XIX. Zur Berechnung hexagonaler Krystalle.

Von

A. Brun in Genf.

(Mit 2 Holzschnitten.)

Bravais hat in seinen »Etudes cristallographiques« für die Berechnung des Winkels zweier Flächen aus den Indices, wie sie für das hexagonale System von ihm vorgeschlagen und in dieser Zeitschrift adoptirt sind, eine analytische Formel gegeben, welche indess ziemlich complicirt ist und die umgekehrte Berechnung, die der Indices aus den Winkeln, nicht in einfacher Weise gestattet. Es dürfte deshalb nicht ganz überflüssig sein, im Folgenden diejenigen Formeln mitzutheilen, welche sich mit Hülfe der Miller'schen Berechnungsweise unter Annahme der Bravais'schen Bezeichnungsart ergeben.

Sei P (Fig. 4) der Pol einer beliebigen Krystallfläche (hkl), seien X, Y, T, Z die Punkte, in denen die drei Nebenaxen (Winkel $XOY = YOT = TOY = 120^\circ$) und die Hauptaxe OZ die Sphäre treffen, so wird, da $OX = OY = OT = 1$, die Miller'sche Gleichung:

$$\frac{a}{h} \cos PX = \frac{b}{k} \cos PY = \frac{c}{l} \cos PZ$$

sich umwandeln in:

$$\frac{\cos PX}{h} = \frac{\cos PY}{k} = \frac{\cos PT}{l} = \frac{c}{i} \cos PZ \quad (1)$$

in welcher der Bogen PT und der Index l als überflüssig*) im Folgenden nicht weiter in Rücksicht gezogen werden sollen.

*) Mit Hülfe der Gleichung (1) lässt sich direct beweisen, dass $h + k + l = 0$, denn es ist:

$$\begin{aligned} \cos PT &= -\frac{\cos PX}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{3} \sin PX \cos PXY \\ \cos PY &= -\frac{\cos PX}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{3} \sin PX \cos PXY \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich:

Groth, Zeitschrift f. Krystallogr. IV.

§ 4. Bestimmung des Poles P der Fläche $(hkl i)$ aus den Indices h, k, i und der Axenlänge c der Grundform. Die Formeln der sphärischen Trigonometrie liefern unter den vorliegenden Bedingungen folgende Gleichungen:

$$\left. \begin{aligned} \cos PZ &= \sin PY \cos PYZ = \sin PX \cos PXZ \\ \cos PY &= \sin PZ \cos PZY = -\frac{\cos PX}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{3} \sin PX \cos PXY \\ \cos PX &= \sin PZ \cos PZX = -\frac{\cos PY}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{3} \sin PY \cos PYX \end{aligned} \right\} (A)$$

Durch Benutzung der unter (A) gegebenen Relationen folgt daraus:

$$\cot PZ = \frac{i}{kc} \cos PZY = \frac{i}{hc} \cos PZX \quad (2)$$

$$\text{d. h.} \quad \frac{\cos PZY}{\cos PZX} = \frac{\cos PZY}{\cos(120^\circ - PZY)} = \frac{k}{h}$$

woraus sich ergibt:

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{tg} PZY &= \frac{k + 2h}{3k} \sqrt{3} \\ \operatorname{tg} PZX &= \frac{h + 2k}{3h} \sqrt{3} \end{aligned} \right\} (3)$$

oder, was damit gleichbedeutend ist:

$$\left. \begin{aligned} \cos^2 PZY &= \frac{3}{4} \cdot \frac{k^2}{h^2 + kh + k^2} \\ \cos^2 PZX &= \frac{3}{4} \cdot \frac{h^2}{h^2 + kh + k^2} \end{aligned} \right\} (4)$$

und aus (2) und (4):

$$\cot PZ = \frac{i\sqrt{3}}{2c\sqrt{h^2 + kh + k^2}} \quad (5)$$

Dieser Ausdruck ergibt unmittelbar den Winkel einer beliebigen Fläche zur Basis aus den Indices und der Axenlänge c .

Aus den beiden letzten Gleichungen unter (A) kann man ableiten:

$$3 \cos PX + 3 \cos PY = \sqrt{3} (\sin PX \cos PXY + \sin PY \cos PYX)$$

und da nach (A):

$$\frac{\cos PX + \cos PY}{h + k} = \frac{c}{i} \cos PZ$$

so ergibt sich unter Berücksichtigung der Relationen (A) und (4):

Aus (4) folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\cos PT}{l} &= \frac{(\cos PX + \cos PY)}{h + k} \\ \text{d. h.} \quad l &= -(h + k) \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{tg} PYZ &= \frac{c(2h+k)}{i\sqrt{3}} \\ \operatorname{tg} PYX &= \frac{i\sqrt{3}}{c(2h+k)} \end{aligned} \right\} (6)$$

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{tg} PXZ &= \frac{c(2k+h)}{i\sqrt{3}} \\ \operatorname{tg} PXY &= \frac{i\sqrt{3}}{c(2k+h)} \end{aligned} \right\} (7)$$

§ 2. Berechnung des Winkels zweier beliebiger Flächen aus ihren Indices und der Axenlänge c . Seien P und Q (Fig. 2) die Pole der beiden Flächen (hki) und (pqr) , so ist:

$$PZQ = PZY - QZY$$

Mit Hülfe der Gleichung (3) folgt hieraus:

$$\operatorname{tg} PZQ = \frac{hq - kp}{h(q + 2p) + k(p + 2q)} \sqrt{3} \quad (8)$$

Man berechnet nunmehr die beiden Bögen PZ und QZ nach (5) und kennt somit in dem sphärischen Dreieck PQZ zwei Seiten und den eingeschlossenen Winkel. Die dritte Seite PQ ist der gesuchte Winkel zwischen den Flächen (hki) und (pqr) .

§ 3. Berechnung des Parameterverhältnisses c der Grundform aus dem Winkel zweier beliebiger Flächen. Diese Flächen seien $P(hki)$ und $Q(pqr)$; mit Hülfe der Miller'schen Methode leitet man daraus die Indices des Punktes M (s. Fig. 2), welcher der Zone PQ und der Prismenzone XY gemeinsam ist, ab; da $ZM = 90^\circ$, so ist

$$\frac{\operatorname{tg} PM}{\operatorname{tg} QM} = \frac{\operatorname{tg} PZM}{\operatorname{tg} QZM}$$

und folglich:

$$\frac{\sin(QM + PM)}{\sin(QM - PM)} = \frac{\operatorname{tg} QZM + \operatorname{tg} PZM}{\operatorname{tg} QZM - \operatorname{tg} PZM} \quad (9)$$

Der gemessene Winkel PQ ist aber nun, je nach der Lage von P , entweder die Summe oder die Differenz von PM und QM ; es ist folglich, da PZM und QZM nach (8) bekannt sind, stets möglich, PM und QM aus der Gleichung (9) zu berechnen. Im Dreieck PZM kennt man demnach ZM ($= 90^\circ$), PM und PZM ; man berechne aus diesen PZ und setze dessen Werth in die Gleichung (2), so erhält man die Axenlänge c , nachdem man den Winkel PZY aus (3) hergeleitet hat.

§ 4. Spezielle Fälle.

a) Liegt der Punkt $Q(pqr)$ in der Zone $PZ[hki, 004]$, so ist nach (2):

$$\operatorname{tg} PZ = \frac{k c}{i \cos PZY} = \frac{h c}{i \cos PZX}$$

$$\operatorname{tg} QZ = \frac{q c}{r \cos QZY} = \frac{p c}{r \cos PZX}$$

daraus folgt:

$$\frac{\operatorname{tg} PZ}{\operatorname{tg} QZ} = \frac{rk}{iq} = \frac{rh}{ip}$$

Wenn also für eine der beiden Flächen der Winkel zur Basis bekannt ist, so findet man hiernach den der anderen, also auch den Winkel, welchen die Flächen PQ mit einander einschliessen.

b) Liegt $P(hki)$ auf dem Zonenkreise ZX , d. h. ist $k = -\frac{h}{2}$, so wird:

$$\frac{\operatorname{tg} PZ}{2} = \frac{h+k}{i} c \quad \text{d. h.} \quad \operatorname{tg} PZ = \frac{h}{i} c$$

c) Hat P das Symbol $(h k 0)$, d. h. ist es eine Prismenfläche, so ist der Winkel V , welchen dieselbe mit der nächstgelegenen Fläche (100) bildet, gegeben durch:

$$\operatorname{tg} V = \frac{k\sqrt{3}}{2h+k}$$

wie sich aus (8) ergibt, wenn man $p = 1$ und $q = 0$ setzt.

d) Für die Pyramide zweiter Ordnung mit den Indices (111) findet man aus (2), das $PZY = 60^\circ$:

$$\frac{\operatorname{tg} PZ}{2} = c$$

e) Für die Pyramide erster Ordnung $(h 0 i)$ ergibt die Formel (5):

$$c = \frac{i\sqrt{3}}{2h}$$

f) Berechnung der Axenlänge c aus dem Winkel zweier Flächen $P(hki)$ und $Q(pqr)$, deren letztere in der Zone PZ liegt. Die Gleichung

$$\operatorname{tg} PQ = \operatorname{tg}(PZ - QZ) = \frac{\operatorname{tg} PZ - \operatorname{tg} QZ}{1 + \operatorname{tg} PZ \operatorname{tg} QZ}$$

gibt, mit (2) und (4) combinirt:

$$c = \frac{ir}{kr(1 - \operatorname{tg} PQ) - iq} \cdot \frac{q\sqrt{3}}{2\sqrt{p^2 + pq + q^2}} \operatorname{tg} PQ.$$