

Kristallformen und Bravais-Gitter

2.1 Phänomenologie äußerer Kristallformen – 35

2.1.1 Tracht und Habitus – 40

2.2 Miller-Indices – 42

2.2.1 Negative Miller-Indices – 47

2.2.2 Netzebenenscharen und Miller-Indices in 3D – 48

2.2.3 Miller-Indices, Weiss'sche Parameter, Kristallflächen und das Korrespondenzprinzip II – 50

2.3 Die Wahl von Elementarzellen und Bravais-Gitter (Zentrierungen) – 52

2.3.1 Primitive Elementarzellen/Gitter – 52

2.3.2 Zentrierte Elementarzellen – 56

2.3.3 Die 14 Bravais-Gitter – 61

2.4 Atompositionen – fraktionale Koordinaten – 64

2.4.1 Fraktionale Koordinaten kleiner null oder größer eins – 66

2.5 Austausch von kristallographischen Informationen (CIF-Dateien) – 66

2.6 Visualisierung von Kristallstrukturen mit VESTA – 69

2.6.1 Download und Installation – 69

2.6.2 Erstellen der Elementarzelle – 70

2.6.3 Spezifizieren der Atomstruktur – 73

2.6.4	Atombindungen generieren – 75
2.6.5	Ansichtsmodi, Begrenzungen und das Erstellen von Bildern und CIFs – 76
2.7	Vier Aspekte des Hexagonalen (Kristallsystems) – 76
2.8	Trigonal – rhomboedrisch – hexagonal-R – 85
	Literatur – 91

2.1 Phänomenologie äußerer Kristallformen

Bei einem Rundgang durch ein Naturkundemuseum mit mineralogischer Abteilung stellt man zunächst einmal fest: Kristalle kommen anscheinend in einer unglaublich Formenvielfalt vor. Kaum ein Kristall gleicht dem anderen bezüglich der äußeren Gestalt, der Morphologie (gr. *μορφή morphé* = Gestalt, Form). Es gibt dünne, lange, nadelartige Kristalle, klobige, bizarr anmutende, zusammengewachsene Büschel, flächige, säulen-, schuppen- oder würfelartige Kristalle usw.

■ **Abbildung 2.1** gibt eine kleine Auswahl davon wieder.

Die Frage ist nun schlicht: Wie ist das möglich? Wir haben doch schließlich in ► **Kap. 1** bei den Kristallsystemen gelernt, dass alle Kristalle aus nur sieben prinzipiell unterschiedlich aufgebauten Bausteinen bestehen und sich der gesamte Kristall lediglich aus dem Zusammensetzen stets gleichartiger Elementarzellen ergibt. Ein Grund für das Auftreten der zahlreichen äußeren Formen von Kristallen ist, dass in der Natur häufig keine einzelnen Kristalle vorgefunden werden,



■ **Abb. 2.1** Eine winzige Auswahl aus den schier unzähligen verschiedenen Kristallformen, die in der Natur anzutreffen sind. Zeilenweise von links nach rechts sind folgende Exponate des Mineralogischen Museums Beirut gezeigt: Rutil, Sammlungsnummer 1022, Fotograf: FMI/James Elliott; Korund in der Varietät Saphir, Sammlungsnummer 1543, Fotograf: AINU/Augustin de Valence; Gold, Sammlungsnummer 1679, Fotograf: AINU/Augustin de Valence; Kesterit, Sammlungsnummer 1034, Fotograf: FMI/James Elliott; Rodochrosit, Sammlungsnummer 584, Fotograf: AINU/Augustin de Valence; Baryt, Sammlungsnummer 1305, Fotograf: AINU/Alessandro Clemenza; Rhodonit, Sammlungsnummer 493, Fotograf: AINU/Augustin de Valence; Beryl in der Varietät Aquamarin, Sammlungsnummer 1092, Fotograf: FMI/James Elliott; Skorodit, Sammlungsnummer 679, Fotograf: AINU/Augustin de Valence; Calcit auf Fluorit, Sammlungsnummer 1450, Fotograf: FMI/James Elliott; Schwefel, Sammlungsnummer 411, Fotograf: AINU/Augustin de Valence; Baryt, Sammlungsnummer 1549, Fotograf: FMI/James Elliott. (Abdruck mit freundlicher Genehmigung durch das © Mineralogische Museum Beirut. Alle Rechte vorbehalten, www.mim.museum)

sondern sie uns als Aggregate begegnen, die wiederum aus einer großen Zahl kleiner(er) Einkristalle bestehen, und diese Aggregate – den Launen der Natur, d. h. den Bedingungen der äußeren Umgebung zum Zeitpunkt ihres Entstehens folgend – völlig regellos zusammenwachsen konnten. Aber selbst wenn wir uns auf die Betrachtung von Einkristallen beschränken, scheint die Zahl der verschiedenen Formen noch ziemlich hoch zu sein (s. [Abb. 2.2](#)).

Und nicht nur das: Es gibt viele Fälle, bei denen selbst ein und dieselbe chemische Substanz unterschiedliche Kristallformen ausbildet. [Abbildung 2.3](#) zeigt ein Foto eines wunderschönen Exemplars von zusammengewachsenen Pyritkristallen. Einige von ihnen scheinen sich zu durchdringen, aber ganz wesentlich ist die vorherrschende Würfelgestalt. Der Würfel ist die häufigste Kristallform, die beim Pyrit gefunden wird. Und das ist auch kein Wunder, weil Pyrit tatsächlich im kubischen Kristallsystem kristallisiert.

7 Kristallsysteme

zahllose Erscheinungsformen

triklin
monoklin
orthorhombisch
tetragonal
trigonal
hexagonal
kubisch

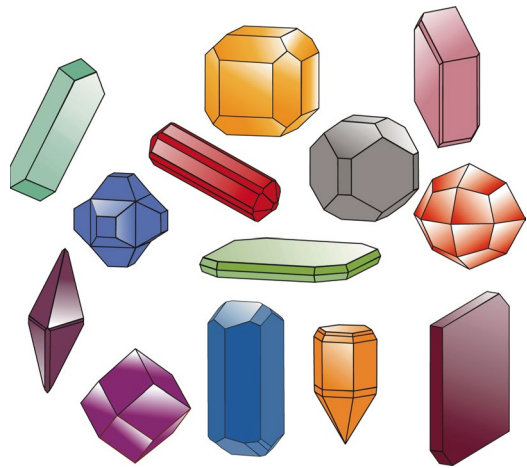


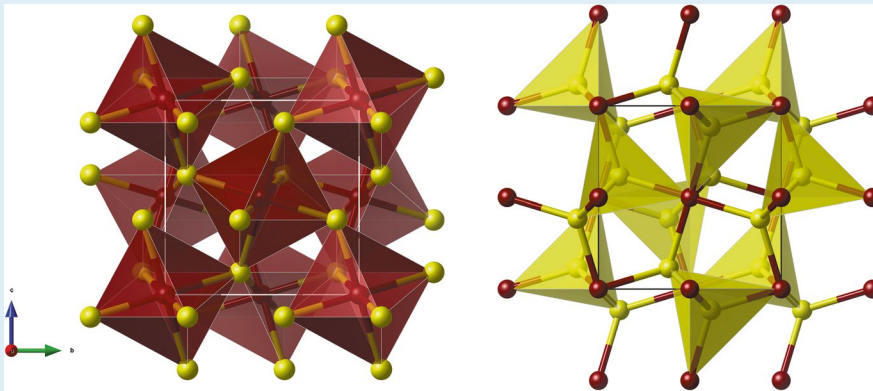
Abb. 2.2 Den sieben Kristallsystemen steht eine unvergleichlich größere Zahl an Kristallformen gegenüber



Abb. 2.3 Würfelförmige, ineinander verwachsene Pyritkristalle. (CC BY-SA 3.0 JJ Harrison)

Chemie und Struktur des Pyrits

Chemisch gesehen ist Pyrit Eisen(II)-disulfid, und es gehört zum kubischen Kristallsystem mit der Raumgruppe $Pa\bar{3}$ (zu den Raumgruppensymbolen siehe ▶ Kap. 5). In ■ Abb. 2.4 sind zwei Ansichten der Elementarzelle zu sehen. Die Struktur kann als Derivat der bekannten Natriumchlorid-Struktur aufgefasst werden. Statt der Natrium-Ionen besetzen Eisen(II)-Ionen (in rot) die Ecken und die Flächenmitten der Elementarzelle, und auf den Kantenmitten sitzen statt der Chlorid- nun Disulfid-Ionen. Dabei bildet sich eine oktaedrische Koordinationssphäre um die Eisen-Ionen (aus sechs Schwefelatomen) und eine tetraedrische um die Schwefelatome (aus einem Schwefel- und drei Eisenatomen).



■ **Abb. 2.4** Kristallstruktur von Pyrit, Eisen(II)-disulfid. Links ist die Koordinationsumgebung der Eisen-Ionen gezeigt, die in Form von Oktaedern von je sechs Schwefelatomen umgeben sind, rechts ist hingegen die Koordinationssphäre der Schwefelatome hervorgehoben, die in Form eines Tetraeders von drei Eisen- und einem weiteren Schwefelatom umgeben sind

Das Interessante ist nun, dass man nicht nur würfelartige Kristalle von Pyrit findet, sondern häufig auch all die Formen, die in ■ Abb. 2.5 zu sehen sind: Oktaeder, Würfel, rhombische Dodekaeder, pentagonale Dodekaeder und viele mehr. Es sind insgesamt über 60 (!) verschiedene Formen von Pyritkristallen bekannt. (Einen informativen Artikel über die Morphologie von Pyrit in schwefelreichen Sedimenten finden Sie in [1].)

Vielleicht haben Sie beim Betrachten der Formen von ■ Abb. 2.5 schon wahrgenommen, dass einige davon End- bzw. elementare Einzelformen sind, während andere aussehen, als seien sie aus zwei verschiedenen geometrischen Körpern zusammengesetzt. Das ist tatsächlich so! Aber wie lässt sich nun das Auftreten all dieser Formen erklären, obwohl die Elementarzelle des Pyrits doch kubisch ist und alles, was zum Aufbau eines makroskopischen Kristalls erlaubt ist, das Aneinanderfügen von Elementarzellen ist?

Dazu betrachten wir ■ Abb. 2.6, in der zwei unterschiedliche Arten gezeigt sind, kleine Würfel aneinanderzufügen: Im oberen Teil ist die relative Wachstumsgeschwindigkeit in allen drei Raumrichtungen völlig gleich – dann muss aus den kleinen Würfeln notwendigerweise ein großer resultieren. Aber die Geschwindigkeit des Zusammenwachsens muss nicht für alle Raumrichtungen gleich sein: Im unteren Teil der Abbildung sehen wir, wie aus kleinen Würfeln am Ende ein großes Oktaeder entsteht! Das heißt, das Geheimnis unterschiedlicher äußerer Kristallformen, selbst innerhalb eines Kristallsystems, liegt darin, dass die relative Wachstumsgeschwindigkeit für die

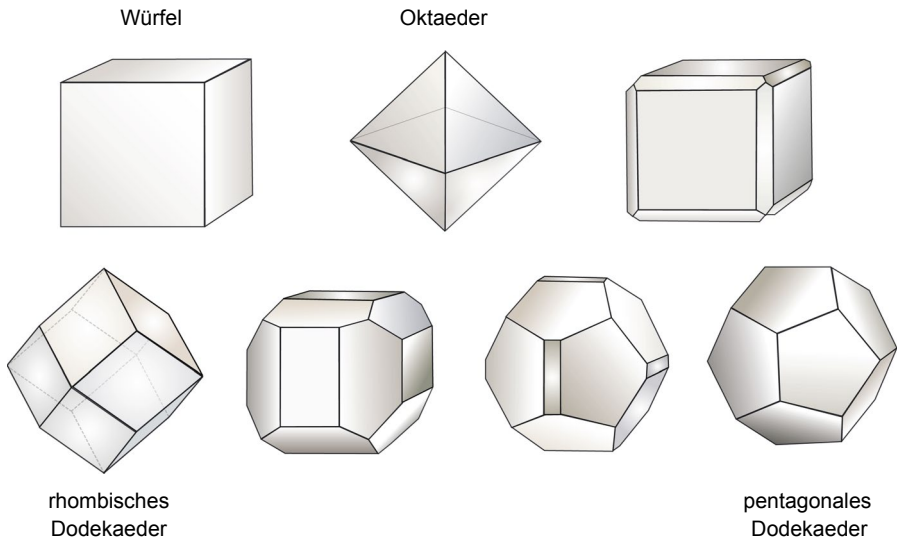


Abb. 2.5 Einige ausgewählte Formen von Pyritkristallen. Insgesamt sind über 60 verschiedene Formen bekannt

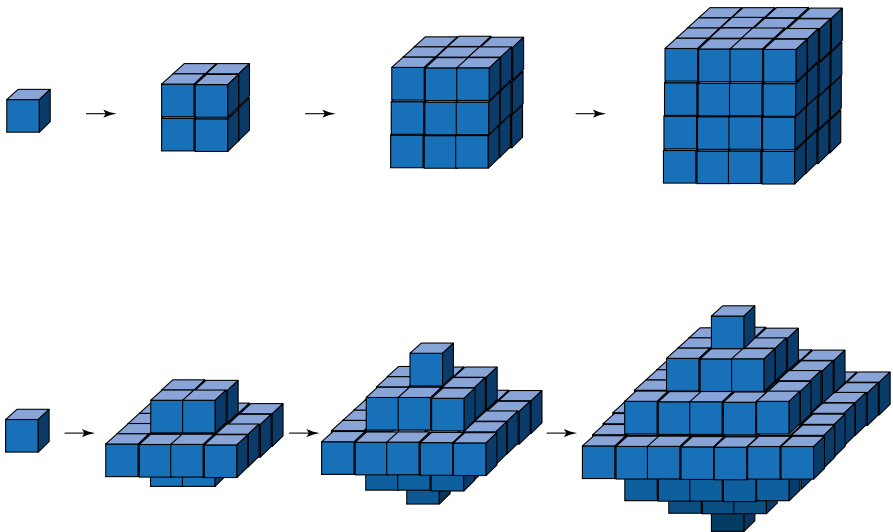


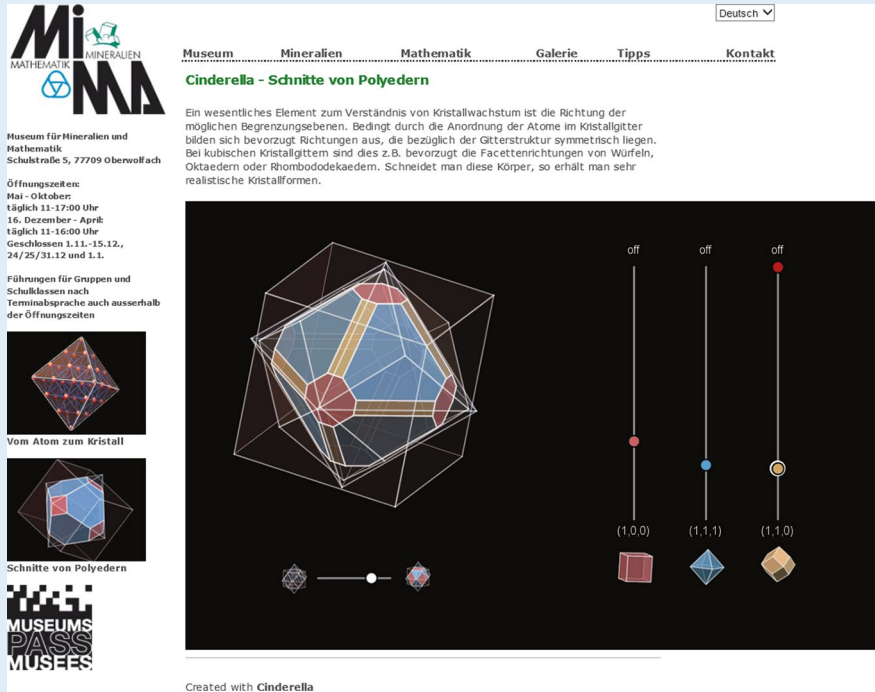
Abb. 2.6 Schematische Darstellung des Kristallwachstums, ausgehend von einer kubischen Elementarzelle. Im oberen Teil entsteht aus einem Mini-Würfel ein größerer Würfel, im unteren Beispiel hingegen ein Oktaeder

unterschiedlichen Raumrichtungen variieren kann. Und das bedeutet auch, dass die fertigen Kristalle unterschiedliche Entstehungsgeschichten haben. Der tiefere Grund dafür, dass bei einem Kristall eine bestimmte Form ausgebildet wird, liegt wiederum an den zum Zeitpunkt seines Wachstums vorherrschenden Bedingungen, z. B. der Zahl der Kristallisationskeime, der Temperatur, dem Druck, ob diese Größen während des Wachstums konstant waren oder nicht und vieles mehr.

Die Erforschung des Wachstums von Kristallen kann sehr schnell sehr kompliziert werden, und es wurden dazu ganze Bücher geschrieben [2–4]. Hier ist zunächst einmal wichtig, Folgendes festzuhalten: Es mag nun den Anschein haben, als könnten wir durch die unterschiedlichen Wachstumsgeschwindigkeiten in den unterschiedlichen Raumrichtungen beliebig geformte Kristalle entstehen lassen – wir haben gesehen, dass es unwahrscheinlich ist, je zwei völlig gleichgertete Schneeflocken zu sichten –, das ist aber nicht so. Denn – Sie ahnen es schon – wenn man sie gemäß ihrer Symmetrie klassifiziert, wird man sehen, dass es insgesamt nur 32 verschiedenartige geometrische Körper gibt, die sich auf bestimmte Weise auf die sieben Kristallsysteme aufteilen lassen! Wir haben ja auch gesehen, dass es zwar „beliebig“ geformte Schneeflocken gibt, aber eines hatten sie alle gemeinsam: Alle hatten eine sechszählige Drehsymmetrie! Und insofern bzw. in diesem Sinne ist die Form einer Schneeflocke und auch die eines Pyrit-Kristalls alles andere als beliebig. Mehr zu diesen 32 kristallographischen Symmetrieklassen finden Sie in ► [Kap. 3!](#)

Kristallformen in 3D

Die Internetpräsenz des Museums für Mineralien und Mathematik der Gemeinde Oberwolfach ist einen Besuch wert [5]. Unter der angegebenen URL gibt es ein Java-Tool, mit dem man sehr realistische, frei rotierbare 3D-Kristallformen erzeugen kann, die sich durch Mischung aus drei geometrischen Grundkörpern ergeben. Die Schieberegler bestimmen dabei den Anteil der drei Grundformen, aus denen Sie Ihren Kristall zusammensetzen können, ► [Abb. 2.7](#) zeigt einen Screenshot.



■ **Abb. 2.7** Screenshot der Webpräsenz des Museums für Mineralien und Mathematik in Oberwolfach. Dieses Java-Tool erlaubt die Konstruktion realistischer 3D-Formen von Kristallen durch die Mischung dreier geometrischer Grundkörper

2.1.1 Tracht und Habitus

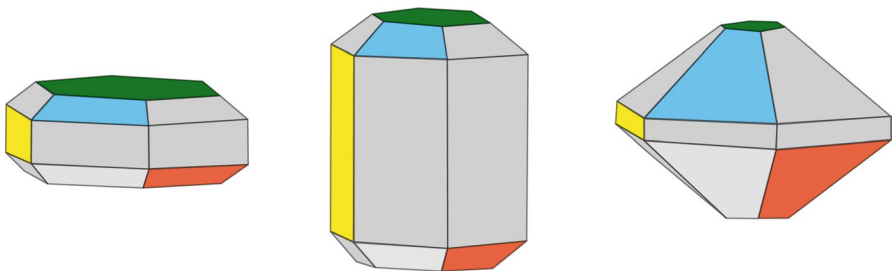
An dieser Stelle wollen wir uns zunächst darauf beschränken, uns die notwendigen Begriffe zur Beschreibung der Morphologie, der äußeren Gestalt von Kristallen, anzueignen. Schließlich können wir z. B. schlecht sagen: Ja, ein Kristall sieht „irgendwie 18-eckig und lang aus“. Zwei Begriffe sind dabei ganz zentral: *Tracht* und *Habitus*.

Tracht beschreibt dabei die *Zahl und Kombination von Flächentypen der äußeren Begrenzungsflächen* des Kristalls, während der Habitus die *relative Größe der Flächen zueinander* kennzeichnet, aus denen die Form aufgebaut wird und die sich auf die Längen- und Breitenverhältnisse der Gestalt insgesamt auswirkt. Während die Begriffe für die Spezifizierung des Habitus sehr nah am Alltag sind (Platten, Säulen, Nadeln etc.), beschreibt die Tracht sehr präzise, welche Art von Flächen in welcher Zahl vorkommt. Sie beschreibt, so sagen die Kristallographen, welche Flächen an einem Kristall *ausgebildet* sind (also zu sehen sind).

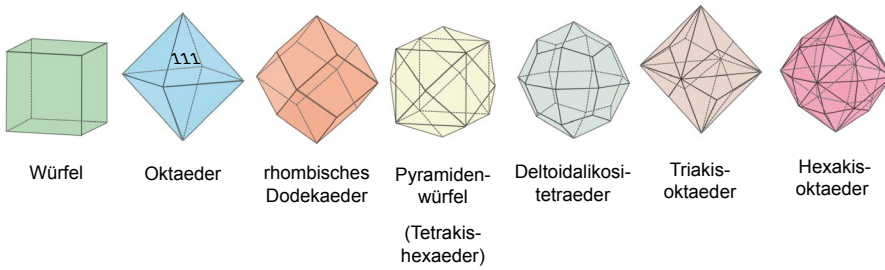
Zwei Kristalle können dieselbe Tracht, aber einen unterschiedlichen Habitus ausbilden, und auch das Umgekehrte ist möglich: bei gleichem Habitus können zwei Kristalle unterschiedliche Trachten ausbilden.

Das macht man sich am besten an einem Beispiel klar, wie in ■ Abb. 2.8 gezeigt: Alle drei Kristalle haben dieselbe Tracht, nämlich (von oben nach unten) beginnend mit einem Hexagon als Deckfläche, dann kommen sechs Trapezoide als schräge Begrenzungsflächen, gefolgt von sechs Rechtecken als vertikal-seitliche Flächen und wiederum sechs Trapezoide; und ein weiteres Sechseck bildet schließlich die Grundfläche. Diese Abfolge von verschiedenen Flächentypen ist bei allen drei Kristallen identisch – sie haben dieselbe Tracht. Aber, wie man sieht, sind die Größenverhältnisse der Flächen zueinander ganz unterschiedlich: Beispielsweise sind die rechteckigen Flächen beim Kristall links ganz lang und dünn, während sie beim rechten Kristall breit und flach sind – daraus resultiert ein unterschiedlicher Habitus, den man mit verschiedenen, typischen Begriffen beschreibt, die die Form auf das Wesentliche reduzieren: Den Kristall links könnte man als plättchenartig beschreiben, den in der Mitte als säulenartig und den rechten als Block bzw. als isometrisch (was so viel bedeutet wie: ungefähr gleichmäßig ausgedehnt in den drei Raumrichtungen).

Im zweiten Beispiel – ■ Abb. 2.9 – soll deutlich werden, dass Kristalle bei gleichem Habitus unterschiedliche Trachten tragen können. Alle gezeigten Kristalle würde man als isometrisch charakterisieren. Aber: Der Würfel ist begrenzt durch sechs Quadrate, das Oktaeder durch acht Dreiecksflächen, das rhombische Dodekaeder – das sagt schon der Name – durch zwölf Rhomben usw.: Alles unterschiedlich ausgeprägte „Kristallkleider“ desselben Habitus.



■ Abb. 2.8 Drei Kristalle mit gleicher Tracht (Flächenkombination), aber unterschiedlichem Habitus (nachgezeichnet aus: Lapis, Chr. Weise-Verlag, München)



■ **Abb. 2.9** Alle hier dargestellten Kristallformen haben in etwa einen isometrischen Habitus, sie zeigen sich aber jeweils in einem anderen „Kristallkleid“, der Tracht: Die Zahl und Art der die begrenzenden Flächen unterscheidet sich. Beispielhaft ist auf einer der Dreiecksflächen des Oktaeders die Ziffernfolge „111“ angegeben, die sehr präzise diese Fläche in Bezug auf den inneren Aufbau des Kristalls beschreibt – mit einem sog. Miller-Index (► [Abschn. 2.2](#))

Nun werden die Termini Tracht und Habitus ja nicht nur im Bereich der Mineralogie oder Kristallographie gebraucht, sondern haben durchaus eine gesellschaftliche Relevanz. Und auch an diesem Alltagsgebrauch können wir uns die Begriffe einprägen. Das soll anhand der beiden Fotos in ■ [Abb. 2.10](#) gezeigt werden.

In der linken Bildhälfte sieht man meine Forscherkollegen Carl und Tamas, die für Chemiker nicht völlig untypisch und nahezu gleich gekleidet sind – gleiche Tracht. Während aber Carl lang und dürr ist und daher eher vom schwächtigen Typ „Bohnenstange“ ist, beeindruckt Tamas durch ausgeprägte Muskelberge und zählt eher zu den untersetzten Typen – unterschiedlicher Habitus. In der rechten Bildhälfte von ■ [Abb. 2.10](#) sehen Sie zwei Aufnahmen von meinem Kollegen Michael, der natürlich immer ein und denselben Habitus hat, aber in der rechten Aufnahme eher sportlich wirkt und auf der linken etwas formeller gekleidet ist (und auch etwas freundlicher dreinblickt – vielleicht ist er mit seiner Frau zum Essen gehen verabredet ...).



■ **Abb. 2.10** Meine Kollegen Tamás und Carl in gleicher Tracht, aber mit deutlich unterschiedlichem Habitus (links) sowie mein Kollege Michael in zwei verschiedenen Trachten (rechts)

Wie wir die Begrenzungsflächen von Kristallen noch etwas präziser beschreiben können, wie wir sie in Bezug setzen können zu ihrem inneren Aufbau – das wird im nächsten Abschnitt (► [Abschn. 2.2](#)) erklärt, wenn es um die Miller-Indices geht.

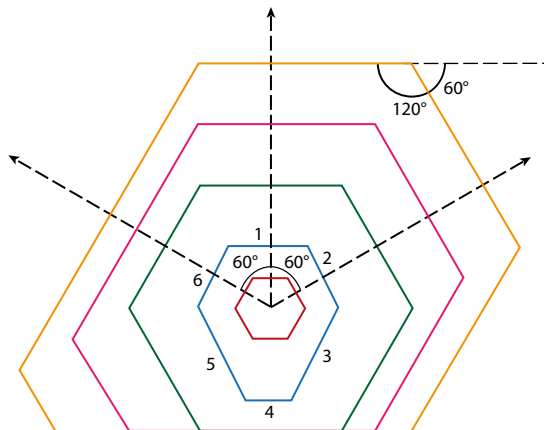
Wer sich intensiv mit den verschiedenen Formen von Kristallen auseinandersetzen möchte, dem sei das liebevoll gestaltete und prächtig ausgestattete dreibändige Werk von Erich Offermann ans Herz gelegt, in dem für sehr viele natürlich vorkommende Kristalle die auftretenden Kristallformen sauber ausgearbeitet und mehrfarbig, z. T. auch in Stereo-Bildern, nachgezeichnet wurden [6].

2.2 Miller-Indices

In [Abb. 2.9](#) (► [Abschn. 2.1.1](#)) haben wir gesehen, dass zur genauen Bezeichnung von Kristallflächen drei Zahlen, Zahlentripel, verwendet werden. Dieses sind die sog. Miller-Indices, die verwendet werden, um die äußeren Kristallflächen systematisch bezeichnen zu können. Die Systematik, die hinter ihnen steckt, werden wir im Folgenden betrachten. Miller-Indices werden auch verwendet, um Gitterebenen im Kristallgitter anzugeben; sie scheinen auf den ersten Blick etwas kompliziert zu sein, sind aber bei näherer Betrachtung relativ einfach abzuleiten und vor allem sehr nützlich.

Es gab eine Reihe von wissenschaftlichen Vorarbeiten, die schließlich zu den Miller-Indices führten. Der Däne Niels Stensen erkannte im Jahr 1669, dass zwischen einander entsprechenden Flächen einer Kristallart eines bestimmten Stoffs – unabhängig von deren Größe – stets die gleichen Winkel auftreten (Gesetz der Winkelkonstanz). Stensen studierte das zunächst anhand der Prismenflächen von Quarz-Kristallen und vermutete dann, dass dies eine Eigenschaft aller Mineralkristalle sei. Er wurde durch Untersuchungen von Jean-Baptiste Romé de L'Isle bestätigt, der im Jahr 1783 eine detaillierte Beschreibung von 500 Kristallarten veröffentlichte und das Gesetz der Winkelkonstanz empirisch bestätigen konnte.

Was bedeutet aber nun diese Winkelkonstanz? Dazu betrachten wir [Abb. 2.11](#): Der Winkel zwischen zwei benachbarten Flächennormalen beträgt bei einem hexagonalen Kristall stets 60° bzw. zwei aneinander stoßende, äußere Begrenzungsebenen bilden stets einen Winkel von 120° . Diese Winkelkonstanz zwischen analogen Flächen gilt bei einem regelmäßigen sechseckigen Kristall (rot und grün) genauso wie bei einem, bei dem drei der sechs Flächen weniger gut bzw. besser entwickelt sind (blau) oder auch bei „verzerrten“ Varianten (pink und orange). Diese



■ **Abb. 2.11** Illustration zum Gesetz der Winkelkonstanz (s. Text)

Faszination Kristalle und Symmetrie

Einführung in die Kristallographie

Hoffmann, F.

2016, XI, 321 S. 338 Abb., 335 Abb. in Farbe., Softcover

ISBN: 978-3-658-09580-2