








## GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

### Lösung zur 3. Übung: Symmetrie einiger einfacher Körper

**Aufgabe 1:** Vgl. Tab. 1 sowie Abb. 1 (a)-(h) auf Seite 2 und 3.

**Tab. 1** Symmetrieelemente einiger Körper mit kristallographischer Symmetrie

	6	4	$\bar{4}$	3	$\bar{3}$	2	$m$	$\bar{1}$
								
Quader	—	—	—	—	—	3	3	✓
Würfel	—	3	—	—	4	6	3 + 6	✓
Oktaeder	—	3	—	—	4	6	3 + 6	✓
Tetraeder	—	—	3	4	—	—	6	—
hexagonales Prisma	1	—	—	—	—	3 + 3	3 + 3 + 1	✓

Quader: Vgl. Tab. 1 und S. 1 der Übung

Würfel und Oktaeder: Diese beiden Polyeder besitzen dieselben Symmetrieelemente bezüglich Art, Anzahl und gegenseitiger Orientierung. Vgl. dazu auch Aufgabe 2. Die vier- und zweizähligen Drehachsen sind gleichzeitig Normalen von Spiegelebenen. In Abb. 1a und 1b sind die Drehachsen und die Drehinversionsachsen beider Körper gezeigt, in Abb. 1c und 1d die Spiegelebenen. Beide Polyeder sind zentrosymmetrisch.

Tetraeder: Im Vergleich zu Würfel und Oktaeder bestehen folgende Unterschiede: Anstelle der vierzähligen Drehachsen (4), die gleichzeitig Normalen von Spiegelebenen sind, gibt es beim Tetraeder nun vierzählige Drehinversionsachsen ( $\bar{4}$ ), ohne dass senkrecht dazu Spiegelebenen vorhanden sind. Anstelle jeder Drehinversionsachse  $\bar{3}$  existiert nun eine Drehachse 3. Die Normalen der sechs Spiegelebenen im Tetraeder sind keine Drehachsen 2; diese Normalen haben aber dieselben Richtungen wie die zweizähligen Drehachsen bei Würfel und Oktaeder. Das Tetraeder besitzt kein Inversionszentrum, da die Drehinversionsachse  $\bar{4}$  kein Inversionszentrum enthält. In Abb. 1e sind die Drehachsen und die Drehinversionsachsen gezeigt, in Abb. 1g die Spiegelebenen.

Hexagonales Prisma: Es ist zentrosymmetrisch. Die Drehachse 6 und sämtliche Drehachsen 2 sind gleichzeitig Normalen von Spiegelebenen (Abb. 1f und 1h).

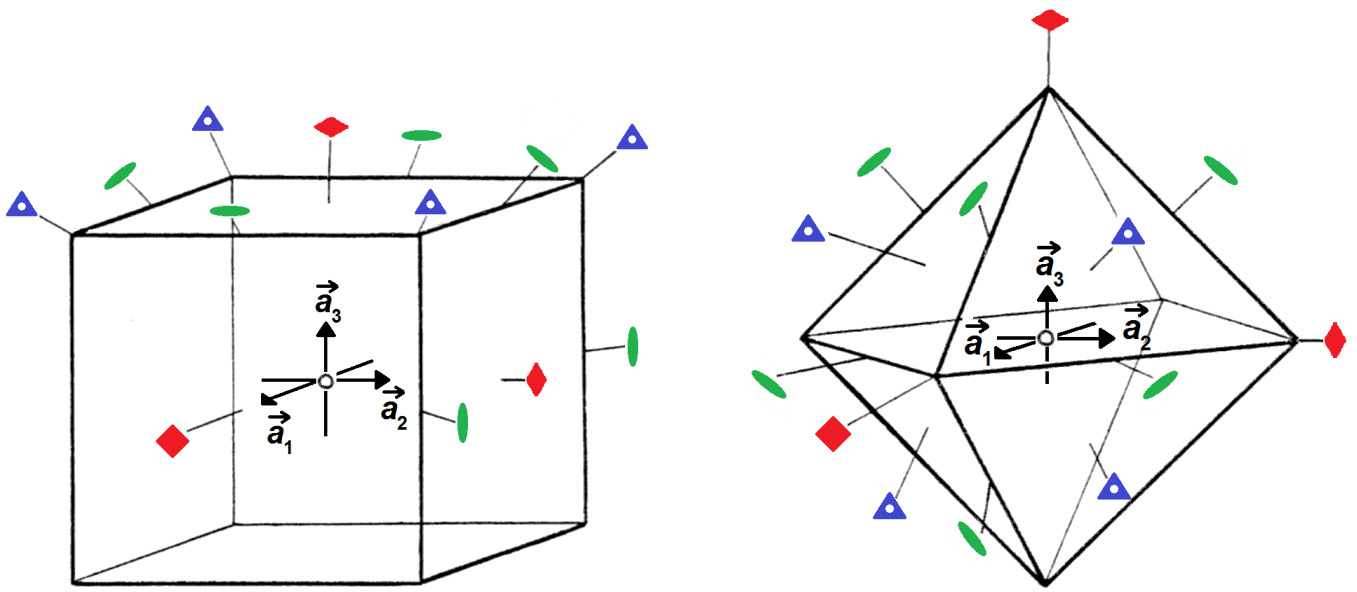
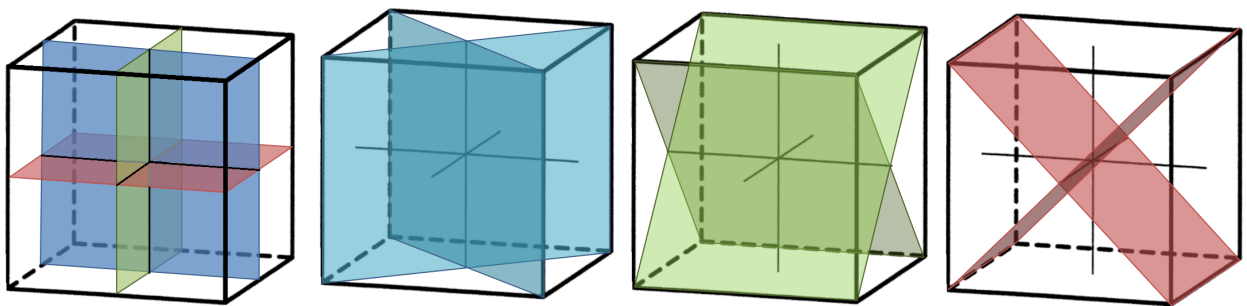
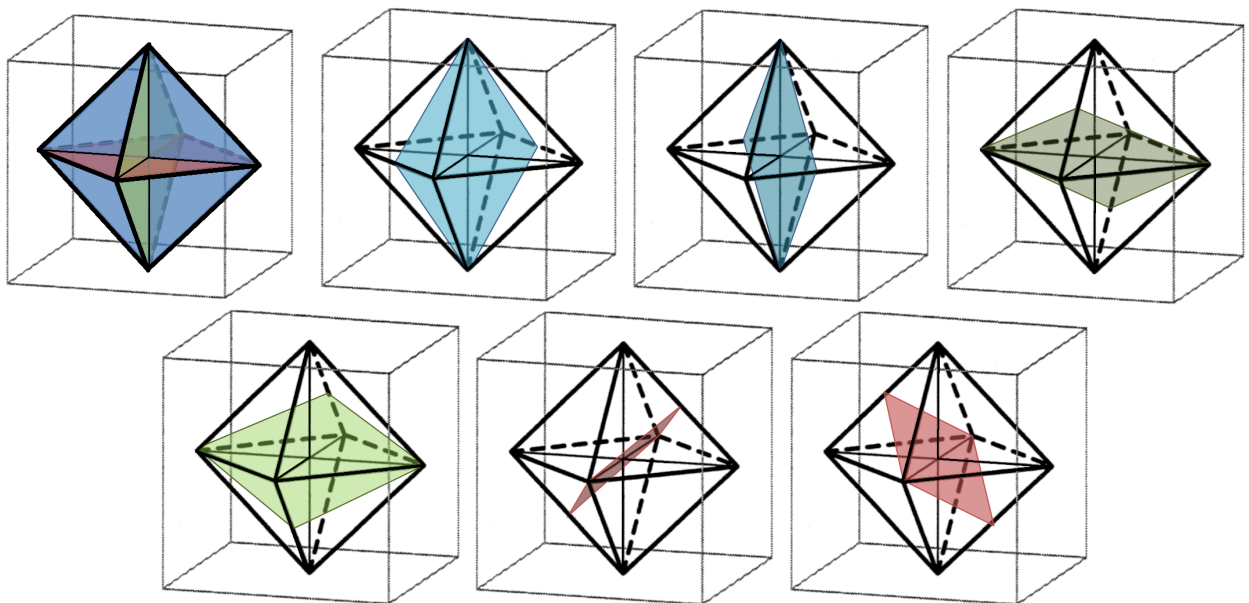


Abb. 1: (a) Würfel, Kubus, Hexaeder

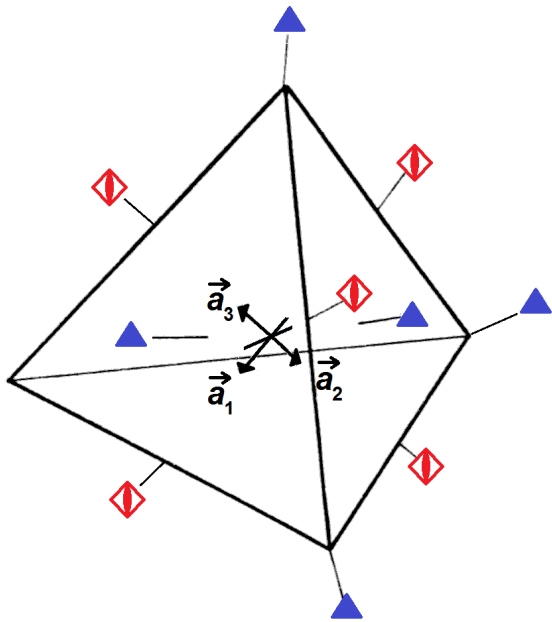
(b) Oktaeder



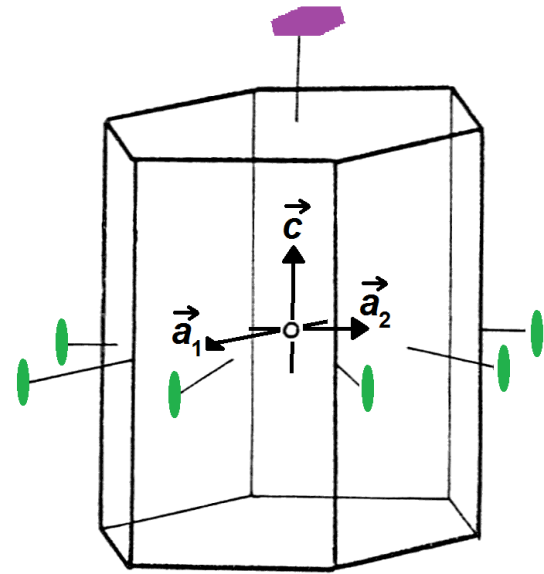
(c) Spiegelebenen im Würfel (Kubus, Hexaeder)



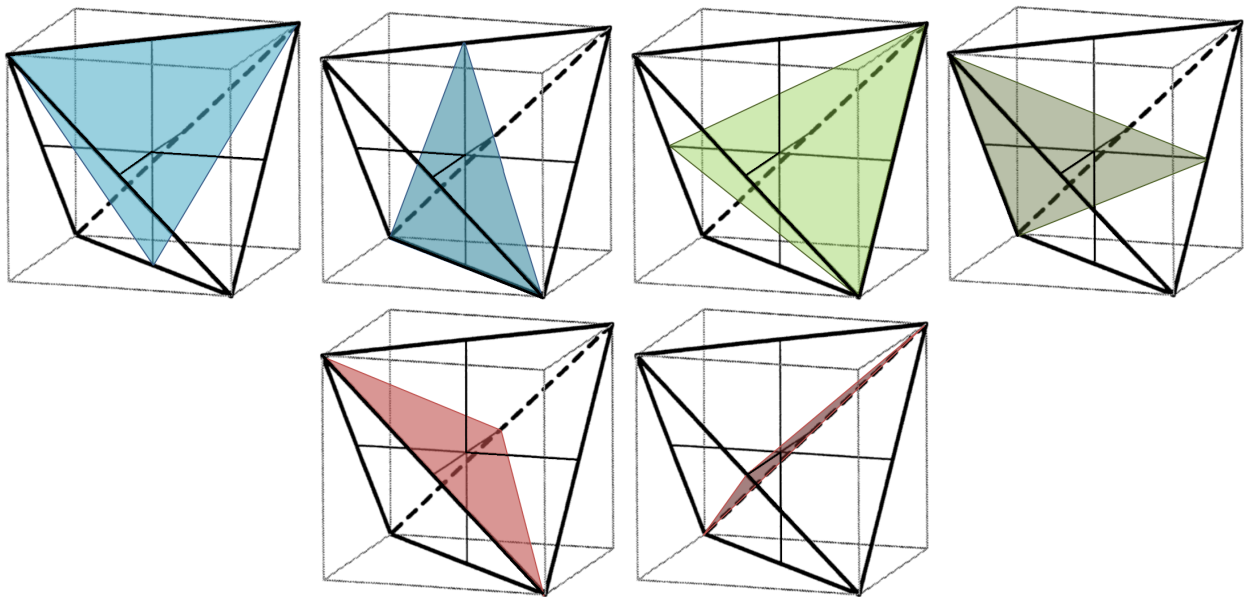
(d) Spiegelebenen im Oktaeder



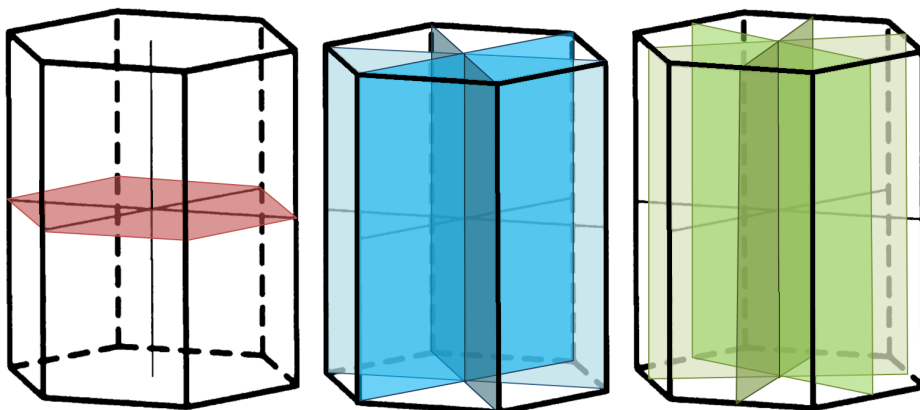
(e) Tetraeder



(f) Hexagonales Prisma



(g) Spiegelebenen im Tetraeder



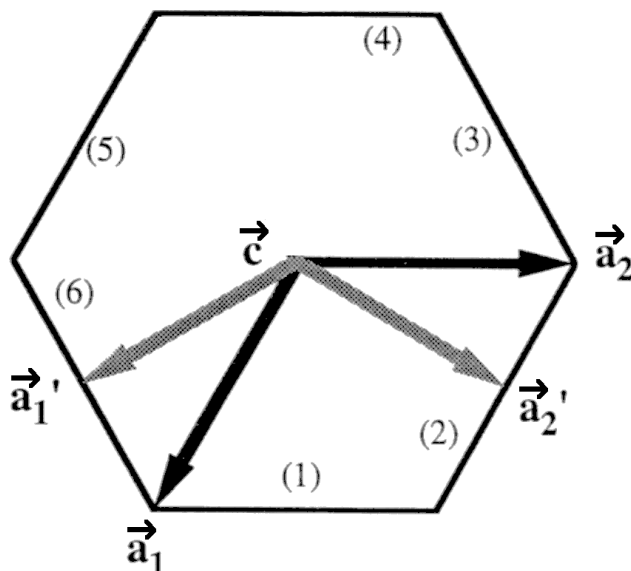
(h) Spiegelebenen im hexagonalen Prisma

## Aufgabe 2 und Aufgabe 3:

Die Richtungen  $[uvw]$  von Drehachsen bzw. Drehinversionsachsen sowie die Richtungen der Normalen von Spiegelebenen sind sogenannte Blickrichtungen oder Symmetrierichtungen. Richtung  $[uvw]$  und (antiparallele) Gegenrichtung sind für diese Zwecke gleich.

**Tab. 2** Richtungen der Symmetrieelemente einiger Körper mit kristallographischer Symmetrie

	Lage des Koordinatensystems (KS)	Symmetrieelemente und Richtungen	Begrenzungsflächen ( $hkl$ )
<b>Quader</b>	$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ in die drei aufeinander $\perp 2 \equiv$ Normalen der drei $m$ (orthorhombischen KS)	$2 \perp m: [100], [010]$ und $[001]$	Flächen: $(100)$ , $(010)$ und $(001)$ Gegenflächen: $(\bar{1}00)$ , $(0\bar{1}0)$ und $(00\bar{1})$
<b>Würfel</b>	$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ in die drei aufeinander $\perp 4 \equiv$ Normalen der drei $m$ (kubisches KS)	$4 \perp m: [100], [010], [001]$ $\bar{3}: [111], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [11\bar{1}]$ $2 \perp m: [110], [011], [101]$ , und $[\bar{1}\bar{1}0], [01\bar{1}], [\bar{1}01]$	Flächen: $(100)$ , $(010)$ und $(001)$ Gegenflächen: $(\bar{1}00)$ , $(0\bar{1}0)$ und $(00\bar{1})$
<b>Oktaeder</b>	$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ in die drei aufeinander $\perp 4 \equiv$ Normalen der drei $m$ (kubisches KS)	$4 \perp m: [100], [010], [001]$ $\bar{3}: [111], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [11\bar{1}]$ $2 \perp m: [110], [011], [101]$ , und $[\bar{1}\bar{1}0], [01\bar{1}], [\bar{1}01]$	Flächen: $(111)$ , $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ , $(1\bar{1}\bar{1})$ und $(\bar{1}\bar{1}1)$ , Gegenflächen: $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ , $(11\bar{1})$ , $(\bar{1}11)$ und $(1\bar{1}1)$
<b>Tetraeder</b>	$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ in die drei aufeinander $\perp \bar{4}$ (kubisches KS)	$\bar{4}: [100], [010], [001]$ $\bar{3}: [111], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [11\bar{1}]$ $m: [110], [011], [101]$ , und $[\bar{1}\bar{1}0], [01\bar{1}], [\bar{1}01]$	a) positives T.: $(111)$ , $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ , $(1\bar{1}\bar{1})$ , $(\bar{1}\bar{1}1)$ , b) negatives T.: $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ , $(11\bar{1})$ , $(\bar{1}11)$ , $(1\bar{1}1)$
<b>hexagonales Prisma</b>	$\vec{c} \perp 6$ ; $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ entweder in $2$ der Kanten oder in $2$ der Prismenflächen (hexagonales KS, vgl. Abb. 2)	$6 \perp m: [001]$ $2$ (Kanten) $\perp m: [100], [010], [\bar{1}\bar{1}0]$ $2$ (Flächen) $\perp m: [1\bar{1}0], [120], [\bar{2}\bar{1}0]$	Basis: $(001)$ , $(00\bar{1})$ Flächen (Abb.2): (1): $(100)$ , (2): $(010)$ (3): $(\bar{1}10)$ , (4): $(\bar{1}00)$ (5): $(0\bar{1}0)$ , (6): $(1\bar{1}0)$



**Abb. 2**

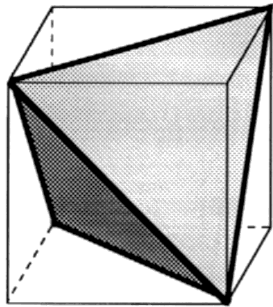
Schnitt senkrecht  $[001]$  durch ein hexagonales Prisma. Die  $\vec{a}_1$ - und  $\vec{a}_2$ -Achsen verlaufen entweder in den zweizähligen Drehachsen durch die Kantenmitten zweier sich schneidender Prismenflächen (schwarz) oder  $\vec{a}_1'$  und  $\vec{a}_2'$  liegen in den zweizähligen Drehachsen durch die Mitten der Prismenflächen (grau).  $\vec{c}$  ragt aus der Blattebene senkrecht heraus.

Ziffern in Klammern (n) bezeichnen Prismenflächen für Aufgabe 3.

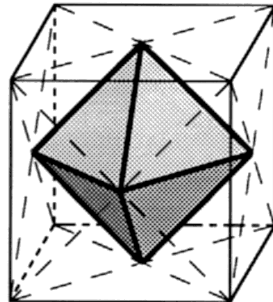
Im Rahmen dieser Lösung wird die erste Möglichkeit (schwarz) benutzt.

**Aufgabe 4:** Vgl. Abb. 3 (a) - (d).

Aus dem Würfel entsteht ein Tetraeder (Abb. 3a), indem vier Würfecken, die nicht benachbart sind, abgeschnitten werden. Jeder Schnitt führt durch die drei benachbarten Ecken. Aus dem Würfel entsteht ein Oktaeder (Abb. 3b), wenn alle acht Würfecken wie beim Tetraeder abgeschnitten werden. Um aus einem Tetraeder ein Oktaeder zu schneiden, müssen die Ecken so abgeschnitten werden, dass die Schnitte durch immer genau durch die Mitte der Tetraederkanten führen (Abb. 3c und 3d).



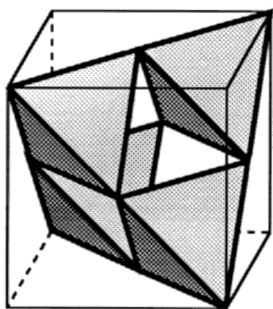
(a)



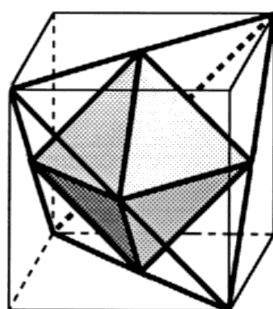
(b)

**Abb. 3**

Wie aus einem Würfel Tetraeder (a) und Oktaeder (b) „geschnitten“ werden können.



(c)



(d)

Aus einem Tetraeder werden ein Oktaeder und vier Tetraeder geschnitten:

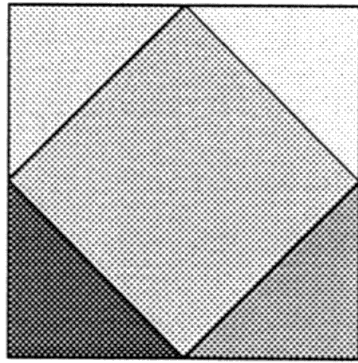
(c) Oktaeder hohl, Tetraeder schattiert;

(d) Tetraeder hohl, Oktaeder schattiert.

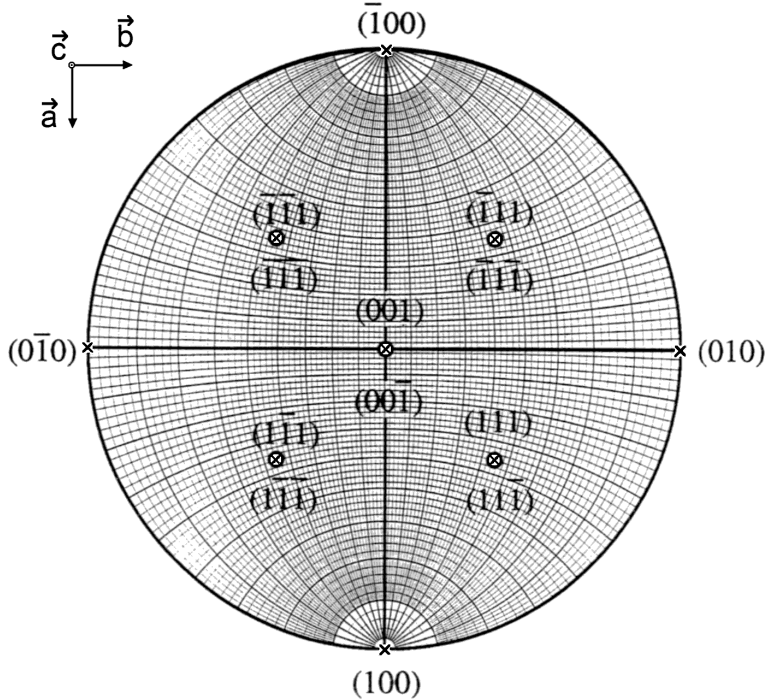
**Aufgabe 5:**

a), b) Stereogramm des Kubooktaeders (Abb. 4)

In Abb. 4a ist der Kubooktaeder entlang der  $[001]$ -Richtung gezeigt. In Abb. 4b sind der Projektionskreis und die beiden senkrecht aufeinander stehenden Geraden im Stereogramm als dünne Linien eingezeichnet. Sie stellen Hilfslinien dar. Die beiden Geraden markieren die kubischen Koordinatenachsen  $\vec{a}_1$  (positive Richtung gegen den unteren Seitenrand) und  $\vec{a}_2$  (positive Richtung gegen den rechten Seitenrand). Die positive Richtung der Achse  $\vec{a}_3$  sticht vom Mittelpunkt des Stereogramms senkrecht aus der Papierebene. Diesem rechtshändigen kubischen Koordinatensystem entsprechend sind alle Flächenpole der Flächen- oder Kristallform  $\{100\}$  (Kubus) und der Flächenform  $\{111\}$  (Oktaeder) gezeichnet und mit ihren Miller-Indizes  $(hkl)$  versehen. Sämtliche Flächenpole mit  $l = 0$  oder  $1$  sind durch Kreuze markiert, Flächen mit  $l = \bar{1}$  durch Kreise.



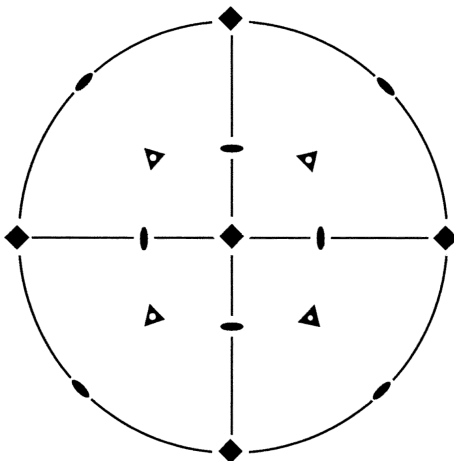
**Abb. 4 a)** Kubooktaeder als Parallelprojektion entlang  $[001]$ .



**Abb. 4 b)** Stereographische Projektion des Kubooktaeders in der Orientierung der Abb. 4a. Sämtliche Flächenpole sind indiziert. Zuerst zeichnet man die Flächenpole der Kubusflächen ein. Danach dreht man das Transparentpapier (und natürlich auch den Kubooktaeder) um  $45^\circ$  und trägt dann den angegebenen Winkel vom  $(001)$ - bzw.  $(00\bar{1})$ -Pol ausgehend auf den senkrechten und waagerechten Großkreisen ab. Dadurch erhält man die Pole der Oktaederflächen.

c) Stereogramm der Dreh- und Drehinversionsachsen des Kubooktaeders (Abb. 5).

Die Pole der Drehachsen 4 fallen mit den Flächenpolen der Flächenform (Kristallform)  $\{100\}$ , die Pole der Drehinversionsachsen  $\bar{3}$  mit den Flächenpolen der Flächen- oder Kristallform  $\{111\}$  zusammen. Für eine vollständige Projektion des Symmetriegerüsts fehlen die  $(3+6=) 9$  Spiegelebenen (vgl. auch Aufgabe 1); letztere sind in dieser Teilaufgabe der Übersichtlichkeit wegen nicht verlangt.



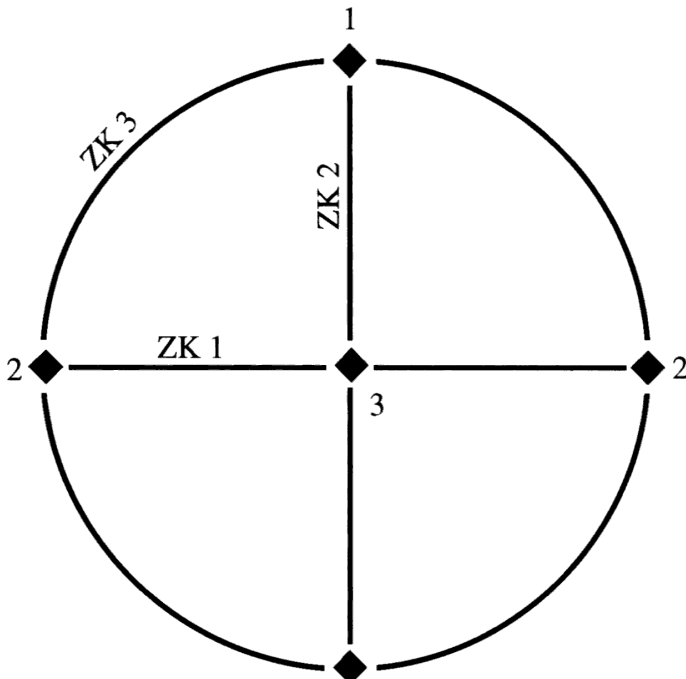
**Abb. 5**  
Stereogramm der Dreh- und Drehinversionsachsen des Kubooktaeders.

d) Ohne Abbildung

Sie *messen* mit Hilfe des Wulffschen Netzes etwas mehr als  $35^\circ$ . Rechnerisch folgt  $90^\circ - 54.74^\circ = 35.26^\circ$ .

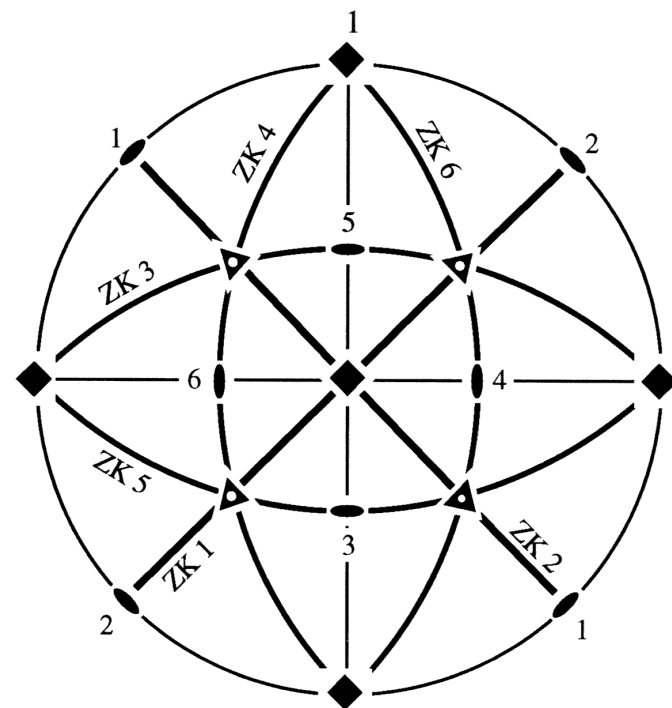
e) Vgl. Abb. 6 und 7

f) In den Zonenkreisen zu den 4-zähligen Drehachsen sind die Pole der 2- und 4-zähligen Drehachsen enthalten, in den Zonenkreisen zu den 2-zähligen Drehachsen die Pole der 2,  $\bar{3}$  und 4.  
*Bemerkung:* Wenn Sie das Stereogramm der Abb. 6 mit dem der Abb. 7 überlagern und alle Zonenkreise als Projektionen von Spiegelebenen auffassen, besitzen Sie das Stereogramm des vollständigen Symmetrierüstes des Kubooktaeders.



**Abb. 6** Drehachsen 4 und deren Zonenkreise.

ZK  $n$ : Zonenkreis zu der mit der Ziffer  $n$  bezeichneten vierzähligen Drehachse.



**Abb. 7** Zonenkreise der Drehachsen 2.

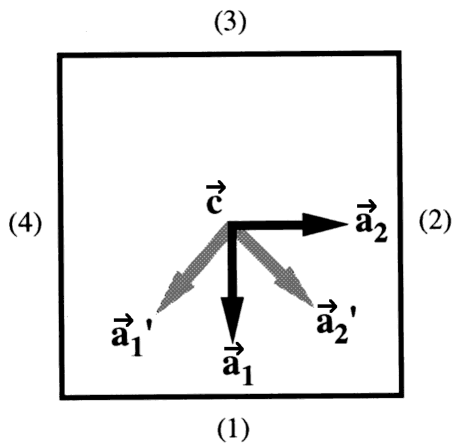
ZK  $n$ : Zonenkreis zu der mit der Ziffer  $n$  bezeichneten zweizähligen Drehachse. Außer für die Drehachsen 2 sind in diesem Stereogramm auch die Pole der Drehachsen 4 und der Drehinversionsachsen  $\bar{3}$  eingezeichnet.

### Zusatzaufgabe: Tetragonales Prisma

Kleben Sie das Polyeder aus dem beim Übungstext mitgelieferten Schnittmuster zusammen.

Die Hauptachse (Längsachse) des tetragonalen Prismas ist eine Drehachse 4 und gleichzeitig die Normale einer Spiegelebene. Senkrecht durch die Mitten je zweier paralleler Prismenflächen verläuft eine Drehachse 2. Durch die Mitten zweier gegenüberliegender Längskanten geht ebenfalls eine Drehachse 2. Es existieren also  $2 \times 2$  zweizählige Drehachsen. Sämtliche Drehachsen sind gleichzeitig Normalen auf Spiegelebenen. Das tetragonale Prisma besitzt außerdem ein Inversionszentrum  $\bar{1}$ .

Es gibt auch hier zwei Möglichkeiten, ein tetragonales Koordinatensystem in ein tetragonales Prisma zu legen (vgl. Abb. 8). In beiden Fällen wird  $\vec{c}$  in die vierzählige Drehachse gelegt. Die senkrecht zur vierzähligen Drehachse liegenden und daher symmetrisch äquivalenten Achsen  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  können entweder senkrecht auf Prismenflächen zeigen ( $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  in Abb. 3) oder, um  $45^\circ$  gedreht, gegen die Schnittkanten der Prismenflächen gerichtet sein ( $\vec{a}_1', \vec{a}_2'$  in Abb. 8).



**Abb. 8**

Schnitt durch ein tetragonales Prisma senkrecht zur vierzähligen Drehachse.  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{c}$  und  $\vec{a}_1', \vec{a}_2', \vec{c}' = \vec{c}$  sind die beiden Möglichkeiten, ein tetragonales Koordinatensystem in ein tetragonales Prisma zu legen. (1) - (4): Prismenflächen.

*Im Rahmen dieser Lösung wird die erste Möglichkeit (schwarz) benutzt.*

Richtungen  $[uvw]$  für Drehachsen und Normalen von Spiegelebenen:

- (i) Richtung der vierzähligen Hauptachse und Normalen einer Spiegelebene:  $[001]$
- (ii) Richtungen der zweizähligen Drehachsen die Prismenflächen und ebenfalls Normalen von Spiegelebenen:  $[100], [010]$
- (iii) Richtungen der zweizähligen Drehachsen durch die Prismenkanten und ebenfalls Normalen von Spiegelebenen:  $[1\bar{1}0], [110]$

Miller-Indizes  $(hkl)$  der Flächen (Prismenflächen in Abb. 8 nummeriert von (1) bis (4)):

a) Basisflächen:  $(001)$  und  $(00\bar{1})$

b) Prismenflächen: (1):  $(100)$       (2):  $(010)$       (3):  $(\bar{1}00)$       (4):  $(0\bar{1}0)$