

Auswahlregeln, erzeugende Operationen und zugehörige Punktmannigfaltigkeiten der Kristallstrukturen

Von der Eidgenössischen Technischen Hochschule
in Zürich zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Naturwissenschaften genehmigte

Promotionsarbeit

vorgelegt von

Ernst Brandenberger

aus Flaach (Kanton Zürich)

Nr. 621

Referent: Herr Professor Dr. P. Niggli
Korreferent: Herr Professor Dr. P. Scherrer

Akademische Verlagsgesellschaft m. b. H.
Leipzig 1930

Sonderabdruck aus „Zeitschrift für Kristallographie“,
Band 76, Seite 1 – 86. 1930.

Zusammenfassung.

§ 1. Diskussion der Auslöschungen einer allgemeinen Basisgruppe, welche auf die Unterscheidung von elementaren Auslöschungen, Kompositionsauslöschungen und Kompensationsauslöschungen führt. Die beiden ersten Gruppen von Auslöschungen sind einer allgemeinen, geometrischen Untersuchung zugänglich.

§ 2. Charakterisierung der Auslöschungsgesetze. Die Beziehungen, welche unter den Basiskoordinaten notwendig sind, damit ein Auslöschungsgesetz zustande kommt. Bestimmt rationale Koordinaten, unbestimmt rationale und irrationale Koordinaten. Zähligkeit des Auslöschungsgesetzes, sein Geltungsbereich im Indizesfeld: nach (hkl) integrale Auslöschungen, zonale und seriale Auslöschungen. Strukturtheoretische Deutung der Auslöschungen: die Frage nach den möglichen, erzeugenden Operationen.

§ 3. Die erzeugenden Operationen der elementaren Auslöschungen. Weg der systematischen Untersuchung der Symmetrieeoperationen. Darstellung der Einzelfälle nach der Anzahl zur Operation variabler Koordinaten. Die geometrischen Örter der elementaren Auslöschungen und ihre Schnitte.

§ 4. Die erzeugenden Operationen der Kompositionsauslöschungen. Geometrie der Kompositionen. Rationale Umgebung eines Punktes. Kennzeichnung der Kompositionen, die Erzeugende von Auslöschungen sind.

§ 5. Diskussion nach (hkl) integraler Auslöschungsgesetze. Mögliche Operationen. Aussagen über die Basiskoordinaten. Mögliche Lokalisierung der Streuzentren aus Zähligkeit des Auslöschungsgesetzes und Anzahl der Streuzentren im Elementarparallelepiped.

§ 6. Diskussion zonaler Auslöschungsgesetze. Leitende Zonen und ihre Beziehungen zu den Symmetrieelementen. Auslöschungen in einer Zone als Auslöschungen eines ebenen Diskontinuums betrachtet. Aussagen über die Basiskoordinaten. Frage nach der erzeugenden Operation bei bekannter Klasse oder bei bekannter Lauesymmetrie.

§ 7. Diskussion serialer Auslöschungsgesetze. Leitende Ebenenserien und ihre Beziehungen zu den Symmetrieelementen. Leitende Ebenenserien in leitenden Zonen. Auslöschungen in einer Ebenenserie als Auslöschungen eines linearen Diskontinuums betrachtet. Aussagen über die Basiskoordinaten. Frage nach der erzeugenden Operation bei bekannter Klasse oder bei bekannter Lauesymmetrie.

§ 8. Die Bestimmung der Translationsgruppe. Wahl der Identitätsperioden. Äquivalenzen für die einzelnen, mehrfach primitiven Translationsgruppen.

§ 9. Bestimmung des Raumsystems. Zonale Raumgruppenkriterien: Mögliche Form derselben und zugehörige, erzeugende Operationen. Diskussion der Äquivalenzen bei bekannter Kristallklasse oder bei bekannter Lauesymmetrie. Seriale Raumgruppenkriterien: Mögliche Form derselben und zugehörige, erzeugende Operationen. Diskussion der Äquivalenzen bei bekannter Klasse oder bei bekannter Lauesymmetrie. Zähligkeitsbeziehungen und Kompositionsmöglichkeiten. Ausschluß von Raumsystemen, wenn bestimmte Zähligkeiten nicht überschritten werden. Bestimmung der Basiskoordinaten.

§ 10. Pseudosymmetrien. Innere Pseudosymmetrie. Äußere Pseudosymmetrie. In den relativen Lagebeziehungen und damit auch in den Auslöschungen übereinstimmende Strukturen. Zusätzlich in der Metrik und Topologie ähnliche Strukturen.

§ 1. Das Selektionsverhalten einer allgemeinen Basisgruppe.

Die Kriterien zur Bestimmung von Translationsgruppe und Raumsystem einer Kristallstruktur haben den Charakter notwendiger, aber nicht hinreichender Bedingungen. Das von ihnen geforderte Verhalten einer Basisgruppe im Interferenzversuch kann, aber muß nicht den Nachweis für eine bestimmte Translationsgruppe oder ein bestimmtes Raumsystem leisten. Diese Eigenschaft der sogenannten »kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln« verlangt, jedem Auslöschungsgesetz die Gesamtheit der mit ihm verträglichen Basisgruppen und nicht nur einen Ausschnitt derselben zuzuordnen. Denn aus der Existenz eines bestimmten Auslöschungsgesetzes im Interferenzbild folgt als gesichert nur das, was allen diesen Basisgruppen gemeinsam ist. Schlußfolgerungen, die ohne Benutzung anderer Interferenzdaten weitergehen, verlassen den Boden strikter, strukturanalytischer Diskussion.

Die Diskussion der Auslöschungsgesetze im Hinblick auf ihre Mehrdeutigkeit ist daher für ihre strukturanalytische Verwertung von fundamentaler Bedeutung. Erst durch sie erhält die Methodik der Bestimmung von Translationsgruppe und Raumsystem jene systematische Grundlage, die den Abschluß ihres strukturtheoretischen Ausbaus darstellt. Die Frage nach der Mehrdeutigkeit der Auslöschungsgesetze vermag zudem prinzipielle Mängel der Strukturbestimmung mittels der Röntgeninterferenzen aufzudecken und so die Grenzen aufzuzeigen, die ihr in ihrer heutigen Form gesteckt sind. Die Untersuchung der Auslöschungsgesetze auf die Eindeutigkeit ihrer Aussagen hin wurde auf Anregung von P. Niggli aufgegriffen; in einer ersten Reihe von Arbeiten¹⁾ erfolgte die

¹⁾ E. Brandenberger und P. Niggli, Die systematische Darstellung der kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln. *Z. Krist.* **68**, 304. 1928. — E. Brandenberger, Systematische Darstellung der kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln trikliner, monokliner und rhombischer Raumsysteme. *Z. Krist.* **68**, 330. 1928. — E. Brandenberger, Systematische Darstellung der kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln tetragonaler Raumsysteme. *Z. Krist.* **71**, 452. 1929. — E. Brandenberger, Die strukturtheoretische Interpretation der Auswahlregeln. *Schweiz. Min. u. Petr. Mitt.* **8**, 438. 1928.

Behandlung der Frage für den Fall von Basisgruppen, die aus einem einzigen homogenen Gitterkomplex bestehen. Die folgenden Ausführungen stellen sich die Aufgabe genereller: Es soll für eine allgemeine Basisgruppe die Mehrdeutigkeit ihres Selektionsverhaltens unter den an ihr erhaltenen Reflexionen, insbesondere des für die Raumgruppenbestimmung wesentlichen Anteils, untersucht werden. Zu den Auslöschungen, welche dem einzelnen Gitterkomplex zukommen, treten offenbar solche, die auf die Art der Ineinanderstellung, der Komposition der Gitterkomplexe, zurückgehen. Im Vordergrund steht die Frage, ob durch diese zusätzliche Auswahl unter den Reflexen einer allgemeinen Basis die Mehrdeutigkeit der Raumsystemsbestimmung erhöht wird.

Die Untersuchung des Selektionsverhaltens einer allgemeinen Basisgruppe wird die Stellung dieser Aufgabe innerhalb des Gesamtproblems fixieren und die Zusammenhänge beleuchten, die zwischen den Auslöschungen einer Basis, ihren geometrischen Eigenschaften und ihrem realen, materiellen Inhalt bestehen können. Die Frage nach dem Selektionsverhalten einer Basisgruppe ist die Frage nach den verschiedenen, möglichen Nullstellen ihres Strukturvektors.

Die gegebene Basis bestehe aus Streuzentren von insgesamt l verschiedenen Sorten (im Sinne von dem Streuvermögen nach verschiedenen Teilchen¹⁾).

$$1, 2, \dots, g, \dots, l$$

mit den Streufaktoren (Atomfaktoren)

$$F_1, F_2, \dots, F_g, \dots, F_l.$$

Dabei sollen die Streuzentren der Sorte g eine Anzahl t_g Gitterkomplexe bilden, welche durch die Symbole

$$G_1, G_2, \dots, G_r, \dots, G_{t_g}$$

bezeichnet werden. Der Komplex G_r besitze die Zähligkeit z_{G_r} und den Komplexgrundpunkt $[[m_{G_r}^1, n_{G_r}^1, p_{G_r}^1]]$; die ihm zugehörige Punktmenge

erhalte das Symbol

$$\sum_{s=1}^{s=z_{G_r}} [[m_{G_r}^s, n_{G_r}^s, p_{G_r}^s]].$$

Der Strukturvektor S_{G_r} des Gitterkomplexes G_r lautet unter der Annahme reeller Streufaktoren

$$S_{G_r} = F_g \cdot \sum_{s=1}^{s=z_{G_r}} e^{2\pi i(m_{G_r}^s h + n_{G_r}^s k + p_{G_r}^s l)}. \quad (1)$$

1) Im folgenden oft kurzweg als Teilchen bezeichnet.

Der Strukturvektor, der für die Gesamtheit der Streuzentren der Sorte g resultiert, \mathfrak{S}_g , ergibt sich durch Addition der t_g Strukturvektoren (1):

$$\mathfrak{S}_g = \sum_{r=1}^{r=t_g} \mathfrak{S}_{G_r}. \quad (2)$$

Der resultierende Strukturvektor der Basisgruppe, \mathfrak{S}_R , schließlich ist die Summe über die insgesamt l Summen (2), also:

$$\mathfrak{S}_R = \sum_{g=1}^{g=l} \mathfrak{S}_g = \sum_{g=1}^{g=l} \sum_{r=1}^{r=t_g} \mathfrak{S}_{G_r}. \quad (3)$$

Es wird dabei über sämtliche Teilchen aller Gitterkomplexe aller Partikelsorten summiert. Die Formulierung (3) des Strukturvektors einer allgemeinen Basisgruppe läßt folgende, ihrem Wesen nach verschiedene Nullstellen (Auslöschungen) zu:

a) Die Strukturvektoren der sämtlichen Gitterkomplexe, also die Summen \mathfrak{S}_{G_r} , haben gemeinsame Nullstellen, die dann naturgemäß auch solche von \mathfrak{S}_R sind (Elementare Auslöschungen).

b) Die Strukturvektoren, die für die einzelnen Sorten von Streuzentren resultieren, die Größen \mathfrak{S}_g , besitzen gemeinsame Nullstellen, jedoch solche, die den \mathfrak{S}_{G_r} einzeln nicht zukommen. Ihnen entsprechen wiederum solche von \mathfrak{S}_R ; sie gehen auf die Art der Ineinanderstellung der Komplexe gleichartiger Streuzentren zurück (Kompositionsauslöschungen).

c) Es sind Nullstellen möglich, welche nur \mathfrak{S}_R , nicht aber den einzelnen Teilsummen \mathfrak{S}_g zugehören. Diese Auslöschungen beruhen auf einer Gruppierung von Gitterkomplexen verschiedener Streuzentren derart, daß eine kompensatorische Wirkung unter diesen, ihrem Streuvermögen nach verschiedenen Beugungszentren möglich wird (Kompensationsauslöschungen). Die Kompensationsauslöschungen lassen sich wegen der Gebundenheit an bestimmte Verhältnisse unter den Streufaktoren der verschiedenen Streuzentren leicht als solche erkennen, wenn eine isomorphe Reihe untersucht wird. Ersatz von dem Streuvermögen nach verschiedenen Teilchen vernichtet die Kompensationsauslöschungen¹⁾.

Diese Betrachtung ergibt zweierlei: Einmal, daß das gleiche Auslöschungsgesetz in allen drei Fällen auftreten kann, so daß im allgemeinen der Charakter der Auslöschungen keine Aussage über die Ursache des Fehlens von Reflexen erlaubt. Leicht erkennt man weiterhin, inwieweit die Lösung der Aufgabe, die Auslöschungen einer Basisgruppe allgemein darzustellen, von der Strukturtheorie geleistet werden kann. Für eine strukturtheoretische Erfassung muß der Fall c) ausscheiden, da er sich

¹⁾ Auf ein weiteres Kriterium zur Erkennung der Kompensationen macht H. Ott, Handb. d. Experimentalphysik 7, 2. Teil, S. 237 aufmerksam.

von der realen Erfüllung der Basis mit Materie nicht trennen läßt. Dies ist unter gewissen Annahmen (reelle Streufaktoren F_g) für die Fälle a) und b) hingegen möglich. Sind die F_g keine reellen Größen, sondern von der Form $f_g e^{i\varphi_g}$, so ist auch im Falle von a) und b) das Selektionsverhalten nicht mehr von der individuellen Art der Streuzentren unabhängig. Die Auswirkung imaginärer Streufaktoren hängt mit deren Symmetrie und den Aussagen, die sich über die Größen $e^{i\varphi_g}$ aus der geometrischen Zusammengehörigkeit ergeben, wesentlich zusammen. Im folgenden wird die Annahme reeller Streufaktoren beibehalten; ihr Nichtzutreffen kann das hier abgeleitete Selektionsverhalten wesentlich umgestalten, wie dies beispielsweise im Falle des Diamanten experimentell belegt ist¹⁾.

Für die Untersuchung der elementaren und kompositionsmäßig bedingten Auslöschungen genügt es, an Stelle einer allgemeinen Basisgruppe eine einzige Sorte von Streuzentren, die sich im Kristallraum genügend allgemein verhält, zu betrachten. Das der gesamten Basisgruppe eigene Selektionsverhalten kommt dann (abgesehen von den Kompensationen, die hier nicht weiter verfolgt werden) dadurch zustande, daß die verschiedenen Streuzentrensorten in ihren resultierenden Strukturvektoren S_g gemeinsame Nullstellen besitzen. Dabei ist es sehr wohl möglich, daß es verschiedene geometrische Zusammenhänge sind, welche im Falle der einzelnen Sorte streuender Teilchen diese Nullstellen bedingen. Die Untersuchung einer bestimmten, allgemeinen Basisgruppe von diesem Standpunkte aus wird durch das größte gemeinsame Vielfache der Anzahlen verschiedener Streuzentren wesentlich bestimmt, indem nur jene Auslöschungsgesetze, die sich bis zu der gleichzähligen Ordnung der Reflexionen auswirken, für die gesamten Basisgruppen in Betracht kommen. Eine Verbindung A_2B_3 , die im Elementarraum einmal vorkommt, kann beispielsweise überhaupt keine elementaren oder kompositionsmäßig bedingten Auslöschungen aufweisen, da das größte gemeinsame Vielfache hier gleich 4 ist. Diese obere Grenze, bis zu welcher die Diskussion zu führen ist, wird erst durch den materiellen Inhalt der Basis fixiert und fällt daher außerhalb den Rahmen der allgemein möglichen, strukturtheoretischen Erwägungen.

Jene Auslöschungen innerhalb einer bestimmten Sorte von Streuzentren, die der allgemeinen Basis als Ganzes nicht zukommen, sind jedoch für den Strukturanalytiker gleich bedeutsam wie die vorerwähnten, wenn er

1) W. Ehrenberg, P. P. Ewald und H. Mark, Z. Krist. **66**, 547. 1928. Dort auch die weitere Literatur. Vergleiche auch die Zusammenfassungen im Artikel Ewald im Handb. d. Physik, **24** und im soeben zitierten Beitrag Ott im Handb. d. Experimentalphysik.

an die Diskussion der Intensitätsfragen überhaupt herantritt. Dabei wird er überblicken müssen, zu welchen Reflexen unter den beobachteten einzelne der Streuzentren nichts beitragen. Für diese Reflexe läßt sich die gesuchte Basis so behandeln, als ob sie die betreffenden Streuzentren nicht enthalten würde. Innerhalb dieser Mannigfaltigkeit von Reflexen wird man versuchen, diese Separation der Basis soweit zu treiben, bis man auf eine Reihe von Reflexionen geführt wird, die von einer möglichst kleinen Zahl von Streuzentren allein erzeugt wird. Dieser Gesichtspunkt befürwortet ebensosehr wie die Mehrdeutigkeitsdiskussion der Raumgruppenkriterien eine explizite Darstellung der kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln der 230 Raumsysteme.

§ 2. Charakterisierung der Auslöschungsgesetze.

Die Mannigfaltigkeit möglicher Auslöschungsgesetze liegt in der Struktur des Diskontinuums begründet. Es sind geometrische Zusammenhänge in den mit dem Diskontinuum verträglichen Kristallräumen, auf die die Existenz von Auslöschungen zurückgeht. Ein Auslöschungsgesetz bedeutet geometrisch, daß in dem Bau der Basisgruppe (bezogen auf die Identitätsperioden) Unterperioden existieren. Diese Unterperioden sind der Ausdruck einer nach Zahl und gegenseitiger Lage der Teilchen speziellen Anordnung der Partikeln innerhalb des Raumes der Nichtidentität. Diese Lagebeziehungen lassen die Gesamtteilchenmenge in charakteristischer spezieller Weise in Gruppen von Teilchen zerlegen. Es soll dabei nicht die Gesamtheit der Teilchenschwerpunkte betrachtet werden, sondern wir betrachten jede einzelne Koordinate als Glied einer selbständigen Reihe von Größen. Statt der Teilchenschwerpunkte selber werden zunächst die Projektionspunkte dieser auf die drei Koordinatenachsen untersucht, ohne daß die Zusammengehörigkeit zu Tripeln interessiert.

Eine Koordinatenreihe einer Basisgruppe kann sich dabei aus einer ersten Koordinate m_0 darstellen lassen, indem unter den s Basiskoordinaten m_g ($s - 1$) Beziehungen der Art

$$m_g = m_0 + z_g \quad (z_g \text{ ein Zusatzglied}) \quad (3a)$$

bestehen. Eine solche Koordinatenreihe läßt sich bei Kenntnis der Beziehungen (3a) ohne Kenntnis der beiden andern Koordinatenreihen angeben. Dies ist im Hinblick auf den Bau der Basisgruppe dann der Fall, wenn unter den erzeugenden Operationen ihrer Punktanordnung keine solchen existieren, welche eine Vertauschung der Koordinaten bedingen. Eine so gebaute Koordinatenreihe ist eine einfache, und die in ihr möglichen Zerlegungen sollen einfache genannt werden. Sind alle drei

Koordinatenreihen einfach, so bedeutet dies offenbar, daß Zerlegungen der Teilchenmenge in folgender Weise auftreten können (es werden jetzt die Teilchenschwerpunkte selber und nicht mehr die Projektionspunkte betrachtet):

Zu einem Teilchen t_o^0 gehören die Teilchen $t_1^0, t_2^0, \dots, t_\alpha^0$ (Teilchengruppe 1).
 t_o^1 $t_1^1, t_2^1, \dots, t_\alpha^1$ (Teilchengruppe 2).
 \dots
 t_o^w $t_1^w, t_2^w, \dots, t_\alpha^w$ (Teilchengruppe w).

Dabei sind die w Teilchengruppen gleich gebaut, was bedeutet: sie umfassen gleiche Zahlen von Punkten, und zudem sind auf die Punkte $t_o^0, t_o^1, \dots, t_o^w$ als Nullpunkte bezogen die Koordinaten entsprechender Punkte einander gleich. Die einzelnen Teilchengruppen lassen sich demnach durch ein und dieselbe Vektorenfigur beschreiben, die sich ergibt, wenn in irgend einer der Teilchengruppen der Punkt mit dem Index o mit allen übrigen Punkten der betreffenden Gruppe verbunden wird. Diese Vektorenfiguren treten zueinander in Parallelstellung oder invers zum Gesamtteilchenhaufen der Basis zusammen. Die Teilmengen der Punkte sollen dabei so gewählt werden, daß sie zueinander primitiv sind, d. h. nicht in sich eine weitere, allen Teilmengen gemeinsame Zerlegung in kleinere Teilmengen zulassen. Hingegen soll die Möglichkeit bestehen, daß die Teilchen $t_o^0, t_o^1, \dots, t_o^w$ unter sich eine weitere Zerlegung wie die beschriebenen erlauben und so fort, bis die schließlich resultierende Gruppe der zuletzt mit o indizierten Teilchen eine primitive Teilchengruppe darstellt.

Die Teilchenmenge des Diamantgitterkomplexes läßt sich in dieser Weise folgend darstellen: Ausgehend vom Punkte $[[0\ 0\ 0]]$ fügen wir zu diesem den Punkt $[[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0]]$, wodurch die erste Teilchengruppe resultiert. Zu jedem dieser Punkte ergibt eine zweite Teilchengruppe einen Punkt durch Addition von $[[\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}]]$. Die vier Punkte bilden die allseitige Flächenzentrierung, welche dadurch zum Diamantgitterkomplex wird, daß zu jedem Punkt ein Punkt durch Addition von $[[\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}]]$ zugeordnet wird. Symbolisch soll eine solche Zerlegung geschrieben werden als:

$$[[0\ 0\ 0]] + [[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0]] \quad [[\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}]] \quad [[\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}]].$$

Die Koordinatenreihe einer Basisgruppe kann jedoch zu andern in bestimmten Beziehungen stehen, so daß bei Festlegung einer oder zwei derselben die restlichen bestimmt sind. Diesem Falle, der nicht mehr voneinander unabhängigen Koordinatenreihen, entsprechen Beziehungen unter den Koordinaten von der Art:

$$m_g = n_g + z_g, \quad (3b)$$

wobei z_g ein Zusatzglied (einschließlich dem Wert Null). Eine Beziehung dieser Art setzt jedoch unter den Operationen, welche die Basisgruppe erzeugen, solche voraus, die eine Vertauschung der Koordinaten in den

s Koordinatentripeln bewirken. Werden zwei Koordinaten miteinander vertauscht, so resultieren zwei unabhängige Koordinatenreihen (der obige Fall wäre dementsprechend derjenige mit drei solchen); werden die Koordinaten zyklisch permutiert, so ist nur eine unabhängige Koordinatenreihe vorhanden. Für die Zerlegung der Teilchenmengen bedeutet dies folgendes: Nach einer Koordinate läßt sich zunächst eine Zerlegung durchführen, die der einfachen durchaus analog ist. Weil dann aber eine zweite Koordinatenreihe besteht, welche aus der ersten dadurch hervorgeht, daß zwei oder drei Koordinaten ihre Plätze vertauscht haben, so muß die gleiche Zerlegung auch nach einer oder nach beiden andern Achsen durchführbar sein. Gehören beispielsweise die Punkte $[[m\ n\ p]]$ und $[[m + \frac{1}{2}\ n\ p]]$ zusammen, und sind die Koordinaten m und n (wegen einer tetragonalen Symmetrieoperation) miteinander vertauschbar; so besteht auch der Zusammenhang $[[n\ m\ p]]\ [[n\ m + \frac{1}{2}\ p]]$. Jedes Paar der Punkte zeigt die gleichen relativen Koordinaten, wenn eine Vertauschung der m - und n -Achse eingeführt wird, nämlich $[[0\ 0\ 0]]$ und $[[\frac{1}{2}\ 0\ 0]]$. Der Vertauschung der Achsen entspricht es, daß die gleich gebauten Vektorenfiguren nicht mehr parallel oder invers zueinander gestellt sind, sondern um $\frac{\pi}{2}$ gegeneinander gedreht erscheinen. Symbolisch soll eine solche Zerlegung dargestellt werden durch:

$$[[[0\ 0\ 0]] + [[\frac{1}{2}\ 0\ 0]]; [0\ 0\ 0] + [0\ \frac{1}{2}\ 0]].$$

Die relativen Koordinaten eines Teilchens innerhalb einer Gruppe sind mit seinen Koordinatendifferenzen im allgemeinen Koordinatensystem gegenüber dem Teilchen mit dem Index o identisch. Die Koordinaten im allgemeinen System sollen für eine bestimmte Teilchengruppe lauten:

$$[[m\ n\ p]], [[m'\ n'\ p']], [[m''\ n''\ p'']], \dots [[m^{\alpha'}\ n^{\alpha'}\ p^{\alpha'}]].$$

Um die relativen Koordinaten zu erhalten, bildet man die drei Reihen von Koordinatendifferenzen

$$\begin{aligned} m' - m, \quad m'' - m, \quad \dots \quad m^{\alpha'} - m, \\ n' - n, \quad n'' - n, \quad \dots \quad n^{\alpha'} - n, \\ p' - p, \quad p'' - p, \quad \dots \quad p^{\alpha'} - p. \end{aligned}$$

Diese Koordinatendifferenzenreihen können folgendermaßen beschaffen sein:

a) $m' - m = 0, m'' - m = 0, \dots m^{\alpha'} - m = 0$, d. h. die Koordinate ist innerhalb der Teilchengruppe konstant.

b) $m' = m + x', m'' = m + x'', \dots m^{\alpha'} = m + x^{\alpha'}$. Dabei sollen die Größen $x', x'', \dots x^{\alpha'}$ rationale Bruchteile der Identitätsperioden darstellen und zwar derart rational, daß sie sich durch einen Ausdruck von der Form

$$\frac{1}{\alpha \lambda} (1 + 2 + \dots + (\alpha - 1)), \quad (4)$$

wo λ eine ganze Zahl, ausschließlich der Null, bezeichnet, darstellen lassen. Geometrisch läßt sich diese Forderung wie folgt veranschaulichen: Die α Punkte der Teilchengruppe besitzen auf der m -Achse Projektionspunkte, die eine Strecke s äquidistant unterteilen (wobei der Endpunkt von s nicht besetzt wird). Das Verhältnis der Identitätsperiode der m -Achse zur Strecke s muß eine ganze Zahl λ sein, so daß der Abstand der Punkte auf s in der Identitätsperiode insgesamt $\frac{1}{\alpha \lambda}$ -mal enthalten ist.

Ein Beispiel zeigt die Fig. 1.

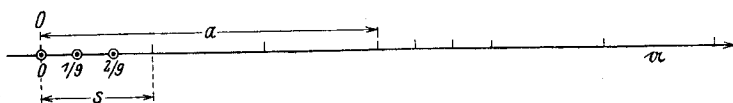


Fig. 1. Bestimmt rationale Koordinatenreihe mit $\alpha = 3$ und $\lambda = 3$.

Eine einfache Zerlegung ist durch ein einziges solches Schema eindeutig determiniert. Für zusammengesetzte Zerlegungen sind deren mehrere notwendig, wobei gegebenenfalls nur in der Richtung der Achse sich unterscheidende auftreten. Koordinaten dieser Art sollen bestimmt rational genannt werden, (4) die Bedingung bestimmter Rationalität.

c) $m' = m + y'$, $m'' = m + y''$, \dots $m^{\alpha'} = m + y^{\alpha'}$. Dabei sollen die Größen y' , y'' , \dots $y^{\alpha'}$ zwar rationale Bruchteile der Identitätsperiode der m -Achse sein, jedoch nicht der Bedingung bestimmter Rationalität gehorchen. Im Gegensatz zu b) sollen diese Koordinaten als unbestimmt rationale bezeichnet werden.

d) $m' = m + x'$, $m'' = m + x''$, \dots $m^{\alpha'} = m + x^{\alpha'}$. Die Größen x' , x'' , \dots $x^{\alpha'}$ sollen auf die Identitätsperiode der m -Achse bezogen irrationale Werte besitzen und demnach irrationale Koordinaten genannt werden.

Die Zerlegbarkeit einer Teilchenmenge, also der Streuzentren einer bestimmten Sorte, hat für die Darstellung des resultierenden Strukturvektors folgende Bedeutung: Er läßt sich der Zerlegung entsprechend in ein Produkt umformen, wobei der einzelne Faktor durch die Punktanordnung innerhalb der Teilchengruppe gegeben wird. Dieser Zusammenhang geht darauf zurück, daß der Addition von Koordinaten zu einem bestimmten Tripel (also der Erzeugung der Basis aus ihren Teilgruppen) eine Multiplikation der entsprechenden Glieder des Strukturvektors korrespondiert. Der oben angegebenen Zerlegung des Diamantgitterkomplexes würde z. B. das folgende dreigliedrige Produkt entsprechen

$$(1 + e^{\pi i(h+k)}) \cdot (1 + e^{\pi i(k+l)}) (1 + e^{\frac{\pi i}{2}(h+k+l)}).$$

Zunächst soll eine Koordinate allein betrachtet werden (wie oben sei es die Koordinate m). Um den Charakter der beiden andern Koordinaten nicht berücksichtigen zu müssen, wählen wir k und l zunächst gleich Null, betrachten also nur die Ebenenserie $(h\ 0\ 0)$. Der Strukturvektor läßt dann einen Faktor von der Form abspalten:

$$[1 + e^{2\pi i h(m' - m)} + e^{2\pi i h(m'' - m)} + \dots + e^{2\pi i h(m^{(\alpha)} - m)}]. \quad (5)$$

Vom Standpunkt der Auslöschungen aus interessiert nur die Frage nach den Nullstellen dieses Ausdruckes. Diese sind, wie nachfolgend gezeigt wird, durch den Charakter der Koordinatendifferenzensreihe der m -Koordinaten festgelegt. Die α Strukturvektoren, welche (5) zusammenfaßt, sind (in der Gaußschen Ebene dargestellt) durch die Koordinatendifferenzen in ihrer relativen Lage zueinander gegeben. Diese Lagebeziehungen bestimmen die möglichen Nullstellen; andererseits ist die Zahl der prinzipiell verschiedenen Fälle durch die oben gegebene Charakterisierung des verschiedenen Verhaltens der Koordinate m fixiert.

a) m ist konstant. Keine Nullstellen für (5), da alle Strukturvektoren parallel der positiven, reellen Achse liegen.

b) m ist bestimmt rational. Die Strukturvektoren bilden ein Bündel von Vektoren, die einander nach gleichen Winkeln, nämlich $\frac{2\pi}{\alpha\lambda}$, folgen, so daß (wie oben die Strecke s) der Winkel $\frac{2\pi}{\lambda}$ durch dieses Vektorenbündel in gleiche Teile unterteilt wird. Da λ eine ganze Zahl (gemäß (4)) ist, wird für $h = \lambda$ das Vektorenbündel der α Vektoren in ein α -seitiges Polygon übergeführt werden. Ein solches Polygon von Vektoren in der Gaußschen Ebene ergibt jedoch die Resultante Null. Algebraisch entspricht dem das Verschwinden von (5) als eine Potenzsumme von α -ten Einheitswurzeln. Wird jedoch $h = \alpha\lambda$ gesetzt, so entartet das Polygon und die Resultante erhält den Wert α . Man erkennt: Der Faktor (5) besitzt in diesem Falle Nullstellen und zwar für $h \equiv 0 \pmod{\lambda}$ bei $h \not\equiv 0 \pmod{\alpha\lambda}$, das heißt für

$$h \equiv \lambda \pmod{\alpha\lambda}. \quad (6)$$

Die Zahl α soll die Zähligkeit des Auslöschungsgesetzes, das diesen Nullstellen sich zuordnen läßt, genannt werden. Es ist diese Größe mit der Zahl der Teilchen pro Teilchengruppe, welcher der Faktor (5) entspricht, identisch.

c) m ist unbestimmt rational. Der Faktor (5) besitzt dann keine Nullstellen, weil der von den Vektoren unterteilte Winkel sich durch Vervielfachen mit einer ganzen Zahl h nicht zu einem Polygon erweitern läßt.

d) m ist irrational. In diesem Falle gilt dasselbe.

Den Begriffen rational und irrational darf in diesem Zusammenhang nicht der streng mathematische Sinn zugemessen werden, sondern es sind diese Ausdrücke in einer dem Experiment angepaßten Modifizierung zu brauchen. Irrational bedeutet dabei: irrational im mathematischen Sinne und höher rational (höher als beobachtbare Ordnungen von Reflexen), rational dagegen stets einfach rational, eine Ausdrucksweise, wie sie der in der Kristallographie üblichen ohnehin entspricht.

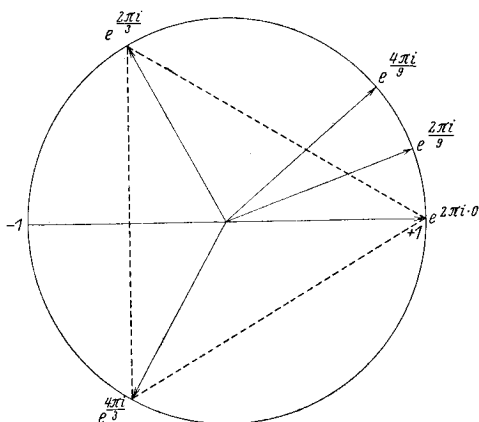


Fig. 2. Die Vektorenfigur des Strukturvektors der bestimmt rationalen Punktanordnung der Fig. 1. Die Resultante wird gleich Null für $h \equiv 3 \pmod{9}$, indem die Vektoren dann ein gleichseitiges Dreieck bilden.

Da k und l gleich Null gesetzt worden waren, ist damit nur das seriale Verhalten der Reflexionen $(h 0 0)$ dargestellt. Durch Betrachtung der Koordinatenreihen der n - und p -Koordinate würde sich eine analoge Aussage über die Reflexe $(0 k 0)$ und $(0 0 l)$ ergeben. Es fragt sich, welche Bedeutung die beiden Koordinaten n und p für das in der Ebenenserie $(h 0 0)$ abgeleitete Auslöschungsgesetz haben werden. Ist eine der beiden Koordinaten konstant, zum Beispiel n , so gilt das seriale Auslöschungsgesetz von $(h 0 0)$ unabhängig zum Index k in gleicher Weise für die Reflexe $(h k 0)$, das heißt, es wird zum zonalen Gesetz in der Zone $[0 0 1]$ erweitert. Für n und p konstant gilt das seriale Gesetz in gleicher Form für alle Ebenen $(h k l)$, das heißt: es hat für das gesamte Indizesfeld Gültigkeit und wird demzufolge als ein nach $(h k l)$ integrales Auslöschungsgesetz bezeichnet. Ist neben konstantem p die Koordinate n

bestimmt rational, so gilt für eine lineare Verbindung von h und k , was oben für h abgeleitet wurde: es besteht ein nach $(h k l)$ integrales Gesetz, dessen Auslöschungen von zwei Indizes abhängen. Ist hingegen p unbestimmt rational, statt konstant, das heißt z. B. $p = \frac{1}{q}$, so tritt anstelle des integralen Gesetzes ein nurmehr zonal gültiges. Da es in allen Zonen $(h k 0)$, $(h k q)$, $(h k 2q)$, . . . gilt, wird es als mehrfach zonal bezeichnet. Ist p irrational, so bleibt das Gesetz in gleicher Form erhalten, gilt aber nurmehr einfach zonal, nämlich für die Reflexe der Form: $(h k 0)$. Sind die beiden Koordinaten n und p bestimmt rational, so besteht für eine lineare Verbindung der drei Indizes eine Beziehung zu den Nullstellen von (5), welche im totalen Indizesfeld gilt und durch Spezialwerte der Indizes sich spezialisiert zu den zonalen Gesetzen in $(h k 0)$, $(h 0 l)$ und $(0 k l)$ mit Indizesbedingungen für zwei Indizes und zu den serialen Gesetzen in $(h 0 0)$, $(0 k 0)$ und $(0 0 l)$ mit Bedingungen für je einen Index. Sind dagegen n und p unbestimmt rational, etwa $n = \frac{1}{\sigma}$ und $p = \frac{1}{\sigma}$, so gilt das für $(h 0 0)$ abgeleitete Gesetz nicht mehr nur in dieser Ebenenserie, sondern erfährt bei gleicher Form eine Ausdehnung auf die Ebenenserien $(h q 0)$, $(h 2q 0)$, . . . und $(h 0 \sigma)$, $(h 0 2\sigma)$, . . . sowie auf die Ebenenserien, die sich durch paarweise Addition dieser Symbolreihen ergeben, wie etwa $(h q \sigma)$, $(h 2q 2\sigma)$, . . . (mehrfach serial). Sind schließlich n und p beide irrational, so ist das abgeleitete Gesetz auf die Ebenenserie $(h 0 0)$ beschränkt, es gilt nur einfach serial.

Allgemein läßt sich dieser Befund folgendermaßen aussprechen: Damit der einer Zerlegung entsprechende Faktor im Strukturvektor verschwindet, ist es notwendig, daß die Teilchengruppe zum mindesten nach einer Koordinate bestimmt rational gebaut ist. Die relative Teilchenanordnung bestimmt mit ihren bestimmt rational gebauten Elementen (Zahl der Teilchen und relative Lage derselben) die Nullstellen des ihr korrespondierenden Faktors (5), ihres Auswahl-faktors. Die nicht bestimmt rationalen Elemente der Teilchengruppe bedingen den Geltungsbereich der Auslöschungen im Indizesfeld, sowie zusammen mit den bestimmt rationalen Elementen, in welcher Weise ein Auslöschungsgesetz in den verschiedenen Bereichen des Indizesfeldes Reflexionen verbietet.

Der Fall mit vertauschten Koordinaten erlaubt nicht, aus dem resultierenden Strukturvektor der Basis einen Auswahlfaktor (5) abzuspalten. Dem verschiedenen Charakter der Teilmengen entsprechen vielmehr ver-

schiedene Faktoren (5), von denen der einzelne nur einen Teil der Glieder des resultierenden Strukturvektors umfaßt. Nach der analog durchgeführten Umformung von \mathfrak{S}_g erhält dieser die Form einer Summe von Produkten; die Diskussion des einzelnen Produktes erfolgt vollständig analog dem Falle einer einfachen Zerlegung. Als Nullstellen des resultierenden Strukturvektors kommen naturgemäß nur solche der einzelnen Produkte in Frage, welche diesen allen gemeinsam sind und dadurch ein Verschwinden der Summe durch ein Verschwinden jedes einzelnen Gliedes bedingen. Eine solche Zerlegung besitzt demzufolge auch im Falle, daß sie bestimmt rational gebaute Teilmengen umfaßt, nicht notwendigerweise Auslöschungen. Erst die zusätzliche Bedingung über gemeinsame Nullstellen entscheidet über die Möglichkeit von Nullintensitäten. Für einen Strukturvektor der Form

$$\{f_1 e^{g_1} (A + e^{\pi i h}) + f_2 e^{g_2} (A + e^{\pi i k}) + f_3 e^{g_3} (A + e^{\pi i l})\}^1,$$

den wir abgekürzt schreiben als

$$\{[A + e^{\pi i h}]; [A + e^{\pi i k}]; [A + e^{\pi i l}]\},$$

besteht eine Nullstelle, wenn h und k und l ungerade sind. Demgegenüber besitzt der Strukturvektor

$$\{[A + e^{\pi i(h+k)}]; [A + e^{\pi i(k+l)}]; [A + e^{\pi i(l+h)}]\}$$

keine Nullstellen, da er der zusätzlichen Bedingung neben der Forderung bestimmter Rationalität nicht genügt.

Dieser Weg gestattet, für einen allgemein gebauten Punkthaufen die Gesamtheit seiner Auslöschungen abzuleiten und diese eindeutig zu kennzeichnen. Die Umkehrung dieser Ableitung ist die Schlußweise des Strukturanalytikers. Er beobachtet im Indizesfeld des Interferenzbildes eine Reihe fehlender Reflexionen; diese Folgen von Auslöschungen charakterisiert er zunächst in zweierlei Weisen: einmal stellt er fest, welchen Bedingungen die Indizestripel $(h k l)$ zu genügen haben, damit der betreffende Reflex verschwindet. Diese Bedingungen spricht man zweckmäßig in Form von Kongruenzen aus, deren Erfüllung bzw. Nichterfüllung auf eine Vernichtung der Intensität eines Tripels $(h k l)$ führt. Sodann untersucht er, in welchen $(h k l)$ -Mannigfaltigkeiten (Zonen, Ebenenserien) des Indizesfeldes diese Auslöschungen auftreten. Früher eingeführten Bezeichnungen entsprechend sind dabei zu unterscheiden: nach $(h k l)$ integrale Auslöschungen, zonale (einfach zonale und mehrfach zonale) Auslöschungen und seriale (einfach seriale und

1) Wobei $f_1 e^{g_1}$, $f_2 e^{g_2}$, $f_3 e^{g_3}$ Anteile des Strukturvektors ohne von m , n , p unabhängige Faktoren.

mehrfach seriale) Auslöschungen. Die Formulierung der Kongruenzen, die den Inhalt des Auslöschungsgesetzes darstellen, soll dabei stets so erfolgen, daß es sich um primitive Kongruenzen handelt (die Auswahlfaktoren werden soweit zerlegt, daß sie als Potenzsummen primitiver Einheitswurzeln verschwinden). Diese Festsetzung entspricht der oben gemachten, daß die Teilchengruppen stets primitiv gebaut sein sollen. Für den Strukturanalytiker stellt sich die Aufgabe, aus den beobachteten Auslöschungen rückwärts die Punktanordnung innerhalb der Teilchengruppe zu bestimmen. Die gefundenen Kongruenzen sind die in der vorstehenden Ableitung als (6) ausgesprochenen. Aus dem Experiment sind somit die Größen α und $\alpha\lambda$ feststellbar, so daß aus α die Zahl der Teilchen der Gruppe und aus λ die relative Anordnung sich ergibt. Der Geltungsbereich des Auslöschungsgesetzes legt das Verhalten der übrigen Koordinaten fest; die Beobachtung eines mehrfach zonalen Gesetzes gibt aus der »Zonenperiode« direkt die unbestimmt rationale Koordinate. Analoges gilt für die mehrfach serialen Auslöschungen.

Die systematische Lösung dieser Aufgabe ist durch eine Reihe von Arbeiten von H. Ott und H. Seyfarth gefördert worden, die insbesondere in weniger durchsichtigen Fällen vorteilhaft Anwendung finden¹⁾.

Die Bestimmung der Anordnung der Streuzentren innerhalb der rationalen Punktgruppe bedeutet jedoch noch keinerlei strukturtheoretische Interpretation der beobachteten Auswahlregel. Diese ist vielmehr erst dann gegeben, wenn die Operationen bekannt sind, welche innerhalb des Elementarparallelepipedes die streuenden Teilchen zueinander in die spezielle, durch das Auslöschungsgesetz erwiesene relative Anordnung bringen. Diese Operationen werden als die erzeugenden Operationen des Auslöschungsgesetzes bezeichnet. Wesentlich ist, inwieweit aus dem Charakter der Auslöschungen ein eindeutiger Schluß auf die Natur der erzeugenden Operation sich ergeben kann. Im Falle, daß ein und dieselbe Auswahlregel, daß heißt anschaulich: in bezug auf die rationalen Koordinaten die gleiche Teilchenanordnung, durch verschiedene Operationen erzeugt werden kann, sollen diese untereinander äquivalente, erzeugende Operationen heißen. Die Mehrdeutigkeit eines Auslöschungsgesetzes hinsichtlich seiner strukturtheoretischen Interpretation geht darauf zurück, daß die Zahl seiner möglichen, erzeugenden Operationen größer als 1 ist. Seine Deutung wird umso unsicherer, je größer die Zahl der möglichen, äquivalenten Operationen.

1) H. Ott, Z. Krist. **66**, 436. 1928. — H. Seyfarth, Z. Krist. **67**, 434, 295, 422, 395. 1928. Ebenso das bereits zitierte Handb. d. Exp. physik., Beitrag H. Ott, **7**, 2.

Nach diesen allgemeinen Feststellungen läßt sich der Sinn der hier angestrebten Behandlung des Gegenstandes schärfer umreißen: Die Bestimmung der Translationsgruppe und des Raumsystems ist mit der Ermittlung der charakteristischen Operationen, d. h. der Operationen der charakteristischen Untergruppen, einer Kristallstruktur gleich bedeutend. Dann und nur dann darf die Ermittlung dieser beiden Bestimmungsstücke einer Basisgruppe als gelungen betrachtet werden, wenn sich alle, den charakteristischen Operationen äquivalenten Operationen streng ausschließen lassen. Die Bestimmung von Translationsgruppe und Raumsystem erfordert daher die Kenntnis der Gesamtheit möglicher, zu den Bestimmungskriterien äquivalenten Operationen, um durch deren Diskussion den Eindeutigkeitsbeweis zu leisten oder andernfalls die vorhandenen Mannigfaltigkeiten von Basisgruppen angeben zu können. Die Gesamtheit dieser Auslöschungsgesetze wurde in früheren Arbeiten als die Gesamtheit der kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln bezeichnet.

Basisgruppen mit gleichen Auslöschungen sind einander in einem bestimmten Anteil ihrer Basiskoordinaten gleich. Dabei wird durch ein nach (hkl) integrales Auslöschungsgesetz eine Reihe von Koordinatentripeln relativ in allen drei Koordinaten bestimmt, während ein zonales Auslöschungsgesetz in einer Reihe von Koordinatentripeln nur je zwei Koordinaten, ein seriales Auslöschungsgesetz nur je eine Koordinate relativ festlegt. Basisgruppen, welche aus Operationen aufgebaut werden, die durchwegs Erzeugende gleicher Auslöschungen sind, haben somit gleiche Schwerpunktskoordinaten und zwar stimmen alle Koordinaten überein im Falle integraler Auslöschungen, während deren zwei oder eine einander gleich sind, wenn zonale oder seriale Auslöschungen vorliegen. Die durch gemeinsame Auslöschungen für zwei Basisgruppen als gleich erwiesenen Koordinatentripel (oder Teile solcher) sollen in Anlehnung an den Begriff topologisch gleicher Basisgruppen von F. Laves die topologisch gleichen Anteile zweier Basisgruppen genannt werden. Strukturanalytisch ist folgender Punkt bedeutsam: Keine der normalen Interferenzmethoden gestattet die Größen, hinsichtlich welcher sich die topologisch gleichen Anteile zweier Basisgruppen voneinander unterscheiden, zu ermitteln. Als ganzes topologisch gleiche Basisgruppen, die gleiche Basiskoordinaten, aber verschiedene Symmetriebedingungen und verschiedene Zusammengehörigkeit der einzelnen Punkte besitzen, sind für den Interferenzversuch in seiner heutigen Form ununterscheidbar. Daraus aber folgt, daß eine Basisgruppe sich strukturtheoretisch eindeutig dann und nur dann bestimmen läßt, wenn

keine zu ihr topologisch gleichen existieren. Erst die Entwicklung eines experimentellen Verfahrens zur Bestimmung der Symmetriebedingung (einer Art molekularen Ätzversuches) wird erlauben, zwischen topologisch gleichen Basisgruppen zu unterscheiden.

Die Lösung der Aufgabe, die Operationen des Diskontinuums zu suchen, welche den Charakter erzeugender Operationen besitzen, ist damit identisch, die Operationen zu suchen, welche bestimmte rationale Punktanordnungen ergeben. Es gilt: Die notwendige und hinreichende Bedingung dafür, daß eine Operation Erzeugende eines Auslöschungsgesetzes ist, fordert, daß zum mindesten eine Koordinate gegenüber der betreffenden Operation das Verhalten einer bestimmten rationalen Koordinate zeigt. Wie oben bereits betont wurde, bestimmt der Charakter der übrigen Koordinaten die Art, in welcher Weise das Auslöschungsgesetz von der Wahl des Indizes-tripels (hkl) abhängt.

Dadurch, daß die Eigenschaften der Punktanordnungen auf die sie erzeugenden Operationen zurückgeführt werden, lassen sich diese als Ortsfunktionen des Kristallraumes darstellen. Zunächst wird man fragen, ob die Anordnung, welche eine bestimmte Operation erzeugt, ganz oder teilweise von der Punktlage unabhängig ist (gemäß früherer Bezeichnung: nach $[[mnp]]$ integral gilt) und in welcher Weise der von der Wahl der Punktlage (also der drei Koordinaten m, n, p) abhängige Teil eine Abhängigkeit vom Kristallraum zeigt. Insbesondere wird man die Örter des Kristallraumes suchen, die Träger gleich gebauter Punktanordnungen und damit Träger gleicher Auslöschungsgesetze sind. Dadurch gelingt es, den gesamten Kristallraum in Teilbereiche aufzulösen, die die maßgeblichen Elemente für sein Selektionsverhalten darstellen.

§ 3. Die erzeugenden Operationen der elementaren Auslöschungen.

Definitionsgemäß kommen als erzeugende Operationen elementarer Auslöschungsgesetze nur die Symmetrieoperationen (Punktsymmetrien und Zusatzsymmetrien) in Frage. Die hierbei herrschenden Beziehungen sind bei der Darstellung des Selektionsverhaltens homogener Gitterkomplexe beschrieben worden¹⁾. Aus diesem Grunde soll hier die Erörterung auf das, was sie von den übrigen erzeugenden Operationen besonders abhebt, beschränkt werden.

Wie gezeigt wurde, kann jede Symmetrieoperation (abgesehen von der Identität und der Gruppe einfach primitiver Translationen) Erzeugende

¹⁾ Vgl. hierzu besonders: E. Brandenberger und P. Niggli, l. c.

eines Auslöschungsgesetzes sein. Die einzelnen Symmetrieoperationen unterscheiden sich jedoch voneinander in der Art, wie die erzeugten Auslöschungen sich im Kristallraum als Funktion des Ortes verhalten. Man wird besonders im Hinblick auf die strukturanalytische Bewertung darnach fragen, welche Aussagen eines Auslöschungsgesetzes im Einzelfalle von der speziellen Wahl der Punktlage unabhängig, und wie bei der einzelnen Symmetrieoperation die Örter gleichen Selektionsverhaltens beschaffen sind.

Die Symmetrieoperation der Zähligkeit r fügt zu einem beliebig gewählten Punkte $[[mnp]]$ ($r-1$) weitere Punkte. Gefragt wird nach der Abhängigkeit der durch die Symmetrieoperation erzeugten Punktanzahl der r Punkte von der Wahl der Koordination m, n, p . Für diese läßt sich durch eine spezielle Wahl der Ausgangskordinaten m, n, p folgendes erreichen:

a) Es kann unter den r Koordinatentripeln eine Entartung auftreten, d. h. ein Teil oder alle der durch die Symmetrieoperation erzeugten Punkte fallen aufeinander. Eine Entartung von Koordinatentripeln bedeutet immer eine Besetzung von Punktsymmetrieelementen unter entsprechender Erhöhung der Wertigkeit und entsprechender Reduktion der Zähligkeit der Punktlage. Mit der Erniedrigung der Zähligkeit fällt naturgemäß die Möglichkeit r -zähliger Punktanzahlungen außer Betracht. Es bleiben nurmehr Komplexe, die eine aus r' Punkten bestehende Anordnung liefern, wobei r' einen Teiler von r bezeichnet. Um die möglichen Entartungen systematisch abzuleiten, muß unterschieden werden, ob Koordinaten vorliegen, welche zur Operation invariant (damit also stets entartet) sind, oder solche Koordinaten, welche erst durch die Wahl spezieller Werte entarten. Durch digonale Drehung gehören beispielsweise zusammen $[[mnp]]$ und $[[\bar{m}\bar{n}p]]$, so daß p stets entartet erscheint, während dies für m und n erst durch die spezielle Festsetzung $m=0$ oder $\frac{1}{2}$ und $n=0$ oder $\frac{1}{2}$ eintritt.

b) In diesem Zusammenhang weiterhin ausgezeichnet sind diejenigen speziellen Werte der Koordinaten m, n, p , für welche die Symmetrieoperation eine bestimmte rationale Punktanzahl erzeugt. Nach § 2 bedeutet dies, daß zum mindesten eine Koordinate zu der Zähligkeit der Symmetrieoperation in einem Verhältnis steht, daß eine Darstellung als

$$\frac{1}{r\lambda} \{1 + 2 + \dots + (r-1)\} \quad (4a)$$

möglich ist. Dem Ausdruck (4a) sollen beispielsweise die Koordinatenwerte $m'_0, m''_0 \dots$ genügen. Jeder dieser Werte definiert eine Ebene parallel (100), so daß alle Punkte dieser Ebenen unter sich gleiche, be-

stimmt rationale Anordnungen hinsichtlich der Koordinate m besitzen. Die Punkte einer solchen Ebene sind somit durch dieselben Auslöschungen in der Ebenenserie $(h\ 0\ 0)$ ausgezeichnet. Mit andern Worten: Diese Ebenen parallel (100) stellen die geometrischen Örter der in $(h\ 0\ 0)$ möglichen, elementaren Auslöschungsgesetze dar. Die Gesamtheit der bestimmt rationalen Punktanordnungen und damit die entsprechenden Auslöschungen, welche eine bestimmte Symmetrieoperation zu erzeugen vermag, erhält man durch Betrachtung der zur Operation variablen Koordinaten in erschöpfender Form. Dabei ist für eine jede variable Koordinate, wie dies oben geschehen ist, eine den Darlegungen von § 2 angepaßte Diskussion durchzuführen. Dabei bestimmt die Zähligkeit des Symmetrieelementes die Zähligkeit des Auslöschungsgesetzes, das heißt die Zahl der Ecken des regulären Polygons in der Gaußschen Ebene. Fallen wegen Entartung von Koordinatentripeln Punkte zusammen, so tritt eine entsprechende Erniedrigung der Zähligkeit ein. Aus (4a) ergibt sich, daß unter den Auslöschungen, welche eine bestimmte Operation erzeugt, Beziehungen bestehen müssen, da für alle Werte von m_0 die Zähligkeit der Symmetrieoperation gleich r im Falle der primitiven Symmetrieoperationen ist, während bei den nicht primitiven Operationen (C_4 , C_6) die Zähligkeit zwar mehrere, jedoch eindeutig bestimmte Werte besitzt. Das heißt, daß es für Komplexe, die von ein und derselben Symmetrieoperation mit gleicher Zahl von Punkten erzeugt werden, dieselben Einheitswurzeln sind, für welche der Strukturvektor verschwindet. Alle Auslöschungsgesetze, welche beispielsweise durch Spiegelung an (100) zustande kommen, führen auf Kongruenzen von der Form

$$h \equiv b \pmod{2b}.$$

Wegen der beschränkten Zähligkeiten der Symmetrieoperationen des Diskontinuums ist nur eine beschränkte Anzahl solcher allgemeiner Kongruenzen möglich, die für elementare Auslöschungsgesetze in Betracht kommen. Wird eine Symmetrieoperation durch andere Symmetrieoperationen im Kristall unter Vertauschung der Koordinatenachsen vervielfacht (wie etwa die Spiegelung nach den Hauptebenen durch trigonale Drehung im Falle des kubischen Raumes), so wird dadurch eine Selektion von einer Koordinate auf deren zwei oder drei ausgedehnt und zwar in der Weise, wie es einer zusammengesetzten Zerlegbarkeit entspricht. In diesem Falle sind mehrere Kongruenzen gleichzeitig zu erfüllen und zwar Kongruenzen vom gleichen Typus, jedoch mit vertauschten Indizes. Im Falle der Spiegelung in der Klasse T_h müssen für die Intensität Null die Punkte der Ebene $(100)_{m_0}$ den drei Kongruenzen entsprechen:

$$h \equiv b \pmod{2b}, \quad k \equiv b \pmod{2b} \text{ und } l \equiv b \pmod{2b}, \text{ wobei } b = 4m_0.$$

Das Verhalten der anderen Koordinaten zu einer Operation bestimmt in Übereinstimmung mit den in § 2 allgemein dargelegten Zusammenhängen den Geltungsbereich des Auslöschungsgesetzes im Indizesfeld. Nachdem beispielsweise die m -Koordinate als bestimmt rationale fixiert wurde, ist das Verhalten von n und p für die Form des Auslöschungsgesetzes außerhalb der Ebenenserie $(h\ 0\ 0)$ maßgebend. Dabei sind die Fälle mit einer Anzahl von Koordinaten, welche sich zur Operation variabel verhalten, größer als 4 besonders mannigfaltig. Die gegebenenfalls nach Wahl einer Koordinate als bestimmt rationale übrig bleibenden Koordinaten können entweder irrational oder bestimmt rational sein. Die Verhältnisse im Falle der einzelnen Symmetrieoperation sind nachfolgend zusammengestellt.

Symmetrieoperationen mit einer zur Operation variablen Koordinate.

Hierher gehört mit den beiden übrigen Koordinaten als sich zur Operation invariant verhaltenden die Spiegelung, während bei der Gleitspiegelung nur eine Koordinate zur Operation invariant ist, die andere Koordinate dagegen ein von der Wahl der Punktlage unabhängiges, zur Zähligkeit der Operation sich bestimmt rational verhaltendes Zusatzglied erhält, oder aber beide Koordinaten solche Zusatzglieder (einer diagonalen Gleitkomponente entsprechend) erhalten. Daraus ergeben sich an Auslöschungsgesetzen die folgenden Möglichkeiten:

Spiegelung: Nach $(h\ k\ l)$ integrale Auswahlregel, wenn die variable Koordinate bestimmt rational, Geltungsbereich: Ebene parallel zur Spiegelebene.

Gleitspiegelung: Zonales Gesetz für beliebige Werte der variablen Koordinate, also integral nach $[[m\ n\ p]]$. Integrales Auslöschungsgesetz, wenn die variable Koordinate sich bestimmt rational verhält.

Symmetrieoperationen mit zwei zur Operation variablen Koordinaten.

Diesem Typus der Symmetrieoperation gehören allgemein die Drehungs- und Schraubungsoperationen an. Sie besitzen alle eine zur Operation invariante Koordinate im Falle der Drehungen, während bei den Schraubungen eine Koordinate, den Schraubungskomponenten entsprechend, Zusatzglieder aufweist, welche sich zur Zähligkeit der Schrauben bestimmt rational verhalten und von der speziellen Wahl der Punktlage unabhängig sind. Im Einzelfall ergeben sich an Auslöschungsgesetzen:

a) Diagonale Drehung: Ist eine der beiden variablen Koordinaten bestimmt rational, die andere dagegen irrational (unbestimmt rational), so resultiert ein zonales (mehrfach zonales) Auslöschungsgesetz in der Zone, deren Achse der irrationalen (unbestimmt rationalen) Koordinate parallel läuft. Geht die Digyre der Richtung $[001]$ parallel, so ergeben sich bei bestimmt rationaler m -Koordinate zonale Gesetze in $[010]$, bei bestimmt rationaler n -Koordinate solche in $[100]$. Sind beide variablen Koordinaten bestimmt rational, so folgt ein nach $(h\ k\ l)$ integrales Gesetz. Während für die zonalen Auslöschungsgesetze der Geltungsbereich nach $[[m\ n\ p]]$ eine Ebene parallel der Digyre und der irrationalen Koordinate (also im obigen Beispiel Ebenen (100) bzw. (010)) darstellt, so ist dieser im Falle der nach $(h\ k\ l)$ integralen Auslöschungsgesetze eine Gerade parallel der Digyre, deren Durchstoßpunkt in der Ebene der m - und n -Achse durch die speziellen, bestimmten rationalen Werte dieser Koordinaten gegeben ist.

b) **Digonale Schraubung:** Sind die beiden variablen Koordinaten irrational so ergibt sich ein einfach seriales Auslöschungsgesetz für die Ebenenserie senkrecht zur Schar der Schraubenachsen. Ist eine der beiden variablen Koordinaten dagegen unbestimmt rational, so resultiert ein mehrfach seriales Gesetz: Ist die Schraubenachse wieder parallel der p -Achse, so gilt für unbestimmt rationales m ($m = 1/q$) und irrationales n das seriale Auslöschungsgesetz in den Ebenenserien $(0\ 0\ l)$, $(q\ 0\ l)$, $(2q\ 0\ l)$, . . . , während bei irrationalem m und unbestimmt rationalem n das Gesetz in den Ebenenserien $(0\ 0\ l)$, $(0\ q\ l)$, $(0\ 2q\ l)$, . . . Gültigkeit hat. Sind schließlich die beiden variablen Koordinaten m und n unbestimmt rational, so ergibt sich ein Auslöschungsgesetz gleicher Form für die Ebenenserien ($m = 1/q$ und $n = 1/r$): $(0\ 0\ l)$ $(q\ 0\ l)$, $(2q\ 0\ l)$, . . . $(0\ r\ l)$, $(0\ 2r\ l)$, . . . $(qr\ l)$, $(2qr\ l)$, . . . Ist eine der beiden variablen Koordinaten bestimmt rational (es sei m), so gilt ein zonales Gesetz in der Zone, deren Achse der irrationalen Koordinate (in unserm Beispiel n) parallel läuft. Für unbestimmt rationales n statt irrationalem n gilt das Gesetz mehrfach zonal. Sind schließlich m und n bestimmt rational, so resultiert ein nach $(h\ k\ l)$ integrales Gesetz. Die Geltungsbereiche sind Örter, die sich zur Schraubenachse gleich verhalten, wie es oben für die digonale Drehungsachsen beschrieben wurde.

c) **Tetragonale Drehung:** Wie im Falle der digonalen Achsen verlaufe auch hier die Achsenschar parallel der p -Achse, so daß m und n die zur Operation variablen Koordinaten darstellen. Ein zonales Gesetz wird notwendigerweise wegen der Gleichwertigkeit der Zonen in $[400]$ und $[040]$ auftreten¹⁾; es müssen die vier durch die tetragonale Drehung erzeugten Punkte sich in gleicher Weise nach der a_1 - wie nach der a_2 -Achse zusammenfassen lassen. Der einen Zusammenfassung entspricht dann ein zonales Gesetz in $[400]$, der andern ein entsprechendes in $[040]$. Eine dem digonalen Anteil der Operation entsprechende Zusammenfassung von Punkten kann nicht auf ein zonales Auslöschungsgesetz führen: Von den vier Punkten sind dann zwar gleichzeitig zwei nach der a_1 -Achse und zwei nach der a_2 -Achse zusammenfaßbar, so daß für die ersten zwei ein zonales Gesetz in $[040]$, für die letzteren zwei ein solches in $[400]$ folgen würde. Weil dann aber (wegen der Vertauschung der Koordinaten m und n) der Strukturvektor aus einer Summe von zwei Gliedern besteht: dem Auswahlfaktor $(1 + e^{\pi i h})$ bzw. $\cos 2\pi n h$ und dem Faktor $(1 + e^{\pi i k})$ bzw. $\cos 2\pi m k$, läßt sich kein von n bzw. m unabhängiges Verschwinden des Strukturvektors in den Zonen $[400]$ bzw. $[040]$ erreichen. Zusammenfassungen der ersten Art ergeben sich, wenn zwei durch Drehung um $\frac{\pi}{2}$ verknüpfte Punkte sich zueinander in spezieller

Lage befinden: also etwa $[[m\ n\ p]]$ und $[[n\ \bar{m}\ p]]$. Die Koordinatendifferenzen lauten: $m - n$; $m + n$; 0 . Der Exponent des Strukturvektors erhält demnach die Form $2\pi i((m - n)h + (m + n)k)$. Wird nun eine lineare, bestimmt rationale Beziehung von m und n erfüllt, welche lauten kann: $m + n = r$ oder $m - n = r'$, wo r und r' auf 2 bezogen bestimmt rationale Brüche darstellen, so ergibt sich ein zonales Gesetz. Es sei $m + n = \frac{1}{2}$; dann lautet der Exponent des Strukturvektors $2\pi i((m - n)h + \frac{1}{2}k)$, so daß für $h = 0$, also die Zone $[400]$, der Auswahlfaktor $(1 + e^{\pi i k})$ resultiert. Die beiden aus $[[m\ n\ p]]$ und $[[n\ \bar{m}\ p]]$ durch digonale Drehung hervorgehenden Punkte $[[\bar{m}\ \bar{n}\ p]]$ und $[[\bar{n}\ m\ p]]$ stehen unter sich in der gleichen Lagebeziehung. Wird statt des ersten und zweiten Punktes der erste und dritte, also $[[m\ n\ p]]$ und $[[\bar{n}\ m\ p]]$, zusammengefaßt, so sind die Koordinatendifferenzen: $m + n$; $-m + n$; 0 . Der Exponent des Strukturvektors lautet demnach: $2\pi i((m + n)h + (n - m)k)$. Je nach-

1) Es soll dann nicht von einem mehrfach zonalen Gesetz gesprochen werden.

dem, ob $m+n$ oder $m-n$ der Bedingung bestimmter Rationalität genügt, folgt ein Auslöschungsgesetz in $[100]$ oder $[010]$; weil aber $m+n$ und $m-n$ gegenüber der Zusammenfassung des ersten und zweiten Punktes vertauscht erscheint, ergibt die Zusammenfassung des ersten und dritten Punktes ein Auslöschungsgesetz in der Zone $[100]$, wenn das aus der ersten Zusammenfassung sich ableitende in der Zone $[010]$ Geltung hatte, und umgekehrt. Der Geltungsbereich des zonalen Auslöschungsgesetzes hinsichtlich $[[m\ n\ p]]$ wird durch die unter m und n herrschende, lineare Beziehung gegeben; es werden dadurch Ebenen parallel (110) bzw. $(1\bar{1}0)$ definiert. Ist neben bestimmt rationalem $m+n$ die Differenz $m-n$ unbestimmt rational, so folgt ein gleiches, jedoch mehrfach zonales Auslöschungsgesetz. Sind $m+n$ und $m-n$ beide bestimmt rational, so ergibt sich ein integrales Gesetz. Zwei Bedingungen für $m+n$ und $m-n$ lassen sich naturgemäß immer als zwei entsprechende für m und n aussprechen. Sie bestimmen den Geltungsbereich des Auslöschungsgesetzes als eine Gerade parallel zur Schar der tetragonalen Achsen, deren Durchstoßpunkt mit der m - n -Ebene durch die beiden, bestimmt rationalen Werte von m und n definiert wird.

d) Tetragonale Schraubung, die gleichzeitig digonale Drehung ist. Grundsätzlich gilt die gleiche Überlegung wie bei c), auch hier führt nur die Zusammenfassung von Punkten, welche auseinander durch Drehungen um $(2n+1)\frac{\pi}{2}$ hervorgehen, auf zonale Auslöschungsgesetze. Integrale Auslöschungsgesetze folgen für bestimmt rationales m und ebensolches n . Gegenüber c) neu ist die Existenz eines serialen Auslöschungsgesetzes, welches in der Ebenenserie $(0\ 0\ 1)$ nach $[[m\ n\ p]]$ integral gilt.

e) Tetragonale Schraubung. Wie in den beiden vorhergehenden Fällen ergeben sich zonale und integrale Auswahlregeln, wenn $m+n$ oder $m-n$ oder $m+n$ und $m-n$ der Forderung bestimmter Rationalität genügen. Die Geltungsbereiche sind von gleicher Art wie für die tetragonale Drehung und Schraubung mit $\frac{1}{2}c$ als Schraubungskomponente. Wie bei der letzteren Operation tritt auch hier eine serielle Auswahl in der Ebenenserie $(0\ 0\ 1)$ auf, welche nach $[[m\ n\ p]]$ integral vorhanden ist. Wie d) unterscheidet sich dieser Fall gegenüber c) nur dadurch, daß entsprechend den Zusatzgliedern in der p -Koordinate die zonalen und integralen Auslöschungsgesetze auch den Index l betreffen, während in c) die sämtlichen Auslöschungen sich nur auf die Indizes h und k (Achsenschar immer der p -Achse parallel gestellt!) beziehen.

f) Trigonale Drehung. Auf das schief hexagonale Achsenkreuz bezogen lauten die Koordinatendifferenzen trigonisch verknüpfter Punkte, wenn die Achsenschar der p -Achse parallel gestellt wird,

$$2m-n, m+n, 0 \text{ und } m+n, 2n-m.$$

Die beiden Exponenten im Strukturvektor erhalten demnach die Form:

$$2\pi i[(2m-n)h + (m+n)k] \text{ und } 2\pi i[(m+n)h + (2n-m)k].$$

Man erkennt hieraus, daß weder durch eine einzelne Bedingung an m oder n , noch durch eine einzelne Bedingung an $m+n$ oder an eine andere lineare Verbindung der beiden Koordinaten sich ein zonales Auslöschungsgesetz ableiten läßt. Erst im Falle, daß sowohl m und n hinsichtlich drei bestimmt rational sind, läßt sich ein Auslöschungsgesetz aussprechen, und zwar ein nach $(h\ k\ l)$ integrales, dessen Geltungsbereich hinsichtlich der Punktlage eine Gerade parallel zur Schar der Trigrynen darstellt.

g) Trigonale Schraubung. Gegenüber f) tritt ein seriales Auslöschungsgesetz in der Ebenenserie senkrecht zur Schar der Schraubenachsen auf. Im übrigen ergeben sich ebenfalls nur nach (hkl) integrale Gesetze, wobei gegenüber f) jedoch auch der Index l in die Kongruenz miteinbezogen wird. Geltungsbereich wiederum eine Gerade parallel zur Achsenschar.

h) Hexagonale Drehung. Hier gestaltet sich die Diskussion vollständig analog den trigonalen Achsen. Die Koordinatendifferenzen lauten:

$$2m - n, m + n, 0; m + n, 2n - m, 0; 2m, 2n, 0; n, n - m, 0; m - n, m, 0.$$

Die gleichen Überlegungen wie oben ergeben auch hier, daß nur durch bestimmte rationale Wahl von m und n ein Auslöschungsgesetz erzeugt werden kann und zwar ein nach (hkl) integrales, dessen Geltungsbereich eine Gerade parallel zur Schar der Hexagyre darstellt.

i) Hexagonale Schraubungen. Zunächst wie h); zusätzlich serielle Gesetze für die Ebenenserie senkrecht zur Schar der Schraubenachsen, dessen Charakter durch die Schraubungskomponente bestimmt wird. Die integralen Gesetze beziehen sich dann auch auf den Index l bei analogem Geltungsbereich hinsichtlich $[[mnp]]$ wie bei der hexagonalen Drehung.

Symmetrieoperationen mit drei zur Operation variablen Koordinaten.

Diesem Typus der Symmetrieoperation gehören die Drehspiegelungen an. Mit der maximalen Zahl variabler Koordinaten ist entsprechend auch die Mannigfaltigkeit möglicher Auslöschungsgesetze entsprechend größer geworden.

a) Digonale Drehspiegelung (Inversion.) Eine Koordinate (p) sei bestimmt rational. Es resultiert daraus:

1. Bei irrationalem m und n : eine serielle Auswahlregel in der Ebenenserie $(00l)$.

2. Bei unbestimmt rationalem m (oder n) und irrationalem n (oder m): ein mehrfach seriales Auslöschungsgesetz, gültig in $(00l)$, $(q0l)$, $(2q0l)$. . ., wenn $m = 1/q$ (oder gültig in $(00l)$, $(0ql)$, $(02ql)$. . ., wenn $n = 1/q$).

3. Bei unbestimmt rationalem m und ebensolchem n , und zwar sei $m = 1/q$ und $n = 1/r$: ein mehrfach seriales Auslöschungsgesetz, gültig in den Ebenenserien: $(00l)$, $(q0l)$, $(2q0l)$. . . und $(0rl)$, $(02rl)$. . . und (qrl) , $(q2rl)$. . . usw.

Zwei Koordinaten (p und n) seien bestimmt rational. Es ergibt sich:

1. Bei irrationalem m : ein mehrfach zonales Auslöschungsgesetz in $[100]$.

2. Bei unbestimmt rationalem m : ein einfach zonales Auslöschungsgesetz in $(0kl)$, (qkl) , $(2qkl)$. . ., wenn $m = 1/q$.

Alle drei Koordinaten sind bestimmt rational. Es folgt dann ein nach (hkl) integrales Gesetz.

Die Geltungsbereiche der einzelnen Auslöschungsgesetze sind die folgenden: Bei einer bestimmt rationalen Koordinate: Ebenen parallel den Achsen der beiden andern Koordinaten. Bei zwei bestimmt rationalen Koordinaten: Geraden parallel der nicht bestimmt rationalen Koordinate. Für drei bestimmt rationale Koordinaten schließlich die durch diese drei speziellen m , n , p bestimmten Punkte.

b) Tetragonale Drehspiegelung. Der digonale Anteil scheidet bei der tetragonalen Drehspiegelung aus analogen Gründen wie bei der tetragonalen Drehung und Schraubung aus. Verbindet man zwei tetragonal miteinander zusammenhängende Punkte, also nach Drehung um $(2n+1)\frac{\pi}{2}$ Spiegelung an (001) sich auseinander ergebende, so erhält man die Koordinatendifferenzen: $m - n$; $m + n$; $2p$. Es folgen

hieraus folgende seriale Auswahlregeln: Bei bestimmt rationalem $m + n$ oder $m - n$ ein seriales Auslöschungsgesetz in $(h\ 0\ 0)$; $(k\ 0\ 0)$. Bei bestimmt rationalem p ein seriales Gesetz für $(0\ 0\ l)$. Bestehen zwei Bedingungen für m und n , so daß beide Koordinaten als bestimmt rational festgelegt sind, so resultiert ein zonales Gesetz in der Zone $[004]$. Dieses hat jedoch, entsprechend dem digonalen Anteil bei der tetragonalen Drehspiegelung, einen nach $(h\ k\ l)$ integralen Anteil. Für Punkte der Geraden, welche durch die bestimmt rationalen Werte $m = \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$ und $n = \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$ definiert wird, gilt für $(h\ k\ 0)$ das Gesetz: » $(h\ k\ 0)$ fehlt, für h oder k ungerade«, während nach $(h\ k\ l)$ integral gilt: » $(h\ k\ l)$ fehlt, wenn $h + k$ eine ungerade Zahl darstellt«. Wird schließlich auch p bestimmt rational gewählt, so resultiert ein nach $(h\ k\ l)$ integrales Gesetz, dessen Geltungsbereich der Punkt mit den drei bestimmt rationalen Koordinaten m, n, p ist.

Wesentlich sind die Beziehungen, die zwischen den Örtern der kristallstrukturell wichtigen Auslöschungsgesetze und den Symmetrieelementen bestehen. Die Örtter von Auswahlregeln, die von Symmetrieelementen erzeugt werden, sind Parallelebenen zu den Spiegelebenen und Gleitspiegelebenen sowie Gleitspiegelebenen selbst, Geraden parallel den Drehungsachsen oder Drehungsachsen kleinerer Wertigkeit, Geraden parallel den Schraubenachsen und Schraubenachsen selbst und schließlich Punkte bestimmter Lage zu den Drehspiegelzentren. Unter diesen Örttern sind diejenigen, welche Träger kristallstrukturell wichtiger Auswahlregeln sind, durch eine einfache Lage zu den Symmetrieelementen, als halbierende Zwischenebenen oder entsprechende Mittelgeraden und -punkte ausgezeichnet. Die Gesamtheit der Örtter kristallstrukturell wichtiger Auswahlregeln läßt sich bei der üblichen Nullpunktswahl mit den gleichen Kennziffern beschreiben, die zur Darstellung der Symmetrieelemente der Raumsysteme einer Klasse notwendig sind. Dem entspricht es, daß die Symmetrieelemente und Örtter der kristallstrukturell wichtigen Auslöschungsgesetze zusammen nur einen beschränkten und zwar für die Raumsysteme einer Klasse mit der gleichen Translationsgruppe übereinstimmenden Teilbereich des Kristallraumes einnehmen.

Für die Raumsysteme \mathfrak{B}_n ist dieser Teilbereich z. B. gegeben durch die Punkte der Ebenen $(100)_m$ mit $m = 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$; $(010)_n$ mit $n = 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$ und $(004)_p$ mit $p = 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$. Alle Punkte, die nicht einer dieser Ebenen angehören, sind weder Punkte mit Symmetriebedingungen $\neq C_1$, noch sind sie Träger kristallstrukturell wichtiger Auslöschungen, welche durch Symmetrieelemente erzeugt werden.

Von wesentlicher Bedeutung ist bei der Bestimmung des Raumsystems und der Translationsgruppe (in Bezug auf die Möglichkeit elementarer Auslöschungen) die Betrachtung dieses Teilbereiches des Kristallraumes. Dabei müssen insbesondere diejenigen Bereiche des Kristallraumes untersucht werden, die mehreren der Örtter von Auslöschungsgesetzen dieser Art oder mehreren Symmetrieelementen oder gleichzeitig einem Symmetrie-

element und einem geometrischen Ort eines kristallstrukturell wichtigen Auslöschungsgesetzes angehören. Für die Untersuchung dieser Schnitte ist es zweckmäßig, ein Raumsystem aus jenen charakteristischen Operationen aufzubauen, deren Symmetrieelemente größte Dimensionszahl besitzen (es sind also möglichst viele Spiegelungen bzw. Gleitspiegelungen unter die charakteristischen Operationen aufzunehmen). Dann lassen sich für jede der charakteristischen Operationen, in einer früher dargelegten Weise, die von ihr erzeugte Selektion unter den Reflexen und die dazu gehörigen Örter ableiten. Hernach sind die Schnittlinien und Schnittpunkte sämtlicher Punktsymmetrieelemente und sämtlicher Örter kristallstrukturell wichtiger Auswahlregeln zu untersuchen. Dabei erkennt man, daß die Zahl der kristallstrukturell wichtigen Auslöschungen und die Symmetriebedingung der Punktlage in einem Verhältnis der Reziprozität stehen. Es entspricht dies dem Umstand, daß die Zahl der sich in einem Punkte schneidenden Punktsymmetrieelemente und Örter von kristallstrukturell wichtigen Auslöschungsgesetzen für die Punkte des ausgezeichneten Teilbereiches des Kristallraumes entweder gleich eins, zwei oder drei ist.

Schnittlinien von Punktsymmetrieelementen mit Örtern kristallstrukturell wichtige Auslöschungsgesetze lassen erkennen, ob es Punktlagen kleinerer Zähligkeit als der allgemeinen gibt, die als Träger einer bestimmten, kristallstrukturell wichtigen Selektion in Frage kommen. Die Lokalisierung der Streuzentren darf bei Beobachtung eines solchen Auslöschungsgesetzes nicht mehr beliebig über die Freiheitsgrade verfügen, sondern es sind z. B. in den Raumsystemen \mathfrak{R}_h^1 bis \mathfrak{R}_h^{16} bei Feststellung einer Kongruenz (immer als primitive formuliert) Punktlagen mit zwei Freiheitsgraden zu solchen mit einem Freiheitsgrad und solche mit einem Freiheitsgrad zu Punktlagen ohne Freiheitsgrade geworden. Wird eine Selektion beobachtet, die die Existenz von zwei Auswahlfaktoren im Produkt des Strukturvektors nachweist, so sind Punktlagen mit zwei Freiheitsgraden zu solchen ohne Freiheitsgrade, solche mit drei Freiheitsgraden zu Punktlagen mit einem Freiheitsgrad geworden. Damit ein Raumsystem auf seinen Örtern kristallstrukturell wichtiger Auswahlregeln Punktlagen höherer Symmetrie besitzt, muß (wenn keine Punktsymmetrieelemente als Träger solcher Auswahlregeln in Frage kommen) das Raumsystem mehrere charakteristische Untergruppen enthalten. Andernfalls wären seine Selektionsörter Parallelebenen oder Parallelen zu seinen Spiegelebenen oder Drehungsachsen, die nur Punktlagen C_1 besitzen.

Über die Gesamtheit möglicher elementarer Auslöschungsgesetze orientiert Tabelle I. Sie gibt erschöpfend die möglichen Typen von Auslöschungsgesetzen für die drei Gruppen von Symmetrieoperationen,

die sich durch die Zahl zur Operation invarianter Koordinaten (immer eine entsprechende Wahl des Koordinatensystems vorausgesetzt) voneinander unterscheiden.

Tabelle I.

Zahl variabler Koordinaten	Zahl davon bestimmt rationaler Koordinaten				Operation			
	$q = 0^1)$	$q = 1$	$q = 2$	$q = 3$				
1	irrational	zonal	integral	—	—	Gleit- spiegelung u. Spiegelung		
	unbest. rational	mehrf. zonal						
2	beide irrat.	serial	irrational	zonal	integral	—	Schraubung und Drehung	
	eine irrat. eine unbest. rational							mehrf. serial
	beide unbest. rational	unbest. rational	mehrf. zonal					
	—	—	—	—				
3	—	—	beide irrat.	serial	irra- tional	zonal	in- tegral	Dreh- spiegelung
			eine irrat. eine unbest. rational					
			beide unbest. rational	unbest. ra- tional	mehrf. zonal			
			—	—	—	—		
Geometr.Ort	Raum	Ebene	Gerade	Punkt				

§ 4. Die erzeugenden Operationen der Kompositionsauslöschungen.

Die Definition dieser Auslöschungen geht wie bei den elementaren von den erzeugenden Operationen aus. Als Komposition wird dabei die Ineinanderstellung von Gitterkomplexen zum allgemeinen Anteil, den

1) Der Fall $q = 0$ bezieht sich jeweils nur auf das unter der Kolonne Operationen erwähnte Zusatzelement.

eine bestimmte Sorte von Streuzentren an einer Basis nehmen kann, bezeichnet. Die Ineinanderstellung von Translationsgittern, die zum Gitterkomplex führt, wird bei der Komposition auf höherer Stufe wiederholt. Während die Lage und Stellung der verschiedenen Translationsgitter im Falle des Gitterkomplexes durch die Wahl eines der Translationsgitter eindeutig festgelegt wird, gilt dies nicht allgemein für die komponierten Komplexe. Die durch eine Komposition erzeugte Punktmenge ist im allgemeinen Fall ihrer Schwerpunktsanordnung nach vielmehr erst bekannt, wenn von jedem der in ihr enthaltenen Komplexe ein Punkt gegeben ist. Die Komposition wird daher zweckmäßig durch die Gesamtheit dieser Punkte symbolisiert. Man kann sich dann die Gesamtheit der Punkte der komponierten Komplexe so erzeugt denken, daß man von einem ersten Punkte aus je einen Punkt aus allen anderen Komplexen mit Vektoren verbindet und diese letzteren den Symmetrioperationen des Kristallraumes unterwirft. Die Länge der Vektoren (Koordinatendifferenzen) bleibt dabei erhalten, während sich die Stellung derselben zum Koordinatensystem ändert. Unter diesen Vektorenfiguren der Kompositionen sind zwei Fälle ausgezeichnet: Alle Vektoren sind so wählbar, daß sie auf demselben Strahl liegen, d. h. die komponierten Punkte liegen auf einer Geraden (Fall der eindimensionalen Komposition), und alle Vektoren lassen sich derart legen, daß sie in einer Ebene liegen (Fall der zweidimensionalen Komposition)¹⁾. Den beiden Spezialfällen kommen bei geeigneter Wahl der Koordinatenachsen die Symbole zu:

$$\{[mnp], [mnp'], [mnp''], \dots\}$$

und $\{[mnp], [m'n'p'], [m''n''p''], \dots\}$.

Für einen beliebigen Aufpunkt P des Kristallraumes bestimmt dessen Struktur die mögliche Mannigfaltigkeit dazugehöriger Kompositionen. Notwendig ist, um deren Zahl und Charakter angeben zu können, die Kenntnis der Lage von P hinsichtlich der Punktsymmetrieelemente und deren Zusammengehörigkeit zu Scharen identischer Elemente. Die Gesamtheit aller möglichen Kompositionen von P mit Punktlagen mit drei Freiheitsgraden bildet eine zusammenhängende, dichte Menge von drei Dimensionen. Anders verhalten sich in der Komposition mit P Punktlagen mit weniger als drei Freiheitsgraden: Treten solche in mehreren analogen, aber nicht zusammengehörigen Scharen auf, so besteht die Gesamtheit der Kompositionen dieser Punktlagen mit P aus einer Reihe

¹⁾ Diese Lagebeziehungen sind natürlich für Kompositionen, welche nur zwei bzw. drei Gitterkomplexe umfassen, trivial.

nicht zusammenhängender Mengen. Diese sind einzeln dichte Mengen von einer oder zwei Dimensionen im Falle der Drehungsachsen oder Spiegelebenen, während für Punktlagen ohne Freiheitsgrad die einzelne Menge nur je ein Element besitzt.

Für das Folgende wird es wesentlich sein, welche Punkte in der rationalen Umgebung von P liegen. Als rationale Umgebung von P werde die Gesamtheit der Punkte bezeichnet, die auf P als Nullpunkt bezogen zum mindesten in einer Koordinate rationale Werte besitzen. Um P herum wird durch diese Festsetzung eine Schar von Ebenen parallel den drei Koordinatenebenen definiert, denen die Punkte der rationalen Umgebung von P angehören müssen. Punkte auf den Schnittgeraden solcher Ebenen sollen als zu P zweifach rational, Punkte in Schnittpunkten dreier solcher Ebenen als zu P dreifach rational bezeichnet werden. Die Lage von P zu den Symmetrieelementen entscheidet, welcher Art die Punkte in der rationalen Umgebung von P hinsichtlich ihrer Eigensymmetrie sind. Ist zum Beispiel (auf den üblichen Nullpunkt der Beschreibung des Kristallraumes bezogen) P in allen drei Koordinaten irrational, so sind es nur Punktlagen C_1 , die zu P eine rationale Lage einnehmen können. Liegt hingegen P auf einem Symmetrieelement, so sind alle anderen, auf irgendwelchen Symmetrieelementen liegenden Punkte in der rationalen Umgebung von P enthalten. Dabei sind dann eine Reihe von Koordinaten, nämlich die zur Operation des Symmetrieelementes, das P enthält, variablen als bestimmte, rationale Werte für alle Punkte auf dem betreffenden Symmetrieelement durch die Abstandsverhältnisse der Symmetrieelemente voneinander festgelegt.

Durch die Bezeichnung homogen sollen Kompositionen ausgezeichnet werden, die nur Punktlagen einerlei Eigensymmetrie besitzen im Gegensatz zu den heterogenen Kompositionen, an deren Aufbau Komplexe verschiedener Symmetriebedingung beteiligt sind. Im Falle der homogenen Kompositionen wie in jenem der heterogenen treten die erwähnten Beschränkungen der Kompositionsmöglichkeit auf, wenn Punktlagen mit weniger als drei Freiheitsgraden zu komponieren sind. Die Unterscheidung wird erst wesentlich sein, wenn unter den Punkten einer Komposition eine bestimmte Rationalität gefordert wird.

Die Frage, inwiefern Kompositionen erzeugende Operationen von Auslöschungsgesetzen sind, erledigt sich analog wie in der in § 3 gegebenen Darstellung für die Symmetrieoperationen. Die allgemeinen geometrischen Eigenschaften der Kompositionen zeigen bereits, daß das von einer Komposition erzeugte Auslöschungsgesetz unabhängig von der Wahl des Punktes P gelten muß. Von dieser abhängig ist lediglich der Charakter der Punktlagen hinsichtlich ihrer Eigensymmetrie und damit

die Frage, ob die Komposition homogen oder heterogen gebaut ist. Das sind jedoch Eigenschaften der Komposition, welche für ihre Rolle als Erzeugende von Auslöschungen keine entscheidende Bedeutung haben. Umgekehrt wird — im Gegensatz zu den Symmetrieelementen — nicht jede Komposition Erzeugende eines Auslöschungsgesetzes sein, sondern es sind hierzu von der Komposition als Operation zusätzliche Bedingungen zu erfüllen. Wie oben werden diese fordern, daß zum mindesten eine Koordinate gegenüber der Komposition ein bestimmt rationales Verhalten zeige, so daß eine Koordinatendifferenzenreihe gemäß (4) besteht. Das bedeutet zunächst, daß für Kompositionen mit dem Punkte P , wenn sie Auslöschungen bedingen sollen, nur Punkte der rationalen Umgebung dieses Punktes in Frage kommen. Nicht alle diese Punkte stehen jedoch zu P im Verhältnis bestimmter Rationalität, sondern es wird innerhalb der rationalen Umgebung von P eine beschränkte Mannigfaltigkeit sein, deren Punkte mit P komponiert eine bestimmt rationale Punktanordnung ergibt. Um die zu solchen Punktanordnungen führenden Kompositionen in ihrer Gesamtheit abzuleiten, kann verschieden vorgegangen werden:

a) Man kann die Zahl der Punkte der bestimmt rationalen Anordnung fixieren und fragen, wo liegen die in dieser bestimmten Anzahl mit P zu bestimmt rationalen Anordnungen komponierbaren Punkte. Für jede Zahl wird sich eine Schar Örter nach den drei Koordinatenebenen ergeben, die dieser Forderung genügen.

b) Man kann eine Reihe von Punkten aus der rationalen Umgebung dem Punkt P zunächst willkürlich zuordnen und für diese (im allgemeinen nicht bestimmt rationale) Anordnung fragen, welche Punkte weiterhin den vorliegenden zuzuordnen sind, damit die Gesamtheit der Punkte auf eine bestimmt rationale Anordnung von Punkten führt. Wählt man etwa zu P einen zweiten Punkt P' mit der (auf P bezogenen) m -Koordinate $m' = \frac{1}{3}$, so bildet diese Anordnung eine bestimmt rationale Anordnung, wenn den beiden Punkten ein dritter Punkt P'' mit $m'' = \frac{2}{3}$ zugefügt wird.

Wie im allgemeinen Fall des § 2 erläutert wurde, bestimmen auch hier die anderen Koordinaten durch ihr Verhalten die Art, in welcher ein zunächst serial gültiges Auslöschungsgesetz in den übrigen Bereichen des Indizesfeldes auftritt. Zwei weitere bestimmt rationale Koordinaten (oder konstante Koordinaten) erweitern das seriale Gesetz zum nach (hkl) integralen, nur eine solche Koordinate dagegen zum zonalen Gesetz. Im einzelnen kann das allgemeine Resultat ohne Änderung auf den Spezialfall der Kompositionen übertragen werden.

Tabelle II.

Auslöschungsgesetztypen, welche von Kompositionen erzeugt werden.

Zahl der variablen Koordinaten	Davon bestimmbar rationale Koordinaten					
	$q = 0$	$q = 1$		$q = 2$	$q = 3$	
1	—	integral		—	—	
2	—	unbest. rational	mehrfach zonal	integral		
		irrational	einfach zonal			
3	—	1 unbest. rational + 1 irrational	mehrfach serial	unbest. rational	mehrfach zonal	integral
		beide un- best. rat.	einfach serial	irrational	einfach zonal	
		beide irrational				

§ 5. Diskussion nach (hkl) integraler Auslöschungsgesetze.

Damit eine Operation des Diskontinuums ein nach (hkl) integrales Auslöschungsgesetz erzeugt, muß sie folgender Bedingung genügen: Neben bestimmt rationalen Koordinaten, von denen zum mindesten eine vorhanden sein muß, dürfen nur zur Operation invariante Koordinaten vorkommen. Tabelle I und II sowie die Erläuterungen auf Seite 49 ff. lassen erkennen, welche der Operationen ein derartiges Verhalten aufweisen können, und an welche zusätzlichen Bedingungen (hinsichtlich Lage des Punktes, auf den die Operation angewandt wird, bzw. hinsichtlich des speziellen Charakters der Operation) dieses geknüpft ist. Neben den in den beiden Tabellen aufgeführten Fällen gehört hierher weiterhin der Fall der mehrfach primitiven Translationsgruppen, welche invariant zur Punktlage (integral nach $\{mnp\}$) ein nach (hkl) integrales Auslöschungsgesetz zu erzeugen vermögen.

Allgemein kommen als erzeugende Operationen (wie für die homogenen Komplexe ausführlich erörtert wurde) sämtliche Symmetrioperationen in Frage, wenn alle Koordinaten, die zur Operation variabel sind, spezielle, bestimmt rationale Werte besitzen. Als Bereiche im Kristallraum, welche dieser Zusatzforderung genügen, werden dadurch Ebenen parallel den Spiegel- oder Gleitspiegelebenen, Geraden parallel den Drehungs- und Schraubungsachsen und Punkte in bestimmter Lage zu den Drehspiegelzentren definiert.

An Kompositionen kommen für die Erzeugung integraler Auslöschungsgesetze die folgenden in Frage:

1. Kompositionen von Punktlagen ohne Freiheitsgrad, falls deren Koordinatendifferenzen mit der Zahl komponierter Punktlagen im Verhältnis bestimmter Rationalität stehen. Bei der üblichen Achsenwahl, auf die die Beschreibung der Raumsysteme bezogen wird, sind mögliche Werte von Koordinatendifferenzen $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{6}$, $\frac{1}{8}$. Die möglichen Kompositionen solcher Punktlagen sind dadurch und die Anzahl analoger, aber nicht gleichwertiger solcher Punktlagen festgelegt. Punktlagen mit Koordinatendifferenzen $(0 \text{ oder } \frac{1}{2})a$, $(0 \text{ oder } \frac{1}{2})b$, $(0 \text{ oder } \frac{1}{2})c$ gestatten nur Kompositionen zu zweien, zu vierten oder zu achten, da Punkte mit Koordinaten $(0 \text{ oder } \frac{1}{2}, 0 \text{ oder } \frac{1}{2}, 0 \text{ oder } \frac{1}{2})$ im Raum der Nichtidentität maximal achtfach auftreten können (sie bilden dann selbstständige Einpunktnern), vorausgesetzt, daß die Achsenwahl normal erfolgte.

2. Kompositionen von Punktlagen mit Freiheitsgraden unter sich oder mit solchen ohne Freiheitsgrade. Dann aber muß die relative Lage in den variablen Koordinaten derart beschaffen sein, daß die Koordinatendifferenzen auf die Zähligkeit der Komposition bezogen bestimmt rationale Werte annehmen (oder gleich Null sind). Für die Koordinatendifferenzen, die durch die festen Abstandsverhältnisse der Symmetrieelemente voneinander bestimmt werden, gilt das Gleiche, was bei der Komposition von Punktlagen ohne Freiheitsgrade für alle drei Koordinaten Gültigkeit hatte. Für beide Gruppen von Kompositionen wird die Zahl der möglichen Kompositionen durch die Forderung, daß die Komposition homogen sei, in gleicher Weise eingeschränkt. Ihre Gesamtheit ist an Hand dieser allgemeinen Bemerkungen aus der expliziten Darstellung der Raumsysteme leicht anzugeben.

Ein nach (hkl) integrales Auslöschungsgesetz von der Zähligkeit q besagt: Die Gesamtmenge der Streuzentren der Basisgruppe ist in Teilmengen von q Punkten angeordnet, deren einzelne sich aus dem Auslöschungsgesetz nach Lage und Zahl ihrer Punkte bestimmen läßt. Waren zunächst s Koordinatentripel der Basis unbekannt, so reduziert sich dadurch deren Zahl auf $\frac{s}{q}$, da je q Punkte in ihrer relativen Lage zu-

einander vollkommen bestimmt sind. Zu jedem der $\frac{s}{q}$ in ihrer Lage noch unbestimmten Punkte ordnet das Auslöschungsgesetz $(q - 1)$ Punkte in bestimmter Lage zu. Dabei können die

Streuzentren einzelne Atome oder Gruppen solcher (Moleküle, Radikale) sein. Das Auslöschungsgesetz macht in beiden Fällen die Aussage, daß sich das betreffende Gebilde in seinen für den Interferenzversuch wesentlichen Eigenschaften in bestimmter Lage zu einem ersten Ort einmal oder mehrfach wiederholt. Dabei ist zu beachten, daß dies noch keine Parallelstellung der beiden Gebilde bedeuten muß. Dieser Schluß ist nur dann berechtigt, wenn das nach (hkl) integral gültige Gesetz auf eine mehrfach primitive Translationsgruppe zurückgeht. Andernfalls würde eine solche Folgerung nur die Streuzentren betreffen, deren Streuvermögen eine Größe besitzt, welche sich im Interferenzversuch nachweisen läßt (also beispielsweise nicht für H -Atome).

Die strukturtheoretische Deutung eines nach (hkl) integralen Auslöschungsgesetzes fragt nach dessen erzeugender Operation. Da sich zu jeder Symmetrieoperation eine ihr äquivalente Komposition finden läßt, indem man die Symmetrieoperationen ganz oder teilweise durch Kompositionen ersetzt und schließlich den Kristallraum C_1 erhält, kann die Frage nur in Form von gewissen Restriktionen beantwortet werden. Es kann lediglich entschieden werden, ob Symmetrieoperationen oder Kompositionen, oder ob sicher Kompositionen neben Symmetrieoperationen oder Kompositionen vorliegen. Dieser Entscheid geht darauf zurück, daß die Symmetrieoperationen im Gegensatz zu den Kompositionen nur in endlicher Mannigfaltigkeit vorkommen, so daß sich aus dieser eingeschränkten Mannigfaltigkeit der ersteren ein Kriterium ergibt, wann Kompositionen sicher unter den erzeugenden Operationen einer rationalen Punktanordnung existieren. Die elementaren Auslöschungsgesetze sind in der folgenden Weise in ihrer Variabilität begrenzt:

a) Die maximale Zahl rational miteinander verknüpfter Punkte ist gleich der Zähligkeit der allgemeinen Punktlage des vorliegenden Kristallraumes. Für Auslöschungsgesetze, die diesen Wert mit ihrer Zähligkeit überschreiten, sind Kompositionen sicher gestellt. Dabei steht die Zähligkeit des einzelnen Auslöschungsgesetzes zu der Zähligkeit der sämtlichen Auslöschungsgesetze (die immer primitiv formuliert werden sollen, wie dies oben festgesetzt wurde) in einem Verhältnis, wie es der Zerlegung des Raumsystems in seine charakteristischen Untergruppen entspricht. Mit anderen Worten: Die rationale Punktanordnung darf nicht nur nicht einen Grenzwert übersteigen, sondern sie muß sich zudem in bestimmter Weise in Teilmengen zerlegen lassen, für welche einzeln wiederum eine maximale Zähligkeit besteht. Jedes der beobachteten Auslöschungsgesetze muß sich, wenn es als elementares überhaupt in Frage kommen soll, auf die Produktdarstellung des allgemeinen

Strukturvektors¹⁾ des betreffenden Kristallraumes zurückführen lassen, indem es einen Spezialfall desselben darstellt. An Hand der einfach primitiven, rhombisch holoedrischen Raumsysteme soll diese Beziehung erörtert werden:

Maximalzähligkeit der rationalen Punktanordnung = 8. Charakteristische Untergruppen (nach den früher entwickelten Gesichtspunkten gewählt) sind $\mathfrak{C}_8 + \mathfrak{C}_8 + \mathfrak{C}_8$, die wechselweise senkrecht aufeinander stehen. Das bedeutet für die rationalen Achtpunktner folgendes: Die acht Punkte müssen sich in Teilmengen von je zwei Punkten zerlegen lassen. Es steht dies damit in Übereinstimmung, daß sich die allgemeinen Strukturvektoren der Raumsysteme \mathfrak{R}_h^k , $k = 1$ bis 16, als Produkte aus drei Faktoren schreiben lassen, wie es der oben gegebenen Darstellung aus Untergruppen entspricht.

Für $k = 1$ lautet das Produkt beispielsweise:

$$(e^{2\pi i m h} + e^{-2\pi i m h})(e^{2\pi i n k} + e^{-2\pi i n k})(e^{2\pi i p l} + e^{-2\pi i p l}).$$

Alle elementaren Auslöschungsgesetze in \mathfrak{R}_h^1 sind demnach von der Form:

$$\left[1 + e^{2\pi i \frac{h}{\mu}} \right], \dots \text{ oder } \left[1 + e^{2\pi i \frac{h}{\mu}} \right] \cdot \left[1 + e^{2\pi i \frac{k}{\nu}} \right], \dots$$

$$\text{oder } \left[1 + e^{2\pi i \frac{h}{\mu}} \right] \cdot \left[1 + e^{2\pi i \frac{k}{\nu}} \right] \cdot \left[1 + e^{2\pi i \frac{l}{\omega}} \right],$$

wobei μ, ν, ω Vielfache von 2 bedeuten.

Wird eine Auswahlregel beobachtet, die einen anderen Bau aufweist, beispielsweise einen Index erst in vierter Ordnung auftreten läßt (der Auswahlfaktor lautet dann $\left[1 + e^{\pi i h} \right] \cdot \left[1 + e^{\pi i \frac{h}{2}} \right]$), so ist unter den erzeugenden Operationen die Komposition sicher vertreten, da eine solche rationale Punktanordnung nicht auf Symmetrieeoperationen allein beruhen kann.

b) Für die Symmetrieeoperationen mit zur Operation invarianten Koordinaten folgt eine weitere Aussage über die mögliche Form des Auswahlfaktors. Der Exponent solcher Auswahlfaktoren kann nur jene Indizes h, k, l enthalten, welche mit zur Operation variablen Koordinaten multiplikativ verknüpft auftreten. Es lassen sich demzufolge aus der Form der Kongruenz, als welche sich das Auslöschungsgesetz aussprechen läßt, über die möglichen Symmetrieeoperationen einschränkende Schlüsse ziehen. Spiegelung an (001) läßt m und n invariant, der Auswahlfaktor kann, wenn zur Schar \mathfrak{C}_8^1 parallel (001) keine anderen Symmetrieelementenscharen schief stehen, nur den Index l betreffen. Für ein Auslöschungsgesetz, welches eine lineare Verbindung von Indizes in seiner Kongruenz besitzt, scheidet diese Operation notwendigerweise als mögliche Erzeugende aus. Für Drehungsachsen läßt sich ein analoger Aus-

1) Siehe E. Brandenberger und P. Niggli, l. c. Eine explizite Tabulierung der Produktdarstellungen der Strukturvektoren der 230 allgemeinen Punktlagen wird in den Internationalen Tabellen zur Strukturbestimmung gegeben werden.

schließungssatz aussprechen, wenn Auslöschungen beobachtet werden, die von der Summe aller Indizes abhängen.

Im Falle der Zusatzsymmetrien gilt etwas Analoges: es treten dort zwar keine zur Operation invarianten Koordinaten auf, jedoch zur Operation derart variable, daß sie durch die Operation für alle Punktlagen in gleicher Weise verändert werden. Es sind dies die Koordinaten, welche sich voneinander durch Addition der Zusatzwerte entsprechend den Gleit- und Schraubungskomponenten unterscheiden. Dadurch werden die Kongruenzen der Auslöschungsgesetze für ein oder zwei Indizes unabhängig zur speziellen Wahl der Punktlage vorgeschrieben. Digonale Schraubung parallel $[004]$ z. B. muß immer auf einen Auswahlfaktor führen, der im Exponenten den Term $\frac{1}{2}l$ enthält, usw.

Wenn ein Auslöschungsgesetz allen diesen Restriktionen widerspricht, kann es als Erzeugende keine Symmetrieoperation besitzen, und die Operation hätte sich in diesem Falle eindeutig nachweisen lassen. Ein eindeutiger Nachweis kann aber nach der oben gemachten Bemerkung als erzeugende Operation eines Auslöschungsgesetzes stets nur eine Komposition ergeben.

Wenn ein q -zähliges Auslöschungsgesetz festgestellt wird, so folgt daraus ohne weiteres bei Ausschluß von Kompensationsauslöschungen (was beim experimentellen Verfahren übrigens die Bestimmung des Basisinhalts zumeist vorweg genommen hätte), daß keine Sorte von Streuzentren in einer Zähligkeit kleiner als q , sondern nur als Vielfache von q im Raum der Nichtidentität vorhanden sein kann. Mit anderen Anzahlen von Streuzentren wäre die aus den Auslöschungen erwiesene Aufteilung der Gesamtmenge von Schwerpunkten in kongruente Teilmengen unvereinbar. Solche Auslöschungen müßten notwendigerweise auf Kompensationen zurückgehen und sich durch Substitution von Streuzentren durch solche mit anderem Streuvermögen als Kompensationsauslöschungen erweisen. Für eine Sorte von Streuzentren, deren Zahl im Elementarbereich gleich $f q$ ist, folgt für die Lokalisierung im Kristallraum: Sind die sämtlichen Auslöschungen kompositionsmäßig bedingt, so sind Punktlagen der Zähligkeit f der Komposition unterworfen. Dabei zeigt der einzelne f -Punktner als homogener Gitterkomplex keine Auslöschungen des q -zähligen Auslöschungsgesetzes. Sind die Auslöschungen dagegen elementar, so besitzt die Punktlage die Zähligkeit q als minimale Zähligkeit und die Gesamtheit der $f q$ Punkte würde sich durch (an sich beliebig gewählte) Besetzung von f solchen Punktlagen ergeben. Die Punktlage kann aber auch eine höhere Zähligkeit besitzen (maximal $f q$) je nach den Symmetrien des betreffenden Kristallraumes. Für mehrere Auslöschungsgesetze mit den

Einzelzähligkeiten q_1, q_2, \dots, q_g ist die gleiche Betrachtung für die Größe $q_1 \cdot q_2 \cdot \dots \cdot q_g$ durchzuführen, wobei naturgemäß für eine Sorte von Streuzentren elementare und kompositionsmäßige Auslöschungen kombiniert sein können. Dadurch, daß die Auslöschungen als elementar betrachtet werden, ist die Punktlage im Kristallraum an die Örter der betreffenden Auslöschungsgesetze gebunden. Im Falle, daß mehrere Auslöschungsgesetze gleichzeitig gelten, die alle elementar sein sollen, muß die Punktlage auf den Schnittlinien der Örter der einzelnen Auslöschungsgesetze liegen.

Punkttagen, welche die Auslöschungen teils durch Komposition teils elementar ergeben sollen, besetzen nur einen Teil der Örter der beobachteten Auswahlregeln. Sind sie von kleinerer Zähligkeit als die allgemeine Punktlage des betreffenden Kristallraumes, so liegen sie auf Schnittlinien der Punktsymmetrieelemente mit den Örtern der entsprechenden Auslöschungsgesetze. Die explizite Darstellung der Auswahlregeln homogener Gitterkomplexe gibt über diese Beziehungen Aufschluß.

Ein Beispiel soll diese Schlußweise im einzelnen erläutern. Im Raumsystem \mathfrak{B}_h^1 werde die Auswahlregel: »(hkl) fehlt, wenn einer der Indizes ungerade« beobachtet. Eine bestimmte Sorte von Streuzentren sei in der Zähligkeit 8 vorhanden. Wie läßt sich diese plazieren an Hand der beobachteten Selektion?

1. Die 8 Punkte bilden einen allgemeinen Achtpunktner C_1 . Die beobachteten Auslöschungen müssen demzufolge sämtlich elementar sein. Als solcher Komplex kommt nur die Punktlage $[\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}]$ in Betracht.

2. Die 8 Punkte bilden zwei Vierpunktner C_2 . Dann müssen zwei der Auswahl-faktoren elementar, einer dagegen kompositionsmäßig bedingt sein. Möglich sind die Punkttagen: $\{[\frac{1}{4} \frac{1}{4} 0] + [\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{2}]\}$ und die hieraus durch zyklische Vertauschung der Koordinaten sich ergebenden.

3. Die 8 Punkte bilden vier Zweipunktner C_2 . In diesem Falle müssen notwendig zwei Auswahl-faktoren kompositionsmäßig, einer dagegen elementar bedingt sein. Mögliche Punkttagen: $\{[0 0 \frac{1}{4}] + [\frac{1}{2} 0 \frac{1}{4}] + [0 \frac{1}{2} \frac{1}{4}] + [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{4}]\}$ und die durch zyklische Vertauschung sich ergebenden.

4. Die 8 Punkte bilden acht Einpunkter V_h . Alle Auslöschungen sind Kompositionsauslöschungen. Mögliche Punktlage ist: $\{[0 0 0] + [\frac{1}{2} 0 0] + [0 \frac{1}{2} 0] + [0 0 \frac{1}{2}] + [\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0] + [\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}] + [0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}] + [\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]\}$.

Die engen Lagebeziehungen unter den verschiedenen Punkttagen beruhen darauf daß das genannte Auslöschungsgesetz zu den kristallstrukturell wichtigen gehört. Man bemerkt, daß sie die Gesamtheit der Gitterpunkte darstellen, die sich als Schnittpunkte der in Raumsystemen \mathfrak{B}_h als Träger von Symmetrieelementen und kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln möglichen Ebenen ergeben (siehe Seite 23). Die Betrachtung aller \mathfrak{B}_h mit einfach primitiver Translationsgruppe zeigt, daß in allen diesen Raumsystemen bei den genannten Auslöschungen ein Achtpunktner sich aus acht dieser Schnittpunkte (Gitterpunkte der Masche von $\frac{1}{8}$ Elementarvolumen) zusammensetzt. Gleichgültig der erzeugenden Operation läßt er sich auf die acht möglichen Aufteilungen dieser 64 Punkte einengen. Für Sorten von Streuzentren, welche in größerer Anzahl im Raum der Nichtidentität vorkommen, ist die Diskussion ent-

sprechend zu erweitern: Sind beispielsweise von einer bestimmten Teilchensorte 16 Teilchen vorhanden, so läßt sich das beobachtete Auslöschungsgesetz durch Komposition von acht Zweipunkttern C_{2v} , von welchen sich einer vollständig willkürlich wählen läßt, erhalten, usw. Bei einer 32-fach im Elementarparallelepiped enthaltenen Teilchensorte gilt dasselbe von Punktlagen C_8 , welche als acht Vierpunktner die geforderte Punktanordnung ergeben, wobei wiederum einer der Komplexe willkürlich fixiert werden kann. Für 64 Streuzentren ist dies schließlich mit einer achtmaligen Komposition von Punktlagen allgemeiner Lage möglich, indem dann acht Achtpunktner derart ineinander gestellt werden, daß korrespondierende Punkte Gitter von $\frac{1}{8}$ Maschenvolumen bilden. Wiederum ist eine der Punktlagen frei wählbar.

§ 6. Diskussion zonaler Auslöschungsgesetze.

Erzeugende Operationen zonaler und nur zonaler Auslöschungsgesetze haben eine unbestimmt rationale oder irrationale Koordinate neben mindestens einer bestimmt rationalen. Solange die gegenüber der Operation willkürliche Koordinate nicht als irrational (einschließlich hoch unbestimmt rational) festgelegt ist, bleibt offen, ob das Auslöschungsgesetz einfach zonal oder mehrfach zonal gilt. Sicher gilt in beiden Fällen das Gesetz zunächst einfach zonal für alle Punkte des zugehörigen geometrischen Ortes und erst eine spezielle Wahl innerhalb desselben führt auf eine mehrfach zonale, im Grenzfall nach (hkl) integrale Auswahlregel. Die Gesamtheit der möglichen Fälle folgt aus Tabelle I und II.

Bei der Analyse zonaler Auslöschungsgesetze ist die Lage der Zone, welche Träger der Auslöschungen ist, relativ zu den Symmetrieelementen wesentlich. Es sind zu unterscheiden:

a) Fall der Gleitspiegelung: Zone senkrecht zur Schar der Gleit-
spiegelebenen,

b) Fall der zwei- bzw. vierzähligen Drehung oder Schraubung: Zone
in der Ebene senkrecht zur Achsenschar, wobei sich durch Transformation der Achsen diese Zone stets in eine der beiden Koordinatenrichtungen dieser Ebenen bringen läßt,

c) Fall der Drehspiegelung: Geeignete Wahl der Achsen führt auf
Zonen parallel den drei Koordinatenrichtungen.

Dieses Resultat bedeutet: Die Zonen, in welchen elementare, zonale Auslöschungsgesetze gelten können, sind in ihrer Lage relativ zu den Symmetrieelementen eindeutig bestimmt, und zwar kommen als Träger solcher Auslöschungsgesetze allein die Zonen in einfachster Lage zu den Symmetrieelementenscharen in Betracht. Im Falle der Kompositionen, welche zonale Auslöschungen erzeugen, besteht ein solcher Zusammenhang nicht. Die Äquivalenzbetrachtungen werden sich jedoch auf die oben ausgezeichneten Zonen beschränken können, da jedes zonale Auslöschungs-

gesetz mit anderem Geltungsbereich a priori ein kompositionsmäßig bedingtes sein muß.

An erzeugenden Operationen zonaler Auslöschungsgesetze kommen unter den Symmetrioperationen die in Tabelle I verzeichneten in Frage, wobei zu beachten ist: durch Gleitspiegelung erzeugte, zonale Auslöschungen sind unabhängig zur Wahl der Punktlage vorhanden, während im Falle der Drehung und Schraubung Ebenen parallel zwei Koordinatenachsen, von denen eine die Drehungs- oder Schraubungsachsenrichtung besitzt, die Örter gleicher zonaler Selektion darstellen. Im Falle der Drehspiegelung beherbergen Geraden parallel den Koordinatenrichtungen, Punkte gleicher zonaler Selektion. Man erkennt aus dieser Feststellung, daß das Problem der zonalen Selektion in gewissem Sinne das zweidimensionale Gegenstück zur dreidimensionalen, integralen Selektion darstellt. Die Gleitspiegelung entspricht dabei im Zweidimensionalen der mehrfach primitiven Translationsgruppe des Dreidimensionalen, die Drehung und Schraubung der Spiegelung und Gleitspiegelung und schließlich die Drehspiegelung der Drehung und Schraubung. Diese Beziehung wird erlauben, die Ableitung der zonalen Auslöschungen und deren strukturanalytische Diskussion dem § 5 völlig analog zu gestalten.

An erzeugenden Operationen unter den Kompositionen sind diejenigen möglich, die den folgenden Bedingungen genügen:

a) Kompositionen von Punktlagen mit einem Freiheitsgrad (C_n oder C_{nv}), wobei die variable Koordinate parallel der Drehungs(Schraubungs-)richtung irrational oder höher unbestimmt rational sein muß. Die Zähligkeit der Komposition muß dabei mit den Abständen der Achsen untereinander in Übereinstimmung stehen. Da diese mit der Zähligkeit der Achsen verknüpft sind, steht auch die Komposition mit der Zähligkeit der Symmetrioperation, welche die komponierten Punktlagen in sich überführt, in Beziehung. Zudem setzen solche Kompositionen voraus, daß mehrere analoge Scharen gleichwertiger Achsen parallel einer Richtung existieren. Die Richtung der Achsenschär bestimmt die Zonenachse der Zone, die Träger des zonalen, kompositionsmäßig bedingten Auslöschungsgesetzes wird. Solche Kompositionen sind, wie man leicht erkennt, mit einer Schar Gleitspiegelebenen senkrecht zu den Drehungs- oder Schraubungsachsen äquivalent, wie dies nach den allgemeinen Überlegungen naturgemäß sein muß. Solche Beziehungen sind im Falle der Pseudosymmetrien, in welchen Symmetrioperationen durch Kompositionen ersetzt werden, bedeutsam (siehe § 10).

b) Kompositionen von Punktlagen mit zwei Freiheitsgraden: Dabei sind folgende Fälle zu unterscheiden:

1. Eine der Koordinaten in der Spiegelebene zeigt irrationales Verhalten, so daß die zweite Koordinate in der Spiegelebene und die Koordinate außerhalb derselben bestimmt rational sein müssen. Die Zähligkeit des Auslöschungsgesetzes muß dann mit dem Abstand der Spiegelebenen im Verhältnis der bestimmten Rationalität stehen. Erfolgt eine Komposition in ein und derselben Spiegelebene, ist also die Koordinate außerhalb derselben zur Operation invariant, so ist die Auswahlregel nur von einer Koordinate abhängig.

2. Die beiden Koordinaten in der Spiegelebene sind bestimmt rational, hingegen die dritte Koordinate (nicht in die Spiegelebene fallende) ist unbestimmt rational. Ein derart erzeugtes Auslöschungsgesetz ist im Gegensatz zu 1. unter allen Umständen mehrfach zonal, wobei die »Zonenperiode« sich aus dem Abstände der Spiegelebenen, welche die komponentierten Punktlagen enthalten, ergibt. Die Dreierkomposition $[[0\ 0\ 0]]$, $[[\frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{2}]]$, $[[\frac{2}{3}\ 0\ \frac{1}{2}]]$ führt z. B. auf ein zonales Gesetz in $[0\ 0\ 1]$, welches für $(h\ k\ 0)$, $(h\ k\ 2)$, $\dots (h\ k\ 2n) \dots$ in gleicher Weise gilt.

c) Kompositionen von Punktlagen mit drei Freiheitsgraden: Dabei müssen sich zwei Koordinaten bestimmt rational (eine davon darf konstant sein) verhalten, während die dritte irrational sein muß.

Für die Strukturbestimmung sind jene zonalen Auslöschungsgesetze, welche in Zonen senkrecht zu Gleitspiegelebenenscharen Gültigkeit besitzen, besonders wesentlich (siehe § 9). In früheren Untersuchungen sind diese Zonen aus diesem Grunde die leitenden Zonen eines Raumsystems genannt worden. Da die Ebenen, parallel denen Scharen von Gleitspiegelebenen oder Spiegelebenen laufen, für die Raumsysteme isomorph einer bestimmten Klasse dieselben sind, haben alle Raumsysteme einer Klasse dieselben leitenden Zonen. Durch diese Betrachtung würde unter den Zonen, die elementare, zonale Auslöschungen enthalten, zunächst eine Gruppe ausgezeichnet. Bei einer erweiterten Betrachtung fällt diese Sonderstellung jedoch dahin, da dann sämtliche elementaren zonalen Auslöschungsgesetze in leitende Zonen fallen, sei es in leitende Zonen der Klasse oder der betreffenden Lauegruppe, sei es in leitende Zonen eines noch höher symmetrischen Raumsystems. Die relative Lage der Zonen, die Träger elementarer, zonaler Auslöschungen sind, läßt sich im Hinblick auf die Symmetrieelemente demzufolge auch folgend umschreiben: Elementare zonale Auslöschungsgesetze gelten in Zonen, welche in einer der 32 Klassen leitenden Charakter besitzen.

Im Falle einer allgemeinen Basisgruppe (entgegen dem Fall eines einzigen Gitterkomplexes) darf der einzelne Komplex eine nach $(h\ k\ l)$

integrale Selektion besitzen. Diese muß jedoch derart beschaffen sein, daß dadurch keine gemeinsamen, zusätzlichen Nullstellen auftreten können, da sonst die Zahl der geometrisch geforderten Auslöschungen größer als die Anzahl im Interferenzbild unterdrückter würde. Das bedingt, daß man das Selektionsverhalten einer Zone zunächst allgemein, ohne Betrachtung des Geltungsbereiches des einzelnen Auslöschungsgesetzes außerhalb der Zone untersuchen muß. Wie bereits bemerkt wurde, läßt sich diese Gesamtheit in einer Zone möglicher Auslöschungen durch eine völlig analoge Betrachtung zu § 5 finden, die sich jedoch nurmehr auf zweidimensionale Diskontinuen erstreckt. Die sämtlichen, in einer Zone möglichen Auslöschungsgesetze sind mit den Auslöschungsgesetzen des zweidimensionalen Diskontinuums, welches den beiden Koordinatenrichtungen außerhalb der Zonenachse parallel läuft, identisch. Im Falle rhombisch holoedrischer Raumsysteme muß beispielsweise bei der Betrachtung der leitenden Zonen das ebene Raumsystem \mathbb{C}_{2v} senkrecht zur Achse der leitenden Zone hinsichtlich seiner Auslöschungen geprüft werden, um dadurch die Gesamtheit der zonalen Auslöschungen innerhalb der leitenden Zonen zu gewinnen. Da die dritte Koordinate außerhalb des ebenen Raumsystems, also parallel der Zonenachse bei einfachster Wahl des Koordinatensystems (es sei die Koordinate p) nicht interessiert, wenn die Zone allein und nicht das gesamte Indizesfeld untersucht wird, genügt es, die ebenen Diskontinuen einseitig (also im Sinne von Niggli-Polyá) zu betrachten. Wie bereits erwähnt, bestehen unter den Operationen der dreidimensionalen, integralen Selektion und der zweidimensionalen, zonalen Parallelen, die im Falle der zonalen Betrachtung die Gleitspiegelung beispielsweise als Analogon zur mehrfach primitiven Translationsgruppe erscheinen läßt, usw. Der Weg der Untersuchung des ebenen Diskontinuums ist dem in § 5 beschrittenen analóg: auch hier wird man fragen, ob Örter bestehen, für deren Komplexe weniger als qz (z = Zähligkeit der allgemeinen Punktlage) Punkte notwendig sind, um ein q -zähliges Auslöschungsgesetz zu erzeugen. Diese Frage führt auf die Punktsymmetrien mit kleinerem z und auf die Örter elementarer Auslöschungen, für welche die Einzelpunktlage bereits in sich die beobachteten Auslöschungen enthält. Als unabhängig zur Wahl der Punktlage gültige Auslöschungsgesetze kommen nur in Betracht: Kantenhalbierung, Flächenzentrierung und Besetzung der $\frac{1}{4}$ -Masche des ebenen Gitters, da dies bei einfach primitiv gewählter Translationsgruppe die einzig möglichen Gleitkomponenten sind.

Um aus den Selektionseigenschaften des ebenen Raumsystems das Verhalten der Auslöschungen in seiner Gänze abzuleiten, muß zusätzlich die dritte Koordinate, die nicht in das ebene Diskontinuum fällt, be-

trachtet werden. Diese Koordinate bestimmt mit ihrem Verhalten bei Ausführung der Operationen, welche das zonale Gesetz erzeugen sollen, ob dieses nur zonal, oder mehrfach zonal oder integral gilt. Irrationale Differenzen in der p -Koordinate der einzelnen, nach zwei Dimensionen einander rational zugeordneten Punkte haben ein einfach zonales Auslöschungsgesetz zur Folge, unbestimmt rationale p -Differenzen ein mehrfach zonales und bestimmt rationale p -Differenzen ein integrales Auslöschungsgesetz. Der spezielle Fall, daß die p -Koordinate innerhalb der rationalen Anordnung konstant ist, führt auf ein Auslöschungsgesetz, das in gleicher Form, wie es in der betrachteten Zone auftritt, im ganzen Indizesfeld besteht. Unter diesen Gesichtspunkt gehört insbesondere der folgende Fall: Ist senkrecht zur betrachteten Zone eine Schar Spiegelebenen vorhanden, so wird p für Punktlagen auf den Spiegelebenen konstant sein. Damit ist aber das in der Zone gültige Auslöschungsgesetz in gleicher Form im gesamten Indizesfeld vorhanden, und es ist demzufolge eine Besetzung der Spiegelebenen allein ausgeschlossen, um durch Komposition von Punktlagen C_s ein beobachtetes, zonales Auslöschungsgesetz zu erzeugen. Um bei der Untergruppe \mathbb{C}_s^1 ein nur zonales Verhalten zu erzeugen, müssen zur Komposition in bezug auf \mathbb{C}_s^1 allgemeine Punktlagen benutzt werden, also zwei Komplexe der Zähligkeit $2t$, wenn t die Zähligkeit in der Spiegelebene bedeutet. Ist eine Basisgruppe aus einer Reihe von Streuzentrensorten aufgebaut, welche alle in der Anzahl 2 vorkommen, so ist für ein zonales Auslöschungsgesetz die Gleit- Spiegelung als erzeugende Operation sichergestellt, da nach dem Gesagten die Zahl der vorhandenen Streuzentren nicht reichen würde, um durch Komposition bei der Untergruppe \mathbb{C}_s^1 das zonale Gesetz abzuleiten. Enthält eine solche Basis neben in der Zahl 2 vorhandenen Streuzentren solche der Anzahl vier, so gilt für eine Sorte dieser letztern, daß sie außerhalb der Spiegelebenen liegen muß, also sicher die Symmetriebedingung C_1 hat, wenn sich nicht aus andern Gründen die Spiegelung aus den erzeugenden Operationen ausschließen läßt.

Die geometrischen Aussagen eines zonalen Auslöschungsgesetzes ergeben eine Projektion der Basisgruppe auf die Koordinatenebene, mit welcher die Zonenachse nicht komplanar ist. Ohne den Geltungsbereich der Auslöschungen zu kennen, werden durch die zonalen Auslöschungsgesetze Geraden parallel der Zonenachse festgelegt, auf welchen die einzelnen Streuzentren zu lokalisieren sind. Auswahlregeln, die mehrfach zonal gelten oder nach (hkl) integral bestehen, erlauben erst, die Plätze innerhalb dieser eindimensionalen Bereiche zu fixieren. Sind keine solchen Auslöschungen vorhanden, so ist es der allgemeinen Intensitätsdiskussion vorbehalten, diese Aufgabe zu lösen. Wie eingangs betont, wird diese

sich auf die Auslöschungen der einzelnen Komplexe stützen müssen, um die Fälle, da eine Reihe von Streuzentren an der Intensität eines Reflexes keinen Anteil nehmen, überblicken zu können. Die Auswertung gestaltet sich gemäß den allgemein gegebenen Überlegungen. Im Falle mehrfach zonaler Auslöschungsgesetze ergibt die »Periode« der Zonen gleicher Auslöschungsgesetze unmittelbar den Wert der unbestimmt rationalen p -Koordinate. Nach dieser Richtung dürfte die Diskussion der Schichtliniendiagramme besonders wertvoll sein; ein Näherungsverfahren wird dann am Platze sein, wenn Schichtlinien angenäherte Übereinstimmung in ihren Intensitäten besitzen. Wie früher betont ist auch bei der mehrfach zonalen Selektion nicht nur der Fall mit der Intensität Null von Interesse, sondern auch eine gleiche Abfolge der Intensitäten innerhalb einer Schichtlinie dürfte eine wesentliche Feststellung sein (als mehrfach zonale Gleichheitsregel). Hinsichtlich der mit der Beobachtung eines Auslöschungsgesetzes verträglichen Freiheiten in der Wahl der Basiskoordinaten ist folgendes zu bemerken: Ein q -zähliges zonales Auslöschungsgesetz reduziert bei ursprünglich s unbekanntem Koordinatentripeln in der Basis deren Zahl analog wie bei der integralen Selektion auf $\frac{s}{q}$ solche. Dabei sind jedoch die je q Koordinatentripel wegen der zonalen Auslöschungen nur nach zwei Koordinaten bestimmt; ihre dritte Koordinate (p in unserer Betrachtung) gehört mit den restlichen $\frac{s}{q}$ Koordinatentripeln zu den noch unbekanntem Bestimmungsstücken der Basis. Diese Freiheit der dritten Koordinate läßt folgende Aussagen zu: Ein zonales Auslöschungsgesetz bleibt erhalten, wenn der Streufaktor in seinem imaginären Teil (seiner Phase) nur von dieser Koordinate abhängt. Ist das Streuzentrum ein mehratomiges Gebilde, so kann dasselbe in den verschiedenen Positionen eine beliebige Deformation in Richtung der Zonenachse des Auslöschungsgesetzes erfahren, ohne daß die zonale Auswahl unter den Reflexionen vernichtet würde. Erst die zusätzliche Forderung, daß die Streugebilde an den verschiedenen Orten unter ihren Teilchen gleiche Abstände besitzen sollen, bedingt, daß an den verschiedenen Orten geometrisch gleiche Teilchengruppen vorliegen. Wenn dieser zusätzlichen Forderung genügt wird, erhält der oben angeführte Fall, in welchem die Gleitspiegelung als erzeugende Operation gesichert gelten kann, eine entsprechend erweiterte Geltung.

Die Frage nach den erzeugenden Operationen der zonalen Auslöschungsgesetze erledigt sich analog derjenigen nach den erzeugenden Operationen der nach (hkl) integralen Auslöschungsgesetze. Wegen der stets vor-

handenen Äquivalenz von Kompositionen zu Symmetrieoperationen gilt auch hier, daß sich lediglich entscheiden läßt, ob Kompositionen unter den erzeugenden Operationen notwendigerweise vorhanden sind. Die maßgebenden Überlegungen sind in § 5 enthalten. Als weiteres entscheidendes Kriterium tritt das zu Eingang des laufenden Paragraphen erwähnte, daß die von Symmetrieoperationen erzeugten, zonalen Auslöschungsgesetze auf bestimmte, allgemein angebbare Zonen beschränkt sind.

Noch gelten für die verschiedenen leitenden Zonen einige allgemeine Beziehungen. Der Strukturanalytiker wird bei der Untersuchung der zonalen Gesetze so vorgehen, daß er unterscheiden wird, ob die Klasse eindeutig bekannt ist, oder ob sich nur die Lauesymmetrie ermitteln läßt, oder ob schließlich ein nur pseudohöhersymmetrisches Verhalten vorliegt. Für diese einzelnen Fälle ergibt sich:

a) Zonale Auslöschungsgesetze bei bekannter Klasse.

Die leitenden Zonen sind bei bekannter Klasse eindeutig gegeben. Ebenso folgt aus der Klassensymmetrie, in welchen weiteren Zonen durch Drehung oder Schraubung oder Drehspiegelung ein zonales Auslöschungsgesetz durch Symmetrieoperationen erzeugt werden kann. Für die Äquivalenzbetrachtung der zonalen Auslöschungsgesetze, soweit sie als Raumgruppenkriterien zur Unterscheidung der Raumsysteme einer Klasse in Betracht kommen, genügt die Untersuchung der leitenden Zonen. Dabei ist wesentlich: Unter den Symmetrieoperationen können keine äquivalenten Operationen existieren, da die geforderte Gruppe \mathcal{C}_s senkrecht zur Zonenachse ein durch Drehung oder Drehspiegelung erzeugtes zonales Auslöschungsgesetz automatisch zum nach (hkl) integralen Auslöschungsgesetz erheben würde. Ein zu einem Raumgruppenkriterium (d. h. zu einem zonalen Auslöschungsgesetz in der leitenden Zone eines Raumsystems) äquivalentes, zonales Auslöschungsgesetz kann innerhalb der zu einer Klasse isomorphen Raumsysteme nicht durch den speziellen Charakter des Gitterkomplexes (oder der Gitterkomplexe) bedingt sein, sondern geht auf die besondere Art der Ineinanderstellung der Gitterkomplexe zurück. Als äquivalente Operationen kommen somit unter diesen Bedingungen nur Kompositionen in Betracht.

b) Zonale Auslöschungsgesetze bei bekannter Lauegruppe.

In diesem Falle wird man zweckmäßig von der höchst symmetrischen Klasse der gefundenen Lauesymmetrie ausgehen, und deren leitende Zonen zunächst derart diskutieren, als ob diese Klasse sicher erwiesen wäre. Die Unsicherheit in der Klassenbestimmung wirkt sich daran anschließend

so aus, daß unter den äquivalenten Operationen der zonalen Auslöschungsgesetze nunmehr Symmetrieeoperationen, Drehungen oder Schraubungen oder Drehspiegelungen möglich sind. Die eingehende Darstellung der möglichen Beziehungen unter den 32 Klassen wird bei der Besprechung der Raumsystemsbestimmung erfolgen. Für den Fall, daß eine niedriger symmetrische Klasse vorliegt, ist die Lokalisierung der Streuzentren im Raum der Nichtidentität an bestimmte Örter gebunden. Diese Örter sind dabei mit den Spiegelebenen im höher symmetrischen Kristallraum identisch. Eine weitere Einschränkung ergibt sich daraus, daß Punkte solcher Örter in einzelnen Fällen notwendig nicht nur ein zonales Gesetz in einer Zone, sondern gleichzeitig in einer zweiten geben. In solchen Fällen sind Äquivalenzen in der niedriger symmetrischen Klasse von vornherein auf einen Teil der Raumsysteme der höchst symmetrischen Klasse beschränkt. Auch auf diesen Punkt wird der § 9 zurückkommen.

c) Zonale Auslöschungsgesetze außerhalb der Lauegruppe.

Solche Auslöschungen sind auf den betreffenden Kristallraum bezogen kompositionsmäßig bedingte Auslöschungen; sie sind dadurch ausgezeichnet, daß ein Kristallraum existiert, in welchem sie elementare Auslöschungen sein können. Die Betrachtung von Pseudosymmetrieeen wird daher die leitenden Zonen höherer Klassen bei der Untersuchung niedrigsymmetrischer besonders zu beachten haben.

§ 7. Diskussion serialer Auslöschungsgesetze.

Seriële Auslöschungsgesetze erfordern zwei irrationale Koordinaten neben einer bestimmt rationalen, damit sie einfach serial (und nur in dieser Weise) gelten. Ist jedoch eine der zur Operation willkürlichen Koordinaten nicht irrational, sondern unbestimmt rational, so gilt das Auslöschungsgesetz mehrfach serial. Die verschiedenen Ebenenserien liegen dabei alle in der Zone, welche durch die Achse der sich irrational verhaltenden Koordinate definiert wird. Sind beide Koordinaten statt irrational unbestimmt rational, so gilt das Gesetz zunächst in den beiden Gruppen von Ebenenserien der Zonen parallel der Koordinatenachsen in der Ebene senkrecht zur Schar der Drehungs- oder Schraubenachsen. Zudem aber sind in allen jenen Ebenenserien die gleichen Auslöschungen zu finden, welche sich aus diesen beiden Mannigfaltigkeiten durch Addition irgendwelcher zwei Tripel (hkl) ergeben.

Analog zu den zonalen Gesetzen ist auch bei den serialen Auslöschungsgesetzen die Lage der davon betroffenen Ebenenserie relativ zu den Symmetrieelementen wesentlich. An Symmetrieeoperationen sind nach Tabelle I Schraubung und Drehspiegelung allein als erzeugende Operationen

serialer Auslöschungsgesetze möglich. Die diesen Auslöschungsgesetzen zugehörigen Geltungsbereiche im Indizesfeld sind entweder Ebenenserien senkrecht zu Scharen von Schraubenachsen (die sich immer als Ebenen parallel zu einer Koordinatenebene wählen lassen) oder im Falle der Drehspiegelung Ebenenserien senkrecht zu Drehspiegelachsen¹⁾ (auch hier ist die Ebenenserie durch geeignete Wahl der Achsen stets in eine der Koordinatenebenen zu transformieren). Gilt eine seriale Auswahlregel für eine andere Ebenenserie, so kann dieselbe nicht eine elementare sein. Bei der Betrachtung der Ebenenserien senkrecht zu Dreh- oder Schraubenachsen, welche die leitenden Ebenenserien eines Kristallraumes darstellen, muß folgender, früher abgeleitete Satz beachtet werden: Gehört eine leitende Ebenenserie einer leitenden Zone an, so ist ein in der leitenden Ebenenserie gültiges seriales Auslöschungsgesetz in der zonalen Selektion der betreffenden leitenden Zone enthalten. Es genügt demzufolge, die leitenden Ebenenserien zu diskutieren, welche außerhalb der leitenden Zonen liegen. Die Äquivalenzbetrachtungen sind somit gleichfalls auf diese Ebenenserien allein anzuwenden, da nur sie neue Resultate gegenüber § 6 liefern.

An Kompositionen, welche auf seriale und nur seriale Auswahlregeln führen, sind möglich:

a) Kompositionen von Punktlagen ohne Freiheitsgrad, wenn nur eine Koordinate zur Zähligkeit der Komposition sich bestimmt rational verhält. Das Gesetz gilt naturgemäß wegen der stets vorhandenen Rationalität der Abstände solcher Punktlagen mehrfach serial.

b) Kompositionen von Punktlagen mit einem Freiheitsgrad, wenn wie oben wiederum nur eine Koordinate bestimmt rational ist. Diese letztere muß die Koordinate parallel der Achsenschar sein, so daß dann die beiden andern, durch die Abstandsverhältnisse der Achsen gegebenen Koordinaten unbestimmt rational sein müssen. Die Auslöschungen sind wegen der stets rationalen Abstände der Achsen mehrfach serial. Wäre eine der beiden Koordinaten außerhalb der Achsenrichtung bestimmt rational (diejenige in der Achsenrichtung unbestimmt rational oder irrational), so würde das Gesetz ein zonales sein, da die beiden Koordinaten außerhalb

1) Im Falle der zweizähligen Drehspiegelachse (Inversion) kommen dabei sämtliche drei Koordinatenebenen in Frage, entsprechend der Unbestimmtheit der Achsenrichtung in diesem Falle. Für die vierzählige Drehspiegelachse ist die Achsenrichtung eindeutig gegeben; in jenem Falle muß natürlich stets der nichtprimitive Charakter der Operation in Betracht gezogen werden, indem man bei S_4 zunächst die Untergruppe C_2 allein betrachtet. Die sechszählige Drehspiegelachse betrachtet man in diesem Zusammenhang als $C_3 + C_i$.

der Achsenrichtung entweder beide bestimmt rational oder beide unbestimmt rational sind.

c) Kompositionen von Punktlagen mit zwei Freiheitsgraden. Hierbei sind folgende Fälle zu unterscheiden:

1. Die beiden Koordinaten in der Spiegelebene sind irrational (bzw. unbestimmt rational), so daß die Koordinate außerhalb derselben bestimmt rational, die Zähligkeit der Komposition somit den Abstandsverhältnissen der beiden Spiegelebenen entsprechend beschaffen sein muß.

2. Eine Koordinate in der Spiegelebene ist bestimmt rational; die Auslöschungen gelten dann mehrfach serial, da der Abstand der Spiegelebenen stets eine rationale Größe darstellt.

In beiden Fällen muß die Komposition Punktlagen umfassen, welche auf Spiegelebenen liegen, die nicht ein und derselben Schar gleichwertiger angehören.

d) Kompositionen von Punktlagen mit drei Freiheitsgraden, wobei eine Koordinate bestimmt rational, die zwei andern entweder unbestimmt rational oder irrational sind.

Im Falle der allgemeinen Basisgruppe darf der einzelne Komplex, der mit andern eine Komposition bildet, in sich wohl integrale oder zonale Auslöschungen besitzen; wesentlich ist dabei nur, daß zum mindesten ein Komplex existiert, der die nur serialen Auslöschungen besitzt, damit nicht durch gemeinsame Nullstellen eine zonale oder integrale Auswahlregel sich ergeben kann. Das bedingt, daß nicht das seriale Verhalten einer Zone allein zu diskutieren ist, sondern ebenso sehr jene zonalen und integralen Auslöschungsgesetze, die auf die betreffende Ebenenserie spezialisiert ein bestimmtes, seriales Auslöschungsgesetz ergeben. Die Gesamtheit aller dieser Auslöschungsgesetze einer bestimmten Ebenenserie folgt aus der Betrachtung eines eindimensionalen Diskontinuums, da die Auslöschungen der beiden Fälle miteinander identisch sind. Die Ableitung beschreitet dabei den vollständig analogen Weg, der in §§ 5 und 6 zum Ziel führte. Wiederum wird dabei der Geltungsbereich des Auslöschungsgesetzes im Indizesfeld durch die Koordinaten außerhalb des eindimensionalen Diskontinuums bestimmt. Auf die einzelnen Möglichkeiten erübrigt sich nach der eingehenden Darstellung der vorangehenden Paragraphen einzutreten.

Die geometrischen Aussagen serialer Auslöschungsgesetze sind die folgenden: Durch ein seriales Auslöschungsgesetz der Zähligkeit q werden unter den s zunächst unbekanntem Koordinaten-tripeln innerhalb einer rationalen Gruppe von Punkten q Koordinaten festgelegt. Es bleiben somit $\frac{s}{q}$ vollständig unbe-

stimmte Koordinatentripel, während in allen andern nur zwei Koordinaten (und zwar stets dieselben zwei Koordinaten) unbekannt bleiben. Geometrisch wird durch ein seriales Auslöschungsgesetz die Lokalisierung der Streuzentren auf Ebenen parallel der Ebenenserie, die Träger des Auslöschungsgesetzes ist, in bestimmten Abständen voneinander fixiert. Die Lage der Streuzentren innerhalb dieser Ebenen ist eine zunächst völlig willkürliche, die sich erst aus eventuell vorhandenen integralen oder zonalen Auslöschungsgesetzen oder einer Betrachtung der Intensitäten überhaupt ergeben kann. Ein Streuzentrum kann nach zwei Koordinaten in seinem Streufaktor imaginäre Anteile besitzen, ohne das seriale Auslöschungsgesetz zu vernichten. Ein mehratomiges Streuzentrum kann nach zwei Koordinaten eine beliebige Deformation erfahren und bleibt in allen derart möglichen Deformationen mit ein und demselben serialen Auslöschungsgesetz verträglich. Die Bedingung, daß ein Streuzentrum an verschiedenen Orten im Kristallraum gleiche innere Teilchenabstände besitzen soll, bedeutet noch keine Wiederholung in Parallelstellung, sondern es ist eine beliebige Rotation der Teilchengruppen gegeneinander mit der Drehungs- oder Schraubenachse als Rotationsachse möglich. Nur für eine Rotation um volle Perioden 2π ergibt sich Parallelstellung der Streuzentren.

Die Unterscheidung von serialen Auslöschungsgesetzen nach der Art der leitenden Ebenenserien (Ebenenserien der Klasse, der Lauegruppe, der höher symmetrischen Lauegruppen) geschieht analog den Zonen in § 6.

a) Seriale Auslöschungsgesetze bei bekannter Klasse.

Eindeutig bestimmte Klassen lassen ohne weiteres die möglichen leitenden Ebenenserien angeben, immer natürlich unter Beachtung des Satzes von Seite 43. Auch hier läßt sich eine Ausschließung der Symmetrioperationen unter den äquivalenten Operationen einer serialen Selektion aussprechen: Ein seriales Auslöschungsgesetz, das ein Raumgruppenkriterium ist (also in der leitenden Ebenenserie eines Raumsystems gilt), kann in den Raumsystemen isomorph der betreffenden Klasse kein ihm äquivalentes besitzen, das durch den speziellen Charakter der Gitterkomplexe bedingt wäre. Es kann nur die besondere Komposition von Gitterkomplexen sein, die eine dem serialen Raumgruppenkriterium äquivalente Selektion bedingen kann. An erzeugenden Operationen kommen in diesem Falle somit nur Schraubung und Komposition in Frage. Dabei kann die Komposition naturgemäß keine Punktlagen auf den Drehungsachsen verwenden, da damit notwendig zonale oder integrale Auslöschungen verbunden wären. In einem Raumsystem, welches Drehungs-

achsen besitzt, sind dementsprechend zur Komposition mehr Punktlagen notwendig, als im Falle des Raumsystemes mit Schraubenachsen. Besitzt das erste Raumsystem nur Drehungsachsen, das andere entsprechende Schraubenachsen mit reiner Schraubung, so müssen im ersten Raumsystem so viele allgemeine Punktlagen komponiert werden, um das seriale und nur seriale Verhalten des zweiten zu erzeugen, als die Zähligkeit der betreffenden Drehungs- resp. Schraubungsachsen beträgt. Weitere Komplexe können hernach auf den Drehungsachsen gewählt werden, weil die erste, allgemeine Komposition jede zonale oder integrale Selektion vernichtet.

b) Seriale Auslöschungsgesetze bei bekannter Lauesymmetrie.

Auch im Falle der serialen Selektion wird bei der Diskussion einer Lauegruppe zweckmäßig von der höchst symmetrischen Klasse ausgegangen. In der Lauegruppe als leitende Ebenenserien überhaupt mögliche können sich gegenüber der höchst symmetrischen Klasse verschieden verhalten: Entweder sind sie in einer der leitenden Zonen dieser Klasse enthalten, und ihre Diskussion ist demzufolge in den unter § 6 gemachten Bemerkungen enthalten, oder sie sind auch in der höchst symmetrischen Klasse leitende Ebenenserien außerhalb der leitenden Zonen geblieben. Dieser Fall allein fällt hierher. Damit eine Erweiterung der möglichen Äquivalenzen eintritt, das heißt, unter die erzeugenden Operationen neben Komposition und Schraubung noch die Drehspiegelung tritt, muß eine Klasse mit reiner Drehung (Schraubung) und eine solche mit reiner Drehspiegelung gleicher Zähligkeit oder mit Zähligkeiten, die einen gemeinsamen Teiler besitzen, in der betreffenden Lauegruppe vorhanden sein. Die ins Einzelne gehende Darstellung für die verschiedenen Lauegruppen ist § 9 vorbehalten.

c) Seriale Auslöschungsgesetze außerhalb der Lauegruppe.

Solche Auslöschungen sind notwendigerweise kompositionsmäßig bedingte, jedoch insofern spezielle dieser Art, als die Kompositionen derselben als Pseudosymmetrieelemente aufgefaßt werden können. Die Untersuchung der Anklänge an höhere Symmetrie wird neben den pseudoleitenden Zonen die entsprechenden Ebenenserien in gleicher Weise berücksichtigen müssen.

§ 8. Die Bestimmung der Translationsgruppe.

Die Bestimmung der Translationsgruppe gründet sich auf die Untersuchung der nach (hkl) integralen Selektion. Zunächst wird gefragt, ob eine Folge von Auslöschungen vorhanden ist, welche

ihrem Bau nach durch eine mehrfach primitive Translationsgruppe bedingt sein könnte. Hernach stellt sich die Frage, welche weiteren Operationen des Diskontinuums den Operationen einer mehrfach primitiven Translationsgruppe äquivalent sind. Strukturtheoretisch ist dann die Gesamtheit dieser erzeugenden Operationen als gleich wahrscheinlich zu betrachten und daher als gleichberechtigt der gesamten weiteren Diskussion zugrunde zu legen.

Die Äquivalenzbetrachtung erledigt sich als Spezialfall der integralen Selektion, wie sie in ihrer allgemeinen Form in § 5 behandelt wurde. Die von den mehrfach primitiven Translationsgruppen geforderten Auslöschungen führen insofern auf spezielle, nach (hkl) integrale Auslöschungsgesetze, als die ihnen entsprechenden, rationalen Punktanordnungen besondere, nämlich die der mehrfach primitiven Bravais-Gitter darstellen müssen. Die Zähligkeit der Auslöschungsgesetze und die Form der ihnen zugeordneten Kongruenzen sind dadurch allgemein festgelegt. Bei normaler Wahl der Achsen treten lediglich zwei- oder dreizählige Auswahl-faktoren auf und zwar maximal deren zwei. Die Kongruenzen haben bei normaler Achsenwahl die Moduln 2 oder 3. Diese Eigenschaften der von mehrfach primitiven Translationsgruppen erzeugten Auslöschungsgesetze bedingen zwei für die Strukturanalyse wesentliche Konsequenzen: einmal ist dadurch die Zahl der integralen, kristallstrukturell wichtigen Auslöschungsgesetze als eine relativ kleine Mannigfaltigkeit festgelegt, und zudem genügt es offenbar, zur Feststellung der Primitivität der Translationsgruppe einen Teil des Indizesfeldes zu betrachten.

Unter den mehrfach primitiven Translationsgruppen sind zwei Typen zu unterscheiden:

a) solche mit Punktanordnungen, die im Sinne des § 2 primitive Teilmengen bilden. Die von der Translationsgruppe erzeugte, rationale Punktanordnung läßt sich nicht weiter in Teilmengen zerlegen; hierher gehören die einfach zentrierten (flächenzentriert und innenzentriert) Translationsgruppen und die rhomboedrische Translationsgruppe.

b) solche mit Punktanordnungen, welche sich in kleinere primitive Teilmengen zerlegen lassen. Einziger Fall ist die allseits flächenzentrierte Translationsgruppe, welche eine Zerlegung in zwei einfach flächenzentrierte Anordnungen zuläßt.

Bei a) entspricht der Translationsgruppe gemäß unserer Festsetzung ein einziger Auswahlfaktor, bei b) hingegen sind zwei Auswahlfaktoren vorhanden, entsprechend der Umformung des viergliederigen Ausdruckes

$$[1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(l+h)}] \text{ in } [1 + e^{\pi i(h+k)}] \cdot [1 + e^{\pi i(k+l)}].$$

Daraus ergibt sich, daß die Mannigfaltigkeit der Äquivalenzen für die allseits flächenzentrierte Translationsgruppe eine wesentlich größere sein muß, als für die beiden einfach zentrierten Translationsgruppen. Die Diskussion soll für die einzelnen Fälle getrennt erfolgen; zunächst werde jedoch die Wahl der Identitätsperioden überhaupt der entsprechenden Prüfung unterworfen.

a) Die Wahl der Identitätsperioden.

Integrale Auslöschungsgesetze können eine zu kleine Identitätsperiode vortäuschen, indem die fehlenden Reflexe übersehen und die vorhandenen dementsprechend falsch indiziert werden. Derartige Auslöschungsgesetze besitzen die folgenden Auswahlaktoren:

$$[1 + e^{\pi i h}]; [1 + e^{\frac{2\pi i}{3}h} + e^{\frac{4\pi i}{3}h}]; [1 + e^{\pi i h}] \cdot [1 + e^{\frac{\pi i}{2}h}]; \dots$$

im Falle einer einzigen reduzierten Achse. Sie stellen Produkte solcher Faktoren dar, wenn mehrere Achsen reduziert sind, etwa im Falle, daß alle drei Achsen halbiert erscheinen, folgendermaßen:

$$[1 + e^{\pi i h}] \cdot [1 + e^{\pi i k}] \cdot [1 + e^{\pi i l}].$$

Damit von den drei Koordinatenachsen n reduziert erscheinen, sind n erzeugende Operationen von entsprechenden Auslöschungsgesetzen notwendig. Die Symmetrieeoperationen ergeben nur eine beschränkte Mannigfaltigkeit von Achsenreduktionen; darüber orientieren die folgenden Sätze:

a) Eine Symmetrieeoperation der Zähligkeit n kann eine Identitätsperiode maximal auf den Bruchteil $1/n$ ihrer wahren Länge reduzieren.

b) Eine Symmetrieeoperation kann nur Achsen reduzieren, welche zu den Symmetrieelementen in bestimmten Lagebeziehungen stehen, nämlich: Achsen senkrecht auf Spiegelebenen, Achsen senkrecht auf Drehungsachsen, Achsen in Gleitspiegelebenen, Achsen parallel Schraubenachsen. Nur im Falle der Drehspiegelung kommt eine Reduktion aller Achsen in Frage.

c) Durch Symmetrieeoperationen kann in den Raumsystemen mit einer charakteristischen Untergruppe höchstens eine Achse, in Raumsystemen mit zwei charakteristischen Untergruppen können maximal zwei Achsen reduziert sein, während erst in den Raumsystemen mit drei charakteristischen Untergruppen die Möglichkeit der Reduktion aller drei Achsen besteht.

Für eine bestimmte Klasse lassen sich somit die elementar möglichen Achsenreduktionen ihrem Charakter nach allgemein angeben. Immer besteht dann die Möglichkeit, daß durch Komposition diese elementaren und beliebige weitere Reduktionen bewirkt werden. In diesem Sinne

bleibt die Wahl der Identitätsperioden immer willkürlich; sehr oft wird die Bestimmung in chemisch komplex gebauten Basisgruppen auch lediglich den Sinn haben, Pseudoperioden festzusetzen.

b) Innenzentrierte Translationsgruppe.

Die integrale Auswahlregel: » (hkl) fehlt, wenn $h + k + l = \text{ungerade}$ « besagt zunächst nur, daß zu jedem Streuzentrum am Orte $[[m \ n \ p]]$ ein hinsichtlich seines Streuverhaltens gleich beschaffenes am Orte $[[m + \frac{1}{2} \ n + \frac{1}{2} \ p + \frac{1}{2}]]$ gehört. Es ist die Aufgabe der strukturtheoretischen Interpretation des Auslöschungsgesetzes, festzustellen, welche Operationen in den verschiedenen Kristallräumen eine solche Anordnung zu erzeugen vermögen, und mit welcherlei Punktlagen dies möglich ist. Die Gesamtheit dieser innenzentriert gebauten Basisgruppen müssen hinsichtlich der Innenzentrierung (die hier allein interessiert) als topologisch gleich angesehen werden. Den einfachsten Fall stellt die innenzentrierte Translationsgruppe insofern dar, als in den entsprechenden Kristallräumen zu jedem Aufpunkt im Kristallraum unabhängig zur Wahl von m, n, p ein ihm identischer an der Stelle $[[m + \frac{1}{2} \ n + \frac{1}{2} \ p + \frac{1}{2}]]$ gehört. Die Lokalisierung der Streuzentren ist daher in keiner Weise an irgendwelche Örter gebunden, wie dies etwa im Falle der durch Gleitspiegelung innenzentrierten Komplexe zutrifft.

Die Gesamtheit der erzeugenden Operationen ist folgende:

I. Symmetrieoperationen.

Operationen parallel den Koordinatenachsen (achsenparallele Operationen), die innenzentrierte Komplexe erzeugen, sind:

1. Gleitspiegelung mit diagonaler Gleitkomponente für die Punkte der Ebene, welche parallel den Gleitspiegelebenen und mitten zwischen zwei solchen liegt, z. B. $[[m \ n \ \frac{1}{2}]] + [[m + \frac{1}{2} \ n + \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}]]$.

2. Digonale Schraubung für die Punkte der Geraden, welche parallel den Schraubachsen laufen und sich in der Mitte zweier, diagonal miteinander verbundener Schraubachsen befinden, z. B. $[[\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ p]] + [[\frac{3}{2} \ \frac{3}{2} \ p + \frac{1}{2}]]$.

3. Tetragonale Schraubung, zugleich digonale Drehung für die Punkte auf den Achsen rein digonaler Drehung, z. B. $[[\frac{1}{2} \ 0 \ p]] + [[0 \ \frac{1}{2} \ p + \frac{1}{2}]]$.

4. Inversion für Punkte, die in der Mitte räumlich miteinander verbundener Symmetriezentren liegen, z. B. $[[\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}]] + [[\frac{3}{2} \ \frac{3}{2} \ \frac{3}{2}]]$.

5. Tetragonale Drehspiegelung: für Punkte, welche im Schnitt der reinen digonalen Drehungsachsen mit den Ebenen liegen, welche den Drehspiegelebenen parallel liegen und sich mitten zwischen zwei solchen befinden, z. B. $[[\frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2}]] + [[0 \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2}]]$.

Operationen nach Symmetrieelementen diagonal zu den Koordinatenachsen (diagonale Symmetrieelemente).

1. Gleitspiegelung mit Gleitkomponente in Richtung $[111]$ für Punkte der Gleitspiegelebene selbst, z. B. $[[m \ m \ p]] + [[m + \frac{1}{2} \ m + \frac{1}{2} \ p + \frac{1}{2}]]$.

2. Digonale Schraubung für Punkte der Geraden in den Ebenen der Schraubenachsen, welche den Schraubenachsen als Mittellinien parallel laufen, z. B. $[[m \ m + \frac{1}{2} \ 4]] + [[m + \frac{1}{2} \ m \ 3]]$.

Daraus folgt: Ein Raumsystem kann dann und nur dann innenzentrierte Komplexe besitzen, deren Innenzentrierung auf Symmetrieeoperationen beruht (elementar innenzentrierte Punkthaufen), wenn es eine der Untergruppen

$$\mathbb{C}_s^2, \mathbb{C}_2^2, \mathbb{C}_i, \mathbb{C}_4, \mathbb{C}_3$$

besitzt. Die Lage der Örter derart gebauter Komplexe ist für jede der Untergruppen eindeutig festgelegt.

Die neben diesen Untergruppen vorhandenen weiteren Untergruppen bestimmen, welcher Art die Punktlagen auf den Örtern innenzentrierter Komplexe sind, ob sich darunter Punktlagen mit Eigensymmetrieeen $\neq C_1$ befinden, oder ob sie Punktlagen enthalten, welche nicht nur innenzentriert, sondern mehrfach rational oder höher rational gebaute Komplexe ergeben. Aus der Diskussion der Schnittlinien der Örter innenzentrierter Komplexe mit den Punktsymmetrieelementen der zusätzlichen Untergruppen folgen die verschiedenen Sorten von Punktlagen, welche innenzentrierte Komplexe bilden und die Anzahlen, mit welchen solche spezielle, innenzentrierte Komplexe vorkommen. Aus der Untersuchung der Schnittlinien mit den Örtern von Auswahlregeln, die die Operationen der zusätzlichen Untergruppen erzeugen, ergeben sich die mehrfach rationalen Punktanordnungen. In der expliziten Darstellung¹⁾ der kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln sind diese Angaben bereits enthalten.

II. Kompositionen.

Eine zweite Gruppe zur innenzentrierten Translationsgruppe äquivalenter Operationen repräsentieren die Kompositionen, welche eine innenzentrierte Punktanordnung ergeben. Kompositionen dieser Art sind dadurch ausgezeichnet, daß sie (Gleichheit der »Kompositionsperiode«²⁾ mit der Identitätsperiode vorausgesetzt) stets homogen sind. Für die einzelnen Punktlagen bieten sich zur Komposition folgende Möglichkeiten:

a) Punktlagen ohne Freiheitsgrad: Punktlagen, welche in sich keine Selektion besitzen, die demzufolge sich der durch Komposition erzeugten Innenzentrierung überlagern würde, sind nur solche der Zähligkeit 4 in allen Klassen und zudem der Zähligkeit 3 in den kubischen Klassen. Alle andern Punktlagen ohne Freiheitsgrad besitzen

1) Siehe die eingangs angegebenen Tabellen über die triklinen, monoklinen, rhombischen und tetragonalen Raumgruppen. Die kubischen, rhomboedrischen und hexagonalen Raumsysteme werden in gleicher Weise demnächst ihre Darstellung finden.

2) Der Vektor, der die Grundpunkte der beiden komponierten Komplexe verbindet, muß auf die Identitätsperioden bezogen die Komponenten $\frac{1}{2}a$, $\frac{1}{2}b$, $\frac{1}{2}c$ besitzen. Die Innenzentrierung darf sich nicht auf eine Unterperiode der Basis beziehen.

Komplexe, welche in sich einen bestimmt rationalen Bau und damit entsprechende elementare Auslöschungen zeigen. Zur Komposition, die auf Innenzentrierung und nur auf Innenzentrierung führt, ist daher in jeder Klasse nur das symmorphie Raumsystem mit seinen Punktlagen der Zähligkeit 4 (ev. 3) befähigt.

b) Punktlagen mit einem Freiheitsgrad: Analog gilt hier: Nur Punkte der höchstzähligen Drehungsachsen in den Raumsystemen C_n , D_n , C_{nh} und Punkte auf den höchstzähligen Achsen C_{nv} in den Raumsystemen C_{nv} und D_{nh} kommen unter den Punktlagen mit einem Freiheitsgrad für Kompositionen, welche innenzentrierte und nur innenzentrierte Komplexe ergeben, in Frage. Alle andern Achsen C_n oder C_{nv} sind an sich bereits Träger weiterer Auslöschungen, welche zu den kristallstrukturell wichtigen gehören, besitzen also Gitterkomplexe, welche in sich bereits einen rationalen Bau aufweisen.

c) Punktlagen mit zwei und drei Freiheitsgraden können allgemein komponiert werden, abgesehen von jenen Bereichen, die innerhalb von Örtern elementarer Auslöschungsgesetze liegen. Indessen sind Spiegelebenen und Punktlagen C_1 nie als Ganzes Träger solcher, wenn die Translationsgruppe einfach primitiv ist.

Um zu entscheiden, in welchen Raumsystemen innenzentrierte und nur innenzentrierte Kompositionsanordnungen resultieren, ist die Kenntnis der in einem Raumsystem enthaltenen symmorphen Untergruppen wesentlich. Es steht somit die Möglichkeit, durch Komposition innenzentrierte (und nur innenzentrierte) Punkthaufen zu bilden, zu den elementar derart gebauten Punktanordnungen in einem gewissen Reziprozitätsverhältnis, indem es gerade die Symmetrieoperationen der nicht symmorphen Raumsysteme waren, welche innenzentrierte Komplexe erzeugten.

Die Forderung, daß ein Punkthaufen innenzentriert und nur innenzentriert sei, ist im Falle einer Basisgruppe aus einer einzigen solchen Gruppe von Punkten besonders wesentlich. Ist die Basis hingegen aus einer Reihe solcher mit verschiedenen Sorten von Streuzentren aufgebaut, so ist nur zu fordern, daß die einzelnen Komplexe weder elementar noch kompositionsmäßig weitere Nullstellen ergeben. Nachdem die gesamte integrale Selektion festgestellt wurde, kann hieraus für die Lokalisierung der Streuzentren eine Reihe von Verboten aufgestellt werden, indem man für die in der Basis vertretenen Teilchenanzahlen prüft, welche Bereiche des Kristallraumes bei einer gleichzeitigen Besetzung eine über die beobachtete Selektion hinausgehende Auswahl unter den Reflexionen ergeben würden.

e) Einfach flächenzentrierte Translationsgruppe.

Im Falle des Auslöschungsgesetzes $\ast(hkl)$ fehlt, wenn eine lineare Verbindung $h + k$ oder $k + l$ oder $l + h = \text{ungerade}$, muß sich aus dem resultierenden Strukturvektor der Basis der Auswahlfaktor $[1 + e^{\pi i(h+k)}]$ oder $[1 + e^{\pi i(k+l)}]$ oder $[1 + e^{\pi i(l+h)}]$ abspalten lassen, der auf die rationale Punktanordnung $\{[m \ n \ p]\} + [m + \frac{1}{2} \ n + \frac{1}{2} \ p]$ oder $\{[m \ n \ p]\} +$

$\{[m n + \frac{1}{2} p + \frac{1}{2}]\}$ oder $\{[m n p] + [m + \frac{1}{2} n p + \frac{1}{2}]\}$ führt. Da keine weiteren integralen Auslöschungen beobachtet sein sollen, ist dieser Faktor zudem der einzige, der sich als von den Variablen h, k, l allein abhängiger Anteil des Strukturvektors \mathfrak{S}_g ausklammern läßt. Wiederum kann es eine entsprechend einfach flächenzentrierte Translationsgruppe sein, die diese Auslöschungen bedingt. Dieser Schluß fordert aber zunächst, daß alle mit dieser Translationsgruppe äquivalenten Operationen streng ausgeschlossen werden. Deren Mannigfaltigkeit zeigt die folgende Zusammenstellung:

Äquivalente Symmetrieoperationen:

1. Gleitspiegelung mit diagonalen Gleitkomponente, wenn die Punktlage auf der Gleitspiegelebene selbst liegt. Zentrierte Koordinatenebene parallel zur Gleitspiegelebene, z. B. $[m n 0] + [m + \frac{1}{2} n + \frac{1}{2} 0]$.

2. Gleitspiegelung mit achsenparalleler Gleitkomponente für Punkte der Ebenen parallel den Gleitspiegelebenen in der Mitte zweier solcher. Zentrierte Fläche je nach Lage der Gleitkomponente eine der Koordinatenebenen senkrecht zur Gleitspiegelebene, z. B. $[m n \frac{1}{2}] + [m + \frac{1}{2} n \frac{3}{2}]$.

3. Digonale Drehung für die Punkte der Geraden, welche den Digyren parallel laufen und sich in der Mitte von zwei, diagonal miteinander verbundenen Drehungsachsen befinden. Zentrierte Koordinatenebene senkrecht zur Schar der Drehungsachsen, z. B. $[\frac{1}{4} \frac{1}{4} p] + [\frac{3}{4} \frac{3}{4} p]$.

4. Digonale Schraubung für die Punkte der Geraden, welche parallel den Schraubenachsen laufen und sich in der Mitte zwischen zwei achsenparallel verbundenen Schraubenachsen befinden. Zentrierte Koordinatenebene parallel zur Schraubenachsenschar, z. B. $[\frac{1}{4} 0 p] + [\frac{3}{4} 0 p + \frac{1}{2}]$.

5. Digonale Schraubung diagonal zu den Koordinatenachsen für Punkte der Schraubenachsen selbst. Zentrierte Fläche parallel zur Ebene der Schraubenachsen¹⁾, z. B. $[m m + \frac{1}{2} 0] + [m + \frac{1}{2} m 0]$.

6. Tetragonale Drehung für die Punkte auf den digonalen Drehungsachsen¹⁾, z. B. $[\frac{1}{2} 0 p] + [0 \frac{1}{2} p]$.

7. Inversion für die Punkte, welche sich in der Mitte zwischen zwei Symmetriezentren befinden, deren Verbindungsvektor die Richtung $[110]$ bzw. $[1\bar{1}0]$ oder eine daraus durch zyklische Vertauschung sich ergebende besitzt, z. B. $[\frac{1}{4} \frac{1}{4} 0] + [\frac{3}{4} \frac{3}{4} 0]$ bzw. $[\frac{1}{4} \frac{3}{4} 0] + [\frac{3}{4} \frac{1}{4} 0]$.

8. Tetragonale Drehspiegelung für die Punkte im Schnitt der reinen digonalen Achsenschar mit den Drehspiegelebenen¹⁾, z. B. $[\frac{1}{2} 0 0] + [0 \frac{1}{2} 0]$.

Man erkennt hieraus, daß zur elementaren Erzeugung einfach flächenzentrierter Anordnungen die Untergruppen \mathfrak{C}_8^2 , \mathfrak{C}_2^1 , \mathfrak{C}_2^2 , \mathfrak{C}_4^1 , \mathfrak{C}_2 , \mathfrak{C}_4^1 in einer Raumgruppe notwendigerweise enthalten sein müssen. Alle andern Raumgruppen besitzen einen Kristallraum, in welchem es nur mittels Kompositionen gelingt, derart gebaute Punkthaufen zu erzeugen.

1) In diesem Falle wird man durch Achsentransformation (Drehung der α_1 - und α_2 -Achse in der Ebene (001) um 45°) das einfach primitive, tetragonale Bravais-Gitter einführen.

Äquivalente Kompositionen:

Wie im Falle der innenzentrierten Translationsgruppe ist auch jede einfach flächenzentrierende Komposition eine homogene Komposition. Die Identitätsperiode muß dabei mit der Kompositionsperiode übereinstimmen. An einzelnen Kompositionen ergeben sich prinzipiell dieselben wie bei den innenzentrierten Punktanordnungen, insbesondere gilt dasselbe, was die Örter von Komplexen anbetrifft, deren Komposition auf einfach flächenzentrierte und nur einfach flächenzentrierte Anordnungen führen soll. Die Konsequenzen sind mutatis mutandis dieselben.

d) Allseits flächenzentrierte Translationsgruppe.

Der Auswahlregel: » (hkl) fehlt für gemischte Indizes« entspricht der Ausdruck $[1 + e^{\pi i(h+k)}] \cdot [1 + e^{\pi i(k+l)}]$ als Auswahlfaktorenaggregat. Die Aussage, die seine Existenz auf die Geometrie der Basis ergibt, fordert eine Zerlegung der gesamten Basispartikeln in einer solchen Weise, daß zu $[[m \ n \ p]]$ die drei weiteren Punkte $[[m + \frac{1}{2} \ n + \frac{1}{2} \ p]]$, $[[m + \frac{1}{2} \ n \ p + \frac{1}{2}]]$ und $[[m \ n + \frac{1}{2} \ p + \frac{1}{2}]]$ gehören. Diese Anordnung von Punkten kann auf eine allseits flächenzentrierte Translationsgruppe zurückgehen, aber ebenso gut kann eine der nachfolgend verzeichneten, äquivalenten Operationen vorliegen.

Die Punktanordnung der allseitigen Flächenzentrierung kann erzeugt werden durch folgende Operationen:

Symmetrieoperationen:

a) Die Translationsgruppe ist einfach flächenzentriert. Dieser Fall ist implizite in Fall c) enthalten, da dann lediglich nach Operationen gefragt werden muß, welche neben der durch die Translationsgruppe gegebenen Flächenzentrierung eine weitere Fläche zentrieren. Diese Überlegungen führen gegenüber der einfach flächenzentrierten Translationsgruppe und deren Äquivalenzen zu keinem grundsätzlich neuen Resultat.

b) Die Translationsgruppe ist einfach primitiv. Um dann die allseitige Flächenzentrierung durch Symmetrieoperationen zu erzeugen, muß ein Raumsystem zum mindesten zwei charakteristische Untergruppen besitzen, von denen je eine eine einfache Flächenzentrierung erzeugt. An möglichen Raumsystemen kommen zudem nur solche mit zwei charakteristischen Untergruppen in Betracht, die beide geradzählig sind. Alle andern Raumsysteme können bei einfach primitiver Translationsgruppe eine allseitige Flächenzentrierung nur durch Kompositionen (ganz oder teilweise) erhalten. An Kombinationen von Symmetrieoperationen, welche auf allseits flächenzentrierte Komplexe führen, sind möglich:

- Gleitspiegelung + Gleitspiegelung
- Gleitspiegelung + digonale Drehung
- Gleitspiegelung + digonale Schraubung
- Digonale Drehung + digonale Drehung
- Digonale Schraubung + digonale Schraubung
- Digonale Drehung + digonale Schraubung
- Tetragonale Schraubung, gleichzeitig digonale Drehung
- Tetragonale Drehspiegelung.

Außer den zwei letztgenannten Fällen sind alle andern unmittelbar durch Kombination aus dem unter c) Gesagten abzuleiten. Neu sind lediglich die Örter für die tetragonalen Symmetrieelemente: nämlich im Falle der tetragonalen Drehung Geraden parallel den Drehungsachsen, welche mitten zwischen zwei diagonal miteinander verbundenen tetragonalen Schraubenachsen, die gleichzeitig digonale Drehungsachsen sind, liegen. Z. B. $[\frac{1}{4} \frac{1}{4} p]$, $[\frac{3}{4} \frac{3}{4} p]$, $[\frac{1}{4} \frac{3}{4} p + \frac{1}{2}]$, $[\frac{3}{4} \frac{1}{4} p + \frac{1}{2}]$. Für die tetragonale Drehspiegelung: die Punkte in der Mitte zwischen räumlich miteinander verbundenen Drehspiegelzentren, z. B. $[\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{2}]$. Alle andern Örter sind Schnittgeraden oder Schnittpunkte von den früher erwähnten Örtern einfacher Flächenzentrierung.

Kompositionen:

a) Die Translationsgruppe ist einfach flächenzentriert. Dann ist wie im Falle, daß in einem einfach primitiven Raumsystem eine einfach flächenzentrierte Anordnung durch Komposition erhalten wurde, zu der translationsgruppenmäßig bestimmten Flächenzentrierung eine zweite durch Komposition zu erzeugen. Diese Kompositionen sind den bereits beschriebenen völlig analog.

b) Die vorhandenen Punktlagen zeigen im Bau ihrer Gitterkomplexe bereits einfache Flächenzentrierung. Durch Komposition läßt sich diese wie bei a) zur allseitigen Flächenzentrierung ergänzen.

c) Die einzelnen Punktlagen bilden keine rationalen Punktanordnungen. Dann muß die allseitige Flächenzentrierung ganz durch Kompositionen erzeugt werden. Von solchen Kompositionen sind alle Punktlagen auf Örtern einfacher, kristallstrukturell wichtiger Auslöschungsgesetze ausgeschlossen, da jedes derselben (ausgenommen die oben behandelten einfach flächenzentrierten) zusammen mit der allseitigen Flächenzentrierung auf eine dreifache Achsenreduktion führen würde.

Punktlagen ohne Freiheitsgrad: Vier Einpunktner, oder ein Einpunktner + ein Dreipunktner, nicht aber zwei Zweipunktner, da dieser Fall unter a) oder b) fällt.

Punktlagen mit einem Freiheitsgrad: Vier Punktlagen auf höchstwertigen Drehungsachsen C_n oder C_{nv} .

Punktlagen mit zwei und drei Freiheitsgraden können wie im Falle der einfach flächenzentrierten Translationsgruppe ohne Einschränkung komponiert werden, solange nicht Örter elementarer Auslöschungsgesetze besetzt werden.

d) Rhomboedrische Translationsgruppe.

Das nach (hkl) integral gültige Auslöschungsgesetz: $\triangleright(hkl)$ fehlt, wenn $h - k + l$ nicht durch drei teilbar« (bei schiefhexagonaler Achsenwahl), ist wie bei den übrigen, mehrfach primitiven Translationsgruppen nicht ein hinreichendes Kriterium für die rhomboedrische Translationsgruppe. Diese darf dann erst als gesichert gelten, wenn die nachfolgend angegebenen, zu ihr äquivalenten Operationen ausgeschlossen werden können.

An äquivalenten Symmetrieeoperationen kommt nur eine dreizählige Operation in Frage, und zwar, da bei der rhomboedrischen Punktanordnung alle drei Koordinaten Zusatzglieder besitzen, nur die trigonale Schraubung. Die rhomboedrische Anordnung ergibt sich durch die trigonale Schraubung für die Punkte der Geraden, welche im Schwerpunkt der in (001) von den trigonalen Schraubenachsen gebildeten, gleichseitigen Dreiecke die Ebene (001) durchstoßen.

An äquivalenten Kompositionen fallen in Betracht:

a) Punktlagen ohne Freiheitsgrad: Es gibt weder Dreipunktner noch Kombinationen von drei Einpunktnern noch eine solche eines Einpunktners mit einem Zweipunktner unter den Punktlagen ohne Freiheitsgrad, welche zueinander im Verhältnis der Rhomboederbedingung stehen.

b) Punktlagen mit einem Freiheitsgrad: Auf eine Rhomboedereruppe führen die Kompositionen von Punktlagen auf den Achsen $[001]_{00}$, $[001]_{\frac{1}{3}\frac{2}{3}}$ und $[001]_{\frac{2}{3}\frac{1}{3}}$. Dabei können Punktlagen ohne Freiheitsgrad vertreten sein, jedoch nicht solche Punktlagen mit einem oder ohne Freiheitsgrad, welche einem geometrischem Ort eines elementaren Auslöschungsgesetzes angehören.

c) Punktlagen mit zwei Freiheitsgraden: Es kommen hierfür nur die Punktlagen C_s in Frage, welche Spiegelebenen parallel der Trigyrengchar angehören, da nur dort Punktlagen mit den von der Rhomboederanordnung geforderten Abständen voneinander vorkommen.

d) Punktlagen mit drei Freiheitsgraden: Deren Komposition kann in beliebiger Weise erfolgen unter Beachtung der Örter elementarer Auslöschungen, indem keine Besetzung derselben in einer solchen Weise erfolgen darf, welche eine über die zur Rhomboederbedingung gehörige Zahl von Auslöschungen hinausgehende Zahl verbotener Reflexe fordern würde.

Die vorliegende Zusammenstellung der Äquivalenzen für die einzelnen mehrfach primitiven Translationsgruppen läßt deutlich erkennen, daß ein nach (hkl) integrales Auslöschungsgesetz in keiner Weise ein eindeutiges Kriterium für den Nachweis einer mehrfach primitiven Translationsgruppe sein kann. Wenn sich ein Eindeutigkeitsbeweis auch nur teilweise leisten läßt, dürfte die Untersuchung der möglichen Äquivalenzen doch das beste Mittel sein, um eine Übersicht über die mit den beobachteten Auslöschungen verträglichen, topologisch gleichen Basisgruppen hinsichtlich ihres möglicherweise translationsgruppenmäßig bedingten, rationalen Anteils zu gewinnen.

§ 9. Bestimmung des Raumsystems.

Die Bestimmung des Raumsystems hängt wesentlich davon ab, ob die Klasse, der das gesuchte Raumsystem isomorph sein muß, eindeutig erkannt wurde. Der gesamte Gang der Diskussion der Raumgruppenkriterien wird durch eine sichere Klassenbestimmung wesentlich abgekürzt. Wegen dieser prinzipiellen Bedeutung, die der Klassenbestimmung zukommt, sollen die Wege der Raumgruppenbestimmung für bekannte Klasse und für nur bekannte Lauesymmetrie voneinander getrennt skizziert werden. Es wird angenommen, daß die Lauesymmetrie sich auf alle Fälle eindeutig ermitteln lasse; ist auch dies nicht der Fall, so muß die Diskussion auf eine noch breitere Basis gestellt werden. Diese ergibt sich jedoch leicht aus dem Paragraphen, der von der Ermittlung der Pseudosymmetrien handelt.

Aus der Klasse oder andernfalls erweitert aus der Lauesymmetrie lassen sich die in Betracht kommenden, leitenden Zonen und Ebenenserien angeben. Deren Betrachtung ist für die Unterscheidung der Raumsysteme einer Klasse hinreichend. Wenn im folgenden von zonalen oder serialen Auslöschungsgesetzen die Rede ist, so sind damit stillschweigend stets Auslöschungen innerhalb der leitenden Zonen und Ebenenserien verstanden.

a) Zonale Raumgruppenkriterien und deren Diskussion.

Um das zonale Verhalten eines Raumsystems erschöpfend diskutieren zu können, ist es notwendig, neben der Gesamtheit möglicher, zonaler Auswahlregeln diejenige der möglichen integralen Auslöschungsgesetze überblicken zu können. Die zonalen Raumgruppenkriterien sind analog den Gesetzen, die über den Charakter der Translationsgruppe entscheiden, spezielle Fälle der überhaupt möglichen, zonalen Auslöschungsgesetze. Alle zonalen Raumgruppenkriterien haben die Gleitspiegelung als erzeugende Operation, und es ist demzufolge die Mannigfaltigkeit der Gleitspiegelungen im Diskontinuum, welche die Mannigfaltigkeit zonaler Raumgruppenkriterien festlegt. Der Charakter der zonalen Raumgruppenkriterien ist demzufolge auf eine kleine Zahl von Möglichkeiten beschränkt: Die Zähligkeit der zonalen Raumgruppenkriterien ist $2v$, wenn der Elementarbereich v -fach primitiv ist. Bei der üblichen Wahl der Elementarbereiche ist somit die maximale Zähligkeit gleich 8. Die Art der Gleitkomponenten bestimmen die Form der dem Auslöschungsgesetz entsprechenden Kongruenz. Im Falle, daß die Schar der Gleitspiegelebenen durch die übrigen Symmetrieelemente im Raume nicht vervielfacht wird, ergeben sich zwei mögliche Typen von Kongruenzen:

Gleitkomponente parallel zu einer Koordinatenachse, die Kongruenz betrifft nur einen der Indizes, nämlich denjenigen, der mit der betreffenden Koordinate im Strukturvektor multiplikativ verknüpft auftritt.

Gleitkomponente diagonal zu den Koordinatenachsen, die Kongruenz spricht eine Bedingung für die Summe der beiden Indizes aus.

Bei einfach primitiver Translationsgruppe sind als Komponenten der Gleitvektoren nur die Werte 0 und $\frac{1}{2}$ möglich. Die Auslöschungen sind demzufolge durch Kongruenzen nach dem Modul 2 darstellbar. Bei mehrfach primitiver Translationsgruppe ist neben diesen Werten der Wert $\pm \frac{1}{4}$ möglich, so daß die Kongruenzen gegebenenfalls den Modul 4 besitzen.

Werden die Gleitspiegelebenen durch die übrigen Symmetrieelemente nicht in Form einer Parallelschar, sondern in Form mehrerer solcher vervielfacht, so werden dadurch die Kongruenzen nicht geändert; sie

treten jedoch mit vertauschten Indizes mehrfach auf und sind gleichzeitig zu erfüllen, damit ein Reflex (hkl) die Intensität Null erhält.

Die strenge Diskussion des Selektionsverhaltens der leitenden Zonen einer Klasse oder einer Lauegruppe darf nicht nur die mit der zonalen Selektion äquivalenten, zonalen Auslöschungsgesetze betrachten, sondern muß ebenso alle integralen Auslöschungsgesetze prüfen, die eine Form besitzen, welche für eine bestimmte Zone spezialisiert ein Verhalten ergibt, das den möglichen Gleitkomponenten entspricht. Der Bau aller Komplexe, die in einer Zone ein von einer bestimmten Gleitkomponente gefordertes Verhalten ergeben können, läßt sich allgemein angeben. Für den Fall, daß die Basisgruppe aus einer einzigen rationalen Anordnung besteht, muß verlangt werden, daß diese ein zonales und nur zonales Gesetz besitzt. Wird jedoch eine Basis aus einer Reihe solcher aufgebaut, so kann ein Teil derselben sehr wohl Träger eines integralen Auslöschungsgesetzes sein, welches auf die untersuchte Zone spezialisiert das beobachtete Auswahlverhalten unter den Reflexen ergibt. Notwendig ist im Hinblick auf diese weitergehende Selektion nur, daß die Zahl der Nullstellen des resultierenden Strukturvektors dadurch nicht erhöht wird, was mit den beobachteten Auslöschungen unvereinbar wäre.

Zunächst sollen für die einzelnen Fälle zentraler Raumgruppenkriterien die überhaupt möglichen Äquivalenzen zusammengestellt werden. Es wird dabei davon ausgegangen, daß eine Reihe von Zonen Auslöschungen aufweisen, welche — wie oben angeführt — als von Gleitspiegelungen erzeugt denkbar sind. Für die Gesamtheit dieser zonalen Auslöschungsgesetze soll dann die Frage nach den ihnen äquivalenten gestellt werden. Sind mehrere Zonen dieser Art vorhanden, so ist es von wesentlicher Bedeutung, ob die Zonen ihrem Selektionsverhalten nach gleichwertig, oder bereits ihrem Selektionsverhalten nach ungleichwertig sind. Die beiden Möglichkeiten sollen als symmetrischer und unsymmetrischer Fall unterschieden werden. Während der unsymmetrische Fall ein hinreichendes Kriterium gegen eine höhere Symmetrie darstellt, ist umgekehrt der symmetrische Fall für eine höhere Symmetrie, deretwegen die Gleichwertigkeit bestehen könnte, eine zwar notwendige, nicht aber hinreichende Bedingung. Die nachfolgende Diskussion läßt die Symmetrieverhältnisse zunächst völlig außer Betracht. Es wird sich anschließend ergeben, wie die Mannigfaltigkeit der äquivalenten Operationen eine Einschränkung dadurch erfährt, daß die Lauesymmetrie oder die Kristallklasse selbst bekannt ist. Wenn der hier skizzierte Weg in dieser Hinsicht auch nicht der strukturanalytischen Methodik entspricht, so gibt er andererseits den besten Überblick über die allgemein vorhandene Mannigfaltigkeit von Äquivalenzbeziehungen.

A. Eine einzige Zone sei Träger eines möglicherweise durch Gleit- spiegelung erzeugten Auslöschungsgesetzes.

Die betreffende Zone wählen wir als $[004]$, da eine einfache Transformation unter zyklischer Vertauschung von Koordinaten und Indizes die Verhältnisse in den Zonen $[400]$ und $[040]$ aus den hier dargestellten ableiten läßt. An zonalen Raumgruppenkriterien sind die folgenden möglich:

I. $(hk0)$ fehlt, wenn $h =$ ungerade.

Die zugehörige rationale Punktanordnung lautet: $\{[mnp] + [m + \frac{1}{2}n p']\}$. Dabei ist $p \neq p'$ ¹⁾. Mögliche erzeugende Operationen:

a) Gleitspiegelung parallel (004) mit achsenparalleler Gleitkomponente. Das entsprechende Auslöschungsgesetz gilt nach $[mnp]$ integral.

b) Digonale Drehung um $[040]$ mit $m = \frac{1}{4}$. Die Punktlage muß $(400)_{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}}$ angehören.

c) Digonale Schraubung um $[400]$ mit $n = 0$ oder $\frac{1}{2}$. Die Punktlage liegt in $(040)_0$ oder $(040)_{\frac{1}{2}}$.

d) Inversion mit $m = \frac{1}{4}$ und $n = 0$ oder $\frac{1}{2}$. Die Punktlage liegt auf $[004]_{\frac{1}{4}, 0}$ oder $[004]_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}}$.

e) Komposition gemäß dem obigen Schema. Ausgeschlossen sind Kompositionen, welche nur Punktlagen in einer zu (004) parallelen Spiegelebene umfassen. Das zonale Gesetz I kann aus einem nach (hkl) integralen hervorgehen. Dies ist möglich, wenn einfach flächenzentrierte Komplexe mit (040) als zentrierter Fläche oder a -kanten-zentrierte Komplexe vorliegen. Die entsprechenden Äquivalenzen siehe unter Translationsgruppe.

II. $(hk0)$ fehlt, wenn $k =$ ungerade.

Zugehörige rationale Punktanordnung: $\{[mnp] + [mn + \frac{1}{2}p']\}$ mit $p \neq p'$. Mögliche erzeugende Operationen:

a) Gleitspiegelung parallel (004) mit achsenparalleler Gleitkomponente.

b) Digonale Drehung um $[400]$ mit $n = \frac{1}{4}$. Punktlagen auf $(040)_{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}}$.

c) Digonale Schraubung um $[040]$ mit $m = 0$ oder $m = \frac{1}{2}$. Punktlagen auf $(400)_0$ oder $(400)_{\frac{1}{2}}$.

d) Inversion mit $m = 0$ oder $m = \frac{1}{2}$ und $n = \frac{1}{4}$. Punktlagen auf den Geraden $[004]_0 \frac{1}{4}$ und $[004]_{\frac{1}{2}} \frac{1}{4}$.

e) Die analogen Kompositionen wie unter I.

Das zonale Gesetz II kann eine Spezialisierung eines nach (hkl) integralen Gesetzes darstellen. Die entsprechenden Komplexe müssen einfach flächenzentrierten Bau mit (400) als zentrierter Fläche oder b -kanten-zentrierten Bau aufweisen.

III. $(hk0)$ fehlt, wenn $h + k =$ ungerade.

Zugehörige rationale Punktanordnung: $\{[mnp] + [m + \frac{1}{2}n + \frac{1}{2}p']\}$, wobei $p \neq p'$. Mögliche erzeugende Operationen:

a) Gleitspiegelung an (004) mit diagonalen Gleitkomponente. Punktlage beliebig.

b) Digonale Schraubung um $[400]$ mit $n = \frac{1}{4}$. Punktlagen auf $(040)_{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}}$.

1) $p \neq p'$ soll symbolisch ausdrücken, daß p und p' zueinander nicht bestimmt rational sind.

c) Digonale Schraubung um $[040]$ mit $m = \frac{1}{2}$. Punktlagen auf $(400)_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}$.

d) Inversion mit $m = \frac{1}{2}$ und $n = \frac{1}{2}$ oder $m = \frac{1}{2}$ und $n = \frac{3}{2}$. Punktlagen der Geraden $[004]_{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}}$ und $[004]_{\frac{1}{4}, \frac{5}{4}}$.

Kompositionen nach obigem Schema mit derselben Einschränkung wie I. Dieses zonale Gesetz ergibt sich aus einem nach (hkl) integralen, wenn basisflächenzentrierte oder innenzentrierte Komplexe vorliegen.

IV. $(hk0)$ fehlt, wenn h oder $k =$ ungerade.

Zugehörige rationale Punktanordnung: $\{[[mn p]] + [[m + \frac{1}{2} n p']] + [[m n + \frac{1}{2} p'']] + [[m + \frac{1}{2} n + \frac{1}{2} p''']\}$. Da keine Symmetrieoperation auf eine solche Anordnung führt, ist die Mannigfaltigkeit beschränkt. Sie läßt sich folgend zusammenfassen:

a) Es ist kein nach (hkl) integraler Anteil vorhanden. Dann sind zwei Fälle möglich:

1. Es ist die Punktanordnung eine rein kompositionsmäßige. Sie darf dabei wie alle vorangehenden Kompositionen keine Punktlagen in einer Spiegelebene $(004)_0$ oder $(004)_{\frac{1}{2}}$ umfassen.

2. Es liegt eine Komposition von zwei Punktanordnungen der Fälle I, II oder III vor, wobei die eine Zweierkombination elementar, ihre Ergänzung zur Viererkombination hingegen kompositionsmäßig gegeben wäre. Möglich sind die Kombinationen: I + II oder III, II + III oder I und III + I oder II.

b) Es ist ein nach (hkl) integraler Anteil vorhanden: Für diesen sind die Äquivalenzen unter der entsprechenden Translationsgruppe nachzusehen. Zum integralen kommt zusätzlich ein zonaler Anteil, so daß durch Kombination die vier Punkte des obigen Schema resultieren, wobei aber von den Größen p, p', p'', p''' je zwei einander gleich sind. Darüber orientiert das Schema:

Es fehlt (hkl) , wenn	Damit ist zur Viereranordnung zu kombinieren der Fall:
$h =$ ungerade	II, III
$k =$ ungerade	I, III
$h + k =$ ungerade	I, II
$h + l =$ ungerade	II, III
$k + l =$ ungerade	I, III
$h + k + l =$ ungerade	I, II
h oder $k =$ ungerade	
$h + k$ oder $h + l =$ ungerade	

Die Gesamtselektion ergibt sich nach (hkl) integral. Die Komplexe sind im ersten Falle solche von $\frac{1}{2}$ -Basismasche. Im zweiten allseits flächenzentrierte.

Schließlich ist als erzeugende Operation noch eine vierzählige Symmetrieoperation möglich, welche zwei p -Werte $+p$ und zwei solche $-p$ besitzt.

Diese Eigenschaft erfüllt die tetragonale Drehspiegelung, welche in der Tat für die Punkte der Geraden $[004]_{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}}$ das verlangte zonale Auslöschungsgesetz ergibt, wobei — entsprechend dem digonalen Anteil dieser Operation — das Gesetz: $\ast(hkl)$ fehlt, wenn $h + k =$ ungerade \ast nach (hkl) integral gilt.

V. $(hk0)$ fehlt, wenn h oder k oder $\frac{1}{2}(h + k) =$ ungerade.

Die rationale Punktanordnung, die diesem Gesetz sich zuordnen läßt, lautet: $\{[[mn p]] + [[m + \frac{1}{2} n p_1]] + [[m + \frac{1}{2} n + \frac{1}{2} p_2]] + [[m n + \frac{1}{2} p_3]] + [[m + \frac{1}{2} n + \frac{1}{2} p_4]] +$

$[[m + \frac{1}{4}n + \frac{3}{4}p_5]] + [[m + \frac{3}{4}n + \frac{3}{4}p_6]] + [[m + \frac{3}{4}n + \frac{1}{4}p_7]]$. Analoge Überlegungen wie bei Fall IV ergeben, daß das rein zonale Gesetz nur kompositionsmäßig gelten kann. Elementar kann nur ein Teil des Gesetzes sein, ausgenommen im Falle der allseits flächenzentrierten Translationsgruppe, wo die vier weiteren Punkte durch Gleitspiegelung, mit der Gleitkomponente $\frac{a}{4} + \frac{b}{4}$ erzeugt werden können. Die Glieder mit den Zusatzwerten $\frac{1}{4}$ sind nur durch Inversion zu erhalten, da die digonale Schraubung wegen ihres Zusatzwertes $\frac{1}{2}$, die digonale Drehung wegen der linearen Verbindung zweier Indizes ausscheidet.

Das geforderte Selektionsverhalten kann integral nach (hkl) auftreten, wenn folgende Gitterkomplexe (oder entsprechende Kombinationen solcher) vorliegen:

1. Allseits flächenzentriert mit Zentrierung der $\frac{1}{4}$ -Basismasche.
2. Diamantgitterkomplex.
3. Basis mit zentrierter $\frac{1}{4}$ -Basismasche.

B. Zwei Zonen seien Träger von möglicherweise durch Gleitspiegelung erzeugten Auslöschungsgesetzen.

Der Vergleich der beiden zonalen Auslöschungsgesetze wird erkennen lassen, ob der symmetrische oder der unsymmetrische Fall vorliegt. Wenn die beiden Zonen als $[100]$ bzw. $[010]$ gewählt werden, so gehören folgende Kombinationen von Auslöschungsgesetzen zum symmetrischen Fall:

- $(0kl)$ fehlt, wenn $l = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt, wenn $l = \text{ungerade}$,
- $(0kl)$ fehlt, wenn $k = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt, wenn $h = \text{ungerade}$,
- $(0kl)$ fehlt, wenn $k + l = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt, wenn $h + l = \text{ungerade}$,
- $(0kl)$ fehlt, wenn k oder $l = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt, wenn l oder $h = \text{ungerade}$,
- $(0kl)$ fehlt, wenn l od. $\frac{1}{2}(2k+l) = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt, wenn l od. $\frac{1}{2}(2h+l) = \text{ungerade}$.

Diese Fälle allein können mit einer höheren Symmetrie verträglich sein, d. h. bei Anwesenheit von Symmetrieeoperationen bestehen, welche die beiden Zonen ineinander überführen. Alle unsymmetrischen Kombinationen von zwei zonalen Auslöschungsgesetzen sind damit unvereinbar.

Gegenüber A. besitzt der unsymmetrische Fall keine neuen Möglichkeiten an erzeugenden Operationen, da alle anderen Symmetrieeoperationen als die bereits angeführten, zweizähligen die Zonen vervielfältigen und damit einander gleichwertig machen würden. Es erhebt sich somit lediglich für den symmetrischen Fall die Frage, ob Symmetrieeoperationen existieren, welche zusätzlich den bereits erwähnten für die Erzeugung der zonalen Auslöschungen in Frage kommen. Neben diesen werden wie im unsymmetrischen Fall reine Kombinationen der Fälle A. zu je zweien vorliegen können, so daß die dort gegebene Darstellung als erschöpfend gelten darf.

Zusätzliche Symmetrieeoperationen für den symmetrischen Fall:

a) $(0kl)$ fehlt für $k = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt für $h = \text{ungerade}$.

Rationale Punktanordnung demzufolge: $\{[mnp] + [m'n + \frac{1}{2}p] + [m + \frac{1}{2}n'p] + [m' + \frac{1}{2}n' + \frac{1}{2}p]\}$. Hierfür kommt als zusätzliche erzeugende Operation in Betracht: Tetragonale Drehung um $[004]$ mit $m = n + \frac{1}{2}$ oder $m = -n + \frac{1}{2}$. Die Punktlagen liegen auf der Ebene $(110)_{\frac{1}{2}}$, $(1\bar{1}0)_{\frac{1}{2}}$.

b) $(0kl)$ fehlt für $k + l = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt für $h + l = \text{ungerade}$.

Rationale Punktanordnung: $\{[mnp][m'n + \frac{1}{2}p + \frac{1}{2}] [m + \frac{1}{2}n'p + \frac{1}{2}] [m' + \frac{1}{2}n' + \frac{1}{2}p]\}$. Zusätzlich der Kombinationen von A. ist auch die tetragonale Schraubung mit $\frac{1}{2}c$ als Schraubungskomponente als erzeugende Operation möglich: Tetragonale Schraubung, zugleich digonale Drehung um $[004]$ mit $m = n + \frac{1}{2}$ oder $m = -n + \frac{1}{2}$. Punktlagen in den Ebenen $(110)_{\frac{1}{2}}$, $(1\bar{1}0)_{\frac{1}{2}}$.

c) $(0kl)$ fehlt für $l = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt für $l = \text{ungerade}$.

Rationale Punktanordnung: $\{[mnp][m'n p + \frac{1}{2}] [m'n' p + \frac{1}{2}] [m'n' p]\}$. Als erzeugende Operation tritt weiterhin auf: Tetragonale Schraubung, zugleich digonale Drehung um $[004]$ mit $m = n$ oder $m = -n$. Punktlagen von $(110)_0$, $(1\bar{1}0)_0$.

d) $(0kl)$ fehlt für k oder $l = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt für h oder $l = \text{ungerade}$.

Dabei ist bei rein elementarer Erzeugung der Auslöschungen stets ein integraler Anteil vorhanden. Die rationale Punktanordnung lautet dann $\{[mnp][m'n + \frac{1}{2}p] [m + \frac{1}{2}n'p] [m' + \frac{1}{2}n' + \frac{1}{2}p] [m + \frac{1}{2}n + \frac{1}{2}p + \frac{1}{2}] [m' + \frac{1}{2}n p + \frac{1}{2}] [m'n' + \frac{1}{2}p + \frac{1}{2}] [m'n' p + \frac{1}{2}]\}$. Diese Auslöschungen werden auch erzeugt von der Achsenschar \mathbb{C}_4^5 , also tetragonaler Drehung im Falle innenzentrierter Translationsgruppe, wenn $m = n + \frac{1}{2}$ oder $-n + \frac{1}{2}$.

e) $(0kl)$ fehlt für $l = \text{ungerade}$ oder $\frac{1}{2}(2k + l) = \text{ungerade}$ und $(h0l)$ fehlt für $l = \text{ungerade}$ oder $\frac{1}{2}(2h + l) = \text{ungerade}$.

Auch in diesem Falle ist bei elementarer Erzeugung stets ein integraler Anteil vorhanden. Die rationale Punktanordnung lautet: $\{[mnp][m'n + \frac{1}{2}p + \frac{1}{4}] [m + \frac{1}{2}n'p + \frac{1}{4}][m'n'p]\}$ und die dazu innenzentrierten Punkte. Diese Punkte gehen auch aus der Anwendung der Achsenschar \mathbb{C}_4^6 auf einen Punkt hervor, wenn $m = n + \frac{1}{2}$ oder $-n + \frac{1}{2}$ ist.

Durch Kombination der unter A. angegebenen Fälle leitet man leicht die Art der Gitterkomplexe ab, welche die genannten Auslöschungsgesetze nach (hkl) integral statt zonal ergeben würden.

C. Mehr als zwei Zonen seien Träger von möglicherweise durch Gleitspiegelung erzeugten Auslöschungsgesetzen.

An Fall B. schließt zunächst der Fall mit drei leitenden Zonen an: Entweder drei selbständige Zonen, oder drei gleichwertige Zonen. Auch hier soll der letztere Fall im Gegensatz zum ersteren als der symmetrische bezeichnet werden. Die Unterscheidung der beiden Fälle ist grundsätzlich dieselbe wie bei B. Wesentlich ist in diesem Zusammenhang folgendes: Die trigonale Drehung, welche die drei Zonen einander

gleichwertig macht, kann selbständig nicht als erzeugende Operation zonaler Auslöschungsgesetze in Frage kommen, insbesondere nicht für solche zonale Auswahlregeln, deren Form einer im Diskontinuum möglichen Gleitspiegelung entspricht. Daraus geht hervor, daß der Fall dreier gleichwertiger Zonen gegenüber dem unsymmetrischen keine zusätzlichen Operationen aufweisen kann und damit im Gegensatz zu Fall B. steht. Für drei Zonen ergibt sich demnach eine Gesamtselektion, welche durch rein additive Kombination der Fälle A. bzw. $A. + B.$ resultiert. Im Falle, daß vier Zonen eine Auswahlregel zeigen, welche auf Gleitspiegelung zurückgehen kann, sind je zwei der vier Zonen gleichwertig: $[400]$ und $[040]$ neben $[410]$ und $[4\bar{1}0]$. Die vorhandenen Äquivalenzen ergeben sich durch rein additive Kombination der Fälle B. Sechs Zonen der geforderten Art sind zu dreien einander gleichwertig; es liegt somit ein Verhalten vor, das aus unmittelbarer Kombination von Fällen A. hervorgeht. Neun leitende Zonen zerfallen in eine Gruppe von drei und eine solche von sechs Zonen, die unter sich gleichwertig sind. Die erstere Gruppe ist reine Kombination von Fällen A., die letztere eine Kombination von Fällen B.

Die Zahl der vorhandenen äquivalenten Operationen wird nun dadurch wesentlich eingeschränkt, daß die Symmetrie der Kristallstruktur zum Teil bekannt ist. Dem Gang der Strukturanalyse angepaßt werden dabei die Fälle unterschieden: Kristallklasse eindeutig festgestellt und Lauesymmetrie eindeutig erkannt. Die Diskussion soll für die beiden Fälle getrennt durchgeführt werden.

I. Die Kristallklasse hat sich eindeutig bestimmen lassen.

Nach dem früher angegebenen Satz kommen unter den äquivalenten Operationen eines zonalen Raumgruppenkriteriums nur Kompositionen, aber keine Symmetrieeoperationen vor. Durch die eindeutige Klassenbestimmung ist sicher gestellt, welche Zonen senkrecht zu ihrer Achse eine Schar \mathcal{C}_s besitzen. Alle jene zonalen Auslöschungsgesetze, welche durch digonale Drehung oder Schraubung, tetragonale Drehung oder Schraubung, Inversion und tetragonale Drehspiegelung erzeugt werden, werden dadurch, daß die Zone eine leitende ist, notwendig zum nach (hkl) integralen Gesetz erhoben. Wird zum Beispiel in der Klasse C_{2v} versucht, ein zonales Gesetz durch digonale Drehung zu erzeugen, indem $m = \frac{1}{4}$ gesetzt wird, so fügt zwar die digonale Drehung (oder Schraubung) zu $[\frac{1}{4}n p]$ einen Punkt $[\frac{3}{4}\bar{n} p]$ (oder $\frac{3}{4}\bar{n} p + \frac{1}{2}$), jedoch die Spiegelung (Gleitspiegelung) an (100) gleichzeitig zu $[\frac{1}{4}n p]$ einen Punkt $[\frac{3}{4}n p]$ (oder $\frac{3}{4}n p + \frac{1}{2}$). Die durch Spiegelung oder Gleitspiegelung verbundenen Punkte führen aber auf ein entsprechendes integrales Gesetz.

Weil unter den äquivalenten Operationen die Komposition allein vertreten ist, folgt, daß bei der Existenz eines zonalen und nur zonalen Gesetzes, wenn die Auslöschungen nicht durch Gleitspiegelung erzeugt werden, notwendig zum mindesten eine Komposition vorhanden sein muß. Wären nämlich alle Gitterkomplexe oder Gruppen solcher Träger integraler Auslöschungsgesetze, so müßte, auch wenn diese integralen Gesetze verschiedene wären, eine größere Zahl von Auslöschungen beobachtet werden, als der rein zonalen Auswahlregel entspricht. Für die oben angegebenen integralen Auslöschungsgesetze, die durch Spezialisierung auf die betreffende Zone das geforderte Verhalten ergeben, bestehen nämlich in allen Fällen gemeinsame Nullstellen, so daß die Zahl solcher für den resultierenden Strukturvektor erhöht sein müßte.

Im Einzelfalle gestaltet sich die Untersuchung folgendermaßen. Wenn in einer Reihe von leitenden Zonen bestimmte Auslöschungsgesetze beobachtet und deren zonaler und nur zonaler Charakter sichergestellt wurde, so kommen als mit diesen Auslöschungen vereinbar die folgenden Raumsysteme in Betracht: Erstens das Raumsystem, welches nur Untergruppen \mathcal{C}_s^1 besitzt (symorphes Raumsystem). Ferner alle jene Raumsysteme, die in einer Richtung Untergruppen \mathcal{C}_s^1 besitzen, in einer anderen hingegen Untergruppen \mathcal{C}_s^2 mit Gleitkomponenten, die den beobachteten Auslöschungen entsprechen. Schließlich das Raumsystem, das die Gesamtzahl der von den raumgruppenmäßig bedingt aufgefaßten Auslöschungen geforderte Zahl Untergruppen \mathcal{C}_s^2 besitzt. Dabei ist eine mögliche Freiheit in der Achsenwahl (Vertauschbarkeit der Achsen) zu berücksichtigen. Zu einem bestimmten Selektionsverhalten in den leitenden Zonen ist zunächst die Zahl der Raumsysteme zu suchen, welche in dieser Weise als mit demjenigen Raumsystem äquivalent erscheinen können, das die vorhandenen Auslöschungen sämtlich als raumgruppenmäßig bedingt erzeugen würde. Topologisch gleiche Basisgruppen können in diesen und nur in diesen Raumsystemen vorhanden sein, da alle übrigen mehr Auslöschungen oder Auslöschungen anderer Art fordern würden, als beobachtet wurden. Die Basis der Diskussion ist in ihrer Breite demnach durch die Zahl der leitenden Zonen wesentlich bestimmt:

a) Es ist eine einzige leitende Zone vorhanden¹⁾ (C_s , C_{2h} , C_{4h} , V_d , C_{3h} , C_{3v} , D_{3d} , D_{3h} , C_{6h} , T_h , T_d). Dann besteht für eine bestimmte

1) Entgegen der vorstehenden Darstellung werden hier nur die selbständigen leitenden Zonen gezählt. Zusammengehörige Zonen zählen somit nur einfach, entsprechend dem Umstande, daß bei bekannter Klasse die Untersuchung einer einzigen Zone aus der Gesamtheit zusammengehöriger genügt, um die Auslöschungen festzustellen. In den Raumgruppen \mathfrak{T}_h ist es hinreichend, die Reflexe $(hk0)$ oder $(h0l)$ oder $(0kl)$ zu betrachten, da hieraus das Verhalten von $(h0l)$ und $(0kl)$ oder $(hk0)$ und $(h0l)$ und $(hk0)$ eindeutig folgen muß.

Translationsgruppe nur die Alternative \mathbb{C}_s^1 oder \mathbb{C}_s^2 . Sind zonale Auslöschungen vorhanden, so muß diskutiert werden: Untergruppe \mathbb{C}_s^2 , Auslöschungen raumgruppenmäßig; Untergruppe \mathbb{C}_s^1 , Auslöschungen durch speziellen Charakter der Komplexe und deren spezielle Ineinanderstellung bedingt.

b) Es sind zwei leitende Zonen vorhanden ($C_{2v}, C_{4v}, C_{6v}, D_{6h}, O_h$). Die möglichen Fälle sind:

1. Beide Untergruppen \mathbb{C}_s^1 . Keine zonale Selektion.
2. Eine Untergruppe \mathbb{C}_s^1 , eine Untergruppe \mathbb{C}_s^2 . Eine Zone zeigt Auslöschungen, die andere ist ohne zonale Selektion. Möglich ist das Raumsystem von 1. neben dem Raumsystem, das eine Untergruppe \mathbb{C}_s^1 und eine solche \mathbb{C}_s^2 besitzt.
3. Beide Untergruppen \mathbb{C}_s^2 . In beiden leitenden Zonen ist eine zonale Selektion vorhanden. Möglich sind: Das Raumsystem mit zwei Untergruppen \mathbb{C}_s^2 mit den durch die Auslöschungen geforderten Gleitkomponenten. Weiterhin sind möglich: Raumsysteme, welche nur eine der Untergruppen \mathbb{C}_s^2 neben einer Untergruppe \mathbb{C}_s^1 enthalten; die Gleitkomponente von \mathbb{C}_s^2 muß dabei mit einer der beobachteten, zonalen Auswahlregeln übereinstimmen. Zudem schließlich das Raumsystem mit zwei Untergruppen \mathbb{C}_s^1 .

c) Es sind drei leitende Zonen vorhanden (V_h, D_{4h}).

Die verschiedenen Möglichkeiten sind in diesem Falle:

1. Alle drei Untergruppen sind \mathbb{C}_s^1 ; keine Selektion zonalen Art in den leitenden Zonen. Möglich ist nur das symmorphes Raumsystem.
2. Zwei Untergruppen \mathbb{C}_s^1 neben einer Untergruppe \mathbb{C}_s^2 . Eine leitende Zone ist Träger eines Raumgruppenkriteriums. Möglich sind: das Raumsystem mit den Untergruppen $\mathbb{C}_s^1, \mathbb{C}_s^1, \mathbb{C}_s^2$ und dasjenige von 1.
3. Eine Untergruppe \mathbb{C}_s^1 neben zwei Untergruppen \mathbb{C}_s^2 . Zwei leitende Zonen haben Auslöschungen, die einem Raumgruppenkriterium entsprechen. Möglich sind: das Raumsystem mit zwei Untergruppen \mathbb{C}_s^2 , welche Gleitkomponenten entsprechend den vorhandenen Auslöschungen besitzen müssen. Weiterhin Raumsysteme mit zwei Untergruppen \mathbb{C}_s^1 und einer Untergruppe \mathbb{C}_s^2 , wobei die Gleitkomponente dieser letzteren mit einem der beiden zonalen Auslöschungsgesetze übereinstimmen muß. Zudem das symmorphes Raumsystem.
4. Drei Untergruppen \mathbb{C}_s^2 . Alle leitenden Zonen sind Träger von Raumgruppenkriterien. Mit diesen Auslöschungen sind folgende Raumsysteme verträglich: Das Raumsystem mit drei Untergruppen \mathbb{C}_s^2 , welche die von den Auswahlregeln geforderten Gleitkomponenten besitzen. Die

Raumsysteme mit zwei Untergruppen \mathbb{C}_s^2 und einer Untergruppe \mathbb{C}_s^1 , wobei die beiden \mathbb{C}_s^2 Gleitkomponenten aufweisen, welche mit irgend zwei der drei zonalen Auslöschungsgesetze übereinstimmen. Die Raumsysteme mit einer Untergruppe \mathbb{C}_s^2 und zwei Untergruppen \mathbb{C}_s^1 ; Gleitkomponente von \mathbb{C}_s^2 entsprechend einem der drei festgestellten Auslöschungsgesetze. Schließlich das symmorphie Raumsystem.

Die Diskussion der zonalen Raumgruppenkriterien steht in jedem Falle vor der gleichen Frage: Es ist zu entscheiden, ob Erzeugende des festgestellten zonalen Auslöschungsgesetzes Gleitspiegelung oder Komposition ist. Im ersten Fall ist das Gesetz als raumgruppenmäßig bedingt zu bewerten, die Auslöschungen sind elementar. Ist die Selektion durch Komposition bedingt, so liegt die Untergruppe \mathbb{C}_s^1 vor. Dann existiert für eine jede Sorte von Streuzentren eine rationale Gruppe, welche durch Komposition einen solchen Bau aufweist, daß das zonale Gesetz für den Strukturvektor der Basis resultiert. Daneben können rationale Gruppen von Punkten bestehen, welche die vorhandenen Auslöschungen integral nach (hkl) , sei es durch Symmetrioperationen oder durch Kompositionen erzeugt, besitzen. Sind nur Punktlagen in der Spiegelebene selbst besetzt, so kann ein zonales Auslöschungsgesetz von der geforderten Art nicht erzeugt werden, und damit wäre die Gleitspiegelung als eindeutig erzeugende Operation nachgewiesen. Eine sicher vorhandene Besetzung von Spiegelebenen folgt aus der Zahl, mit der die einzelnen Sorten von Streuzentren in der Basis enthalten sind. Da die Erzeugung eines v -zähligen Auslöschungsgesetzes durch Komposition v Punktlagen benötigt, kann erst im Falle, daß eine Sorte von Streuzentren v -mal in der Zähligkeit außerhalb der Spiegelebene auftritt, durch Komposition die beobachtete Selektion erhalten werden. Auf diese Zähligkeitsbeziehungen wird zu Ende des Paragraphen zurückgekommen.

II. Die Kristallklasse hat sich nicht eindeutig bestimmen lassen; nur die Lauesymmetrie ist eindeutig bekannt.

Die weniger enge Determinierung der Symmetrie bewirkt notwendigerweise eine Erhöhung der Zahl möglicher Äquivalenzen. In diesem Falle kann nur ausgesagt werden, welche Zonen als leitende möglich sind, nicht aber, daß sie diesen Charakter notwendig besitzen müssen. Sind dann die betreffenden Zonen tatsächlich nicht solche mit einer Schar \mathbb{C}_s senkrecht zu ihrer Achse, ist also die Klasse nicht die maximal symmetrische der betreffenden Lauegruppe, so können die beobachteten zonalen Auslöschungen (immer neben dem Fall der Komposition, der bei I bereits existierte) durch diejenigen Symmetrioperationen erzeugt sein,

welche oben als erzeugende Operationen zonaler Auswahlregeln erkannt wurden. Dabei setzt dies, wie oben betont, eine spezielle Lage der Punktlagen hinsichtlich der Symmetrieelemente voraus. Als solche, zusätzlich äquivalente Symmetrieelemente kommen nach den oben gemachten Ausführungen die Drehung und Schraubung von der Zähligkeit 2 und 4 und die Drehspiegelung von der Zähligkeit 2 und 4 in Frage. Die Möglichkeit, daß unter den äquivalenten Operationen Symmetrieelemente vorhanden sind, ist somit durch die Beziehungen der Klassen ein und derselben Lauegruppe untereinander bestimmt. Die Untersuchung derselben zeigt, daß als Äquivalenz nur die folgende möglich ist: Die niedriger symmetrische Klasse besitzt senkrecht zu den Achsen der leitenden Zonen der höher symmetrischen Klasse Scharen \mathcal{C}_2 oder \mathcal{C}_4 . Die zonalen Auslöschungen werden dann für Punktlagen erfüllt, welche den oben angegebenen Koordinatenbedingungen genügen. Die Symmetrieelementenscharen der folgenden Klassen stehen miteinander in dem geforderten Verhältnis: V und V_h ; V_d , D_4 und D_{4h} ; T und T_h ; O und O_h ; D_3 und D_{3d} ; D_6 und D_{6h} . Aber auch die Klassen der betreffenden Lauegruppen, welche nur einen Teil der leitenden Zonen des höchstsymmetrischen Falles der betreffenden Lauesymmetrie besitzen, kommen für diese Äquivalenzen ihrer Raumgruppenkriterien in Betracht. In der Klasse \mathcal{C}_{2v} kann das leitende Verhalten in den Zonen $[100]$ und $[010]$ ebenso wie in V_h durch eine den betreffenden Spiegelungen oder Gleitspiegelungen äquivalente Drehung oder Schraubung in V erzeugt werden. Für alle andern Klassen können Symmetrieelemente der genannten Art nicht als äquivalente Operationen zu den Raumgruppenkriterien in Frage kommen, so daß sich dann die Diskussion wie bei bekannter Kristallklasse gestaltet. Dabei müssen, was natürlich auch im Falle der erweiterten Diskussion der andern Klassen zu geschehen hat, diejenigen Symmetrieelemente, welche der niedriger symmetrischen Klasse gegenüber der höchst symmetrischen der betreffenden Lauegruppe fehlen, durch Kompositionen ersetzt werden. Bei der Symmetriereduktion ist dabei folgendes zu beachten:

Ein n -Punktner der höchst symmetrischen Klasse kann beim Übergang zu einer symmetrischen Klasse folgendes Verhalten zeigen:

a) Er bleibt beim Übergang zur Klasse kleinerer Symmetrie eine Punktlage gleicher Symmetrie, die beiden Klassen haben demnach eine symmorphe Untergruppe gemeinsam. Die Zähligkeit der Punktlage wird durch die Symmetriereduktion der Klasse ein Bruchteil der im höher symmetrischen Fall vorhandenen. Die Symmetrieelemente, welche die höher symmetrische Klasse außer den mit der niedriger symmetrischen Klasse gemeinsamen besitzt, müssen durch Kompositionen ersetzt werden.

b) Die Punktlage bleibt beim Übergang von der höher symmetrischen Klasse zur niedriger symmetrischen von gleicher Zähligkeit. Die Reduktion der Klassensymmetrie wirkt sich in einer entsprechenden Reduktion der Symmetriebedingung der Punktlage aus. Die erzeugenden Operationen der beiden n -Punktner sind dieselben; war der höher symmetrische eine elementare, rationale Punktanordnung, so gilt dies auch vom niedriger symmetrischen.

c) Die beiden n -Punktner können sich sowohl hinsichtlich Zähligkeit und Symmetriebedingung voneinander unterscheiden. Dieses kombinierte Verhalten bei der Symmetriereduktion folgt einfach aus einer Zusammensetzung der unter a) und b) erwähnten Beziehungen.

Diese Diskussion ist für alle Lauegruppen in gleicher Weise durchzuführen. An sie anschließend ist im Falle, daß die Lauesymmetrien $V_h, D_{4h}, T_h, O_h, D_{3d}, D_{6h}$ vorliegen, zu untersuchen, ob ein beobachtetes zonales Auslöschungsgesetz nicht elementar bedingt sein könnte unter entsprechender Reduktion der Klassensymmetrie gegenüber dem zunächst angenommenen, höchst symmetrischen Fall. Dabei ist folgendes zu beachten: Nicht jedes zonale Verhalten in den leitenden Zonen läßt sich zwischen den oben genannten Paaren von Klassen durch Symmetrieoperationen erzeugen.

Die explizite Darstellung der in der Raumgruppe \mathfrak{R}^4 möglichen, elementaren zonalen Auslöschungsgesetze soll diese Beziehungen verdeutlichen, zumal dieser Typus von Auslöschungsgesetzen sich noch in keiner der vorhandenen, expliziten Darstellungen vorfindet.

Zonale Auslöschungsgesetze in \mathfrak{R}^4 .

Komplexe:

- $[[\frac{1}{4} n p]]$ ergeben in der Zone $[010]: (h 0 l)$ fehlt, wenn $h + l \equiv 1 \pmod{2}$
 $[001]: (h k 0)$ fehlt, wenn $k \equiv 1 \pmod{2}$
- $[[0 n p]]$ ergeben in der Zone $[010]: (h 0 l)$ fehlt, wenn $l \equiv 1 \pmod{2}$
 $[001]: (h k 0)$ fehlt, wenn $h + k \equiv 1 \pmod{2}$
- $[[m \frac{1}{4} p]]$ ergeben in der Zone $[100]: (0 k l)$ fehlt, wenn $l \equiv 1 \pmod{2}$
 $[001]: (h k 0)$ fehlt, wenn $h + k \equiv 1 \pmod{2}$
- $[[m 0 p]]$ ergeben in der Zone $[001]: (0 k l)$ fehlt, wenn $h + l \equiv 1 \pmod{2}$
 $[001]: (h k 0)$ fehlt, wenn $k \equiv 1 \pmod{2}$
- $[[m n \frac{1}{4}]]$ ergeben in der Zone $[100]: (0 k l)$ fehlt, wenn $k \equiv 1 \pmod{2}$
 $[010]: (h 0 l)$ fehlt, wenn $h + l \equiv 1 \pmod{2}$
- $[[m n 0]]$ ergeben in der Zone $[100]: (0 k l)$ fehlt, wenn $k + l \equiv 1 \pmod{2}$
 $[010]: (h 0 l)$ fehlt, wenn $h \equiv 1 \pmod{2}$.

Kombinationen von Komplexen, welche in der einen Zone ein gleiches Verhalten zeigen, führen auf Auslöschungen in nur einer Zone:

Z. B. $[\frac{1}{4}np] + [m\frac{1}{4}p]$ ergeben das zonale Gesetz in [004]:
 $(hk0)$ fehlt, wenn $(h+k) \equiv 1 \pmod{2}$.

Mögliche äquivalente, nach (hkl) integrale Auslöschungsgesetze.

Das Verhalten ist hier bei unbekannter Klasse ein rein additives unter den Klassen der betreffenden Lauegruppe, indem nunmehr sämtliche integrale Auslöschungen aller Klassen zu diskutieren sind. Dabei geht man zweckmäßig von der höchst symmetrischen Klasse aus; der Übergang zu den niedriger symmetrischen bedingt lediglich, daß die fehlenden Symmetrieoperationen durch Kompositionen ersetzt werden.

b) Seriale Raumgruppenkriterien und deren Diskussion.

Gegenüber den zonalen Raumgruppenkriterien ist für die serialen die Zahl der möglichen äquivalenten Operationen größer geworden, da — wie bereits bei der Erörterung der serialen allgemeinen Selektion betont wurde — neben den sämtlich möglichen serialen Äquivalenzen die entsprechenden zonalen und nach (hkl) integralen untersucht werden müssen. Dazu kommt, daß die Operationen, welche auf seriale Raumgruppenkriterien, wenn sie raumgruppenmäßig bedingt werden, an sich vielgestaltiger sind, da eine größere Zahl verschiedener Typen von Schraubachsen als solcher von Gleitspiegelebenen existiert. Umgekehrt fällt nicht jede Ebenenserie senkrecht einer Schar Drehungs- oder Schraubachsen unter den Begriff der leitenden Ebenenserie, sondern hierzu sollen, wie oben, nur diejenigen Ebenenserien solcher Art gerechnet werden, welche außerhalb der leitenden Zonen liegen. In allen Raumsystemen, bei welchen den Scharen $\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3, \mathcal{C}_4, \mathcal{C}_6$ Scharen \mathcal{C}_n parallel gehen, also Scharen $\mathcal{C}_{2v}, \mathcal{C}_{3v}, \mathcal{C}_{4v}$ oder \mathcal{C}_{6v} vorliegen, kommt eine seriale, leitende Selektion nicht in Frage, da dort alle Ebenenserien senkrecht auf Scharen \mathcal{C}_n in leitenden Zonen liegen. Zudem scheidet von den Ebenenserien senkrecht Scharen \mathcal{C}_n eine weitere Gruppe aus: Es sind das Ebenenserien, welche zwar außerhalb der leitenden Zonen liegen, jedoch in den verschiedenen Raumsystemen als Schar \mathcal{C}_n senkrecht zur Ebenenserie alle dieselbe Schar \mathcal{C}_n besitzen, so daß sich die verschiedenen Raumsysteme hinsichtlich dieser charakteristischen Untergruppe voneinander überhaupt nicht unterscheiden. Auch diese Ebenenserien senkrecht zu den Scharen \mathcal{C}_n sollen nicht zu den leitenden gerechnet werden. Es handelt sich um die Ebenenserien senkrecht der Schar \mathcal{C}_2^3 in den Raumgruppen $\mathcal{D}_3, \mathcal{D}_4, \mathcal{D}_6$ und \mathcal{D} .

Auch die serialen Raumgruppenkriterien sind Spezialfälle der überhaupt möglichen serialen Auslöschungsgesetze. Ihre Mannigfaltigkeit ist durch diejenige der im Diskontinuum möglichen Schraubungsoperationen eindeutig gegeben.

Ihre maximale Zähligkeit ist 6 entsprechend der Maximalzähligkeit möglicher Schraubenachsen. Die Auslöschungsgesetze, welche serielle Raumgruppenkriterien darstellen, ergeben stets einen Auswahlfaktor, der für alle Werte des Index der betreffenden Ebenenserie eine Potenzsumme von Einheitswurzeln darstellt. Es entspricht dies der Tatsache, daß die Schraubungskomponente immer einen rationalen Bruchteil der Identitätsperiode darstellt und die Ausführung der Schraubung auf eine Punktreihe führt, welche die Koordinatenachse parallel der Schraubungsachse mit ihren Projektionspunkten äquidistant unterteilt.

Auch bei der Diskussion der serialen Raumgruppenkriterien sind die beiden Fälle: Kristallklasse eindeutig bekannt und Kristallklasse nicht bekannt, sondern nur Lauesymmetrie festgestellt grundsätzlich verschieden. Im Falle, daß nur die Lauesymmetrie feststeht, müssen drei Fälle serialer Gesetze unterschieden werden:

a) Eine Ebenenserie mit serialen Auslöschungen in einer niedrig symmetrischen Klasse fällt durch den Übergang zur höher symmetrischen Klasse gleicher Lauesymmetrie in eine leitende Zone dieser letzteren. Das tritt dann ein, wenn bei diesem Übergang die Schar \mathfrak{C}_n senkrecht zur betreffenden Ebenenserie zu einer Schar $\mathfrak{C}_{n'}$ wird, wie dies beim Übergang von den enantiomorphen zu den holoedrischen Klassen zutrifft.

b) Eine Ebenenserie bleibt innerhalb der verschiedenen Klassen gleicher Lauesymmetrie als selbständiger Selektionsort erhalten. In beiden Klassen ist eine Achsenschar \mathfrak{C}_n vorhanden. Die serialen Raumgruppenkriterien gehen in diesem Falle unverändert in die Gesamtselektion der höheren Raumsysteme ein. Dieser Fall liegt vor, wenn Klassen C_n mit Klassen C_{nh} verglichen werden. Dabei müssen zwei Fälle unterschieden werden:

1. Es gibt eine Klasse, in welcher die betreffende Ebenenserie nicht leitende (hkl) -Mannigfaltigkeit ist. Indessen besitzt diese Klasse Raumsysteme, die derart spezielle Gitterkomplexe enthalten, daß diese wegen ihres besonderen Baues die betreffende serielle (und zwar nur als serielle) Selektion ergeben. Dies setzt voraus, daß die Symmetrieoperation dieser Klasse alle drei Koordinaten ändert und dabei eine Zähligkeit besitzt, welche mit der Zähligkeit der Drehungs- oder Schraubungsachsen der höheren Raumsysteme der betreffenden Lauegruppe einen gemeinsamen Teiler besitzt. Dieser Bedingung genügt nur die Gruppe C_{4h} , in welcher die Klasse S_4 gegenüber C_4 und C_{4h} das geforderte Verhalten zeigt.

2. Die Klassen ohne die leitende Ebenenserie stehen zu den übrigen nicht in einer solchen Beziehung; es gibt keine Symmetrioperationen, welche zu den Schraubungen äquivalent sind.

Der Fall a) wird in der Diskussion der zonalen Auslöschungsgesetze, die in der betreffenden Lauegruppe leitend sind, erledigt, während die Fälle b) unter die nachfolgende Diskussion fallen.

Der eigentlichen Diskussion der Äquivalenzen soll eine allgemeine Übersicht über die möglichen erzeugenden Operationen vorangestellt werden. Die Betrachtung der Ebenenserien ist gegenüber den Zonen dadurch vereinfacht, daß nur symmetrische Fälle möglich und damit in dem oben genannten Sinne, die sämtlichen Ebenenserien, wenn sie überhaupt eine auf Schraubung zurückführbare Selektion besitzen, einander gleichwertig erscheinen. Im einzelnen liegen die Verhältnisse folgend:

A) Eine einzige Ebenenserie sei Träger eines möglicherweise durch Schraubung erzeugten Auslöschungsgesetzes.

Die betreffende Ebenenserie wird als (001) gewählt. Dann ergeben sich entsprechend den viererlei, im Diskontinuum möglichen Schraubungskomponenten, die folgenden Möglichkeiten serialer Auslöschungen:

I. (001) fehlt, wenn $l \equiv 4 \pmod{2}$.

Die korrespondierende, rationale Punktanordnung ist $[[m\ n\ p]] [[m'\ n'\ p + \frac{1}{2}]]$, wobei $m \neq m'$ und $n \neq n'$. Mögliche erzeugende Operationen:

a) Digonale Schraubung um $[001]$. Die Punktlage kann dabei beliebig zur Schraubenachse gewählt werden.

b) Tetragonale Schraubung, die zugleich digonale Drehung, um $[001]$. Ebenfalls mit beliebiger Punktlage.

c) Inversion. Dabei muß jedoch p den speziellen Wert $\frac{1}{4}$ besitzen, d. h. die Punktlage muß der Ebene $(001)_{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}}$ angehören.

d) Tetragonale Drehspiegelung. Auch hier resultiert die geforderte Selektion nur für die speziellen Punktlagen mit $p = \frac{1}{4}$, also für die Ebenen $(001)_{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}}$.

e) Hexagonale Schraubung, die zugleich trigonale Drehung ist. Die Auslöschungen sind bei beliebiger Wahl der Punktlage vorhanden.

f) Kompositionen, welche auf die oben gegebene Punktanordnung führen. Dabei darf keine Besetzung von Drehungsachsen senkrecht zur leitenden Ebenenserie allein erfolgen.

Das seriale Auslöschungsgesetz kann jedoch auch ein Spezialfall eines zonalen sein; in Betracht kommen hierfür die nachstehenden Auswahlregeln:

Zonales Gesetz in $(0\ k\ l)$ mit $(0\ k\ l)$ fehlt, wenn $l =$ ungerade
oder mit $(0\ k\ l)$ fehlt, wenn $k + l =$ ungerade,

zonales Gesetz in $(h\ 0\ l)$ mit $(h\ 0\ l)$ fehlt, wenn $l =$ ungerade
oder mit $(h\ 0\ l)$ fehlt, wenn $h + l =$ ungerade,

zonales Gesetz in $(h\ h\ l)$ mit $(h\ h\ l)$ fehlt, wenn $l =$ ungerade
oder mit $(h\ h\ l)$ fehlt, wenn $h + l$ oder $\frac{1}{2}h + l =$ ungerade.

Oder aber das seriale Auslöschungsgesetz geht auf ein an sich integrales zurück. Dieser Spezialisierung gehorchen die folgenden, integralen Auswahlregeln:

- ($h k l$) fehlt, wenn $l =$ ungerade, oder
 ($h k l$) fehlt, wenn ($h + l$) oder ($k + l$) = ungerade, oder
 ($h k l$) fehlt, wenn ($h + k + l$) gleich ungerade.

Die erzeugenden Operationen dieser Auslöschungsgesetze findet man unter den entsprechenden Raumgruppenkriterien und Bestimmungskennzeichen der mehrfach primitiven Translationsgruppen zusammengestellt.

II. (0 0 1) fehlt, wenn $l \not\equiv 0 \pmod{3}$.

Zugehörige rationale Punktanordnung $[[m n p] [m' n' p + \frac{1}{3}], [m'' n'' p + \frac{2}{3}]]$.

Mögliche erzeugende Operationen:

- Trigonale Schraubung um [001] bei beliebiger Wahl der Punktlagen.
- Hexagonale Schraubung um [001], welche zugleich digonale Drehung ist. Ebenfalls uneingeschränkte Wahl der Punktlage möglich.
- Dem obigen Koordinatenschema entsprechende Kompositionen.

An zonalen und integralem Auslöschungsgesetzen kommen alle diejenigen in Frage, welche im Auswahlfaktor Exponenten mit dem Glied $\pm \frac{1}{3}l$ besitzen, welches mit Gliedern qh und sk additiv verknüpft sein kann.

III. (0 0 1) fehlt, wenn $l \not\equiv 0 \pmod{4}$.

Entsprechende rationale Punktanordnung: $[[m n p] [m' n' p + \frac{1}{4}], [m'' n'' p + \frac{1}{2}], [m''' n''' p + \frac{3}{4}]]$. Es sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- Nur seriale, keine zonalen oder integralen Auslöschungen sind vorhanden.

Mögliche erzeugende Operationen:

- Tetragonale Schraubung um [001] bei beliebiger Wahl der Punktlage.
 - Kompositionen den oben gegebenen Koordinatentripeln entsprechend.
- Es ist ein zonaler oder integraler Anteil vorhanden.

Eine solche zusätzliche Folge von Auslöschungen geht auf die Beziehungen unter den Koordinaten m, m', m'', m''' oder n, n', n'', n''' oder $m, n, m', n', m'', n'', m''', n'''$ miteinander verbindet. Im Falle der Achsenschar \mathbb{C}_4^6 ist $m'' = m + \frac{1}{2}$ und $n'' = n + \frac{1}{2}$, wie es die innenzentrierte Translationsgruppe erfordert. Ein hierzu äquivalentes Auslöschungsgesetz ergibt sich in \mathbb{C}_4^2 , wenn p den speziellen Wert $\frac{1}{4}$ erhält. Nur in diesem Falle tritt somit an erzeugenden Operationen neben die Schraubung und Komposition als dritte Operation die Drehspiegelung.

Diejenigen Operationen, welche ein Auslöschungsgesetz ergeben, das nicht nur serial die geforderten Auslöschungen bedingt, sondern eine zonale oder integrale Gültigkeit besitzt, wurden bereits oben erwähnt. Dort ergab sich, daß bei einer entsprechenden zonalen oder integralen Auswahlregel stets ein Aggregat dreier Auswahlregeln vorliegt. Einer derselben wirkt sich in der Ebenenserie (001) nicht aus, so daß auf die Reflexe (001) spezialisiert Auslöschung bis zur vierten Ordnung tritt.

IV. (0 0 1) fehlt für $l \not\equiv 0 \pmod{6}$.

Zugehörige rationale Punktanordnung:

$[[m n p] [m' n' p + \frac{1}{6}], [m'' n'' p + \frac{1}{3}], [m''' n''' p + \frac{1}{2}], [m'''' n'''' p + \frac{2}{3}], [m''''' n''''' p + \frac{5}{6}]]$

4. Nur seriale, keine zonalen oder integralen Auslöschungen sind vorhanden: An erzeugenden Operationen sind möglich:

- a) Hexagonale Schraubung um $[001]$ bei beliebiger Wahl der Punktlagen.
- b) Kompositionen entsprechend dem angegebenen Koordinatenschema.

2. Es ist ein zonaler oder integraler Anteil vorhanden. Derselbe kann die Form $\left(1 + e^{2\pi i \frac{l}{3}} + e^{4\pi i \frac{l}{3}}\right)$ oder $(1 + e^{\pi i l})$ besitzen, je nach den Beziehungen, welche unter den sechs Koordinatentripeln bestehen. Dabei tritt jedoch entgegen der tetragonalen Schraubung keine neue erzeugende Operation auf.

B) Es sind zwei Ebenenserien vorhanden, welche Träger von möglicherweise durch Schraubung erzeugten Auslöschungsgesetzen sind.

Die beiden Zonen werden als (100) und (010) gewählt. Dann können folgende Auslöschungen in den beiden Ebenenserien bestehen:

$(h\ 0\ 0)$ fehlt, wenn $h \not\equiv 0 \pmod{2}$ und $(k\ 0\ 0)$ fehlt, wenn $k \not\equiv 0 \pmod{2}$.

Zugehörige rationale Punktanordnung:

$$[[m\ n\ p]] \left[m + \frac{1}{2} n' p' \right] \left[m' n + \frac{1}{2} p' \right] \left[m' + \frac{1}{2} n' + \frac{1}{2} p' \right].$$

Mögliche erzeugende Operationen:

a) Zunächst kommt als reine Kombinationen von unter A I. genannten Fällen in Frage:

Digonale Schraubung + digonale Schraubung

und die sich hieraus ableitenden Fälle, wenn eine oder beide Operationen durch Kompositionen ersetzt werden.

b) Als neue erzeugende Operation gegenüber den Kombinationen von A I. ergibt sich die tetragonale Drehspiegelung, wenn $n = m + \frac{1}{2}$ oder $n = -m + \frac{1}{2}$ gesetzt wird. Für diese Punktlagen, das sind die Punkte der Ebenen $(110)_{\frac{1}{2}}$ und $(\bar{1}\bar{1}0)_{\frac{1}{2}}$, folgt also durch ein und dieselbe Operation das Verhalten in den beiden Ebenenserien, so daß diese nur in Fällen, da die Serie $(h\ 0\ 0)$ mit derjenigen $(k\ 0\ 0)$ gleichwertig erscheint, äquivalent sein kann.

C) Es sind drei Ebenenserien vorhanden, welche Träger von möglicherweise durch Schraubung erzeugten Auslöschungsgesetzen sind.

In diesem Falle zeigen die drei Ebenenserien $(h\ 0\ 0)$, $(0\ k\ 0)$ und $(0\ 0\ l)$ ein Verhalten, welches serialen Raumgruppenkriterien entsprechen könnte. Es sind alle diese Fälle solche, die sich aus additiver Kombination der Fälle A und B ergeben. Die Kombinationsmöglichkeiten sind die folgenden:

- a) Digonale Schraubung + digonale Schraubung + digonale Schraubung.
- b) Digonale Schraubung + digonale Schraubung + tetragonale Schraubung, die zugleich digonale Drehung ist.

Die beiden Fälle lassen sich, wenn die Zusammengehörigkeit der Ebenenserien nicht feststeht, voneinander nicht unterscheiden. An Stelle der Schraubungsoperationen können die oben erwähnten, mit ihnen äquivalenten treten.

c) Tetragonale Schraubung + digonale Schraubung + digonale Schraubung.

d) Tetragonale Schraubung + tetragonale Schraubung + tetragonale Schraubung.

Beim Fall c) sind zwei, beim Fall d) sicher alle drei Ebenenserien einander gleichwertig; eine Substitution der Schraubungen durch andere Operationen müßte dementsprechend in zwei oder drei Serien in gleicher Weise vorhanden sein.

Damit sind die möglichen Äquivalenzen vollständig abgeleitet. Analog den zonalen Raumgruppenkriterien bedingt auch hier die Kenntnis der Kristallklasse oder doch der Lauesymmetrie eine wesentliche Einschränkung der Breite der Diskussion. Den Bedürfnissen des Strukturanalytikers werden auch hier sinngemäß die beiden Fälle: Kristallklasse bekannt und nur die Lauesymmetrie festgestellt unterschieden. Ihre Diskussion soll im folgenden besprochen werden.

I. Die Kristallklasse hat sich eindeutig bestimmen lassen.

Nach dem früher angegebenen Satz kommen dann als zu den Schraubungen äquivalente Operationen einzig Kompositionen in Frage. Die Kristallklasse erlaubt, die leitenden Ebenenserien eindeutig anzugeben, wodurch auch die Frage der Zusammengehörigkeit derselben beantwortet ist.

Die Diskussion der serialen Raumgruppenkriterien gestaltet sich grundsätzlich völlig gleich derjenigen der zonalen Raumgruppenkriterien. Wenn eine Ebenenserie eine bestimmte Folge von Auslöschungen aufweist, sind damit verträgliche Raumsysteme: Das Raumsystem mit der Schar \mathcal{C}_n^l senkrecht zur Ebenenserie und alle Raumsysteme, die Scharen von Schraubenachsen besitzen mit größeren Schraubungskomponenten als dasjenige Raumsystem, welches sich ergibt, wenn die Auslöschungen raumgruppenmäßig bedingt angesehen werden. Fehlt beispielsweise in der Klasse $C_4(00l)$ für alle $l \equiv 0 \pmod{4}$, so sind möglich: Tetragryren senkrecht (004), oder tetragonale Schraubenachsen, die zugleich digonale Drehungsachsen sind, senkrecht (004), oder reine tetragonale Schraubenachsen senkrecht (004). Diese Analyse der einzelnen Ebenenserie muß für alle leitenden Ebenenserien durchgeführt werden, und es hat hernach eine entsprechende Kombination der für die einzelne Ebenenserie gefundenen Lösungen zu erfolgen. Gleich wie im Falle der zonalen Auslöschungsgesetze ist auch für die serialen die Anzahl der leitenden Ebenenserien wesentlich. Eine einzige leitende Ebenenserie ist nach Durchführung der soeben mitgeteilten Diskussion erschöpfend behandelt; hierher gehören die Raumsysteme $\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3, \mathcal{C}_4, \mathcal{C}_6; \mathcal{D}_3, \mathcal{D}_6; \mathcal{T}, \mathcal{D}$ und $\mathcal{C}_{2h}, \mathcal{C}_{4h}, \mathcal{B}_d$. Zwei Ebenenserien von leitendem Charakter besitzen die Raumsysteme \mathcal{D}_4 . Deren drei sind im Falle der Raumsysteme \mathcal{B} vorhanden, so daß dieser Fall die breiteste Diskussion verlangt. Sie ergibt sich in vollständiger Analogie zu derjenigen der Raumsysteme \mathcal{B}_h , wenn an Stelle der leitenden Zonen [100], [010] und [001] die leitenden Ebenenserien (100), (010) und (001) und an Stelle der Untergruppen \mathcal{C}_s die Untergruppen \mathcal{C}_2 gesetzt werden.

Die Diskussion der serialen Auslöschungsgesetze steht im Falle jeder Ebenenserie (wieder in voller Analogie zur Diskussion der leitenden Zonen) vor

der prinzipiell gleichen Frage: ist die erzeugende Operation der serialen Auslöschungen eine Schraubung oder eine Schraubung mit größerer Schraubungskomponente kombiniert mit einer Komposition oder eine reine Komposition. Eine eindeutige Beantwortung dieser Frage entspricht eine eindeutige Bestimmung des Charakters der Achsenschar, welche sich senkrecht zur leitenden Ebenenserie befindet. Liegt ein Raumsystem vor, in welchem nicht die sämtlich beobachteten Auslöschungen raumgruppenmäßig bedingt sind, so muß für eine jede Sorte von Streuzentren eine solche spezielle Ineinanderstellung von Gitterkomplexen vorliegen, welche auf die beobachteten, serialen (und nur serialen) Auslöschungen führt. Mit der auf eine Ebenenserie begrenzten Geltung des Auslöschungsgesetzes würde eine solche rationale Anordnung auf Drehungsachsen allein in Widerspruch stehen, da eine solche nicht ein seriales, sondern ein zonales oder integrales Auslöschungsgesetz zur Folge hätte. Ist die Anzahl der verschiedenen Streuzentren in der Basis pro Sorte derart, daß die Komposition, um die von den Auslöschungen geforderte, rationale Anordnung zu erzeugen, nicht Punktlagen allgemeiner Lage, sondern solche auf Drehungsachsen allein verwenden müßte, so daß ein zonales oder integrales Auslöschungsgesetz notwendig resultieren würde, so ließe sich in diesem speziellen Fall die Schraubung eindeutig als erzeugende Operation nachweisen. Ein Beispiel einer solchen Eindeutigkeit der erzeugenden Operation eines serialen Raumgruppenkriteriums ist das Raumsystem \mathbb{C}_2^2 mit zwei gleichartigen Streuzentren in der Basis. Wäre \mathbb{C}_2^1 vorhanden und damit die Auslöschung von $(0k0)$ nicht elementar, sondern kompositionsmäßig bedingt, so müßte die Selektion integral vorhanden sein, da die Komposition nur Punktlagen C_2 der Zähligkeit 4 verwenden könnte. Auch auf diese Zähligkeitsbeziehungen soll zusammenfassend zurückgekommen werden.

Fall B: Die Kristallklasse ist nicht eindeutig bekannt, nur die Lauesymmetrie hat sich eindeutig ermitteln lassen.

Nach den zu Anfang des laufenden § gemachten Bemerkungen ist es nur im Falle der Lauegruppe C_{4h} notwendig, die Diskussion der serialen Raumgruppenkriterien zu erweitern, wenn nur die Lauesymmetrie an Stelle der Klassensymmetrie eindeutig festgestellt werden kann. Die Erweiterung bedeutet dabei, daß in der Klasse S_4 durch spezielle Punktlagen erreicht werden kann, daß die Drehspiegelung das seriale Raumgruppenkriterium serial und nur serial erzeugt. Die Zahl der möglichen, äquivalenten serialen Auslöschungsgesetze wird dadurch erhöht, während die weitere Diskussion dem Fall A völlig analog durchzuführen ist. Die Punktlagen $[m n \frac{1}{4}]$ in \mathbb{S}_4^1 ergeben das seriale Gesetz: (001) fehlt, wenn

$l =$ ungerade, welches in den Klassen C_4 und C_{4h} für die Raumsysteme \mathbb{C}_4^3 und \mathbb{C}_{4h}^2 , \mathbb{C}_{4h}^4 Raumgruppenkriterium ist. Die Punktlagen $[[m n \frac{1}{2}]]$ in \mathbb{C}_4^2 ergeben serial in (001) das Fehlen aller nicht durch vier teilbaren Ordnungen, wobei jedoch ein Anteil (der der innenzentrierten Translationsgruppe) integral gilt. Dieses Auslöschungsgesetz ist in den Raumgruppen \mathbb{C}_4^6 und \mathbb{C}_{4h}^6 Raumgruppenkriterium. Für diese beiden Fälle sind also bereits im Falle eines einzigen homogenen Gitterkomplexes Äquivalenzen zu den Kriterien der höher symmetrischen Raumsysteme möglich.

c) Zähligkeitsbeziehungen und Kompositionsmöglichkeiten.

Die vorstehende Darstellung hat ergeben, daß innerhalb der Raumsysteme isomorph ein und derselben Kristallklasse Kompositionen als einzig mögliche, den Raumgruppenkriterien äquivalente Operationen in Betracht kommen. Sie führen dabei auf dieselben Auslöschungen mit gleichem Geltungsbereich im Indizesfeld. Dabei wurden die Bedingungen formuliert, die die Komposition genügen muß, damit zonale und nur zonale bzw. seriale und nur seriale Auswahlregeln resultieren. Wird ein zonales oder ein seriales Auslöschungsgesetz beobachtet, so heißt dies, wenn keine integrale oder integrale und zonale Selektion unter den Reflexen existiert, daß der resultierende Strukturvektor keine weiteren Nullstellen als jene in der betreffenden Zone oder Ebenenserie besitzen darf. Dadurch ergeben sich, wie an einigen Stellen bereits angedeutet wurde, gewisse Einschränkungen hinsichtlich der Placierung der Streuzentren im Raum der Nichtidentität. Diese seien nachfolgend zusammengefaßt.

Allgemein interessieren vom Standpunkt der Auslöschungen nur diejenigen Kompositionen, welche durch ihren besondern Charakter die Zahl der ausgelöschten Reflexe erhöhen. Das bedingt, daß bei der Bestimmung der Raumgruppe nur Kompositionen von Gitterkomplexen interessieren, welche in den Kristallräumen mit einfach primitiver Translationsgruppe die Auslöschungen einer mehrfach primitiven Translationsgruppe ergeben, oder solche, welche in einem Raumsystem mit raumgruppenmäßig vollständig vorhandenen Reflexreihen in den leitenden Zonen und Ebenenserien eine Reihe von Reflexen in einer solchen Weise verbieten, wie es für andere Raumsysteme raumgruppenmäßig erfolgt. Aus dieser Betrachtung folgt allgemein, daß nur jene Raumsysteme das zonale oder seriale Verhalten eines andern durch Komposition erhalten können, welche sich von diesem durch eine größere Anzahl symmorpher Untergruppen unterscheiden. Die Komposition erfordert zur Erzeugung dieser Auslöschungen die Ineinanderstellung einer

um so größeren Zahl von Gitterkomplexen, je größer die Zahl der Untergruppen in denen sich die beiden Raumsysteme voneinander hinsichtlich der Symmorphie ihrer Untergruppen unterscheiden. Dadurch ist der systematische Weg, der oben zur Ableitung beschritten wurde, allgemein umschrieben. Es genügt nach diesem Zusammenhang, die Kompositionsmöglichkeiten der charakteristischen Untergruppen zueinander zu untersuchen, um dadurch durch Kombination die Kompositionsbeziehungen aller Raumsysteme abzuleiten.

Um in \mathbb{C}_s^1 das zonale Verhalten von \mathbb{C}_s^2 durch Komposition zu erhalten, muß zu einer Punktlage $[[m\ n\ p]]$ eine Punktlage $[[m'\ n'\ p + \frac{1}{2}]]$ gefügt werden, so daß für $k=0$ der Strukturvektor den Auswahlfaktor $[1 + e^{\pi i l}]$ ausklammern läßt. Ist dabei jedoch speziell $n = n'$, so gilt das Auslöschungsgesetz nicht zonal in $[0\ 1\ 0]$, sondern nach (hkl) integral. Ausgezeichnet ist unter den Fällen $n = n'$ der Fall $n = 0$ und $n = \frac{1}{2}$, das heißt die Komposition von Punktlagen in den Spiegelebenen $(0\ 1\ 0)_0$ oder $(0\ 1\ 0)_{\frac{1}{2}}$. Jede solche Komposition von Punktlagen C_s , die zonal das Auslöschungsgesetz: $\succ(hkl)$ fehlt, wenn l gleich ungerade \leftarrow ergibt, führt gleichzeitig auf ein nach (hkl) integrales Gesetz. Wenn in einer Basis eine Sorte von Streuzentren als einzige in der Anzahl 2 vorkommt, so kann nicht durch Komposition in \mathbb{C}_s^1 das zonale Verhalten von \mathbb{C}_s^2 erreicht werden, so daß in diesem Falle das Raumsystem \mathbb{C}_s^2 als eindeutig bestimmt gelten kann. Ist die Anzahl der betreffenden Streuzentren gleich 4, so können diese nur allgemeine Lagen einnehmen, die Eigensymmetrie des Streuzentrums muß sicher C_1 sein. Ein solcher Schluß ist nun für jedes Paar von Raumsystemen möglich, von denen eines senkrecht zur leitenden Zone als Untergruppe \mathbb{C}_s^1 , das andere dagegen \mathbb{C}_s^2 besitzt. Sind mehrere solche Paare von charakteristischen Untergruppen \mathbb{C}_s vorhanden, so gilt der Befund zunächst einzeln für jedes Paar. Die Zähligkeit, bis zu welcher das Raumsystem mit den Untergruppen \mathbb{C}_s^2 eindeutig gegenüber demjenigen mit den Untergruppen \mathbb{C}_s^1 bestimmt ist, erhöht sich, indem die Einzelzähligkeiten der Kompositionen sich multiplikativ zur Gesamtzähligkeit zusammensetzen.

Sind beispielsweise zwei charakteristische Untergruppenpaare \mathbb{C}_s^1 und \mathbb{C}_s^2 vorhanden, so verknüpft eine erste Komposition zwei Komplexe A und B in geeigneter Lage, um dadurch das erste Gesetz zu erzeugen. Zu A wird durch eine zweite Komposition ein Komplex A' , zu B ein Komplex B' gefügt, damit dadurch das zweite Auslöschungsgesetz resultiert.

Eine vollständig analoge Betrachtung läßt sich für die Raumsysteme isomorph den Klassen C_2 , C_3 , C_4 und C_6 durchführen. Damit in \mathbb{C}_s^1 das seriale Verhalten von \mathbb{C}_s^2 resultiert, muß zu einem Komplex $[[m\ n\ p]]$ durch Komposition ein Komplex an der Stelle $[[m'\ n + \frac{1}{2}\ p']]$ gehören, wobei m und m' , p und p' voneinander sich nicht um eine bezüglich 2 bestimmte rationale Differenz unterscheiden dürfen, da in diesem Falle eine integrale Selektion bestehen muß, wenn nur eine rationale Anordnung von Punkten in der Basis enthalten ist. Insbesondere führt auch hier eine Besetzung der digonalen Drehungsachsen, wenn sie gleichzeitig in der Ebenenserie ein seriales Gesetz ergeben soll, immer auf eine nach (hkl) integral gültige Auswahlregel. Sind in der Basis aber nur zwei Streuzentren vorhanden, so daß eine Komposition nur auf den einzähligen Punktlagen C_2 möglich ist, so kann unter keinen Umständen ein seriales Gesetz in der leitenden Ebenenserie resultieren und demzufolge muß dann das Raumsystem \mathbb{C}_s^2 gegenüber dem Raumsystem \mathbb{C}_s^1 als eindeutig bestimmt gelten, da die Schraubung in diesem Fall einzig mögliche erzeugende Operation ist. Sind mehrere

Scharen \mathfrak{C}_2 vorhanden, die in einem Raumsystem \mathfrak{C}_2^1 , im andern Raumsystem Scharen \mathfrak{C}_2^2 darstellen, so ist die Erweiterung genau gleich wie bei den Untergruppen \mathfrak{C}_s zu treffen, wodurch die Zahl der Streuzentren in der Basis, bis zu welcher Eindeutigkeit vorliegt, in gleicher Weise erhöht wird. Um in \mathfrak{B}^1 das dreifach serielle Verhalten von \mathfrak{B}^4 zu erzeugen, sind folgende Kompositionen notwendig:

$\{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}]\}$ für das serielle Gesetz in $(0\ 0\ l)$. Zu jedem dieser Punkte eine Punktlage $\{[m''\ n'' + \frac{1}{2}\ p'']\}$ für das serielle Gesetz in $(0\ k\ 0)$ und schließlich zu jedem dieser vier Punkte eine Punktlage $\{[m + \frac{1}{2}\ n''' p''']\}$ für das serielle Gesetz in $(h\ 0\ 0)$.

Es sind somit acht allgemeine Gitterkomplexe notwendig, um in \mathfrak{B}^1 die serielle und nur serielle Selektion von \mathfrak{B}^4 zu erreichen. Enthält eine Basisgruppe mit den Raumgruppenkriterien von \mathfrak{B}^4 vier gleiche Streuzentren in der Basis, so ist damit diese Raumgruppe gegenüber allen andern Raumsystemen \mathfrak{B} als sicher bestimmt zu betrachten.

Analoge Betrachtungen lassen sich für die Raumsysteme \mathfrak{C}_3 , \mathfrak{C}_4 , \mathfrak{C}_6 durchführen; immer ist eine Besetzung der Drehungsachsen mit der Möglichkeit, durch Komposition serielle Raumgruppenkriterien zu erzeugen, ausgeschlossen. Bei den nicht primitiven Schraubungsgruppen (\mathfrak{C}_4 und \mathfrak{C}_6) darf zwar eine Besetzung derjenigen Drehungsachsen vorliegen, welche den beiden verglichenen Raumsystemen gemeinsam sind, also beispielsweise der Triglyren im Falle von \mathfrak{C}_6^1 und \mathfrak{C}_6^6 . In der Tabelle III sind die Verhältnisse zusammengefaßt worden.

Tabelle III.

$\mathfrak{C}_2^1 \rightarrow \mathfrak{C}_2^2 \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}]\}$, $< 2 \cdot 2$
$\mathfrak{C}_4^1 \rightarrow \mathfrak{C}_4^4 \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}]\}$, $< 2 \cdot 4$ bzw. $2 \cdot 2$
$\mathfrak{C}_4^3 \rightarrow \mathfrak{C}_4^{2,4} \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}]\}$, $< 2 \cdot 4$
$\mathfrak{C}_4^4 \rightarrow \mathfrak{C}_4^{2,4} \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}] + [m''\ n''\ p + \frac{1}{2}] + [m''' n''' p + \frac{3}{2}]\}$, $< 4 \cdot 4$
$\mathfrak{C}_3^1 \rightarrow \mathfrak{C}_3^{2,3} \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{3}] + [m''\ n''\ p + \frac{2}{3}]\}$, $< 3 \cdot 3$
$\mathfrak{C}_6^1 \rightarrow \mathfrak{C}_6^6 \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}]\}$, $< 2 \cdot 6$ bzw. $< 2 \cdot 2$
$\mathfrak{C}_6^{4,5} \rightarrow \mathfrak{C}_6^{2,3} \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}]\}$, $< 2 \cdot 6$
$\mathfrak{C}_6^1 \rightarrow \mathfrak{C}_6^{4,5} \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}] + [m''\ n''\ p + \frac{3}{2}]\}$, $< 3 \cdot 6$ bzw. $< 3 \cdot 3$
$\mathfrak{C}_6^6 \rightarrow \mathfrak{C}_6^{2,3} \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}] + [m''\ n''\ p + \frac{3}{2}]\}$, $< 3 \cdot 6$
$\mathfrak{C}_6^1 \rightarrow \mathfrak{C}_6^{2,3} \{[m\ n\ p] + [m'\ n'\ p + \frac{1}{2}] + [m''\ n''\ p + \frac{1}{2}] + [m''' n''' p + \frac{1}{2}] + [m'''' n'''' p + \frac{3}{2}] + [m'''''' n'''''' p + \frac{5}{2}]\}$, $< 6 \cdot 6$.

Die anschließend an die Kompositionssymbole beigefügten Faktoren geben die Anzahl gleicher Streuzentren im Elementarparallelepiped, für die das Raumsystem mit kleinerer Schraubungskomponente als eindeutig bestimmt gelten kann, gegenüber demjenigen Raumsystem, in welchem die Komposition durchgeführt wird. Erst dann, wenn zum mindesten eine Sorte von Streuzentren in einer größeren Anzahl im Elementarbereich auftritt, muß die Mehrdeutigkeit durch Komposition erörtert werden.

Vergleicht man zwei beliebige Raumsysteme miteinander, so geht man am zweckmäßigsten von der gleichen Darstellung der beiden Raumsysteme durch charakteristische Untergruppen aus, die sich bereits für die Ab-

leitung der Örter der elementaren Auslöschungsgesetze bewährt hat. Man wählt als Darstellungen durch charakteristische Untergruppen diejenigen, welche die größte Zahl Untergruppen \mathfrak{C}_s enthalten. Hernach führt man für die einzelnen Untergruppen die Betrachtung entsprechend den vorangehenden Bemerkungen durch und kann demzufolge angeben, bis zu welcher Zahl von Streuzentren für eine Basis, welche solche von nur einer Art enthält, die Raumgruppenbestimmung als sicher anzusehen ist. Sind mehrere Sorten von Streuzentren vorhanden, so folgen aus diesen Überlegungen Einschränkungen für die Platzierung von mindestens einer der Sorten verschiedener Streuzentren. Welche Streuzentren sich dabei in der notwendigen allgemeinen Lage zu den Symmetrieelementen befinden, um die Selektion als im Indizesfeld beschränkte zu erhalten, ergibt sich erst aus der Verwertung weiterer Auslöschungen in höheren Ordnungen oder aus Feststellungen über den gesamten Intensitätsverlauf.

Um den Einblick in die allgemeinen Kompositionsbeziehungen einer Kristallklasse zu vertiefen, soll deren Mannigfaltigkeit für die Klasse C_{2h} explizite dargestellt werden.

Raumsystem \mathfrak{C}_{2h}^1 , charakteristische Untergruppen: $\mathfrak{C}_s^1 + \mathfrak{C}_2^1$.

Keines der nicht symmorphen Raumsysteme kann das Selektionsverhalten des Raumsystems \mathfrak{C}_{2h}^1 aufweisen.

Raumsystem \mathfrak{C}_{2h}^2 , charakteristische Untergruppen: $\mathfrak{C}_s^1 + \mathfrak{C}_2^2$.

Das Verhalten von \mathfrak{C}_{2h}^2 ist möglich, wenn in \mathfrak{C}_{2h}^1 die Komposition vorliegt:

$$\{[mnp]\} + \{[m'n + \frac{1}{2}p']\}.$$

Damit ist eine Besetzung der Digyren in \mathfrak{C}_{2h}^1 unvereinbar, damit implizit auch eine solche der Punktlage C_{2h} . Enthält ein Elementarbereich mit diesen Auslöschungen nur zwei gleiche Streuzentren, so ist die Raumgruppe \mathfrak{C}_{2h}^2 eindeutig bestimmt. Ist die Zahl der Streuzentren für alle Sorten gleich zwei, so gilt dasselbe.

Raumsystem \mathfrak{C}_{2h}^4 , charakteristische Untergruppen: $\mathfrak{C}_s^2 + \mathfrak{C}_2^1$.

Das Verhalten von \mathfrak{C}_{2h}^4 ist möglich, wenn in \mathfrak{C}_{2h}^1 die Komposition vorliegt:

$$\{[mnp]\} + \{[m'n'p + \frac{1}{2}]\}.$$

Mit dieser steht eine Besetzung der Spiegelebenen in \mathfrak{C}_{2h}^1 in Widerspruch, damit auch eine Lokalisierung in Punktlagen C_{2h} . Wiederum gilt, daß, wenn eine Basis mit diesen Auslöschungen nur zwei gleiche Streuzentren (oder verschiedene Streuzentren, aber alle in der Anzahl 2) enthält, die Raumgruppe \mathfrak{C}_{2h}^4 als eindeutig bestimmt gelten darf.

Raumsystem \mathfrak{C}_{2h}^5 , charakteristische Untergruppen: $\mathfrak{C}_s^2 + \mathfrak{C}_2^2$.

Das Verhalten von \mathfrak{C}_{2h}^5 erzeugen äquivalent die folgenden Kompositionen in den folgenden Raumsystemen:

in \mathfrak{C}_{2h}^1 die Komposition: $\{[mnp]\} + \{[m'n + \frac{1}{2}p']\} + \{[m'n'p + \frac{1}{2}]\} + \{[m'n' + \frac{1}{2}p + \frac{1}{2}]\}$

in \mathfrak{C}_{2h}^2 die Komposition: $\{[mnp]\} + \{[m'n'p + \frac{1}{2}]\}$

in \mathfrak{C}_{2h}^4 die Komposition: $\{[mnp]\} + \{[m'n + \frac{1}{2}p']\}$.

Für alle drei Raumsysteme, die nach \mathbb{C}_{2h}^5 komponierbar sind, scheidet eine Besetzung der Punktsymmetrieelemente allein aus, da mit einer solchen eine Folge von Auslöschungen außerhalb der leitenden (hkl) -Mannigfaltigkeiten der Klasse C_{2h} verbunden sein müßte. Sind in einer Basis mit den für \mathbb{C}_{2h}^5 charakteristischen Auslöschungen nur vier gleiche Streuzentren enthalten, so darf die Raumgruppe als eindeutig bestimmt gelten.

Raumsystem \mathbb{C}_{2h}^3 . Charakteristische Untergruppen: $\mathbb{C}_2^3 + \mathbb{C}_2^3$.

Das Verhalten von \mathbb{C}_{2h}^3 ergeben durch Komposition die Raumsysteme \mathbb{C}_{2h}^1 und \mathbb{C}_{2h}^2 . Örter, welche Träger dieser Auslöschungen (dann erzeugt durch Symmetrieeoperationen und nicht durch Komposition) sind, besitzen die Raumsysteme \mathbb{C}_{2h}^2 und \mathbb{C}_{2h}^5 .

Raumsystem \mathbb{C}_{2h}^6 . Charakteristische Untergruppen: $\mathbb{C}_2^4 + \mathbb{C}_2^3$.

Das Verhalten von \mathbb{C}_{2h}^6 ergeben durch Kompositionen die folgenden Raumsysteme:

$\mathbb{C}_{2h}^{1,2}$ mit der Komposition $\{[mnp] + [mn'p + \frac{1}{2}]\} + \{[m + \frac{1}{2}n + \frac{1}{2}p] + [m + \frac{1}{2}n + \frac{1}{2}p]\}$

$\mathbb{C}_{2h}^{4,5}$ mit der Komposition $\{[mnp] + [m + \frac{1}{2}n + \frac{1}{2}p]\}$

\mathbb{C}_{2h}^3 mit der Komposition $\{[mnp] + [mn'p + \frac{1}{2}]\}$.

Die speziellen Punktlagen $[\frac{1}{4}n0]$ bzw. $[\frac{1}{4}n\frac{1}{2}]$ in \mathbb{C}_{2h}^2 nach dem Schema

$$\{[mnp] + [mn'p + \frac{1}{2}]\}$$

komponiert, ergeben bereits die Selektion von \mathbb{C}_{2h}^6 . Die Punktlagen $[\frac{1}{4}n\frac{1}{2}]$ in \mathbb{C}_{2h}^5 schließlich besitzen durch den Charakter des Raumsystems und durch ihren speziellen Bau (einfach flächenzentriert!) die gesamte Zahl der Auslöschungen, welche für \mathbb{C}_{2h}^6 charakteristisch sind. Fälle wie den letzten leitet man leicht an Hand der Tabellen der kristallstrukturell wichtigen Auswahlregeln ab. Sind in \mathbb{C}_{2h}^6 vier gleichartige Streuzentren vorhanden, so ist das Raumsystem \mathbb{C}_{2h}^3 ausgeschlossen, da bei einer solchen Anzahl der Streuzentren die Komposition Punktlagen C_{2h} verwenden müßte, woraus notwendig eine integrale Regel folgen würde. Für eine Komposition mit mehr als vier Streuzentren dürfen keine Punktlagen C_s benutzt werden, da hierbei in allen Fällen eine integrale Selektion resultieren muß. Analoge Überlegungen führen auch gegenüber den andern Raumsystemen auf die Anzahl vier als Zahl von gleichen Streuzentren, für welche \mathbb{C}_{2h}^6 eindeutig erwiesen ist.

d) Bestimmung der Basiskoordinaten.

Die Untersuchung der Translationsgruppe und des Raumsystems einer Kristallstruktur sind Spezialaufgaben, die sich bei der Ermittlung der Basiskoordination stellen. Es erweist sich normalerweise als zweckmäßig, deren Lösung als erste Phasen einer Strukturbestimmung anzustreben, weil die Kenntnis der Symmetrieeigenschaften des Kristallraumes, dem eine Kristallstruktur angehört, die Ermittlung der Basiskoordinaten wesentlich erleichtern kann (zur Bestimmung der Basiskoordinaten wird die Ermittlung der Koordinatentripel $[mnp]$ und der Eigensymmetrie der Punkte $[mnp]$ gerechnet). Um die Strukturbestimmung nach ermittelter Translationsgruppe und bestimmtem Raumsystem zu Ende zu führen, müssen nunmehr die unbenutzt gebliebenen Auslöschungen, vorzugsweise

die in höheren Ordnungen, zur Lokalisierung der einzelnen Streuzentren im Symmetriegerüst des bestimmten Kristallraumes verwendet werden. Gleichzeitig wird man die Symmetrieeigenschaften desselben, voran die Zähligkeiten seiner verschiedenen Punktlagen, mit den Anzahlen von Streuzentren in Beziehung setzen. Genügen die vorhandenen Auslöschungen nicht, um alle Basiskoordinatentripel zu eruieren, so hat eine Untersuchung der Intensitäten überhaupt einzusetzen. Diese wird mit Vorteil von den Auslöschungen ausgehen, die den einzelnen Komplexen, aber nicht der gesamten Basisgruppe zukommen, namentlich dann, wenn an Hand der vorangegangenen Überlegungen sich einzelne Sorten der Streuzentren bereits einwandfrei hatten placieren lassen. Die Zahl der Parameter der Struktur wird dementsprechend für diejenige Teilmannigfaltigkeit des Indizesfeldes reduziert, innerhalb welcher eine oder mehrere Streuzentrensorten an die Gesamtintensität nichts beitragen. Für diese Untersuchungen muß eine anpassungsfähige, explizite Darstellung der Auslöschungsgesetze der 230 Kristallräume des Diskontinuums gesucht werden.

Vom strukturtheoretischen Standpunkte aus muß scharf unterschieden werden, ob es gelingt, für eine Kristallstruktur die Basiskoordinaten im soeben definierten Sinn, also nach Lage und Eigensymmetrie der Punktlage, zu bestimmen, oder ob es nur möglich ist, generell die Koordinatentripel anzugeben, ohne jedoch dem einzelnen die ihm zukommende Eigensymmetrie zuzuordnen.

Beim Abschluß der Untersuchung der möglichen Mehrdeutigkeiten in der Raumgruppenbestimmung ist schließlich folgender Punkt zu diskutieren: Angenommen, daß Auslöschungen gefunden werden, welche für ein Raumsystem R charakteristisch sind. Dieselben sollen zunächst als eindeutig angesehen werden, so daß nur Basisgruppen im Raumsystem R in die Diskussion der Basiskoordinatenbestimmung eingehen. Erst im Anschluß daran suchen wir nach den Raumsystemen, welche Basisgruppen aufbauen lassen, die ebenfalls mit den beobachteten Auslöschungen vereinbar sind. Dabei fragt es sich, ob unter bloßer Berücksichtigung der Schwerpunkte die Diskussion dieser letzteren Fälle in der Diskussion aller Punktlagen des charakteristischen Raumsystems R enthalten ist, oder ob dieser gegenüber Zusatzbetrachtungen notwendig sind. Wenn nämlich die Mannigfaltigkeit der Basisgruppen in den zusätzlich möglichen Raumgruppen ein Teil derjenigen im charakteristischen Raumsystem R ist, so ist an sich die Diskussion der Basisgruppen in R erschöpfend. Die weiterhin mit den beobachteten Auslöschungen verträglichen Punktanordnungen außerhalb des Raumsystems R ergeben sich dann aus den in R mög-

lichen durch bloße Symmetriereduktion, d. h. durch Änderung der Eigensymmetrie der Punktlagen oder der Zusammengehörigkeit der Punkte oder beider. Wenn hingegen in einem zweiten Raumsystem eine Basisgruppe mit den Auslöschungen verträglich ist, die in der gesamten Mannigfaltigkeit von Basisgruppen im Raumsystem R nicht enthalten ist, genügt die Betrachtung der Raumgruppe R allein nicht, da ja ohne Berücksichtigung dieses zweiten Raumsystems mögliche Punktanordnungen übersehen werden. Im Einzelfalle liegen die Verhältnisse wie folgt: Die zusätzlich möglichen Punktanordnungen sind in denen des Raumsystems R dann enthalten, wenn sie in Raumsystemen auftreten, deren Operationen sämtlich in R enthalten sind. Diese Punktanordnungen stellen in ihrem Symmetriegrad gegenüber den Basisgruppen von R reduzierte Basisgruppen dar. Neue Fälle, die in der in R möglichen Mannigfaltigkeit nicht enthalten sind, ergeben sich in Raumsystemen, welche Operationen besitzen, die in denen von R nicht enthalten sind. Im Falle der Bestimmung der Translationsgruppe sind die Operationen der zusätzlich möglichen Raumgruppen stets in denjenigen des (mehrfach primitiven) Raumsystems R enthalten, so daß hier durch Symmetriereduktion die Gesamtheit möglicher Basisgruppen sich ableiten läßt. Im Raumsystem \mathbb{C}_2^2 liegen auf den Geraden $[\frac{1}{4}n\ 0]$ und $[\frac{1}{4}n\ \frac{1}{2}]$ Punktlagen, welche basiszentrierte Gitter bilden, so daß die Bestimmung der Translationsgruppe von \mathbb{C}_2^3 mehrdeutig erscheint. \mathbb{C}_2^3 enthält nun aber sämtliche Operationen von \mathbb{C}_2^2 , so daß die Geraden $[\frac{1}{4}n\ 0]$ und $[\frac{1}{4}n\ \frac{1}{2}]$ in \mathbb{C}_2^3 Punkte beherbergen, deren Gitterkomplexe durch diagonale Schraubung und durch die mehrfach primitive Translationsgruppe zentriert werden, also eine Entartung ihrer Koordinatentripel zeigen (dem entspricht geometrisch die Besetzung eines Punktsymmetrieelements, in unserem Falle einer Digyre). Die in \mathbb{C}_2^2 möglichen basiszentrierten Gitterkomplexe sind demnach mit den Gitterkomplexen der Symmetrie C_2 in \mathbb{C}_2^2 identisch, so daß die Diskussion des Raumsystems \mathbb{C}_2^3 die Untersuchung der in \mathbb{C}_2^2 möglichen basiszentrierten Basisgruppen als Teil enthält. Symmetriereduktion von C_2 auf C_1 führt gegebenenfalls die beiden Möglichkeiten ineinander über. Alle anderen Punktanordnungen mit Basiszentrierung in \mathbb{C}_2^2 müßten Kompositionen als erzeugende Operationen besitzen. Die Komplexe der Einzelpunktlagen sind als Teilkomplexe aber sämtlich in \mathbb{C}_2^3 enthalten, die Art der Komposition ist derart durch die beobachteten Auslöschungen eindeutig festgelegt, daß sie die Komplexe von \mathbb{C}_2^2 in jene von \mathbb{C}_2^3 überführt. Es genügt also in diesem Falle, \mathbb{C}_2^3 zunächst als eindeutig anzusehen, die Parameterbestimmung vorzunehmen und dann die Fälle möglicher Symmetriereduktionen zu betrachten.

Im Falle der Raumsystembestimmung wurden zwei verschiedene Fälle von Mehrdeutigkeiten erkannt: solche in Raumsystemen derselben Klasse und solche in Raumsystemen niedriger symmetrischer Klassen. Die oben geforderte Beziehung unter den Operationen der zusätzlich möglichen Raumgruppen zum Raumsystem R ist offenbar nur im zweiten Falle erfüllt, wenn das niedriger symmetrische Raumsystem eine Untergruppe des Raumsystems R darstellt. Elementar oder kompositionsmäßig erzeugte Auslöschungen sind dann stets mit Punktanordnungen verknüpft, welche sich durch Symmetriereduktion aus denen des Raumsystems R ergeben. Die Punkte der Ebene $[[m\ n\ \frac{1}{4}]]$ in \mathfrak{B}^4 besitzen die Auslöschungen, welche \mathfrak{B}_h^{16} kennzeichnen. Weil nun \mathfrak{B}^4 Untergruppe von \mathfrak{B}_h^6 , enthält \mathfrak{B}_h^{16} alle Operationen von \mathfrak{B}^4 , also auch die erzeugende der Auslöschungen der Komplexe von $[[m\ n\ \frac{1}{4}]]$ in \mathfrak{B}^4 . Weil nun aber die in \mathfrak{B}_h^{16} gegenüber \mathfrak{B}^4 hinzutretenden Gleitspiegelungen dieselbe relative Punktanordnung erzeugen, muß für die Punktlagen $[[m\ n\ \frac{1}{4}]]$ in \mathfrak{B}_h^{16} eine Entartung der Koordinaten eintreten, welcher die Besetzung einer Spiegelebene entspricht. Es herrschen somit die vollständig analogen Beziehungen wie bei den Translationsgruppen, so daß auch hier die Diskussion von \mathfrak{B}_h^{16} die möglichen Fälle in \mathfrak{B}^4 enthält und durch anschließende Symmetriereduktion ableiten läßt.

Anders verhält sich der erste Fall: Hier wird der Bedingung, daß die Operationen des einen Raumsystems in denjenigen des andern enthalten sind, nicht genügt. Damit ist die Möglichkeit, daß ein zweites Raumsystem gegenüber dem durch die Auslöschungen charakterisierten Raumsystem R neue Punktanordnungen enthält, die gesondert zu diskutieren sind, gegeben. Zum Beispiel: Beobachtete Auslöschungen: $(h\ 0\ l)$ fehlt, wenn $l =$ ungerade, Raumgruppenkriterium für \mathfrak{C}_s^2 . Anzahl der Streuzentren im Elementarparallelepiped $= 8$. Mögliche Punktanordnungen sind in \mathfrak{C}_s^2 und \mathfrak{C}_s^1 beispielsweise:

$$\begin{aligned} \mathfrak{C}_s^2: & \left[\begin{array}{l} [m_1\ n_1\ p_1 \mid m_1\ \bar{n}_1\ p_1 + \frac{1}{2}] \\ [m_2\ n_2\ p_2 \mid m_2\ \bar{n}_2\ p_2 + \frac{1}{2}] \\ [m_3\ n_3\ p_3 \mid m_3\ \bar{n}_3\ p_3 + \frac{1}{2}] \\ [m_4\ n_4\ p_4 \mid m_4\ \bar{n}_4\ p_4 + \frac{1}{2}] \end{array} \right] \\ \mathfrak{C}_s^1: & \left. \begin{array}{l} [m_1\ n_1\ p_1 \mid m_1\ \bar{n}_1\ p_1] \\ [m_1\ n_2\ p_1 + \frac{1}{2} \mid m_1\ \bar{n}_2\ p_1 + \frac{1}{2}] \\ [m_3\ n_3\ p_3 \mid m_3\ \bar{n}_3\ p_3] \\ [m_3\ n_4\ p_3 + \frac{1}{2} \mid m_3\ \bar{n}_4\ p_3 + \frac{1}{2}] \end{array} \right\} . \end{aligned}$$

Die für \mathfrak{C}_s^1 erwähnte Basisgruppe läßt sich in \mathfrak{C}_s^2 nicht erzeugen. Auch eine vollständige Diskussion aller in \mathfrak{C}_s^2 möglichen Punktanord-

nungen führt nicht auf diesen Fall, der somit ohne Zusatzbetrachtung übersehen wird. Damit würden natürlich auch sämtliche aus ihm sich ergebenden Fälle niedriger Symmetrie nicht beachtet.

Zusammenfassend läßt sich daher folgende Aussage machen: Die mit den beobachteten Auslöschungen verträglichen Fälle lassen sich aus dem durch diese Auslöschungen charakterisierten Raumsystem ableiten, wenn sie in Raumgruppen auftreten, deren Operationen in denen des letzteren enthalten sind. Die übrigen Möglichkeiten von Basisgruppen, die mit den beobachteten Auslöschungen verträglich sind, folgen erst aus den hier abgeleiteten Zusatzbetrachtungen. Methodisch bedeutet dies folgendes: Zusatzbetrachtungen sind notwendig für die Mehrdeutigkeiten der Raumsystembestimmung innerhalb der Raumsysteme derselben Klasse und Translationsgruppe. Es ist beispielsweise \mathbb{C}_{2h}^6 gegen \mathbb{C}_{2h}^3 zusätzlich zu diskutieren; dabei enthält diese Diskussion gleichzeitig auch diejenige gegenüber \mathbb{C}_{2h}^1 und \mathbb{C}_{2h}^2 . Alle übrigen Fälle, wie zum Beispiel diejenigen in \mathbb{C}_{2h}^5 , folgen durch Symmetriereduktion.

Ein besonders ausgezeichneter Fall liegt dann vor, wenn die Auslöschungen hinreichen, um die Basiskoordinaten in ihrer Gesamtheit festzulegen. Man kann dann, statt die Teilbestimmungen entsprechend den hier beschriebenen Diskussionen durchzuführen, zunächst aus den Auslöschungsgesetzen die Koordinatentripel $[[mnp]]$ bestimmen, ohne nach deren Symmetrie zu fragen, und damit die Schwerpunktsanordnung der Basis erhalten. Dann ergibt sich die rein strukturtheoretische Aufgabe, zu untersuchen, in welchen Kristallräumen des Diskontinuums eine solche Punktanordnung möglich ist, und welche Einzelsymmetriebedingungen in den verschiedenen Fällen die Streuzentren zu erfüllen haben¹⁾. Das Endresultat der beiden Analysen einer Kristallstruktur muß selbstverständlich zum gleichen Ziel führen, und es wird vom Einzelfall abhängen, welcher Weg der Kristallstrukturbestimmung sich als der rationellere erweist.

§ 10. Pseudosymmetrien.

Die vergleichende Betrachtung der Kristallstrukturen sucht unter den ermittelten Strukturen Beziehungen aufzustellen, um damit die Faktoren erfassen zu können (bzw. die mit ihnen zusammenhängenden strukturell direkt wahrnehmbaren Tatbestände), auf die die Auslese der tatsächlich

1) Als Beispiel dieser Behandlung siehe E. Brandenberger, Zur Frage der Kristallstruktur des Eises. Z. Krist. **73**, 429. 1930.

realisierten Strukturen aus der strukturgeometrisch sich bietenden Mannigfaltigkeit zurückgeht. Im Falle niedriger symmetrischer Strukturen ist dabei der Nachweis von Pseudosymmetrien wesentlich. Weil aber höher symmetrische Basisgruppen einer Analyse leichter zugänglich sind, und zudem die Auslöschungsgesetze sich zur speziellen Metrik der Basisgruppe invariant verhalten, fragt es sich, in welcher Weise sich die Lehre von den Pseudosymmetrien bei einer Strukturanalyse verwenden läßt. Nach dem am Ausgang des § 2 Bemerkten kann es sich dabei natürlich nur um die Betrachtung jener Symmetrieeen handeln, die in der Punktanordnung zum Ausdruck kommen und nicht um jene, von der Strukturanalyse noch nicht erfaßt, die in der Teilchensymmetrie liegen. Dieser Zusammenhang erlaubt, den dort ausgesprochenen Befund auch so zu deuten, daß die Strukturanalyse in ihrer heutigen Form zwischen Symmetrie (das sei der höchst symmetrisch aufgefaßte Fall) und damit verwandten »inneren Pseudosymmetrien« nicht unterscheiden kann¹⁾.

Die Betrachtung der Pseudosymmetrien in diesem Sinne kann erst nach Einführung der Komposition erfolgen, da ohne die Möglichkeit der Komposition nur die »inneren Pseudosymmetrien« sich darstellen lassen, indem dabei von einem niedrig symmetrischen Komplex bestimmter Zähligkeiten ausgegangen wird, der im Falle einer speziellen Metrik der Basisgruppe insofern höher symmetrisch wird, als die Eigensymmetrie der Punktlage steigt. Die Komposition von Komplexen in speziellen Lagebeziehungen dagegen führt von niedrig symmetrischen Komplexen bei gleicher oder nur partiell sich ändernder Teilchensymmetrie zu höher symmetrischen Punkthaufen. Dabei sind zweierlei Fälle zu unterscheiden:

a) Die Auslöschungen eines höher symmetrischen Strukturtyps, der seinerseits aus einem Gitterkomplex oder bereits aus einer Komposition solcher bestehen kann, werden beobachtet. In der Metrik der Basisgruppe jedoch sind keine Anklänge an höher symmetrische Verhältnisse vorhanden. Der Sinn der beobachteten Selektion unter den Reflexen liegt dann offenbar lediglich darin, daß auch im niedriger symmetrischen Fall eine analoge, relative Punktanordnung existiert, wobei eine Reihe von Symmetrieoperationen der höher symmetrischen Basis im Falle der niedriger symmetrischen durch Kompositionen ersetzt wurden. Diese

1) In einem gewissen Sinn ergibt sich daher folgender Parallelismus mit den phänomenologisch wahrnehmbaren Verhältnissen: die »inneren Pseudosymmetrien« entsprechen den makroskopischen Pseudosymmetrien, wie sie sich in der Metrik des Kristalles äußern, die »äußeren Pseudosymmetrien«, die auf Kompositionen zurückführen, dagegen den durch Zwillingsbildung angestrebten höheren Symmetrien im Falle makroskopischer Betrachtung.

Feststellung entscheidet noch nicht darüber, ob die Struktur als deformierte dem höher symmetrischen Typ zugezählt werden darf, da aus den Auslöschungen (wie den Intensitätsverhältnissen überhaupt) über die absoluten, topologischen Qualitäten einer Struktur keine Aussagen folgen. Diese sind erst möglich, wenn die spezielle Metrik der Basis, d. h. jene der Translationsgruppe, mit in Betracht gezogen wird. Die Strukturanalyse wird indessen diese Zusammenhänge auch dann berücksichtigen, wenn den topologischen Bedingungen eines Strukturtypus nicht genügt wird, indem sie ihr in ihren ersten Phasen wertvolle Wegleitung sein können.

b) Zunächst wie in Fall a) Auslöschungen eines höher symmetrischen Strukturtypus beobachtet; zusätzlich dazu zeigt die Metrik der Basisgruppe eine Annäherung an höher symmetrische Verhältnisse. In diesem Falle folgt daraus naturgemäß, daß die Punktanordnung im niedriger symmetrischen Fall nicht nur in ihren relativen Lagebeziehungen, sondern auch in ihren absoluten an höhere Symmetrie erinnert. Dabei ist es dann gerechtfertigt, die Struktur als eine deformierte des betreffenden, höher symmetrischen Typus anzusehen. Auf die Aufgabe, einem bestimmten Strukturtyp alle mit ihm verträglichen Basisgruppen unter Angabe der dann herrschenden Parameterwerte der Translationsgruppe zuzuordnen, soll hier nicht eingegangen werden; die Aufgabe erscheint um so sinnvoller, als eine Betrachtung des experimentell bestimmten Materials zur Erfahrung führt, daß die feste Materie nur eine auffallend kleine Auslese unter der strukturgeometrischen Mannigfaltigkeit realisiert (P. Niggli¹).

Um Pseudosymmetrien in einem solchen Sinne aufzudecken, genügt es nicht mehr, die leitenden Zonen und Ebenenserien der betreffenden Klasse allein zu betrachten, sondern es müssen alle jene (hkl) -Mannigfaltigkeiten mitberücksichtigt werden, welche bei ansteigender Symmetrie zu leitenden Zonen oder Ebenenserien werden. Zweckmäßig wird man sich auch dabei von der Gruppenstruktur der Symmetrien der einzelnen Kristallräume leiten lassen und zunächst feststellen, in welchen höher symmetrischen Kristallräumen die gegebene Raumgruppe als Untergruppe enthalten ist. Dadurch ist ein systematischer Weg gegeben, um mit ansteigender Symmetrie eine immer größere Zahl von leitenden (hkl) -Bereichen in die Diskussion aufzunehmen. Leitende Ebenenserien niedrig symmetrischer Raumsysteme können bei wachsender Symmetrie in leitende Zonen übergehen und damit ihre Selbständigkeit als Geltungsbereich verlieren. Die gegebene Darstellung der Raumsystemsbestimmung ist einer

1) P. Niggli, Stereochemie der Kristallverbindungen. Z. Krist. Im Erscheinen.

solchen Erweiterung auf die Fragen nach bestehenden Pseudosymmetrien angepaßt. Bei ihrer praktischen Anwendung darf nicht vergessen werden, daß erst nach einer geeigneten Transformation der Einheitsvektoren durchsichtige Beziehungen zu höher symmetrisch struierten Basisgruppen sich ergeben können.

Die Untersuchung der Auslöschungsgesetze der 230 Raumsysteme, ihrer systematischen Darstellung und strukturanalytischen Verwertung hat Herr Professor P. Niggli im Sommer 1927 in seiner Vorlesung über Kristallstrukturlehre angeregt. Für den Vorschlag, diese Ausarbeitung zu übernehmen, und die stete Förderung, der ich dabei teilhaftig werden durfte, bin ich meinem verehrten Lehrer sehr zu Dank verpflichtet.

Zürich, Mineralogisch-petrographisches Institut
der Eidgenössischen Technischen Hochschule, Juni 1930.

Eingegangen den 18. Juli 1930.

Curriculum vitae.

Ich wurde am 28. Februar 1906 in Zürich geboren, durchlief das kantonale Gymnasium in Zürich und trat hierauf im Herbst 1924 in die Abteilung für Fachlehrer der Naturwissenschaften an der Eidgenössischen Technischen Hochschule ein. Im Frühling 1928 bestand ich die Diplomprüfung und war hernach als Assistent am mineralogischen-petrographischen Institut tätig. Seit Winter 1928 widmete ich mich kristallstrukturellen Untersuchungen und strukturtheoretischen Arbeiten, aus denen die vorgelegte Promotionsarbeit hervorging.

Druck von Breitkopf & Härtel in Leipzig.