

Berechnung der Goldschmidtschen (,)-Werte für beliebige Flächen und Zonen aus dem kristallographischen Achsenverhältnis

Autor(en): **Burri, Conrad**

Objektyp: **Article**

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

Band (Jahr): **55 (1975)**

Heft 2

PDF erstellt am: **21.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-43068>

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.

**Berechnung der Goldschmidtschen (φ, ρ)-Werte
für beliebige Flächen und Zonen
aus dem kristallographischen Achsenverhältnis**
Dem Andenken an Leonhard Weber (1883–1968) gewidmet

Von *Conrad Burri**)

Mit 4 Figuren im Text

Zusammenfassung

Ausgehend von Leonhard Webers vektorieller Behandlung der geometrischen Kristallographie werden einfache Formeln abgeleitet, welche die Berechnung der (φ, ρ)-Werte nach Goldschmidt, bei bekannten Indizes, direkt aus dem Achsenverhältnis ermöglichen, und zwar sowohl für Kristallflächen wie für Kanten. Damit lässt sich der komplizierte und heute kaum mehr gebräuchliche Goldschmidtsche Algorithmus vermeiden.

Summary

Following Leonhard Weber's vector approach to geometrical crystallography, simple formulas for the calculation of Goldschmidt's (φ, ρ) values from the axial ratio are developed for crystal faces, as well as for edges of known indices. Thus, Goldschmidt's rather complicated and currently little used algorithm can be avoided.

Inhalt

A. Einleitung	168
B. Methodik der Berechnung und Ableitung der grundlegenden Beziehungen	169
I. Kristallsysteme mit dreigliedrigen Flächen- und Zonensymbolen	171
1. Allgemeines und Winkel zweier Zonen	171
2. Winkel zweier Flächennormalen	171
3. Winkel zwischen Zonenachse und Flächennormalen	173
II. Kristallsysteme mit viergliedrigen Flächen- und Zonensymbolen	174
1. Allgemeines und Winkel zweier Zonen	174
2. Winkel zweier Flächennormalen	175
3. Winkel zwischen Zonenachse und Flächennormalen	177

*) Institut für Kristallographie und Petrographie ETHZ, CH-8006 Zürich, Sonneggstrasse 5.

C. Berechnung der (φ, ρ) -Werte für die Flächen in den einzelnen Kristallsystemen	177
I. Systeme mit dreigliedrigen Flächensymbolen (hkl)	177
II. Systeme mit viergliedrigen Flächensymbolen (hkil)	181
D. Berechnung der (φ', ρ') -Werte für die Zonenachsen in den einzelnen Kristallsystemen	181
I. Systeme mit dreigliedrigen Zonensymbolen $[uvw]$	181
II. Systeme mit viergliedrigen Zonensymbolen $[uvw\omega w]$	185
E. Zusammenstellung der Umrechnungsformeln	185
I. (φ, ρ) -Werte der Flächen	185
II. (φ', ρ') -Werte der Zonenachsen (Kanten)	187
F. Anhang	188
I. Berechnung der Pinakoidwinkel $\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ aus den Kantenwinkeln α, β, γ	188
II. Berechnung des Volumens des von den drei Vektoren a, b, c aufgespannten Spates	189
G. Zitierte Literatur	190

A. Einleitung

Die durch V. GOLDSCHMIDT eingeführten Positionswinkel φ (Azimut) und ρ (Zentraldistanz) sind Polarkoordinaten zur Definition der Lage von Kristallflächen. Sie werden auch heute noch vielfach benützt, besonders beim Arbeiten mit dem zweikreisigen Goniometer und in Verbindung mit den bekannten Winkeltabellen dieses Autors (GOLDSCHMIDT 1897). Sie gestatten die Darstellung der Formenmannigfaltigkeit einer Kristallart durch einfache und übersichtliche Winkeltabellen, wobei immer die Möglichkeit besteht, beliebige, interessierende Flächenwinkel auf einfache Weise aus den gegebenen (φ, ρ) -Werten nach dem Cosinussatz zu berechnen. Ein weiterer Vorteil der GOLDSCHMIDTSchen Positionswinkel besteht darin, dass sie das Entwerfen von Stereogrammen sehr einfach gestalten. Hiervon wird gelegentlich auch zur Darstellung optischer Verhältnisse Gebrauch gemacht, so zum Beispiel bei der Behandlung von Problemen im Zusammenhang mit der optischen Orientierung der Plagioklase oder anderer niedrigsymmetrischer Kristallarten.

Wenn sich die (φ, ρ) -Werte aus diesen Gründen auch heute noch einer weiten Verbreitung erfreuen, so kann dies jedoch von der Gesamtheit der durch GOLDSCHMIDT entwickelten Methoden der Kristallberechnung kaum behauptet werden. Der Grund hierfür dürfte u. a. darin liegen, dass sie in engem Zusammenhang mit der heute kaum mehr gebrauchten gnomonischen Projektion konzipiert wurden (GOLDSCHMIDT 1887, 1897). Es dürfte jedenfalls feststehen, dass

heute nur noch wenige Kristallographen mit dem GOLDSCHMIDTSchen Algorithmus in seinem vollen Umfange vertraut sind¹⁾.

Aus diesen Gründen ist es vielleicht von einigem Nutzen, wenn hier gezeigt wird, wie sich die GOLDSCHMIDTSchen (φ, ρ) -Werte auf einfache Weise direkt aus dem kristallographischen Achsenverhältnis erhalten lassen, ohne dass eine Einarbeitung in das GOLDSCHMIDTSche System der Berechnung notwendig wird, und zwar sowohl für Flächen, wie für Zonen (Kanten), deren MILLERSche, bzw. BRAVAISSche Indizes bekannt sind.

B. Methodik der Berechnung und Ableitung der grundlegenden Beziehungen

Das gestellte Problem liesse sich ohne weiteres sphärisch-trigonometrisch lösen, unter Befolgung der in den klassischen Anleitungen zur Kristallberechnung behandelten Methoden. Der hierfür benötigte Rechenaufwand wäre allerdings teilweise recht bedeutend. Es soll daher im folgenden gezeigt werden, wie sich die Aufgabe auf sehr elegante und anschauliche Weise durch die Anwendung elementarer Vektormethoden behandeln lässt. Vektormethoden wurden zum ersten Male durch L. WEBER (in NIGGLI, 1924, 107–120) in der phänomenologischen Kristallographie zur Anwendung gebracht, nachdem sie schon früher in der Kristallstrukturlehre Eingang gefunden hatten. Die hier gemachten Ausführungen erfolgen denn auch in enger Anlehnung an die Ansätze dieses Autors, wie sie auch durch P. NIGGLI in seinen «Kristallographischen und strukturtheoretischen Grundbegriffen» (1928) benützt wurden. Der Autor hofft damit auch dazu beizutragen, dass den Gedankengängen des von ihm als äusserst anregenden Lehrer hochgeschätzten und in bester Erinnerung gehaltenen LEONHARD WEBER (1883–1968), mehr als dies bis jetzt der Fall war, die ihnen gebührende Beachtung geschenkt werde. Ein erneuter Hinweis darauf dürfte auch deshalb angezeigt sein, weil sowohl die Originaldarstellung, wie auch das erwähnte Buch von NIGGLI, seit langem vergriffen und antiquarisch nur sehr schwer erhältlich sind, sowie auch, weil der Abschnitt über die vektorielle Kristallberechnung in der dritten Auflage des Lehrbuches von NIGGLI (1941) nur

¹⁾ In diesem Zusammenhange ist vielleicht eine Bemerkung von P. TERPSTRA von Interesse: «VICTOR GOLDSCHMIDT (1853–1933) may rightly be considered one of the great crystallographers. Unfortunately he made use of a special terminology of his own which has found little general acceptance except among some of his American pupils. By present-day standards this terminology possesses no advantages in principle, although at the time it drew attention to some hitherto neglected truths. It has the great practical disadvantage that a modern investigator, when consulting the works of GOLDSCHMIDT, must first make a extensive, though unrewarding, study of the peculiarities of GOLDSCHMIDT's terminology.» Aus P. TERPSTRA u. L. W. CODD, *Crystallometry* (1961), 62–63. London, Longmans, Green and Co., Ltd.

noch in sehr reduziertem Umfange Aufnahme fand. Aus diesen Gründen wurden denn auch hier einige der grundlegenden Ableitungen von WEBER in extenso übernommen. Im Unterschied zu seinen Ausführungen wurde jedoch hinsichtlich der reziproken Vektorsysteme der heute allgemein üblichen Definition und Symbolisierung Rechnung getragen. Auf die Endergebnisse bleibt dies selbstverständlich ohne Einfluss.

Als Zentraldistanz ρ wird definitionsgemäss der Winkel zwischen der kristallographischen c -Achse und der Normalen der betrachteten Kristallfläche bezeichnet, während der Positionswinkel φ (Azimut) in der Zone der c -Achse von (010) bzw. (10 $\bar{1}$ 0) im trigonalen und hexagonalen System gezählt wird. Eine gewisse Inkonsequenz in bezug auf die heute geltenden Konventionen resultiert dabei daraus, dass φ bei GOLDSCHMIDT im Uhrzeigersinn gezählt wird, während heute Winkel ganz allgemein im positiven, das heisst im Gegen- uhrzeigersinn gemessen werden. Angesichts der sehr zahlreichen in der Literatur, nicht nur in den GOLDSCHMIDTSchen Tabellenwerken, enthaltenen Daten, erscheint es nicht als zweckmässig, hier eine Änderung zu treffen. Eine solche würde nur Verwirrung stiften.

Ganz allgemein erhält man somit ρ als Winkel zwischen einer Zonenachse und einer Flächennormale. In denjenigen Systemen, für welche die Basis normal zur c -Achse steht, kann ρ auch als Flächenwinkel gegenüber der Basis berechnet werden. Für diesen Fall erscheinen in der stereographischen Projektion die durch die c -Achse verlaufenden Zonen als Kreisdurchmesser, so dass $\varphi_{(hkl)}$, bzw. $\varphi_{(hk\bar{l})}$ vereinfacht als Winkel (010)/(hk0), bzw. (10 $\bar{1}$ 0)/(hk \bar{l} 0) berechnet werden können.

Was die (φ' , ρ')-Werte für die Zonenachsen (Kanten) anbelangt, so handelt es sich für sie um die Berechnung des Winkels zwischen zwei Zonenachsen oder zwischen Zonenachse und Flächennormalen.

Es handelt sich somit darum, vorerst allgemein gültige Ausdrücke zur Lösung folgender Aufgaben abzuleiten:

1. Winkel zwischen zwei Zonenachsen (Kanten);
2. Winkel zwischen zwei Flächennormalen;
3. Winkel zwischen Zonenachse und Flächennormalen.

Die allgemeinen Ausdrücke gelten für das trikline System. Aus ihnen lassen sich durch Spezialisierung gemäss der jeweils vorhandenen Symmetrieverhältnisse die Ausdrücke für die weiteren Kristallsysteme ableiten. Dies gilt vorerst für die Systeme mit drei kristallographischen Achsen bzw. dreigliedrigen Flächensymbolen (hkl) sowie dreigliedrigen Zonensymbolen [uvw]. Die Systeme, welche auf das vierachsige BRAVAISSche Achsenkreuz bezogen werden (hexagonales und trigonales bzw. rhomboedrisches System) und welche viergliedrige Flächensymbole (hkil) bzw. Zonensymbole [u v ω w] benötigen, müssen gesondert behandelt werden.

I. Kristallsysteme mit dreigliedrigen Flächen- und Zonensymbolen

1. Allgemeines und Winkel zweier Zonen

Die Gesamtheit aller Kanten (Zonenachsen) eines Kristalls, durch einen Punkt verlaufend gedacht, ergibt nach WEBER (1924) das Zonenbündel \mathfrak{Z} für diesen. Wählt man willkürlich drei, nicht komplanare, dieser Kantenrichtungen zu kristallographischen Achsen a, b, c (wobei konventionell $b = 1$ gesetzt wird), welche ihrerseits die Winkel α, β, γ einschliessen, und ordnet man ihnen die Vektoren $\mathfrak{a}, \mathfrak{b}, \mathfrak{c}$ zu, so ist die Vektorfigur des Zonenbündels, sofern das Verhältnis $u : v : w$ rational ist, gegeben durch:

$$\mathfrak{Z} = \pm u \mathfrak{a} \pm v \mathfrak{b} \pm w \mathfrak{c}. \quad (1)$$

Den Absolutwert eines bestimmten Vektors $|\mathfrak{z}|$ erhält man durch skalare Multiplikation mit sich selbst. Da im hier vorerst betrachteten allgemeinen (triklinen) Fall $\mathfrak{a}, \mathfrak{b}, \mathfrak{c}$ kein orthogonales, sondern ein schiefwinkliges (affines) System bilden, für welches die drei Basisvektoren von 90° verschiedene Winkel einschliessen, und auf welchen mit verschiedenen Massstäben gemessen wird, weist das skalare Produkt nicht die einfache, dreigliedrige Form der Orthogonalsysteme auf.

Bildet man $|\mathfrak{z}^2| = (u \mathfrak{a} + v \mathfrak{b} + w \mathfrak{c})^2$ nach den Regeln der gewöhnlichen Algebra, jedoch unter Berücksichtigung, dass für die skalare Multiplikation gilt, dass:

$$\begin{aligned} (\mathfrak{a} \mathfrak{a}) &= a^2, & (\mathfrak{b} \mathfrak{c}) &= b c \cos \alpha, \\ (\mathfrak{b} \mathfrak{b}) &= b^2, & (\mathfrak{c} \mathfrak{a}) &= c a \cos \beta, \\ (\mathfrak{c} \mathfrak{c}) &= c^2, & (\mathfrak{a} \mathfrak{b}) &= a b \cos \gamma, \end{aligned}$$

so erhält man:

$$|\mathfrak{z}^2| = u^2 a^2 + v^2 b^2 + w^2 c^2 + 2 u v a b \cos \gamma + 2 v w b c \cos \alpha + 2 w u c a \cos \beta. \quad (2)$$

Den gesuchten Winkel zweier Zonen \mathfrak{z}_1 und \mathfrak{z}_2 erhält man aus dem skalaren Produkt:

$$\cos (\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2) = \frac{(\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2)}{|\mathfrak{z}_1| |\mathfrak{z}_2|}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \text{worin } (\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2) &= u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + w_1 w_2 c^2 + (u_1 v_2 + u_2 v_1) a b \cos \gamma \\ &+ (v_1 w_2 + v_2 w_1) b c \cos \alpha + (w_1 u_2 + w_2 u_1) c a \cos \beta \end{aligned} \quad (4)$$

und $|\mathfrak{z}_1|$ bzw. $|\mathfrak{z}_2|$ gemäss (2) zu bilden sind.

2. Winkel zweier Flächennormalen

Um von den Zonen zu den Flächen zu gelangen, geht man davon aus, dass eine Fläche F durch einen doppelten Zonenverband bestimmt ist, dass somit ihre Normale \mathfrak{F} auf den beiden Zonenachsen \mathfrak{z}_1 und \mathfrak{z}_2 normal steht, das heisst

dass $\mathfrak{F} = [\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2]$. Aus

$$\mathfrak{z}_1 = u_1 \mathfrak{a} + v_1 \mathfrak{b} + w_1 \mathfrak{c},$$

$$\mathfrak{z}_2 = u_2 \mathfrak{a} + v_2 \mathfrak{b} + w_2 \mathfrak{c}$$

erhält man durch vektorielle Multiplikation, unter Berücksichtigung, dass hierfür

$$[\mathfrak{a} \mathfrak{a}] = [\mathfrak{b} \mathfrak{b}] = [\mathfrak{c} \mathfrak{c}] = 0,$$

$$\mathfrak{F} = [\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2] = u_1 v_2 [\mathfrak{a} \mathfrak{b}] + u_1 w_2 [\mathfrak{a} \mathfrak{c}] + v_1 u_2 [\mathfrak{b} \mathfrak{a}] + v_1 w_2 [\mathfrak{b} \mathfrak{c}] + v_1 u_2 [\mathfrak{c} \mathfrak{a}] + w_1 v_2 [\mathfrak{c} \mathfrak{b}].$$

Weil das vektorielle Produkt, im Gegensatz zum skalaren, nicht kommutativ ist, sondern vielmehr gilt, dass:

$$[\mathfrak{a} \mathfrak{b}] = -[\mathfrak{b} \mathfrak{a}], \quad [\mathfrak{b} \mathfrak{c}] = -[\mathfrak{c} \mathfrak{b}], \quad [\mathfrak{c} \mathfrak{a}] = -[\mathfrak{a} \mathfrak{c}]$$

folgt:

$$\mathfrak{F} = (v_1 w_2 - w_1 v_2) [\mathfrak{b} \mathfrak{c}] + (w_1 u_2 - u_1 w_2) [\mathfrak{c} \mathfrak{a}] + (u_1 v_2 - v_1 u_2) [\mathfrak{a} \mathfrak{b}]$$

oder in Determinantenform:

$$\mathfrak{F} = \begin{vmatrix} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{vmatrix} [\mathfrak{b} \mathfrak{c}] + \begin{vmatrix} w_1 & u_1 \\ w_2 & u_2 \end{vmatrix} [\mathfrak{c} \mathfrak{a}] + \begin{vmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{vmatrix} [\mathfrak{a} \mathfrak{b}]. \quad (5)$$

Vektorielle Berechnungen in affinen Systemen lassen sich oft entscheidend vereinfachen, wenn vom vorliegenden Grundsystem zum sog. reziproken System übergegangen wird. Setzt man hierfür definitionsgemäss:

$$\mathfrak{a}^* = \frac{[\mathfrak{b} \mathfrak{c}]}{[\mathfrak{a} \mathfrak{b} \mathfrak{c}]} = \frac{[\mathfrak{b} \mathfrak{c}]}{V}, \quad \mathfrak{b}^* = \frac{[\mathfrak{c} \mathfrak{a}]}{V}, \quad \mathfrak{c}^* = \frac{[\mathfrak{a} \mathfrak{b}]}{V}, \quad (6)$$

wobei $V = [\mathfrak{a} \mathfrak{b} \mathfrak{c}]$ das Volumen des von den Vektoren \mathfrak{a} , \mathfrak{b} , \mathfrak{c} aufgespannten Spates bedeutet, dann sind \mathfrak{a}^* , \mathfrak{b}^* , \mathfrak{c}^* drei Vektoren, welche auf den durch je zwei Vektoren des ersten Systems aufgespannten Ebenen normal stehen. Umgekehrt lässt sich auch zeigen, dass

$$\mathfrak{a} = \frac{[\mathfrak{b}^* \mathfrak{c}^*]}{V^*}, \quad \mathfrak{b} = \frac{[\mathfrak{c}^* \mathfrak{a}^*]}{V^*}, \quad \mathfrak{c} = \frac{[\mathfrak{a}^* \mathfrak{b}^*]}{V^*}, \quad (7)$$

das heisst dass die drei Vektoren \mathfrak{a} , \mathfrak{b} , \mathfrak{c} auch ihrerseits auf den durch je zwei der Vektoren des Systems \mathfrak{a}^* , \mathfrak{b}^* , \mathfrak{c}^* aufgespannten Ebenen normal stehen, wobei V^* das Volumen des von diesen aufgespannten Spates darstellt, sowie, dass $VV^* = 1$ ist. Man nennt die beiden Systeme \mathfrak{a} , \mathfrak{b} , \mathfrak{c} und \mathfrak{a}^* , \mathfrak{b}^* , \mathfrak{c}^* reziprok zueinander. Für die skalare Multiplikation ihrer Vektoren gilt folgendes Schema:

$$\begin{array}{c|ccc} & \mathfrak{a}^* & \mathfrak{b}^* & \mathfrak{c}^* \\ \hline \mathfrak{a} & 1 & 0 & 0 \\ \mathfrak{b} & 0 & 1 & 0 \\ \mathfrak{c} & 0 & 0 & 1 \end{array} \quad (8)$$

und für die absoluten Werte von a^* , b^* , c^* :

$$a^* = \frac{bc}{V} \sin \alpha, \quad b^* = \frac{ca}{V} \sin \beta, \quad c^* = \frac{ab}{V} \sin \gamma. \quad (9)$$

Ersetzt man in (5) nach dem bekannten Schema der «Zonenrechnung» die Determinanten durch die Flächenindizes (hkl) sowie die Vektorprodukte gemäss (6) durch die reziproken Vektoren, so erhält man den einfachen Ausdruck

$$\mathfrak{F} = V(ha^* + kb^* + lc^*) \quad (10)$$

und, in Analogie zu (2) wird im reziproken System:

$$|\mathfrak{F}^2| = V^2 \{h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2(hka^*b^* \cos \gamma^* + klb^*c^* \cos \alpha^* + lhc^*a^* \cos \beta^*)\}.$$

Kehrt man zum ursprünglichen System a , b , c zurück, so erhält man, unter Berücksichtigung von (9), sowie der (im Anhang abgeleiteten) Beziehungen zwischen den Winkeln α , β , γ , (Kantenwinkeln) und α^* , β^* , γ^* (Pinakoidwinkeln) des durch a , b , c aufgespannten Spates:

$$\begin{aligned} \cos \alpha^* &= \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}, & \cos \beta^* &= \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{\sin \gamma \sin \alpha}, \\ \cos \gamma^* &= \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta} \end{aligned} \quad (11)$$

den allgemein gebräuchlichen, jedoch wesentlich komplizierteren Ausdruck:

$$|\mathfrak{F}^2| = b^2 c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 b^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) hk + 2a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) kl + 2ab^2 c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) lh. \quad (12)$$

Den Winkel zweier Flächen F_1 und F_2 erhält man aus dem skalaren Produkt

$$\cos(\mathfrak{F}_1, \mathfrak{F}_2) = \frac{(\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2)}{|\mathfrak{F}_1| |\mathfrak{F}_2|}, \quad (13)$$

wobei

$$\begin{aligned} (\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2) &= b^2 c^2 \sin^2 \alpha \cdot h_1 h_2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k_1 k_2 + a^2 b^2 \sin^2 \gamma \cdot l_1 l_2 \\ &+ c^2 ab (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) (h_1 k_2 + h_2 k_1) \\ &+ a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) (k_1 l_2 + k_2 l_1) \\ &+ b^2 ca (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) (l_1 h_2 + l_2 h_1). \end{aligned} \quad (14)$$

$|\mathfrak{F}_1|$ und $|\mathfrak{F}_2|$ berechnen sich gemäss (12).

3. Winkel zwischen Zonenachse und Flächennormale

Der gesuchte Winkel δ zwischen Zonenachse und Flächennormale ergibt sich aus dem skalaren Produkt

$$\cos \delta = \frac{(\mathfrak{F} \mathfrak{z})}{|\mathfrak{F}| |\mathfrak{z}|} \quad (15)$$

durch Multiplikation von (10) und (1). Unter Berücksichtigung von (8) wird

$$(\mathfrak{F} \mathfrak{z}) = V (h a^* + k b^* + l c^*) (u a + v b + w c) = V (h u + k v + l w)$$

und

$$\cos \delta = V \frac{(h u + k v + l w)}{|\mathfrak{F}| |\mathfrak{z}|}. \quad (16)$$

$|\mathfrak{F}|$ und $|\mathfrak{z}|$ berechnen sich gemäss (12) und (2). Das Volumen V des von a , b , c aufgespannten Spates ergibt sich im allgemeinen Fall zu

$$V = a b c \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}. \quad (17)$$

Die Ableitung des Ausdruckes erfolgt im Anhang.

II. Kristallsysteme mit viergliedrigen Flächen- und Zonensymbolen

1. Allgemeines und Winkel zweier Zonen

Die Forderung, dass die Indizes gleichwertiger Flächen einer Form sich nur in der Permutation ihrer Glieder unterscheiden sollen, führt notgedrungen dazu, dass für das hexagonale und trigonale bzw. rhomboedrische System eine Achsenkombination von entsprechender Symmetrie eingeführt werden muss. Diesem Postulat genügen die durch MILLER und BRAVAIS eingeführten Achsensysteme, von welchem sich das letztere fast ausschliesslich durchgesetzt hat. Es weist bekanntlich drei gleichwertige, in einer Ebene liegende und sich unter Winkel von 120° schneidende Achsen auf, normal zu welchen die ungleichwertige c -Achse steht. Es ist somit:

$$a_1 = a_2 = a_3 = 1 \neq c; \quad \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 120^\circ, \quad \gamma = 90^\circ.$$

Konsequenterweise resultieren für diese Achsenwahl viergliedrige Flächensymbole vom Typus $(hkil)$. Da eine Fläche durch vier Punkte überbestimmt ist, muss zwischen den vier Indizes eine Beziehung bestehen. Sie lautet $h + k + i = 0$. In analoger Weise lassen sich auch die Zonen durch viergliedrige Indizes symbolisieren, wobei es, angesichts der Wichtigkeit des Themas, merkwürdig lange gedauert hat, bis die den Flächenindizes konforme Formulierung gefunden wurde. Diese gelang erst L. WEBER (1922) mit der Einführung von viergliedrigen Zonensymbolen vom Typus $[uv\omega w]$, für welche, in vollkommener Analogie zu den dreigliedrigen, die Beziehung $h u + k v + i \omega + l w = 0$ Gültigkeit hat. Für den Umgang mit diesen viergliedrigen Symbolen gilt dabei folgender Satz von WEBER (1922):

«Um aus zwei viergliedrigen Flächen- (oder Zonen-) Symbolen das viergliedrige Zonen- (oder Flächen-) Symbol abzuleiten, verwandelt man die betreffenden Symbole zuerst in dreigliedrige, indem man den dritten Index vom ersten und zweiten subtrahiert, im übrigen aber unterdrückt. Die reduzierten Symbole werden dem gewöhnlichen Algorithmus unterworfen. Im Resultat ist als dritter Index die negative Summe der beiden ersten einzusetzen.»

Diese Symbolik lässt sich auch auf die vektorielle Darstellung anwenden. Sie gestattet, die zu den bereits gegebenen Ausdrücken analogen Formeln für das hexagonale und trigonale bzw. rhomboedrische System herzuleiten.

Nach der gegebenen Regel entspricht somit der Zone $[u v \omega w]$ der Vektor

$$\mathfrak{z} = (u - \omega) \mathfrak{a}_1 + (v - \omega) \mathfrak{a}_2 + w \mathfrak{c}. \quad (18)$$

Dessen Absolutwert wird, in Analogie zu (3), durch skalare Multiplikation mit sich selbst erhalten, wobei zu beachten ist, dass $\cos(\mathfrak{a}_1, \mathfrak{a}_2) = \cos 120^\circ = -\frac{1}{2}$. Es wird somit

$$\begin{aligned} |\mathfrak{z}^2| &= u^2 + v^2 + \omega^2 - uv - v\omega - \omega u + c^2 w^2 \\ &= \frac{3}{2}(u^2 + v^2 + \omega^2) - \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \omega^2 + 2uv + 2v\omega + 2\omega u) + c^2 w^2 \\ &= \frac{3}{2}(u^2 + v^2 + \omega^2) - \frac{1}{2}(u + v + \omega)^2 + c^2 w^2. \end{aligned}$$

Da jedoch nach Definition $u + v + \omega = 0$ ist, folgt:

$$|\mathfrak{z}^2| = \frac{3}{2}(u^2 + v^2 + \omega^2) + c^2 w^2. \quad (19)$$

Für das skalare Produkt $(\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2)$ erhält man, in Analogie zu (4):

$$(\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2) = \frac{3}{2}(u_1 u_2 + v_1 v_2 + \omega_1 \omega_2) + c^2 w_1 w_2 \quad (20)$$

und für den Winkel zweier Zonen \mathfrak{z}_1 und \mathfrak{z}_2 :

$$\cos(\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2) = \frac{(\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2)}{|\mathfrak{z}_1| |\mathfrak{z}_2|},$$

wobei $(\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2)$ und $|\mathfrak{z}_{1,2}|$ gemäss (20) und (19) zu berechnen sind. Nach Kürzung folgt:

$$\cos(\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2) = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + \omega_1 \omega_2 + \frac{2c^2}{3} w_1 w_2}{\sqrt{\left(u_1^2 + v_1^2 + \omega_1^2 + \frac{2c^2}{3} w_1^2\right) \left(u_2^2 + v_2^2 + \omega_2^2 + \frac{2c^2}{3} w_2^2\right)}}. \quad (21)$$

2. Winkel zweier Flächennormalen

Der Normalvektor einer Fläche \mathfrak{F} , welche durch die zwei Zonen \mathfrak{z}_1 und \mathfrak{z}_2 bestimmt ist, ergibt sich als $\mathfrak{F} = [\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2]$, in Analogie zu (5), als

$$\mathfrak{F} = [\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2] = \begin{vmatrix} (v_1 - \omega_1) & w_1 \\ (v_2 - \omega_2) & w_2 \end{vmatrix} [\mathfrak{a}_2 \mathfrak{c}] + \begin{vmatrix} w_1 & (u_1 - \omega_1) \\ w_2 & (u_2 - \omega_2) \end{vmatrix} [\mathfrak{c} \mathfrak{a}_1] + \begin{vmatrix} (u_1 - \omega_1) & (v_1 - \omega_1) \\ (v_2 - \omega_2) & (u_2 - \omega_2) \end{vmatrix} [\mathfrak{a}_1 \mathfrak{a}_2],$$

woraus sich, in Analogie zu (10), durch Einführung der Flächenindizes und Einführung der reziproken Vektoren ergibt:

$$\mathfrak{F} = V(h \mathfrak{a}_1^* + k \mathfrak{a}_2^* + l \mathfrak{c}^*). \quad (22)$$

Durch Quadrierung erhält man daraus als Absolutwert von \mathfrak{F} im reziproken System:

$$|\mathfrak{F}^2| = V^2 \{(h a_1^* + k a_2^* + l c^*)^2\} = V^2 \{h^2 a_1^{*2} + k a_2^{*2} + l^2 c^{*2} - 2 h k (a_1^* a_2^*)\}$$

und nach Übergang zum ursprünglichen System a, b, c , unter Berücksichtigung, dass

$$c^* = \frac{a_1 a_2}{V} \sin 120^\circ = \frac{a_1 a_2}{V} \frac{1}{2} \sqrt{3} \quad \text{und} \quad (a_1 a_2) = a_1 a_2 \cos 120^\circ = -\frac{1}{2} a_1 a_2 \quad \text{ist,}$$

$$|\mathfrak{F}^2| = h^2 a_2^2 c^2 + k^2 a_1^2 c^2 + \frac{3}{4} a_1^2 a_2^2 l^2 + h k a_1 a_2 c^2,$$

oder, weil $a_1 = a_2 = 1$ ist,

$$\begin{aligned} |\mathfrak{F}^2| &= h^2 c^2 + k^2 c^2 + \frac{3}{4} l^2 + h k c^2 = c^2 (h^2 + k^2 + h k) + \frac{3}{4} l^2 \\ &= \frac{c^2}{2} [(h^2 + k^2) + (h + k)^2] + \frac{3}{4} l^2, \end{aligned}$$

bzw. weil $(h + k)^2 = i^2$, unter Wiedereinführung des unterdrückten, dritten Index:

$$|\mathfrak{F}^2| = \frac{c^2}{2} (h^2 + k^2 + i^2) + \frac{3}{4} l^2. \quad (23)$$

Für das skalare Produkt zweier Flächennormalen \mathfrak{F}_1 und \mathfrak{F}_2 erhält man:

$$(\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2) = c^2 \left(h_1 h_2 + k_1 k_2 + \frac{h_1 k_2 + h_2 k_1}{2} \right) + \frac{3}{4} l_1 l_2,$$

oder, wenn, entsprechend $h + k + i = 0$, wieder zum viergliedrigen Symbol übergegangen wird:

$$\begin{aligned} (\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2) &= c^2 \left(h_1 h_2 + k_1 k_2 - \frac{h_1 (i_2 + h_2) + (k_2 + i_2) k_1}{2} \right) + \frac{3}{4} l_1 l_2 \\ &= c^2 \left(h_1 h_2 + k_1 k_2 - \frac{(h_1 + k_1) i_2 + h_1 h_2 + k_1 k_2}{2} \right) + \frac{3}{4} l_1 l_2, \\ (\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2) &= \frac{c^2}{2} (h_1 h_2 + k_1 k_2 + i_1 i_2) + \frac{3}{4} l_1 l_2. \end{aligned} \quad (24)$$

Für den Winkel zweier Flächennormalen \mathfrak{F}_1 und \mathfrak{F}_2 erhält man in Analogie zu (13):

$$\cos (\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2) = \frac{(\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2)}{|\mathfrak{F}_1| |\mathfrak{F}_2|}, \quad (25)$$

wobei sich $(\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2)$ gemäss (24) und $|\mathfrak{F}_1|$ bzw. $|\mathfrak{F}_2|$ nach (23) berechnen. Gekürzt ergibt sich:

$$\cos (\mathfrak{F}_1, \mathfrak{F}_2) = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + i_1 i_2 + \frac{3}{2 c^2} l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + i_1^2 + \frac{3}{2 c^2} l_1^2) (h_2^2 + k_2^2 + i_2^2 + \frac{3}{2 c^2} l_2^2)}}. \quad (26)$$

3. Winkel zwischen Zonenachse und Flächennormale

Der Winkel δ zwischen Zonenachse \mathfrak{z} und Flächennormale \mathfrak{F} berechnet sich, in Analogie zu (15), aus dem skalaren Produkt:

$$\cos \delta = \frac{(\mathfrak{z} \mathfrak{F})}{|\mathfrak{z}| |\mathfrak{F}|}. \quad (27)$$

Nach (18) und (22), sowie unter Berücksichtigung von (8) wird:

$$\begin{aligned} (\mathfrak{z} \mathfrak{F}) &= \{(u - \omega) a_1 + (v - \omega) a_2 + w c\} \{V (h a_1^* + k a_2^* + l c^*)\} \\ &= V (u h + v k + \omega i + w l) \end{aligned}$$

und unter Benutzung von (19) und (23) erhält man explicite:

$$\cos \delta = \frac{V (u h + v k + \omega i + w l)}{\sqrt{\frac{3}{2} (u^2 + v^2 + \omega^2) + c^2 w^2} \sqrt{\frac{c^2}{2} (h^2 + k^2 + i^2) + \frac{3}{4} l^2}}, \quad (28)$$

wobei $V = \frac{c}{2} \sqrt{3}$.

C. Berechnung der (φ, ρ)-Werte für die Flächen in den einzelnen Kristallsystemen

I. Systeme mit dreigliedrigen Flächensymbolen (hkl)

a) *Triklines System*: $a \neq (b = 1) \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

α) Berechnung von $\rho = [001]/(hkl)$

Nach (16) ist für $u = v = 0$ und $w = 1$

$$\cos \rho = V \frac{l}{|\mathfrak{z}| |\mathfrak{F}|}.$$

Nach (17) ist für $b = 1$

$$V = a c \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}.$$

Nach (12) ist für $b = 1$

$$|\mathfrak{F}| = \sqrt{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k + 2 a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h}.$$

Nach (2) ist für $u = v = 0$ und $w = 1$

$$\mathfrak{z} = \sqrt{c^2} = c.$$

Somit wird:

$$\cos \rho = \frac{a c l \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}}{c |\mathfrak{F}|},$$

$$\cos \rho = a l \sqrt{\frac{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k + 2 a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h}} \quad (29a)$$

β) Berechnung von φ

Man berechnet zuerst den Hilfswinkel ϵ (Fig. 1). $\epsilon = (hkl)/(010) = (\mathfrak{F}_1, \mathfrak{F}_2)$, gemäss (13),

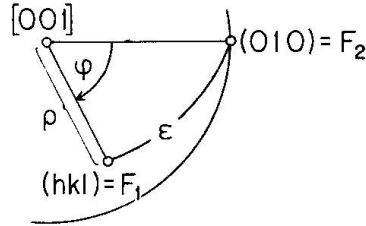


Fig. 1.

wobei

$$\begin{aligned} h_1 &= h, & k_1 &= k, & l_1 &= l, \\ h_2 &= 0, & k_2 &= 1, & l_2 &= 0. \end{aligned}$$

$(\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2)$ berechnet sich nach (14), $|\mathfrak{F}_1|$ und $|\mathfrak{F}_2|$ nach (12)

$$|\mathfrak{F}_1| = \sqrt{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k + 2 a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h},$$

$$|\mathfrak{F}_2| = \sqrt{c^2 a^2 \sin^2 \beta} = c a \sin \beta,$$

$$\cos \epsilon = \frac{c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k + a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) l}{|\mathfrak{F}_1| c a \sin \beta}.$$

Nach dem Cosinussatz ist jedoch $\cos \epsilon = \cos \rho \cos 90^\circ + \sin \rho \sin 90^\circ \cos \varphi$ und $\cos \varphi = \cos \epsilon / \sin \rho$

$$\cos \varphi = \frac{c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k + a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) l}{|\mathfrak{F}_1| c a \sin \beta \sin \rho},$$

oder, explicite:

$$\cos \varphi = \frac{c (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h + c a \sin^2 \beta \cdot k + a (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) l}{\sin \beta \sin \rho \sqrt{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k + 2 a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h}} \quad (29b)$$

Durch geeignete Umformung lässt sich ρ in (29b) eliminieren. Setzt man, zur Vereinfachung, vorübergehend den Radikanden im Nenner

$$\left(\frac{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + c^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k}{+ 2 a c^2 (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h} \right) = T,$$

so erhält man aus (29a)

$$\sin \rho = \sqrt{1 - \cos^2 \rho} = \sqrt{1 - \frac{a^2 l^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)}{T}} =$$

$$\sqrt{\frac{T - a^2 l^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)}{T}}$$

und aus (29b)

$$\cos \varphi = \frac{c (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h + c a \sin^2 \beta \cdot k + a (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) l}{\sin \beta \sin \rho \sqrt{T}},$$

bzw. explicite:

$\cos \varphi =$

$$\frac{c (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h + c a \sin^2 \beta \cdot k + a (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) l}{\sin \beta \sqrt{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k + 2 a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h - a^2 l^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)}} \quad (29c)$$

Diese, für den allgemeinen Fall des triklinen Systems abgeleiteten Ausdrücke spezialisieren sich für die höhersymmetrischen Systeme mit dreigliedrigen Flächenindizes (hkl) wie folgt:

b) *Monoklines System*: $a \neq (b = 1) \neq c$; $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

$$\cos \rho = \frac{a l \sqrt{1 - \cos^2 \beta}}{\sqrt{c^2 h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 l^2 - 2 c a \cos \beta \cdot l h}}$$

$$= \frac{l \sin \beta}{\sqrt{\left(\frac{c}{a}\right)^2 h^2 + c^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + l^2 - 2 \frac{c}{a} \cos \beta \cdot l h}},$$

$$\cos \rho = \frac{l \sin \beta}{c \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \sin^2 \beta \cdot k^2 + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2}{a c} \cos \beta \cdot l h}}, \quad (30a)$$

$$\cos \varphi = \frac{c a \sin^2 \beta \cdot k}{\sin \beta \sin \rho \sqrt{c^2 h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 l^2 - 2 a c \cos \beta \cdot l h}},$$

$$\cos \varphi = \frac{k \sin \beta}{\sin \rho \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \sin^2 \beta \cdot k^2 + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2}{a c} \cos \beta \cdot l h}}. \quad (30b)$$

Auch hier lässt sich, durch Eliminierung von ρ, φ allein durch das Achsenverhältnis ausdrücken. Setzt man den Radikanden in (30b)

$$\left(\frac{h^2}{a^2} + \sin^2 \beta \cdot k^2 + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2}{a c} \cos \beta \cdot l h\right) = T,$$

so wird $\cos \rho = \frac{l \sin \beta}{c \sqrt{T}}$ und $\sin \rho = \sqrt{1 - \frac{l^2 \sin^2 \beta}{c^2 T}} = \sqrt{\frac{c^2 T - l^2 \sin^2 \beta}{c^2 T}}$

und

$$\cos \varphi = \frac{k \sin \beta}{\sqrt{\frac{c^2 T - l^2 \sin^2 \beta}{c^2 T}} \sqrt{T}} = \frac{k \sin \beta}{\sqrt{T - \left(\frac{l}{c} \sin \beta\right)^2}},$$

$$\cos \varphi = \frac{k \sin \beta}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \sin^2 \beta \cdot k^2 - \frac{2}{ac} \cos \beta \cdot lh + \frac{l^2}{c^2} \cos^2 \beta}}. \quad (30c)$$

Der Ausdruck folgt auch aus (29c) für $\alpha = \gamma = 90^\circ$ gesetzt.

c) *Orthorhombisches System*: $a \neq (b = 1) \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$\cos \rho = \frac{l}{c \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + k^2 + \frac{l^2}{c^2}}}. \quad (31a)$$

Da im orthorhombischen System $(001) \perp [001]$ steht, ist $\varphi_{(hkl)} = \varphi_{(hko)}$. Das Azimut irgend einer Fläche (hkl) kann daher nach (13) als $(010)/(hk0)$ berechnet werden, ohne dass ρ in die Rechnung eingeht.

Es ist: $h_1 = h$, $k_1 = k$, $l_1 = 0$ und $h_2 = 0$, $k_2 = 1$, $l_2 = 0$.

Nach (14) ist $(\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2) = c^2 a^2 k$ und nach (12) $|\mathfrak{F}_1| = \sqrt{c^2 h^2 + c^2 a^2 k^2}$ und $|\mathfrak{F}_2| = \sqrt{c^2 a^2} = ca$.

Somit wird:

$$\cos \varphi = \frac{c^2 a^2 k}{ca \sqrt{c^2 h^2 + c^2 a^2 k^2}} = \frac{ak}{\sqrt{h^2 + a^2 k^2}} = \frac{k}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + k^2}}. \quad (31b)$$

d) *Tetragonales System*: $a = b = 1 \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$\cos \rho = \frac{l}{\sqrt{c^2 (h^2 + k^2) + l^2}} = \frac{l}{c \sqrt{h^2 + k^2 + \frac{l^2}{c^2}}}. \quad (32a)$$

Auch hier ist $\varphi_{(hkl)} = \varphi_{(hko)} = (010)/(hk0)$, so dass

$$\cos \varphi = \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}}. \quad (32b)$$

e) *Kubisches System*: $a = b = c = 1$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$\cos \rho = \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (33a)$$

$$\cos \varphi = \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}}. \quad (33b)$$

II. Systeme mit viergliedrigen Flächensymbolen $(hki\bar{l})$ $\alpha)$ Berechnung von $\rho = [0001]/(hki\bar{l})$ Nach (28) wird für $u = v = \omega = 0$ und $w = 1$

$$\cos \rho = \frac{Vl}{|\mathfrak{z}||\mathfrak{F}|}.$$

Nach (17) wird

$$V = \frac{c}{2} \sqrt{3}.$$

Nach (19) wird

$$|\mathfrak{z}| = \sqrt{c^2 w^2} = c.$$

Nach (23) wird

$$\mathfrak{F} = \sqrt{\frac{c^2}{2}(h^2 + k^2 + i^2) + \frac{3}{4}l^2} = \sqrt{\frac{c^2}{2}\left(h^2 + k^2 + i^2 + \frac{3}{2c^2}l^2\right)}.$$

$$\text{Somit } \cos \rho = \frac{\frac{c}{2} \sqrt{3} l}{c \sqrt{\frac{c^2}{2}\left(h^2 + k^2 + i^2 + \frac{3}{2c^2}l^2\right)}} = \frac{l \sqrt{\frac{3}{2}}}{c \sqrt{\left(h^2 + k^2 + i^2 + \frac{3}{2c^2}l^2\right)}}. \quad (34a)$$

 $\beta)$ Berechnung von φ

Da im hexagonalen und trigonalen bzw. rhomboedrischen System ebenfalls $(0001) \perp [0001]$ steht, kann $\varphi_{(hki\bar{l})}$ als Winkel $(10\bar{1}0)/(hki\bar{1}0)$ berechnet werden, das heisst als Winkel zweier Flächen F_1 und F_2 , gemäss (26).

Setzt man $h_1 = h$, $k_1 = k$, $i_1 = \bar{i}$, $l_1 = 0$, sowie $h_2 = 1$, $k_2 = 0$, $i_2 = \bar{1}$, $l_2 = 0$, so hat man gemäss (24)

$$(\mathfrak{F}_1 \mathfrak{F}_2) = \frac{c^2}{2}(h+i)$$

und gemäss (23)

$$|\mathfrak{F}_1| = \sqrt{\frac{c^2}{2}(h^2 + k^2 + i^2)} \quad \text{und} \quad |\mathfrak{F}_2| = \sqrt{2 \frac{c^2}{2}} = c,$$

$$\cos \varphi = \frac{\frac{c^2}{2}(h+i)}{c \sqrt{\frac{c^2}{2}(h^2 + k^2 + i^2)}} = \frac{(h+i)}{\sqrt{2(h^2 + k^2 + i^2)}}. \quad (34b)$$

D. Berechnung der (φ', ϱ') -Werte für Zonenachsen in den einzelnen Systemen**I. Systeme mit dreigliedrigen Zonensymbolen $[uvw]$** *a) Triklines System:* $a \neq (b = 1) \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Die Poldistanz $\rho' = [uvw]/[001]$ berechnet sich als Winkel zweier Zonenachsen nach (3), wobei $u_1 = u$, $v_1 = v$, $w_1 = w$ und $u_2 = v_2 = 0$, $w_2 = 1$.

Nach (4) ist $(\mathfrak{z}_1 \mathfrak{z}_2) = wc^2 + vc \cos \alpha + uca \cos \beta$.

Nach (2) ist, für $b = 1$ gesetzt,

$$|\mathfrak{z}_1| = \sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2uva \cos \gamma + 2vwc \cos \alpha + 2wuca \cos \beta}$$

und $|\mathfrak{z}_2| = \sqrt{c^2} = c$,

$$\cos \rho' = \frac{wc^2 + vc \cos \alpha + uca \cos \beta}{c \sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2vwc \cos \alpha + 2wuca \cos \beta + 2uva \cos \gamma}},$$

$$\cos \rho' = \frac{wc + v \cos \alpha + ua \cos \beta}{\sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2(vwc \cos \alpha + wuca \cos \beta + uva \cos \gamma)}}. \quad (35a)$$

Zur Berechnung von φ' führt man (Fig. 2) den Hilfswinkel $\epsilon = [uvw]/(010)$ ein.

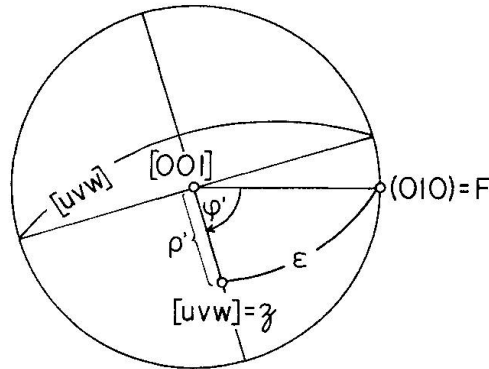


Fig. 2.

Für $u = u$, $v = v$, $w = w$ sowie $h = 0$, $k = 1$ und $l = 0$ wird nach (16)

$$\cos \epsilon = V \frac{v}{|\mathfrak{z}| |\mathfrak{F}|},$$

wobei nach (2)

$$|\mathfrak{z}| = \sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2(vwc \cos \alpha + wuca \cos \beta + uva \cos \gamma)}$$

und nach (12)

$$|\mathfrak{F}| = \sqrt{c^2 a^2 \sin^2 \beta} = ca \sin \beta,$$

sowie nach (17)

$$V = ac \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma},$$

somit wird

$$\cos \epsilon = \frac{vac \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}}{ca \sin \beta |\mathfrak{z}|}.$$

Nach dem Cosinussatz ist $\cos \epsilon = \cos \rho' \cos 90^\circ + \sin \rho' \sin 90^\circ \cos \varphi'$ und $\cos \varphi' = \cos \epsilon / \sin \rho'$

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sin \rho' \sin \beta} \sqrt{\frac{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2(v w c \cos \alpha + w u c a \cos \beta + u v a \cos \gamma)}}. \quad (35b)$$

Eine leichte Umformung ermöglicht auch hier das Azimut φ' durch das Achsenverhältnis allein auszudrücken. Setzt man hierzu den Radikanden von (35a)

$$u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2(v w c \cos \alpha + w u c a \cos \beta + u v a \cos \gamma) = T,$$

so erhält man aus (35a)

$$\sin \rho' = \sqrt{1 - \frac{(w c + v \cos \alpha + u \cos \beta)^2}{T}} = \sqrt{\frac{T - (w c + v \cos \alpha + u c \cos \beta)^2}{T}}$$

und aus (35b)

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sin \beta} \sqrt{\frac{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}{T - (w c + v \cos \alpha + u a \cos \beta)^2}},$$

woraus durch Ausrechnen des Nenners des Radikanden nach weiterer Umformung folgt:

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sin \beta} \sqrt{\frac{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}{u^2 a^2 \sin^2 \beta + v^2 \sin^2 \alpha - 2 u v a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)}}. \quad (35c)$$

Für die höhersymmetrischen Systeme mit dreigliedrigen Zonensymbolen $[u v w]$ spezialisieren sich diese Ausdrücke wie folgt:

b) *Monoklines System*: $a \neq (b = 1) \neq c$; $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

$$\cos \rho' = \frac{w c + u a \cos \beta}{\sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2 w u c a \cos \beta}}, \quad (36a)$$

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sin \rho' \sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2 w u c a \cos \beta}}. \quad (36b)$$

Auch hier lässt sich das Azimut φ' durch das Achsenverhältnis allein ausdrücken, unter Eliminierung von ρ' . Setzt man den Radikanden in (36a)

$$u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2 w u c a \cos \beta = T,$$

so erhält man:

$$\sin \rho' = \sqrt{1 - \frac{(w c + u a \cos \beta)^2}{T}} = \sqrt{\frac{T - w^2 c^2 - 2 w c u a \cos \beta - u^2 a^2 \cos^2 \beta}{T}},$$

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{\frac{T - w^2 c^2 - 2 w c u a \cos \beta - u^2 a^2 \cos^2 \beta}{T}} \sqrt{T}}$$

und nach leichter Umformung:

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{u^2 a^2 \sin^2 \beta + v^2}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{u^2}{v^2} a^2 \sin^2 \beta + 1}}. \quad (36c)$$

Der Ausdruck geht auch aus (35c), für $\alpha = \gamma = 90^\circ$ gesetzt, hervor.

c) *Orthorhombisches System*: $a \neq (b = 1) \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$\cos \rho' = \frac{w c}{\sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2}}. \quad (37a)$$

Da im orthorhombischen System $(001) \perp [001]$ steht, kann $\varphi_{[uvw]}$ als Winkel $[uv0]/[010]$ nach (3) berechnet werden.

Es ist $u_1 = u$, $v_1 = v$, $w = 0$ und $u_2 = 0$, $w_2 = 1$, $w_2 = 0$.

Nach (2) wird hierfür:

$$|\hat{z}_1| = \sqrt{u^2 a^2 + v^2}, \quad |\hat{z}_2| = 1 \quad \text{und} \quad (\hat{z}_1 \hat{z}_2) = v, \\ \cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{u^2 a^2 + v^2}}. \quad (37b)$$

Der Ausdruck geht auch aus (36b) für $\rho' = 90^\circ$ und $w = 0$ bzw. aus (36c) für $\beta = 90^\circ$ gesetzt hervor.

d) *Tetragonales System*: $a = b = 1 \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$\cos \rho' = \frac{w c}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2 c^2}}. \quad (38a)$$

Auch hier ist $\varphi'_{(uvw)}$ durch $\varphi'_{(uv0)} = [010]/[uv0]$ gegeben, so dass

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}}. \quad (38b)$$

e) *Kubisches System*: $a = b = c = 1$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$\cos \rho' = \frac{w}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}}, \quad (39a) \quad \cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}}. \quad (39b)$$

Die Ausdrücke (39a) und (39b) sind mit denjenigen für die Flächen des kubischen Systems (33a) und (33b) identisch, wenn man $[uvw] = (hkl)$ setzt. Dies besagt, dass im kubischen System Flächen und Zonen mit numerisch gleichlautenden Indizes normal zueinander stehen.

II. Systeme mit viergliedrigen Zonensymbolen $[uvw\omega]$

Hexagonales und trigonales bzw. rhomboedrisches System:

$$a_1 = a_2 = a_3 = 1 \neq c;$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 120^\circ, \gamma = 90^\circ.$$

Die Poldistanz ρ' berechnet sich als Winkel zweier Zonen, $[uvw\omega]/[0001]$ gemäss (21) (Fig. 3). Es ist $u_1 = u, v_1 = v, \omega_1 = \omega, w_1 = w$ und $u_2 = v_2 = \omega_2 = 0, w_2 = 1$. Somit wird:

$$\cos \rho' = \frac{\frac{2c^2}{3}w}{\sqrt{u^2 + v^2 + \omega^2 + \frac{2c^2}{3}w^2}} = \frac{cw\sqrt{\frac{2}{3}}}{\sqrt{u^2 + v^2 + \omega^2 + \frac{2c^2}{3}w^2}}. \quad (40a)$$

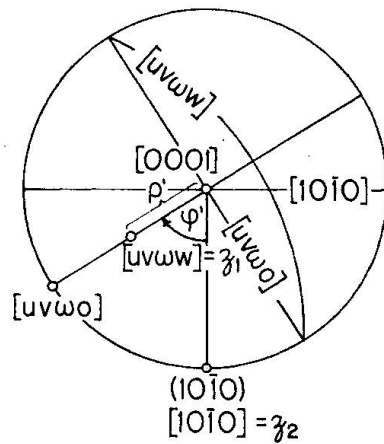


Fig. 3.

φ' wird von der auf $(10\bar{1}0)$ normal stehenden Zonenachse $[10\bar{1}0]$ aus gezählt und kann somit, weil auch hier (0001) auf $[0001]$ normal steht, nach (21) als Winkel $[uvw\omega]/[10\bar{1}0]$ berechnet werden. Es wird somit:

$$\cos \varphi' = \frac{(u - \omega)}{\sqrt{u^2 + v^2 + \omega^2} \sqrt{1 + 1}} = \frac{(u - \omega)}{\sqrt{2(u^2 + v^2 + \omega^2)}}. \quad (40b)$$

E. Zusammenstellung der Umrechnungsformeln

I. (φ, ρ)-Werte der Flächen

a) Triklinen System

$$\cos \rho = a l \sqrt{\frac{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k + 2 a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 a c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h}} \quad (29a)$$

$$\cos \varphi = \frac{c (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h + c a \sin^2 \beta \cdot k + a (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) l}{\sin \beta \sin \rho \sqrt{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k + 2 a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h}} \quad (29b)$$

$$\cos \varphi = \frac{c (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h + c a \sin^2 \beta \cdot k + a (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) l}{\sin \beta \sqrt{c^2 \sin^2 \alpha \cdot h^2 + c^2 a^2 \sin^2 \beta \cdot k^2 + a^2 \sin^2 \gamma \cdot l^2 + 2 c^2 a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) h k + 2 a^2 c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) k l + 2 c a (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) l h - a^2 l^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)}} \quad (29c)$$

b) *Monoklines System*

$$\cos \rho = \frac{l \sin \beta}{c \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \sin^2 \beta \cdot k^2 + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2}{a c} \cos \beta \cdot l h}}, \quad (30a)$$

$$\cos \varphi = \frac{k \sin \beta}{\sin \rho \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \sin^2 \beta \cdot k^2 + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2}{a c} \cos \beta \cdot l h}}, \quad (30b)$$

$$\cos \varphi = \frac{k \sin \beta}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \sin^2 \beta \cdot k^2 - \frac{2}{a c} \cos \beta \cdot l h + \frac{l^2}{c^2} \cos^2 \beta}}. \quad (30c)$$

c) *Orthorhombisches System*

$$\cos \rho = \frac{l}{c \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + k^2 + \frac{l^2}{c^2}}}, \quad (31a) \quad \cos \varphi = \frac{k}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + k^2}}. \quad (31b)$$

d) *Tetragonales System*

$$\cos \rho = \frac{l}{c \sqrt{h^2 + k^2 + \frac{l^2}{c^2}}}, \quad (32a) \quad \cos \varphi = \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}}, \quad (32b)$$

e) *Hexagonales und trigonales bzw. rhomboedrisches System*

$$\cos \rho = \frac{l \sqrt{\frac{3}{2}}}{c \sqrt{h^2 + k^2 + i^2 + \frac{3}{2} \frac{l^2}{c^2}}}, \quad (34a) \quad \cos \varphi = \frac{(h+i)}{\sqrt{2(h^2 + k^2 + i^2)}}. \quad (34b)$$

f) *Kubisches System*

$$\cos \rho = \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (33a) \quad \cos \varphi = \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}}. \quad (33b)$$

II. (φ, ρ) -Werte der Zonenachsen (Kanten)*a) Triklines System*

$$\cos \rho' = \frac{w c + v \cos \alpha + u a \cos \beta}{\sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2(v w c \cos \alpha + w u c a \cos \beta + u v a \cos \gamma)}}, \quad (35 a)$$

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sin \rho' \sin \beta} \sqrt{\frac{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2(v w c \cos \alpha + w u c a \cos \beta + u v a \cos \gamma)}}, \quad (35 b)$$

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sin \beta} \sqrt{\frac{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}{u^2 a^2 \sin^2 \beta + v^2 \sin^2 \alpha - 2 u v a (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)}}. \quad (35 c)$$

b) Monoklines System

$$\cos \rho' = \frac{w c + u a \cos \beta}{\sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2 w u c a \cos \beta}}, \quad (36 a)$$

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sin \rho' \sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2 + 2 w u c a \cos \beta}}, \quad (36 b)$$

$$\cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{u^2 a^2 \sin^2 \beta + v^2}}. \quad (36 c)$$

c) Orthorhombisches System

$$\cos \rho' = \frac{w c}{\sqrt{u^2 a^2 + v^2 + w^2 c^2}}, \quad (37 a) \quad \cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{u^2 a^2 + v^2}}. \quad (37 b)$$

d) Tetragonales System

$$\cos \rho' = \frac{w c}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2 c^2}}, \quad (38 a) \quad \cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}}. \quad (38 b)$$

e) Hexagonales und trigonales bzw. rhomboedrisches System

$$\cos \rho' = \frac{c w \sqrt{\frac{2}{3}}}{\sqrt{u^2 + v^2 + \omega^2 + \frac{2 c^2}{3} w^2}}, \quad (40 a) \quad \cos \varphi' = \frac{(u - \omega)}{\sqrt{2(u^2 + v^2 + \omega^2)}}. \quad (40 b)$$

f) Kubisches System

$$\cos \rho' = \frac{w}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}}, \quad (39 a) \quad \cos \varphi' = \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}}. \quad (39 b)$$

F. Anhang

I. Berechnung der Pinakoidwinkel $\alpha^*, \beta^*, \gamma^*$ aus den Kantenwinkeln α, β, γ

Bezeichnet man in einem schiefwinkligen Vektortripel a, b, c die von a, b aufgespannte Ebene mit C (Fig. 4), die durch b, c aufgespannte mit A und die

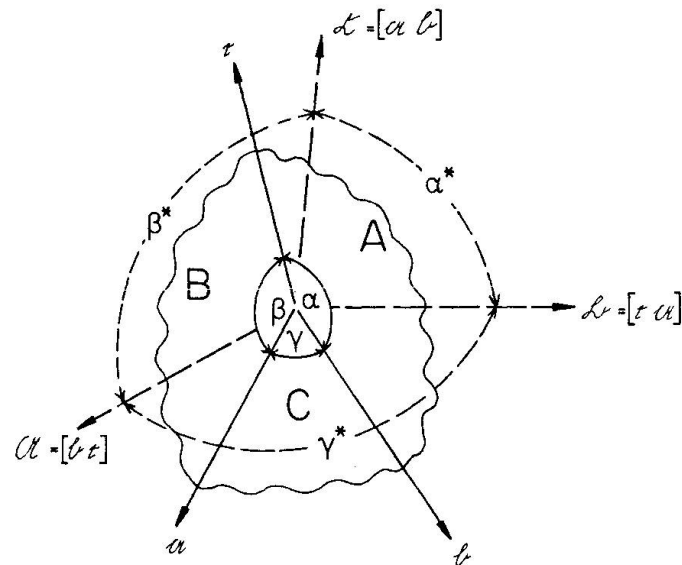


Fig. 4.

durch c, a aufgespannte mit B , sowie die entsprechenden Normalvektoren mit $\mathfrak{C}, \mathfrak{A}, \mathfrak{B}$, so ist:

$$\begin{aligned} \mathfrak{C} &= [a b], & |\mathfrak{C}| &= a b \sin \gamma, \\ \mathfrak{A} &= [b c], & |\mathfrak{A}| &= b c \sin \alpha, \\ \mathfrak{B} &= [c a], & |\mathfrak{B}| &= c a \sin \beta. \end{aligned}$$

Für $\cos \alpha^* = \cos (\mathfrak{B}, \mathfrak{C})$ erhält man, wenn man das auftretende skalare Produkt zweier Vektorprodukte gemäss der sog. Identität von Lagrange erledigt:

$$\begin{aligned} \cos \alpha^* &= \frac{(\mathfrak{B} \mathfrak{C})}{|\mathfrak{B}| |\mathfrak{C}|} = \frac{[c a][a b]}{|\mathfrak{B}| |\mathfrak{C}|} = \frac{\begin{vmatrix} (a c) & (b c) \\ (a a) & (a b) \end{vmatrix}}{|\mathfrak{B}| |\mathfrak{C}|} = \frac{\begin{vmatrix} a c \cos \beta & b c \cos \alpha \\ a^2 & a b \cos \gamma \end{vmatrix}}{a c \sin \beta a b \sin \gamma} = \\ &= \frac{a^2 b c \cos \beta \cos \gamma - a^2 b c \cos \alpha}{a^2 b c \sin \beta \sin \gamma} = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}. \end{aligned}$$

Die analogen Ausdrücke für $\cos \beta^*$ und $\cos \gamma^*$ werden durch zyklische Vertauschung erhalten:

$$\begin{aligned} \cos \alpha^* &= \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}, & \cos \beta^* &= \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{\sin \gamma \sin \alpha}, \\ \cos \gamma^* &= \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}. \end{aligned}$$

Das Vektortripel $\mathfrak{a}, \mathfrak{b}, \mathfrak{c}$ kann auch als Dreikant aufgefasst werden. Dann ist das Tripel $\mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}$ dessen Polardreikant. Da jedes Dreikant selbst polar zu seinem Polardreikant ist, können die Kantenwinkel aus den Pinakoidwinkeln nach den gleichen Formeln berechnet werden, wenn die Bezeichnungen entsprechend vertauscht werden.

II. Berechnung des Volumens des von den drei Vektoren $\mathfrak{a}, \mathfrak{b}, \mathfrak{c}$ aufgespannten Spates

Bei Annahme eines beliebigen, rechtwinkligen Koordinatensystems $X Y Z$ ist das Volumen des von den drei Vektoren $\mathfrak{a}, \mathfrak{b}, \mathfrak{c}$ aufgespannten Spates durch das sog. Volumprodukt gegeben:

$$V = [\mathfrak{a} \mathfrak{b} \mathfrak{c}] = \begin{vmatrix} a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \\ c_x & c_y & c_z \end{vmatrix}.$$

Für die hier verfolgten Ziele erweist es sich jedoch als vorteilhaft, sich vom System $X Y Z$ unabhängig zu machen. Hierfür wird der obenstehende Ausdruck, unter Anwendung des Multiplikationssatzes für Determinanten ins Quadrat erhoben:

$$V^2 = [\mathfrak{a} \mathfrak{b} \mathfrak{c}]^2 = \begin{vmatrix} (\mathfrak{a} \mathfrak{a}) & (\mathfrak{a} \mathfrak{b}) & (\mathfrak{a} \mathfrak{c}) \\ (\mathfrak{b} \mathfrak{a}) & (\mathfrak{b} \mathfrak{b}) & (\mathfrak{b} \mathfrak{c}) \\ (\mathfrak{c} \mathfrak{a}) & (\mathfrak{c} \mathfrak{b}) & (\mathfrak{c} \mathfrak{c}) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ac \cos \beta & bc \cos \alpha & c^2 \end{vmatrix}.$$

Die so erhaltene Determinante (sog. Gramsche Determinante), unter Ausklammerung des gemeinsamen Faktors $a^2 b^2 c^2$ nach der ersten Zeile entwickelt:

$$V^2 = a^2 b^2 c^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \gamma + \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos^2 \beta).$$

Geordnet und nach V aufgelöst:

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}.$$

Für die einzelnen Kristallsysteme spezialisiert sich der Ausdruck wie folgt:

Triklin: $a \neq (b = 1) \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$.

$$V = ac \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}.$$

Monoklin: $a \neq (b = 1) \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$.

$$V = ac \sqrt{1 - \cos^2 \beta} = ac \sin \beta.$$

Orthorhombisch: $a \neq (b = 1) \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

$$V = ac.$$

Tetragonal: $a = b = 1 \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

$$V = c.$$

Kubisch: $a = b = c = 1$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

$$V = 1.$$

Hexagonal und trigonal bzw. rhomboedrisch:

$$a_1 = a_2 = a_3 = 1 \neq c; \quad \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 120^\circ, \quad \gamma = 90^\circ.$$

$$V = c \sqrt{1 - \left(\frac{1}{2}\right)^2} = c \sqrt{\frac{3}{4}} = \frac{c}{2} \sqrt{3} \quad \text{oder:} \quad V = c [a_1 a_2] = \frac{c}{2} \sqrt{3}.$$

G. Zitierte Literatur

- GOLDSCHMIDT, V. (1887): Über Projektion und graphische Krystallberechnung. Berlin.
 — (1886–1891): Index der Krystallformen der Mineralien. 3 Bde.
 — (1897): Krystallographische Winkeltabellen. Berlin.
 NIGGLI, P. (1924): Lehrbuch der Mineralogie, Bd. 2, 2. Aufl. Berlin.
 — (1928): Kristallographische und strukturtheoretische Grundbegriffe. Handb. d. Experimentalphysik, herausgeg. v. W. Wien u. F. Harms. Bd. 7. I. Leipzig.
 WEBER, L. (1922): Das viergliedrige Zonensymbol des hexagonalen Systems. Z. Kristallogr. 57, 200–203.
 — (1924): Vektoranalytische Behandlung kristallographischer Aufgaben. (Autor nicht genannt.) In: P. Niggli (1924) 107–120.

Manuskript eingegangen am 30. Januar 1975.