Zeitschrift: Schweizerische mineralogische und petrographische Mitteilungen = Bulletin suisse de minéralogie et pétrographie

Band: 43 (1963)

Heft: 1: Festschrift Robert L. Parker : zu seinem 70. Geburtstag : 1. Mai 1963

Artikel: Zur Topologie, Metrik und Symmetrie der einfachen Kristallformen

Autor: Niggli, Alfred

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-33435

Zur Topologie, Metrik und Symmetrie der einfachen Kristallformen

Von *Alfred Niggli* (Zürich)[1])

Mit 3 Tabellen

Zusammenfassung

Die einfachen Kristallformen werden vom topologischen, metrischen und symmetrischen Standpunkt aus charakterisiert. Dabei zeigt sich, dass es
— 30 topologisch verschiedene Formen, wovon 17 geschlossene und 13 offene,
— 47 metrische Sorten der Kristallformen nach B. Delaunay (+ 9 mit kristallographischer Symmetrie verträgliche nichtkristallographische Formen), wovon 30 (+ 5) geschlossene und 17 (+ 4) offene,
— 164 (+ 16) Symmetriefälle einfacher Formen, wovon 75 (+ 6) geschlossene und 89 (+ 10) offene

gibt. Am Rande werden auch die nichtkristallographischen Formen endlicher Flächenzahl behandelt.

Abstract

The simple crystal-forms are characterized with respect to the topology, metrics and symmetry viewpoints. There are
— 30 topologically different forms, whereof 17 closed and 13 open ones;
— 47 metric kinds of crystal forms after B. Delaunay (+ 9 non-crystallographic forms, compatible with crystallographic symmetry), whereof 30 (+ 5) closed ones and 17 (+ 4) open ones;
— 164 (+ 16) symmetry cases of simple forms, whereof 75 (+ 6) closed ones and 89 (+ 10) open ones.

Incidentally, the non-crystallographic forms with finite number of faces are mentioned as well.

1. Einleitung

Die Bemerkung von B. Delaunay in seinem an der Münchener Gedenktagung „Fünfzig Jahre Röntgeninterferenzen" 1962 verlesenen Referat, dass es 47 einfache Kristallformen gebe, regte den Verfasser dazu an, diese jedem Kristallographen geläufigen Formen einmal näher vom Standpunkt der Topologie, der Metrik und der Symmetrie zu betrachten.

[1]) Institut für Kristallographie und Petrographie der Eidgenössischen Technischen Hochschule und der Universität Zürich.

Tabelle 1.1. *Topologische Kennzeichnung der einfachen Kristallformen*

Nr.	*Isoedrische Polyeder* geschlossen / offen	Topologische Kennzeichnung F	∅	K	e_3	e_4	e_5	e_6	e_8	e_{12}	E	Symbol	*Isogonale Polyeder* regulär / halbregulär
1	Pedion	1		0							0		(Punkt)
2	Pinakoid	2		0							0		(Strecke)
3	Sphenoid-Doma	2		1							0		(Strecke)
4	trig. Prisma	3		3							0		(gleichseit. Dreieck)
5	trig. Pyramide	3		3	1						1		(gleichseit. Dreieck)
6.1	orthorhomb. Prisma	4		4							0		
6.2	tetr. Prisma												(Quadrat)
7.1	mkl.-orthorhomb. Pyramide	4		4		1					1		
7.2	tetr. Pyramide												(Quadrat)
8.1	orthorhomb. Bisphenoid	4	3	6	4						4	3^3	
8.2	tetr. Bisphenoid												
8.3	Tetraeder												Tetraeder
9.1	ditrig. Prisma	6		6							0		
9.2	hex. Prisma												(reg. Sechseck)
10.1	ditrig. Pyramide	6		6				1			1		
10.2	hex. Pyramide												(reg. Sechseck)
11	trig. Bipyramide	6	3	9	2	3					5	3.4^2	trig. Prisma
12.1	trig. Trapezoeder	6	4	12	8						8	3^4	
12.2	Rhomboeder												
12.3	Hexaeder												Oktaeder
13.1	ditetr. Prisma	8		8							0		
13.2	(oktag. Prisma)												(reg. Achteck)
14.1	ditetr. Pyramide	8		8					1		1		
14.2	(oktag. Pyramide)												(reg. Achteck)

15.1	tetr. Skalenoeder	8	3	12		6					6	4^3	
15.2	orthorhomb. Bipyramide												
15.3	tetr. Bipyramide												
15.4	Oktaeder												Hexaeder
16.1	tetr. Trapezoeder	8	4	16	8	2					10	$3^3.4$	
16.2	(tetr. Streptoeder)												tetr. Antiprisma
17.1	dihex. Prisma	12		12							0		
17.2	(dodekag. Prisma)												(reg. Zwölfeck)
18.1	dihex. Pyramide	12		12						1	1		
18.2	(dodekag. Pyramide)												(reg. Zwölfeck)
19	Triakistetraeder	12	3	18	4			4			8	3.6^2	abgestumpftes Tetraeder
20.1	ditrig. Skalenoeder	12	3	18		6		2			8	$4^2.6$	
20.2	ditrig. Bipyramide												
20.3	hex. Bipyramide												hex. Prisma
21.1	Deltoiddodekaeder	12	4	24	8	6					14	$(3.4)^2$	
21.2	Rhombendodekaeder												Kubooktaeder
22.1	hex. Trapezoeder	12	4	24	12			2			14	$3^3.6$	
22.2	(hex. Streptoeder)												hex. Antiprisma
23.1	tetraedr. Pentagondodekaeder	12	5	30	20						20	3^5	
23.2	Pentagondodekaeder												
23.3	(Dodekaeder)												Ikosaeder
24.1	ditetr. Bipyramide	16	3	24		8			2		10	$4^2.8$	
24.2	(oktag. Bipyramide)												oktag. Prisma
25.1	dihex. Bipyramide	24	3	36		12				2	14	$4^2.12$	
25.2	(dodekag. Bipyramide)												dodekag. Prisma
26	Triakisoktaeder	24	3	36	8				6		14	3.8^2	abgestumpftes Hexaeder
27.1	Hexakistetraeder	24	3	36		6		8			14	4.6^2	
27.2	Tetrakishexaeder												abgestumpftes Oktaeder
28.1	Dyakisdodekaeder	24	4	48	8		18				26	3.4^2	
28.2	Deltoidikositetraeder												Rhombikubooktaeder
29	Pentagonikositetraeder	24	5	60	32	6					38	$3^4.4$	stumpfes Hexaeder
30	Hexakisoktaeder	48	3	72		12		8	6		26	$4.6.8$	abgestumpft.Kubooktaeder

Topologisch sind die einfachen Kristallformen als Isoeder, das heisst isoedrische Polyeder (mit kongruenten oder spiegelbildlichen Flächen) der zweidimensionalen Sphäre äquivalent; darüber hinaus sind Formen, die sich — unter Beibehaltung der Anordnung von Ecken, Kanten und Flächen — durch irgendwelche Deformation ineinander überführen lassen, topologisch gleich, was zum Beispiel für das trigonale Trapezoeder, das Rhomboeder und den Würfel zutrifft.

Für den Begriff der *metrischen* „Sorte" hat DELAUNAY folgende Definition gegeben: Sei $\{S\}$ eine reguläre Teilung und G eine beliebige topologische oder metrische Gruppe der Abbildungen von $\{S\}$ auf sich selbst, die bezüglich der Teilung transitiv ist. Zwei Paare $\{S, G\}$ und $\{S', G'\}$ gehören dann zu derselben „Sorte", wenn

— die Teilungen $\{S\}$ und $\{S'\}$ topologisch gleich sind;
— die Gruppen G und G′ isomorph sind;
— die Gruppen mit ihren Teilungen gleich verbunden sind, das heisst: führt $g \in G$ ein Element der Teilung $\{S\}$ in ein gewisses anderes Element über, so führt das entsprechende g' aus G′ die entsprechenden Elemente von $\{S'\}$ ineinander über.

An Beispielen für diesen metrischen Sortenbegriff gibt DELAUNAY einmal eben die 47 einfachen Kristallformen, sodann die den 14 BRAVAIS-Gittern entsprechenden 24 metrischen Sorten der DIRICHLETschen Teilungen für dreidimensionale Gitter und schliesslich die 46 fundamentalen metrischen Sorten der 11 LAVESschen (topologisch verschiedenen, isogonalen) Ebenenteilungen.

Der *symmetrische* Gesichtspunkt ist dem Kristallographen wiederum vertraut; er behandelt die Möglichkeit des Auftretens der Formen in den verschiedenen Kristallklassen, wobei einerseits die Flächensymmetrien entscheidend werden und andererseits sowohl Spezialformen wie Grenzformen zu berücksichtigen sind.

2. Topologie der einfachen Formen

Aus der linken Hälfte der *Tabelle 1.1* geht hervor, wie sich die 47 einfachen Kristallformen sowie die 9 (in Klammern geschriebenen) durch Spezialisierung aus ihnen hervorgehenden nichtkristallographischen Formen in 30 durch entsprechende Nummern bezeichnete topologische Fälle gliedern. Für die topologische Kennzeichnung wurden folgende Symbole verwendet:

F = Flächenzahl (Zähligkeit der Form)	E = Eckenzahl
ϕ = Eckenzahl einer Fläche	e_q = Zahl der Ecken, in denen q Kanten zusammenlaufen
K = Kantenzahl	

Das topologische Symbol führt in Produktform auf, wieviele q-kantigen Ecken eine Fläche besitzt.

Zu den isoedrischen Polyedern der einfachen Formen sind die — für den höchstsymmetrischen Fall in der rechten Hälfte der Tabelle 1.1 angegebenen — isogonalen Polyeder dual oder polar, bei denen nun nicht mehr die Flächen kongruent oder spiegelbildlich sind, dafür aber die Büschel der in den Ecken zusammenlaufenden Kanten. Hier sind die zu den offenen Kristallformen dualen null- bis zweidimensionalen Figuren in Klammern geschrieben. Wegen der Symmetrie der EULERschen Polyederformel $E-K+F = 2$ in E und F ist in der topologischen Kennzeichnung der isogonalen Polyeder die Bedeutung von E und F vertauscht; ϕ zeigt nun, wieviele Kanten in einer Ecke zusammenlaufen, und die e_q sind die Anzahlen der q-eckigen Flächen.

Die *Tabelle 1.2* enthält analoge Angaben über die einfachen nichtkristallographischen Formen, die durch eine endliche Zahl von Ebenen begrenzt werden.

3. Metrik der einfachen Formen

Die metrischen Sorten, das heisst die eigentlichen einfachen Formen, sind schon in den Tabellen 1.1 und 1.2 aufgeführt. Die *Tabelle 2* zeigt am Beispiel der geschlossenen kristallographischen Formen, wie die 17 topologischen Fälle in 30 kristallographische und 5 nichtkristallographische, aber mit kristallographischer Symmetrie verträgliche Formen aufspalten. Entsprechende Überlegungen lassen sich leicht auch für offene oder nichtkristallographische Formen anstellen. Erwähnt sei noch, dass die in der Kristallographie übliche Benennung der Formen mit nur zwei Ausnahmen ein-eindeutig den metrischen Sorten entspricht: vom Standpunkt der Metrik sind Sphenoid und Doma einerseits, monoklines und orthorhombisches Prisma andererseits eine und dieselbe Form.

Interessant sind die Übergänge zu nichtkristallographischen Formen als Spezial- oder Grenzformen im Rahmen kristallographischer Symmetrie: das Pentagondodekaeder (Nr. 23.2) wird bei geeigneter, allerdings irrationaler Wahl der Indizes regulär wie im Falle ikosaedrischer Symmetrie, und die Vortäuschung 2n-gonaler Symmetrie durch an sich n-gonale Formen ist häufig zu beobachten. Eine riesige Fülle von Möglichkeiten würde sich ferner aus der Vortäuschung von Formen durch Kombinationen niedrigerzähliger Formen ergeben, wie das bei Pseudosymmetrie oft der Fall ist: so lässt sich etwa das Ikosaeder als Kombination von Oktaeder und geeignetem (wiederum irrational zu indizierendem) Pentagondodekaeder auffassen, und schliesslich liessen sich alle

Tabelle 1.2. *Topologische Kennzeichnung der einfachen nichtkristallographischen Formen*

Isoedrische Polyeder geschlossen offen	Topologische Kennzeichnung											*Isogonale Polyeder* regulär halbregulär
	F	∅	K	e_3	e_4	e_5	e_6	e_{10}	e_n	E	Symbol	
Dodekaeder	12	5	30	20						20	3^5	Ikosaeder
Ikosaeder	20	3	30			12				12	5^3	Dodekaeder
Rhombentriakontaeder	30	4	60	20		12				32	$(3.5)^2$	Ikosidodekaeder
Pentakisdodekaeder	60	3	90			12	20			32	5.6^2	abgestumpftes Ikosaeder
Triakisikosaeder	60	3	90	20				12		32	3.10^2	abgestumpftes Dodekaeder
Deltoidhexekontaeder	60	4	120	20	30	12				62	3.4.5.4	Rhombikosidodekaeder
Pentagonhexekontaeder	60	5	150	80		12				92	$3^4.5$	stumpfes Dodekaeder
Hexakisikosaeder	120	3	180		30		20	12		62	4.6.10	abgest. Ikosidodekaeder
di-$\frac{1}{2}$n-gon. Prisma n-gon. Prisma	n		n							0		(reg. n-Eck)
di-$\frac{1}{2}$n-gon. Pyramide n-gon. Pyramide	n		n						1	1		(reg. n-Eck)
di-$\frac{1}{2}$n-gon. Skalenoeder di-$\frac{1}{2}$n-gon. Bipyramide n-gon. Bipyramide	2n	3	3n		n				2	n+2	4^2.n	n-gon. Prisma
n-gon. Trapezoeder n-gon. Streptoeder	2n	4	4n	2n					2	2n+2	3^3.n	n-gon. Antiprisma

Tabelle 2. *Metrische Sorten der geschlossenen einfachen Kristallformen*

Fall I allgemeines Dreieck (3 Bestimmungsstücke)
Fall II gleichschenkliges Dreieck (2 Bestimmungsstücke)
Fall III gleichseitiges Dreieck (1 Bestimmungsstück)
Fall IV Viereck mit 2 gleichen Seiten (4 Bestimmungsstücke)
Fall V Deltoid (3 Bestimmungsstücke)
Fall VI Rhombus (2 Bestimmungsstücke)
Fall VII Quadrat (1 Bestimmungsstück)
Fall VIII Fünfeck mit $2+2$ gleichen Seiten (5 Bestimmungsstücke)
Fall IX Fünfeck mit Spiegelgerader (4 Bestimmungsstücke)
Fall X reguläres Fünfeck (1 Bestimmungsstück)

	$\phi=3$			$\phi=4$				$\phi=5$		
Fall	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X
relat. Bestimmungsstücke	2	1	0	3	2	1	0	4	3	0
Nr. 8	8.1	8.2	8.3							
11		11								
12				12.1		12.2	12.3			
15	15.1 15.2	15.3	15.4							
16				16.1	16.2					
19		19								
20	20.1 20.2	20.3								
21					21.1	21.2				
22				22.1	22.2					
23								23.1	23.2	23.3
24	24.1	24.2								
25	25.1	25.2								
26		26								
27	27.1	27.2								
28				28.1	28.2					
29								29		
30	30									

Formen aus Pedien aufbauen, doch fällt all das nicht mehr unter das betrachtete Thema der einfachen Formen.

Die Tabelle 2 zeigt auch die 10 (römisch numerierten) Gestaltfälle der die geschlossenen Formen begrenzenden Drei-, Vier- und Fünfecke mit den Anzahlen der notwendigen Bestimmungsstücke; weil es dabei ja nicht auf die absolute Grösse ankommt, ist die Zahl der relativen Bestimmungsstücke jeweilen um 1 niedriger. Als metrisches Merkmal

Tabelle 3. *Symmetriemöglichkeiten der einfachen Kristallformen*

Bezeichnung der Flächensymmetrien: A = 1, B = 2, C = 3, D = 4, E = 6, F = m, G = 2mm, H = 3m, I = 4mm, J = 6mm; kleine Buchstaben bedeuten Grenzformen

Nr.	1	$\bar{1}$	2	m	2/m	222	mm2	mmm	4	$\bar{4}$	4/m	422	4mm	$\bar{4}$2m	4/mmm	3	$\bar{3}$	6	$\bar{6}$	6/m	32	3m	$\bar{3}$m	622	6mm	$\bar{6}$m2	6/mmm	23	m3	432	$\bar{4}$3m	m3m
1	A		B	F			G		D				I			C		E				H			J							
2		A	a	a	BF	B	f	G		B	D	D		G	I		C		C	E	C		H	E		H	J					
3			A	A			F																									
4																a			F		B	f				G						
5																A						F										
6.1					A	a	a	F																								
6.2					a	a	a	f	a	a	F	B	f	Bf	G																	
7.1							A																									
7.2							a		A				F																			
8.1						A																										
8.2						a				A				F																		
8.3						a				a				f														C			H	
9.1																					a	a				F						
9.2																	a	a		F	a	a	Bf	B	f	f	G					
10.1																						A										
10.2																		A				a			F							
11																			A		a					F						
12.1																					A											
12.2																	A				a		F									
12.3																	a				a		f					B	G	D	G	I
13.1												a	a	a	F																	
13.2												a	a	a	f																	
14.1													A																			
14.2													a																			

15.1								A															
15.2				A																			
15.3				a		A	a	a	F														
15.4				a		a	a	a	f											C	C		H
16.1							A																
16.2							a																
17.1														a	a	a		f					
17.2														a	a	a		f					
18.1																A							
18.2																a							
19																			a			F	
20.1														A									
20.2																	A						
20.3												A		a	a		a	F					
21.1																			a			F	
21.2																			a	f	B	f	G
22.1															A								
22.2															a								
23.1																			A				
23.2																			a	F			
23.3																			a	f			
24.1									A														
24.2									a														
25.1																		A					
25.2																		a					
26																				a	a		F
27.1																						A	
27.2																					a	a	F
28.1																				A			
28.2																				a	a		F
29																					A		
30																							A

findet diese Anzahl ihre Entsprechung in der Zahl der zur kristallographischen Beschreibung einer Form erforderlichen Parameter, die sich aus relativen Konstanten des Bezugssystems (Achsenverhältnisse und freie Achsenwinkel, also 0 bei kubischer bis 5 bei trikliner Symmetrie), aus Freiheitsgraden der Form oder aus den Verhältnissen der linearunabhängigen, nichtverschwindenden Flächenindizes zusammensetzen.

4. Symmetrie der einfachen Formen

Die *Tabelle 3*, die keiner weiteren Erläuterung bedarf, stellt dar, in welchen Kristallklassen die mit denselben Nummern wie in Tabelle 1.1. bezeichneten einfachen Formen auftreten können; die dabei erscheinenden Flächensymmetrien sind mit Buchstaben, im Falle von Grenzformen mit kleinen Buchstaben, angegeben. Pseudosymmetrien sind berücksichtigt: so können etwa das tetragonale Bisphenoid (Nr. 8.2) und sogar das Tetraeder (Nr. 8.3) als Grenzformen des orthorhombischen Bisphenoids (Nr. 8.1) mit geeigneten, eventuell irrationalen Indizes in der Kristallklasse 222-D_2 vorgetäuscht werden.

Eine einfache Abzählung ergibt, dass zu den 164 Symmetriemöglichkeiten der kristallographischen Formen noch 16 Fälle von an sich nichtkristallographischen, aber mit kristallographischer Symmetrie verträglichen Formen hinzukommen; alle diese Möglichkeiten verteilen sich auf 32 allgemeine Formen (Flächensymmetrie 1-C_1), 67 Spezialformen (Flächensymmetrien m-C_s, 2-C_2, 2 mm-C_{2v}, 3-C_3, 3 m-C_{3v}, 4-C_4, 4 mm-C_{4v}, 6-C_6 und 6 mm-C_{6v}), 64 allgemeine Grenzformen (Flächensymmetrie 1-C_1) und 17 spezielle Grenzformen (Flächensymmetrie m-C_s).

Wiederum wären analoge Überlegungen leicht auch für die nichtkristallographischen Symmetrien anzustellen.

5. Zusammenstellung der Ergebnisse

Die in topologischer, metrischer und symmetrischer Hinsicht gefundenen Anzahlen der geschlossenen und offenen, einfachen kristallographischen Formen seien abschliessend nochmals zusammengestellt; dabei sind wieder die an sich nichtkristallographischen, aber mit kristallographischer Symmetrie verträglichen Formen in Klammern aufgeführt:

	geschlossen	offen	total
topologisch	17	13	30
metrisch	30 (+5)	17 (+ 4)	47 (+ 9)
symmetrisch	75 (+6)	89 (+10)	164 (+16)

Manuskript eingegangen am 2. Januar 1963.