

Beitrag zu den Berechnungsmethoden der Zwillingkrystalle.

Von Dr. Albrecht Schrauf,

Universitätsdocent und Custosadjunct am k. k. Hof-Mineralien-Cabinete.

(Vorgelegt in der Sitzung vom 19. Jänner 1865.)

(Mit 1 Tafel.)

§. 1. Zu jenen Problemen, welche trotz ihrer Wichtigkeit bisher in der Krystallographie vernachlässigt, ja beinahe vollständig unberücksichtigt geblieben sind, ist auch das allgemeine Problem der Zwillingberechnung zu zählen, für welches in einzelnen speciellen Fällen nur Naumann (Krystallographie 1830) Berechnungsformeln mittheilt.

In nachfolgenden Zeilen sind die Gleichungen angegeben, welche die Ermittlung aller mathematischen Verhältnisse der Zwillingkrystalle gewähren.

Das allgemeine Problem der Zwillingberechnung besteht in der Aufgabe „die Kenntniss der Zwillingfläche und den morphologischen Elementen der Species genüge, um die Winkel jeder Fläche des Indiv. (II) gegen jede Fläche des Indiv. (I) zu berechnen“ und erfordert hierzu zwei vorhergehende Bestimmungen. 1. Die Ermittlung der Lage der Krystallaxen $X'Y'Z'$ von (II) gegen die Krystallaxen XYZ von (I) und Identificirung der ersteren mit Normalen auf Flächen von (I). 2. Die Transformation der Flächenindices von Ind. (II) in solche Zahlen, welche Functionen der Krystallaxen XYZ sind.

Zur Beantwortung dieser Fragen sind nebst den allgemeinen krystallographischen Relationen nur zu benützen die Gesetze der Zwillingbildung: „dass die gleichnamigen Pole beider Individuen in einer Zone mit der Zwillingaxe liegen und letztere deren Winkel halbirt.“

§. 2. Zur Ermittlung der Lage der Krystallaxen des Indiv. II dient die Figur 1 und 2, in welchen XYZ die Axen des Indiv. (I); $X'Y'Z'$ die des Indiv. (II) $\xi, \eta, \zeta, a, b, c$, die Axenneigungen und Parametergrößen des Systems sind, P die Zwillingaxe und daher der Pol der Zwillingfläche (hkl).

In dieser Figur ist

$$\begin{aligned} XX' &= 2PX \\ \cos X'Z &= \cos \eta \cos XX' + \sin \eta \sin XX' \cos PXZ \\ \cos Z'X &= \cos X'Z. \end{aligned}$$

Entwickelt man nun hieraus mittelst der bekannten Gleichung 1), welche die Lage eines Poles als Function von $\xi\eta\zeta$ hkl abc darstellt, alle Cosinuse, so erhält man folgende Gleichungen:

1. Triclinisches System:

$$\begin{aligned} A_1 &= 1 + 2 \cos \xi \cos \eta \cos \zeta - \cos^2 \xi - \cos^2 \eta - \cos^2 \zeta \\ M_1 &= h^2 b^2 c^2 \sin^2 \xi + k^2 a^2 c^2 \sin^2 \eta + l^2 a^2 b^2 \sin^2 \zeta \\ &\quad - 2abc [chk (\cos \zeta - \cos \xi \cos \eta) + bhl (\cos \eta - \cos \xi \cos \zeta) \\ &\quad + akl (\cos \xi - \cos \zeta \cos \eta)] \\ M_1 \cos X'X &= 2h^2 b^2 c^2 A_1 - M_1 \\ M_1 \cos Y'Y &= 2k^2 a^2 c^2 A_1 - M_1 \\ M_1 \cos Z'Z &= 2l^2 a^2 b^2 A_1 - M_1 \\ M_1 \cos X'Z &= M_1 \cos Z'X = 2hl ab^2 c A_1 - M_1 \cos \eta \\ M_1 \cos X'Y &= M_1 \cos Y'X = 2hk abc^2 A_1 - M_1 \cos \zeta \\ M_1 \cos Y'Z &= M_1 \cos Z'Y = 2kl a^2 bc A_1 - M_1 \cos \xi \end{aligned}$$

2. Monoclinisches System:

$$\begin{aligned} M_2 \cos X'X &= 2h^2 b^2 c^2 \sin^2 \eta - M_2 \\ M_2 \cos Y'Y &= 2k^2 a^2 c^2 \sin^2 \eta - M_2 \\ M_2 \cos Z'Z &= 2l^2 a^2 b^2 \sin^2 \eta - M_2 \\ M_2 \cos X'Z &= M_2 \cos Z'X = 2hl ab^2 c \sin^2 \eta - M_2 \cos \eta \\ M_2 \cos X'Y &= M_2 \cos Y'X = 2hk abc^2 A_2 \\ M_2 \cos Y'Z &= M_2 \cos Z'Y = 2kl a^2 bc A_2 \end{aligned}$$

3. Prismatisches System:

$$\begin{aligned} M_3 \cos X'X &= h^2 b^2 c^2 - k^2 a^2 c^2 - l^2 a^2 b^2 \\ M_3 \cos Y'Y &= k^2 a^2 c^2 - h^2 b^2 c^2 - l^2 a^2 b^2 \\ M_3 \cos Z'Z &= l^2 a^2 b^2 - h^2 b^2 c^2 - k^2 a^2 c^2 \\ M_3 \cos X'Y &= M_3 \cos Y'X = 2hk abc^2 \\ M_3 \cos X'Z &= M_3 \cos Z'X = 2hl ab^2 c \\ M_3 \cos Y'Z &= M_3 \cos Z'Y = 2kl a^2 bc \end{aligned}$$

1) Vergl. Schrauf Lehrbuch der physikalischen Mineralogie. I. Theil. Mineral-Morphologie. Cap. IX.

4. Orthohexagonales System:

$$\begin{aligned}
M_4 \cos X'X &= h^2c^2 - 3k^2c^2 - 3l^2a^2 \\
M_4 \cos Y'Y &= 3k^2c^2 - h^2c^2 - 3l^2a^2 \\
M_4 \cos Z'Z &= 3l^2a^2 - h^2c^2 - 3k^2c^2 \\
M_4 \cos X'Y &= M_4 \cos Y'X = 2hk\sqrt{3}c^2 \\
M_4 \cos X'Z &= M_4 \cos Z'X = 2hl\sqrt{3}ac \\
M_4 \cos Y'Z &= M_4 \cos Z'Y = 2kl\ 3ac
\end{aligned}$$

5. Pyramidales System:

$$\begin{aligned}
M_5 \cos X'X &= h^2c^2 - k^2c^2 - l^2a^2 \\
M_5 \cos Y'Y &= k^2c^2 - h^2c^2 - l^2a^2 \\
M_5 \cos Z'Z &= l^2a^2 - h^2c^2 - k^2c^2 \\
M_5 \cos X'Y &= M_5 \cos Y'X = 2hkc^2 \\
M_5 \cos X'Z &= M_5 \cos Z'X = 2hla \\
M_5 \cos Y'Z &= M_5 \cos Z'Y = 2kla
\end{aligned}$$

6. Tesserales System: 1)

$$\begin{aligned}
M_6 \cos X'X &= h^2 - k^2 - l^2 \\
M_6 \cos Y'Y &= k^2 - h^2 - l^2 \\
M_6 \cos Z'Z &= l^2 - k^2 - h^2 \\
M_6 \cos X'Y &= M_6 \cos Y'X = 2hk \\
M_6 \cos X'Z &= M_6 \cos Z'X = 2hl \\
M_6 \cos Y'Z &= M_6 \cos Z'Y = 2kl
\end{aligned}$$

§. 3. Diese Gleichungen machen es möglich, die Lage der Krystallaxen $X'Y'Z'$ dadurch zu bestimmen, dass man dieselben als Normalen auf Flächen des Indiv. (I) betrachtet und die Indices dieser letzteren bestimmt. Seien also die Indices jener Fläche von Indiv. (I), deren Normale mit X' parallel ist

$$x_1 \ x_2 \ x_3$$

analog für Y'

$$y_1 \ y_2 \ y_3$$

und für Z'

$$z_1 \ z_2 \ z_3$$

1) Die Werthe M_2 M_6 ergeben sich durch Specialisirung von a , b , c , ξ , η , ζ , aus M_1 — Behufs ihrer Ableitung vergl. Schrauf phys. Miner. I, Cap. IX.

wobei sich $x_1 \dots x_3$ der numerischen Ordnung nach auf X, Y, Z , bezieht, so gelten nachstehende Bestimmungsgleichungen:

$$\begin{array}{lll} x_1 = a \cos X'X & x_2 = b \cos X'Y & x_3 = c \cos X'Z \\ y_1 = a \cos Y'X & y_2 = b \cos Y'Y & y_3 = c \cos Y'Z \\ z_1 = a \cos Z'X & z_2 = b \cos Z'Y & z_3 = c \cos Z'Z. \end{array}$$

§. 4. Mittelst der erlangten Kenntniss der Indices $x_1 x_2 \dots x_3$ ist es möglich, die Indices der Flächen des Indiv. (I) als Functionen der Axen $X'Y'Z'$ des Indiv. (II) darzustellen.

Sind nämlich uvw die Indices der Fläche M vom Indiv. (I) bezogen auf die Axen XYZ und sollen nun die Indices $u'v'w'$ — die Indices bezogen auf $X'Y'Z'$ — gefunden werden, so müssen die nachfolgenden Gleichungen gelten:

$$\begin{aligned} \bullet \frac{a}{u'} \cos MX' &= \frac{b}{v'} \cos MY' = \frac{c}{w'} \cos MZ' \\ \cos MX' &= \cos (uvw x_1 x_2 x_3) \\ \cos MY' &= \cos (uvw y_1 y_2 y_3) \\ \cos MZ' &= \cos (uvw z_1 z_2 z_3) \end{aligned}$$

welche aus der wechselseitigen Transponirung der Axensysteme folgen. Aus der Auflösung dieser Gleichungen erhält man dann ($u'v'w'$) als Function von (uvw); da aber die Individuen (I) und (II) ident sind, so müssen die Transformationsgleichungen allgemeine Gültigkeit haben, also auch die Relationen der Indices von Flächen des Indiv. (II) auf die Axen (XYZ) des Indiv. (I) darstellen.

Es gelten somit zur Transformirung der Indices folgende Gleichungen: ●

1. Triclinisches System:

$$\begin{aligned} u' &= \frac{u(2h^2b^2c^2A_1 - M_1) + v(2hkabc^2A_1 - \cos \zeta M_1) + w(2hlab^2cA_1 - \cos \eta M_1)}{\sqrt{[(2h^2b^2c^2A_1 - M_1)^2 + (2hkabc^2A_1 - \cos \zeta M_1)^2 + (2hlab^2cA_1 - \cos \eta M_1)^2]} \\ v' &= \frac{u(2hkabc^2A_1 - \cos \zeta M_1) + v(2k^2a^2c^2A_1 - M_1) + w(2kla^2bcA_1 - \cos \xi M_1)}{\sqrt{[(2hkabc^2A_1 - \cos \zeta M_1)^2 + (2k^2a^2c^2A_1 - M_1)^2 + (2kla^2bcA_1 - \cos \xi M_1)^2]} \\ w' &= \frac{u(2hlab^2cA_1 - \cos \eta M_1) + v(2kla^2bcA_1 - \cos \xi M_1) + w(2l^2a^2b^2A_1 - M_1)}{\sqrt{[(2hlab^2cA_1 - \cos \eta M_1)^2 + (2kla^2bcA_1 - \cos \xi M_1)^2 + (2l^2a^2b^2A_1 - M_1)^2]} \end{aligned}$$

2. Monoclinisches System:

$$u' = \frac{u(2h^2b^2c^2 \sin^2 \eta - M_2) + v(2hkabc^2 \sin^2 \eta) + w(2hlab^2c \sin^2 \eta - \cos \eta M_2)}{\sqrt{[(2h^2b^2c^2 \sin^2 \eta - M_2)^2 + (2hkabc^2 \sin^2 \eta)^2 + (2hlab^2c \sin^2 \eta - \cos \eta M_2)^2]}}$$

$$v' = \frac{u(2hkabc^2 \sin^2 \eta) + v(2k^3a^2c^2 \sin^2 \eta - M_2) + w(2kla^2bc \sin^2 \eta)}{\sqrt{[(2hkabc^2 \sin^2 \eta)^2 + (2k^3a^2c^2 \sin^2 \eta - M_2)^2 + (2kla^2bc \sin^2 \eta)^2]}}$$

$$w' = \frac{u(2hlab^2c \sin^2 \eta - \cos \eta M_2) + v(2kla^2bc \sin^2 \eta) + w(2l^2a^2b^2 \sin^2 \eta - M_2)}{\sqrt{[(2hlab^2c \sin^2 \eta - \cos \eta M_2)^2 + (2kla^2bc \sin^2 \eta)^2 + (2l^2a^2b^2 \sin^2 \eta - M_2)^2]}}$$

3. Prismatisches System:

$$u' = u(h^2b^2c^2 - k^2a^2c^2 - l^2a^2b^2) + 2ha^2(vkc^2 + wlb^2)$$

$$v' = v(k^2a^2c^2 - h^2b^2c^2 - l^2a^2b^2) + 2kb^2(wla^2 + uhc^2)$$

$$w' = w(l^2a^2b^2 - h^2b^2c^2 - k^2a^2c^2) + 2lc^2(uhb^2 + vka^2)$$

4. Orthohexagonales System:

$$u' = u(h^2c^2 - 3k^2c - 3l^2a^2) + 6h(vkc^2 + wla^2)$$

$$v' = v(3k^2c^2 - h^2c^2 - 3l^2a^2) + 2k(3wla^2 + uhc^2)$$

$$w' = w(3l^2a^2 - h^2c^2 - 3k^2c^2) + 2lc^2(uh + 3vk)$$

5. Pyramidales System:

$$u' = u(h^2c^2 - k^2c^2 - l^2a^2) + 2h(vkc^2 + wla^2)$$

$$v' = v(k^2c^2 - h^2c^2 - l^2a^2) + 2k(wla^2 + uhc^2)$$

$$w' = w(l^2a^2 - h^2c^2 - k^2c^2) + 2lc^2(uh + vk)$$

6. Tesserales System:

$$u' = u(h^2 - k^2 - l^2) + 2h(vk + wl)$$

$$v' = v(k^2 - h^2 - l^2) + 2k(wl + uh)$$

$$w' = w(l^2 - h^2 - k^2) + 2l(uh + vk)$$

§. 5. Durch diese Transformationsgleichungen werden die Indices der Flächen beider Individuen des Zwillinges als Functionen eines Axensystems dargestellt; und hierdurch ermöglicht, die allgemeinen Berechnungsformeln für die Winkel zweier Flächen auch auf die Flächen der beiden Zwillingindividuen anzuwenden.

Denn ist $P(pqr)$ eine Fläche des Individuums (I) und $Q(uvw)$ eine Fläche des Individuums (II), ferner $(u'v'w')$ die auf (XYZ) transformirten Indices von Q , so ist

$$\cos(PQ) = \cos(pqr)(u'v'w')$$

womit das Problem gelöst ist, da bekanntlich (l. c.)

$$\begin{aligned} & pu'b^2c^2 \sin^2 \xi + qv'a^2b^2 \sin^2 \eta + rw'a^2b^2 \sin^2 \zeta \\ & - (ru' + pw')ab^2c [\cos \eta - \cos \xi \cos \zeta] \\ & - (rv' + qw')a^2bc [\cos \xi - \cos \eta \cos \zeta] \\ & - (qu' + pv')abc^2 [\cos \zeta - \cos \xi \cos \eta] \\ \cos PQ = & \frac{\begin{aligned} & p^2b^2c^2 \sin^2 \xi + q^2a^2c^2 \sin^2 \eta + r^2a^2b^2 \sin^2 \zeta \\ & - 2abc[prb(\cos \eta - \cos \xi \cos \zeta) + gra(\cos \xi - \cos \eta \cos \zeta) \\ & \quad + pqc(\cos \zeta - \cos \eta \cos \xi)] \end{aligned}}{2} \\ & \times \frac{\begin{aligned} & u'^2b^2c^2 \sin^2 \xi + v'^2a^2b^2 \sin^2 \eta + w'^2a^2b^2 \sin^2 \zeta \\ & - 2abc[u'w'b(\cos \eta - \cos \xi \cos \zeta) + v'w'a(\cos \xi - \cos \eta \cos \zeta) \\ & \quad + u'v'c(\cos \zeta - \cos \eta \cos \xi)] \end{aligned}}{2} \end{aligned}$$

§. 6. Im nachfolgenden sind einige Beispiele der Transformation der Indices durchgeführt.

Die variablen Elemente der früheren Gleichungen sind die Werthe von $(\xi\eta\zeta abc)$ und der Indices (hkl) der Zwillingfläche: Die Formeln werden daher sowohl mit den Systemen als auch mit der Vereinfachung der Zwillingfläche weniger complicirt. In der Natur sind auch immer die möglichst einfachen Indices für die Zwillingflächen vorkommend und nur in den wenigsten Fällen treten Pyramiden als solche auf.

Voraus berechnen lassen sich aber nur die Transformationen des tesserale Systemes, da für dieselben die Axenverhältnisse und Neigungen eliminiert sind. Im tesserale Systeme kommen zwei Zwillingflächen vor $a(110)$ und $b(111)$. Die Gleichungen sind für diese Fälle:

$$\begin{aligned} a) \quad & u' = v \\ & v' = u \\ & w' = -w \\ b) \quad & u' = (-u + 2v + 2w) \\ & v' = (-v + 2u + 2w) \\ & w' = (-w + 2u + 2v) \end{aligned}$$

Es ergibt sich somit für den gewöhnlichen Fall der Zwillingsbildung im tesserale System, Octaederfläche (111) oder ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) gleich Zwillingsfläche folgende Parallelstellung von Indices des positiven Quadranten:

$$(uvw) = 100, 110, 111, 211, 221, 321.$$

$$(u'v'w') = \bar{1}22, 114, 111, 255, 447, 123.$$

Diese Parallelstellung gilt jedoch nur für die specielle Fläche uvw und nicht für den vollständigen Complex der Form $[uvw]$.

Für die Figur (3), welche einen Hexaeder Zwilling nach ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) darstellt, haben daher die Flächen des Individuums (II) eine solche Lage gegen die Axen (XYZ) von (I), dass nachfolgende Indices gelten können:

$$uvw = 100, \quad 010, \quad 001$$

$$u'v'w' = \bar{1}22, \quad 2\bar{1}2, \quad 22\bar{1}.$$

Dieser Zwilling ist zugleich derjenige, der am Golde von Vöröspatak vorkommt und Missverständnisse veranlasste.

Einen zweiten Zwilling will ich hier noch erwähnen, den des Tetrakishexaeder (Zwilling nach $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$), welcher an Kupfer beobachtet wird. Fig. (4) stellt denselben dar. An demselben ist interessant, dass die Flächen des positiven Quadranten von einem Individuum parallel sind Flächen des positiven Quadranten vom zweiten Individuum. Es ergibt sich nämlich durch Transformation:

$$\left\{ \begin{array}{l} uvw = 210, \quad 120, \quad 201, \quad 102, \quad 021, \quad 012, \\ u'v'w' = 012, \quad 102, \quad 021, \quad 120, \quad 201, \quad 210, \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} uvw = \bar{2}10, \quad \bar{1}20, \quad 20\bar{1}, \quad 10\bar{2}, \quad 02\bar{1}, \quad 01\bar{2}, \\ u'v'w' = 4\bar{5}\bar{2}, \quad 5\bar{4}2, \quad \bar{4}25, \quad \bar{5}24, \quad \bar{2}45, \quad \bar{2}54. \end{array} \right.$$

Während für das tesserale System die Indices ziemlich einfach sind, nehmen sie mit den höheren Systemen an Complication zu. Als Beispiel für das pyramidale System kann Rutil gelten, dessen Axenverhältniss infolge $(001)(101) = 32^\circ 47'$ als

$$a : a : c = 1 : 1 : 0.64409 = 1 : 1 : \sqrt{\frac{7}{17}}$$

angenommen werden kann.

Die Transformationsgleichungen werden hierfür, da die Zwillingfläche für die Figur 5 und 6 ($10\bar{1}$) ist:

$$\begin{aligned} u' &= u(c^2-1) - 2w = -10u - 34w \\ v' &= -v(c^2-1) = 10v \\ w' &= 2uc^2 - w(c^2-1) = 14u + 10w. \end{aligned}$$

Man erhält hiedurch folgende Transformationen für die Flächen des zweiten Individuums:

$$\begin{cases} uvw = 100, 010, 110, \bar{1}10, 101, \bar{1}01, 111, \bar{1}\bar{1}\bar{1} \\ u'v'w' = \bar{5}07, 010, \bar{5}\bar{5}7, \bar{5}\bar{5}\bar{7}, \bar{1}\bar{1},06, \bar{6}01, 2\bar{2},5,12 \quad \bar{1}\bar{2}5,2. \end{cases}$$

Diese Indices sind mit den genäherten Werthen $c = \sqrt{\frac{7}{17}}$ berechnet worden und die Grenzwerte für die, zum Zwecke der absoluten Winkelbestimmung aus dem Werthe $c = 0.64409$ zu ermittelnden, Indices.

Auf analoge Weise können die genäherten Werthe zur Construction und Definirung der Krystalle, die genauen hingegen zur Berechnung verwendet werden.

Weitere Beispiele anzuführen, halte ich für unnöthig, indem durch die beiden durchgeführten der Gang der Untersuchung wohl genügend erläutert ist.

