

VEKTORANALYTISK FORMULERING AV GRUNNLOVEN FOR DEN GEOMETRISKE KRYSTALLOGRAFI

Det dreier seg her om ting som i en eller annen form og mere eller mindre utførlig er behandlet i alle lærebøker i krystallografi og mineralogi. Heller ikke den vektoranalytiske behandling er noe nytt, men jeg har ikke sett den gjennomført i den form som her er gitt.

Loven om krystallflatenes rasjonale akseavsnitt gjelder under forutsetning av at vi bruker visse (affine) koordinatsystemer som er tilpasset krystallens egen geometri. Et slikt koordinatsystem er karakterisert ved tre vektorer a , b , c , hvis retninger og relative¹ lengder er gitt ved et sett krystallografiske elementer for vedkommende krystall. Ut fra et fast punkt O kan vi med a , b , c som det primitive vektortriplett konstruere et rumgitter. Vi kommer til alle gitterets punkter (cellehjørner) ved å avsette fra O vektorene

$$r = ua + vb + wc$$

hvor u , v og w hver for seg etterhånden antar alle hele positive og negative verdier og null. Enhver slik vektor r kalles en gittervektor; den vil avsette fra et hvilket som helst gitterpunkt nå til et gitterpunkt, og enhver vektor som forbinder to gitterpunkter kan skrives på formen r .

Ethvert plan som inneholder to ikke parallelle gittervektorer vil være besatt med et regelmessig nett av gitterpunkter. Alle slike nettplan er parallelle med mulige flater på krystallen. Hvis en nettmaske har vektorene r_1 og r_2 til sider, så er planstørrelsen² $r_1 r_2 (= -r_2 r_1)$ karakteristisk for det nettplan den ligger i. Planstørrelsens tallverdi er nettmaskens flateinnhold; jo mindre den er, jo tettere er nettplanet besatt med punkter og jo større er dettes krystallografiske betydning. Hvis vi uttrykker vektorene r_1 og r_2 ved det primitive vektortriplett og utfører deres ytre produkt, så får vi planstørrelsen uttrykt ved de primitive planstørrelser bc , ca og ab :

$$\begin{aligned} r_1 r_2 &= (u_1 a + v_1 b + w_1 c) (u_2 a + v_2 b + w_2 c) = \\ &= (v_1 w_2 - v_2 w_1) bc + (w_1 u_2 - w_2 u_1) ca + (u_1 v_2 - u_2 v_1) ab. \end{aligned}$$

Enhver av gitterets planstørrelser har derfor hele komponenter i de primitive planstørrelser og kan skrives på formen

$$r_1 r_2 = lbc + mca + nab.$$

Forholdet mellom akseavsnittene for et nettplan som inneholder planstørrelsen $r_1 r_2$ kan vi finne ved å multiplisere planstørrelsen skalart med

¹ Vi ser her bort fra de grunnvektorer hvis absolutte lengder kan bestemmes røntgenografisk og som for øvrig står i en eller annen enkel sammenheng med a , b , c .

² De vektorbetegnelser som er brukt her finnes f. eks. i C. Runge, Vektoranalysis, Verlag S. Hirzel, Leipzig.

xa , yb og zc suksessive, hvor x , y og z er de ukjente akseavsnitt. Disse tre skalare produkter må nemlig være like store, da de hvert for seg betyr volumet av et parallelepiped med $r_1 r_2$ som grunnflate og samme høide (nemlig nettplanets avstand fra O). Utfører vi disse produkter og setter dem like store, så får vi

$$xl = ym = zn \quad \text{eller} \quad x : y : z = \frac{1}{l} : \frac{1}{m} : \frac{1}{n}.$$

l , m , n er altså nettplanets resiproke akseavsnitt, d. v. s. dets millerske indises. Da enhver gittervektor er parallell med aksene for en av krystallens mulige soner og dens komponenter er proporsjonale med denne sonens indises, har vi her av to soner avledet den flate som er felles for dem og funnet de kjente formler

$$l = \begin{vmatrix} v_1 w_1 \\ v_2 w_2 \end{vmatrix} \quad m = \begin{vmatrix} w_1 u_1 \\ w_2 u_2 \end{vmatrix} \quad n = \begin{vmatrix} u_1 v_1 \\ u_2 v_2 \end{vmatrix}$$

Analogt kan vi av indises for to ikke parallelle flater finne indises for den sone de bestemmer. Det er da hensiktsmessig istedenfor de karakteristiske planstørrelser for disse flater å betrakte deres „tilhørende vektorer“, som vi får ved å innføre vektorprodukter istedenfor ytre produkter. Til planstørrelsen $lbc + mca + nab$ svarer da vektoren $lb \times c + mc \times a + na \times b$, som kan skrives $abc(la^* + mb^* + nc^*)$, hvor a^* , b^* , c^* er det resiproke vektortriplett til a , b , c . Denne vektor faller langs normalen til planstørrelsen. Produktet abc (volumet av elementærcellen) kan vi velge lik 1, slik at vektoren kan skrives $la^* + mb^* + nc^*$. Danner vi denne vektor for hver av de to flater, så er deres vektorprodukt en vektor som er parallell med flatenes skjæringslinje, altså med aksene for deres felles sone:

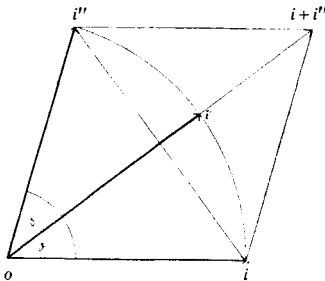
$$(l_1 a^* + m_1 b^* + n_1 c^*) \times (l_2 a^* + m_2 b^* + n_2 c^*) = \\ = (m_1 n_2 - m_2 n_1) b^* \times c^* + (n_1 l_2 - n_2 l_1) c^* \times a^* + (l_1 m_2 - l_2 m_1) a^* \times b^*$$

Da vi har satt abc lik 1 er også $a^* b^* c^*$ lik 1, og vektoren kan skrives

$$ua + vb + wc$$

hvor

$$u = \begin{vmatrix} m_1 n_1 \\ m_2 n_2 \end{vmatrix} \quad v = \begin{vmatrix} n_1 l_1 \\ n_2 l_2 \end{vmatrix} \quad w = \begin{vmatrix} l_1 m_1 \\ l_2 m_2 \end{vmatrix}$$



Dette er de kjente formler for beregning av en sonens indises ut fra to av dens flaters indises. Vi ser at mens en sonens indises er vektorkomponenter i krystallgitteret, er en flates indises vektorkomponenter i det resiproke gitter til dette.

Ved å gå ut fra de 4 valgte utgangsflater (koordinatplanene og enhetsflaten) og de soner de bestemmer og fortsatt anvende de to sett

formler for beregning av soners og flaters indises, får vi frem soneforbindelsen mellom alle krystallens mulige flater, og vi har dermed vist at rasjonalitetsloven og soneloven er to uttrykk for ett og det samme. Hvis en flate (lmn) skal ligge i sonen $[uvw]$, så må dens normal stå loddrett på soneaksen, d. v. s. det skalare produkt

$$(la^* + mb^* + nc^*) \cdot (ua + vb + wc)$$

må forsvinne. Utfører vi produktet så får vi den kjente betingelse

$$lu + mv + nw = 0.$$

Pålegger vi det primitive vektortriplett (elementærcellen) spesielle betingelser, så kan det i gitteret opptre de forskjellige symmetrielementer og kombinasjoner av disse som svarer til de 7 krystallsystemer. Vi skal bare betrakte symmetriaksene.

En dreining kan defineres ved to enhetsvektorer i og i' , når vi fastsetter at deres vektorprodukt $i \times i' = \epsilon \sin \vartheta$ skal ligge i dreiningssaksen og ved sitt fortegn angi dreiningens retning. Da er ϑ , vinkelen mellom i og i' , dreiningsvinkelen. Hvis dreiningens retning er slik at den overfører i i i' , så overfører den i' i en ny enhetsvektor i'' , som kan uttrykkes ved i og i' . Av figuren, hvor ϵ står loddrett på papiret i punktet O , ser vi at vektoren $i + i''$ faller langs i' og har lengden $2i \cdot i' = 2i' \cdot i'' = 2 \cos \vartheta$. Vi har altså vektorligningen

$$i'' = 2i' \cos \vartheta - i.$$

Hvis dreiningen skal være en krystallografisk dekkbevegelse, må i , i' og i'' være krystallografisk likeverdige vektorer. Hvis altså i er en gittervektor, må også i' og i'' være gittervektorer i det samme gitter. Vi velger i og i' slik at de blir minste gittervektorer i det nettplan de ligger i. Da må komponentene av i'' i systemet i, i' være hele tall eller null. Størrelsen $2 \cos \vartheta$ må altså være et helt tall eller null. Herav følger som mulige verdier

$$\text{for } \cos \vartheta: \quad +1, \quad +\frac{1}{2}, \quad 0, \quad -\frac{1}{2}, \quad -1.$$

$$\text{og for } \vartheta: \quad \pm \frac{2\pi}{1}, \quad \pm \frac{2\pi}{6}, \quad \pm \frac{2\pi}{4}, \quad \pm \frac{2\pi}{3}, \quad \pm \frac{2\pi}{2}.$$

Hermed er vist at en dreining som skal være en krystallografisk dekkbevegelse, må ha en dreiningsvinkel som går opp i 2π , og det enten 1, 2, 3, 4 eller 6 ganger.

Oslo, Mineralogisk-geologisk museum,
september 1941.

Ivar Oftedal.