

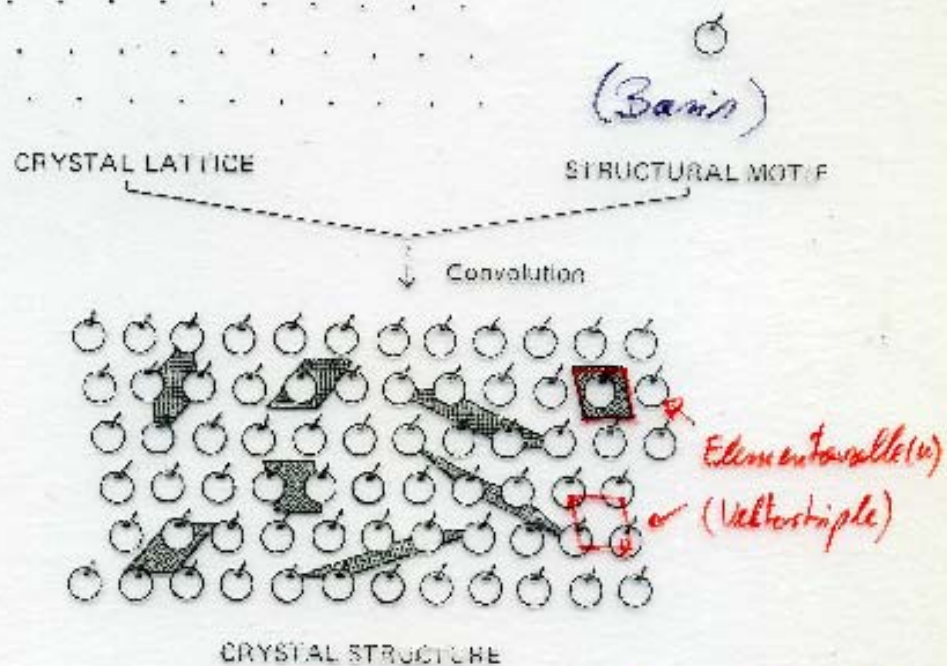
Kristalle (Kristallgeometrie, Kristallsymmetrie)

Grundlegende Charakteristika des kristallinen Festkörpers ist (idealisiert) der hohe **Ordnungsgrad**, d.h., die

Bausteine des Kristalls (Atome, Moleküle oder Ionen)

wiederholen sich in regelmäßiger Weise **stetig periodisch** (Kepler, 1611; Hooke, 1665; Bragg, 1773; Haüy, 1782)

→ **Festordnung**; Gegensatz: **amorph** (nur Nahordnung)



Grundmuster + 3-dim. Translation → Gesamtkonstrukt

Basis + Kristall-(Translations-)gitter → Kristallstruktur

Basis: die einem Gitterpunkt entsprechende Baueinheit

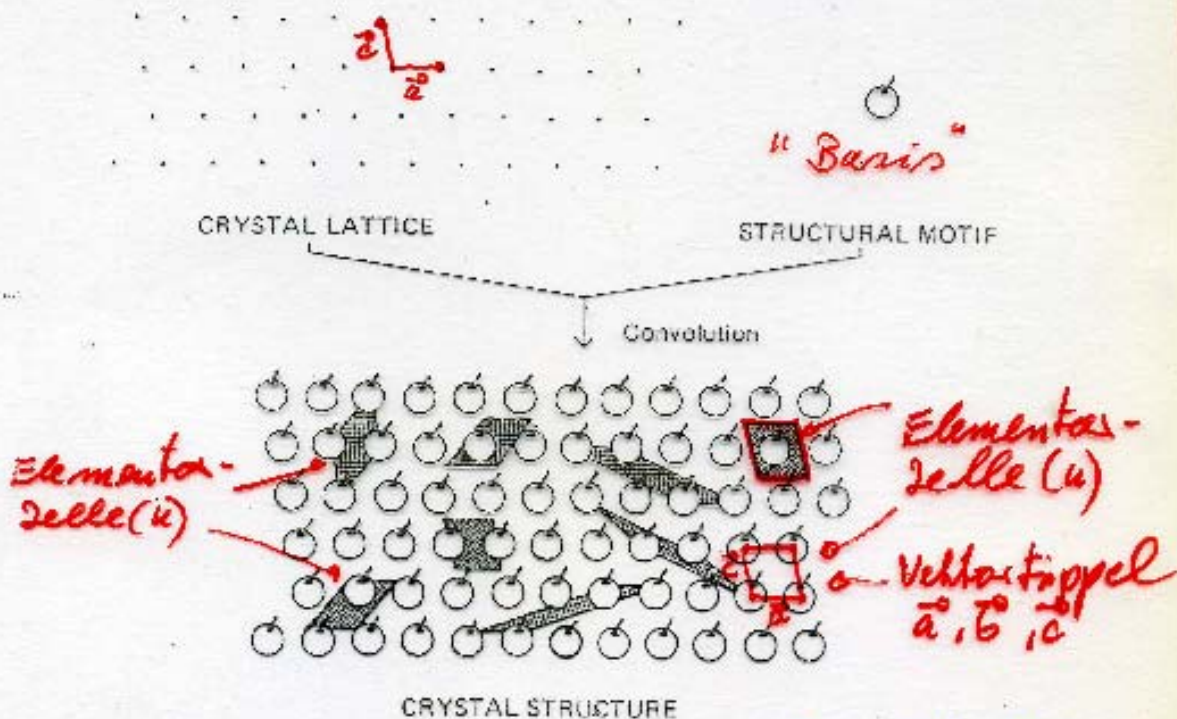
bestehend aus einem oder mehreren Atomen, Molekülen, Ionen

Elementarzelle: das Gitter aufbauende Parallelepiped

Basis, Elementarzelle, Kristallgitter haben bestimmte Symmetrie

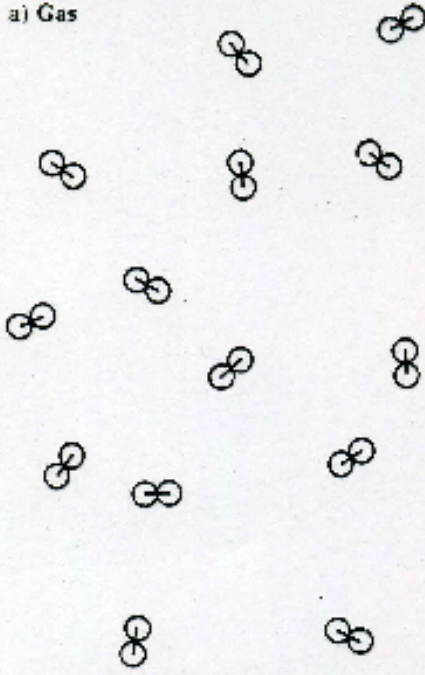
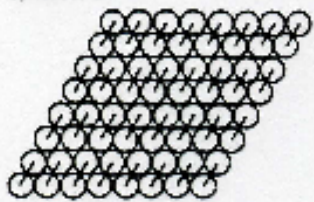
Kristalle (Kristallgeometrie, Kristallsymmetrie)

Grundlegende Charakteristika des kristallinen Festkörpers
ist (idealisiert) der hohe **Ordnungsgrad**, d.h., die
Bausteine des Kristalls (Atome, Moleküle oder Ionen)
wiederholen sich in regelmäßige Weise **stetig, periodisch**
(Kepler, 1611; Hooke, 1665; Bravais, 1812; Haüy, 1782)
→ **Fernordnung**; Gegensatz: **amorph** (nur Nahordnung)



Grundmuster + 3-dim. Translation → Gesamtkonstrukt
Basis + Kristall-(Translations-)gitter → Kristallstruktur
Basis: die einem Gitterpunkt entsprechende Baueinheit
bestehend aus einem oder mehreren Atomen, Molekülen, Ionen
Elementarzelle: das Gitter aufbauende Parallelepiped
Basis, Elementarzelle, Kristallgitter haben bestimmte Symmetrien

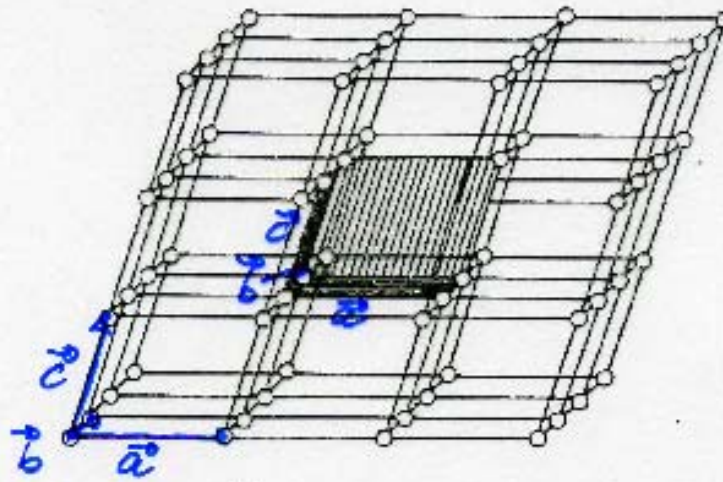
*Fernordnung, Nahordnung
homogen, inhomogen; isotrop, anisotrop*

Modellvorstellung der Aggregatzustände	form- beständig	volumen- beständig	Verteilung der Bausteine	Physikalisches Verhalten
a) Gas 	⊖	⊖	statistisch homogen ¹	 isotrop ²
Siedepunkt: b) Flüssigkeit 	⊖	⊕		
Schmelzpunkt: c) Kristall 	⊖	⊕	periodisch homogen ¹	 anisotrop ³

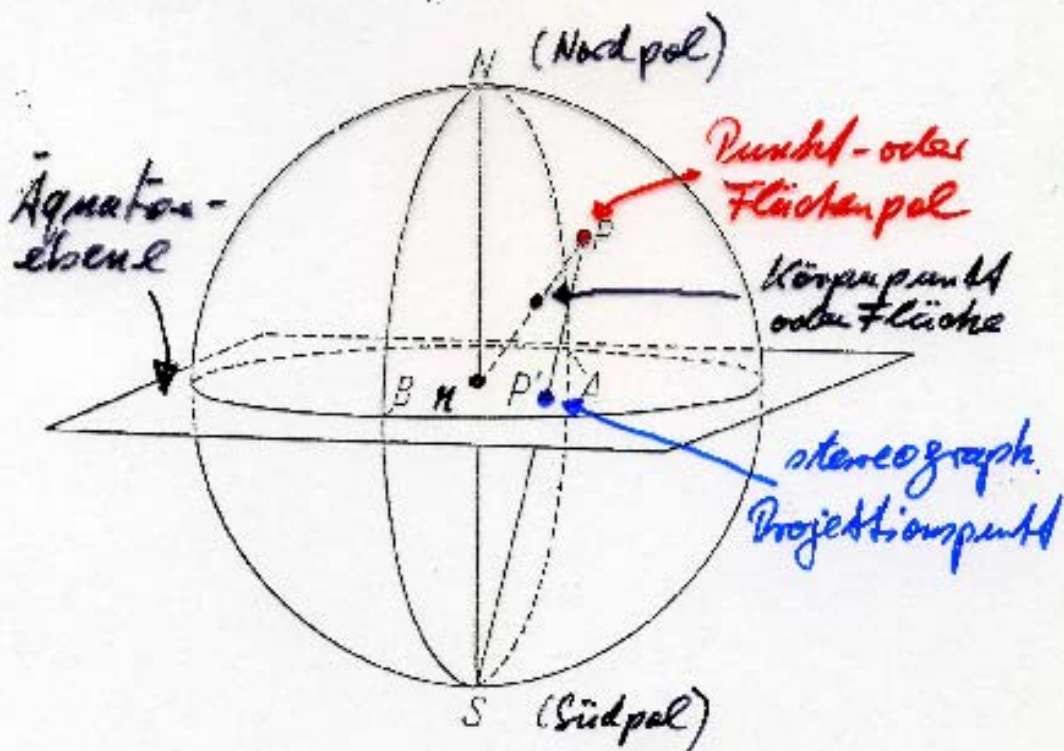
¹ Ein Stoff ist homogen, wenn er in parallelen Richtungen gleiches Verhalten zeigt: $\Rightarrow$ **homogen**

² Gleiche physikalische Eigenschaften in allen Richtungen $\rightarrow$ **isotrop**

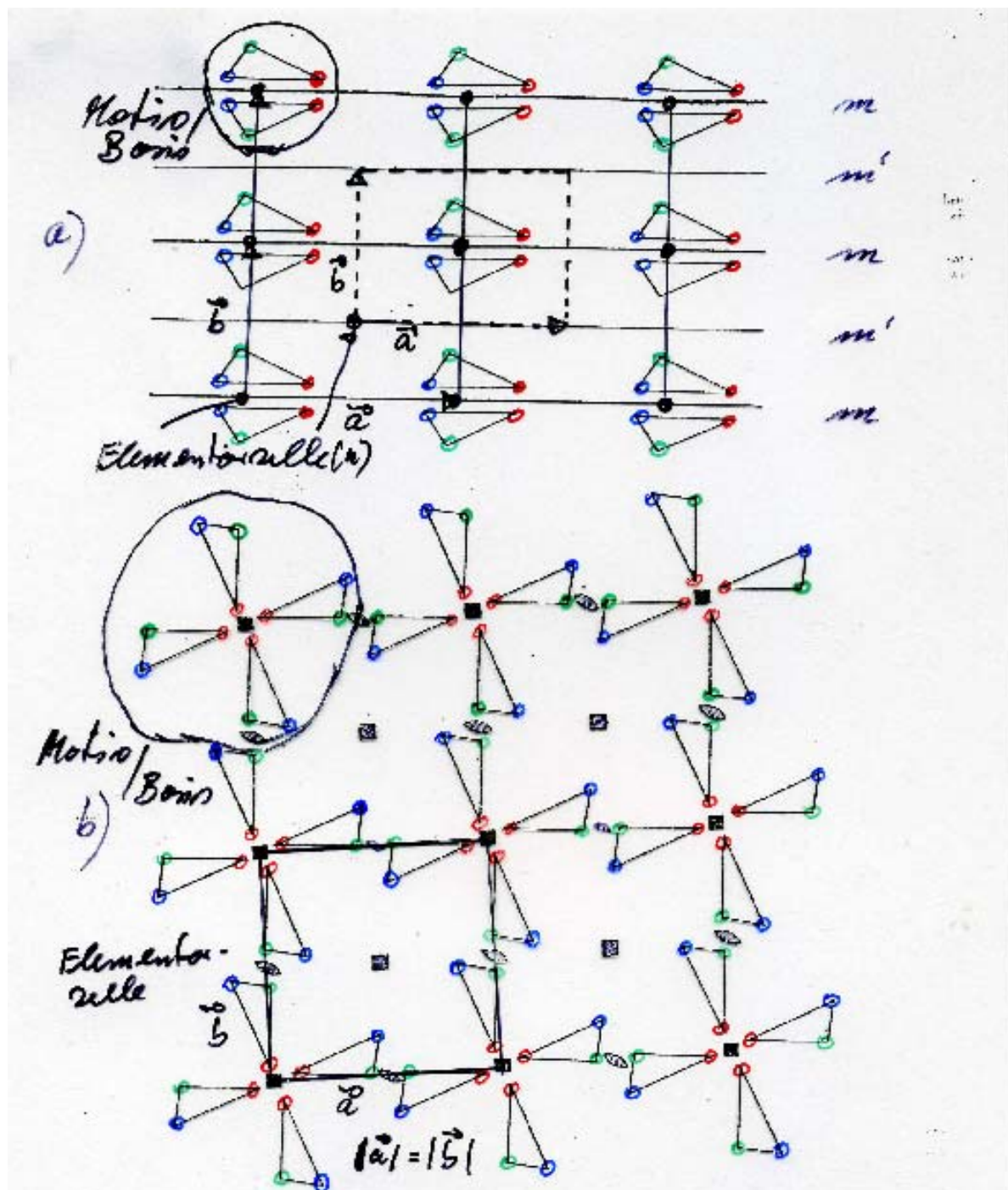
³ Verschiedene physikalische Eigenschaften in verschiedenen Richtungen $\rightarrow$ **anisotrop**



Raumgitter
 Parallelepiped, Elementarzelle
 (Elementarzellachsen $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$)



Das Prinzip der stereographischen Projektion



Translationsperiodische Wiederholung symmetrischer Baueinheiten

Bezüglich der erwähnten Baueinheiten und Raumgitter vgl. Fig. 11-16 u. 17, bezüglich der erwähnten Raumgruppen siehe 11, 25. In den Figuren sind sowohl die sichtbaren (schwarz oder dick) als auch die zusätzlichen (grau oder dünn) kristallographischen Symmetrieelemente eingezeichnet.

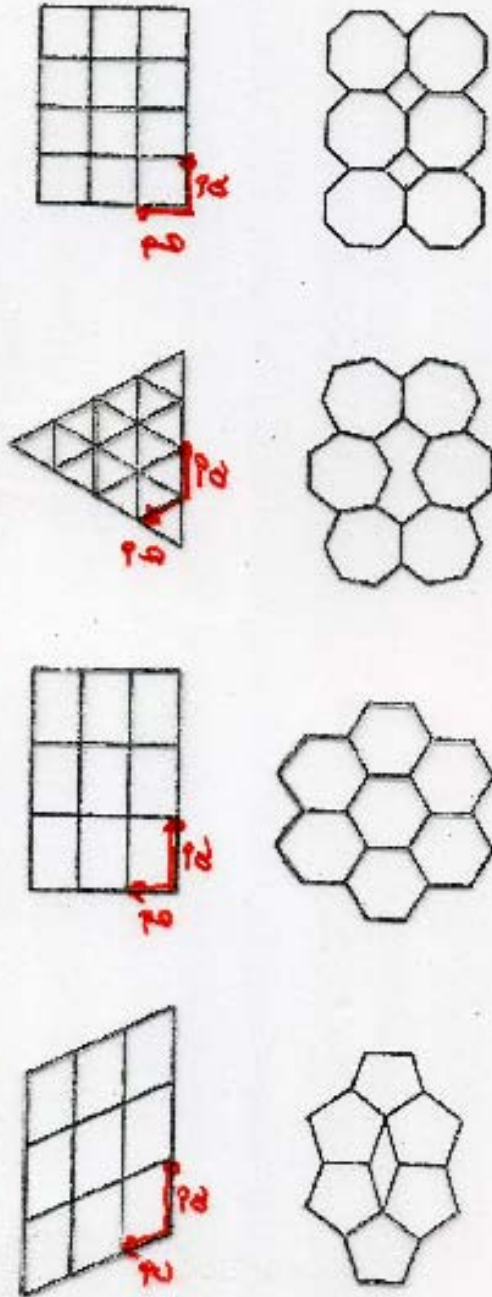
a) Wiederholung einer Baueinheit der Symmetrie ∞ in einem Raumgitter der Symmetrie $\begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$

Nur diejenigen der dreizähligen Symmetrien des Raumgitters sind als kristallographische Symmetrieelemente wirksam, für die Spiegelebene der Baueinheit parallel ist. Der entstehende Kristall ist folglich monoklin mit der Raumgruppe $P2_1$.

b) Wiederholung einer Baueinheit der Symmetrie 4 in einem Raumgitter der Symmetrie $\begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$

Die Spiegelebenen und 2-zähligen Achsen des Raumgitters werden nicht als kristallographische Symmetrieelemente wirksam. Der entstehende Kristall ist tetragonal mit der Raumgruppe $P4$.

Wegen des Gitterbaus der Kristalle sind in der Kristallographie nur raumfüllende Symmetrieelemente erlaubt



Lückenlose Bedeckung der Ebene mit identischen n-Ecken

In der Ebene können von allen n -zähligen Polygonen nur Parallelelogramme ($n = 1$), Rechtecke ($n = 2$), Gleichseitige Dreiecke ($n = 3$) Quadrate ($n = 4$), und regelmäßige Sechsecke ($n = 6$) lückenlos aneinander gesetzt werden. Keine lückenlose Bedeckung mit Fünfecken oder $n > 6$.

- Symmetrieelemente, Symmetrieeoperationen

Da Kristalle dreidimensionale Gebilde sind, kommen nur "raumfüllende" Symmetrieelemente in Frage

Spiegelebene: σ ; Symmetriezentrum: i
 Drehachsen: $n = 1, 2, 3, 4, 6$; Translationen: $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$
 sowie ihre Kombinationen (Hermann-Mauguin)

- Kristallklassen (kristallographische Punktgruppen)

Unter Auslassung der Translation ergeben sich genau 32 verschiedene Kombinationsmöglichkeiten

→ 32 kristallogr. Punktgr. (Schönflies oder)
 → 32 Kristallklassen (Hermann-Mauguin)

Sie dienen zur Beschreibung der Kristallmorphologie
 Darstellung in Form stereographischer Projektionen

- Kristallsysteme (Gittersymmetrie)

Auch Kristallgitter sind die ihnen zugrunde liegenden Parallelepipede (Elementarzellen) haben bestimmte Symmetrie (genau 7 Möglichkeiten) → Kristallsysteme
 mit unterschiedlichen Beziehungen werden Kristallachsen

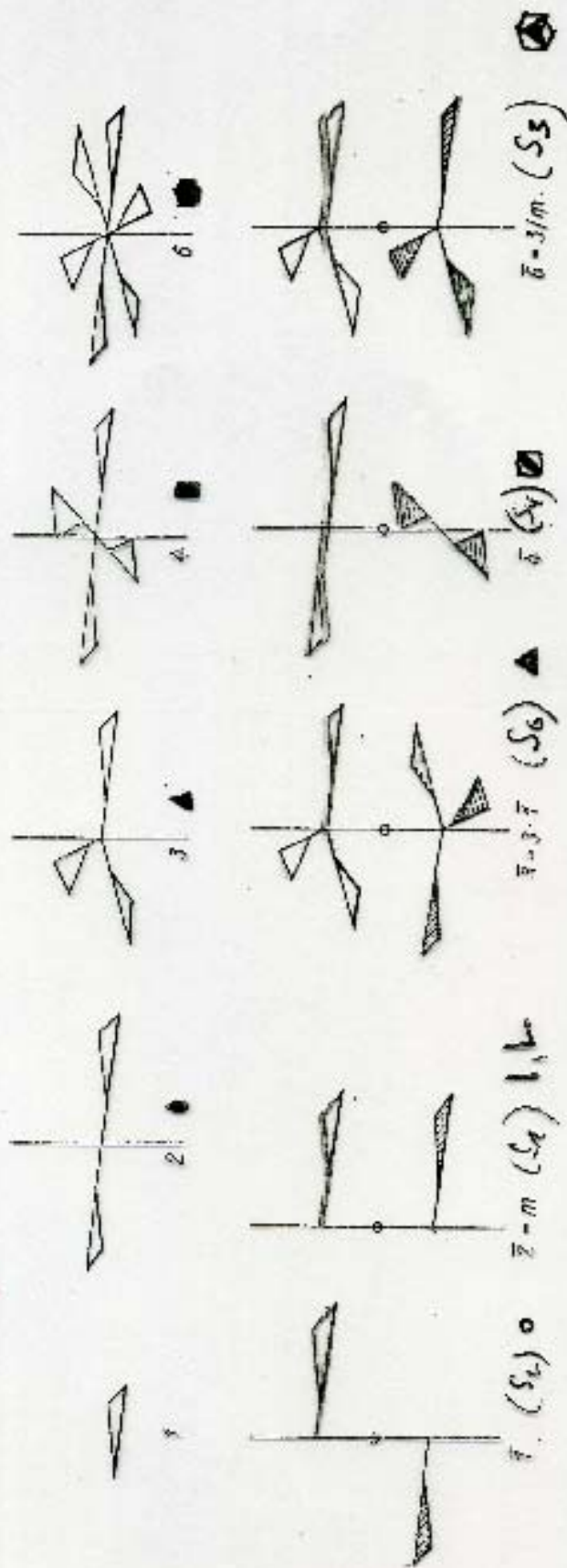
- Bravais-Gitter (zentrierte Gitter)

Normalerweise 1 Gitterpunkt pro Elementarzelle (P)

Bei bestimmten Achsenverhältnissen höhere Symmetrie möglich unter Erhöhung des Gitterpunkts pro Elementarzelle

$C(2), I(2), R(3), F(4)$, → 14 Bravais-Gitter

"Raumfüllende" Symmetrieelemente (ohne Translationen)

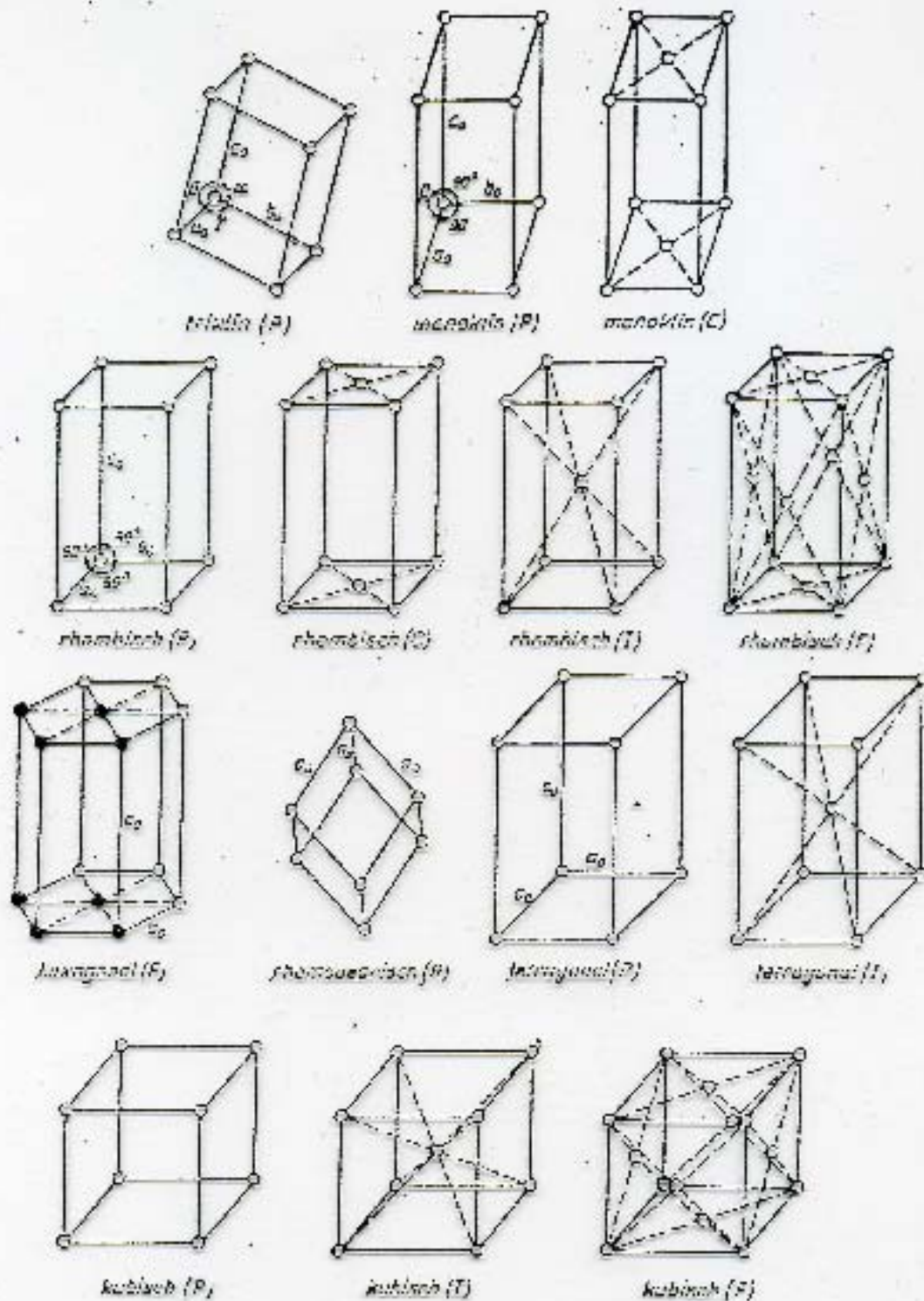


aus 5 Fundamentoperationen (1, 2, 3, 4, 6) und $\bar{1}$
 (Drehachsen $R = 1, 2, 3, 4, 6$; Windachse nach Winkel $\varphi = 2\pi/n$)
 10 Punktsymmetrieelemente durch Koppelung
 $\bar{1}$: Invertierung; $S_n(R)$: Drehspiegelachsen

Triklin	Monoklin	Tetragonal	Trigonal	Hexagonal	Kubisch
—			—		—
Gitterkubisch					
					—

The 14 Bravais Lattices and Conventional Unit Cells

<i>Kristall-</i> System	Number of lattices in system	Lattice symbols	Nature of unit- cell axes and angles ⁽¹⁾	Lengths and angles to be specified	<i>Holoedrie</i> Symmetry of lattice ⁽²⁾
Triclinic	1	P	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	a, b, c α, β, γ	$\bar{1}$
Monoclinic ⁽³⁾	2	1st setting $\begin{Bmatrix} P \\ B \end{Bmatrix}$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	a, b, c γ	$2/m$
		2nd setting $\begin{Bmatrix} P \\ C \end{Bmatrix}$	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	a, b, c β	
Orthorhombic	4	P $C^{(4)}$ I F	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a, b, c	mnm
Tetragonal	2	$P^{(5)}$ I	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a, c	$4/mmm$
Cubic	3	P I F	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a	$m\bar{3}m$
Trigonal	1	$R^{(6)}$	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$	a a	$\bar{3}m$
Hexagonal	1	$P^{(6)}$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 120^\circ$ $\gamma = 90^\circ$	a, c	$6/mmm$



Die 14 Bravais-Gitter mit Gitterkonstanten
 $a_0, b_0, c_0, d_0, \rho_0, \rho_0 \equiv \vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

- Raumgruppen (3-dim. Symmetriegruppen)

Unter Einbeziehung der Translation ergeben sich weitere Symmetrieelemente $\rightarrow$ Translationsymmetrieelemente

a) Schraubenachsen: n_m

Drehung um $2\pi/n$ und Translation $\parallel$ zur Drehachse um $\frac{m}{n} \cdot |\vec{c}|$

($2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$ möglich)

b) Gleitspiegelebenen: a, b, c, n, d

Spiegelung und Translation parallel zur Spiegelebene

um $a/2 \parallel a$ bei a ; $b/2 \parallel b$ bei b ; $c/2 \parallel c$ bei c

um $(a+b)/2, (b+c)/2, (a+c)/2$ parallel

$\vec{a}+\vec{b}, \vec{b}+\vec{c}, \vec{a}+\vec{c}$ bei n

um $(a+b)/4, (b+c)/4, (a+c)/4$ parallel

$\vec{a}+\vec{b}, \vec{b}+\vec{c}, \vec{a}+\vec{c}$ bei d (nur im I u. F-Zellen)

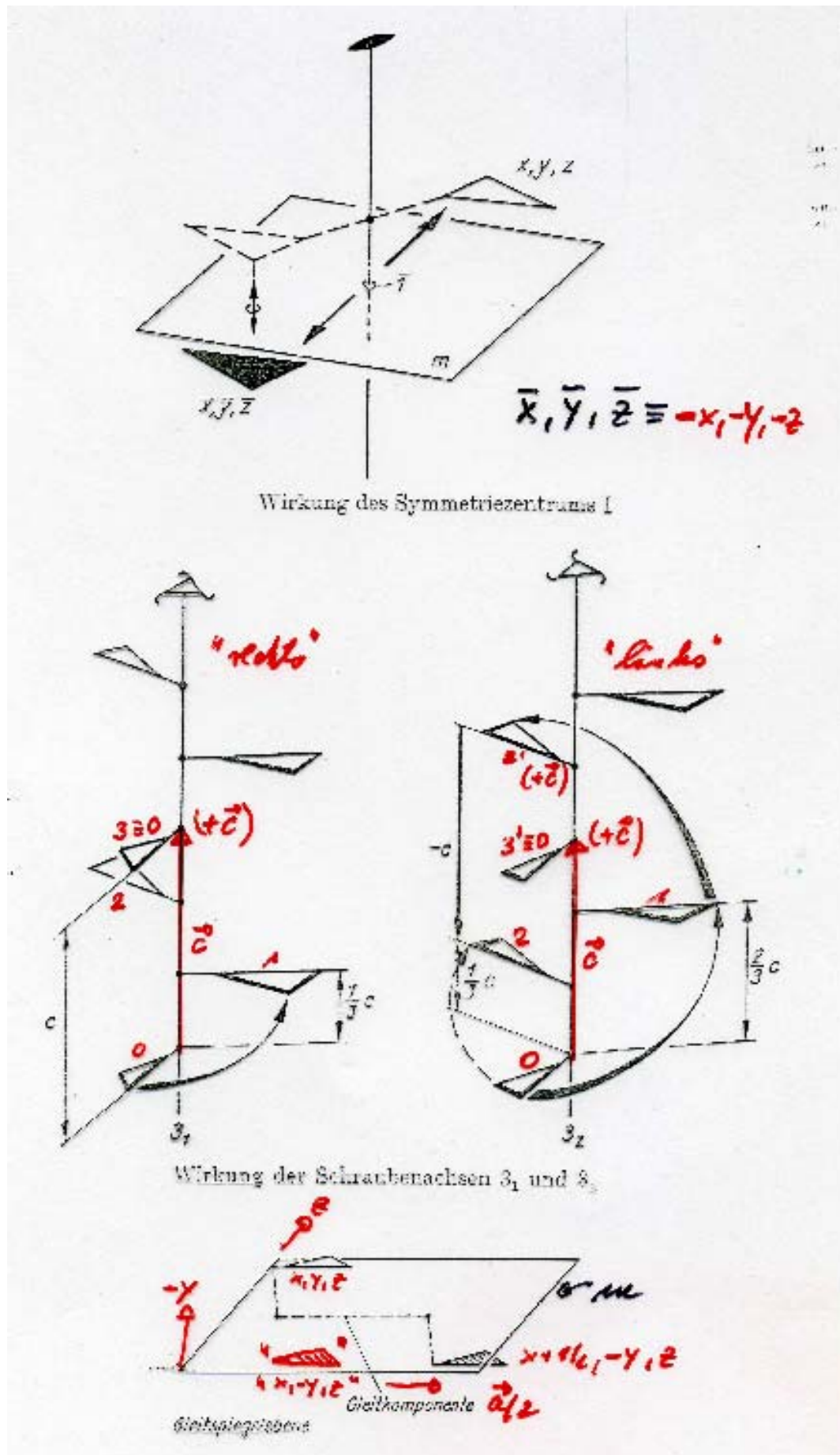
Einschränkung der Kombinationsmöglichkeiten hinsichtlich
Fähigkeit und Translationskomponenten durch
3-dimensionale Periodizität des Translationsgitters

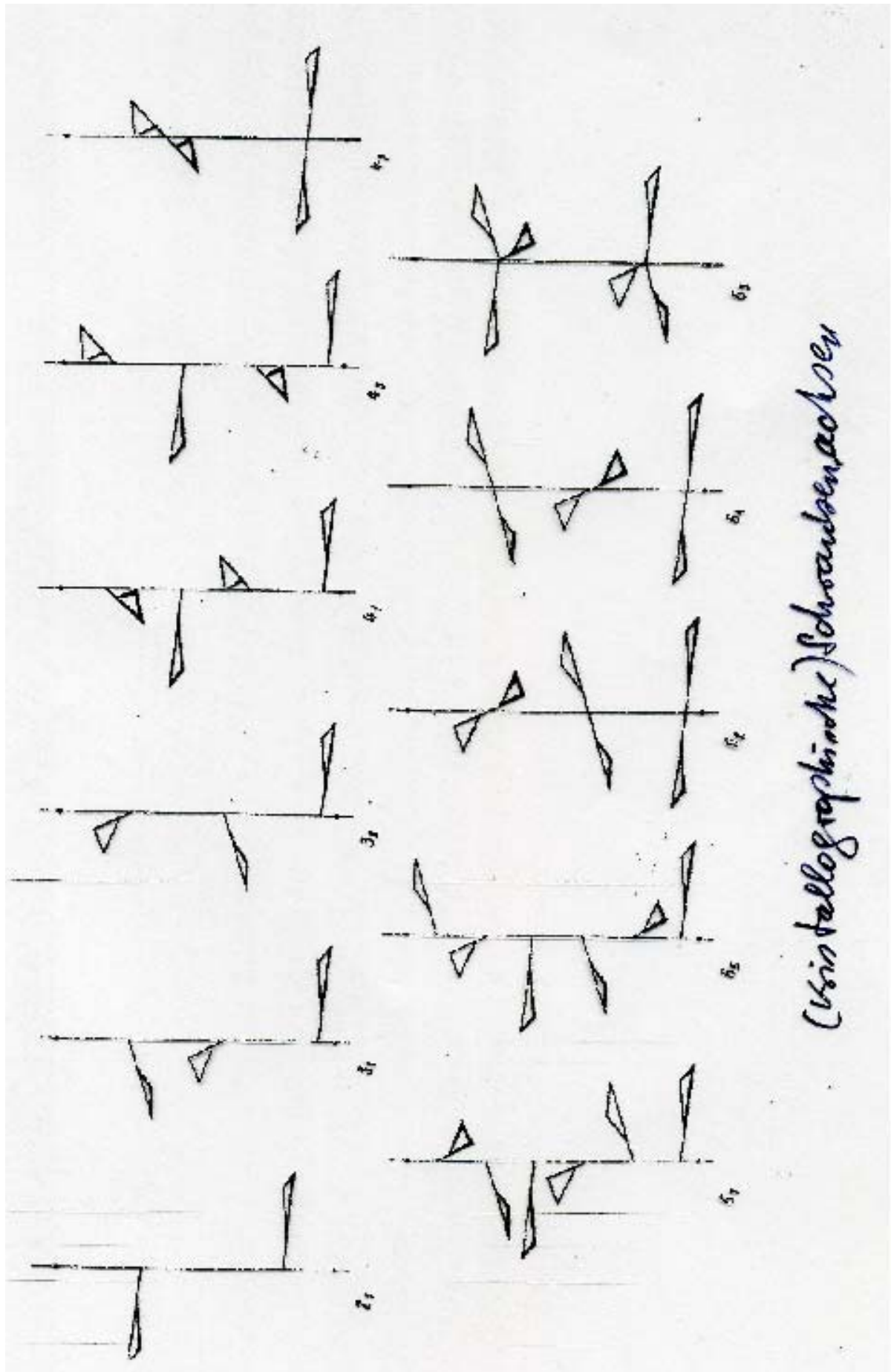
Kombination der 14 Bravais-Gitter mit den
"raumfüllenden" Punktgruppensymmetrieelementen und
den o.g. Translationsymmetrieelementen $\rightarrow$
230 Raumgruppen

Punktgruppen: Beschreiben Symmetrie der Körperoberfläche

Raumgruppen: Beschreiben Symmetrie des Körperinhalts

Auflistung aller Symmetrieelemente der 230 Raumgruppen
im International Tables for X-Ray Crystallography, Band I





Raumgruppen

$P 2_1/m$
 C_{2h}^2

No. 11 $P \perp 1 2_1/m$ $2_1/m$ Monoclinic

1st SETTING

Origin at 1; unique axis c

Number of positions,
Wyckoff notation,
and point symmetry

Co-ordinates of equivalent positions

Conditions limiting
possible reflections

General:

hkl : No conditions
 $hk0$: No conditions
 $00l$: $l=2n$

Special: as above, plus
no extra conditions

hkl : $l=2n$

Symmetry of special projections

(001) $p2$; $a' = a$, $b' = b$ (100) pgm ; $b' = b$, $c' = c$ (010) pmg ; $c' = c$, $a' = a$

During our "International Tables for X-Ray Crystallography" Band I, Symmetry

- Atomkoordinaten, Latticeparameter, Punktlagen

Translationsperiodizität liefert eine Beschreibung von Kristallstrukturen, die möglichst klein ist:

1. Jeder (translatorische) unabhängige Mannst wird ein eigenes Translationsgitter zugeordnet. Die Kristallstruktur ergibt sich als Summe gegeneinander **verschobener** (verschobener) Translationsgitter mit jeweils **gleichen** Grundtranslationen.
2. Die Kristallstruktur wird als Summe von Basis (Grundmotiv) und Translations-(Bravais-) Gitter beschrieben.
3. Basis und Gittertranslation werden dem aus den Grundtranslationen $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ gebildeten Parallelepiped (Elementarzelle: P, C, I, F, R) entnommen.

→ Vollständigste und einfachste Darstellung der Kristallstruktur durch Elementarzelle mit ihren Grundtranslationen $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ bzw. Gitterkonstanten $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma)$ und ihrem Inhalt (Atome, Moleküle etc.)

Beschreibung der Atomlagen innerhalb der Elementarzelle durch Ortsvektoren $\vec{r} = x \cdot \vec{a} + y \cdot \vec{b} + z \cdot \vec{c}$ bzw. durch deren (kontravariante) Vektorkomponenten x, y, z

Dabei genügt bei Kenntnis der Raumgruppe der **nicht-symmetrische** Teil der Zelle = asymmetrische Einheit

$Pmmn$ D_{2h}^{13}		No. 59	$P 2_1/c$ or $2_1/c$ or $2/c$	or or or Orthorhombic
<i>tätigkeit der Lage</i> <i>Punktlage</i> <i>Symmetrie der Punktlage</i> Origin at $\bar{1}$, or $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ from above (compare previous page for alternative origin)		Diagrams as on previous page but with origin shifted to $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		
Number of symmetry equivalents, and point symmetry <i>allgemein</i>		Co-ordinates of equivalent positions <i>Punkt- (Atom-) koordinaten</i>		Character-Table possible reflections
5 2 1		x, y, z $\bar{x}, y, z$ $x, \bar{y}, z$ $\bar{x}, \bar{y}, z$ $x, y, \bar{z}$ $\bar{x}, y, \bar{z}$ $x, \bar{y}, \bar{z}$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$		General: hkl } No conditions $0kl$ } $h0l$ } hkl $h = 2n$ $0kl$ $h = 2n$ hkl $h = 2n$ hkl $h = 2n$ hkl $h = 2n$
<i>periodisch</i>		4 f m x, y, z $\bar{x}, \bar{y}, z$ $x, \bar{y}, \bar{z}$ $\bar{x}, y, \bar{z}$ 4 e m x, y, z $\bar{x}, \bar{y}, z$ $x, \bar{y}, \bar{z}$ $\bar{x}, y, \bar{z}$ 4 d $\bar{1}$ $0, y, z$ $0, \bar{y}, z$ $0, y, \bar{z}$ $0, \bar{y}, \bar{z}$ 4 c $\bar{1}$ $0, 0, z$ $0, 0, \bar{z}$ $0, y, z$ $0, \bar{y}, \bar{z}$ 2 b m x, y, z $\bar{x}, \bar{y}, z$ 2 a m x, y, z $\bar{x}, \bar{y}, z$		Special: as above, plus no extra conditions hkl $h = 2n$ $k = 2n$ no extra conditions
Symmetry of spatial projections		(001) mm $a' = a$ $b' = b$ (100) mm $b' = b$ $c' = c$ (010) mm $c' = c$ $a' = a$		

153

Atom- bzw. Lagenparameter bzw. Atomkoordinaten (x, y, z)

Tab. II. Lagenparameter und anisotrope Temperaturfaktorkoeffizienten für Ga ; B_{ij} definiert für $\exp[-\frac{1}{2}(B_{11}h^2a^{*2} + \dots + 2B_{12}hka^*b^* + \dots)]$; Raumgruppe: $Pmmn-D_{2h}^{13}$ (Nr. 59, zentrosymmetrische Aufstellung), $Z = 2$; Zahlen in Klammern geben die Standardabweichung der letzten Stelle an.

Atom	Punktlage	x	y	z	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
O1	(2e)	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0,371(1)	3,5(4)	5,2(5)	1,8(3)	0	0	0
O2	(2e)	0,1281(4)	0,3739(4)	0,7576(6)	3,0(1)	4,2(2)	2,6(1)	-0,2(2)	-0,1(2)	-0,1(2)
H	(4f)	0,122(1)	$\frac{1}{2}$	0,551(2)	2,8(4)	4,0(5)	3,4(4)	0	-0,7(4)	0
F	(4f)	0,0631(5)	$\frac{1}{2}$	0,4144(9)	3,8(2)	6,9(3)	4,1(2)	0	-1,7(2)	0
C1	(4e)	$\frac{1}{2}$	0,4261(9)	0,830(1)	3,0(4)	3,9(4)	1,9(3)	0	0	0,5(3)
C2	(4e)	$\frac{1}{2}$	0,5541(9)	0,017(1)	5,2(5)	3,1(4)	5,3(3)	0	0	-1,0(4)

- Zellbesetzung, röntgenographisch best. Dichte
Elementarzelle kann nur **ganzzahlige Vielfache**
bestimmter Formeleinheiten (Atome, Moleküle)
enthalten.

Zahl der Formeleinheiten pro Elementarzelle =

$$\text{Zellbesetzung (Zahl)} \quad Z = \rho \cdot V \cdot N / M$$

(ρ = Dichte, V = Zellvolumen, N = Avogadro-Zahl, M = Molmasse)

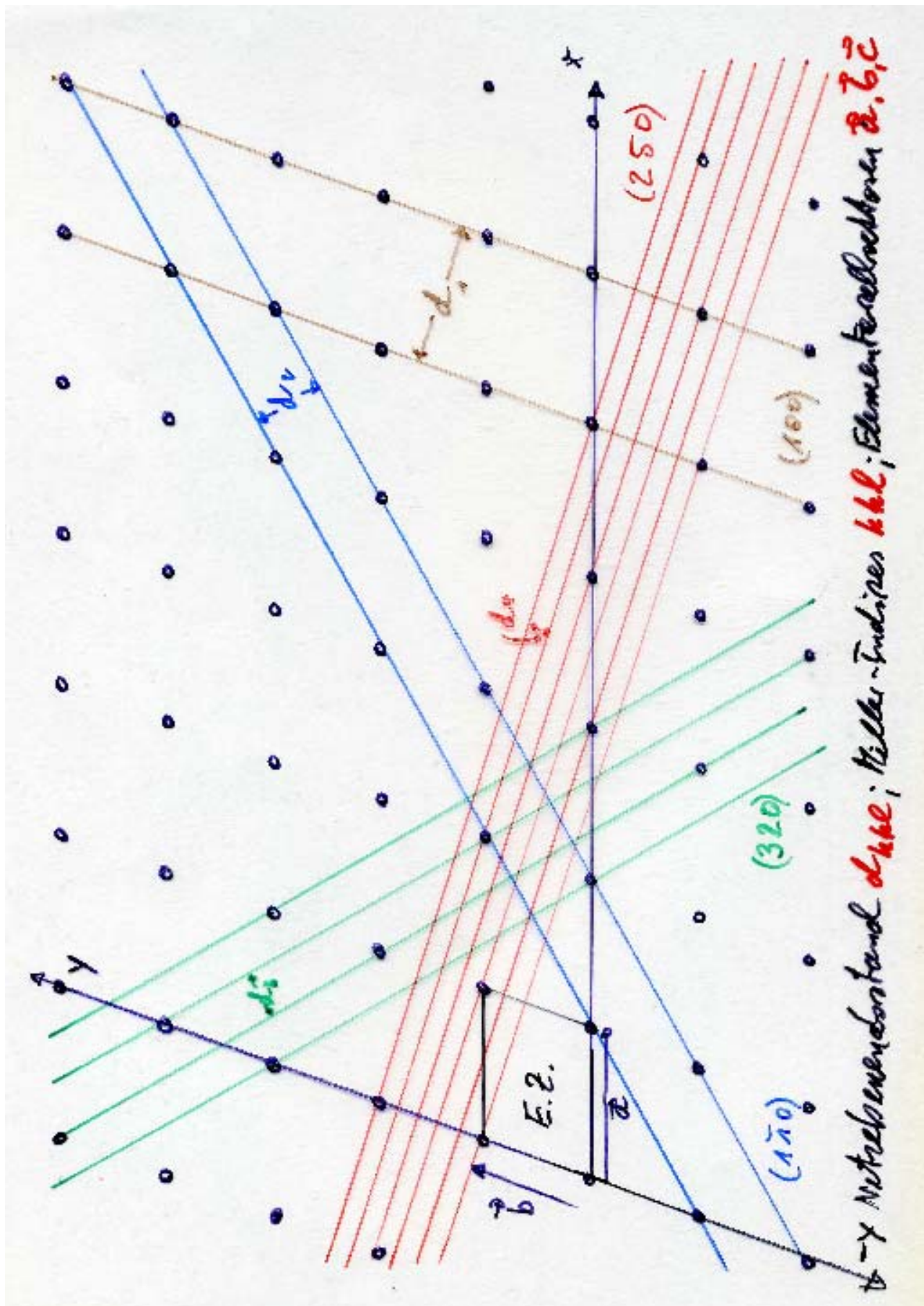
Da Z immer **ganzzahlig**, läßt sich bei Kenntnis des
Zellvolumens und der Molmasse die Dichte einer
Verbindung **sehr genau** berechnen nach:

$$\rho_{\text{re}} = \frac{Z \cdot M}{N \cdot V} \quad \text{bzw.} \quad \rho_{\text{re}} = \frac{Z \cdot M}{0.6022 \cdot V [\text{\AA}^3]} [\text{g cm}^{-3}]$$

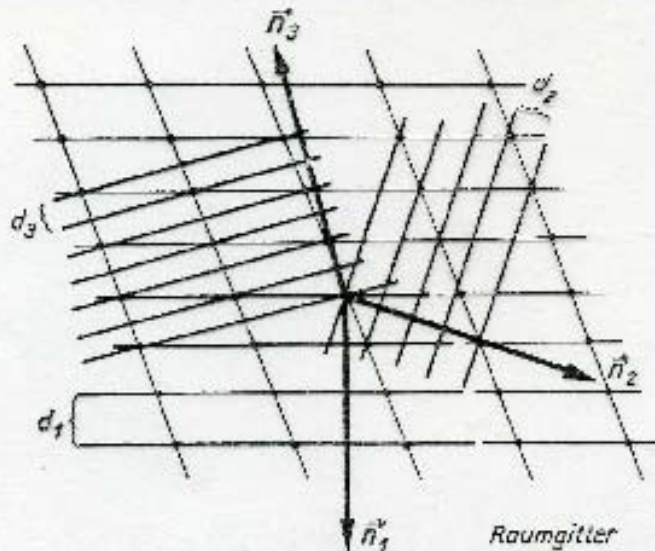
genauere Methode zur Dichtebestimmung **reiner** Verbindungen

- Netzebenen, Netzebenenscharen

Ebenen durch **Gitterpunkte** des Kristallgitters
heißen Netzebenen. Werden die Netzebenen entsprechend
den Gittertranslationen (parallel) verschoben, ergeben
sich **Scharen** gleichwertiger (**gleichberechtigte, parallele**)
Netzebenen. Sie heißen Netzebenenscharen.



Eine Netzebenenreihe wird durch die Richtung ihres Normalen $\vec{n}$ und den Abstand benachbarter Ebenen der Reihe, Netzebenenabstand d , charakterisiert.



$$\vec{n}_1, d_1 \rightarrow (0\bar{1}0)$$

$$\vec{n}_2, d_2 \rightarrow (3\bar{1}0)$$

$$\vec{n}_3, d_3 \rightarrow (\bar{1}20)$$

→ Miller-Indizes (Flächen, Richtungen, Zonen)

Weitere (einfachere) Charakterisierungsmöglichkeit einer Netzebenenreihe durch Zahl der Streifen, in die die Gittertranslationen $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ durch die jeweilige Netzebenenreihe unterteilt werden $\rightarrow$

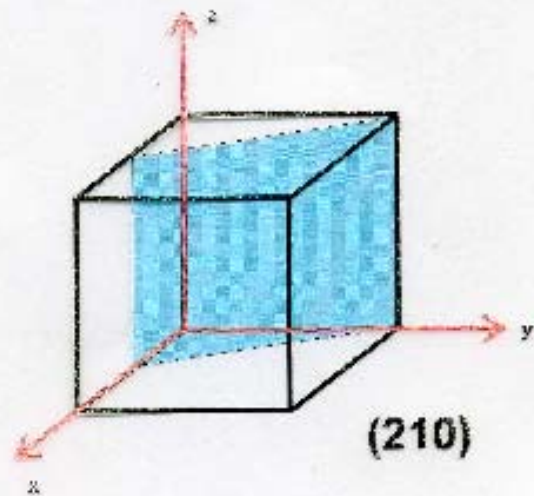
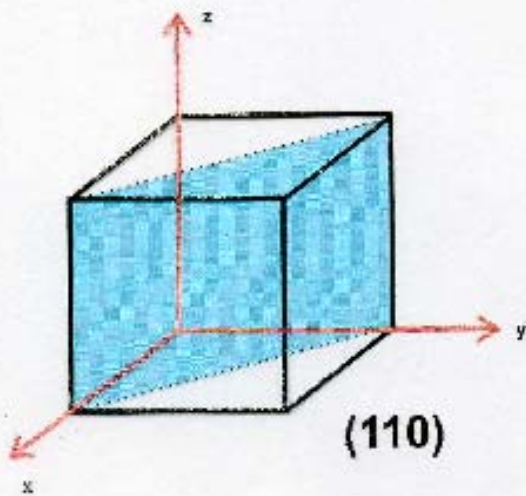
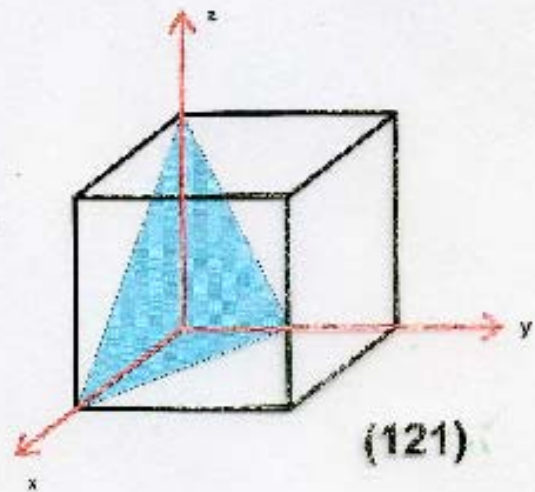
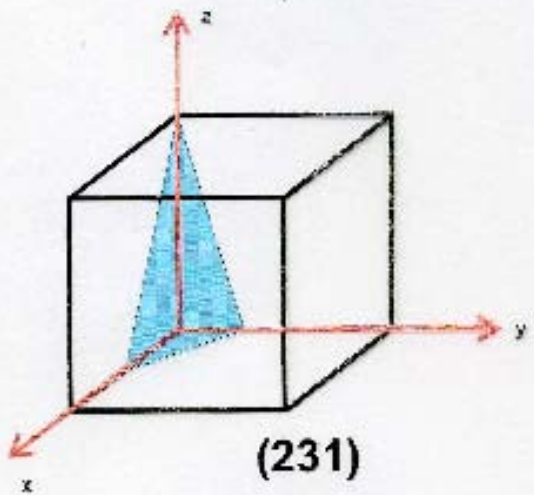
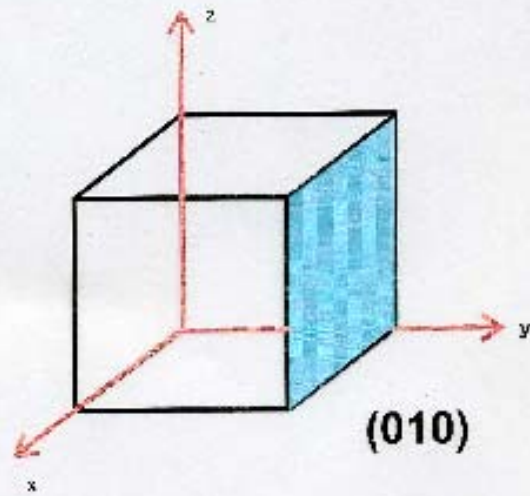
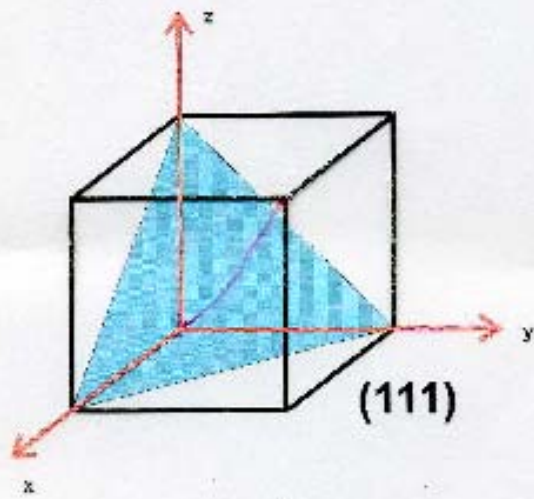
Miller-Indizes, $(h.k.l)$

Ursprüngliche Definition der Miller-Indizes (1839):

Kleinste gemeinsame Vielfache der Reziprokwerte der durch die jeweilige Gitterkonstante dividierten Achsenabschnitte (Weiss'sche Indizes).

Für Kennzeichnung der Orientierung einer Kristallfläche im dreidimensionalen Kristallsystem.

Millersche Indizes



Kristallflächen, Netzebenen $\rightarrow (hkl)$

z.B. $(100) = yz$ - bzw. bc -Fläche

$(010) = xz$ - bzw. ac -Fläche

$(001) = xy$ - bzw. ab -Fläche

Scharen symmetrieäquivalenter Flächen $\rightarrow \{hkl\}$

z.B. $\{100\}_{\text{Kub}} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$

Richtungen im Kristall $\rightarrow [uvw]$

werden nach den Komponenten des kleinsten Translationsvektors $\vec{r} = u \cdot \vec{a} + v \cdot \vec{b} + w \cdot \vec{c}$ in die betreffende Richtung bezeichnet.

z.B. $[100] = x$ - bzw. a -Achse

$[010] = y$ - bzw. b -Achse

$[001] = z$ - bzw. c -Achse

Zonen sind alle Flächen oder Netzebenen-scharen parallel einer gemeinsamen Richtung.

Gemeinsame Richtung ist die Zonenachse $[uvw]$

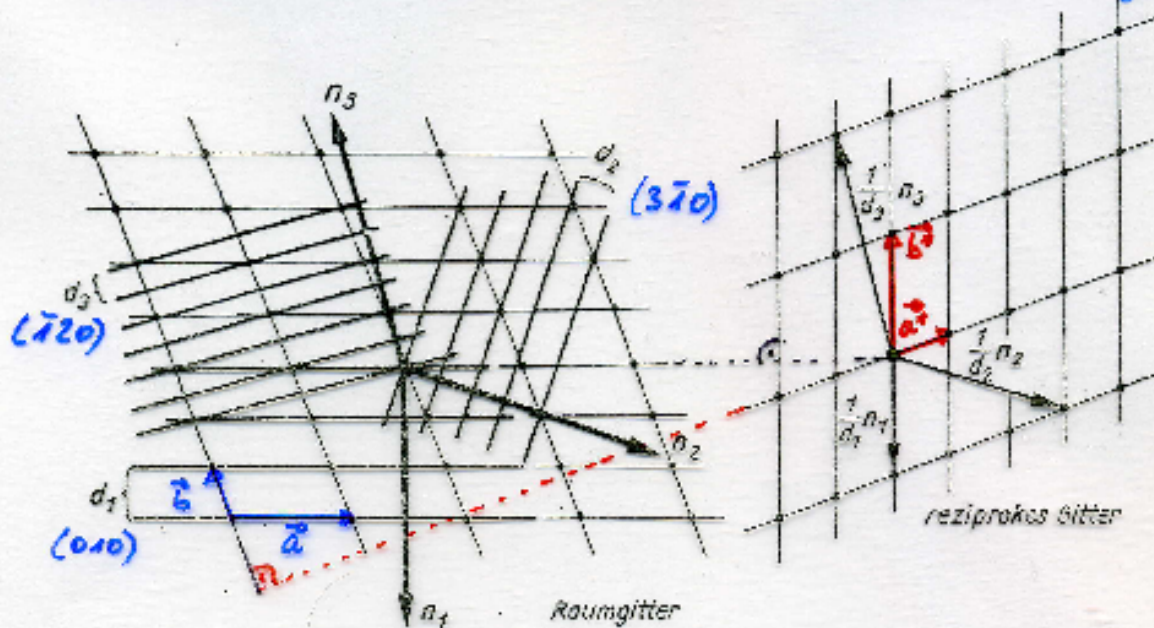
Zwischen Flächen- und Zonen-Indizes gilt die

Beziehung: $u \cdot h + v \cdot k + w \cdot l = 0$

Die Werte von h, k, l bzw. u, v, w sind ganzzahlig positiv, null, oder negativ $(\dots, \bar{3}, \bar{2}, \bar{1}, 0, 1, 2, 3, \dots)$

Reziprokes Gitter (Konstruktion von Netzebenenachsen)

Netzebenennormale $\vec{n}$ und Netzebenenabstand d charakterisieren eine Netzebenenschar eindeutig



Endpunkte der Vektoren $(1/d_n) \cdot \vec{n}_n$ bzw. $(1/d_{hkl}) \cdot \vec{n}_{hkl}$ bilden ein Punktgitter, das sog. reziproke Gitter des Kristalls, mit den Basisvektoren

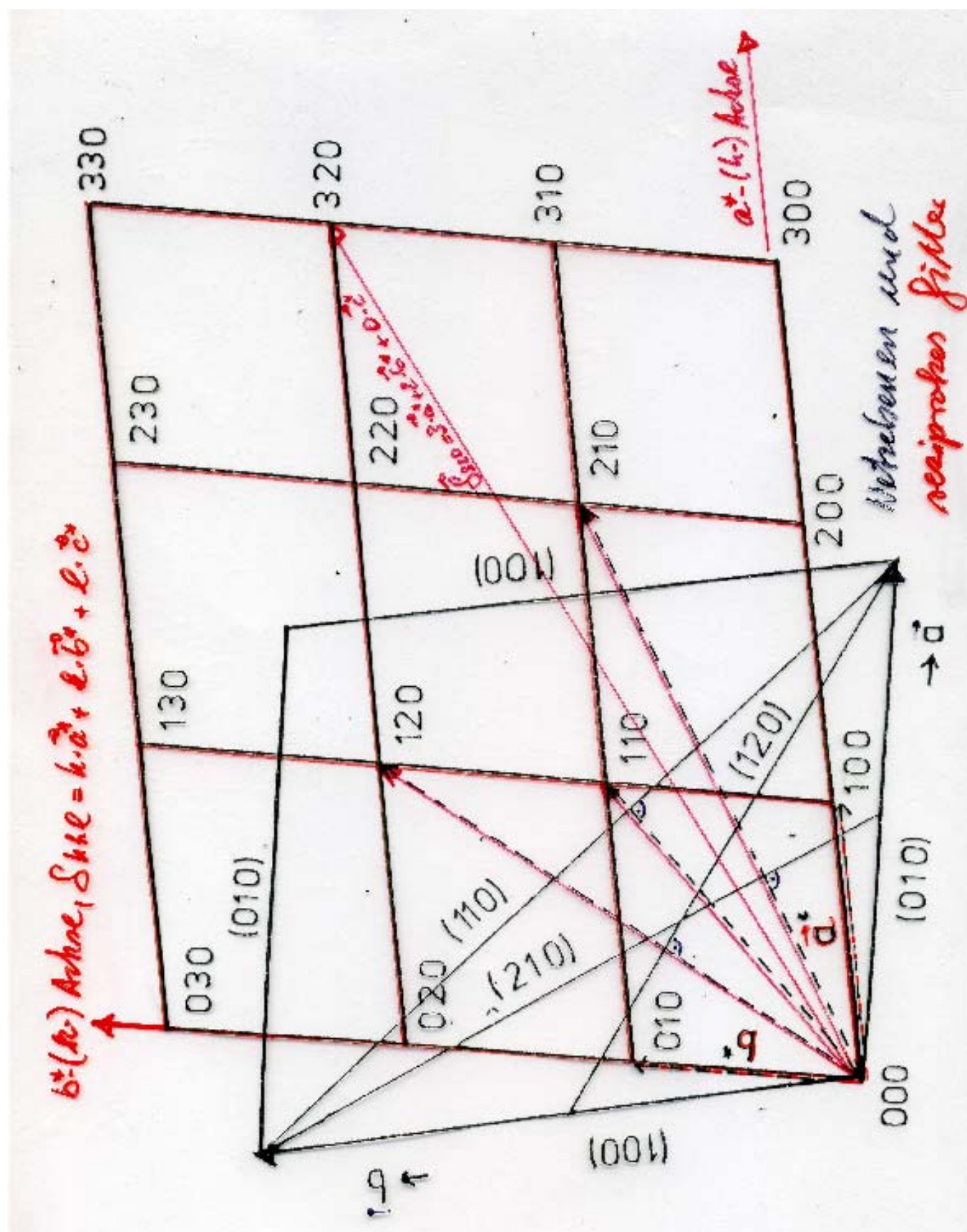
$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} ; \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} ; \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

und den Gittervektoren $\vec{S}_{hkl} = h \cdot \vec{a}^* + k \cdot \vec{b}^* + l \cdot \vec{c}^*$

Es gilt: $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = V = 1/V^*$; $\vec{a} \cdot \vec{a}^* = \vec{b} \cdot \vec{b}^* = \vec{c} \cdot \vec{c}^* = 1$
 $\vec{a} \cdot \vec{b}^* = \vec{a} \cdot \vec{c}^* = \vec{b} \cdot \vec{c}^* = \vec{a}^* \cdot \vec{b} = \vec{a}^* \cdot \vec{c} = \vec{b}^* \cdot \vec{c} = 0$

In orthogonalen Kristallsystemen ($\neq 90^\circ$) gilt:

$$a = 1/a^*, \quad b = 1/b^*, \quad c = 1/c^*$$



Zusammenhang zwischen d_{hkl} und Gitterkonstanten $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

System	d_{hkl}
Cubic	$\left[\frac{1}{a^2} (h^2 + k^2 + l^2) \right]^{-1/2}$
Tetragonal	$\left[\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right]^{-1/2}$
Orthorhombic	$\left[\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right]^{-1/2}$
Hexagonal	$\begin{cases} \left[\frac{4}{3a^2} (h^2 + hk + k^2) + \frac{l^2}{c^2} \right]^{-1/2} & \text{hexagonal indexing} \\ \left[\frac{1}{a^2} \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + lh)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{1 - 2 \cos^3 \alpha + 3 \cos^2 \alpha} \right]^{-1/2} & \text{rhombohedral indexing} \end{cases}$
Monoclinic	$\left[\frac{\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl \cos \beta}{ac}}{\sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} \right]^{-1/2}$
Triclinic	$\left[\frac{\frac{h^2}{a^2} \sin^2 \alpha + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma + \frac{2hk}{ab} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) + \frac{2kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + \frac{2lh}{ca} (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)}{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma} \right]^{-1/2}$

Reziproke Netzebenenabstände für verschiedene Kristallsysteme

System	$1/d_{hkl}^2$
Cubic	$(h^2 + k^2 + l^2)/a^2$
Tetragonal	$\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
Orthorhombic	$\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$
Hexagonal and trigonal (P)	$\frac{4}{3a^2}(h^2 + k^2 + hk) + \frac{l^2}{c^2}$
Trigonal (R)	$\frac{1}{a^2} \left((h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + hl + kl) \cos^2 \alpha \cos \alpha \right) \frac{1}{1 + 2 \cos^3 \alpha - 3 \cos^2 \alpha}$
Monoclinic	$\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}$
Triclinic	$(1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{-1} \left(\frac{h^2}{a^2} \sin^2 \alpha + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma + \frac{2kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + \frac{2lh}{ca} (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) + \frac{2hk}{ab} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) \right)$