RHEINISCH-
WESTFÄLISCHE
TECHNISCHE
HOCHSCHULE
AACHEN

Postadresse: D-52056 Aachen, Germany
Institut: Jägerstraße 17-19, D-52066 Aachen
Telefon: ++49 241 80 96900
Telefax: ++49 241 80 92184
http://www.xtal.rwth-aachen.de

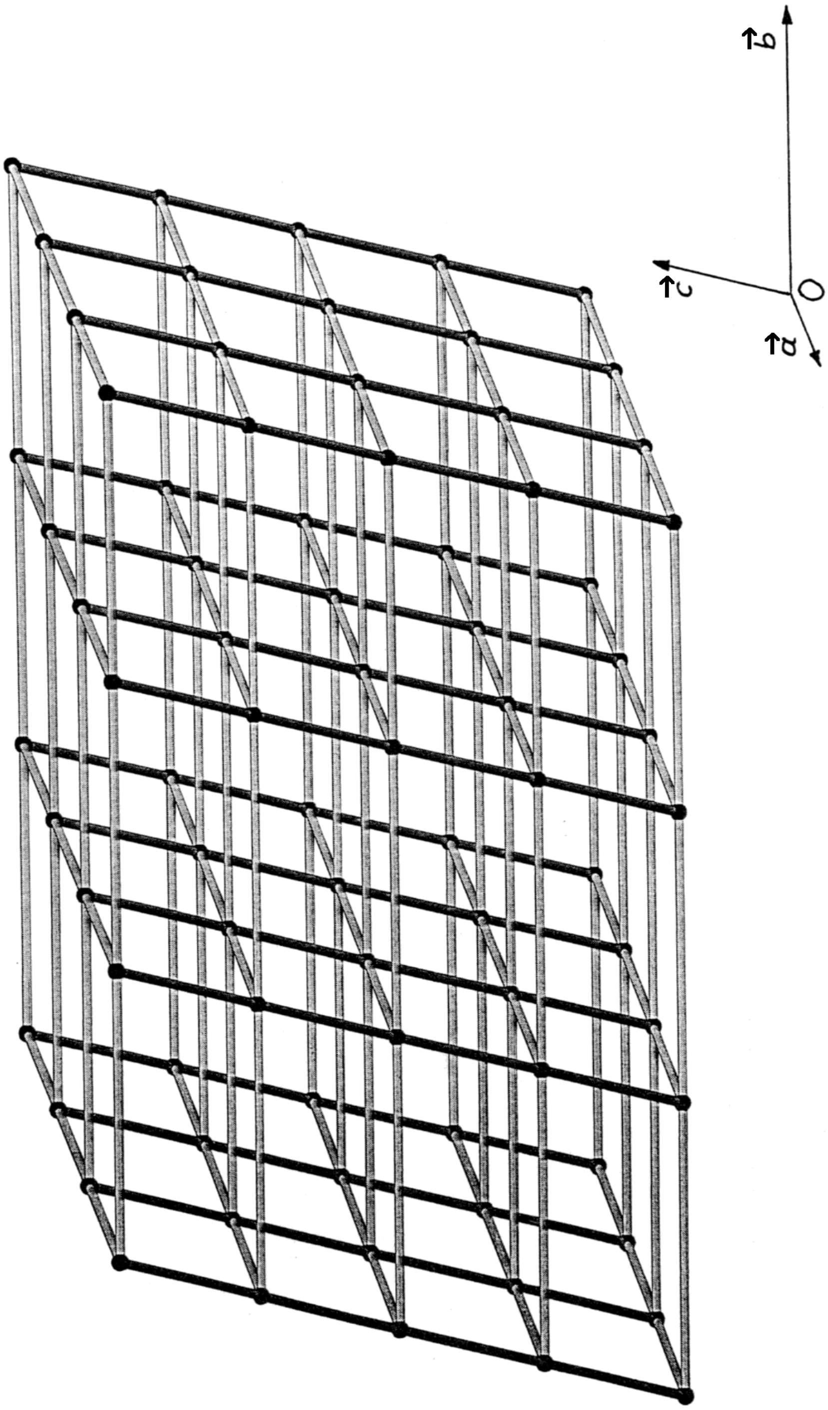
INSTITUT FÜR KRISTALLOGRAPHIE

GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

2. Übung: Richtungs- und Flächensymbole, Zonenregel, d-Werte, Bravais-Gitter

Aufgabe 1: Richtungssymbole - $[uvw]$

Zeichnen Sie in den gegebenen Ausschnitt eines triklinen Gitters (die Punkte markieren Gitterpunkte, nicht etwa Atome!) die folgenden Richtungen $[uvw]$ als Pfeile ein: $[100], [010], [001], [110], [221], [112], [11\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}2]$.



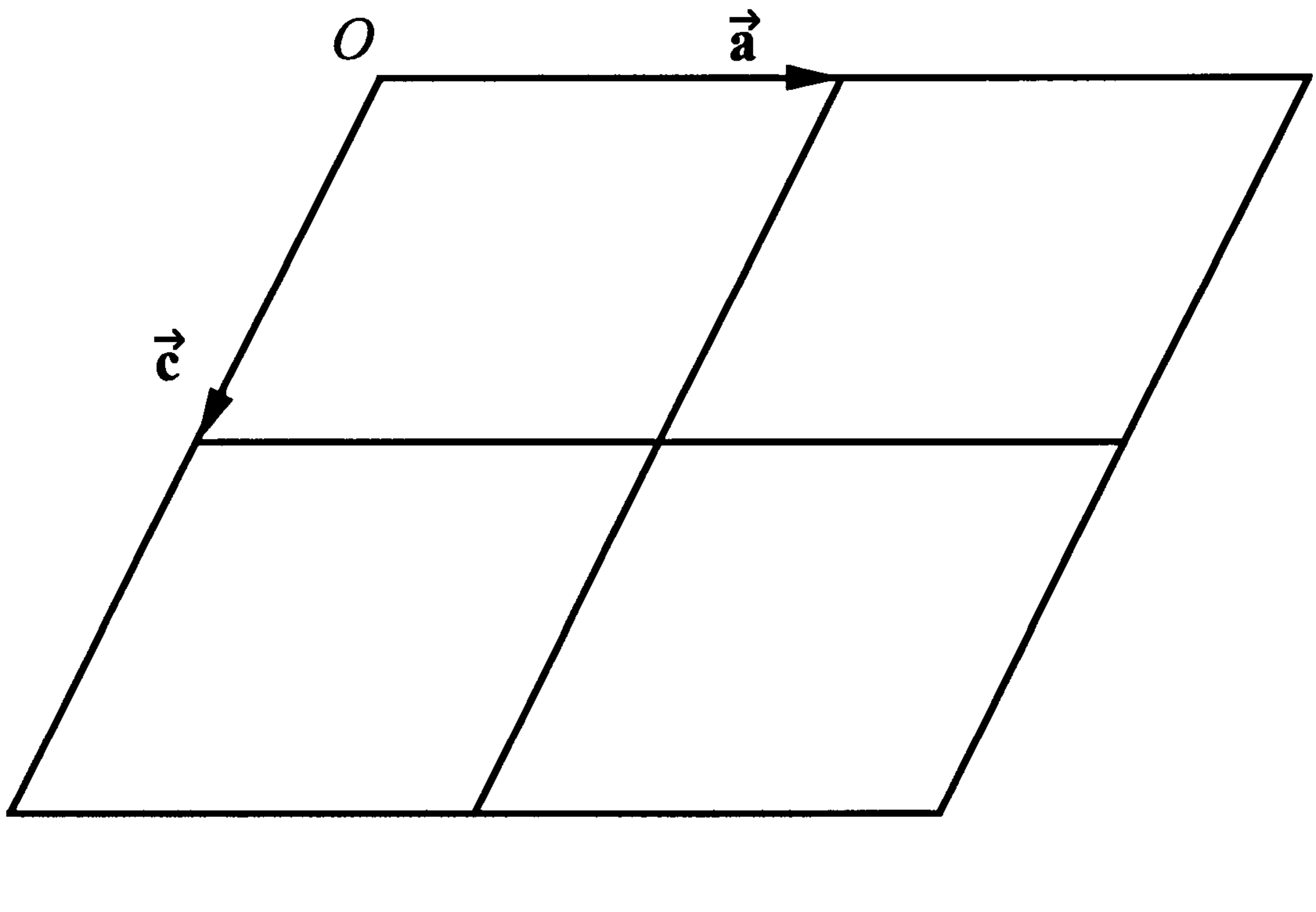
Aufgabe 2: Flächensymbole für Netzebenenscharen (Gitterebenen) im Kristall / Laue-Indizes (hkl)

Die folgende Abbildung zeigt einen Ausschnitt aus der $(\vec{a}, \vec{c})$-Ebene eines monoklinen Kristalls (a, b, c, $\alpha = \gamma = 90°$, β).

Zeichnen Sie jeweils einige Spuren der folgenden Netzebenenscharen (Gitterebenen) (hkl) ein:

$$(100), (200), (001), (101), (201), (20\bar{1}), (\bar{2}01), (\bar{2}0\bar{1}).$$

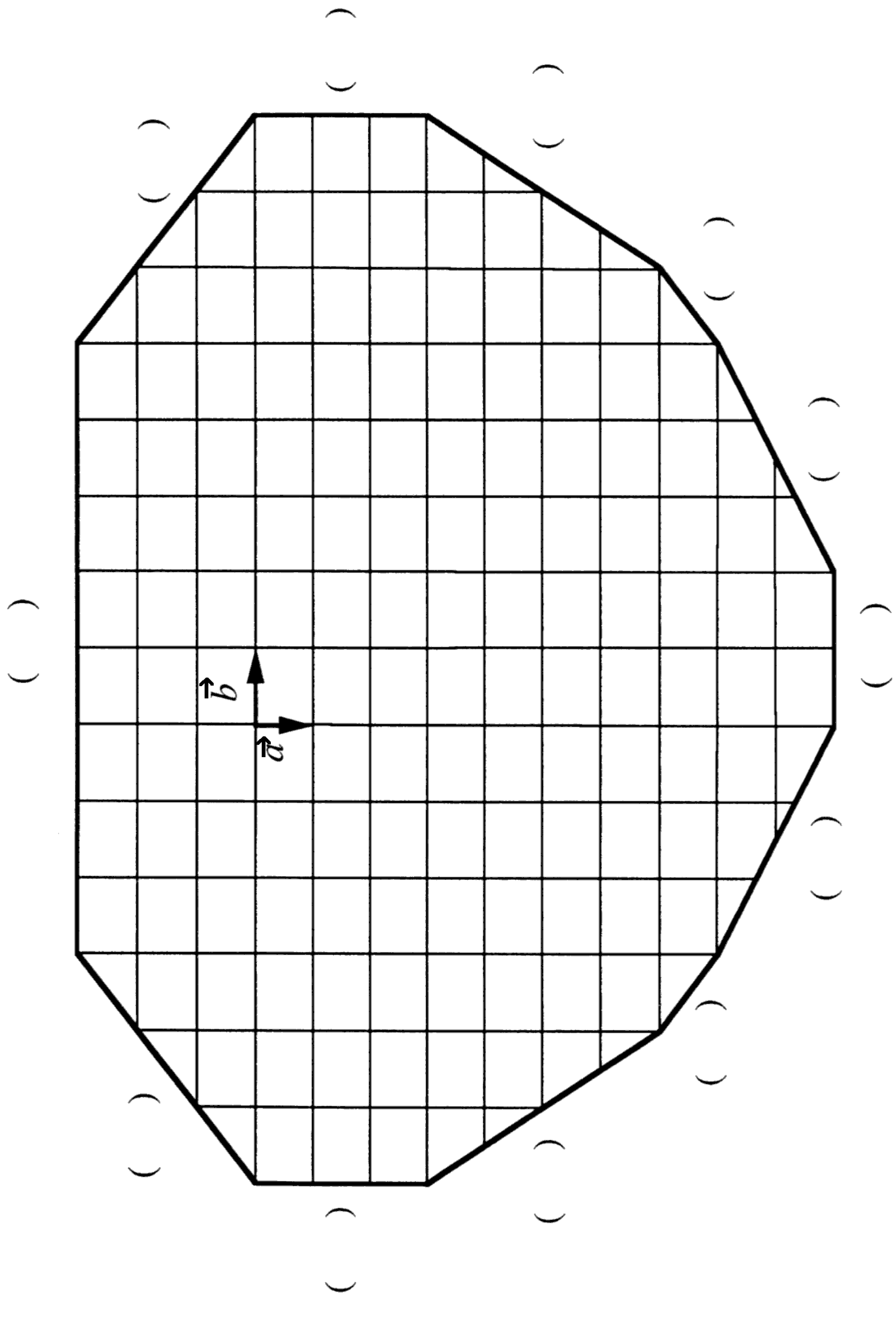
Eine Spur jeder Netzebenenschar soll durch den Ursprung laufen.



Aufgabe 3: Flächensymbole für Begrenzungsflächen eines Kristalls / Miller-Indizes (hkl)

Das folgende Bild ist als Querschnitt durch einen orthorhombischen Kristall (a, b, c, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$) zu verstehen. Sämtliche Begrenzungsflächen stehen parallel zum Basisvektor $\vec{c}$. In die Figur ist als Raster das Längenverhältnis der Gitterparameter a und b eingezeichnet. Bestimmen Sie die Miller-Indizes (hkl) der Begrenzungsflächen des gegebenen Körpers.

Hinweis: Im Gegensatz zu den Laue-Indizes von Netzebenenscharen (vgl. Aufgabe 2) sind die Miller-Indizes von Begrenzungsflächen (z.B. den *natürlichen äußeren Kristallflächen*) immer teilerfremd. Im Allgemeinen sind die Flächen (hkl) und $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ nicht äquivalent.



Aufgabe 4: Netzebenenabstände - d_{hkl}

Für rechtwinklige Gitter gilt:

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

Berechnen Sie den Netzebenenabstand d_{hkl} eines Aragonit-Kristalls (a = 4,95 Å, b = 7,96 Å und c = 5,74 Å; $\alpha = \beta = \gamma = 90°$) für folgende Netzebenen: $(100), (010), (001), (110), (101), (111), (123), (120), (220), (300)$ und (301).

Aufgabe 5: Zonenregel

Begriff der Zone:

Zone: Menge aller Ebenen, die parallele Schnittgeraden haben bzw. Menge aller Netzebenenscharen, die eine gemeinsame Gittergerade besitzen.

Flächen, die zu ein und derselben Geraden, der **Zonenachse** (oder Zonenrichtung) parallel sind, heißen **tautozonal** (Abb. 1). Ihre Flächennormalen liegen in einer Ebene senkrecht zur Zonenachse. Zonenachsen werden durch ihre Richtungssymbole $[uvw]$ dargestellt.

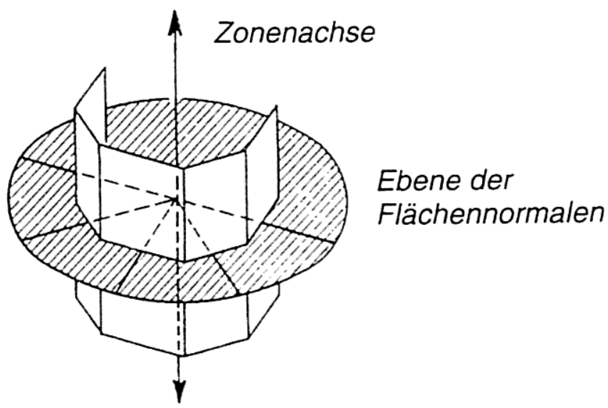


Abb. 1 Eine Zone ist eine Schar von Kristallflächen, deren Schnittgeraden parallel verlaufen. Die Zonenachse steht auf der Ebene der Flächennormalen senkrecht.

Rechenregeln:

I) Eine Ebene (hkl) gehört zur Zone $[uvw]$, wenn gilt:

$$h \cdot u + k \cdot v + l \cdot w = 0$$

II) Berechnung des Zonensymbols der durch zwei nicht-parallele Flächen $(h_1k_1l_1)$ und $(h_2k_2l_2)$ definierten Zone (Schnittkante):

$$u : v : w = \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}$$

Dabei werden die (2×2)-Determinanten folgendermaßen berechnet:

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = a \cdot d - c \cdot b$$

Merkregel zur Berechnung des Zonensymbols:
Man schreibe die Miller-Indizes wie folgt zweimal auf, trenne die beiden Randspalten ab und ermittle die Determinanten für u, v und w gemäß der angegebenen Klammerung:

$$\begin{array}{c|cccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \\ \hline & \underbrace{\qquad\quad}_{u} & : \underbrace{\qquad\quad}_{v} & : \underbrace{\qquad\quad}_{w} & & \end{array}$$

III) Berechnung der Miller-Indizes einer durch zwei gegebene, nicht-parallele Richtungen $[u_1v_1w_1]$ und $[u_2v_2w_2]$ definierten Ebene:

$$h : k : l = \begin{vmatrix} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} w_1 & u_1 \\ w_2 & u_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{vmatrix}$$

(Merkregel wie unter II)

IV) Drei Ebenen $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$, $(h_3k_3l_3)$ sind tautozonal, wenn die Determinate der 3x3-Matrix der hkl Null ist, d.h. es gilt:

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = h_1 \cdot \begin{vmatrix} k_2 & l_2 \\ k_3 & l_3 \end{vmatrix} - k_1 \cdot \begin{vmatrix} h_2 & l_2 \\ h_3 & l_3 \end{vmatrix} + l_1 \cdot \begin{vmatrix} h_2 & k_2 \\ h_3 & k_3 \end{vmatrix} = 0$$

V) Drei Richtungen $[u_1v_1w_1]$, $[u_2v_2w_2]$, $[u_3v_3w_3]$ sind komplanar (d. h. liegen in einer Ebene), wenn gilt:

$$\begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix} = 0$$

Aufgaben:

a) Welche der Flächen (111), (210), (001), (011) gehören der Zone $[1\bar{1}0]$ an?

b) Berechnen Sie das Zonensymbol $[uvw]$ der Flächen $(11\bar{1})$ und $(\bar{1}10)$.

c) Berechnen Sie die Miller-Indizes der den Zonen $[1\bar{1}0]$ und $[21\bar{1}]$ gemeinsamen Fläche.

d) Sind die Flächen (111), $(1\bar{1}1)$ und (131) tautozonal?

Aufgabe 6: Bravais-Gitter

Zeigen Sie anhand einer Skizze, daß eine C-Zentrierung im tetragonalen Kristallsystem überflüssig ist und diese Konstellation daher keines der 14 dreidimensionalen Bravais-Gitter ist.