

Das Zeichnen von Kristallstrukturen

Autor(en): **Parker, Robert L.**

Objektyp: **Article**

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

Band (Jahr): **29 (1949)**

Heft 2

PDF erstellt am: **21.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-23689>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Das Zeichnen von Kristallstrukturen

Von *Robert L. Parker*, Zürich

Betrachtet man die in der Literatur enthaltenen anschaulichen Wiedergaben von aus Kugeln und Stäben gebauten Kristallstrukturmodellen, so stellt man leicht fest, dass diese weit vorwiegend vom Typus der Figur 1a, also so beschaffen sind, dass die b- und c-Achsen des Elementarparallelepipeds zueinander senkrechte Lage

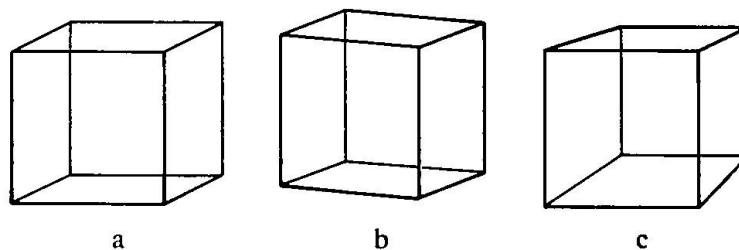


Fig. 1. a) Würfel in schiefer Parallelprojektion; b) gewendeter Würfel in senkrechter Parallelprojektion; c) Würfel in Zentralprojektion

und gleiches Längenverhältnis wie am Original haben, während die a-Achse einen Winkel Φ mit der Vertikalen bildet und eine Länge a' besitzt, die im Masstab der anderen Achsen eine mehr oder weniger starke Verkürzung ihrer wahren Länge a darstellt. Solche Entwürfe können als allgemein-schiefe Parallelprojektionen des zur Zeichenebene frontal aufgestellten Objekts aufgefasst werden. Ihre Beliebtheit erklärt sich leicht aus der grossen Einfachheit der Konstruktion, die darin zum Ausdruck kommt, dass zwei Dimensionen der Zelle unmittelbar mit Hilfe eines rechtwinkligen Bezugssystems (Millimeterpapier) abgetragen werden können, während die dritte durch Anpassung von Φ und a' sich so darstellen lässt, dass un-

liebsame Überschneidungen wichtiger Gitterpunkte vermieden werden. Diesen Vorteilen stehen aber gewisse Nachteile gegenüber, die es deswegen hervorzuheben lohnt, weil sie ohne nennenswerte Komplizierung der Konstruktion und zum Vorteil der Entwürfe beseitigt werden können.

Eine erste unerwünschte Eigenschaft dieser Darstellungsart ist der sehr unnatürliche Anblick der Zelle, den sie vermittelt. In der Tat besitzen die solche Figuren erzeugenden Projektionsstrahlen beträchtlich schiefere Einfallswinkel als die im normalen Sehkegel gelegenen. Dadurch kommen verzerrte Ansichten des Körpers zustande, die wenig Ähnlichkeit mit den durch direkte Anschauung oder auf photographischem Wege gewonnenen aufweisen.

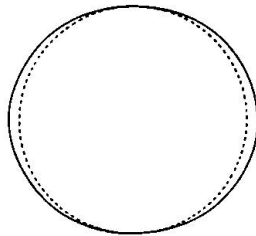


Fig. 2. Kreis und Ellipse mit Achsenverhältnis 1:1,09 (siehe Text)

Ein weiterer Übelstand dieser Projektion beruht in der Tatsache, dass die als Kugeln dargestellten Massenteile der Struktur nicht, wie die Anschaulichkeit es erfordert, als Kreise, sondern als Ellipsen abgebildet werden. Diese entstehen als schiefe Schnitte der Bildebene mit den die Kugeln projizierenden Drehzylindern. Eine einfache Überlegung gestattet das Achsenverhältnis dieser Ellipsen zu ermitteln: denkt man sich im Punkte $\frac{1}{2}00$ des in Figur 1 a abgebildeten Würfels, dessen wahre Kantenlänge a betragen möge, eine Kugel von eben diesem Durchmesser eingesetzt, so folgt aus Sätzen der darstellenden Geometrie, dass auch der kleine Durchmesser der Ellipse a betragen wird und dass die Projektionen der Punkte 000 und 100 des Würfels ihre Brennpunkte sein müssen. Daraus ergibt sich der grosse Ellipsendurchmesser zu $\sqrt{a^2 + a'^2}$, wenn a' die projizierte Länge der Würfelkante $[100]$, oder allgemeiner des zur Bildebene senkrechten Kugeldurchmessers, und damit der Abstand zwischen den Brennpunkten ist. In Figur 1 a ist $a' = 0,425 a$, der grosse Durchmesser also $\sqrt{1,18a^2}$ und das Achsenverhältnis somit 1:1,09. Dass sich solche Ellipsen von Kreisen deutlich unterscheiden, zeigt Figur 2, die es auch klar macht, dass die allgemein übliche Anwendung

von Kreisen im Zusammenhang mit der schiefen Parallelprojektion eine immerhin merkliche Unexaktheit darstellt. Als Kompromisslösung lässt sie sich allenfalls dadurch rechtfertigen, dass man am Original an Stelle der Kugeln sich kreisrunde, der Bildebene parallele Scheiben gesetzt denken kann.

Hervorzuheben ist nun die Tatsache, dass beide Nachteile der üblichen Darstellungsmethode in einfachster Weise beseitigt werden, wenn statt der schiefen die senkrechte Parallelprojektion zur Anwendung gebracht wird. Wenn man derselben bei Strukturdarstellungen nur selten begegnet, so beruht das offenbar auf einer irrigen Auffassung, sie sei umständlicher und zeitraubender in der Ausführung als die bis jetzt betrachtete.

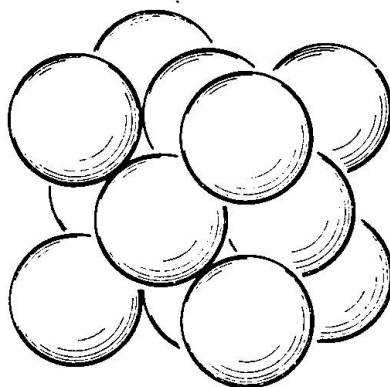


Fig. 3. Kugelpackung (senkrechte Parallelprojektion)

Tatsächlich hat die senkrechte Parallelprojektion als einzige der in Frage kommenden Konstruktionsmethoden zunächst die Eigenschaft, die Kugeln stets als Kreise abzubilden¹⁾. Sie liefert aber überdies bei geeigneter Handhabung weit natürlichere Ansichten der Zelle als die, die unter den zumeist gewählten Bedingungen zustandekommen. Beim Kristallzeichnen, wo aus wohlerwogenen Gründen²⁾ diese Projektion fast ausschliesslich Verwendung findet, wird bekanntlich eine günstige räumliche Wirkung so herbeigeführt, dass

¹⁾ Lehrreich ist in diesem Zusammenhang das Zeichnen von dichtesten Kugelpackungen mit kreisförmiger Darstellung der Kugeln. Man wird sich leicht davon überzeugen, dass man nur dann zu einer allseitigen Berührung gelangt, wenn die Zentren der Kreise die Stellungen inne haben, wie sie die senkrechte Parallelprojektion verlangt. So wurde Figur 3 auf Grund einer der Tabelle 1 entnommenen Würfeldarstellung konstruiert.

²⁾ Siehe ROBERT L. PARKER, „Kristallzeichnen“, Berlin 1929.

man hintereinander eine Neigung (Inklination) von I^0 um die b-Achse und eine Drehung (Rotation) von R^0 um die neue c-Achsenrichtung des Kristalls ausführt. Als allgemein vorteilhaft haben sich die Werte $R = 18^0 26'$ und $I = 6^0 28'$ eingeführt, und es liegt nahe, dieselben auch für die Strukturdarstellung zu verwenden. Allein die Erfahrung zeigt, dass, obschon die meisten Kristallpolyeder und ihre Kombinationen unter diesen Normalbedingungen eine sehr befriedigende Wiedergabe erfahren, der Würfel und analoge Flächenkom-

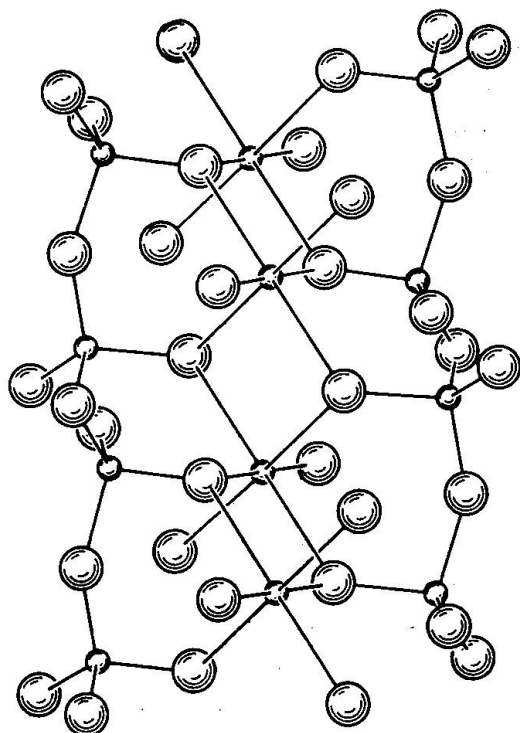


Fig. 4. Motiv aus der Enstatitstruktur (senkrechte Parallelprojektion)

binationen in anderen Systemen diesbezüglich eine gewisse Ausnahme bilden. Ihre Abbildung in der oben genannten „Normalstellung“ hinterlässt auf den unbefangenen Beobachter eine eher ungünstige räumliche Wirkung, indem die Körper nach der Tiefe hin abgeplattet erscheinen. Das ist für die vorliegenden Zwecke bedeutungsvoll, da gerade sie häufig als Elementarparallelepipede in Frage kommen. Versuche zeigen, dass etwas (um ca. 50 %) vergrößerte Werte von R und I zu überzeugenderen Darstellungen führen, was durch die Ansicht des Würfels Figur 1b belegt werden mag, zu deren Konstruktion die Werte $R = 25^0$ und $I = 10^0$ verwendet wurden. Die

räumliche Wirkung der Figur ist befriedigend, und es tritt der isometrische Charakter der Zelle deutlich in Erscheinung. Durch Versuche kann man sich davon überzeugen, dass wichtige Punktlagen wie die Schnittpunkte von Flächen- und Körperdiagonalen, ferner die $\frac{1}{4}$ -Punkte auf letzteren gut getrennt sind, so dass sich viele wichtige Strukturen auf dieser Grundlage wiedergeben lassen. Naturgemäss ist die Mannigfaltigkeit der vorkommenden Punktanordnungen viel zu gross, als dass eine Universallösung möglich wäre, und man wird angesichts einer gegebenen Struktur durch Tasten die günstigsten R- und I-Werte zu finden haben. Dabei können die eben besprochene Aufstellung zweckmässig als Ausgangspunkt gewählt und etwaige bei ihr zutage tretende Unzulänglichkeiten durch systematische Veränderungen der Aufstellung eliminiert werden. So wurde Figur 4, die (leicht idealisiert) die T-O-T Anordnung im Enstatit zeigt, auf Grund der im Strukturbericht Band 2 (1928—1932), S. 135 gegebenen Daten mit $R = 10^0$ und $I = 20^0$ konstruiert, nachdem durch Versuche festgestellt worden war, dass diese Werte eine befriedigende Trennung der Punktlagen ergeben.

Für den praktischen Entwurf der Figuren kommen (von Spezialfällen abgesehen) eigentlich konstruktive Methoden kaum in Frage. Diese wären in der Tat zeitraubender als die eingangs erwähnten. Es wird vielmehr zweckmässig sein, auf Grund von Formeln, die a. a. O. mitgeteilt wurden, die auf ein rechtwinkliges Bezugssystem (Millimeterpapier) bezogenen Koordinaten der Gittereckpunkte und anderer von Massenteilen besetzten Gitterstellen zu ermitteln. Die Ausführung der Zeichnung ist dann ebenso rasch und mühelos wie im ersterwähnten Fall der schiefen Parallelprojektion bei frontal aufgestellter Zelle. Obgleich die in Frage kommenden Rechnungen einfachster Art sind, erscheint es zweckmässig, die für eine Anzahl wichtiger Werte von R und I geltenden Koordinaten der Gitterpunkte 100, 010, 001 mitzuteilen (Tabelle 1), wobei +X-Werte vom Koordinatenursprung (der gleichzeitig Sitz des Punktes 000 ist) nach rechts, +Y-Werte nach oben hin abzutragen sind. Die X-Y-Koordinaten anderer Punktlagen sind aus den in der Tabelle angegebenen unmittelbar ableitbar. So gelten für den Punkt 110 Werte, die durch Summation der für 100 und 010 angeführten erhalten werden, während für den Punkt 111 noch die von 001 hinzukommen. Soll allgemein ein Punkt mnp festgelegt werden, so geschieht dies gemäss der Formel

$$\begin{aligned} X_{mnp} &= mX_{100} + nX_{010} + pX_{001} \\ Y_{mnp} &= mY_{100} + nY_{010} + pY_{001} \end{aligned}$$

Ebenso leicht ist der Übergang zu anderen rechtwinkligen Elementarparallelepipeden im tetragonalen und orthorhombischen System, indem die X-Y-Werte von den Punkten 100 und 001 lediglich mit dem betreffenden Achsenverhältnis zu multiplizieren sind. (Alle Angaben der Tabelle beziehen sich auf eine Kantenlänge von 10 Einheiten.) Zum raschen Entwerfen von hexagonalen Strukturen nach den gleichen Gesichtspunkten sei noch Tabelle 2 mit den notwendigen Daten mitgeteilt. Sie führen zu der in Figur 5 wiedergegebenen Ansicht der hexagonalen Zelle.

Tabelle 1. *Koordinaten der Eckpunkte des Elementarwürfels in senkrechter Parallelprojektion*

R	I	100		010		001	
		X	Y	X	Y	X	Y
5°	5°	-0,87	-0,87	+9,96	-0,08	0,0	+9,96
„	10°	„	-1,73	„	-0,15	„	+9,85
„	15°	„	-2,58	„	-0,22	„	+9,66
„	20°	„	-3,41	„	-0,30	„	+9,40
10°	5°	-1,74	-0,86	+9,85	-0,15	0,0	+9,96
„	10°	„	-1,71	„	-0,30	„	+9,85
„	15°	„	-2,55	„	-0,45	„	+9,66
„	20°	„	-3,37	„	-0,59	„	+9,40
15°	5°	-2,59	-0,84	+9,66	-0,22	0,0	+9,96
„	10°	„	-1,68	„	-0,45	„	+9,85
„	15°	„	-2,50	„	-0,70	„	+9,66
„	20°	„	-3,30	„	-0,88	„	+9,40
20°	5°	-3,42	-0,82	+9,40	-0,30	0,0	+9,96
„	10°	„	-1,63	„	-0,60	„	+9,85
„	15°	„	-2,43	„	-0,88	„	+9,66
„	20°	„	-3,21	„	-1,17	„	+9,40
25°	5°	-4,23	-0,79	+9,06	-0,37	0,0	+9,96
„	10°	„	-1,57	„	-0,73	„	+9,85
„	15°	„	-2,29	„	-1,09	„	+9,66
„	20°	„	-3,10	„	-1,44	„	+9,40
30°	5°	-5,00	-0,75	+8,66	-0,44	0,0	+9,96
„	10°	„	-1,50	„	-0,87	„	+9,85
„	15°	„	-2,24	„	-1,29	„	+9,66
„	20°	„	-2,96	„	-1,71	„	+9,40
35°	5°	-5,74	-0,71	+8,19	-0,50	0,0	+9,96
„	10°	„	-1,42	„	-1,00	„	+9,85
„	15°	„	-2,12	„	-1,48	„	+9,66
„	20°	„	-2,80	„	-1,96	„	+9,40

Tabelle 2. *Koordinaten der Eckpunkte des hexagonalen Elementarparallelepipeds*(senkrechte Parallelprojektion. $R = 15^\circ$, $I = 10^\circ$)

Punktlagen	X	Y
100	-7,07	- 1,23
101	„	+ 8,62
$\bar{1}00$	+7,07	+ 1,23
$\bar{1}01$	„	+11,08
010	+9,65	- 0,45
011	„	+ 9,40
$0\bar{1}0$	-9,65	+ 0,45
$0\bar{1}1$	„	+10,30
110	+2,59	- 1,68
111	„	+ 8,17
$\bar{1}\bar{1}0$	-2,59	+ 1,68
$\bar{1}\bar{1}1$	„	+11,53

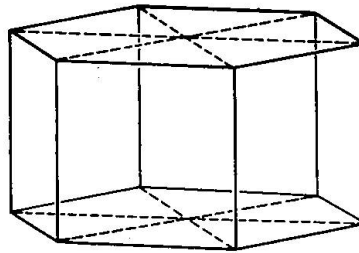


Fig. 5. Hexagonales Elementarparallelepiped (senkrechte Parallelprojektion)

Obgleich die nach den angedeuteten Methoden entworfenen Bilder den auf optischem Wege erhaltenen bereits viel näher stehen als die, die aus dem frontal gestellten Objekt durch schiefe Parallelprojektion entstehen, so weisen sie doch gewisse Mängel der Anschaulichkeit auf, die ganz allgemein allen Parallelprojektionen eigen sind. Namentlich der parallele Verlauf von nach hinten fliehenden Kanten wird von unvoreingenommenen Beobachtern oft so aufgefasst, als ob die betreffenden Richtungen nach vorne zusammenlaufen würden. Es ist deshalb immer wieder versucht worden, durch Kunstgriffe die räumliche Wirkung der Zeichnungen zu verbessern. Gewisse solche, wie die Verwendung von Linien verlaufender Breite, stehen mit dem Wesen der Parallelprojektion in ausgesprochenem Widerspruch und führen zu Entwürfen von sehr unbefriedigendem Charakter. Weit besser, als mit solchen Mitteln zu operieren, dürfte es sein, falls für spezielle Zwecke eine besonders starke räumliche

Wirkung erzielt werden soll, die Entwürfe in eigentliche Perspektive (Zentralprojektion) zu setzen. Unternimmt man diesen Schritt, so muss man sich allerdings von vorne herein über zwei Punkte im klaren sein: 1. die in Frage kommenden Konstruktionen und zwar elementar, doch wesentlich zeitraubender als die für die Parallelprojektionen geltenden; 2. es gilt für die Perspektive wie für die schiefe Parallelprojektion, dass die Kugeln (insofern sie nicht auf dem Hauptstrahl liegen) als Ellipsen abgebildet werden. Ihre Wiedergabe als Kreise bedeutet also im gleichen Sinne eine Kompromisslösung, wie für die schiefe Parallelprojektion bereits angedeutet (S. 214).

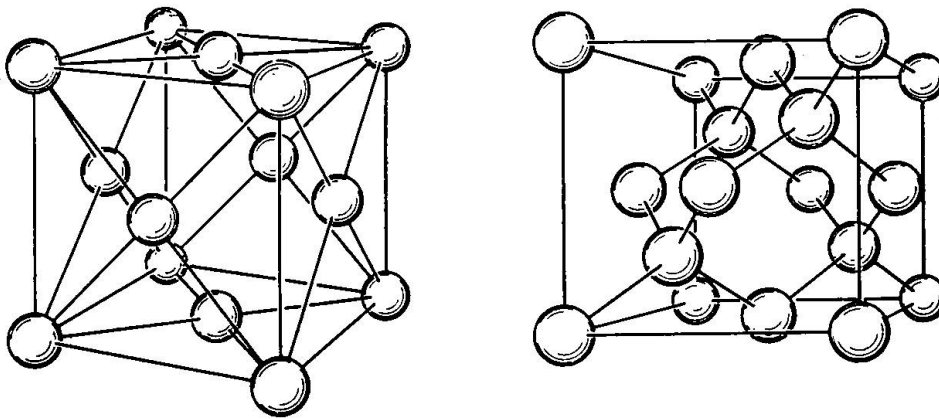


Fig. 6 und 7. Allseitig flächenzentrierter Würfel und Diamantstruktur in Zentralprojektion

Ist man aber geneigt, diese Nachteile in Kauf zu nehmen, so gelangt man leicht zu Darstellungen von bemerkenswerter räumlicher Anschaulichkeit. Es kann an dieser Stelle weder auf die fast unerschöpfliche Mannigfaltigkeit der erzielbaren Wirkungen, noch auf konstruktive Einzelheiten eingegangen werden. Lediglich sei auf die Wichtigkeit hingewiesen, die Wahl des Augpunktes den verfolgten Zwecken anzupassen. Seine Lage im Raum kann in ganz gleicher Weise fixiert werden wie die eines Gitterpunktes, also als x_a, y_b, z_c , wenn a, b, c wie üblich die Kantenlängen des Elementarparallelepipedes bedeuten¹⁾. Um natürlich erscheinende Darstellungen zu erhalten, wird x im allgemeinen ein Vielfaches der Kantenlänge betragen müssen, während für y und z meist kleinere Werte in Frage kommen, um eine zentrale Lage des Hauptfluchtpunktes zu gewährleisten. Das darzustellende Modell kann je nach Umständen frontal aufgestellt oder aber in gedrehter Lage abgebildet werden. Von einer

¹⁾ Als 0-Punkt der Zählung wird 110 gewählt.

Inklination wird im allgemeinen abgesehen werden können. Lediglich als Beispiele der erzielbaren Entwürfe sei auf Figur 1c, sowie auf Figuren 6 und 7 hingewiesen. Erstere wurde mit einem Augpunkt in 5a, 2b, 2c konstruiert und schliesst sich mit ihrer frontalen Aufstellung des Würfels der schiefen Parallelprojektion Figur 1a an, die sie aber in räumlicher Wirkung weit übertrifft. Bei Figur 6 ist der Würfel um 25° nach links gedreht, und der Augpunkt liegt in 5a, 0b, 2c. Der Entwurf ist mit Figur 1b zu vergleichen. Nicht nur die auf dem Horizont zusammenlaufenden [100]-Kanten, sondern auch die mit der Entfernung abnehmende Grösse der Kreise tragen wesentlich zu seiner Wirkung bei. Es ist leicht, den geeigneten Radius für jeden Kreis zu finden, wenn man den Radius der Scheiben (nicht Kugeln!) am Original als Bruchteil der Vertikalkantenlänge der Zelle ausdrückt. Dieses Verhältnis bleibt dann im ganzen Gebiet der Projektion erhalten. Schliesslich zeigt Figur 7, dass auch mit gesenktem Augpunkt (er wurde hier in 3,5a, 1b, 0,5c gewählt) sich Resultate mit bemerkenswert guter Trennung der besetzten Gitterpunkte erzielen lassen, die weit mehr als die gewöhnlichen den Eindruck erwecken, man schaue in das Modell hinein.

Zum Schluss seien noch die Koordinaten der Eckpunkte der drei abgebildeten zentralprojektiv konstruierten Würfel mitgeteilt. Sie gestatten, den Entwurf ohne Hilfslinien auf Millimeterpapier vorzunehmen, worauf dann auch viele weitere einfache Punktlagen durch blosses Ausziehen der Körper- und Flächendiagonalen usw. gewonnen werden können.

Tabelle 3. *Koordinaten der Eckpunkte des Würfels*
(Zentralprojektionen)

Punktlagen	Fig. 1 c		Fig. 6		Fig. 7	
	X	Y	X	Y	X	Y
000	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
010	8,3	0,0	7,5	-1,1	7,75	0,0
100	-5,0	-3,3	-4,5	-2,6	-4,45	-1,1
110	5,0	-3,3	3,85	-4,15	5,55	-1,1
001	0,0	8,35	0,0	8,0	0,0	7,8
011	8,3	8,35	7,5	7,35	7,75	7,8
101	-5,0	6,7	-4,5	6,7	-4,45	8,9
111	5,0	6,7	3,85	5,85	5,55	8,9
Horizont:	—	16,3	—	15,85	—	3,9

Eingegangen: Juli 1949.