

Einführung in die Kristallgeometrie

©2008-2025 Klaus Schilling, Speyer

Erste Folie (Titel):

Die Präsentation zeigt keine wissenschaftliche Ausarbeitung. Es ist ein Versuch, dem Thema den Nimbus der Wissenschaftlichkeit zu nehmen und mit Bildern die Kristallgeometrie - wie hier im Titel am Beispiel Albit gezeigt - in den Blickwinkel von Sammlern zu rücken.

Zweite Folie (Ziel der Einführung):

Ziel der Einführung soll sein, die Begriffe:

- Kristall,
- Kristallgitter,
- Kristallelemente,
- Millersche Indizes,
- Kristallklasse und
- Kristallsystem anschaulich zu machen und

an ausgesuchten Beispielen die

- Kristallmorphologie zu beschreiben.

An dieser Stelle möchte ich mich bei den Fotografen bedanken, die mir Ihre Bilder uneigennützig für diese Ausarbeitung zur Verfügung gestellt haben. Alle Bilder sind mit den Namen der Fotografen versehen.

Dritte Folie (Kristalle):

Kristalle sind feste Körper

Diese Definition soll als roter Faden für die nachfolgende Erläuterung dienen.

Als Stellvertreter für die Vielzahl der Mineralien steht hier der Albit. Die hier am Beispiel Albit gezeigten Gesetzmäßigkeiten gelten sinngemäß für alle Kristalle.

- In der Literatur findet man Werte zu den Winkeln Alpha, Beta und Gamma sowie den Gitterkonstanten a_0 , b_0 und c_0 . Diese Daten beschreiben die Form der Elementarzelle. Die Elementarzelle ist der kleinste Baustein für die dreidimensionale Anordnung
- Im linken animierten Bild ist die dreidimensionale - lückenlose - Anordnung der Bausteine simuliert.
- Diese Anordnung führt auch - wenn die Elementarzelle als Gitterzelle betrachtet wird - zum Kristallgitter.

Das Kristallgitter ist die Grundlage für die Kristallgeometrie.

Ein Blick in die Geschichte der Kristallographie:

René Just Haüy (1743-1826, Paris) gilt als Vater der Betrachtungsweise vom Aufbau der Kristalle aus Bausteinen - Elementarzellen. Er nennt die Zellen integrierende Moleküle.

Die Legende berichtet, dass die entscheidende Idee geboren wurde, als ihm ein Kalkspat aus den Händen glitt und am Boden in eine Vielzahl verschieden große rhomboederförmige Spaltstücke zerbrach. Daraus resultiert die Frage: Wie weit kann man Mineralien spalten, ohne dass diese Spaltstücke ihre mineralspezifischen Eigenschaften verlieren?

⁽¹⁾ P. Rahmdohr, H. Strunz (Nachdruck 1980) Klockmans Lehrbuch der Mineralogie, Stuttgart Enke, Seite 3

⁽²⁾ Klockmann(1980) Seite 779

Vierte Folie (Raumgitterprinzip):

Das Raumgitterprinzip

Im linken Bild ist die Korrespondenz zwischen den Elementarzellen und den Kristallflächen sowie Kristallkanten dargestellt.

- Im animierten Bild wird das Raumgitterprinzip simuliert. Die Simulation zeigt, dass jede Kristallfläche in Knotenpunkten des Gitternetzes liegt. Hier wird auch das Rationalitätsgesetz anschaulich. Rational bedeutet sinngemäß in der Kristallgeometrie ganzzahlig - frei übersetzt: in ganzen Schritten. Schrittweiten sind dabei die Abstände zwischen den Knotenpunkten.

Jede Kristallfläche verläuft parallel zu

⁽³⁾ Klockmann (1980) Seite 3

⁽⁴⁾ Borchardt-Ott (1977) Kristallographie: Einführung für Naturwissenschaftler. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, Seite 29

Fünfte Folie (Kristallelemente):

Um die Kristallflächen mathematisch beschreiben zu können, ist ein Koordinatensystem erforderlich.

- Konvention: Das System ist so aufgestellt, dass die positive Z-Achse nach oben, die positive Y-Achse nach rechts und die X-Achse nach vorn zum Betrachter zeigt.
- Heute wird die Achseneinteilung mit den so genannten Gitterkonstanten, die aus röntgenographischen Messungen ermittelt werden, festgelegt. Daraus lässt sich auch ein so genanntes strukturelles (von der Kristallstruktur abgeleitetes) Achsenverhältnis ermitteln.

Hinweis zur Konvention: Die Seite a_0 der Elementarzelle liegt parallel zur X-Achse, die Seite b_0 parallel zur Y-Achse und die Seite c_0 parallel zur Z-Achse.

- Die Alten konnten den Kristall nur von außen studieren. Wie haben Sie die Achsenteilung festgelegt?
- Traditionell wurde die Achsenteilung als Achsenverhältnis $a:b:c$ bezogen auf die Einheitsfläche mit den Indizes (111) angegeben - ermittelt aus Winkelmessungen, die man am Kristall durchgeführt hat. Die Teilung auf der Y-Achse ist hierbei mit eins festgelegt und die Teilung auf den beiden anderen Achsen relativ dazu angegeben.
- Das strukturelle und das morphologische Achsenverhältnis sind im Allgemeinen gleich.

Ausnahmen!!!

Auch die von Borchardt-Ott vorgeschlagene normierte Schreibweise zeigt den Zusammenhang zwischen dem morphologischen und strukturellen Achsenverhältnis.

- Der Winkel alpha liegt zwischen
- Christian Samuel Weiss führt 1809 das Verhältnis $a:b:c$ und die Systemwinkel α , β und γ den Begriff Kristallelemente ein.⁽⁶⁾ Die Kristallelemente sind mineralspezifische

Mit den Kristallelementen ist ein Koordinatensystem für jedes Mineral gegeben.

⁽⁵⁾ Borchardt-Ott(1997) Seite 51, 127

Sechste Folie (Kristallsysteme):

Ein kurzer Blick in die Geschichte.

Christian Samuel Weiss (1780-1856, Prof. 1808 Leipzig, 1810 Berlin) und Friedrich Mohs (1773-1839, Prof. 1812 Graz, 1817 Freiberg, 1826 Wien) fanden unabhängig voneinander die sieben Kristallsysteme zur Abbildung von Kristallen in Koordinatensystemen.

Die geometrische Form aller Elementarzellen (Bausteine) ist ein Spat (Parallelfach, Parallelepipet, Parallelepipetion). Nur in solch einer Form sind die Bausteine lückenlos räumlich anzuordnen. Im triklinen System steht der Spat in allgemeiner Form mit variablen Kantenlängen und Winkeln.

Die sieben Kristallsysteme sind vereinfacht betrachtet, die möglichen Gitter mit einer Form je Gitterzelle wie dem allgemeinen Spat im triklinen System oder seinen Sonderformen bis hin zum Würfel im kubischen System.

⁽⁶⁾ Klockmann (1980) Seite 18

Siebte Folie (Millersche Indizes):

6

Man nennt (hkl) die Millerschen Indizes⁽⁷⁾

Eingeführt 1839 durch William Hallowes Miller (1801-1880, Prof. 1832 Cambridge). Hier der Versuch einer anschaulichen exemplarischen Ableitung.

- In jedem Oktanten des Achsenkreuzes sind
- 1. Fall:
- Regel: Das Achsenverhältnis
- 2. Fall:
- 3. Fall:
- Im animierten Bild sind drei parallele Flächen mit unterschiedlich langen Achsenabschnitten dargestellt.
- Das Achsenverhältnis für diese drei Flächen aufgestellt.
- Die daraus ermittelten Indizes (hkl) lauten für alle drei Flächen gleich 4:6:3.

Die Erkenntnis daraus: Die Millerschen Indizes gelten unabhängig von der Kristallgröße und beschreiben eine unendliche Zahl von parallelen Kristallflächen.

- Die Faktoren zeigen die Kristallgröße an oder können auch als die Anzahl der Materialschichten, vom Ursprung aus gezählt, betrachtet werden.

Hier wird das Rationalitätsgesetz wieder anschaulich. Im Bild teilen die Kristallflächen auf den Kristallsystemachsen nur ganzzahlige Achsenabschnitte.

⁽⁷⁾ Borchardt-Ott(1997) Seite 14

Achte Folie (Indizes am Beispiel Zirkon):

Als Beispiel für die weitere Betrachtung ein Zirkon - passend zur Ausbildung des Kristalls auf dem Foto mit zwei Kristallformen idealisiert gezeichnet. Die Kristallelemente sollen hier sein: $a:c = 1:0.901$; $\alpha, \beta, \gamma = 90^\circ$.

- Die Abbildung zeigt den Zirkon als Idealkristall im Achsenkreuz.

In den weiteren Schritten sollen die Millerschen Indizes für vier Kristallflächen abgeleitet werden.

- Die erste Fläche, bis zu den Systemachsen erweitert, trennt auf der positiven a-Achse einen Achsenabschnitt von 4 Einheiten und auf der c-Achse von 12 Einheiten ab und liegt zur b-Achse parallel. Dazu die Ableitung der Indizes
- Die zweite Fläche trennt auf der b-Achse vier Einheiten und auf der c-Achse zwölf Einheiten ab und liegt zur a-Achse parallel. Dazu die Ableitung der Indizes
- Die dritte Fläche trennt auf der negativen a-Achse vier Einheiten und auf der c-Achse 12 Einheiten ab und liegt zur b-Achse. Dazu die Ableitung der Indizes
- Die vierte Fläche trennt auf der negativen b-Achse vier Einheiten und auf der c-Achse 12 Einheiten ab und liegt zur a-Achse parallel. Dazu die Ableitung der Indizes

Der negative Achsenabschnitt wird in die Ableitung auch negativ eingeführt und der daraus resultierende Index mit einem Strich über dem Index als negativ gekennzeichnet.

Die gleichwertigen Flächen im negativen Bereich der c-Achse erhalten die gleichen Indizes, wobei jedoch der dritte Index als negativer Index anzugeben ist.

Runde Klammern kennzeichnen die Indizes
 Geschweifte Klammern kennzeichnen

Neunte Folie (Deckoperation Spiegelung): 8

In den drei Bildern ist ein gleiches Ebenmaß (mit kleinen Unebenheiten) zu sehen.

- In jedem Bild tritt das Ebenmaß Symmetrieebene oder Spiegelebene m auf.

Ein Blick in die Geschichte:

Haüy gilt auch als Entdecker des Symmetriegesetzes an Kristallen. Dieses Gesetz hat Johann Friedrich Christian Hessel (1796-1872, Prof. 1821 Marburg) 1819 in einer Übersetzung als „Haüys Ebenmaaßgesetz“ bezeichnet. Frei zitiert lautet das Gesetz: Kristalle können durch bestimmte Bewegungen in ihrer Lage verändert werden - wobei das Abbild jedoch gleich bleibt.

- Dazu nun die Betrachtung in der Kristallgeometrie am Beispiel Beryll.
- Im animierten Bild wird der über der Spiegelebene liegende obere Teil des Berylls durch eine Symmetrieeoperation (Deckoperation) nach unten gespiegelt. Sinngemäß wird der untere Teil nach oben gespiegelt. Dabei ist zwar die Lage des Kristalls verändert. Er erscheint im Bild jedoch unverändert
- Im Symmetriegerüst sind die Spiegelebenen am Beryll für alle möglichen Symmetrieeoperationen durch Spiegelung (Deckoperationen) zusammengefasst.

Zehnte Folie (Deckoperation Drehung):

Zum zweiten einfachen Ebenmaß vier Bilder.

- Auf allen Bildern ist eine Drehachse als Symmetrieelement auszumachen. Verschieden ist die Anzahl bzw. Schrittweite der Drehoperationen, die wieder zur Deckung der Abbildung führt. In der Kristallographie wird diese Anzahl als Zähligkeit bezeichnet.
- Dargestellt sind hier 1-, 2-, 3- und zwölfzählige Drehachsen.
- Dazu ein Apophyllit als Stellvertreter aus der Mineralienwelt.

Im animierten Bild ist die Symmetrieoperation mit einer vierzähligen Drehachse[001] dargestellt. Der Kristall kommt nach jeder Drehung mit dem Winkel $360/4=90^\circ$ zur Deckung.

- Im Symmetriegerüst sind die weiteren Drehachsen am Apophyllit und deren Lage im Koordinatensystem dargestellt.

Nun ist theoretisch eine unendliche Zähligkeit für eine Drehachse möglich – denkbar an einer kreisförmigen Scheibe.

In der Kristallgeometrie stellt sich daher die Frage: welche Zähligkeit können die Drehachsen an Kristallen annehmen?

Das Raumgitterprinzip fordert eine lückenlose Anordnung der Bausteine eines Kristalls.

- Dazu sollen acht Formen in einer Ebene (zweidimensional) mit je einer zweizähligen bis achtzähligen Drehachse betrachtet werden.
- Das geforderte lückenlose Gefüge bieten nur Rechtecke, gleichseitige Dreiecke, Quadrate und regelmäßige Sechsecke.

Es sind nur 2-, 3-, 4- und sechszählige Achsen möglich.

Hinweis: Eine einzählige Achse ist hier ohne Bedeutung, da die Lage des Kristalls und seine Abbildung nach einer Deckoperation mit einer einzähligen Achse gleich bleiben.

Elfte Folie (Deckoperation Drehung):

Zum dritten einfachen Ebenmaß zwei Bilder.

- Auf allen Bildern ist ein Inversionszentrum als Symmetrieelement auszumachen.
- Ein Inversionszentrum wird in der Kristallographie mit einem i oder 1_{quer} als einzählige Dreh-Spiegelachse gekennzeichnet.
- Verbindet man am Beispiel Albit alle Eckpunkte von parallelen Kristallflächen z.B.: (110) und $(-1-10)$ mit einander, dann treffen sich die Verbindungslinien in einem Punkt – dem Inversionszentrum.

Sinngemäß kann man Inversion auch als Punktspiegelung übersetzen.

Zwölfte Folie (Kristallklassen):

Die Ableitung aller möglichen

- In jeder Kristallklasse (Symmetrieklasse) sind

Die Symmetrie jeder Kristallklasse gilt für die Kristallmorphologie und in gleicher Weise für Untersuchungen der Kristallsstruktur.

- Zusammengefasst soll es hier ausreichen, dass es hochsymmetrische bis niedersymmetrische Klassen gibt. Werden zum Beispiel in der höchstsymmetrischen Klasse mit einer gegebenen allgemeinen Fläche die möglichen Symmetrieelemente der Klasse durchgeführt, dann entsteht eine Kristallform mit 48 Kristallflächen. In der Klasse mit der geringsten Symmetrie entspricht eine Kristallfläche einer Kristallform da in dieser Klasse als Symmetrieelement nur eine einzählige Drehachse auftritt.

Es genügt also für die Beschreibung einer vollständigen Kristallform nur eine Kristallfläche und die Kristallklasse anzugeben.

⁽⁸⁾ Klockmann (1980) Seite 11

Dreizehnte Folie (Kristallformen):

Hier nun exemplarisch die Anwendung der Symmetrieelemente.

- Als Stellvertreter aus der Mineralienwelt ein Fluorapatit. Den Fluorapatit findet man in der Literatur der hexagonalen-dipyramidalen Kristallklasse (internationales Kurzzeichen $6/m$)⁽⁸⁾ zugeordnet. In dieser Klasse ist ein Symmetriegerüst mit einer sechszähligen Drehachse und einer Spiegelebene gegeben.
- In den beiden animierten Bildern wird die Symmetrieelemente Drehachse und Spiegelebene simuliert.

Führt man mit dem Symmetrieelement Drehachse eine entsprechende Symmetrieelementoperation - im Bild mit der Fläche (100) oder (-110) durch, dann erhält man alle Kristallflächen der Kristallform, der die vorgegebene Fläche angehört – im Beispiel das Prisma $\{100\}$.

Sinngemäß gilt das gleiche für die Symmetrieelementoperation durch Spiegelung. Wird die Fläche (001) vorgegeben, dann entsteht durch Spiegelung die zweite Kristallfläche zum Pinakoid $\{001\}$.

Nach den Symmetriegesetzen sind alle Flächen einer so ermittelten Kristallform geometrisch und physikalisch gleichwertige Flächen oder als Merksatz:

- Eine Menge von äquivalenten Flächen nennt man Kristallform.⁽⁹⁾

Im Beispiel entsteht bei den beiden dargestellten Symmetrieelementoperationen nur eine offene Kristallform.

- Die beiden offenen Kristallformen Prisma $\{100\}$ und Pinakoid $\{001\}$ kombiniert bilden einen geschlossenen Kristallkörper als Idealkristall.

Auch in der Natur sind nur geschlossene Kristallkörper – wenn auch zumeist verzerrt – möglich.

Ausgebildete Kristallformen sind auch Bestimmungshilfen. Zum Beispiel können an Stufen die Kristallformen auf Pyrit oder Markasit hinweisen.

⁽⁹⁾ Klockmann (1980) Seite 635

⁽¹⁰⁾ Borchardt-Ott (1997) Seite 135

Vierzehnte Folie (Formen kombinieren):

In jeder Kristallklasse lassen sich über die Symmetrieelemente sieben Grund-Kristallformen ableiten.

Dargestellt am Calcit in der ditrigonalen - skalenooedrischen Klasse - das positive und negative Skalenooeder, die hexagonale Dipyramide, das negative und positive Rhomboeder, das dihexagonale Prisma, das hexagonale Prisma in erster und zweiter Stellung und das Basispinakoid.

Positive und negative Kristallformen lassen sich durch eine Drehung um eine Systemachse (in diesem System 60° um c) ineinander überführen. Sie unterscheiden sich nur in ihrer Stellung im Koordinatensystem.

Die Ableitung der Formen verbleibt als Hausaufgaben.

Welche Kristallformen sind an den Kristallen im Bild vorhanden? Da die Kristalle nicht als Kristallform gegeben sind, ist hier offensichtlich eine Kombination abgebildet.

- In dieser Kristallklasse ist es sinnvoll, sich im ersten Schritt für einen Rhomboeder zu entscheiden. Zuerst sei ein positiver Rhomboeder $\{102\}$ die Wahl. Im zweiten Schritt wird ein Prisma gesucht das die Ecken des Rhomboeders bricht.
- Das kann nur das Prisma in erster Stellung.
- Die beiden Formen kombiniert ergeben eine denkbare Kombination für die abgebildeten Kristalle.
- **Transparenz bei Rhomboeder und Prisma ausschalten.**
- Für einen zweiten Versuch soll zu Beginn das negative Rhomboeder $\{012\}$ stehen.
- Wie zuvor wird ein Prisma gesucht das die Ecken des Rhomboeders bricht.
- Auch hier kann das nur das Prisma in erster Stellung.
- Diese Kombination ist mit der Kombination im ersten Versuch geometrisch gleich. An den Kombinationen sind jedoch verschiedene Kristallformen vorhanden.

Welche der beiden Kombinationen nun für die Kristalle im Bild zutrifft, kann nur mit weiteren Merkmalen wie Spaltrisse, Flächenstreifung, Kristallwinkel, Literatur bestimmt werden.

⁽¹¹⁾ Klockmann (1980) Seite 69

Fünfzehnte Folie (Schluss):

Danke für Ihre Aufmerksamkeit.