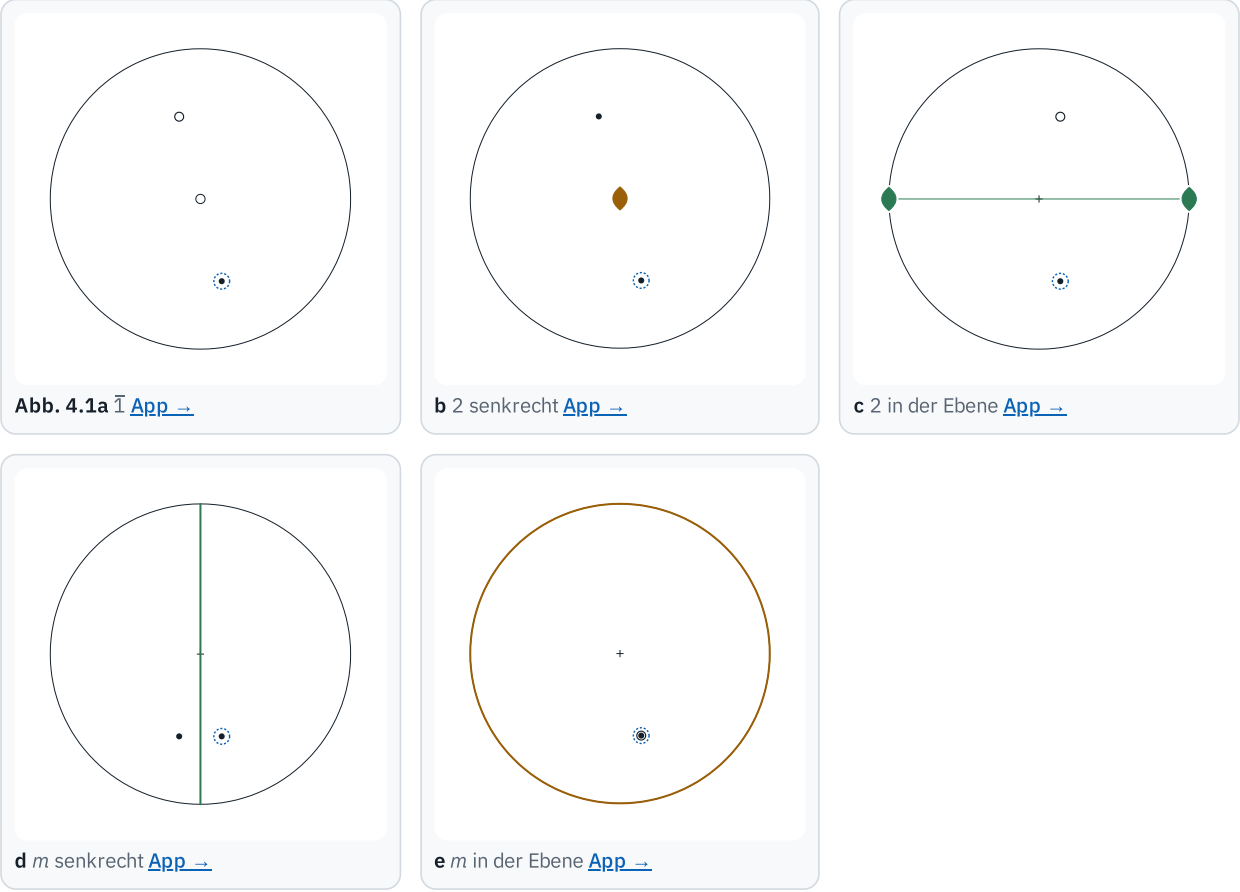


Abb. 4.1a Ī App →

b 2 senkrecht App →

c 2 in der Ebene App →

d *m* senkrecht App →

e *m* in der Ebene App →

Abb. 4.1 Ein Pol in allgemeiner Lage (gestrichelter Ring) und sein Bild unter (a) einem Inversionszentrum, (b) einer 2-zähligen Achse senkrecht zur Projektionsebene, (c) einer 2-zähligen Achse in der Projektionsebene, (d) einer Spiegelebene senkrecht und (e) parallel zur Projektionsebene. Jede Abbildung führt in die App; dort lässt sich der Pol ziehen.

4.3 Symmetrieelemente erzeugen einander: die Symmetriesätze

Mit den Regeln aus Abb. 4.1 lässt sich am Stereogramm verfolgen, was geschieht, wenn man zwei Symmetrieoperationen nacheinander ausführt. Zwei Fälle kommen so oft vor, dass man sie als Sätze formuliert. Beide beschreiben eine Kombination (Kapitel 3): Die beiden Ausgangselemente bleiben erhalten, und ein drittes kommt hinzu.

MERKE

Symmetriesatz I: Eine geradzählige Drehachse (2, 4 oder 6) und eine Spiegelebene senkrecht dazu erzeugen im Schnittpunkt ein Inversionszentrum.

Symmetriesatz II: Zwei zueinander senkrechte Spiegelebenen erzeugen in ihrer Schnittgeraden eine (mindestens) 2-zählige Drehachse.

Für Satz I liege die 2-zählige Achse in der Projektionsebene, und die Spiegelebene stehe senkrecht zu ihr, also auch senkrecht auf der Projektionsebene (Abb. 4.2). Die Drehung spiegelt das Bild eines Pols an der Achse und bringt ihn auf die andere Halbkugel (Abb. 4.1c). Die Spiegelung spiegelt das Bild danach an ihrer Spur, die senkrecht auf der Achse steht; die Halbkugel bleibt (Abb. 4.1d). An zwei senkrechten Geraden gespiegelt, liegt das Bild gegenüber dem Ausgangspol, und der Pol ist auf der anderen Halbkugel: genau dort, wohin ihn ein Inversionszentrum bringt (Abb. 4.1a).

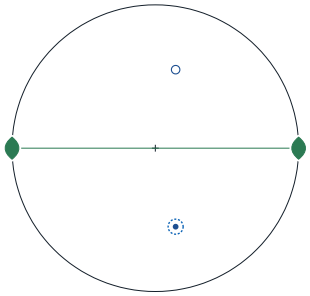
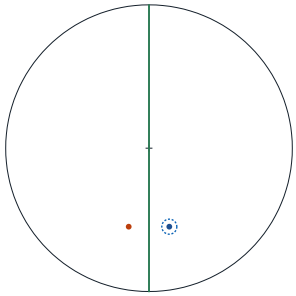
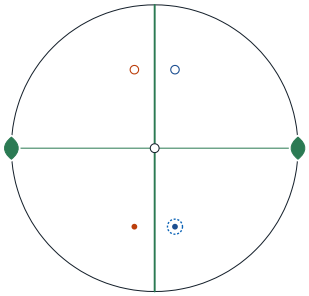


Abb. 4.2a 2 in der Ebene: Spiegelung des Bildes an der Achse, andere Halbkugel.
In der App öffnen →



b *m* senkrecht zu 2: Spiegelung an der Spur, gleiche Halbkugel.
In der App öffnen →



c 2/*m*: Beide zusammen erzeugen 1. In der App öffnen →

Abb. 4.2 Symmetriesatz I am Stereogramm. Der Ausgangspol (gestrichelter Ring) und sein Bild unter der Drehung sind blau, Spiegelbilder orange (Kapitel 3). In (c) liegt der vierte Pol gegenüber dem Ausgangspol auf der anderen Halbkugel: Er geht aus ihm durch Inversion hervor. Das Inversionszentrum ist der kleine Kreis in der Mitte.

Für Satz II stehen beide Spiegelebenen senkrecht auf der Projektionsebene und senkrecht aufeinander (Abb. 4.3). Jede Spiegelung spiegelt das Bild an ihrer Spur, der Pol bleibt auf seiner Halbkugel. Nach beiden Spiegelungen liegt er gegenüber dem Ausgangspol, auf derselben Halbkugel: Das ist eine Drehung um 180° um die Schnittgerade der beiden Ebenen (Abb. 4.1b). Weil das Spiegelbild eines Spiegelbilds wieder das Original ist, ist dieser Pol blau.

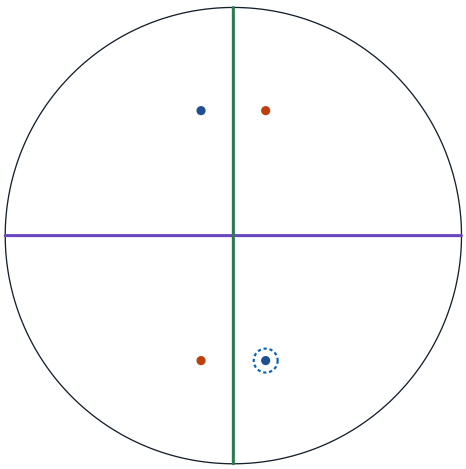
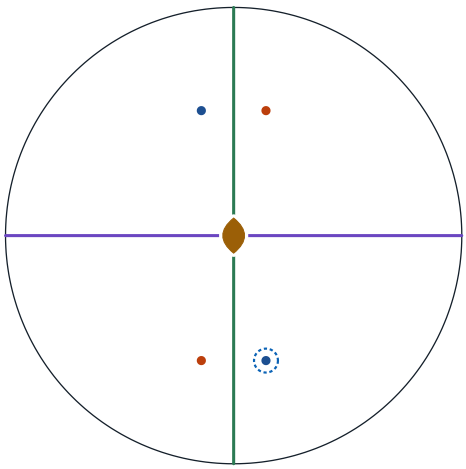


Abb. 4.3a Zwei senkrechte Spiegelebenen, eine davon (senkrecht zu *b*) wie in Abb. 4.2b: vier Pole.
In der App öffnen →



b Die erzeugte 2-zählige Achse in der Mitte: *mm*2.
In der App öffnen →

Abb. 4.3 Symmetriesatz II am Stereogramm. (a) zeigt nur die beiden Spiegelebenen: Der vierte Pol entsteht, wenn man den Ausgangspol erst an der einen, dann an der anderen Ebene spiegelt. (b) Er liegt dort, wohin ihn eine Drehung um 180° um die Schnittgerade bringt.

Die Sätze gelten in jeder Richtung: Je zwei der drei Elemente erzeugen das dritte. Ein Inversionszentrum auf einer Spiegelebene erzeugt eine 2-zählige Achse senkrecht zu ihr, ein Inversionszentrum auf einer 2-zähligen Achse eine Spiegelebene senkrecht zu ihr. Eine 2-zählige Achse, die in einer Spiegelebene liegt, erzeugt eine zweite Spiegelebene, die die Achse ebenfalls enthält und senkrecht auf der ersten steht. Umgekehrt erzeugen eine Spiegelebene und ein Inversionszentrum nur eine 2-zählige Achse, keine 4- oder 6-zählige.

Die Sätze erklären, warum manche Symmetrieelemente in Symbolen fehlen dürfen. 2/*m* enthält immer ein Inversionszentrum, ohne dass das Symbol es nennt. In *mmm* erzeugen die drei Spiegelebenen die drei 2-zähligen Achsen (Abb. 4.4); das volle Symbol lautet 2/*m* 2/*m* 2/*m* (Kapitel 5). Und $\bar{6}$ = 3/*m* enthält kein Inversionszentrum: Satz I ist nicht anwendbar, weil die Drehachse 3 ungeradzählig ist, und unter den Drehinversionsachsen enthalten nur die ungeradzähligen ein Inversionszentrum (Kapitel 3).

4.4 Vom Pol zur Bahn

Wendet man alle Symmetrieoperationen einer Punktgruppe auf einen Pol in allgemeiner Lage an, so entsteht seine Bahn: so viele Pole, wie die Gruppe Operationen hat. Das sind die Pole der allgemeinen Form (Kapitel 6).

Abb. 4.4 zeigt die Bahn in *mmm*: Aus einem Pol werden acht, so viele, wie *mmm* Operationen hat. Bei einer Drehinversionsachse sind Drehung und Inversion zu *einer* Operation gekoppelt (Kapitel 3). Abb. 4.5 und 4.6 vergleichen eine 4-zählige Drehachse mit einer 4-zähligen Drehinversionsachse $\bar{4}$: Bei 4 liegen alle vier Pole auf derselben Halbkugel, bei $\bar{4}$ wechseln sie mit jedem Schritt um 90° die Halbkugel. $\bar{4}$ enthält eine 2-zählige Drehachse, aber weder 4 noch ein Inversionszentrum.

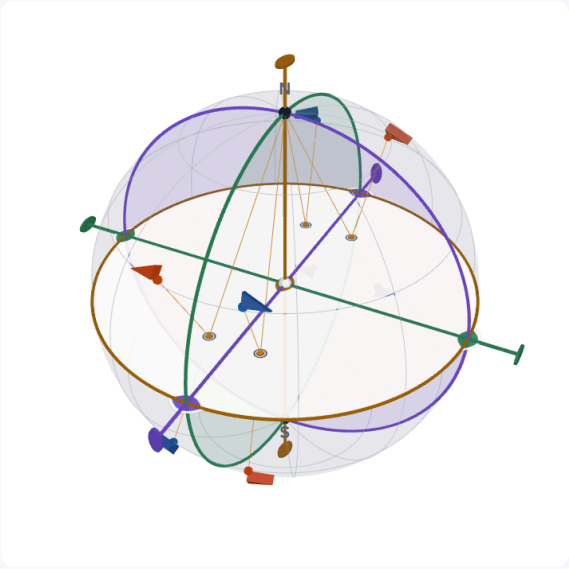


Abb. 4.4a *mmm* in 3D: die drei Spiegelebenen (Scheiben), die 2-zähligen Achsen in ihren Schnittgeraden und die 8 äquivalenten Pole auf der Umkugel. Ziehen dreht die Ansicht. In der App öffnen →

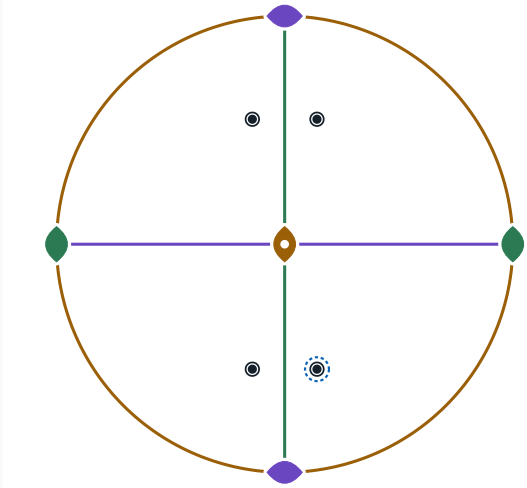


Abb. 4.4b *mmm* im Stereogramm: Drei Spiegelebenen erzeugen drei 2-zählige Achsen; der allgemeine Pol ergibt 8 äquivalente Pole. In der App öffnen →

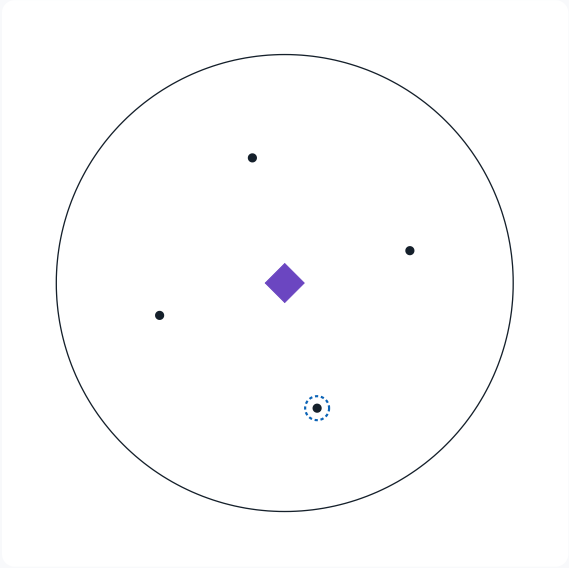


Abb. 4.5 4: vier Pole auf derselben Halbkugel. In der App öffnen →

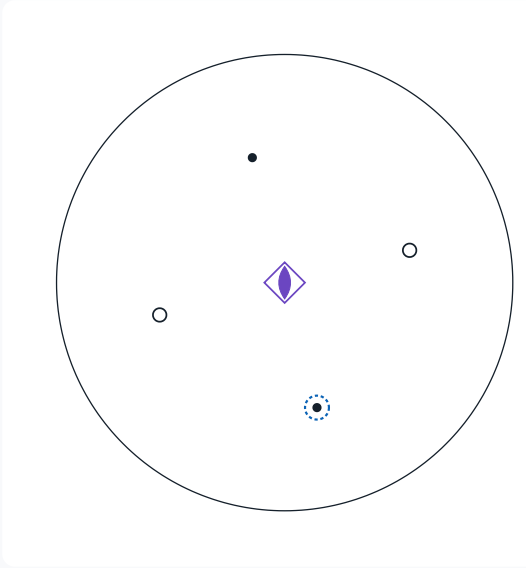


Abb. 4.6 $\bar{4}$: Die Pole wechseln mit jeder Vierteldrehung die Halbkugel. In der App öffnen →

IN DER APP

Im Tab „Punktgruppen“ erzeugt das Objekt in allgemeiner Lage diese Bahn; man kann den Ausgangspol ziehen und durch Antippen auf die andere Halbkugel bringen. Nahe an einer Achse oder Spiegelebene rastet er ein; dann fallen Bilder zusammen, und es entstehen weniger Pole (Kapitel 10).

4.5 Pole auf Symmetrieelementen

Die Pole spezieller Formen (Kapitel 6) liegen auf Symmetrieelementen. Am Galenit sieht man das, wenn man das Symmetriegerüst von $m\bar{3}m$ unter die Pole legt (Abb. 4.7 und 4.8): Die Pole des Würfels {100} liegen auf den 4-zähligen Achsen, die des Oktaeders {111} auf den $\bar{3}$-Achsen und die des Rhombendodekaeders {110} auf den 2-zähligen Achsen. Umgekehrt kann man aus einem Stereogramm von Flächenpolen auf die Symmetrie schliessen, indem man die Drehungen und Spiegelungen sucht, die das Muster der Pole in sich überführen. Eindeutig ist dieser Schluss aber nicht immer (Vertiefung am Ende des Abschnitts).

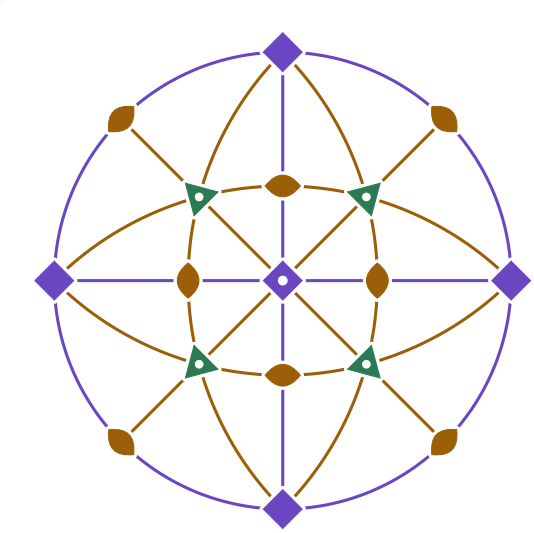


Abb. 4.7 Symmetriegerüst von $m\bar{3}m$, Farben nach Blickrichtung (Kapitel 5). In der App öffnen →

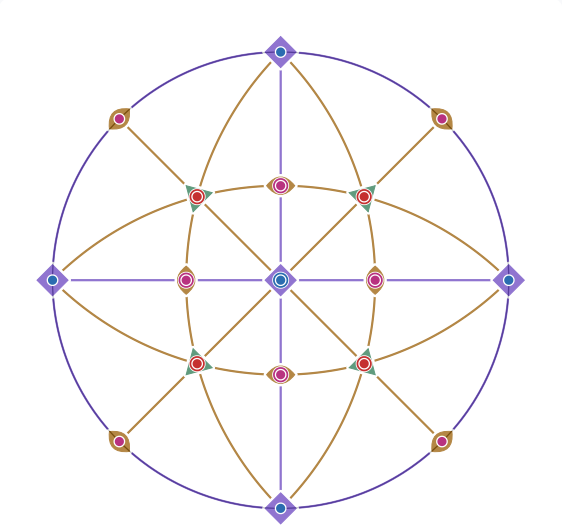


Abb. 4.8 Galenit über dem Symmetriegerüst: Würfel {100} auf 4, Oktaeder {111} auf $\bar{3}$, Rhombendodekaeder {110} auf 2. In der App öffnen →

VERTIEFUNG · **Grenzen des Schlusses vom Polmuster auf die Punktgruppe**

Wer aus einem Stereogramm die Punktgruppe bestimmt, sollte wissen, wann dieser Schluss nicht eindeutig ist.

Sucht man die Symmetrie auf diese Weise, erhält man die Symmetrie des Polmusters, und die kann höher sein als die Punktgruppe des Kristalls: Die Pole eines Würfels in 23 liegen genau wie in $m\bar{3}m$ (Kapitel 6), und selbst die allgemeine Form der Punktgruppe 4, die tetragonale Pyramide, hat ein Polmuster mit Spiegelebenen (Abb. 4.5). Sicher wird die Zuordnung erst, wenn mehrere Formen zusammen oder die Symmetrie der Flächen selbst die höhere Symmetrie ausschliessen; die App zeigt Letztere mit „Flächensymmetrie zeigen“.

ZUSAMMENFASSUNG

- Projiziert werden die Durchstosspunkte der Achsen und die Grosskreise der Spiegelebenen; zusammen bilden sie das Symmetriegerüst.
- $\bar{1}$: Gegenstelle, andere Halbkugel. 2 senkrecht: Drehung um 180°. 2 in der Ebene: Spiegelung an der Achse, andere Halbkugel. m senkrecht: Spiegelung an der Spur. m in der Ebene: gleiche Stelle, andere Halbkugel.
- Alle Operationen zusammen machen aus einem allgemeinen Pol die Pole der allgemeinen Form. Pole spezieller Formen liegen auf Symmetrieelementen.
- Symmetrieelemente erzeugen einander, z. B. $m \perp m$ eine 2-zählige Achse in der Schnittgeraden.
- Symmetriesatz I: Eine geradzählige Drehachse und eine Spiegelebene senkrecht dazu erzeugen ein Inversionszentrum im Schnittpunkt. Symmetriesatz II: Zwei zueinander senkrechte Spiegelebenen erzeugen eine 2-zählige Achse in der Schnittgeraden. Je zwei der drei Elemente erzeugen das dritte.

ZUR VERTIEFUNG

- Das Polmuster einer Form kann höhere Symmetrie haben als die Punktgruppe des Kristalls.

Lernziele prüfen im Quiz: Stufe 1 · Stufe 2 · Stufe 3

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 5.4 (Projektion von Symmetrieelementen, S. 43), 6.1–6.4 (Drehachsen und ihre Symbole, Spiegelebene, Inversionszentrum, Koppelung und Drehinversionsachsen, S. 69–78), 7.2 (Symmetriesätze I und II, S. 102, Abb. 7.14, 7.15; Anwendung S. 104), 9.1 (Abb. 9.1, Tab. 9.2, S. 128–129), 9.2 (Galenit, Abb. 9.4, S. 142), Tab. 15.1 und 15.2 (Symbole, S. 354–356); Aufgabe 6.1b (Pol in allgemeiner Lage, S. 79).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Kap. 1.4 (graphische Symbole der Symmetrieelemente) und Kap. 10.1 (Stereogramme der Punktgruppen).

- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 3.2.2 (zwei senkrechte Spiegelebenen erzeugen eine 2-zählige Achse, Abb. 3.10, S. 101), 3.3.2 (2 und *m* in zwei Blickrichtungen erzeugen eine weitere Spiegelebene, S. 114).

5 Blickrichtungen

Das Hermann-Mauguin-Symbol einer Punktgruppe ist eine kurze Liste: Für jede Klasse gleichwertiger Richtungen sagt es, welche Symmetrieelemente dort liegen. Diese Richtungen heissen Blickrichtungen.

LERNZIELE

- die Blickrichtungen eines Kristallsystems angeben
- ein Hermann-Mauguin-Symbol Position für Position lesen
- volles und gekürztes Symbol ineinander überführen

ZUR VERTIEFUNG

- zwei Aufstellungen derselben Punktgruppe unterscheiden, z. B. 321 und 312
- am Symmetriegerüst ablesen, ob eine Punktgruppe zentrosymmetrisch, enantiomorph oder polar ist, und ihre Laue-Klasse angeben

5.1 Was ist eine Blickrichtung?

Drehachsen und Normalen von Spiegelebenen können in einem Kristall nur in ganz bestimmten Richtungen liegen. Diese Richtungen bilden höchstens drei Klassen: Innerhalb einer Klasse gehen die Richtungen durch Symmetrieoperationen ineinander über, Richtungen verschiedener Klassen nicht. Diese Klassen symmetrisch nicht äquivalenter Symmetrierichtungen heissen **Blickrichtungen**. Welche es sind, hängt vom Kristallsystem und dem gewählten Achsensystem ab; trigonale Kristalle werden in diesem Skript immer mit hexagonalen Achsen beschrieben:

KRISTALLSYSTEM	1. BLICKRICHTUNG	2. BLICKRICHTUNG	3. BLICKRICHTUNG
Triklin	–	–	–
Monoklin	[010]	–	–
Orthorhombisch	[100]	[010]	[001]
Tetragonal	[001]	⟨100⟩	⟨110⟩
Trigonal, hexagonal	[001]	⟨100⟩	⟨210⟩
Kubisch	⟨100⟩	⟨111⟩	⟨110⟩

Spitze Klammern ⟨*uvw*⟩ bezeichnen eine Richtung und alle zu ihr gleichwertigen Richtungen; tetragonal umfasst ⟨100⟩ z. B. [100] und [010]. Im monoklinen System gibt es nur eine Blickrichtung, die **eindeutige Achse** (in den International Tables *unique axis*): die Richtung der 2-zähligen Achse bzw. der Normalen der Spiegelebene. Standard ist *b* als eindeutige Achse, so auch in der Tabelle; gebräuchlich ist auch *c*, dann ist die Blickrichtung [001]. Die App bietet beide Aufstellungen an. Ältere Bezeichnungen wie „1. Aufstellung“ und „2. Aufstellung“ sind nicht eindeutig: Die International Tables von 1952 meinten damit *c* bzw. *b*, Borchardt-Ott verwendet sie umgekehrt (Abschn. 7.2, S. 104, Fussnote 6).

Die Blickrichtung ist etwas anderes als die Projektionsrichtung des Stereogramms (Kapitel 6): Die Projektionsrichtung wählt man frei, die Blickrichtungen sind durch die Symmetrie festgelegt.

VERTIEFUNG · **Schreibweise in den International Tables**

Wer in den International Tables nachschlägt, findet für das hexagonale System eine andere Schreibweise.

Die International Tables schreiben die dritte hexagonale Blickrichtung als ⟨$\bar{1}$10⟩; das ist dieselbe Familie wie ⟨210⟩, denn [$\bar{1}$10] gehört zu ihr.

5.2 Das Hermann-Mauguin-Symbol lesen

Jede Position des Symbols gehört zu einer Blickrichtung, in der Reihenfolge der Tabelle. An jeder Position steht, was zu dieser Richtung gehört: Achsen parallel, Spiegelebenen senkrecht. Also eine Drehachse oder Drehinversionsachse *X* entlang der Richtung, eine Spiegelebene mit der Richtung als Normale (*m*) oder beides (*X*/*m*). Gleichwertige Elemente werden nur einmal genannt. Gehört zu einer Blickrichtung nichts, fällt ihre Position am Ende des Symbols weg (z. B. 4/*m*, 23).

Am Beispiel 4/*m* 2/*m* 2/*m* (Abb. 5.1–5.3):

- 1. Position [001]: eine 4-zählige Drehachse entlang *c* und eine Spiegelebene senkrecht dazu;
- 2. Position ⟨100⟩: 2-zählige Achsen entlang *a* und *b*, Spiegelebenen senkrecht dazu;
- 3. Position ⟨110⟩: 2-zählige Achsen entlang der Diagonalen, Spiegelebenen senkrecht dazu.

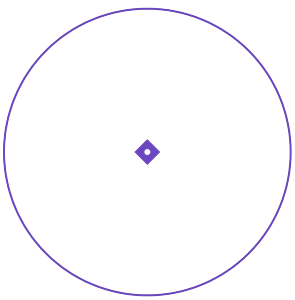


Abb. 5.1 4/*mmm*, 1. Blickrichtung [001]: 4/*m* In der App öffnen →

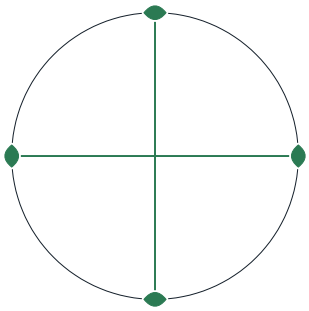


Abb. 5.2 2. Blickrichtung ⟨100⟩: 2/*m* In der App öffnen →

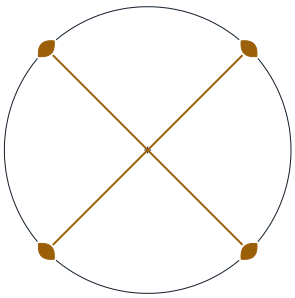


Abb. 5.3 3. Blickrichtung ⟨110⟩: 2/*m* In der App öffnen →

Kubisch steht ⟨100⟩ an erster Stelle, ⟨111⟩ an zweiter. Beim Galenit ($m\bar{3}m$) liegen entlang ⟨100⟩ 4-zählige Achsen mit Spiegelebenen senkrecht dazu (4/*m*), entlang der Raumdiagonalen ⟨111⟩ $\bar{3}$-Achsen, entlang ⟨110⟩ 2-zählige Achsen mit Spiegelebenen senkrecht dazu (2/*m*) (Abb. 5.4–5.6). Ein kubisches Symbol erkennt man an der 3 oder $\bar{3}$ an zweiter Stelle.

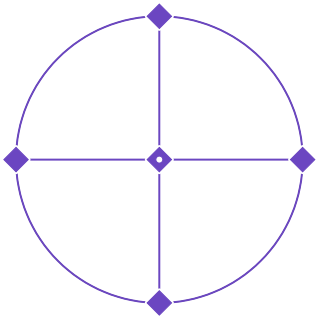


Abb. 5.4 $m\bar{3}m$, ⟨100⟩: 4/*m* In der App öffnen →

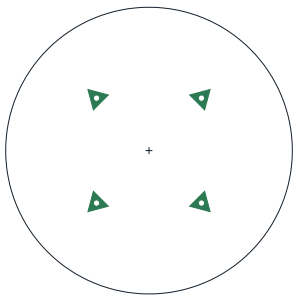


Abb. 5.5 ⟨111⟩: $\bar{3}$ In der App öffnen →

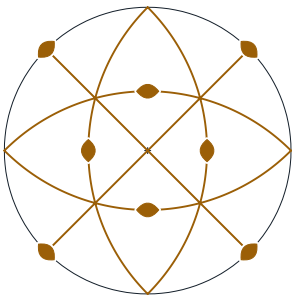


Abb. 5.6 ⟨110⟩: 2/*m* In der App öffnen →

VERTIEFUNG · **Die 1 als Platzhalter**

Am Ende des Symbols darf eine leere Position wegfallen. Dazwischen geht das nicht, denn sonst wüsste man nicht mehr, welche Position zu welcher Blickrichtung gehört.

Steht eine leere Position zwischen besetzten Positionen, schreibt man eine 1 (z. B. 31*m* gegenüber 3*m*1, siehe „Zwei Aufstellungen derselben Punktgruppe“).

IN DER APP

Die App färbt die Symmetrieelemente nach ihrer Blickrichtung (violett, grün, ocker für die 1., 2. und 3. Position), auch im vollen Symbol und in der Infobox. In der 3D-Ansicht lassen sich die Blickrichtungen einzeln ein- und ausblenden.

5.3 Volles und gekürztes Symbol

Einige Symbole sind überbestimmt, weil Symmetrieelemente einander erzeugen (Symmetriesätze, Kapitel 4). In 2/*m* 2/*m* 2/*m* erzeugen die drei zueinander senkrechten Spiegelebenen die 2-zähligen Achsen von selbst; das gekürzte Symbol lautet *mmm*. Ebenso wird 4/*m* 2/*m* 2/*m* zu 4/*mmm* und 4/*m* $\bar{3}$ 2/*m* zu *m*$\bar{3}$*m*. Welche Teile entfallen, ist festgelegt (Borchardt-Ott Tab. 9.2); die 4 in 4/*mmm* bleibt stehen, weil sie das tetragonale System kennzeichnet, während in *m*$\bar{3}$*m* die $\bar{3}$ an zweiter Stelle das kubische System anzeigt. Das gekürzte Symbol behält die Positionen bei: In *m*$\bar{3}$*m* steht das erste *m* für ⟨100⟩, das zweite für ⟨110⟩. Gekürzt werden ausserdem 6/*m* 2/*m* 2/*m* zu 6/*mmm*, 2/*m* $\bar{3}$ zu *m*$\bar{3}$ und $\bar{3}$ 2/*m* 1 zu $\bar{3}$*m*1 (ebenso $\bar{3}$ 1 2/*m* zu $\bar{3}$1*m*); bei allen anderen Punktgruppen sind volles und gekürztes Symbol gleich. Die App zeigt zu jeder Punktgruppe beide Symbole.

5.4 Zwei Aufstellungen derselben Punktgruppe VERTIEFUNG

Die Achsen eines Kristalls sind durch sein Gitter festgelegt (Kapitel 1). Bei einigen Punktgruppen lassen sich die Symmetrieelemente auf zwei Arten zu diesen Achsen anordnen. Man spricht von zwei **Aufstellungen** der Punktgruppe. Das Symbol zeigt, welche gemeint ist, denn jede Position gehört zu einer Blickrichtung.

Ein Beispiel ist die Punktgruppe 32. Im Symbol 321 steht die 2 an zweiter Stelle: Die 2-zähligen Achsen liegen entlang ⟨100⟩, also entlang a_1, a_2 und a_3; die dritte Blickrichtung ⟨210⟩ ist leer und erhält die 1. Im Symbol 312 liegen die 2-zähligen Achsen entlang ⟨210⟩, zwischen den *a*-Achsen. Das Symmetriegerüst ist dasselbe, nur um 30° um *c* gedreht (Abb. 5.7).

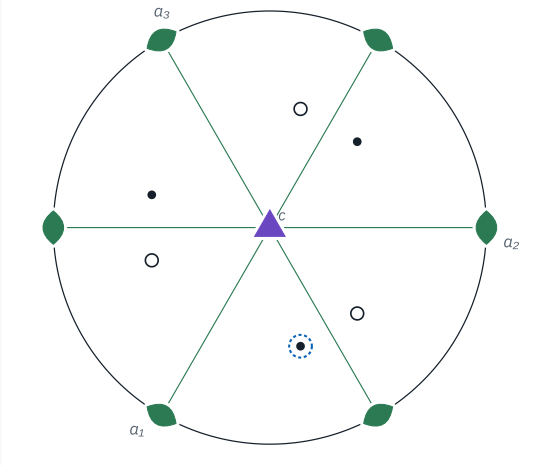


Abb. 5.7a 321: 2-zählige Achsen entlang a_1, a_2, a_3. In der App öffnen →

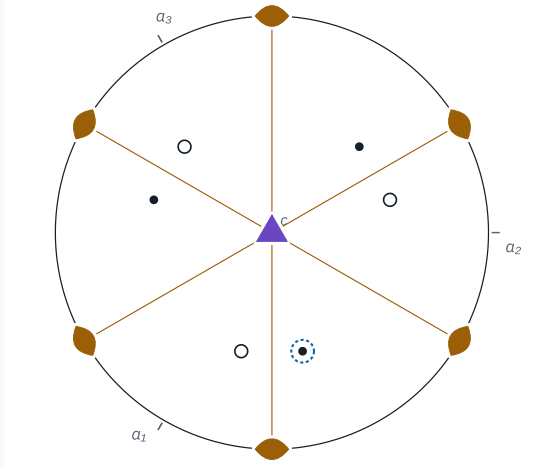


Abb. 5.7b 312: 2-zählige Achsen zwischen den *a*-Achsen, entlang ⟨210⟩. In der App öffnen →

Als Gruppe betrachtet sind 321 und 312 gleich. Für den Kristall sind sie es nicht, denn seine Flächen werden auf die Achsen bezogen. Der Pol von (100) liegt senkrecht zu a_2, also in Richtung [210]. In 312 liegt er damit auf einer 2-zähligen Achse, und die Form {100} hat 3 Flächen, ein trigonales Prisma. In 321 liegt er auf keinem Symmetrieelement, und {100} hat 6 Flächen, ein hexagonales Prisma wie beim Quarz (Kapitel 9). Dasselbe Paar gibt es bei fünf Punktgruppen:

PUNKTGRUPPE	AUFSTELLUNG A	AUFSTELLUNG B
32	321: 2 ∥ ⟨100⟩	312: 2 ∥ ⟨210⟩
3*m*	3*m*1: *m* ⊥ ⟨100⟩	31*m*: *m* ⊥ ⟨210⟩
$\bar{3}m$	$\bar{3}m$1: *m* ⊥ ⟨100⟩	$\bar{3}$1*m*: *m* ⊥ ⟨210⟩
$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$: 2 ∥ ⟨100⟩, *m* ⊥ ⟨110⟩	$\bar{4}m2$: *m* ⊥ ⟨100⟩, 2 ∥ ⟨110⟩
$\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$: *m* ⊥ ⟨100⟩, 2 ∥ ⟨210⟩	$\bar{6}2m$: 2 ∥ ⟨100⟩, *m* ⊥ ⟨210⟩

Die beiden Aufstellungen unterscheiden sich jeweils durch eine Drehung um die Hauptachse, um 30° bei den trigonalen und hexagonalen, um 45° bei den tetragonalen Punktgruppen. Bei den trigonalen Punktgruppen unterscheiden sich die beiden Symbole nur durch die Stellung der 1 (Vertiefung „Die 1 als Platzhalter“). Auch die eindeutige Achse *b* oder *c* der monoklinen Punktgruppen (Abschnitt 5.1 „Was ist eine Blickrichtung?“) ist eine Wahl der Aufstellung; ausgeschrieben, mit je einer Position für [100], [010] und [001], lautet das Symbol der Punktgruppe 2 dann 121 bzw. 112. Der Gips, ein Beispielkristall der App, ist mit *b* als eindeutiger Achse aufgestellt.

IN DER APP

Im Modus „Punktgruppen“ bietet die App bei diesen Punktgruppen beide Aufstellungen an; der Tooltip jedes Knopfs sagt, wo die Elemente liegen. Mit „Kristallachsen“ unter „Darstellung“ sieht man, wie das Gerüst zu den Achsen liegt. Auch im Modus „Kristallformen“ stehen beide Aufstellungen zur Wahl: Die Formauswahl führt die Punktgruppe mit dem vollständigen Symbol und der Aufstellung auf, z. B. „Punktgruppe 312 (D3), Aufstellung B“. So lässt sich das Beispiel oben nachvollziehen: {100} in 312 ist ein trigonales Prisma. Bei monoklinen Punktgruppen verwendet der Modus „Kristallformen“ die Achse *b*.

5.5 Was die Punktgruppe über den Kristall verrät VERTIEFUNG

Die Infobox der App nennt zu jeder Punktgruppe fünf Eigenschaften: Laue-Klasse, zentrosymmetrisch, enantiomorph, polar und piezoelektrisch. Jede lässt sich am Symmetriegerüst ablesen, und jede sagt etwas darüber, was ein Kristall dieser Punktgruppe zeigen kann. Abb. 5.8 zeigt drei Punktgruppen mit derselben Laue-Klasse, die Pole nach Händigkeit gefärbt (Kapitel 3).

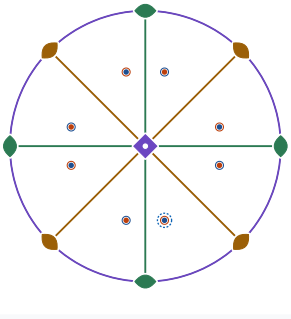


Abb. 5.8a 4/*mmm*: zentrosymmetrisch, zu jedem Pol der Gegenpol.
In der App öffnen →

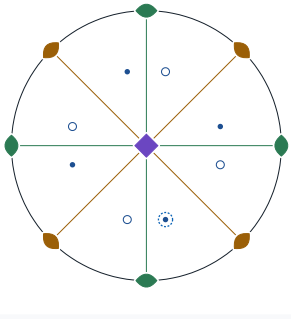


Abb. 5.8b 422: enantiomorph, nur Drehungen, alle Pole blau.
In der App öffnen →

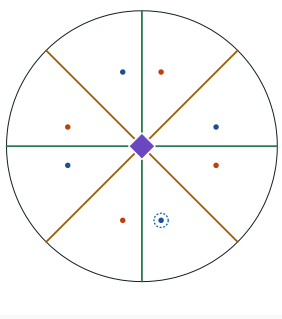


Abb. 5.8c 4*mm*: polar, alle Pole auf der oberen Halbkugel.
In der App öffnen →

- **Zentrosymmetrisch** ist eine Punktgruppe, die das Inversionszentrum $\bar{1}$ enthält. Im Stereogramm gehört dann zu jedem Pol der Gegenpol: an der gegenüberliegenden Stelle und auf der anderen Halbkugel (Abb. 5.8a). Das trifft auf 11 der 32 Punktgruppen zu.
- Nimmt man zu einer Punktgruppe die Inversion hinzu, erhält man eine zentrosymmetrische Punktgruppe, ihre **Laue-Klasse**. 422, 4*mm*, $\bar{4}2m$ und 4/*mmm* gehören zur Laue-Klasse 4/*mmm*. Die 32 Punktgruppen verteilen sich so auf 11 Laue-Klassen (Tabelle). Bedeutung hat das für Messungen, die ein Inversionszentrum nicht erkennen: Die

Beugung von Röntgenstrahlen liefert meist ein zentrosymmetrisches Beugungsbild, ob der Kristall zentrosymmetrisch ist oder nicht. Sie zeigt deshalb in der Regel nur die Laue-Klasse.

- **Enantiomorph** oder **chiral** heisst eine Punktgruppe, die nur Drehungen enthält, also nur Operationen erster Art (Kapitel 3). Beide Wörter meinen dasselbe; für Kristalle ist in der Kristallographie „enantiomorph“ üblich, „chiral“ vor allem in der Chemie und im Englischen. Enantiomorph sind die 11 Punktgruppen 1, 2, 3, 4, 6, 222, 32, 422, 622, 23 und 432; Borchardt-Ott führt die Punktgruppe 1 als *asymmetrisch* gesondert auf, zählt sie aber zu den 11 enantiomorphen Punktgruppen. Ein Kristall dieser Punktgruppe und sein Spiegelbild lassen sich durch keine Drehung zur Deckung bringen; es kann ihn in einer Links- und einer Rechtsform geben, wie den Links- und Rechtsquarz (Punktgruppe 32). Im Stereogramm sind alle Pole einer Bahn blau (Abb. 5.8b). Solche Kristalle können optisch aktiv sein: Sie drehen die Ebene von polarisiertem Licht; Links- und Rechtsform drehen sie um den gleichen Betrag in entgegengesetzte Richtungen. Umgekehrt verrät optische Aktivität noch keine Enantiomorphie: Sie ist auch in den Punktgruppen *m*, *mm*2, $\overline{4}$ und $\overline{4}2m$ möglich, die Spiegelungen bzw. Drehinversionen enthalten. Bei den Raumgruppen werden die Begriffe übrigens enger gebraucht; das gehört zur Strukturkristallographie, etwa mit den enantiomorphen Schraubenachsen 3_1 und 3_2 (Borchardt-Ott & Sowa, Abschn. 10.1).
- **Polar** heisst eine Punktgruppe, wenn alle Operationen eine Richtung samt ihrem Richtungssinn festhalten: Ein Pfeil entlang dieser Richtung bleibt derselbe Pfeil. In 4*mm* ist das *c*; keine Operation bringt einen Pol von oben nach unten (Abb. 5.8c). Am Kristall können oben und unten deshalb verschiedene Formen auftreten, wie beim Turmalin (3*m*). Nur in polaren Punktgruppen kann ein Kristall ein bleibendes elektrisches Dipolmoment haben. Ändert sich die Temperatur, ändert sich das Dipolmoment, und die beiden Enden laden sich entgegengesetzt auf; das heisst **Pyroelektrizität**. Polar sind die 10 Punktgruppen 1, 2, 3, 4, 6, *m*, *mm*2, 3*m*, 4*mm* und 6*mm*. In 1 ist jede Richtung polar, in *m* jede Richtung in der Spiegelebene.
- **Piezoelektrisch** heisst ein Kristall, in dem Druck oder Zug elektrische Ladungen erzeugt; umgekehrt verformt ihn eine angelegte elektrische Spannung. Das ist in allen Punktgruppen ohne Inversionszentrum möglich ausser in 432, also in 20 der 32. In einem zentrosymmetrischen Kristall ist es unmöglich, denn die Inversion kehrt jeden Pfeil um. Quarz ist piezoelektrisch: Eine Quarzplatte senkrecht zu einer *a*-Achse lädt sich unter Druck entgegengesetzt auf. Darauf beruht die Quarzuhr.

Polar im Sinn der Infobox ist mehr, als dass eine Richtung und ihre Gegenrichtung verschieden sind. Beim Quarz gilt das schon für die 2-zähligen Achsen; Borchardt-Ott nennt solche Achsen *polare Achsen*. Es gibt aber drei gleichwertige davon, und keine wird von allen Operationen festgehalten. Die Punktgruppe 32 ist deshalb nicht polar: Quarz ist piezoelektrisch, aber nicht pyroelektrisch.

Die Eigenschaften hängen zusammen. Eine zentrosymmetrische Punktgruppe ist weder enantiomorph noch polar: Die Inversion ist eine Operation zweiter Art, und sie kehrt jeden Pfeil um. Enantiomorph und polar zugleich sind die fünf Punktgruppen 1, 2, 3, 4 und 6, die nur Drehungen um eine einzige Achse enthalten (in 1 nur die Identität). Von den 21 Punktgruppen ohne Inversionszentrum bleiben fünf, die weder enantiomorph noch polar sind: $\overline{4}$, $\overline{4}2m$, $\overline{6}$, $\overline{6}m2$ und 43*m*. Jede von ihnen enthält eine Drehinversionsachse $\overline{4}$ oder $\overline{6}$. Die Tabelle zeigt alle diese Fälle auf einen Blick.

LAUE-KLASSE	WEITERE PUNKTGRUPPEN DER LAUE-KLASSE
$\overline{1}$	1 (e, p)
2/*m*	2 (e, p), *m* (p)
mmm	222 (e), *mm*2 (p)
4/*m*	4 (e, p), $\overline{4}$
4/*mmm*	422 (e), 4*mm* (p), $\overline{4}2m$
$\overline{3}$	3 (e, p)
$\overline{3}m$	32 (e), 3*m* (p)
6/*m*	6 (e, p), $\overline{6}$
6/*mmm*	622 (e), 6*mm* (p), $\overline{6}m2$
$m\overline{3}$	23 (e)
$m\overline{3}m$	432 (e), $\overline{4}3m$

Die 11 Laue-Klassen sind die 11 zentrosymmetrischen Punktgruppen. Die rechte Spalte enthält die übrigen 21 Punktgruppen, die kein Inversionszentrum haben; e: enantiomorph, p: polar. Alle Punktgruppen der rechten Spalte ausser 432 sind piezoelektrisch.

Eine polare Punktgruppe erkennt man auch an ihren Kristallformen. Ein Pedion besteht aus einer einzigen Fläche, wie die Grundfläche der Pyramide in Abb. 6.2; keine Operation der Punktgruppe darf sie in eine andere Fläche überführen. Alle Operationen halten also die Flächennormale samt ihrem Richtungssinn fest, und genau das heisst polar. Ein Pedion gibt es deshalb nur in den 10 polaren Punktgruppen, und seine Flächensymmetrie ist die ganze Punktgruppe: In 4*mm* entsteht das Pedion (001), wenn die Pole einer tetragonalen Pyramide {*hhl*} auf ihren Spiegelebenen zur 4-zähligen Achse wandern; es hat die Flächensymmetrie 4*mm* (Borchardt-Ott, Abschn. 9.2.1). In 1 ist jede Fläche ein Pedion, in *m* jede Fläche, deren Pol auf der Spiegelebene liegt. Kapitel 10 führt dasselbe auf eine allgemeine Regel zurück: Die Flächenzahl ist die Ordnung der Punktgruppe geteilt durch die Ordnung der Flächensymmetrie; bei einer einzigen Fläche müssen beide gleich sein.

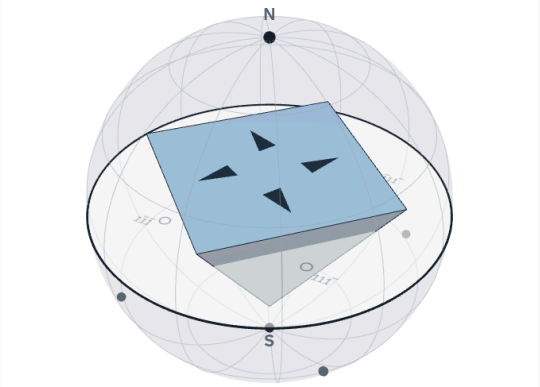


Abb. 5.9a Pedion (001) in 4: Flächensymmetrie 4.., das Muster hat nur die 4-zählige Drehung.
In der App öffnen →

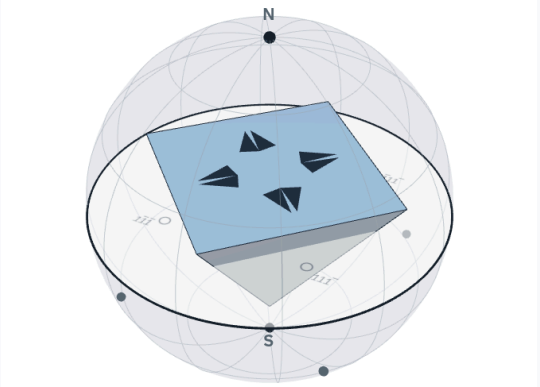


Abb. 5.9b Pedion (001) in 4*mm*: Flächensymmetrie 4*mm*, das Muster ist zusätzlich spiegelsymmetrisch.
In der App öffnen →

Abb. 5.9 zeigt das Pedion (001) in den beiden polaren Punktgruppen 4 und 4*mm*, jeweils durch eine graue tetragonale Pyramide nach unten zu einem Körper geschlossen. Der quadratische Umriss stammt von dieser Ergänzungsform; die Fläche allein ist in beiden Punktgruppen dieselbe. Den Unterschied zeigt erst das Muster auf der Fläche, dessen Symmetrie die Flächensymmetrie ist. Es zeigt zugleich, ob die Punktgruppe enantiomorph ist: In 4 hat das Muster nur die 4-zählige Drehung, in 4*mm* zusätzlich die vier Spiegelebenen, die die Fläche senkrecht schneiden.

IN DER APP

Die Infobox einer Punktgruppe zeigt die fünf Eigenschaften; Tooltips erklären „enantiomorph“, „polar“ und „piezoelektrisch“. „Pole nach Händigkeit färben“ unter „Darstellung“ zeigt, ob eine Punktgruppe enantiomorph ist. Die Beispielkristalle Links- und Rechtsquarz zeigen die beiden enantiomorphen Formen, der Turmalin eine polare Punktgruppe mit verschiedenen Formen oben und unten. Mit „Flächensymmetrie zeigen“ bietet die Formauswahl das Pedion in jeder polaren Punktgruppe an, mit seinem Flächenmuster.

ZUSAMMENFASSUNG

- Blickrichtungen sind die höchstens drei Klassen nicht gleichwertiger Symmetrierichtungen; sie hängen vom Kristallsystem und von der Wahl der Achsen ab.
- Jede Position des Hermann-Mauguin-Symbols gehört zu einer Blickrichtung: Achsen parallel, Spiegelebenen senkrecht zu ihr.
- Das gekürzte Symbol lässt Elemente weg, die von den übrigen erzeugt werden, z. B. *mmm* für 2/*m* 2/*m* 2/*m*.

ZUR VERTIEFUNG

- Fünf Punktgruppen haben zwei Aufstellungen, die sich durch eine Drehung um die Hauptachse unterscheiden (321 und 312, 3*m*1 und 31*m*, …). Sie ergeben für dieselben Indizes verschiedene Formen.
- Zentrosymmetrisch: enthält $\bar{1}$. Laue-Klasse: Punktgruppe mit hinzugenommener Inversion, 11 Klassen. Enantiomorph (chiral): nur Drehungen, Links- und Rechtsform möglich. Polar: eine Richtung samt Richtungssinn bleibt erhalten, Pyroelektrizität möglich. Piezoelektrisch: alle Punktgruppen ohne $\bar{1}$ ausser 432.
- Enantiomorph und polar zugleich sind 1, 2, 3, 4 und 6; eine zentrosymmetrische Punktgruppe ist keines von beiden. Ein Pedion gibt es nur in den 10 polaren Punktgruppen; seine Flächensymmetrie ist die ganze Punktgruppe.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 6.4.2 (Schreibweise ⟨*uvw*⟩, S. 78), 7.1 (Blickrichtungen, Tab. 7.3, S. 88–89), 7.2.2–7.2.6 (Symbole der Gitter nach Blickrichtungen, S. 104–111, monoklin 1. und 2. Aufstellung S. 104 Fussnote 6, Abb. 7.19, 7.21, 7.23, 7.24), 9.1 (gekürzte Symbole, Abb. 9.1, Tab. 9.2, S. 128–130), 9.2 (Galenit, S. 131, Abb. 9.4, S. 142).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Teil 2 (Symmetrierichtungen der Gitter), Abschn. 2.2.16.2 (monokline Aufstellungen *unique axis b* und *c*, Standard *b*; frühere Bezeichnungen „1st/2nd setting“).
- W. Kleber, J. Bohm, D. Klimm, M. Mühlberg, B. Winkler, *Einführung in die Kristallographie*, 20. Aufl., De Gruyter, Berlin/Boston (2020), Abschn. 1.6 (Enantiomorphie nur in Kristallklassen mit ausschliesslich Drehungen, S. 60), 5.5.8 („Enantiomorphie (Chiralität, ‚Händigkeit‘)“, S. 412).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Abschn. 10.2.1.1 (H. Klapper, Th. Hahn: Enantiomorphie und Chiralität bezeichnen dieselbe Einschränkung, keine Operationen zweiter Art; bei Kristallen ist „Enantiomorphie“ bevorzugt; 11 Kristallklassen, S. 804), Tab. 10.1.2.2 (Pedion, *pedion or monohedron*, Multiplizität 1, nur in 1, 2, *m*, *mm*2, 4, 4*mm*, 3, 3*m*, 6 und 6*mm*).
- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 9.2.1 (Pedion {001} in 4*mm* mit der Flächensymmetrie 4*mm*, S. 144), 9.4 (polare Drehachsen, S. 164), 9.5 (Enantiomorphie, „enantiomorph (chiral)“, Liste der Punktgruppen, 1 als asymmetrisch gesondert, S. 169), 9.6.1.2 („11 enantiomorphen Punktgruppen“, S. 170), 9.6.1–9.6.3 (optische Aktivität, Piezo- und Pyroelektrizität, Quarzplatte Abb. 9.21, Turmalin, S. 169–171), 10.1 (enantiomorphe Schraubenachsen, S. 203).
- D. Schwarzenbach, *Kristallographie*, Springer, Berlin (2001), Abschn. 2.5.3 (Drehgruppen beschreiben „chirale oder enantiomorphe Objekte“, S. 49), 2.5.7 (Laue-Klassen, Friedelsche Regel, S. 60–61), 2.5.9 (internationale Symbole, Aufstellungen 121 und 112, 3*m*1 und 31*m*, 321 und 312, S. 63–65).

6 Kristallformen im Stereogramm

Gleichwertige Flächen eines Kristalls bilden eine Kristallform. Im Stereogramm erscheint jede Form als ein Muster von Polen, an dem man sie wiedererkennt.

LERNZIELE

- das Stereogramm einfacher Kristallformen zeichnen und ein Stereogramm einem Körper zuordnen
- allgemeine und spezielle Form unterscheiden
- erklären, was sich bei einer anderen Projektionsrichtung am Stereogramm ändert und was gleich bleibt
- die Multiplizität einfacher Formen angeben und begründen, warum sie von der Punktgruppe abhängt
- die Flächenzahl einer Form am Stereogramm abzählen und in $m\bar{3}m$ aus den Indizes berechnen
- Pyrit und Galenit an ihren Formen unterscheiden

ZUR VERTIEFUNG

- Flächensymmetrie und asymmetrische Flächeneinheit erklären und Grenzformen erkennen
- erklären, warum die Würfelflächen des Pyrits gerieft sein können

6.1 Was ist eine Kristallform?

Wendet man die Symmetrieoperationen eines Kristalls auf eine seiner Flächen an, so entstehen weitere, gleichwertige Flächen. Eine solche Menge äquivalenter Flächen ist eine **Kristallform**. Man bezeichnet sie mit den Indizes einer ihrer Flächen in geschweiften Klammern, z. B. {100} für den Würfel. Die Zahl der Flächen einer Form ist ihre **Flächenzahl**.

Die Pole einer Form bilden im Stereogramm ein regelmässiges Muster. Beim tetragonalen Prisma {100} stehen alle vier Flächen senkrecht auf der Projektionsebene: Ihre Pole liegen auf dem Grundkreis, je 90° voneinander entfernt (Abb. 6.1). Bei der tetragonalen Pyramide {101} sind alle vier Flächen gleich stark gegen die Projektionsebene geneigt; ihre Pole haben deshalb den gleichen Abstand vom Grundkreis (Abb. 6.2).

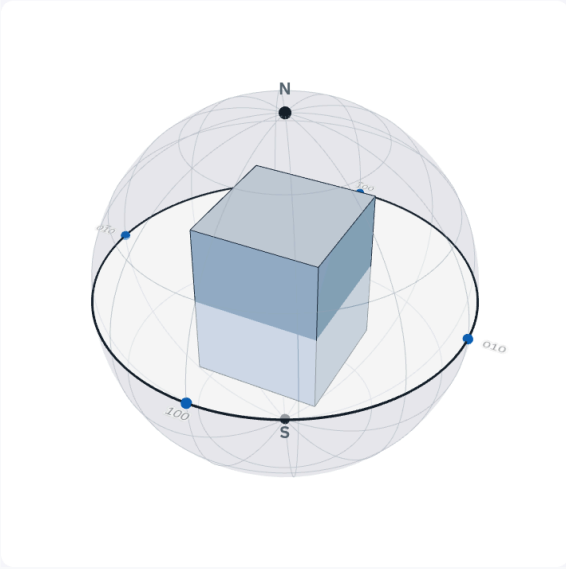


Abb. 6.1a Tetragonales Prisma {100} mit Pinakoid {001} (grau) in der Umkugel, [001] ∥ Projektionsrichtung (senkrecht). In der App öffnen →

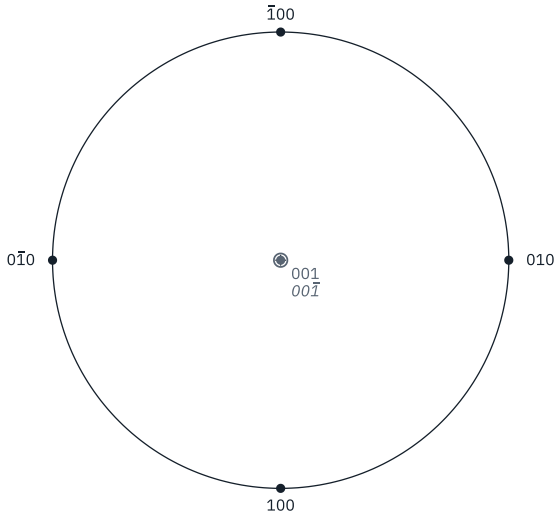


Abb. 6.1b Stereogramm dazu: Die Prismenpole liegen auf dem Grundkreis, die beiden Pinakoidflächen oben und unten im Mittelpunkt (● im ○). In der App öffnen →

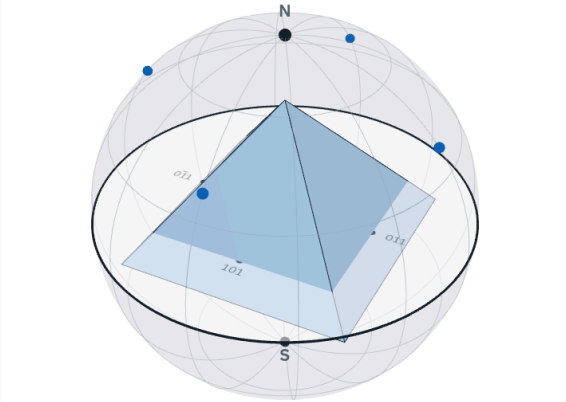


Abb. 6.2a Tetragonale Pyramide {101} mit Pedion ($00\bar{1}$) (grau), gleiche Projektionsrichtung. In der App öffnen →

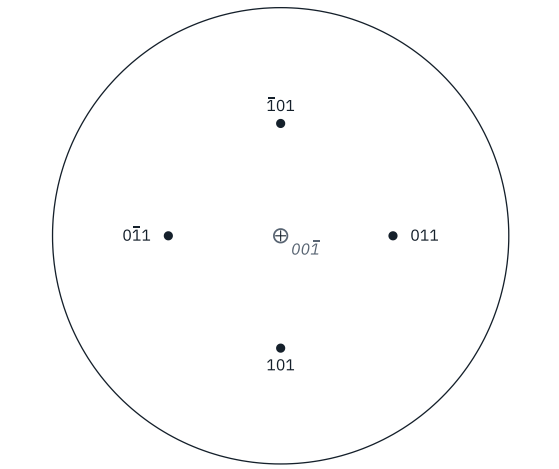


Abb. 6.2b Stereogramm dazu: vier Pole im gleichen Abstand vom Grundkreis; die Grundfläche zeigt nach unten (○ im Mittelpunkt). In der App öffnen →

Prisma, Pyramide, Pinakoid und Pedion sind **offene Formen**: Allein umschliessen sie keinen Raum. Am Kristall treten sie immer zusammen mit anderen Formen auf, so wie in Abb. 6.1 und 6.2. Würfel, Oktaeder oder Dipyramiden sind dagegen **geschlossene Formen**.

IN DER APP
Die App ergänzt offene Formen grau durch Formen derselben Punktgruppe; unter „Gestalt“ lassen sie sich auch offen zeigen.

6.2 Allgemeine Form, spezielle Form, Grenzform

Ob eine Form viele oder wenige Flächen hat, hängt davon ab, wo ihr Pol relativ zu den Symmetrieelementen liegt (Kapitel 4).

- Die Pole einer **allgemeinen Form** liegen auf keinem Symmetrieelement. Sie hat so viele Flächen, wie die Punktgruppe Symmetrieoperationen hat, und wird mit {*hkl*} bezeichnet. Weil *h*, *k* und *l* verschiedene Werte annehmen können, gibt es

in einer Punktgruppe viele allgemeine Formen, in 4/*mmm* z. B. {211}, {321} oder {213}; sie haben alle dieselbe Flächenzahl und denselben Namen, hier ditetragonale Dipyramide. „Die allgemeine Form“ einer Punktgruppe meint diesen Typ.

- Bei einer **speziellen Form** liegt jeder Pol auf mindestens einem Symmetrieelement, und sie hat weniger Flächen. Ihre Indizes sind ein Spezialfall von {*hkl*}, z. B. {*hhl*}, {*h*0*l*} oder {100}.

Abb. 6.3 und 6.4 zeigen beides in der Punktgruppe 4/*mmm*, mit dem Symmetriegerüst gedämpft im Hintergrund. Die ditetragonale Dipyramide {211} ist eine allgemeine Form: 16 Pole, keiner auf einem Symmetrieelement. Die tetragonale Dipyramide {111} ist eine spezielle Form: Ihre 8 Pole liegen auf Spiegelebenen.

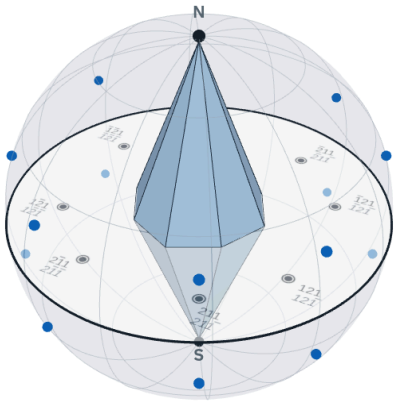


Abb. 6.3a Allgemeine Form der Punktgruppe 4/*mmm*: ditetragonale Dipyramide {211} mit 16 Flächen, [001] senkrecht. In der App öffnen →

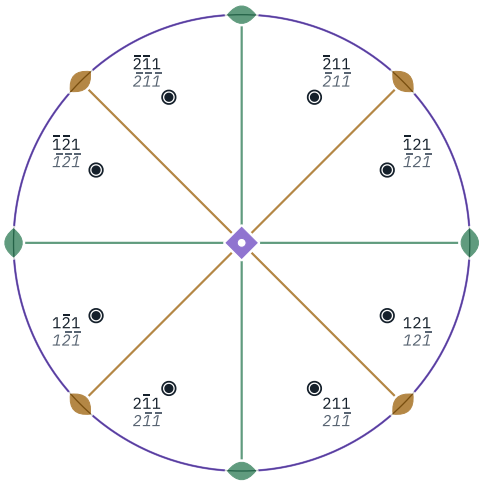


Abb. 6.3b Stereogramm dazu, über dem Symmetriegerüst: 16 Pole, keiner auf einem Symmetrieelement. In der App öffnen →

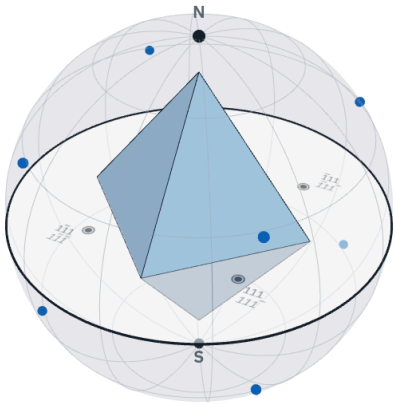


Abb. 6.4a Spezielle Form derselben Punktgruppe: tetragonale Dipyramide {111}, gleiche Projektionsrichtung. In der App öffnen →

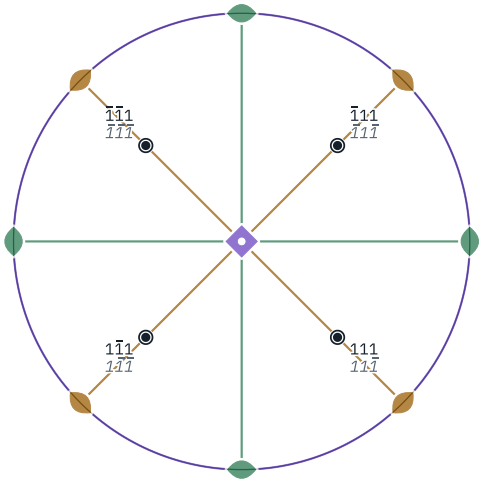


Abb. 6.4b Stereogramm dazu: Die 8 Pole liegen auf Spiegelebenen. In der App öffnen →

MERKE

Die allgemeine Form hat so viele Flächen, wie die Punktgruppe Operationen hat; ihre Pole liegen auf keinem Symmetrieelement. Die Pole spezieller Formen liegen auf Symmetrieelementen, ihre Flächenzahl ist kleiner.

Die Flächenzahl einer Form heisst auch ihre **Multiplizität**. Beim Galenit (Punktgruppe $m\bar{3}m$, Abb. 6.5) hat der Würfel {100} die Multiplizität 6, das Oktaeder {111} 8 und das Rhombendodekaeder {110} 12; die allgemeine Form {*hkl*}, das Hexakisoktaeder, hat 48 Flächen. Die Pole von {100} liegen auf den 4-zähligen Achsen, die von {111} auf den $\bar{3}$-Achsen, die von {110} auf den 2-zähligen Achsen entlang ⟨110⟩. Für Richtungen gilt dasselbe: Zur Familie ⟨111⟩ gehören im Würfel 8 Richtungen, die vier Raumdiagonalen mit beiden Richtungssinnen.

Die Flächenzahl lässt sich auf zwei Wegen bestimmen. Der erste geht in jeder Punktgruppe: Man trägt einen Pol der Form in das Symmetriegerüst ein, wendet alle Symmetrieoperationen an (Kapitel 4) und zählt die verschiedenen Bilder. Für die tetragonale Dipyramide {111} in 4/*mmm* (Abb. 6.4b) ergibt das 8 Pole, obwohl die Punktgruppe 16 Operationen hat: Weil der Pol auf einer Spiegelebene liegt, bringen je zwei Operationen ihn an dieselbe Stelle.

In $m\bar{3}m$ geht es schneller über die Indizes. Die 48 Operationen dieser Punktgruppe vertauschen die drei Indizes in jeder Reihenfolge und ändern ihre Vorzeichen in jeder Kombination (6 Reihenfolgen mal 8 Vorzeichenkombinationen). Man zählt deshalb, wie viele verschiedene Reihenfolgen die drei Zahlen ergeben (6, wenn alle verschieden sind, 3, wenn zwei gleich sind, 1, wenn alle gleich sind), und multipliziert mit 2 für jeden von null verschiedenen Index, denn nur dessen Vorzeichen kann wechseln:

FORM IN $M\bar{3}M$	REIHENFOLGEN	VORZEICHEN	FLÄCHEN
Würfel {100}	3	2	6
Oktaeder {111}	1	2 · 2 · 2 = 8	8
Rhombendodekaeder {110}	3	2 · 2 = 4	12
Deltoidikositetraeder {112}	3	8	24
Tetrakishexaeder {210}	6	4	24
Hexakisoktaeder {321}	6	8	48

Die Regel gilt nur für $m\bar{3}m$. Die übrigen kubischen Punktgruppen enthalten nicht alle Vertauschungen und Vorzeichenwechsel, und eine Form hat dort oft weniger Flächen: {210} im Pyrit ($m\bar{3}$) nur 12 (Abschnitt 6.4 „Gleicher Würfel, andere Symmetrie: Pyrit und Galenit“). Eine Formel für jede Punktgruppe steht in Kapitel 10.

Welche Flächen gleichwertig sind, entscheidet die Symmetrie, nicht die Form der Indizes. Im Würfel bilden (100), (010), (001) und ihre Gegenflächen eine Form mit 6 Flächen. Ein Quader mit drei verschiedenen Kantenlängen hat nur die Symmetrie *mmm*; keine Operation führt *a* in *b* über. Dieselben sechs Flächen bilden dann drei Formen mit je 2 Flächen, die Pinakoide {100}, {010} und {001}. Streckt man den Würfel nur entlang [001], bleibt die Symmetrie 4/*mmm*: (001) und (00$\bar{1}$) bilden ein Pinakoid, die vier Seitenflächen ein tetragonales Prisma. Dass auch zwei kubische Kristalle mit gleichen Indizes verschiedene Formen haben können, zeigt der Pyrit am Ende des Kapitels.

VERTIEFUNG · **Flächensymmetrie, Freiheitsgrade und Grenzformen**

Warum hat eine spezielle Form weniger Flächen, und wie können Formen mit derselben Flächenzahl verschieden angeordnet sein? Dafür braucht man die Flächensymmetrie, die Kapitel 10 ausbaut, und den Begriff der Grenzform.

Entscheidend ist die **Flächensymmetrie**: die Symmetrie, die eine einzelne Fläche innerhalb der Punktgruppe noch besitzt. Die Flächen einer allgemeinen Form haben die Flächensymmetrie 1, die einer speziellen Form eine höhere. Die Pole einer allgemeinen Form lassen sich in zwei Richtungen verschieben, ohne dass die Form verloren geht (zwei Freiheitsgrade).

Eine **Grenzform** ist ein Spezialfall einer allgemeinen oder speziellen Form, mit gleicher Flächenzahl und Flächensymmetrie, aber anderer Anordnung der Flächen. Wandern in der Punktgruppe 4 die Pole der tetragonalen Pyramide {*hkl*} auf den Grundkreis, so entsteht das tetragonale Prisma {*hk*0}.

Wie gross der Teil der Kugel ist, der für eine Punktgruppe „zählt“, sagt die **asymmetrische Flächeneinheit**: der kleinste Teil der Kugeloberfläche, der unter den Symmetrieoperationen die ganze Kugel ergibt. Bei 4/*mmm* ist sie ein sphärisches Dreieck zwischen den Polen von (001), (100) und (110), also ein Sechzehntel der Kugel. Bei 4/*mmm* sind alle Seiten dieses Dreiecks Spiegelebenen: Ein Pol im Inneren ergibt die allgemeine Form, ein Pol auf einer Seite oder Ecke eine spezielle Form.

Dieselbe geometrische Form kann in mehreren Punktgruppen vorkommen. Der Würfel tritt in allen fünf kubischen Punktgruppen auf; seine Pole liegen immer gleich, aber seine Flächen haben verschiedene Flächensymmetrie, in *m* 3*m* z. B. 4*m*.*m*, in 23 nur 2.. (eine 2-zählige Achse); wie man diese Symbole liest und wie aus der Flächensymmetrie

die Flächenzahl folgt, erklärt Kapitel 10. Die App macht das sichtbar: Mit „Flächensymmetrie zeigen“ trägt jede Fläche ein Muster in allgemeiner Lage (Würfel in 23, Würfel in $m\bar{3}m$).

6.3 Andere Projektionsrichtung, gleicher Kristall

Das Stereogramm hängt davon ab, welche Richtung des Kristalls zum Betrachter zeigt. Abb. 6.5–6.7 zeigen den Galenit mit [001], [111] und [110] als Projektionsrichtung. Die Winkel zwischen den Polen bleiben dabei gleich; nur der Blickwinkel ändert sich. Dreht man den Kristall, so wandern die Pole auf Kleinkreisen um die Drehachse.

Mit [111] als Projektionsrichtung liegt der Pol einer Oktaederfläche im Mittelpunkt, und die dreizählige Symmetrie um diese Richtung wird sichtbar; mit [110] die zweizählige. So lässt sich dieselbe Form aus verschiedenen Richtungen erkennen.

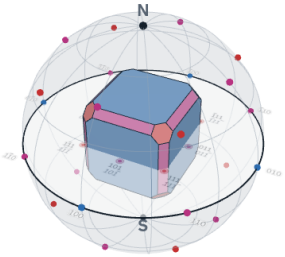


Abb. 6.5a Galenit, [001] senkrecht.
In der App öffnen →

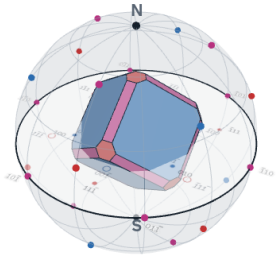


Abb. 6.6a Galenit, [111] senkrecht.
In der App öffnen →

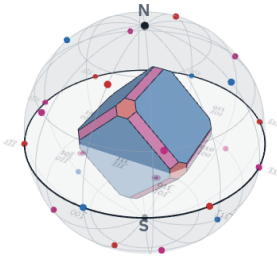


Abb. 6.7a Galenit, [110] senkrecht.
In der App öffnen →

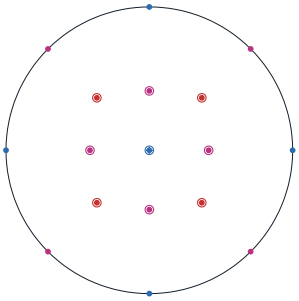


Abb. 6.5b Stereogramm, [001] ∥ Projektionsrichtung.
In der App öffnen →

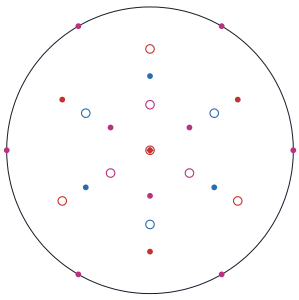


Abb. 6.6b Stereogramm, [111] ∥ Projektionsrichtung.
In der App öffnen →

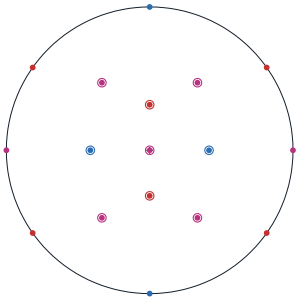


Abb. 6.7b Stereogramm, [110] ∥ Projektionsrichtung.
In der App öffnen →

6.4 Gleicher Würfel, andere Symmetrie: Pyrit und Galenit

Pyrit (FeS_2) bildet wie Galenit (PbS) oft Würfel, und beide sind kubisch. Pyrit hat aber die Punktgruppe $m\bar{3}$, ausgeschrieben $2/m\ \bar{3}$, Galenit $m\bar{3}m$. $m\bar{3}$ ist eine Untergruppe von $m\bar{3}m$ (Kapitel 3) mit 24 statt 48 Operationen. Geblieben sind die drei Spiegelebenen senkrecht zu ⟨100⟩, die $\bar{3}$-Achsen entlang ⟨111⟩ und das Inversionszentrum. Die Achsen entlang ⟨100⟩ sind nur noch 2-zählig, und die dritte Blickrichtung ⟨110⟩ ist leer: Die sechs 2-zähligen Achsen und die sechs Spiegelebenen dort fehlen (Abb. 6.8b, vgl. Abb. 5.4–5.6).

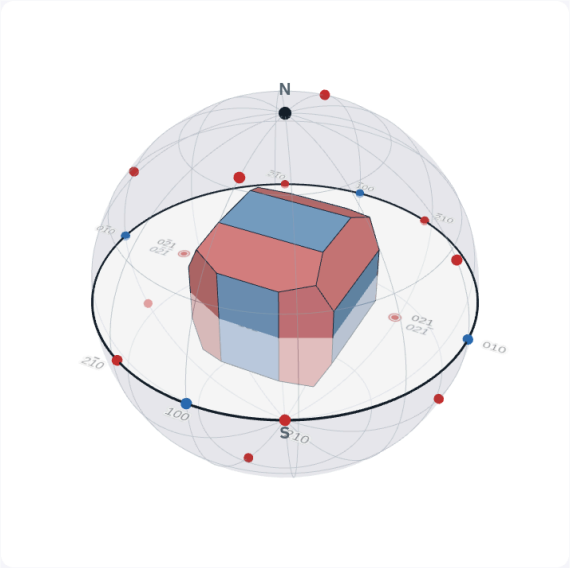


Abb. 6.8a Pyrit, Beispielkristall der App: Würfel {100} mit Pentagondodekaeder {210}. In der App öffnen →

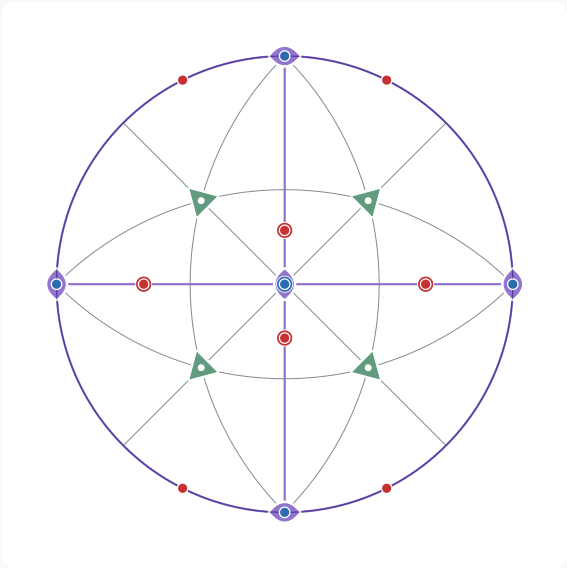


Abb. 6.8b Stereogramm dazu über dem Symmetriegerüst von $m\bar{3}$: 2-zählige Achsen entlang ⟨100⟩, $\bar{3}$-Achsen, drei Spiegelebenen. In der App öffnen →

Dem Würfel allein sieht man den Unterschied nicht an. Seine Pole liegen in beiden Punktgruppen auf den Achsen entlang ⟨100⟩, und er hat in beiden 6 Flächen. Anders die zweite Form des Pyrits, {210}. In $m\bar{3}m$ sind (210) und (120) gleichwertig, denn die Spiegelebene senkrecht zu $[1\bar{1}0]$ vertauscht h und k. In $m\bar{3}$ fehlt diese Spiegelebene. Dort hat {210} deshalb nur 12 Flächen und bildet ein **Pentagondodekaeder** (Abb. 6.9a, b); die Flächen (120), (012), (201) usw. bilden eine zweite, um 90° gedrehte Form {120}. In $m\bar{3}m$ gehören beide zu einer Form, dem Tetrakishexaeder mit 24 Flächen (Abb. 6.9c, d).

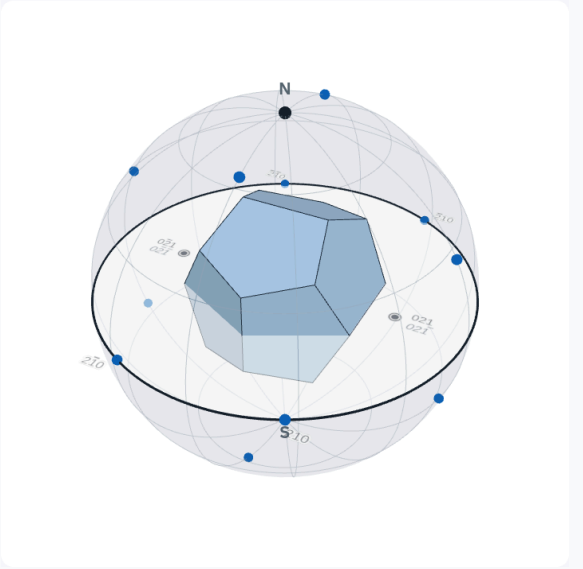


Abb. 6.9a {210} in $m\bar{3}$: Pentagondodekaeder, 12 Flächen. In der App öffnen →

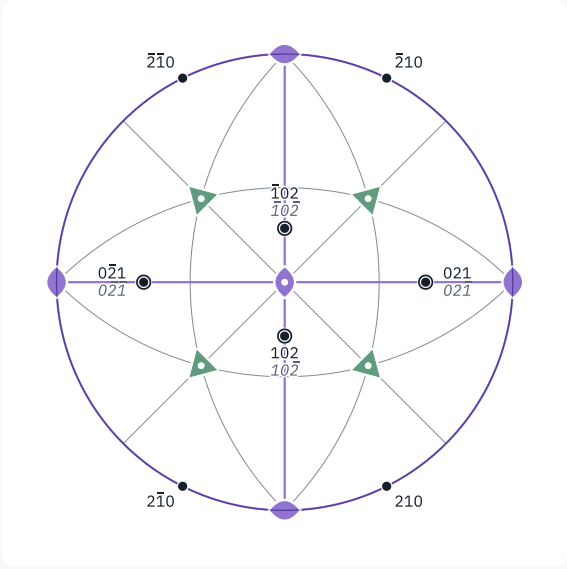


Abb. 6.9b Stereogramm dazu: 12 Pole auf den Spiegelebenen senkrecht zu ⟨100⟩. In der App öffnen →

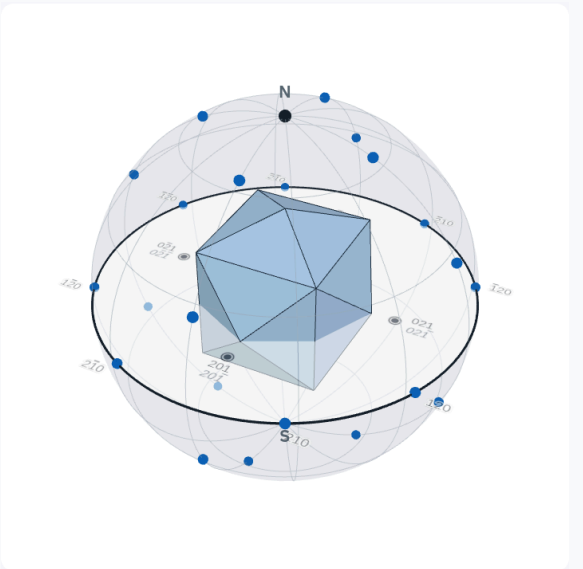


Abb. 6.9c {210} in $m\bar{3}m$: Tetrakishexaeder, 24 Flächen. In der App öffnen →

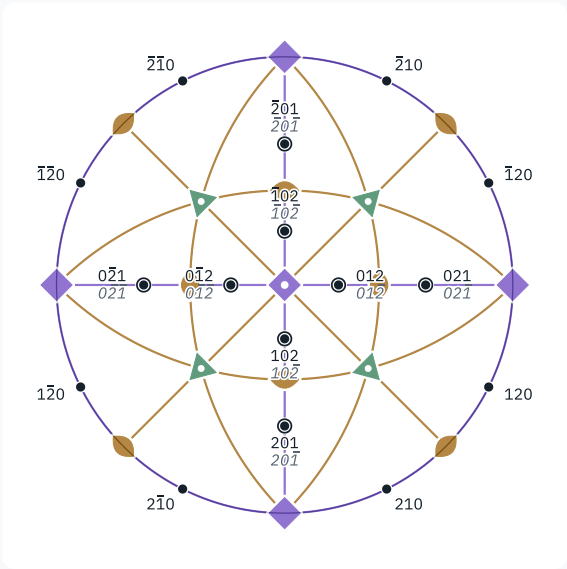


Abb. 6.9d Stereogramm dazu: zu jedem Pol von {210} der Pol von {120}. In der App öffnen →

Die Fünfecke des Pentagondodekaeders sind nicht regelmässig: Vier ihrer Kanten sind gleich lang, die fünfte nicht. Wie lang sie ist, hängt von den Indizes {*hk*0} ab. Bei {210} ist sie länger als die vier anderen, rund 1,3-mal; bei {320} ist sie kürzer, rund 0,87-mal. Gleich lang wären alle fünf Kanten erst bei $h : k = (1 + \sqrt{5})/2 \approx 1{,}618$, dem Goldenen Schnitt. Dieses Verhältnis ist irrational und kann deshalb nach dem Gesetz der rationalen Indizes (Kapitel 1) nicht vorkommen. Damit passt zusammen, dass ein regelmässiges Pentagondodekaeder 5-zählige Achsen hätte, und die gibt es in Kristallen nicht (Kapitel 3).

MERKE

Welche Flächen zu einer Form gehören und wie viele es sind, hängt von der Punktgruppe ab, nicht nur von den Indizes. {210} hat in $m\bar{3}$ 12 Flächen, in $m\bar{3}m$ 24. Der Würfel hat in allen kubischen Punktgruppen 6 Flächen und verrät die Punktgruppe deshalb nicht.

VERTIEFUNG · **Die Würfelfläche des Pyrits**

Auch der Würfel des Pyrits ist nicht ganz derselbe wie der des Galenits. Das zeigt seine Flächensymmetrie (Kapitel 10).

In $m\bar{3}m$ geht durch die Würfelfläche (100) eine 4-zählige Achse, und vier Spiegelebenen stehen senkrecht auf ihr: Flächensymmetrie $4m.m$. In $m\bar{3}$ ist die Achse nur 2-zählig, und von den Spiegelebenen bleiben die beiden senkrecht zu [010] und [001]: Flächensymmetrie $2mm$.. (Abb. 6.10). Das Symbol ist ein orientiertes Symbol (Kapitel 10) mit einer Stelle je Blickrichtung: An der ersten Stelle, für die Richtungen ⟨100⟩, steht $2mm$, die 2-zählige Achse entlang [100] und die beiden Spiegelebenen senkrecht zu [010] und [001]. Die beiden Punkte heissen, dass durch die Fläche kein Symmetrieelement der Blickrichtungen ⟨111⟩ und ⟨110⟩ geht. Ebenso liest man $4m.m$ in $m\bar{3}m$: $4m$ für ⟨100⟩, nichts für ⟨111⟩, m für ⟨110⟩. Dass in $4m$ nur ein m für die beiden Spiegelebenen senkrecht zu [010] und [001] steht, liegt an der 4-zähligen Achse: Sie führt die beiden Ebenen ineinander über, und gleichwertige Elemente schreibt man nur einmal. In $m\bar{3}$ fehlt diese Drehung; keine Operation, die die Fläche festhält, führt die beiden Ebenen ineinander über, deshalb werden sie einzeln geschrieben: $2mm$. Die Fläche ist zwar ein Quadrat, aber ihre Symmetrie ist die eines Rechtecks. Am Kristall sieht man das an der **Streifung**: Die Würfelflächen des Pyrits sind oft fein gerieft, auf jeder Fläche nur in einer Richtung. Eine 4-zählige Achse würde Riefen in zwei Richtungen verlangen, diagonale Spiegelebenen Riefen entlang der Diagonalen. So schliesst die Streifung $m\bar{3}m$, 432 und $\bar{4}3m$ aus; sie passt zu $m\bar{3}$ (und zu 23).

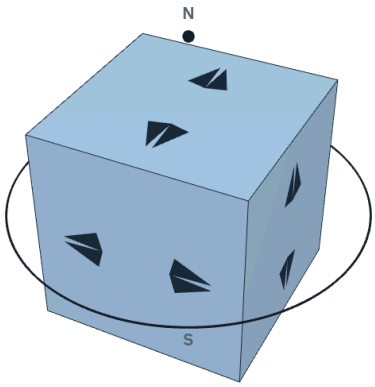


Abb. 6.10a Würfel in $m\bar{3}$: Flächensymmetrie $2mm$..
In der App öffnen →

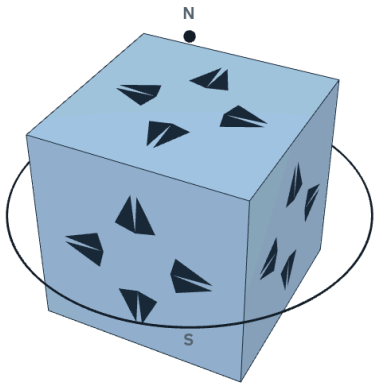


Abb. 6.10b Würfel in $m\bar{3}m$: Flächensymmetrie $4m.m$.
In der App öffnen →

IN DER APP

„Flächensymmetrie zeigen“ trägt auf jede Fläche ein Muster in allgemeiner Lage; seine Symmetrie ist die Flächensymmetrie.

ZUSAMMENFASSUNG

- Eine Kristallform {*hkl*} ist die Menge der Flächen, die durch die Symmetrieoperationen auseinander hervorgehen.
- Flächen parallel zur Projektionsrichtung haben ihre Pole auf dem Grundkreis, Flächen senkrecht dazu im Mittelpunkt.
- Allgemeine Form: Pole auf keinem Symmetrieelement, Flächenzahl gleich der Zahl der Symmetrieoperationen. Spezielle Formen: Pole auf Symmetrieelementen, weniger Flächen.
- Eine andere Projektionsrichtung dreht den Kristall auf der Umkugel: Das Stereogramm sieht anders aus, die Winkel zwischen den Flächennormalen bleiben gleich.
- Die Flächenzahl heisst Multiplizität. Sie hängt von der Punktgruppe ab: {210} hat in $m\bar{3}$ (Pyrit) 12 Flächen, ein Pentagondodekaeder, in $m\bar{3}m$ 24. Der Würfel hat in allen kubischen Punktgruppen 6 Flächen.
- Flächenzahl bestimmen: einen Pol mit allen Operationen abbilden und die Bilder zählen. In $m\bar{3}m$: Zahl der Reihenfolgen der Indizes (6, 3 oder 1) mal 2 für jeden Index ungleich 0.

ZUR VERTIEFUNG

- Die allgemeine Form hat die Flächensymmetrie 1, spezielle Formen eine höhere. Grenzformen: gleiche Flächenzahl und Flächensymmetrie, andere Anordnung.
- Die Würfelfläche hat in $m\bar{3}$ nur die Flächensymmetrie 2*mm*..; am Pyrit zeigt das die Streifung.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 5.2 (Kristallform und Tracht, S. 35), 5.4 (Abb. 5.13, S. 43), 5.6 (Drehung eines Oktaeders, Abb. 5.23, S. 49), 9.2 (Kristallform, allgemeine und spezielle Form, Grenzform, asymmetrische Flächeneinheit, S. 142–149, Abb. 9.5–9.9; Flächensymmetrien Tab. 9.5–9.8), 9.1 (Flächenzahl der allgemeinen Form und Ordnung der Gruppe, Abb. 9.3, S. 130), Abb. 15.2 (die 47 Kristallformen, S. 358–360).
- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Tab. 9.4 Nr. 29 (Pyrit mit Streifung auf den Würfelflächen, S. 141), Abschn. 9.4 (Würfel in allen kubischen Punktgruppen, geriefte Würfelflächen des Pyrits, S. 168), 9.7 (regelmässiges Pentagondodekaeder nicht kristallographisch, Tab. 9.13, S. 175–176), Abb. 15.2 Nr. 37 (Pentagondodekaeder, Pyritoeder, S. 360).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 2.1 (Pyrit: Würfel, Pentagondodekaeder, S. 36–37), 8.3 (Pentagondodekaeder des Pyrits ohne 5-zählige Achsen, S. 271).
- W. Kleber, J. Bohm, D. Klimm, M. Mühlberg, B. Winkler, *Einführung in die Kristallographie*, 20. Aufl., De Gruyter, Berlin/Boston (2020), Abschn. 1.6, Kristallklasse $m\bar{3}$ (Pentagondodekaeder {*hk*0}, Abb. 1.89m, S. 79; Pyrit, Abb. 1.90, S. 80).
- Kantenlängen des Pentagondodekaeders für {210}, {320} und den Goldenen Schnitt mit einem eigenen Skript nachgerechnet.

7 Zonen

An vielen Kristallen schneiden sich mehrere Flächen in parallelen Kanten. Solche Flächen bilden eine Zone. Im Stereogramm liegen ihre Pole auf einem Grosskreis.

LERNZIELE

- die Zonenachse zweier Flächen bestimmen
- mit der Zonengleichung prüfen, ob eine Fläche zu einer Zone gehört
- eine Fläche als Schnittpunkt zweier Zonenkreise indizieren

ZUR VERTIEFUNG

- Zonenkreis und Zonenpol einander zuordnen
- mit der Komplikationsregel weitere mögliche Flächen einer Zone finden

7.1 Was ist eine Zone?

Eine **Zone** ist eine Schar von Kristallflächen, deren Schnittkanten parallel verlaufen; meist sind es drei oder mehr Flächen. Die Flächen einer Zone heissen **tautozonal**, die gemeinsame Richtung ihrer Kanten ist die **Zonenachse** [*uvw*]. Bereits zwei nicht parallele Flächen legen eine Zone fest: Ihre Schnittkante gibt die Richtung der Zonenachse an.

Die Normalen aller Flächen einer Zone stehen senkrecht auf der Zonenachse und liegen deshalb in einer Ebene. Am Galenit gehört die Würfelfläche (100) zu vier Zonen: [010], [001], [011] und [0$\bar{1}$1]. Abb. 7.1 zeigt die Zone [001] in 3D: Alle Flächen, deren Kanten parallel zur *c*-Achse verlaufen, sind hervorgehoben.

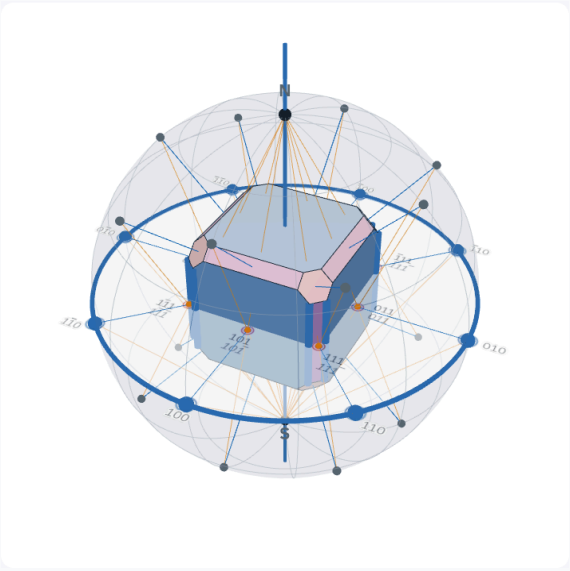


Abb. 7.1 Zone [001] am Galenit: die 8 Flächen mit Kanten parallel zu *c*, ihr Zonenkreis auf der Umkugel und die Zonenachse. In der App öffnen →

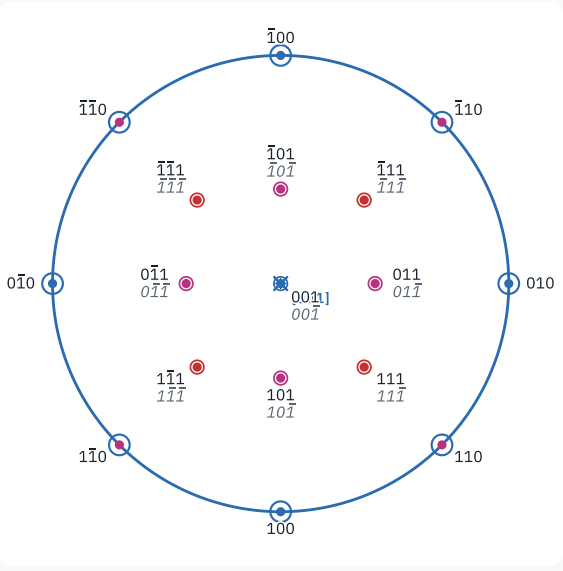


Abb. 7.2 Dieselbe Zone im Stereogramm: Ihre Pole liegen auf dem Grundkreis, die Zonenachse [001] (×) im Mittelpunkt. In der App öffnen →

7.2 Zonenkreis und Zonenpol

Weil die Normalen einer Zone in einer Ebene durch den Kugelmittelpunkt liegen, liegen ihre Pole auf einem Grosskreis, dem **Zonenkreis**. Die Zonenachse steht senkrecht auf seiner Ebene; ihr Durchstosspunkt durch die Umkugel ist der **Zonenpol**. Wie jeder geneigte Grosskreis erscheint ein Zonenkreis im Stereogramm als zwei Bögen; die App zeichnet die untere Hälfte gestrichelt.

VERTIEFUNG · **Zonenpol und Zonenkreis konstruieren**

Zonenkreis und Zonenpol gehören zusammen: Kennt man das eine, findet man das andere. Damit konstruiert man Zonen von Hand und bestimmt Winkel zwischen Zonen.

Der Zonenpol ist von jedem Punkt des Zonenkreises 90° entfernt. Mit dem Wulffschen Netz findet man deshalb zu jedem Zonenkreis den Zonenpol und umgekehrt, indem man 90° abträgt. Der Winkel zwischen den Ebenen zweier Zonenkreise ist gleich dem Winkel zwischen ihren Zonenpolen.

7.3 Die Zonengleichung

Eine Fläche (hkl) gehört genau dann zur Zone $[uvw]$, wenn die Zonenachse in der Fläche liegt. Das drückt die **Zonengleichung** aus:

$$hu + kv + lw = 0$$

Liegt zum Beispiel (112) in der Zone $[11\bar{1}]$? Ja, denn $1\cdot1 + 1\cdot1 + 2\cdot(-1) = 0$. Alle Flächen $(hk0)$ liegen in der Zone [001], denn für sie ist $h\cdot0 + k\cdot0 + 0\cdot1 = 0$.

Die Zonenachse zweier Flächen erhält man, indem man ihre Indizes zweimal nebeneinander schreibt und über Kreuz multipliziert (Vektorprodukt):

$[uvw] = (h_1k_1l_1) \times (h_2k_2l_2)$:
$u = k_1l_2 - l_1k_2,\quad v = l_1h_2 - h_1l_2,\quad w = h_1k_2 - k_1h_2$

Für (100) und (010) ergibt das [001], für (100) und (111) die Zone $[0\bar{1}1]$. Vertauscht man die beiden Flächen, erhält man die Gegenrichtung $[\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$, also dieselbe Zonenachse.

7.4 Flächen im Schnittpunkt zweier Zonen

Genauso bestimmt man die Fläche, die zwei Zonen gemeinsam ist: $(hkl) = [u_1v_1w_1] \times [u_2v_2w_2]$. Im Stereogramm liegt ihr Pol im Schnittpunkt der beiden Zonenkreise. Zwei Grosskreise schneiden sich in zwei gegenüberliegenden Punkten; sie gehören zu einer Fläche und ihrer Gegenfläche (hkl) und $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$.

Am Galenit schneiden sich die Zonen $[\bar{1}10]$ und $[0\bar{1}1]$ im Pol von (111): $(1\cdot1 - 0\cdot(-1),\ 0\cdot0 - (-1)\cdot1,\ (-1)\cdot(-1) - 1\cdot0) = (111)$. Auch die Zone $[\bar{1}01]$ geht durch diesen Pol (Abb. 7.3). So lassen sich die Flächen eines Kristalls Schritt für Schritt über ihre Zonen indizieren.

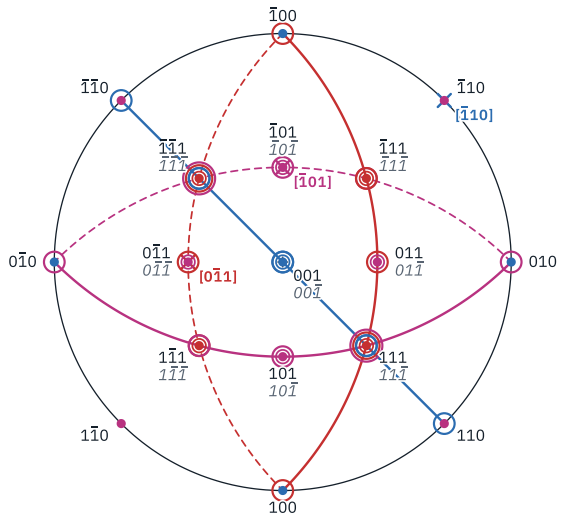


Abb. 7.3 Die Zonen $[\bar{1}10]$, $[0\bar{1}1]$ und $[\bar{1}01]$ schneiden sich im Pol von (111) und in dem der Gegenfläche $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$. In der App öffnen →

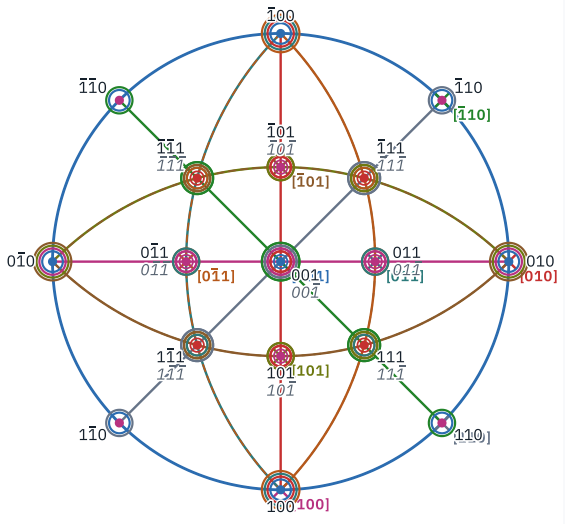


Abb. 7.4 Galenit mit einer Auswahl seiner Zonen, den 3 Zonen ⟨100⟩ und den 6 Zonen ⟨110⟩: Jede Fläche liegt auf mehreren Zonenkreisen. In der App öffnen →

VERTIEFUNG · **Die Komplikationsregel**

Die Zonen helfen nicht nur, vorhandene Flächen zu indizieren. Mit ihnen lässt sich auch vorhersagen, welche weiteren Flächen an einem Kristall auftreten können.

Nach Borchardt-Ott treten an einem Kristall nur Flächen auf, die miteinander in Zonenbeziehung stehen. Die Komplikationsregel von Goldschmidt macht das handlich: Addiert oder subtrahiert man die Indizes zweier Flächen einer Zone, so erhält man die Indizes einer weiteren möglichen Fläche derselben Zone. Aus (100) und (010) folgt (110), daraus weiter (210) und (120) usw., alle in der Zone [001].

7.5 Zonenachse und Flächennormale

Die Zonenachse [*uvw*] ist eine Richtung im Gitter, keine Flächennormale. Nur im kubischen System liegt der Zonenpol [*uvw*] für alle *uvw* an derselben Stelle wie der Pol der Fläche (*uvw*). In anderen Kristallsystemen fallen beide im Allgemeinen auseinander, weil die Achsen verschieden lang sind oder schiefe Winkel bilden; zusammen fallen sie nur in Sonderfällen, etwa für [001] und (001) im tetragonalen System.

VERTIEFUNG · **Ein Beispiel: Topas**

Wie gross der Unterschied ausserhalb des kubischen Systems ist, zeigt ein orthorhombischer Kristall. Wer nichtkubische Kristalle über Zonen indiziert, darf Zonenachse und Flächenpol nicht verwechseln.

Abb. 7.5 und 7.6 vergleichen die Zone [101] am Galenit und am Topas (orthorhombisch, $a : b : c \approx 0{,}53 : 1 : 0{,}95$): Beim Galenit liegt die Zonenachse (×) genau auf dem Pol von (101), beim Topas daneben.

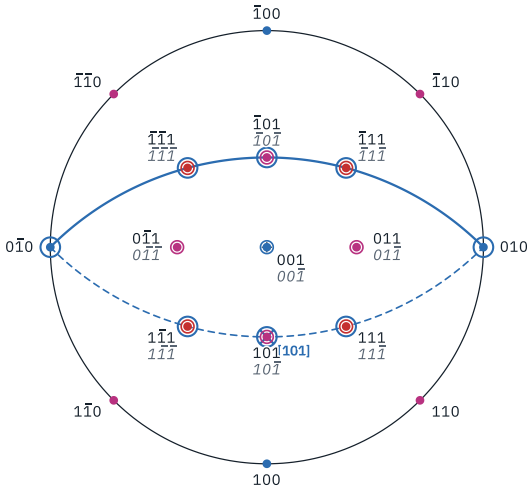


Abb. 7.5 Galenit (kubisch): Zonenachse [101] und Pol von (101) fallen zusammen. In der App öffnen →

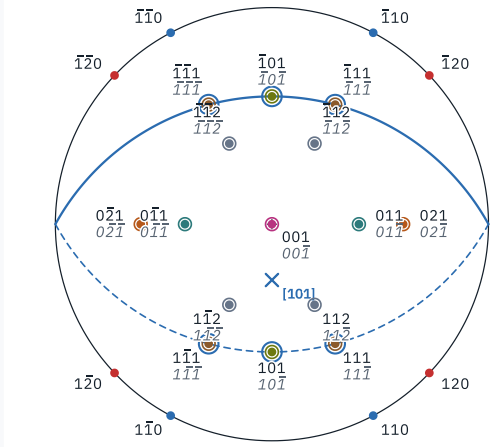


Abb. 7.6 Topas (orthorhombisch): Die Zonenachse [101] liegt nicht auf dem Pol von (101).
In der App öffnen →

IN DER APP

Das Werkzeug „Zone“ zeigt alle Zonen des dargestellten Kristalls mit mindestens drei Flächen, gruppiert nach gleichwertigen Zonenachsen ⟨*uvw*⟩. Zwei angetippte Flächen oder Pole legen jede Zone fest; weicht die Richtung [*uvw*] von der Normalen auf (*uvw*) ab, gibt die Infobox den Winkel an.

ZUSAMMENFASSUNG

- Flächen mit parallelen Kanten bilden eine Zone; die Kantenrichtung ist die Zonenachse [*uvw*].
- Die Pole einer Zone liegen auf einem Grosskreis, dem Zonenkreis.
- (*hkl*) gehört zur Zone [*uvw*], wenn $hu + kv + lw = 0$. Zonenachse zweier Flächen und Fläche zweier Zonen erhält man über das Kreuzschema.
- Nur im kubischen System fallen Zonenpol [*uvw*] und Flächenpol (*uvw*) für alle *uvw* zusammen; sonst nur in Sonderfällen wie [001] und (001).

ZUR VERTIEFUNG

- Der Zonenpol ist von jedem Punkt seines Zonenkreises 90° entfernt.
- Mit der Komplikationsregel findet man aus zwei Flächen einer Zone weitere mögliche Flächen derselben Zone.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 3.5 (Zonengleichung und ihre Anwendungen, S. 18–21), 5.2 (Zone, Zonenachse, tautozonal, Galenit, S. 35–36, Abb. 5.3), 5.4 (Zonenkreis, S. 42, Abb. 5.12), 5.6 (Zonenkreis und Zonenpol, Winkel zwischen Zonen, S. 47–48, Abb. 5.20, 5.21), 5.7 (Indizierung über Zonen am Topas, Komplikationsregel, S. 50–53, Abb. 5.24–5.30).

8 Tracht und Habitus

Kristalle derselben Art können sehr verschieden aussehen. Zwei Begriffe beschreiben, worin sie sich unterscheiden: welche Formen auftreten und wie gross ihre Flächen sind.

LERNZIELE

- Tracht und Habitus eines Kristalls unterscheiden und benennen
- erklären, wie der Habitus beim Wachstum entsteht
- begründen, warum das Stereogramm die Tracht zeigt, aber nicht den Habitus

8.1 Tracht

Die **Tracht** eines Kristalls ist die Menge der Kristallformen, die ihn begrenzen. Ein Galenit mit Würfel, Oktaeder und Rhombendodekaeder hat die Tracht {100}, {111}, {110}; ein Kristall aus hexagonalem Prisma und Pinakoid hat die Tracht {100}, {001}.

IN DER APP

Die Infobox zeigt die Tracht eines Beispielkristalls als Tabelle mit Form, Symbol, Flächenzahl und Eigensymmetrie.

8.2 Habitus

Der **Habitus** beschreibt die relative Grösse der Flächen, also die Gestalt des Kristalls. Man unterscheidet drei Grundtypen: **isometrisch** (nach allen Richtungen etwa gleich ausgedehnt), **planar** oder tafelig (flach) und **prismatisch** oder nadelig (lang gestreckt). Abb. 8.1–8.3 zeigen alle drei für dieselbe Tracht aus hexagonalem Prisma und Pinakoid.

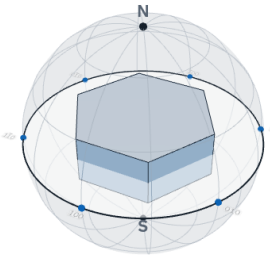


Abb. 8.1 planar (tafelig)
In der App öffnen →

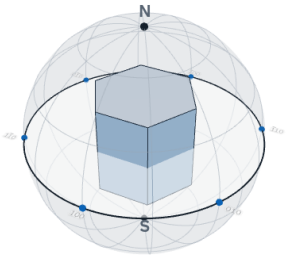


Abb. 8.2 isometrisch
In der App öffnen →

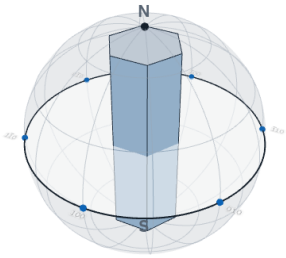


Abb. 8.3 prismatisch (nadelig)
In der App öffnen →

Tracht und Habitus sind unabhängig voneinander: Kristalle mit gleicher Tracht können verschiedenen Habitus haben (Abb. 8.1–8.3), und Kristalle mit gleichem Habitus verschiedene Tracht, etwa ein isometrischer Würfel und ein isometrisches Oktaeder.

8.3 Wie der Habitus entsteht

Ein Kristall wächst, indem sich auf seinen Flächen neue Netzebenen anlagern; die Flächen verschieben sich dabei parallel. Wie schnell sich eine Fläche nach aussen schiebt, ist ihre **Wachstumsgeschwindigkeit**. Sie ist anisotrop, also für nicht gleichwertige Flächen verschieden, und hängt von Temperatur, Druck und Übersättigung ab.

Langsam wachsende Flächen werden dabei immer grösser, schnell wachsende kleiner, bis sie ganz verschwinden können. Welche Flächen am Ende auftreten und wie gross sie sind, hängt also vom Verhältnis der Wachstumsgeschwindigkeiten ab. In der Regel sind es niedrig indizierte Flächen, deren Netzebenen dicht mit Bausteinen besetzt sind; je grösser die Indizes, desto dünner sind die Netzebenen in der Regel besetzt und desto schneller wächst die Fläche meist. Am Kaliumalaun hat man die Wachstumsgeschwindigkeiten gemessen: Relativ zu {111} wachsen {110} 4,8-mal, {001} 5,3-mal, {221} 9,5-mal und {112} 11-mal so schnell, und übrig bleibt das Oktaeder {111}. Im kubisch primitiven Gitter des Alauns sind aber die

Netzebenen {100} am dichtesten besetzt. Dass hier nicht der Würfel übrig bleibt, zeigt, dass die Regel nur eine Tendenz ist. Die konkreten Bedingungen, unter denen ein Kristall wächst, können die Rangfolge ändern; aus einer Lösung mit etwas Borax wächst Alaun sogar als Würfel. Wächst das Prisma langsam und das Pinakoid schnell, wird der Kristall prismatisch; im umgekehrten Fall tafelig.

8.4 Was das Stereogramm zeigt

Weil sich die Flächen beim Wachstum nur parallel verschieben, ändern sich die Winkel zwischen ihnen nicht (Kapitel 2). Die drei Kristalle in Abb. 8.1–8.3 haben deshalb genau dasselbe Stereogramm (Abb. 8.4). Das Stereogramm zeigt die Tracht, aber nicht den Habitus. Erst wenn eine Form beim Wachstum ganz verschwindet (oder eine neue hinzukommt), ändert sich mit der Tracht auch das Stereogramm.

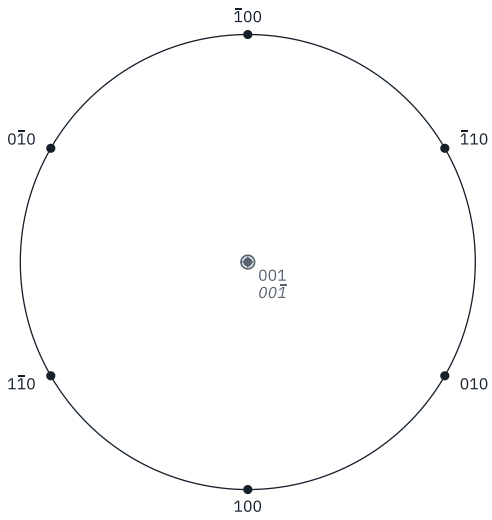


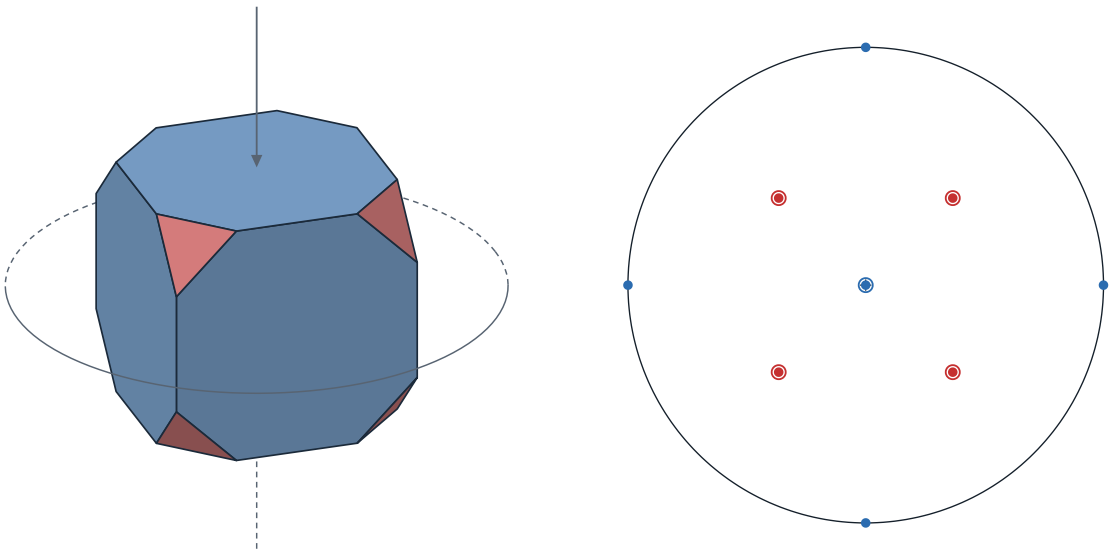
Abb. 8.4 Stereogramm der drei Kristalle aus Abb. 8.1–8.3: sechs Prismenpole auf dem Grundkreis, das Pinakoid im Mittelpunkt. In der App öffnen →

IN DER APP

Der Habitus lässt sich unter „Gestalt“ verändern, über den Abstand der Ergänzungsformen oder bei Beispielkristallen über die Abstände der Formen. Die Infobox nennt den Habitus. Die App bestimmt ihn aus den drei Hauptausdehnungen des Körpers $L_1 \geq L_2 \geq L_3$: Ist L_3/L_1 mindestens 2/3, gilt der Kristall als isometrisch; sonst als prismatisch, wenn eine Richtung herausragt, oder als planar, wenn eine Richtung zurückbleibt. Diese Grenze ist eine Festlegung der App, keine Definition aus der Literatur; die Grundtypen selbst sind fliessend.

8.5 Wenn eine Form verschwindet

Wie eine Form beim Wachstum verschwindet, zeigt Abb. 8.5 an einem Galenit aus Würfel und Oktaeder. Beide Formen beginnen gleich weit vom Mittelpunkt; dann schiebt sich eine doppelt so schnell nach aussen wie die andere. Die schnellere Form wird immer kleiner, doch die Winkel zwischen den Flächen bleiben gleich, und das Stereogramm ändert sich nicht. Das Oktaeder verschwindet, sobald seine Flächen $\sqrt{3} \approx 1{,}73$-mal so weit vom Mittelpunkt entfernt sind wie die Würfelflächen: Dann berühren sie gerade noch die Ecken des Würfels. Umgekehrt verschwindet der Würfel, sobald die Würfelflächen $\sqrt{3}$-mal so weit entfernt sind wie die Oktaederflächen (Oktaeder : Würfel = $1/\sqrt{3} \approx 0{,}58$). Von da an fehlen die Pole der verschwundenen Form auch im Stereogramm; die Tracht ist eine andere.



Schneller wächst ◉ das Oktaeder ○ der Würfel

Wachstum

Die Oktaederflächen haben sich doppelt so weit nach aussen verschoben wie die Würfelflächen. Abstand vom Mittelpunkt, Oktaeder : Würfel = 1,44 : 1. Flächen: 6 des Würfels, 8 des Oktaeders. Das Oktaeder verschwindet bei 1,73 : 1 (√3).

Abb. 8.5 Galenit aus Würfel {100} (blau) und Oktaeder {111} (rot), anfangs gleich weit vom Mittelpunkt. Links der Kristall, auf gleiche Grösse gebracht, rechts sein Stereogramm. Mit dem Regler wachsen die Flächen; die gewählte Form schiebt sich doppelt so schnell nach aussen. Die Winkel zwischen den Flächen bleiben gleich, bis eine Form verschwindet. *Im PDF ein fester Zustand; interaktiv in der Online-Version.*

ZUSAMMENFASSUNG

- Tracht: die Menge der auftretenden Kristallformen. Habitus: die relative Grösse der Flächen, mit den Grundtypen isometrisch, planar (tafelig) und prismatisch (nadelig).
- Der Habitus entsteht durch verschieden schnelles Wachstum der Flächen; langsam wachsende Flächen werden gross.
- Beim Wachstum verschieben sich die Flächen parallel. Das Stereogramm zeigt deshalb die Tracht, nicht den Habitus.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 5.2 (Tracht, Habitus, S. 35, Abb. 5.2), 5.3 (Wachsen der Kristalle, Wachstumsgeschwindigkeit, Winkelkonstanz, S. 36–39, Abb. 5.5–5.7).
- W. Kleber, J. Bohm, D. Klimm, M. Mühlberg, B. Winkler, *Einführung in die Kristallographie*, 20. Aufl., De Gruyter, Berlin/Boston (2020), Abschn. 1.9.4 (Besetzungsdichte der Netzebenen und Rangordnung der Formen, S. 102–106), 4.3 (Wachstum von Kristallen, Kaliumalaun, Abb. 4.12, Borax-Zusatz, S. 280–281).

9 Trigonale und hexagonale Kristalle

Trigonale und hexagonale Kristalle beschreibt man mit dem hexagonalen Achsensystem aus Kapitel 1. Ein wichtiges Beispiel ist das Rhomboeder: Es entsteht aus dem Würfel, wenn man ihn entlang einer Raumdiagonalen streckt oder staucht. Zwei Rhomboeder bilden zusammen mit einem hexagonalen Prisma die Gestalt des Quarzes.

LERNZIELE

- das Rhomboeder als entlang [111] gestreckten Würfel beschreiben und seine Punktgruppe $\bar{3}m$ angeben
- angeben, wie man das Rhomboeder mit hexagonalen Achsen aufstellt
- den Quarz als Kombination von hexagonalem Prisma und zwei Rhomboedern beschreiben und erklären, warum sein Stereogramm hexagonal aussieht

ZUR VERTIEFUNG

- Links- und Rechtsquarz unterscheiden
- das rhomboedrische Achsensystem am gestreckten Würfel beschreiben und begründen, warum man trigonale Kristalle mit hexagonalen Achsen beschreibt
- Miller-Indizes (*hkl*) in Miller-Bravais-Indizes (*hkil*) umrechnen und zurück
- begründen, wozu der vierte Index dient

9.1 Das Rhomboeder: ein gestreckter Würfel

Streckt man einen Würfel entlang einer Raumdiagonalen, etwa [111], so bleibt von seinen Symmetrieelementen nur ein Teil übrig: die $\bar{3}$-Achse entlang [111] und die drei 2-zähligen Achsen senkrecht dazu, entlang $[1\bar{1}0]$, $[01\bar{1}]$ und $[\bar{1}01]$, mit den Spiegelebenen senkrecht zu ihnen. Das ist die Punktgruppe $\bar{3}\,2/m = \bar{3}m$ mit 12 Operationen, trigonal statt kubisch.

Alle sechs Würfelflächen werden durch die $\bar{3}$-Achse ineinander überführt; sie bleiben eine einzige Form, aber ihre Winkel ändern sich: Aus dem Würfel wird ein **Rhomboeder** (Abb. 9.1). Der Würfel ist der Sonderfall eines Rhomboeders mit 90°. Alle Kanten sind gleich lang; an den beiden Ecken auf der $\bar{3}$-Achse schliessen sie den gleichen Winkel α ein. Bei Streckung ist α kleiner als 90° (spitzes Rhomboeder), bei Stauchung grösser (stumpfes Rhomboeder); für eine Streckung um den Faktor 1,3 ist α = 79,2°.

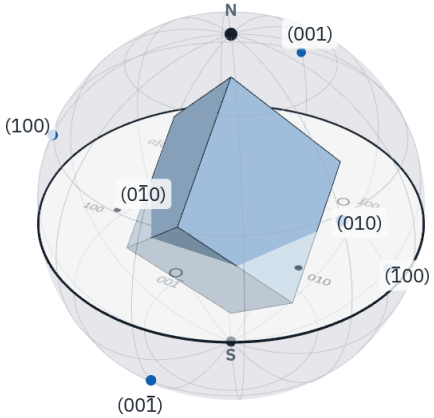


Abb. 9.1a Würfel, entlang [111] um den Faktor 1,3 gestreckt, [111] senkrecht: ein Rhomboeder.
In der App öffnen →

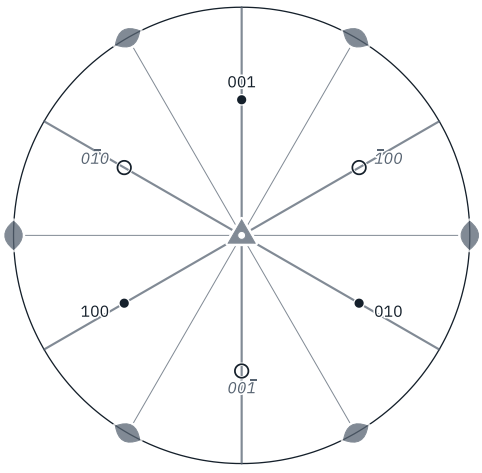


Abb. 9.1b Stereogramm, [111] ∥ Projektionsrichtung, über dem Symmetriegerüst $\bar{3}m$: $\bar{3}$-Achse im Mittelpunkt, drei Spiegelebenen, drei 2-zählige Achsen.
In der App öffnen →

Für die trigonale Punktgruppe verwendet man hexagonale Achsen (Kapitel 1): c entlang der $\bar{3}$-Achse, also $c \parallel [111]$, und $a_1 \parallel [1\bar{1}0]$, $a_2 \parallel [01\bar{1}]$ senkrecht dazu. In diesen Achsen ist die Würfelfläche (100) die Rhomboederfläche (101).

IN DER APP

Unter „Kristallformen“ den Würfel wählen, unter „Gitter“ den Schalter „Symmetrie brechen“ einschalten und entlang ⟨111⟩ strecken. Die Infobox nennt die verbleibende Punktgruppe $\bar{3}m$ und rechnet die Indizes in hexagonale Achsen um.

9.2 Ein Beispiel: Quarz

Quarz (SiO_2) ist trigonal, mit der Punktgruppe 32. Mit hexagonalen Achsen beschrieben ist $c/a \approx 1{,}10$ ($a = 4{,}91$ Å, $c = 5{,}40$ Å). Ein typischer Quarzkristall ist ein hexagonales Prisma {100}, an beiden Enden durch eine Spitze aus sechs Flächen abgeschlossen (Abb. 9.2a). Die Spitze sieht aus wie eine hexagonale Dipyramide. Sie besteht aber aus zwei verschiedenen Rhomboedern, {101} und {011}.

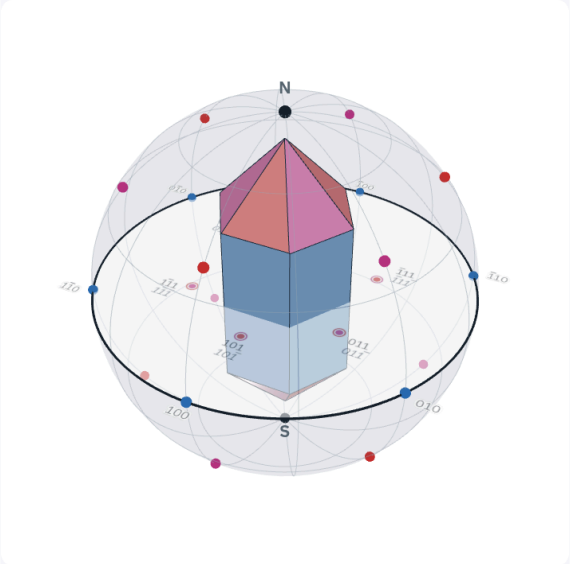


Abb. 9.2a Quarz: hexagonales Prisma {100} mit den Rhomboedern {101} und {011}. In der App öffnen →

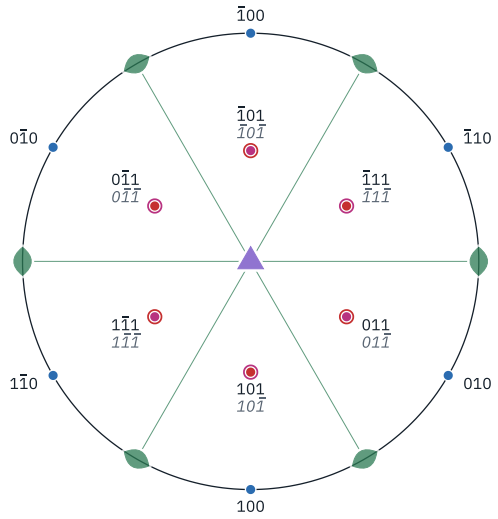


Abb. 9.2b Stereogramm dazu über dem Symmetriegerüst von 32: oben sechs Rhomboederpole bei $\rho \approx 51{,}8°$, abwechselnd von {101} und {011}. In der App öffnen →

Jedes der beiden Rhomboeder hat sechs Flächen, drei an jedem Ende, so wie das Rhomboeder in Abb. 9.1; beim Quarz ist es allerdings ein gestauchtes (stumpfes) Rhomboeder. {011} ist gegenüber {101} um 60° um c gedreht. Oben ergänzen sich ihre Pole deshalb zu sechs Polen, alle unter demselben Winkel $\rho \approx 51{,}8°$ zu c und um je 60° um c gegeneinander gedreht (Abb. 9.2b). Die unteren Flächen von {101} liegen genau unter den oberen von {011} und umgekehrt; im Stereogramm steht deshalb jeder Pol als ● im ○. So sieht das Stereogramm hexagonal aus, obwohl Quarz trigonal ist.

Gleichwertig sind die beiden Rhomboeder aber nicht: Keine Operation von 32 führt (101) in (011) über. Deshalb dürfen sie verschieden gross sein, und an natürlichen Kristallen sind sie es meist. Man stellt den Kristall üblicherweise so auf, dass das grosse Rhomboeder {101} heisst, das **positive Rhomboeder**; das kleinere {011} ist das **negative Rhomboeder**. An einem solchen Kristall wechseln an der Spitze grosse und kleine Flächen ab (Abb. 9.3b); erst dadurch, oder durch weitere kleine Flächen, zeigt die Gestalt die trigonale Symmetrie.

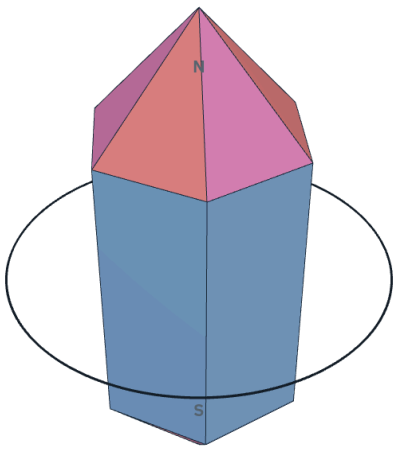


Abb. 9.3a Beide Rhomboeder gleich gross: Die Spitze sieht hexagonal aus. In der App öffnen →

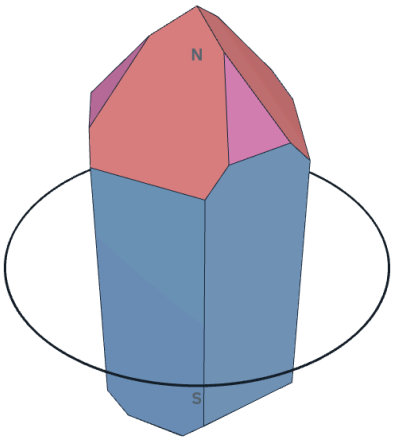


Abb. 9.3b Negatives Rhomboeder {011} kleiner: Grosse und kleine Flächen wechseln ab. In der App öffnen →

VERTIEFUNG · **Links- und Rechtsquarz**

Quarz gibt es in zwei spiegelbildlichen Formen. Woran man sie erkennt, zeigen kleine zusätzliche Flächen.

Die Punktgruppe 32 enthält nur Drehungen; sie ist enantiomorph (Kapitel 5). Ein Quarzkristall und sein Spiegelbild lassen sich deshalb durch keine Drehung zur Deckung bringen: Es gibt **Linksquarz** und **Rechtsquarz**. Prisma und Rhomboeder verraten das nicht, denn sie sehen im Spiegel gleich aus. Erkennbar ist es an zwei Formen, die oft als kleine Flächen zwischen Prisma und Rhomboedern auftreten, einer trigonalen Dipyramide und einem trigonalen Trapezoeder. Blickt man von vorn auf die Prismenfläche (100), mit *c* nach oben, so liegt beim Rechtsquarz eine Fläche des Trapezoeders oben rechts, beim Linksquarz oben links, jeweils neben einer Fläche des positiven Rhomboeders (Abb. 9.4). In vier Indizes sind es beim Rechtsquarz die Trapezoederfläche $(51\bar{6}1)$ und die Dipyramidenfläche $(11\bar{2}1)$, beim Linksquarz $(6\bar{1}\bar{5}1)$ und $(2\bar{1}\bar{1}1)$. Welche Form man „links“ und welche „rechts“ nennt, ist eine Konvention und in der Literatur nicht einheitlich; das Skript folgt Kleber. Sind die kleinen Flächen nicht ausgebildet, unterscheidet man die beiden optisch: Sie sind auch im Inneren Spiegelbilder voneinander und drehen die Ebene von polarisiertem Licht in entgegengesetzter Richtung.

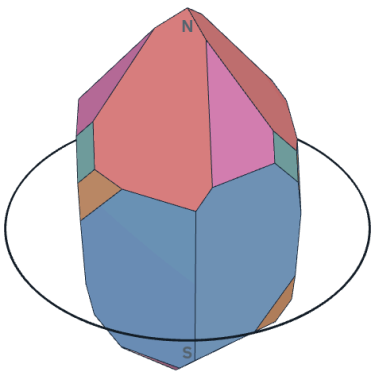


Abb. 9.4a Linksquarz, Beispielkristall der App. In der App öffnen →

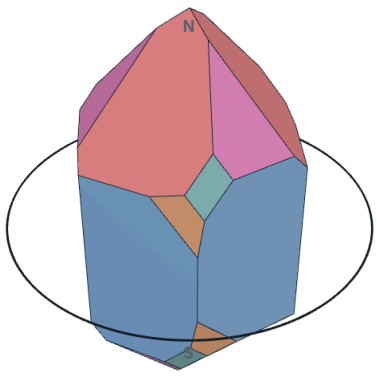


Abb. 9.4b Rechtsquarz: das Spiegelbild. In der App öffnen →

IN DER APP

Unter „Kristallform“ die Beispielkristalle „Linksquarz“ und „Rechtsquarz“ wählen. Unter „Gestalt“ lassen sich die Abstände der Formen ändern, z. B. die beiden Rhomboeder gleich gross machen oder die kleinen Formen entfernen.

9.3 Rhomboedrische Achsen VERTIEFUNG

Rhomboedrische Achsen gehören eigentlich zu den Bravais-Gittern und damit zur Strukturkristallographie. Am gestreckten Würfel aus Abb. 9.1 lässt sich schon hier zeigen, was sie sind und warum man trigonale Kristalle trotzdem mit hexagonalen Achsen beschreibt.

Beim gestreckten Würfel liegt eine andere Wahl der Achsen nahe: seine drei Kanten, die an einer Ecke auf der $\bar{3}$-Achse zusammentreffen. Sie sind gleich lang, schliessen paarweise denselben Winkel α ein, und die 3-zählige Drehung führt sie ineinander über. Das ist das **rhomboedrische Achsensystem**: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$. Beim unverzerrten Würfel sind es die Würfelachsen mit α = 90°, bei einer Streckung um den Faktor 1,3 ist α = 79,2° (Abb. 9.5). Keine der drei Achsen fällt mit einer Drehachse zusammen; die 3-zählige Achse liegt zwischen ihnen, entlang [111].

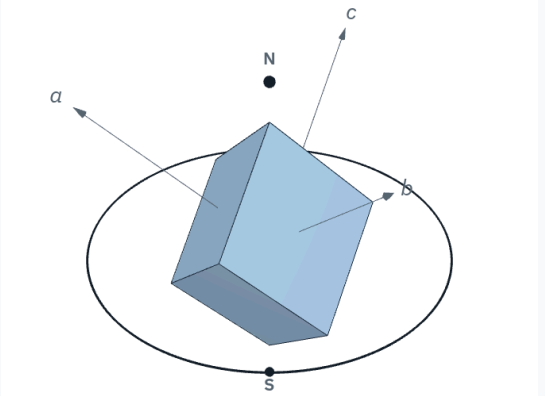


Abb. 9.5a Entlang [111] gestreckter Würfel, [111] senkrecht. Die Achsen *a*, *b*, *c* laufen entlang seiner Kanten: rhomboedrische Achsen.
In der App öffnen →

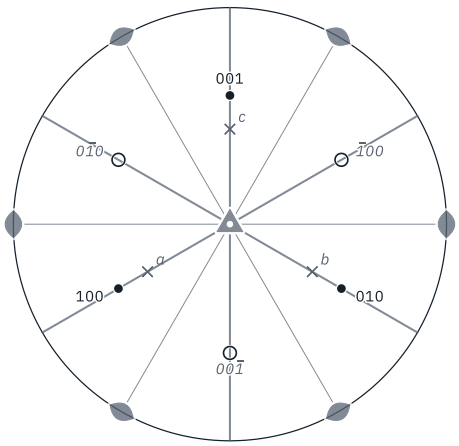


Abb. 9.5b Stereogramm dazu: Die Achsen (×) liegen im gleichen Abstand von der $\bar{3}$-Achse, um je 120° um sie gegeneinander gedreht, jede auf einer Spiegelebene.
In der App öffnen →

Weil eine Fläche beim Strecken ihre Indizes behält (Kapitel 1), sind die Würfelindizes nach dem Strecken die rhomboedrischen Indizes. Die Flächen des Rhomboeders heissen {100} wie die des Würfels. In hexagonalen Achsen mit $c \parallel [111]$ heissen dieselben Flächen anders. Streckt man statt des Würfels das Oktaeder oder das Rhombendodekaeder, zerfallen sie in zwei Formen:

AUSGANGSFORM	FORM IN $\bar{3}M$	RHOMBOEDRISCHE ACHSEN	HEXAGONALE ACHSEN
Würfel	Rhomboeder	{100}	{101}
Oktaeder	Pinakoid	{111}	{001}
	Rhomboeder	{11$\bar{1}$}	{021}
Rhombendodekaeder	Rhomboeder	{110}	{012}
	hexagonales Prisma	{1$\bar{1}$0}	{110}

In rhomboedrischen Achsen liegt die 3-zählige Achse entlang [111], und das Pinakoid senkrecht zu ihr heisst {111}; in hexagonalen Achsen ist es {001}. Die Indizes der beiden Systeme hängen nicht so einfach zusammen wie die drei und die vier hexagonalen Indizes (*hkl*) und (*hkil*) (Abschnitt 9.4 „Vier Indizes für Flächen“), aber sie bezeichnen dieselben Flächen.

Warum verwendet man dann für trigonale Kristalle hexagonale Achsen? Für die Indizes der Flächen könnte man jeden trigonalen Kristall auch rhomboedrisch beschreiben. Beim Gitter ist das anders. Bei manchen trigonalen Kristallen, z. B. beim Calcit, spannen rhomboedrische Achsen eine primitive Elementarzelle des Gitters auf; man spricht von einem **rhomboedrischen Gitter**. Bei anderen, z. B. beim Quarz, ist das nicht möglich; ihre primitive Elementarzelle hat hexagonale Achsen. Hexagonale Achsen passen dagegen zu allen trigonalen Kristallen, und bei ihnen liegt, wie im tetragonalen und hexagonalen System, die Achse höchster Zähligkeit entlang *c*. Deshalb gibt es ein trigonales Kristallsystem, aber kein rhomboedrisches: „trigonal“ bezeichnet das Kristallsystem, „rhomboedrisch“ ein Achsensystem und ein Gitter. Manche Bücher, auch Borchardt-Ott, sprechen trotzdem von einem rhomboedrischen Kristallsystem; diese Begriffe werden in der Literatur nicht einheitlich verwendet. Wie man ein rhomboedrisches Gitter mit hexagonalen Achsen beschreibt, mit einer rhomboedrisch zentrierten Zelle, gehört zu den Bravais-Gittern (Borchardt-Ott & Sowa, Abschn. 7.1, Abb. 7.12).

IN DER APP

Würfel, Oktaeder oder Rhombendodekaeder unter „Gitter“ mit „Symmetrie brechen“ entlang ⟨111⟩ strecken. Die Infobox nennt zu jeder Form ihre bisherigen, kubischen Indizes, also die rhomboedrischen, und die hexagonalen in drei und vier Ziffern (zu den vier Indizes Abschnitt 9.4 „Vier Indizes für Flächen“). „Kristallachsen“ unter „Darstellung“ zeigt die rhomboedrischen Achsen.

9.4 Vier Indizes für Flächen VERTIEFUNG

Dieses Skript beschreibt hexagonale Flächen mit drei Indizes. In der Literatur stehen sie oft mit vier; dieser Abschnitt erklärt, woher der vierte kommt und was er zeigt.

Mit drei Indizes sieht man gleichwertigen Flächen ihre Gleichwertigkeit nicht an. Die sechs Flächen des hexagonalen Prismas {100} heissen (100), (010), ($\bar{1}$10), ($\bar{1}$00), (0$\bar{1}$0) und (1$\bar{1}$0): Mal steht die 1 vorn, mal in der Mitte, und ($\bar{1}$10) und (1$\bar{1}$0) fallen aus dem Muster.

Deshalb nimmt man die dritte Achse a_3 hinzu und bildet die **Miller-Bravais-Indizes** (*hkil*), bei Borchardt-Ott Bravais-Miller-Indizes. Der zusätzliche Index *i* bezieht sich auf a_3 und ist durch die beiden anderen festgelegt:

$$h + k + i = 0, \text{ also } i = -(h + k)$$

Umrechnen ist einfach: Aus (*hkl*) wird (*hk*, −(*h*+*k*), *l*); umgekehrt lässt man *i* weg. Das gilt nur für Flächen; Richtungen bleiben hier dreistellig. Die Prismenflächen heissen dann (10$\bar{1}$0), (01$\bar{1}$0), ($\bar{1}$100), ($\bar{1}$010), (0$\bar{1}$10) und (1$\bar{1}$00): immer dieselben Ziffern 1, $\bar{1}$ und 0 in vertauschter Reihenfolge, wie es gleichwertigen Flächen entspricht. Das Pinakoid {001} wird zu {0001}, die hexagonale Dipyramide {101} zu {10$\bar{1}$1}. Beim Quarz heissen Prisma und Rhomboeder {10$\bar{1}$0}, {10 11} und {01$\bar{1}$1}.

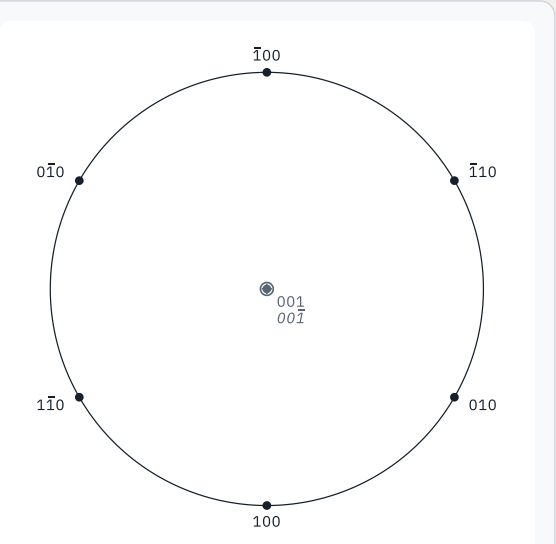


Abb. 9.6 Hexagonales Prisma {100} mit Pinakoid, drei Indizes (*hkl*). In der App öffnen →

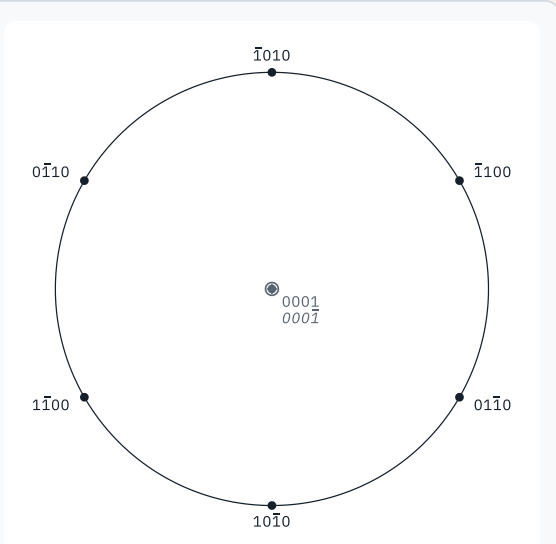


Abb. 9.7 Dieselben Flächen mit vier Indizes (*hkil*): {10 10} und {0001}. In der App öffnen →

Beide Schreibweisen beschreiben dieselbe Fläche, der vierte Index macht nur die Symmetrie sichtbar.

IN DER APP

Die App verwendet wie das Skript standardmässig drei Indizes; „Vier Indizes (*hkil*)“ unter „Weitere Optionen“ schaltet auf vier um.

ZUSAMMENFASSUNG

- Ein entlang [111] gestreckter Würfel ist ein Rhomboeder mit der Punktgruppe $\bar{3}m$. Der Würfel ist der Sonderfall mit $\alpha = 90°$.
- Mit hexagonalen Achsen, $c \parallel [111]$, wird die Würfelfläche (100) zur Rhomboederfläche (101).
- Quarz (32): hexagonales Prisma {100} mit dem positiven Rhomboeder {101} und dem negativen Rhomboeder {011}. Ihre Pole ergeben ein hexagonal wirkendes Muster; die trigonale Symmetrie zeigt sich, wenn die beiden Rhomboeder verschieden gross sind.

ZUR VERTIEFUNG

- Quarz ist enantiomorph: Links- und Rechtsquarz sind Spiegelbilder und unterscheiden sich an der Lage kleiner Flächen neben dem positiven Rhomboeder.
- Rhomboedrische Achsen: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$, entlang der Kanten des Rhomboeders; seine Flächen heissen dann {100}. Hexagonale Achsen passen zu allen trigonalen Kristallen, rhomboedrische zum Gitter nur bei rhomboedrischem Gitter (Calcit, nicht Quarz).
- Miller-Bravais-Indizes (*hkil*) mit $i = -(h + k)$: Bei gleichwertigen Flächen sind *h*, *k*, *i* vertauscht, gegebenenfalls mit umgekehrtem Vorzeichen; *l* bleibt oder wechselt das Vorzeichen.
- (*hkl*) → (*hkil*): *i* einfügen; (*hkil*) → (*hkl*): *i* weglassen.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 7.1 (rhomboedrisches Gitter, Abb. 7.12, S. 98), 7.3 (Rhomboeder, Sonderfall Würfel, S. 116), 9.2.2 (Bravais-Miller-Indizes, $h + k + i = 0$, S. 151, Abb. 9.12; Tab. 9.6, S. 154 f.).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 2.8 (Rhomboeder als gestreckter Würfel, S. 86–87).
- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Tab. 9.4 Nr. 18 (Links- und Rechts-Tiefquarz, Punktgruppe 32, S. 138), Abschn. 9.6.1.1 (optische Aktivität von Links- und Rechtsquarz, S. 170).
- W. Kleber, J. Bohm, D. Klimm, M. Mühlberg, B. Winkler, *Einführung in die Kristallographie*, 20. Aufl., De Gruyter, Berlin/Boston (2020), Abschn. 1.6, Kristallklasse 32 (Formen, Abb. 1.70: Links- und Rechtsquarz mit Indizes; grosses Rhomboeder als $\{10\bar{1}1\}$; Unterscheidung nach Heaney u. a. (1994); Benennung nicht einheitlich, S. 70–71).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 2.8 (trigonal, rhomboedrisch, hexagonal-R: Rhomboeder aus dem Würfel, Achse höchster Zähligkeit entlang *c*, warum es ein rhomboedrisches Gitter, aber kein rhomboedrisches Kristallsystem gibt, S. 85–90).
- D. Schwarzenbach, *Kristallographie*, Springer, Berlin (2001), Abschn. 2.5.8 (rhomboedrische Achsen im trigonalen System; Terminologie der IUCr: trigonal als Kristallsystem, rhomboedrisch als Achsensystem und Bravais-Gitter; Bild 2.22, S. 62–63), Abschn. 2.9 (Calcit, Raumgruppe $R\bar{3}c$, S. 91).
- W. Kleber u. a. (2020), a. a. O., Abschn. 1.1.2 (rhomboedrisches Achsensystem im trigonalen System, S. 12), 1.6.5 (hexagonale und rhomboedrische Achsen im trigonalen System, Gitter hR und hP, S. 68), 1.9.4 (Quarz, Raumgruppe $P3_121$, S. 106).
- Indizes der Tabelle mit der App nachgerechnet (Streckung entlang [111]).
- Gitterkonstanten wie im Beispielkristall der App; $\rho = 51{,}8°$ für (101) bei $c/a = 1{,}10$ mit der App nachgerechnet.

Vertiefungen

Die Kapitel 10 und 11 gehen über den Grundstoff hinaus. Sie bauen auf den Kapiteln 1–9 auf und zeigen, wie deren Inhalte weitergehen; der Kasten „Voraussetzungen“ am Anfang jedes Kapitels nennt die Anknüpfungspunkte. Die Randlinie links markiert den ganzen Teil.

10 Lagen, Flächensymmetrie und Multiplizität VERTIEFUNG

Der Würfel hat 6 Flächen, das Oktaeder 8, das Hexakisoktaeder 48, alle in derselben Punktgruppe $m\bar{3}m$. Wie viele Flächen eine Form hat, hängt davon ab, wo ihre Pole relativ zu den Symmetrieelementen liegen. Dieses Kapitel bündelt, was dazu in Kapitel 4 und 6 verstreut steht, und bereitet die Punktlagen der Raumgruppen vor.

VORAUSSETZUNGEN

Das Kapitel baut auf der Kristallform als Menge gleichwertiger Flächen und ihrer Flächenzahl (Kapitel 6), den Familien gleichwertiger Richtungen ⟨*uvw*⟩ (Kapitel 5) und den Untergruppen (Kapitel 3) auf und verbindet sie mit den zehn ebenen Punktgruppen: Diese treten als Lagesymmetrien auf, und aus der Lagesymmetrie folgt die Flächenzahl. Dieselben Begriffe und Bezeichnungen, Lagesymmetrie, Multiplizität und Wyckoff-Lage, kommen bei den Raumgruppen wieder.

LERNZIELE

- für einen Pol oder eine Richtung die Lagesymmetrie angeben und entscheiden, ob die Lage allgemein oder speziell ist
- die Flächenzahl einer Form aus der Ordnung der Punktgruppe und der Flächensymmetrie berechnen
- ein orientiertes Symbol der Flächensymmetrie lesen, z. B. $4m.m$ oder $..m$
- erklären, warum dieselbe Form in verschiedenen Punktgruppen verschiedene Flächensymmetrie, aber gleiche Flächenzahl haben kann

10.1 Die Lage eines Pols

Wendet man eine Symmetrieoperation auf einen Pol an, so bringt sie ihn im Allgemeinen an eine andere Stelle der Umkugel. Manche Operationen lassen ihn aber, wo er ist: eine Drehachse, die durch den Pol geht, und eine Spiegelebene, die ihn enthält. Danach unterscheidet man zwei Lagen:

- Ein Pol in **allgemeiner Lage** wird nur von der Identität festgehalten. Er liegt auf keinem Symmetrieelement.
- Ein Pol in **spezieller Lage** wird von mindestens einer weiteren Operation festgehalten. Er liegt auf einer Drehachse, einer Spiegelebene oder mehreren davon.

Die Operationen, die einen Pol festhalten, bilden seine **Lagesymmetrie**. Sie enthält immer die Identität, und führt man zwei von ihnen nacheinander aus, bleibt der Pol wieder an seiner Stelle: Die Lagesymmetrie ist eine Untergruppe der Punktgruppe. Ist der Pol der Pol einer Fläche, heisst sie **Flächensymmetrie** (Kapitel 6).

Die Inversion und die Drehinversionen $\bar{3}$, $\bar{4}$ und $\bar{6}$ als Operationen halten keinen Pol fest, denn sie bringen ihn auf die andere Seite der Kugel. (Die Drehinversion $\bar{2}$ ist die Spiegelung; sie hält die Pole auf ihrer Spiegelebene fest.) Die Lagesymmetrie eines Pols enthält deshalb nur Drehungen um die Gerade durch den Pol und Spiegelungen an Ebenen, die diese Gerade enthalten. Als Lagesymmetrie kommen damit nur 1, 2, 3, 4, 6, m, $2mm$, $3m$, $4mm$ und $6mm$ in Frage, die zehn ebenen Punktgruppen. Das gilt für Pole, also für Richtungen. Für Punkte im Raum gilt es nicht: Ein Punkt auf einem Inversionszentrum wird von der Inversion festgehalten, und ein Gitterpunkt in einem Gitter mit der Symmetrie $4/mmm$ hat die volle Lagesymmetrie $4/mmm$ (Ausblick am Ende des Kapitels). Der Pol von (001) hat in $4/mmm$ die Lagesymmetrie $4mm$, nicht $4/mmm$; ein Pol auf der $\bar{4}$-Achse in der Punktgruppe $\bar{4}$ hat nur die Lagesymmetrie 2, die Drehung um 180°, die in $\bar{4}$ enthalten ist.

Wie in Kapitel 6 beschrieben, genügt es, die **asymmetrische Flächeneinheit** zu betrachten, den kleinsten Teil der Kugel, aus dem die Operationen die ganze Kugel erzeugen. In 4/*mmm* ist sie ein sphärisches Dreieck mit den Ecken (001), (100) und (110), dessen Seiten auf Spiegelebenen liegen. Für die Lage eines Pols darin gibt es sieben Möglichkeiten: im Inneren, auf einer der drei Seiten oder auf einer der drei Ecken (Abb. 10.1).

- Im Inneren hat er zwei Freiheitsgrade und die Lagesymmetrie 1: die allgemeine Form, 16 Pole.
- Auf einer Seite hat er einen Freiheitsgrad und die Lagesymmetrie *m*: Er darf auf der Spiegelebene wandern, ohne dass sich die Zahl der Pole ändert, je 8 Pole.
- Auf einer Ecke hat er keinen Freiheitsgrad; dort schneiden sich Spiegelebenen in einer Drehachse. Die Ecken (100) und (110) haben die Lagesymmetrie 2*mm* (je 4 Pole), die Ecke (001) die Lagesymmetrie 4*mm* (2 Pole).

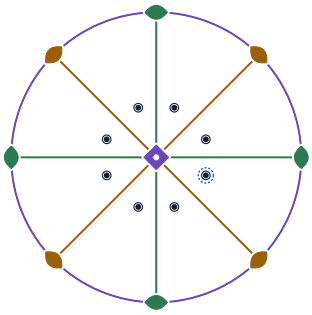
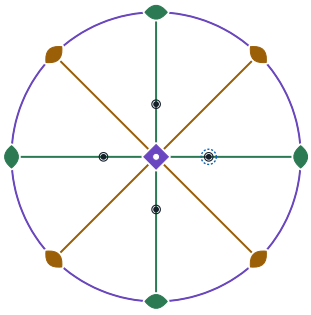
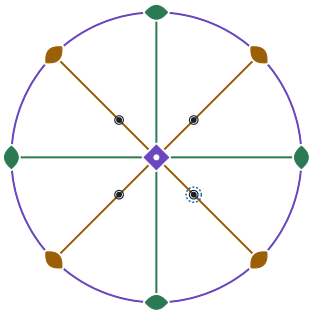


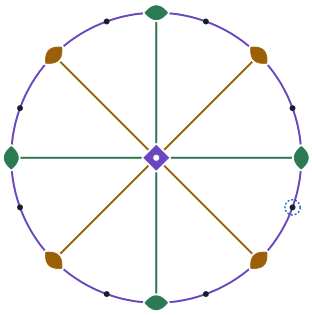
Abb. 10.1a 16*g*, 1 App →



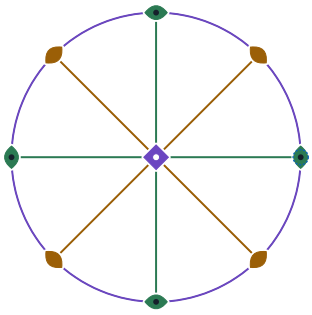
b 8*f*, *.m.* App →



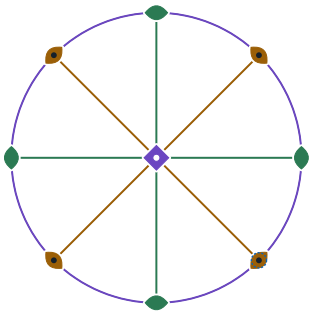
c 8*e*, *..m* App →



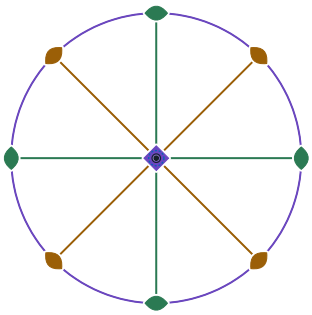
d 8*d*, *m..* App →



e 4*c*, *m2m*. App →



f 4*b*, *m.m2* App →



g 2*a*, 4*mm* App →

Abb. 10.1 Die sieben Lagen eines Pols in 4/*mmm*, jeweils mit Wyckoff-Lage und Lagesymmetrie: (a) allgemeine Lage; (b)–(d) auf einer Spiegelebene: ⊥ ⟨100⟩, ⊥ ⟨110⟩, in der Projektionsebene; (e)–(g) auf einer Drehachse: ⟨100⟩, ⟨110⟩, [001]. Der gestrichelte Ring markiert den Ausgangspol. In der App rastet er beim Ziehen auf den Symmetrieelementen ein, und die Infobox nennt seine Lage.

Alle Pole mit gleichwertiger Lagesymmetrie, also Pole, die auf genau denselben Sätzen gleichwertiger Symmetrieelemente liegen, bilden eine **Wyckoff-Lage**. Ein Pol auf einer Spiegelebene *.m.* von 4/*mmm* gehört also nur dann zu 8*f*, wenn er auf keinem weiteren Element liegt; der Pol (001) liegt zwar auch auf diesen Spiegelebenen, hat aber die höhere Lagesymmetrie 4*mm*. Man bezeichnet eine Wyckoff-Lage mit ihrer Multiplizität und einem Buchstaben,

beginnend mit *a* für die Lage mit der kleinsten Multiplizität (bei gleicher Multiplizität nach der Konvention der International Tables); die allgemeine Lage hat den letzten Buchstaben. In 4/*mmm* gehört jede der sieben Möglichkeiten zu einer eigenen Wyckoff-Lage, 2*a* bis 16*g*. In $m\bar{3}m$ sind es nur sechs. Dort hat die asymmetrische Flächeneinheit die Ecken (100), (110) und (111); zwei ihrer Seiten, von (100) nach (111) und von (111) nach (110), liegen auf gleichwertigen Spiegelebenen ..*m*, die dritte auf einer Spiegelebene *m*... Deshalb gehören Trisoktaeder und Deltoidikositetraeder, beide {*hhl*}, zur selben Wyckoff-Lage 24*e*.

Ein Beispiel sind die beiden tetragonalen Dipyramiden {111} und {113} aus Kapitel 1 (Abb. 10.2). Ihre Pole liegen auf denselben diagonalen Spiegelebenen, nur verschieden weit vom Mittelpunkt. Beide Formen gehören zur Wyckoff-Lage 8*e* mit der Flächensymmetrie ..*m* und haben deshalb gleich viele Flächen.

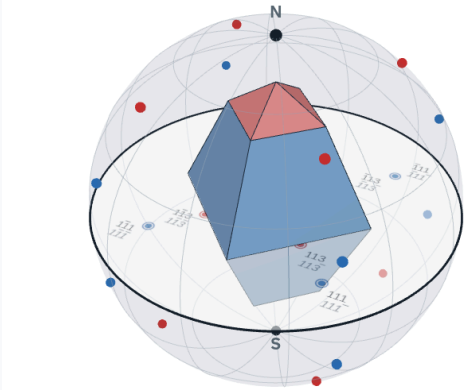


Abb. 10.2a Kristall aus den tetragonalen Dipyramiden {111} und {113}, [001] senkrecht. In der App öffnen →

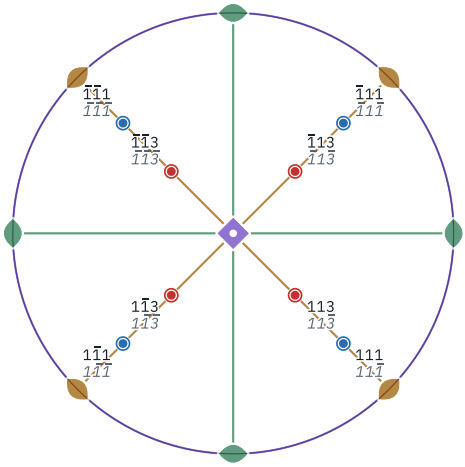


Abb. 10.2b Stereogramm dazu über dem Symmetriegerüst: Die Pole beider Formen liegen auf den diagonalen Spiegelebenen (Wyckoff-Lage 8*e*). In der App öffnen →

MERKE · VERTIEFUNG

Die Lagesymmetrie eines Pols sind die Operationen, die ihn festhalten. Allgemeine Lage: nur die Identität. Spezielle Lage: Der Pol liegt auf einer Drehachse oder Spiegelebene. Pole mit gleichwertiger Lagesymmetrie bilden eine Wyckoff-Lage.

10.2 Das orientierte Symbol der Flächensymmetrie

Die Flächensymmetrie schreibt man als **orientiertes Symbol**. Es hat dieselben Positionen wie das Hermann-Mauguin-Symbol der Punktgruppe, eine je Blickrichtung (Kapitel 5). An jeder Position steht, welche Symmetrieelemente dieser Blickrichtung durch die Fläche gehen; ein Punkt heisst, dass es keines gibt. Gehören zu einer Blickrichtung mehrere gleichwertige Richtungen, kann eine Position mehrere Zeichen haben. Sie stehen dann in der Reihenfolge, in der die International Tables die Richtungen aufzählen: für ⟨100⟩ [100], [010], [001], für ⟨110⟩ [1$\bar{1}$0] vor [110]. Deshalb heisst die Flächensymmetrie der Würfelfläche (100) des Pyrits 2*mm*.. und nicht *mm*2..: 2 entlang [100], *m* senkrecht zu [010], *m* senkrecht zu [001] (Kapitel 6). Ist das Symbol der Punktgruppe kürzer als drei Positionen, ergänzt man es, z. B. 4/*m* zu 4/*m* 1 1; die Fläche (001) hat dort die Flächensymmetrie 4.. und eine Fläche {*hk*0} die Flächensymmetrie *m*..

In $m\bar{3}m$ sind die Blickrichtungen ⟨100⟩, ⟨111⟩ und ⟨110⟩. Für die Würfelfläche (001) ergibt das:

- ⟨100⟩: die 4-zählige Achse entlang [001] und die Spiegelebenen senkrecht zu [100] und [010], zusammen 4*m*;
- ⟨111⟩: keine 3-zählige Achse geht durch (001), also ein Punkt;
- ⟨110⟩: die Spiegelebenen senkrecht zu [110] und [1$\bar{1}$0], also *m*.

Die Flächensymmetrie ist 4*m*.*m*. Für die beiden Spiegelebenen senkrecht zu [100] und [010] steht nur ein *m*, weil die 4-zählige Achse sie ineinander überführt; gleichwertige Elemente schreibt man nur einmal, ebenso die beiden Ebenen ⊥ ⟨110⟩. Ebenso hat die Oktaederfläche (111) die Flächensymmetrie .3*m* (eine 3-zählige Achse und drei Spiegelebenen ⊥

⟨110⟩), die Fläche (110) des Rhombendodekaeders *m.m*2 (eine Spiegelebene ⊥ [001], eine Spiegelebene ⊥ [1$\bar{1}$0] und die 2-zählige Achse entlang [110]; [1$\bar{1}$0] steht vor [110], deshalb *m*2 und nicht 2*m*). Die Infobox der App zeigt diese Angabe für jede Form, zusammen mit der Wyckoff-Lage.

10.3 Multiplizität

Ein Pol in allgemeiner Lage hat so viele Bilder, wie die Punktgruppe Operationen hat (Kapitel 4). Liegt er speziell, liefern mehrere Operationen dasselbe Bild: Hält eine Operation den Pol fest, so bringt jede weitere Operation, nach ihr ausgeführt, ihn an dieselbe Stelle wie ohne sie. Die Operationen der Punktgruppe zerfallen so in gleich grosse Teilmengen, je eine für jedes Bild, und jede ist so gross wie die Lagesymmetrie. (In der Gruppentheorie heissen diese Teilmengen Nebenklassen der Lagesymmetrie; ausser der Lagesymmetrie selbst sind sie keine Gruppen.)

MERKE · VERTIEFUNG

Flächenzahl = Ordnung der Punktgruppe / Ordnung der Flächensymmetrie

Die Flächenzahl einer Form heisst auch ihre Multiplizität. Für die allgemeine Form ist die Flächensymmetrie 1, die Flächenzahl gleich der Ordnung der Gruppe.

Für *m*$\bar{3}$*m* mit 48 Operationen:

WYCKOFF-LAGE	FLÄCHENSYMMETRIE	ORDNUNG	FORM	FLÄCHEN
48*f*	1	1	Hexakisoktaeder {*hkl*}	48
24*e*	..*m*	2	Trisoktaeder {*hhl*}, *h* > *l*; Deltoidikositetraeder {*hhl*}, *h* < *l*	24
24*d*	*m*..	2	Tetrakishexaeder {0*kl*}	24
12*c*	*m.m*2	4	Rhombendodekaeder {110}	12
8*b*	.3*m*	6	Oktaeder {111}	8
6*a*	4*m.m*	8	Würfel {100}	6

Die Regel zeigt auch, warum dieselbe Form in einer kleineren Punktgruppe eine entsprechend kleinere Flächensymmetrie hat. Der Würfel hat in *m*$\bar{3}$*m* die Flächensymmetrie 4*m.m* (48/8 = 6), in $\bar{4}$3*m* nur 2.*mm* (24/4 = 6) und in 23 nur 2.. (12/2 = 6): Die Gruppe wird kleiner, die Flächensymmetrie im selben Verhältnis. Anders {111}: Die Flächensymmetrie .3*m* ist in $\bar{4}$3*m* dieselbe wie in *m*$\bar{3}$*m*, die Gruppe hat aber nur 24 Operationen. Die Form hat deshalb 24/6 = 4 Flächen, ein Tetraeder; die übrigen vier Flächen bilden das Gegentetraeder {$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$}, eine eigene Form (Abb. 10.3).

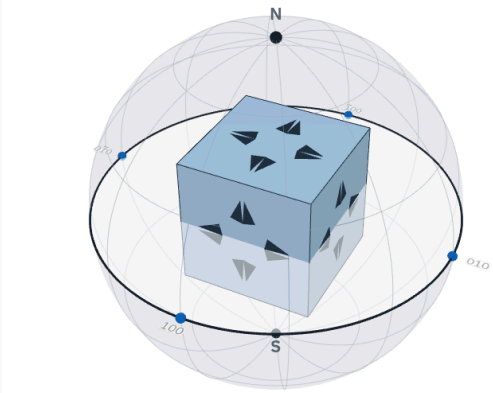


Abb. 10.3a Würfel in $m\bar{3}m$: 6*a*, Flächensymmetrie 4*m*.*m*; acht Muster je Fläche. In der App öffnen →

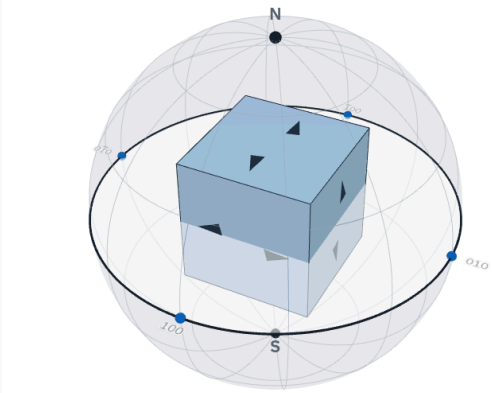


Abb. 10.3b Würfel in 23: 6*b*, Flächensymmetrie 2..; zwei Muster je Fläche. In der App öffnen →

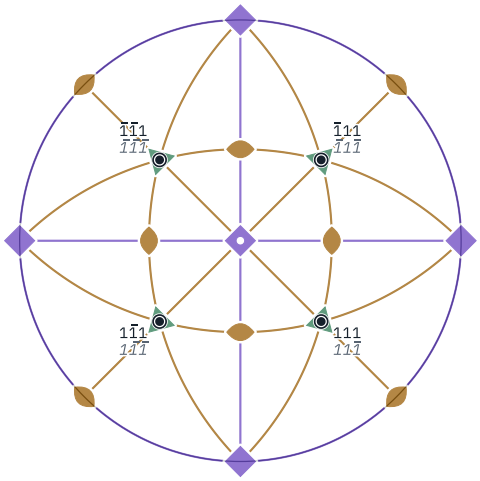


Abb. 10.3c Oktaeder in $m\bar{3}m$: 8*b*, 48/6 = 8 Pole. In der App öffnen →

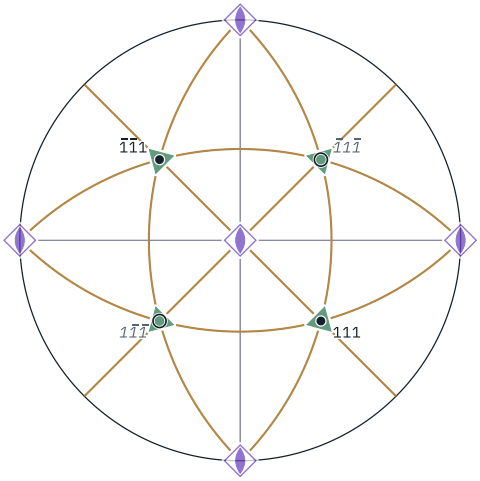


Abb. 10.3d Tetraeder in $\bar{4}3m$: 4*a*, 24/6 = 4 Pole; an den übrigen vier Stellen ⟨111⟩ lägen die Pole des Gegentetraeders. In der App öffnen →

Die Grösse der asymmetrischen Flächeneinheit folgt aus der allgemeinen Form: Sie ist die Kugeloberfläche geteilt durch deren Flächenzahl, in $m\bar{3}m$ also ein Achtundvierzigstel der Kugel. Eine Punktgruppe mit halb so vielen Operationen hat eine doppelt so grosse asymmetrische Flächeneinheit.

10.4 Richtungen

Eine Richtung durchstösst die Umkugel in einem Punkt, genau wie eine Flächennormale. Für Richtungen gilt deshalb dasselbe wie für Flächenpole: Eine Richtung auf einem Symmetrieelement hat dieselbe Lagesymmetrie wie ein Pol an dieser Stelle, und die Zahl der gleichwertigen Richtungen ist Ordnung der Gruppe durch Ordnung der Lagesymmetrie. Im Würfel gibt es 6 Richtungen ⟨100⟩, 8 Richtungen ⟨111⟩ und 12 Richtungen ⟨110⟩, die Multiplizitäten der Wyckoff-Lagen 6*a*, 8*b* und 12*c*. Im kubischen System liegt die Richtung [*uvw*] dort, wo der Pol der Fläche (*uvw*) liegt (Kapitel 7); in den anderen Systemen fallen beide im Allgemeinen nicht zusammen. Die Regel gilt dann weiter, aber eine Richtungsfamilie ⟨*uvw*⟩ und die Form {*uvw*} können verschieden viele Glieder haben, weil sie an verschiedenen Stellen liegen: In 3*m*1 gibt es 6 Richtungen ⟨100⟩, die Form $\{10\bar{1}0\}$ (dreistellig {100}) ist aber ein trigonales Prisma mit 3 Flächen.

Auch die Familie gleichwertiger Richtungen hängt von der Punktgruppe ab. In 23 hat [111] nur die Lagesymmetrie 3 (Symbol .3.), also 12/3 = 4 gleichwertige Richtungen: [111], [$\bar{1}\bar{1}1$], [$\bar{1}1\bar{1}$] und [$1\bar{1}\bar{1}$]. Die Gegenrichtungen bilden eine zweite Familie, so wie das Gegentetraeder eine zweite Form (Abb. 10.4).

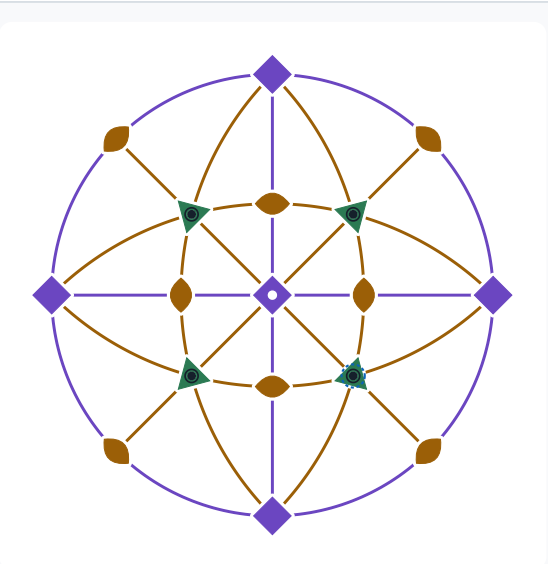


Abb. 10.4a $m\bar{3}m$, Ausgangspol auf [111]: 8 gleichwertige Richtungen ⟨111⟩ (8*b*, .3*m*).
In der App öffnen →

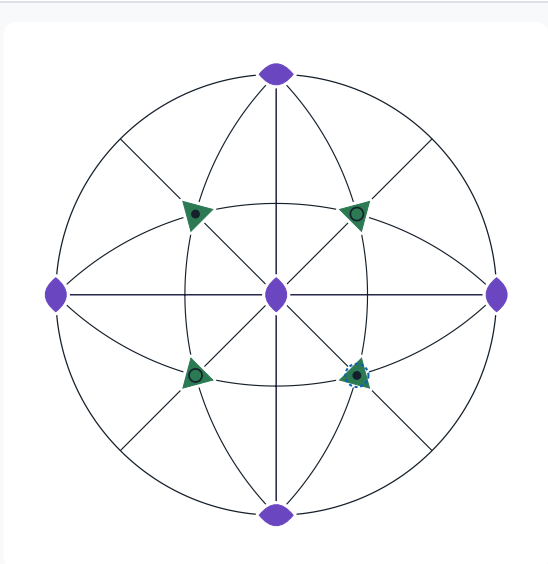


Abb. 10.4b 23, gleicher Ausgangspol: nur 4 gleichwertige Richtungen (4*a*, .3.).
In der App öffnen →

Die International Tables unterscheiden deshalb neben der **Kristallform**, der Menge gleichwertiger Flächen, die **Punktform**, die Menge gleichwertiger Punkte, z. B. der Endpunkte gleichwertiger Richtungen. Beide gehören zu derselben Wyckoff-Lage und haben dieselbe Multiplizität. Ihre Polyeder sind zueinander dual: Die 8 Richtungen ⟨111⟩ zeigen auf die Ecken eines Würfels, die 8 Flächen {111} bilden ein Oktaeder; die 6 Richtungen ⟨100⟩ zeigen auf die Ecken eines Oktaeders, die 6 Flächen {100} bilden einen Würfel.

Bei Achsen zählt man oft nicht Richtungen, sondern Geraden. Eine Gerade hat zwei Richtungen, und ihre Lagesymmetrie enthält auch die Operationen, die die beiden Richtungen vertauschen. Die Gerade [001] wird in $m\bar{3}m$ von 16 Operationen in sich überführt (4/*mmm*), es gibt also 48/16 = 3 gleichwertige Geraden ⟨100⟩, aber 6 Richtungen. Genau diese Zählung steckt in Kapitel 11 (Streckung entlang einer Geraden) und in der Liste der Zonen in der App.

10.5 Lage und Flächenform

Die Operationen der Flächensymmetrie führen nicht nur den Pol, sondern die ganze Fläche in sich über. Hat der Kristall die volle Symmetrie seiner Punktgruppe, sind also alle Flächen einer Form gleich ausgebildet, dann hat der Umriss jeder Fläche mindestens die Flächensymmetrie. Das zeigt sich an den Namen der Formen:

- Flächensymmetrie 1: Die Flächen des Hexakisoktaeders sind ungleichseitige Dreiecke.
- Flächensymmetrie ..*m*: Die Flächen des Trisoktaeders sind gleichschenklige Dreiecke, die des Deltoidikositetraeders Deltoide (in den International Tables Trigon- bzw. Tetragon-Trioktaeder). Beide sind spiegelsymmetrisch, die Spiegelebene halbiert die Fläche.
- Flächensymmetrie *m*.*m*2: Die Flächen des Rhombendodekaeders sind Rauten mit zwei Spiegelebenen.
- Flächensymmetrie .3*m* bzw. 4*m*.*m*: Die Flächen von Oktaeder und Würfel sind gleichseitige Dreiecke bzw. Quadrate.

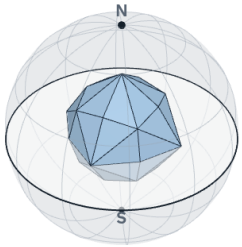


Abb. 10.5a Hexakisoktaeder {321}, 48*f*, 1: ungleichseitige Dreiecke. In der App öffnen →

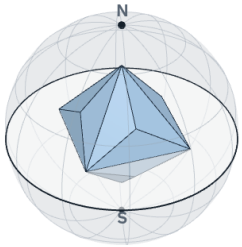


Abb. 10.5b Trisoktaeder {221}, 24*e*, ..*m*: gleichschenklige Dreiecke. In der App öffnen →

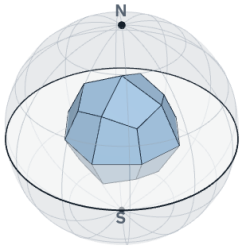


Abb. 10.5c Deltoidikositetraeder {112}, ebenfalls 24*e*, ..*m*: Deltoide. In der App öffnen →

Umgekehrt kann der Umriss symmetrischer sein, als die Flächensymmetrie verlangt. Die Würfelfläche ist auch in 23 ein Quadrat, obwohl ihre Flächensymmetrie dort nur 2.. ist. Die Flächensymmetrie zeigt sich dann erst an Ätzfiguren, Streifung und anderen Zeichnungen auf der Fläche; die International Tables nennen sie ausdrücklich auch deren Symmetrie. In der App macht „Flächensymmetrie zeigen“ das sichtbar (Abb. 10.3a und b).

10.6 Erzeugende Symmetrie und Eigensymmetrie

Die Symmetrie einer Kristallform lässt sich auf zwei Arten angeben. Die **erzeugende Symmetrie** ist die Punktgruppe, deren Operationen die Form aus einer Fläche erzeugen. Die **Eigensymmetrie** ist die Symmetrie des Polyeders für sich allein betrachtet. Eine tetragonale Pyramide entsteht durch die Operationen von 4; für sich betrachtet hat sie aber die Symmetrie 4*mm* (Abb. 10.6). Ein Würfel kann von allen fünf kubischen Punktgruppen erzeugt werden; seine Eigensymmetrie ist immer $m\bar{3}m$.

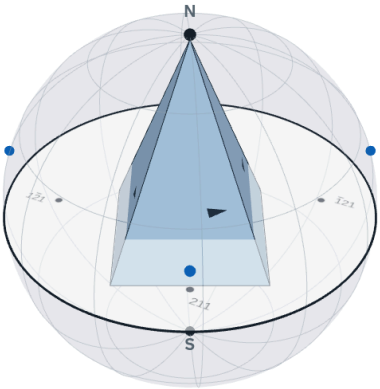


Abb. 10.6a Tetragonale Pyramide in 4: erzeugende Symmetrie 4, Flächensymmetrie 1. In der App öffnen →

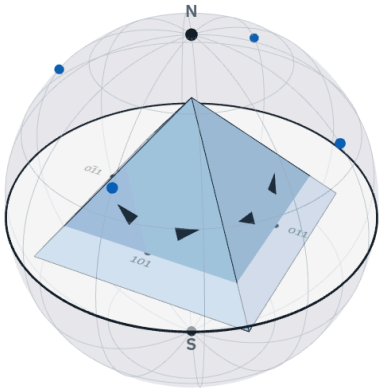


Abb. 10.6b Tetragonale Pyramide in 4*mm*: erzeugende Symmetrie gleich Eigensymmetrie, Flächensymmetrie .*m*. In der App öffnen →

Ohne Flächenmuster sind beide Körper tetragonale Pyramiden; an der Gestalt allein sieht man nicht, ob die Form von 4 oder von 4*mm* erzeugt wurde. Ist die Eigensymmetrie höher als die erzeugende Symmetrie, reicht die Form allein deshalb nicht, um die Punktgruppe zu bestimmen. Das ist der Grund für die Vorsicht in Kapitel 4: Das Polmuster einer einzelnen Form zeigt ihre Eigensymmetrie, nicht die erzeugende Symmetrie.

Auch die **Grenzformen** aus Kapitel 6 lassen sich so einordnen. Die International Tables nennen die Formen mit der niedrigsten Eigensymmetrie einer Wyckoff-Lage ihre **Grundformen**. Eine Grenzform gehört zur selben Wyckoff-Lage wie die zugehörige Grundform, hat also dieselbe Flächenzahl und Flächensymmetrie, aber eine höhere Eigensymmetrie. In

der Punktgruppe 4 gehören die tetragonale Pyramide {*hkl*} (Eigensymmetrie 4*mm*) und das tetragonale Prisma {*hk*0} (Eigensymmetrie 4/*mmm*) beide zur allgemeinen Lage 4*b*.

IN DER APP

Die Infobox nennt zu jeder Form die Punktgruppe als erzeugende Symmetrie und die Eigensymmetrie. Ohne „Flächensymmetrie zeigen“ bietet die Formauswahl je Punktgruppe die allgemeine Form und die Formen an, deren Eigensymmetrie die Punktgruppe selbst ist. Im trigonalen System kommen das trigonale und das hexagonale Prisma hinzu: Ihre Eigensymmetrie ($\bar{6}2m$ bzw. $6/mmm$) ist hexagonal; weil keine trigonale Punktgruppe sie als Eigensymmetrie hat, stehen sie unter der Punktgruppe, in der sie vorkommen (32 bzw. $\bar{3}m$).

10.7 Ausblick: Punktlagen in Raumgruppen

Dieselben Begriffe kehren bei den Raumgruppen wieder, nur dass dort nicht Pole auf der Kugel, sondern Punkte in der Elementarzelle betrachtet werden. Ein Punkt in **allgemeiner Punktlage** hat die Lagesymmetrie 1 und drei Freiheitsgrade; ein Punkt in **spezieller Punktlage** liegt auf einem Symmetrieelement ohne Translationsanteil und hat eine höhere Lagesymmetrie. Die Zahl gleichwertiger Punkte in der Elementarzelle heisst **Zähligkeit** oder Multiplizität. In der Raumgruppe *Pmm*2 ist die allgemeine Punktlage 4-zählig, ein Punkt auf einer Spiegelebene 2-zählig (Lagesymmetrie *m*), ein Punkt auf einer 2-zähligen Achse 1-zählig (Lagesymmetrie *mm*2). Die International Tables bezeichnen die Punktlagen mit Multiplizität und Buchstabe, in *Pmm*2 z. B. 1*a* für eine Lage auf einer 2-zähligen Achse und 4*i* für die allgemeine Lage; die Wyckoff-Lagen der Punktgruppen sind diesen Bezeichnungen nachgebildet. Anders als Pole können Punkte auch auf einem Inversionszentrum oder einer Drehinversionsachse liegen; dann kommen Lagesymmetrien wie $\bar{1}$, $2/m$ oder $\bar{4}$ hinzu.

Neu ist bei den Raumgruppen: Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen verringern die Zähligkeit nicht. Ihr Translationsanteil bringt einen Punkt, der auf ihnen liegt, immer an eine andere Stelle. Und an die Stelle der asymmetrischen Flächeneinheit tritt die **asymmetrische Einheit**: das Volumen der Elementarzelle geteilt durch die Zähligkeit der allgemeinen Punktlage.

ZUSAMMENFASSUNG

- Die Lagesymmetrie eines Pols oder einer Richtung sind die Operationen, die ihn festhalten, eine Untergruppe der Punktgruppe. Allgemeine Lage: Lagesymmetrie 1. Spezielle Lage: auf Drehachse oder Spiegelebene.
- Flächenzahl (Multiplizität) = Ordnung der Punktgruppe / Ordnung der Flächensymmetrie, z. B. Würfel in $m\bar{3}m$: 48/8 = 6.
- Das orientierte Symbol nennt je Blickrichtung die Elemente durch die Fläche, ein Punkt steht für keines (4*m*.*m*, .3*m*, ..*m*).
- Wyckoff-Lage: alle Pole mit gleichwertiger Lagesymmetrie, bezeichnet mit Multiplizität und Buchstabe (z. B. 24*e*). Kristallform und Punktform derselben Lage haben dieselbe Multiplizität.
- Der Umriss einer Fläche hat mindestens ihre Flächensymmetrie. Die Eigensymmetrie einer Form kann höher sein als die erzeugende Symmetrie.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 9.2.1 (Kristallform, allgemeine und spezielle Form, Flächensymmetrie und orientiertes Symbol, Freiheitsgrade, Grenzform, asymmetrische Flächeneinheit mit Gl. 9.1, Flächenpole in allgemeiner und spezieller Lage, S. 142–150, Abb. 9.5–9.10; Ergänzung ein- und zweigliedriger Symbole, S. 151), Tab. 9.5–9.8 (Kristallformen und Flächensymmetrien, S. 152–157), 9.2.3 (Abb. 9.15, S. 160), 9.2.4 (erzeugende Symmetrie und Eigensymmetrie, Tab. 9.9, S. 159), Abb. 15.2 (die 47 Kristallformen, S. 358–360); 10.4 (Punktlagen, Zähligkeit, Lagesymmetrie, Freiheitsgrade, Tab. 10.4, asymmetrische Einheit mit Gl. 10.3, S. 214–218).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Tab. 2.2.4.1 (Reihenfolge der Symmetrierichtungen, S. 24) und Abschn. 2.2.12 (orientierte Lagesymmetriesymbole, S. 34–35).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Abschn. 10.1.2.1 (Dualität der Polyeder von Kristall- und Punktform), 10.1.2.2 (Kristall- und Punktformen, Flächen- und Lagesymmetrie, Multiplizität, Wyckoff-Lagen, erzeugende Symmetrie und Eigensymmetrie, Grundformen und Grenzformen) und 10.1.2.3 (Flächensymmetrie als Symmetrie von Ätzfiguren, Namen der Formen), Tab. 10.1.2.2 und 10.1.2.3.

- F. Hoffmann, Faszination Kristalle und Symmetrie, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 6.1.5 (Lagen, Multiplizität, Lagensymmetrie, Wyckoff-Buchstaben, S. 203–205).

11 Symmetrieändernde Verzerrungen VERTIEFUNG

Verzerrt man einen Kristall, bleibt nur ein Teil seiner Symmetrie erhalten. Am gestreckten Würfel lässt sich im Stereogramm ablesen, welcher Teil das ist. Das Kapitel ist ein Ausblick über den Grundstoff hinaus: Am Bariumtitanat zeigt es, dass solche Verzerrungen in realen Kristallen vorkommen und ihnen neue Eigenschaften geben.

VORAUSSETZUNGEN

In Kapitel 9 wird der Würfel entlang [111] zum Rhomboeder mit der Symmetrie $\bar{3}m$, beschrieben mit hexagonalen Achsen. Das Kapitel macht daraus ein allgemeines Verfahren für alle drei Blickrichtungen des Würfels. Es nutzt Untergruppen (Kapitel 3) und die Blickrichtungen (Kapitel 5) und führt zu Phasenumwandlungen und zu Eigenschaften wie Piezo- und Ferroelektrizität.

LERNZIELE

- die Restgruppe eines entlang ⟨100⟩, ⟨111⟩ oder ⟨110⟩ gestreckten Würfels bestimmen
- im Stereogramm erkennen, in welche Formen eine Form bei der Verzerrung zerfällt
- Streckung und Polarisation unterscheiden und die zugehörige Punktgruppe angeben
- begründen, warum beim Übergang zu niedrigerer Symmetrie Domänen entstehen

11.1 Was bei einer Verzerrung erhalten bleibt

Streckt man einen Würfel entlang einer Richtung, so werden alle Abstände in dieser Richtung um einen Faktor s länger ($s > 1$) oder kürzer ($s < 1$); quer dazu ändert sich nichts. Die Flächen bleiben eben und behalten ihre Indizes, die Winkel zwischen ihnen ändern sich im Allgemeinen. Welche Symmetrieoperationen des Würfels sind danach noch Symmetrieoperationen des Körpers?

Genau die, die die Streckrichtung als Gerade in sich überführen. Da eine Streckung keinen Richtungssinn hat, gehören dazu auch die Operationen, die die Streckrichtung umkehren, darunter das Inversionszentrum. Jede andere Operation brächte die gestreckte Richtung in eine ungestreckte und kann keine Symmetrie mehr sein. Weil das Inversionszentrum erhalten bleibt, gehört zu jeder verbleibenden 2- oder 4-zähligen Achse auch die Spiegelebene senkrecht zu ihr (Symmetriesatz I, Kapitel 4); bleibt von einer Achse nicht einmal die Drehung um 180°, verschwindet auch diese Spiegelebene.

Die verbleibenden Operationen bilden wieder eine Gruppe, eine **Untergruppe** der Punktgruppe $m\bar{3}m$ des Würfels; die App nennt sie **Restgruppe**. Wie gross sie ist, hängt davon ab, entlang welcher Blickrichtung man streckt.

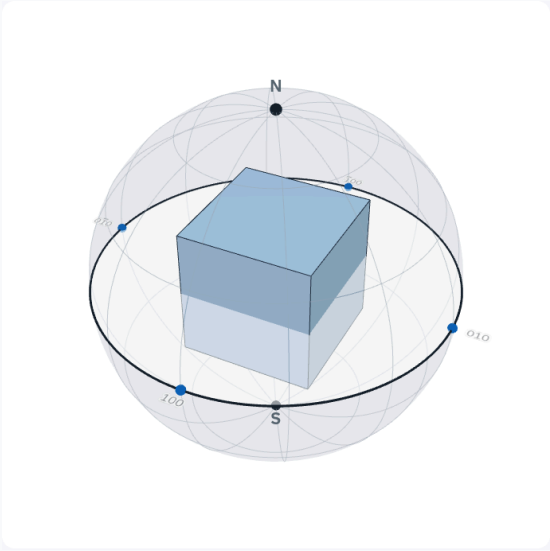


Abb. 11.1a Würfel {100} der Punktgruppe $m\bar{3}m$, [001] senkrecht. In der App öffnen →

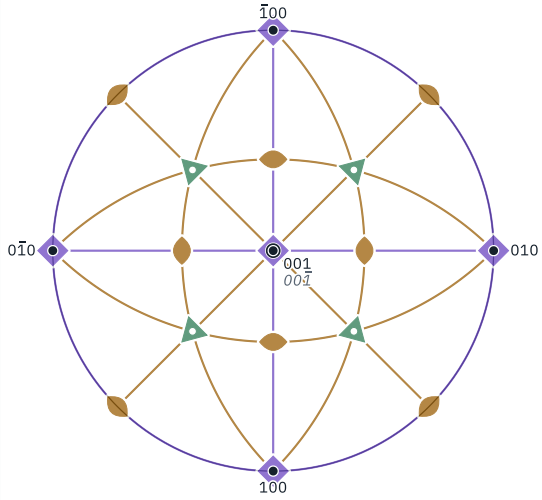


Abb. 11.1b Stereogramm des Würfels über dem Symmetriegerüst von $m\bar{3}m$: 4-zählige Achsen entlang ⟨100⟩, $\bar{3}$-Achsen entlang ⟨111⟩, 2-zählige Achsen entlang ⟨110⟩, neun Spiegelebenen.
In der App öffnen →

IN DER APP

Unter „Kristallformen“ den Würfel wählen, unter „Gitter“ den Schalter „Symmetrie brechen“ einschalten und die Streckung entlang einer Blickrichtung einstellen; die Gitterregler zeigen dann das gestreckte Gitter. Die Infobox nennt die Restgruppe; die Pole der Formen, in die der Würfel zerfällt, erscheinen in verschiedenen Farben.

Die Abbildungen dieses Kapitels strecken um den Faktor 1,3, damit man die Verzerrung gut sieht; in realen Kristallen ist sie viel kleiner (Bariumtitanat, am Ende des Kapitels).

MERKE · VERTIEFUNG

Bei einer Verzerrung bleiben nur die Symmetrieoperationen erhalten, die auch die Verzerrung selbst unverändert lassen. Die neue Punktgruppe ist eine Untergruppe der alten.

11.2 Streckung entlang ⟨100⟩

Streckt man entlang [001], einer der drei 4-zähligen Achsen (1. Blickrichtung), so bleibt die 4-zählige Achse entlang [001] erhalten. Die 4-zähligen Achsen entlang [100] und [010] würden [001] um 90° in die Ebene senkrecht zu [001] drehen; von ihnen bleibt nur die Drehung um 180°, also je eine 2-zählige Achse, die [001] umkehrt. Erhalten bleiben auch die 2-zähligen Achsen entlang [110] und [$1\bar{1}0$], die senkrecht auf [001] stehen. Alle $\bar{3}$-Achsen und die übrigen vier 2-zähligen Achsen gehen verloren.

Übrig bleibt $4/m\ 2/m\ 2/m = 4/mmm$ mit 16 statt 48 Operationen. Das Gitter ist jetzt tetragonal: $a = b \neq c$. Der Würfel zerfällt in zwei Formen: Die Flächen (001) und ($00\bar{1}$) senkrecht zur Streckrichtung bilden ein Pinakoid, die vier Flächen parallel dazu ein tetragonales Prisma (Abb. 11.2). Das ist genau die Kombination aus Kapitel 6 (Abb. 6.1). Die Pole liegen dabei wie beim unverzerrten Würfel, denn die Würfelflächen bleiben senkrecht zueinander. Die Verzerrung zeigt sich im Stereogramm daran, dass Pinakoid und Prisma jetzt verschiedene Formen sind, und am kleineren Symmetriegerüst.

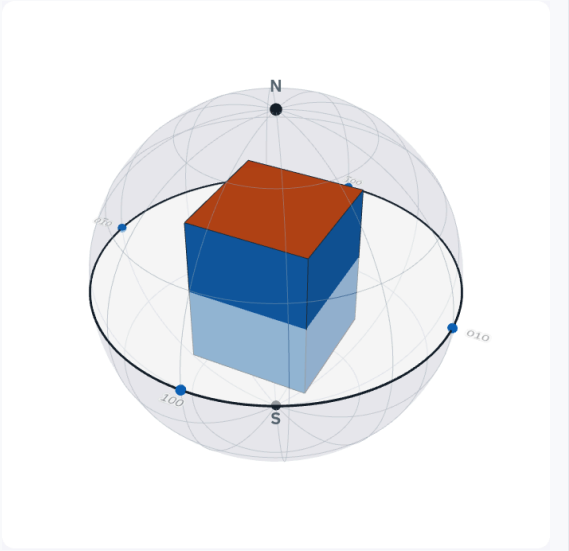


Abb. 11.2a Würfel, entlang [001] um den Faktor 1,3 gestreckt, [001] senkrecht: Pinakoid {001} und tetragonales Prisma {100}. In der App öffnen →

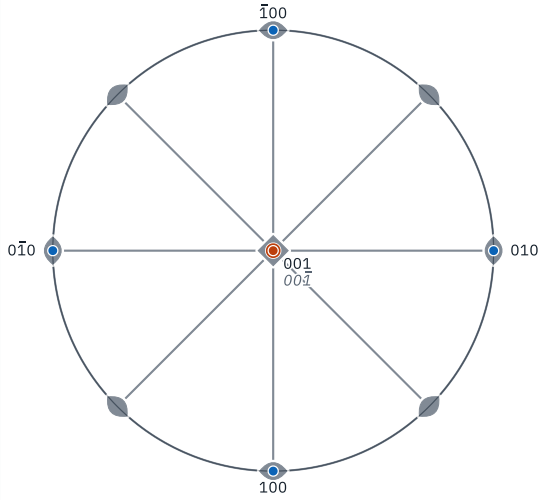


Abb. 11.2b Stereogramm dazu über dem Symmetriegerüst der Restgruppe 4/*mmm*; die beiden Farben zeigen die beiden Formen. In der App öffnen →

11.3 Streckung entlang ⟨111⟩

Streckt man entlang der Raumdiagonalen [111], einer $\bar{3}$-Achse (2. Blickrichtung), so bleibt die $\bar{3}$-Achse entlang [111]. Senkrecht zu [111] liegen drei der sechs 2-zähligen Achsen, entlang [$1\bar{1}0$], [$01\bar{1}$] und [$\bar{1}01$]; sie kehren [111] um und bleiben erhalten. Verloren gehen alle 4-zähligen Achsen, die übrigen drei $\bar{3}$-Achsen und die übrigen drei 2-zähligen Achsen.

Übrig bleibt $\bar{3}\,2/m = \bar{3}m$ mit 12 Operationen. Alle sechs Würfelflächen werden durch die $\bar{3}$-Achse ineinander überführt; sie bleiben eine einzige Form, aber ihre Winkel ändern sich: Aus dem Würfel wird das **Rhomboeder** aus Kapitel 9 (Abb. 11.3), aus dem kubischen ein rhomboedrisches Gitter. Für $s = 1{,}3$ ist der Winkel α an den Ecken auf der $\bar{3}$-Achse 79,2°, bei Stauchung ($s < 1$) wird er grösser als 90°.

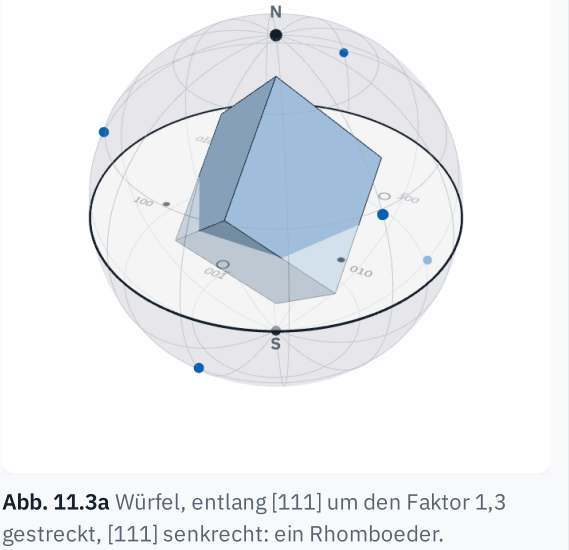


Abb. 11.3a Würfel, entlang [111] um den Faktor 1,3 gestreckt, [111] senkrecht: ein Rhomboeder. In der App öffnen →

Abb. 11.3b Stereogramm, [111] ∥ Projektionsrichtung, über dem Symmetriegerüst $\bar{3}m$: $\bar{3}$-Achse im Mittelpunkt, drei Spiegelebenen, drei 2-zählige Achsen. In der App öffnen →

Mit hexagonalen Achsen, c ∥ [111], wird die Würfelfläche (100) zur Rhomboederfläche (101) = ($10\bar{1}1$) (Kapitel 9); die Infobox der App zeigt diese Umrechnung, sobald die Restgruppe trigonal ist. Streckt man ein Oktaeder auf dieselbe Weise, zerfällt es in ein Pinakoid aus den beiden Flächen senkrecht zu [111] und ein Rhomboeder aus den übrigen

sechs.

11.4 Streckung entlang ⟨110⟩

Streckt man schliesslich entlang der Flächendiagonalen [110], einer 2-zähligen Achse (3. Blickrichtung), so bleiben drei 2-zählige Achsen: die entlang [110] selbst, die senkrecht dazu entlang [1$\bar{1}$0] und entlang [001] die Drehung um 180° der früheren 4-zähligen Achse. Die Drehung um 90° um [001] würde [110] in [$\bar{1}$10] drehen und geht verloren. Ganz verloren gehen die 4-zähligen Achsen entlang [100] und [010], alle $\bar{3}$-Achsen und die übrigen vier 2-zähligen Achsen.

Übrig bleibt 2/*m* 2/*m* 2/*m* = *mmm* mit nur 8 Operationen. Das Gitter ist orthorhombisch, aber seine Achsen liegen nicht mehr entlang der Würfelkanten, sondern entlang [110], [1$\bar{1}$0] und [001]. Der Würfel zerfällt in ein Pinakoid aus (001) und (00$\bar{1}$) und ein rhombisches Prisma aus den vier übrigen Flächen, deren Querschnitt jetzt eine Raute ist (Abb. 11.4).

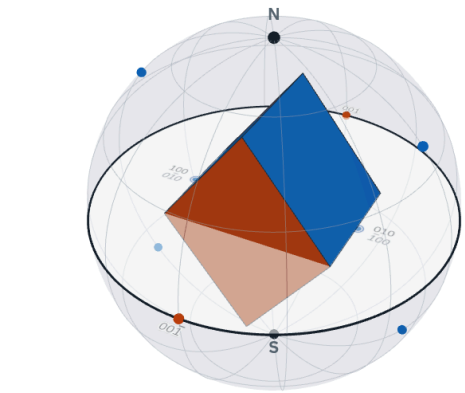


Abb. 11.4a Würfel, entlang [110] um den Faktor 1,3 gestreckt, [110] senkrecht: Pinakoid {001} und rhombisches Prisma. In der App öffnen →

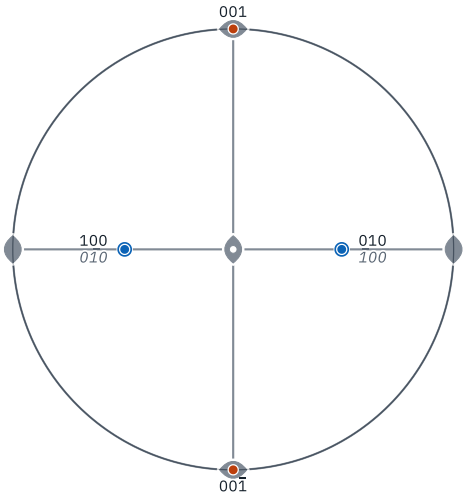


Abb. 11.4b Stereogramm, [110] ∥ Projektionsrichtung, über dem Symmetriegerüst *mmm*.
In der App öffnen →

Je höherzählig die Achse entlang der Streckrichtung, desto mehr Symmetrie bleibt übrig. Die drei Fälle im Überblick:

STRECKUNG ENTLANG	ACHSE DORT	RESTGRUPPE	OPERATIONEN	DER WÜRFEL WIRD ZU
[001], ⟨100⟩	4-zählig	4/*mmm*	16	tetragonales Prisma und Pinakoid
[111], ⟨111⟩	$\bar{3}$	$\bar{3}$*m*	12	Rhomboeder
[110], ⟨110⟩	2-zählig	*mmm*	8	rhombisches Prisma und Pinakoid

Teilt man die 48 Operationen des Würfels durch die Zahl der verbleibenden, erhält man 3, 4 und 6: genau die Zahl der gleichwertigen Geraden ⟨100⟩, ⟨111⟩ und ⟨110⟩, entlang derer man den Würfel gleichwertig strecken könnte (zur Zählung von Geraden und Richtungen Kapitel 10).

Eine Streckung ist nur eine von vielen möglichen Verzerrungen. Allgemein kann sich jeder der sechs Gitterparameter *a*, *b*, *c*, α, β, γ ändern, und das Prinzip bleibt dasselbe: Erhalten bleiben die Operationen, die das veränderte Gitter in sich überführen. Ist beim Würfel nur *a* länger als *b* = *c*, ist das die Streckung entlang [100], und es bleibt 4/*mmm*. Sind *a*, *b* und *c* verschieden, bleibt *mmm*; weicht zusätzlich β von 90° ab, bleibt 2/*m*; sind auch α und γ keine rechten Winkel, bleibt nur $\bar{1}$, denn die Inversion führt jedes Gitter in sich über. Die Restgruppe ist immer eine Untergruppe der ursprünglichen Punktgruppe. Umgekehrt folgt die Symmetrie nicht aus den Gitterparametern: Ein Kristall, dessen Gitter zufällig rechte Winkel hat, ist deshalb nicht orthorhombisch. „Die Symmetrie bestimmt die metrischen Zusammenhänge, nicht aber die Metrik die Symmetrie“ (Schwarzenbach).

IN DER APP

Unter „Gitter“ bei eingeschaltetem „Symmetrie brechen“ auf „Alle Parameter frei“ wechseln. Dann lassen sich alle Gitterparameter einzeln einstellen, und die Infobox nennt die Restgruppe, die zum eingestellten Gitter gehört.

11.5 Streckung oder Polarisation

Eine Streckung hat keinen Richtungssinn. Anders eine Verschiebung von Atomen, durch die ein elektrisches Dipolmoment entsteht, eine **Polarisation**: Sie ist ein Pfeil und unterscheidet „vorn“ von „hinten“. Bei ihr bleiben nur die Operationen erhalten, die den Pfeil in sich selbst überführen; alle, die ihn umkehren, gehen zusätzlich verloren, darunter das Inversionszentrum. Aus 4/*mmm* wird so 4*mm*, aus *mmm* wird *mm*2 und aus $\bar{3}m$ wird 3*m*. Abb. 11.5 zeigt den Unterschied an der Elementarzelle von Bariumtitanat (siehe unten): Wird die Zelle nur gestreckt, sitzt das Ti weiter in ihrer Mitte, und das Inversionszentrum bleibt. Rückt das Ti zusätzlich aus der Mitte, zeigt die Polarisation *P* nach oben, und oben und unten sind nicht mehr gleichwertig.

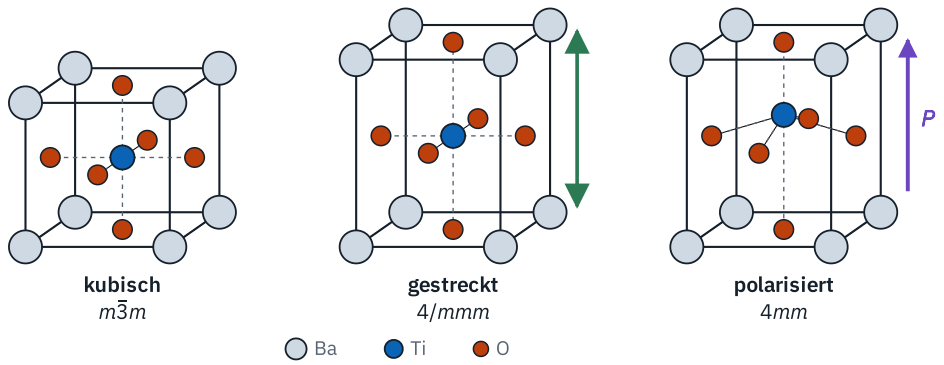


Abb. 11.5 Elementarzelle von $BaTiO_3$ (Perowskitstruktur), Verzerrung und Verschiebung stark übertrieben. Links kubisch ($m\bar{3}m$), Mitte entlang *c* gestreckt, Ti in der Mitte (4/*mmm*, Doppelpfeil: Streckung ohne Richtungssinn), rechts zusätzlich Ti nach oben verschoben (4*mm*, Pfeil: Polarisation *P*). Gestrichelt die Verbindungen vom Ti zu den sechs O des Oktaeders.

Diese Punktgruppen sind **polar** (Kapitel 5, „Was die Punktgruppe über den Kristall verrät“): Die beiden Enden der Pfeilrichtung gehen durch keine Symmetrieoperation ineinander über. Mit dieser Richtung als Projektionsrichtung liegen alle Pole einer allgemeinen Form auf derselben Halbkugel (Abb. 11.6), bei Punktgruppen mit Inversionszentrum auf beiden (*mmm*, Abb. 4.4b). Ein Körper dieser Art ist die tetragonale Pyramide mit Pedion (Abb. 6.2): Oben und unten sind verschieden.

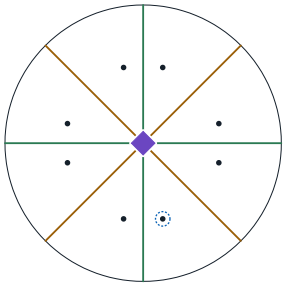
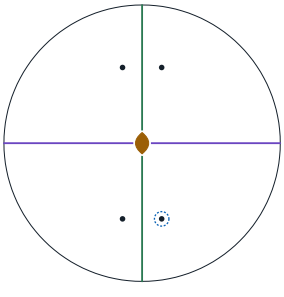
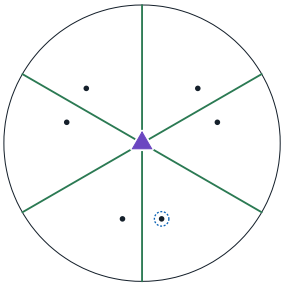


Abb. 11.6a 4*mm*
In der App öffnen →



b *mm*2 In der App öffnen →



c 3*m* In der App öffnen →

Abb. 11.6 Bahn eines allgemeinen Pols in den polaren Punktgruppen (a) 4*mm* (8 Pole), (b) *mm*2 (4 Pole) und (c) 3*m* (6 Pole), die polare Achse jeweils als Projektionsrichtung; bezogen auf den Würfel liegt sie entlang [001], [110] bzw. [111]. Alle Pole liegen auf derselben Halbkugel.

MERKE · VERTIEFUNG

Eine Streckung erhält die Operationen, die die Streckrichtung als Gerade in sich überführen; beim Würfel behält die Restgruppe ihr Inversionszentrum. Eine Polarisation erhält nur die Operationen, die den Pfeil in sich überführen; die Restgruppe ist polar.

11.6 Ein reales Beispiel: Bariumtitanat

Bariumtitanat $BaTiO_3$ hat oberhalb von etwa 121 °C (394 K) die kubische Perowskitstruktur: Ba auf den Ecken der Elementarzelle, Ti in ihrer Mitte, umgeben von einem Oktaeder aus sechs O-Atomen auf den Flächenmitten; Punktgruppe $m\bar{3}m$. Kühlt man den Kristall ab, rückt das Ti um etwa 0,1 Å aus der Mitte des Oktaeders heraus (Abb. 11.5). Die Schwerpunkte der positiven und negativen Ladungen fallen dann nicht mehr zusammen: Jede Zelle trägt ein elektrisches Dipolmoment, der Kristall eine **spontane Polarisation**. Zugleich verformt sich die Zelle mit der Symmetrie einer Streckung entlang dieser Richtung, allerdings nur sehr wenig: Die Winkel ändern sich um Bruchteile eines Grades, viel weniger als in den Abbildungen dieses Kapitels.

Je nach Temperatur liegt die Polarisation entlang einer der drei Blickrichtungen des Würfels, genau wie in den drei Fällen dieses Kapitels. Die Verformung allein ergäbe $4/mmm$, mmm bzw. $\bar{3}m$; die Verschiebung des Ti nimmt zusätzlich alle Operationen weg, die die Polarisationsrichtung umkehren, und führt auf die polaren Punktgruppen (Abb. 11.6). Die Phasen eines $BaTiO_3$-Einkristalls beim Abkühlen:

PHASE	TEMPERATUR	POLARISATION ENTLANG	PUNKTGRUPPE	VERFORMUNG WIE
kubisch	über 394 K (121 °C)	–	$m\bar{3}m$	Abb. 11.1
tetragonal	279 K bis 394 K (6 °C bis 121 °C)	⟨100⟩	$4mm$	Abb. 11.2
orthorhombisch	181 K bis 279 K (−92 °C bis 6 °C)	⟨110⟩	$mm2$	Abb. 11.4
rhomboedrisch	unter 181 K (−92 °C)	⟨111⟩	$3m$	Abb. 11.3

Beim Aufheizen liegen die Umwandlungstemperaturen einige Kelvin höher, bei 196 K, 285 K und 401 K.

Die Symmetrie bestimmt, welche Eigenschaften ein Kristall haben kann. Im kubischen $BaTiO_3$ hebt das Inversionszentrum jede Polarisation auf; der Kristall ist weder pyroelektrisch noch piezoelektrisch. In den polaren Phasen ist beides möglich: Erwärmen ändert die Polarisation (Pyroelektrizität), Druck erzeugt eine elektrische Spannung, und eine angelegte elektrische Spannung verformt den Kristall (Piezoelektrizität). Beim $BaTiO_3$ lässt sich die Polarisation zudem durch ein elektrisches Feld umkehren; solche Kristalle heissen **ferroelektrisch**. $BaTiO_3$ ist ein wichtiger Werkstoff für Kondensatoren, piezoelektrische Kristalle setzen elektrische in mechanische Signale um und umgekehrt, etwa in Ultraschallgebern. In der App zeigt die Infobox der Punktgruppen, ob eine Gruppe polar und ob sie piezoelektrisch ist: $m\bar{3}m$ nein, $4mm$, $mm2$ und $3m$ ja (Kapitel 5).

Die Symmetrie erklärt auch, warum Domänen entstehen: Die Polarisation kann in der tetragonalen Phase in jede der sechs gleichwertigen Richtungen ±[100], ±[010], ±[001] zeigen. Kühlt ein Kristall ab, wählen verschiedene Bereiche verschiedene Richtungen. Es entstehen **Domänen**, die durch die beim Übergang verlorenen Symmetrieoperationen ineinander übergehen, eine Art Zwillinge. Ihre möglichen Orientierungen zählt man wie oben: 48/8 = 6 tetragonal, 48/4 = 12 orthorhombisch, 48/6 = 8 rhomboedrisch, doppelt so viele wie bei der reinen Streckung (3, 6 bzw. 4), weil die Polarisation auch den Richtungssinn unterscheidet. Ein elektrisches Feld lässt die günstig orientierten Domänen wachsen.

ZUSAMMENFASSUNG

- Bei einer Verzerrung bleiben nur die Symmetrieoperationen erhalten, die auch die Verzerrung unverändert lassen; die neue Punktgruppe ist eine Untergruppe der alten.
- Der Würfel ($m\bar{3}m$) wird bei Streckung entlang ⟨100⟩ zu tetragonalem Prisma und Pinakoid ($4/mmm$), entlang ⟨111⟩ zum Rhomboeder ($\bar{3}m$), entlang ⟨110⟩ zu rhombischem Prisma und Pinakoid (mmm).
- Eine Polarisation (Pfeil) nimmt zusätzlich alle Operationen weg, die ihre Richtung umkehren, darunter das Inversionszentrum: $4mm$, $mm2$ und $3m$ sind polar.
- $BaTiO_3$ durchläuft beim Abkühlen genau diese drei polaren Phasen. Erst die niedrigere Symmetrie erlaubt Pyro- und Piezoelektrizität, und sie führt zu Domänen.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 7.3 (Rhomboeder, Sonderfall Würfel, S. 116), 9.1 (Punktgruppen als Untergruppen der Holoedrien, Tab. 9.2, Abb. 9.3, S. 127–130), 9.4 und 9.6.2–9.6.3 (polare Achsen, Piezo- und Pyroelektrizität, S. 164–172), 11.2 (Untergruppe, S. 263–265), 11.5.1.1 und 11.5.4 (Symmetrieabbau durch Verformung, Phasenübergänge, Zwillinge, S. 272–276, 288–290).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 2.8 (Rhomboeder als gestreckter Würfel, S. 86–87), 7.5 (Ferroelektrika, S. 257–263), 7.5.2 ($BaTiO_3$, Verschiebung des Ti, Domänen, S. 259–261), 7.5.5 (Streckung und Polarisation, S. 263–264).
- D. Schwarzenbach, *Kristallographie*, Springer, Berlin (2001), Abschn. 2.5.8 (Kristallsysteme; Symmetrie bestimmt die Metrik, nicht umgekehrt, S. 61).
- Phasen und Umwandlungstemperaturen von $BaTiO_3$: D. Fu, M. Itoh, in: A. Peláiz-Barranco (Hrsg.), *Ferroelectric Materials – Synthesis and Characterization*, IntechOpen (2015), Fig. 2; Punktgruppen der Phasen: P. W. Forsbergh, Phys. Rev. 76, 1187 (1949).
- Domänen und Zahl ihrer Orientierungen: K. Aizu, Phys. Rev. B 2, 754 (1970), S. 755–757; H. Schmid, J. Phys.: Condens. Matter 20, 434201 (2008), Abschn. 3.

Skript zur App „Stereographische Projektion“, Version 1.22.1. Abbildungen mit dem Code der App erzeugt; „In der App öffnen“ führt jeweils genau in diese Ansicht. Zur App · Quellcode