

# Über einige Beziehungen bei den kristallographischen Symmetrieoperationen

Autor(en): **Wojno, Tadeusz**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Schweizerische mineralogische und petrographische Mitteilungen  
= Bulletin suisse de minéralogie et pétrographie**

Band (Jahr): **28 (1948)**

Heft 1: **Festschrift P. Niggli zu seinem 60. Geburtstag den 26. Juni 1948**

PDF erstellt am: **17.07.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-23026>

## **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

## **Haftungsausschluss**

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

# Über einige Beziehungen bei den kristallographischen Symmetrieoperationen

Von *Tadeusz Wojno*, Warszawa (Polen)

Sämtliche Symmetrieoperationen und Symmetriegruppen (Zyklen) der geometrischen Kristallographie sind in zwei höchstsymmetrischen einfachen Formen, dem Hexakisoktaeder (hkl) und der dihexagonalen Dipyramide (hkīl) enthalten. Alle anderen Symmetriefälle sind Untergruppen davon, je nachdem das Achsenkreuz drei- oder vierachsig ist.

Jedes Einzelsymbol der Gruppe (hkl) bzw. (hkīl) ist mit jedem anderen Symbol durch eine besondere Symmetrieoperation verbunden. Rein zahlenmässig betrachtet, beruhen diese Operationen auf Stellungs- und Vorzeichenwechsel der Indizes, wobei bekanntlich in der (hkl)-Gruppe 6 Permutationen mit 8 Vorzeichenvariationen kombiniert 48 Fälle ergeben, dagegen in der (hkīl)-Gruppe zwar auch 6 Permutationen der ersten drei Indizes vorkommen, aber die Anzahl der Vorzeichenvariationen auf bloss zwei beschränkt ist, weil h und k stets das gleiche Vorzeichen haben, welches demjenigen von i entgegengesetzt ist. Mit den beiden möglichen Vorzeichen am Index l, welcher an den Permutationen nicht teilnimmt, ergibt das 24 Fälle.

Man bekommt eine anschauliche Übersicht über alle möglichen Beziehungen zweier Symbole zu einander, wenn man, wie ich es früher vorgeschlagen habe<sup>1)</sup>, graphische Zeichen einführt, bestehend aus Verbindungsstrichen zwischen den beiden untereinander aufgeschriebenen Symbolen; diese Striche weisen darauf hin, an welche Stelle der betreffende Index des oberen Symbols bei der Symmetrieoperation hingehet. Der punktierte Strich bedeutet Vorzeichenwechsel. So wird z. B. der Übergang vom hkl zu khī mit  $\times$  bezeichnet, weil die Beziehung

$$\begin{array}{c} hkl \\ \times \\ kh\bar{l} \end{array}$$

<sup>1)</sup> Archive du Lab. de Min. de la Soc. Sc. de Varsovie 1 (1925), 153—62.

besteht, bei welcher h und k ihre Plätze wechseln und l zwar am gleichen Platz bleibt, aber das Vorzeichen ändert.

Sämtliche Zeichen der Symmetrieoperationen sind in der Tabelle S. 123 zusammengestellt. Sie haben sich recht gut bewährt, wenn man z. B. alle Symbole aufschreiben will, welche zu einem Zyklus gehören, also durch Wiederholung der gleichen Operation bis zur Identität erhalten werden. Auch kann man sie dazu benutzen, um alle Flächensymbole einer einfachen Form aus dem gegebenen Symmetrieminimum einer Klasse abzuleiten. Man kann z. B. leicht zeigen, dass zwei dreizählige Achsen  $\left[\frac{3}{3}\right][111]$  und  $\left[\frac{3}{3}\right][\bar{1}\bar{1}1]$  genügen, um das tetraedrische Pentagondodekaeder abzuleiten. Man erhält nämlich zunächst aus (hkl) mit Hilfe des entsprechenden Zeichens für  $\left[\frac{3}{3}\right][111]$  aus der Tabelle <sup>2)</sup>:

$$1. \text{ hkl, } \rightarrow 2. \text{ klh, } \rightarrow 3. \text{ lhk}$$

Nochmalige Wiederholung gibt wieder das Ausgangssymbol hkl.

Die drei erhaltenen Symbole werden durch den Zyklus der  $\left[\frac{3}{3}\right][\bar{1}\bar{1}1]$  Achse folgendermassen umgewandelt:

$$\begin{aligned} (1) \text{ hkl, } &\rightarrow 4. \text{ klh, } \rightarrow 5. \bar{1}\bar{h}\bar{k} \\ (2) \text{ klh, } &\rightarrow 6. \bar{1}\bar{h}\bar{k}, \rightarrow 7. \bar{h}\bar{k}\bar{l} \\ (3) \text{ lhk, } &\rightarrow 8. \bar{h}\bar{k}\bar{l}, \rightarrow 9. \bar{k}\bar{l}\bar{h} \end{aligned}$$

Davon sind die Symbole 4. bis 9. noch weiterer Umwandlung durch  $\left[\frac{3}{3}\right][111]$  fähig, wobei z. T. bereits abgeleitete Symbole entstehen können:

$$\begin{aligned} (4) \text{ klh, } &\rightarrow 10. \bar{1}\bar{h}\bar{k}, \rightarrow (7) \bar{h}\bar{k}\bar{l} \\ (5) \bar{1}\bar{h}\bar{k}, &\rightarrow (8) \bar{h}\bar{k}\bar{l}, \rightarrow 11. \bar{k}\bar{l}\bar{h} \\ (6) \bar{1}\bar{h}\bar{k}, &\rightarrow 12. \bar{h}\bar{k}\bar{l}, \rightarrow (9) \bar{k}\bar{l}\bar{h} \end{aligned}$$

was drei weitere Symbole 10. bis 12. ergibt. Hier wird die Ableitung abgebrochen, weil in den letzten Zyklen die Symbole 7. bis 9. bereits aufgetreten sind.

Nimmt man jetzt aber der Reihe nach alle Symbole vor, deren Beziehung zu hkl noch nicht aus den obigen Operationen hervorgeht,

<sup>2)</sup> Auf die Benutzung der Zeichen im laufenden Text muß ich wohl aus typographischen Rücksichten verzichten.

also 6., 7., 8., 9., 10., 11. und 12., so erhält man mit Hilfe der Tabelle alle anderen Symmetrieelemente, und zwar

aus 1. mit 6., 9., 10. und 11. — die beiden anderen dreizähligen Achsen  $[\bar{1}\bar{1}1]$  und  $[\bar{1}1\bar{1}]$  mit doppeltem Drehungssinn,

aus 1. mit 7., 8. und 10. — drei zweizählige Achsen  $[100]$ ,  $[010]$  und  $[001]$ .

Diese letzte Ableitung lässt sich aber auch ohne Flächensymbole direkt mit Operationszeichen ausführen, wenn man sie paarweise unter einander setzt, das Endresultat beider Operationen ermittelt und zu neuem Zeichen zusammensetzt. So folgt aus den beiden Zeichen für  $\begin{bmatrix} 3 \\ 3 \end{bmatrix} [111] \rightarrow$  und  $\begin{bmatrix} 3 \\ -3 \end{bmatrix} [\bar{1}\bar{1}1] \rightarrow$  (mit rechtem Drehungssinn,  $\rightarrow$  bezeichnet) die ebenfalls rechte  $[\bar{1}\bar{1}1]$  Achse, aus  $[\bar{1}\bar{1}1] \leftarrow$  (links) und  $[111] \rightarrow$  (rechts) — die zweizählige  $[100]$  Achse, usw.

Ebenso leicht lassen sich auf diese Weise alle Aufgaben lösen, die bei der Ableitung der Kristallklassen aus den Teilspiegelebenen (P. NIGGLI, Das Universalsymmetrieelement, N. J. f. Min. BB. LVII, Abt. A. 1927, S. 617—630; G. WULFF in seiner russischen Anleitung zur Kristallographie 1904) vorkommen. Nimmt man z. B. an, im kubischen System seien die Ebenen  $(001)$ ,  $(1\bar{1}0)$  und  $(0\bar{1}1)$  Teilspiegelebenen, die nur zu dreien spiegeln, so folgt, wenn man ihre Zeichen in dieser Reihenfolge unter einander setzt, dass ihre Gesamtwirkung der Spiegelinversionsachse  $\begin{bmatrix} \bar{6} \\ \bar{6} \end{bmatrix} [\bar{1}\bar{1}1] \leftarrow$  gleichkommt. Ändert man die Reihenfolge, so bekommt man dazu auch  $\begin{bmatrix} \bar{6} \\ \bar{6} \end{bmatrix} [1\bar{1}1]$ . Führt man aber die Ableitung weiter bis zum Ende, so folgt daraus die Symmetrie der kubisch paramorphen Klasse.

Die Zähligkeit der Symmetrieeoperationen ist an den graphischen Zeichen leicht abzulesen, wenn man überlegt, nach wievielen Einzeloperationen jeder Index in seine Ausgangsstellung mit seinem ursprünglichen Vorzeichen zurückkehrt.

U n ä r ist nur die Identität  $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ , bei der weder Platz- noch Vorzeichenwechsel stattfindet.

B i n ä r sind diejenigen Operationen, bei denen

a) bloss Vorzeichenwechsel, aber kein Platzwechsel stattfindet, also — mit  $(hkl)$  bzw.  $(hk\bar{l})$  als Ausgangssymbol — zweizählige

Achsen, z. B.  $\left[\frac{2}{2}\right][100] \dots (hkl)$ ,  $\left[\frac{2}{2}\right][0001] \dots (hkil)$ ; Symmetrieebenen  $\left[\frac{-2}{-2}\right](100) \dots (hkl)$ ,  $\left[\frac{-2}{-2}\right](0001) \dots (hkil)$  und Symmetriezentrum  $\left[\frac{\bar{2}}{2}\right]$ ,

b) zwei Indizes Platz wechseln und entweder kein Vorzeichenwechsel stattfindet, wie bei den S. E.  $\left[\frac{-2}{-2}\right](0\bar{1}1) \dots (h\bar{l}k)$ ,  $\left[\frac{-2}{-2}\right](01\bar{1}0) \dots (h\bar{i}kl)$ , oder derjenige Index sein Vorzeichen ändert, welcher an derselben Stelle bleibt, wie bei den Achsen  $\left[\frac{2}{2}\right][011] \dots (\bar{h}lk)$ ,  $\left[\frac{2}{2}\right][2\bar{1}\bar{1}0] \dots (h\bar{i}k\bar{l})$ , oder schliesslich beide verstellbare Indizes gleichzeitig ihre Vorzeichen ändern, gleichgültig, was mit dem dritten Index geschieht, wie bei  $\left[\frac{-2}{-2}\right](011) \dots (h\bar{l}k)$ ,  $\left[\frac{2}{2}\right][0\bar{1}1] \dots (h\bar{l}k)$ .

Für hexagonale Symbole ist ein ausreichendes Anzeichen dafür, dass die Operation binär ist, wenn kein Platzwechsel, oder zwei Platzwechsel vorkommen, da alle ternären und senären Operationen dreifachen Platzwechsel erfordern. Dabei wechseln in allen Operationen die ersten drei Indizes ihre Vorzeichen entweder gar nicht, oder alle drei gleichzeitig; der vierte Index bleibt stets an demselben Ort und kann deshalb den sonst binären Charakter nicht stören.

Ternär sind diejenigen Operationen, bei denen alle drei, bzw. erste drei Indizes Platz wechseln und ihre Vorzeichen dabei entweder unverändert bleiben, wie bei  $\left[\frac{3}{3}\right][111] \dots (klh \text{ und } lkh)$ ,  $\left[\frac{3}{3}\right][0001] \dots (kihl \text{ und } ihkl)$ , oder zwei Vorzeichen geändert werden und das dritte nicht, wie bei  $\left[\frac{3}{3}\right][1\bar{1}1] \dots (l\bar{h}k \text{ und } k\bar{l}h)$ . (Letzterer Fall ist bei den Bravais'schen Symbolen nicht möglich.) Es muss nämlich, damit nach drei Operationen eines Zyklus das Symbol seine ursprüngliche Gestalt bekommt, jeder Index, welcher einmal sein Vorzeichen geändert hat, es nachher noch einmal ändern. Das bedeutet aber, dass im ternären Zeichen zwei punktierte Striche vorkommen. Dagegen kann der Platzwechsel aller drei Indizes unter gleichzeitigem unpaarigen Vorzeichenwechsel erst nach sechs Operationen zum Ausgangssymbol führen: die Operation ist senär, wie bei  $\left[\frac{\bar{6}}{\bar{6}}\right][111] \dots (k\bar{l}h \text{ und } l\bar{h}k)$ ,  $\left[\frac{\bar{6}}{\bar{6}}\right][1\bar{1}1] \dots (\bar{l}hk \text{ und } k\bar{l}h)$ ,  $[0001]$  für alle drei Fälle  $\left[\frac{\bar{6}}{\bar{6}}\right]$ ,  $\left[\frac{-6}{-6}\right]$ ,  $\left[\frac{\bar{6}}{\bar{6}}\right]$ .

Schliesslich quaternär sind diejenigen Operationen, bei welchen zwei Platzwechsel mit einem Vorzeichenwechsel an einem der Platz wechselnden Indizes verbunden ist. Der an seinem Platz bleibende Index kann dabei entweder das ursprüngliche Vorzeichen behalten, wie bei  $\begin{bmatrix} 74 \\ 4 \end{bmatrix} [100]$ , oder ändern, wie bei  $\begin{bmatrix} \bar{4} \\ 4 \end{bmatrix} [100]$ ; nach vier Operationen ist sowieso das Ausgangssymbol erreicht. Nach zwei Operationen dieser Art aber kehren zwar die beiden verstellbaren Indizes an ihre ursprünglichen Plätze, haben aber ihre Vorzeichen geändert, was einer Drehung um eine zweizählige Achse gleichkommt, die im Zyklus der vierzähligen Achse enthalten ist.

Die Symbole der Symmetrieoperationen leitet man auf folgende Weise ab.

Für jede von ihnen ist charakteristisch, dass sie ein bestimmtes („spezielles“) Symbol entweder unverändert lässt, oder in ein Symbol mit entgegengesetzten Vorzeichen überführt. Diese beiden Arten von Spezialsymbolen werden zur Symbolisierung der Operationen gebraucht, d. h. zur Ermittlung der Lage der Symmetrieelemente im Koordinatensystem, während die Wirkung der Symmetrieelemente daraus hervorgeht, wie sie ein Symbol von ganz allgemeinem Charakter ( $hkl$  bzw.  $hk\bar{l}$ ) umändern. Geometrisch müssen die Symmetrieelemente, da sie auch Koordinatenachsen in sich selbst oder in einander überführen, symmetrische Lagen gegen dieselben haben.

1. Für die Identität ist charakteristisch, dass alle beliebigen Symbole unverändert bleiben, dass also das unveränderliche Symbol ganz allgemein  $hkl$  bzw.  $hk\bar{l}$  ist und alle mehr oder weniger speziellen Symbole mit einschliesst. Hingegen kommt bei dieser Operation die Bildung von entgegengesetzten Symbolen gar nicht vor.

Nun wird das unveränderliche Symbol auf solche Weise erhalten, dass man das allgemeine Ausgangssymbol dem nach der Operation resultierenden Symbol gleichsetzt und die dabei erhaltenen Beziehungen zwischen den Indizes in eines von den Symbolen einsetzt. Wir werden das als I. Gleichsetzung bezeichnen. Ebenso erhält man das Gegensymbol, wenn man im Ausgangssymbol alle Vorzeichen ändert und das erhaltene Symbol dem aus der Operation resultierenden gleichsetzt: wir werden das II. Gleichsetzung nennen. Für die Identität sind diese beiden Gleichsetzungen ganz trivial, weil ja die Operation selber ganz formell ist. Wir bekommen als

- I. Gleichsetzung:  $h = \bar{h}, k = k, l = l$ , und  $\bar{i} = \bar{i}$ , also  $hkl$ , bzw.  $hk\bar{l}$   
 II. Gleichsetzung:  $\bar{h} = h, \bar{k} = k, \bar{l} = l$ , und  $i = \bar{i}$ , also  $000$ , bzw.  $0000$

woraus die volle Unbestimmtheit der unveränderlichen Fläche und die Nichtexistenz der Gegenfläche bei der Identität ausgedrückt wird. Diese Zusammenstellung ist für die Identität charakteristisch.

2. Für die gewöhnlichen Drehachsen ist charakteristisch, dass eine einzige Fläche, nämlich die zur Achse senkrechte, als Einzelfläche mit unveränderlichem Symbol bestehen bleibt. Dabei wandelt nur die zweizählige Achse nach einmaliger Operation jede zu ihr parallele Fläche in ihre Gegenfläche um; alle anderen Drehachsen tun dies nicht. Demnach erwarten wir aus der I. Gleichsetzung ein spezielles Symbol, welches als Symbol der Achse gelten wird. Aus der II. Gleichsetzung muss im Falle der zweizähligen Drehachse ein mehrdeutiges Symbol eines zur Achse parallelen Flächenkomplexes hervorgehen; im Falle der drei-, vier- und sechszähligen Drehachse muss das Resultat hier  $000$  bzw.  $0000$  sein. Wir werden das an einigen Beispielen zeigen.

Beispiel 1. Ausgangssymbol

A. S.  $hkl$

Resultierendes Symbol

R. S.  $\bar{h}\bar{k}l$

Kein Platzwechsel, zwei Vorzeichenwechsel, Operation binär.

- I. Gls.  $h = \bar{h}, k = \bar{k}, l = l$ , also  $001$   
 II. Gls.  $\bar{h} = h, \bar{k} = k, \bar{l} = l$ , also  $hk0$ .

Die Operation ist also  $\left[ \frac{2}{2} \right] [001]$ ; der zur Zone der Achse gehörende Flächenkomplex ist  $(hk0)$ .

Im Falle der zweizähligen Achse erhält man das Symbol ebenfalls durch blosse Addition (Komplikationsregel) der beiden Symbole  $hkl$  und  $\bar{h}\bar{k}l$ , das Symbol  $hk0$  — durch Subtraktion.

Beispiel 2.

A. S.  $kh\bar{l}$

R. S.  $l\bar{h}k$

Zwei Platz- und drei Vorzeichenwechsel: Operation binär.

- I. Gls.  $k = l, h = \bar{h}, \bar{l} = \bar{k}$ , also  $10\bar{1}$   
 II. Gls.  $\bar{k} = l, \bar{h} = \bar{h}, l = \bar{k}$ , also  $khk$ , was  $\left[ \frac{2}{2} \right] [10\bar{1}]$  ergibt.

Das Gleiche aus der Komplikationsregel:

$$\begin{aligned} \text{Addition: } & k+l, 0, \bar{k}+\bar{l} \dots \dots 10\bar{l} \\ \text{Subtraktion: } & k-l, 2h, k-l \dots \dots k'h'k' \end{aligned}$$

Beispiel 3.

$$\begin{aligned} \text{A. S. } & hkl \\ \text{R. S. } & \bar{h}\bar{k} \end{aligned}$$

Drei Platzwechsel mit zwei Vorzeichenwechsel, Operation ternär.

$$\begin{aligned} \text{I. Gls. } & h = \bar{l}, k = \bar{h}, l = k, \text{ daraus } 1\bar{1}\bar{l} \\ \text{II. Gls. } & \bar{h} = \bar{l}, \bar{k} = \bar{h}, \bar{l} = k, \text{ daraus } 000, \text{ also } \left[ \frac{3}{3} \right] [1\bar{1}\bar{l}] \end{aligned}$$

Beispiel 4.

$$\begin{aligned} \text{A. S. } & \bar{h}\bar{k}\bar{l} \\ \text{R. S. } & \bar{h}lk \end{aligned}$$

Zwei Platzwechsel, wovon einer mit Vorzeichenwechsel, Operation quaternär.

$$\begin{aligned} \text{I. Gls. } & \bar{h} = \bar{h}, k = l, \bar{l} = k, \text{ daraus } \bar{1}00 \\ \text{II. Gls. } & h = \bar{h}, \bar{k} = l, l = k, \text{ daraus } 000, \text{ also } \left[ \frac{4}{4} \right] [\bar{1}00] \end{aligned}$$

Beispiel 5.

$$\begin{aligned} \text{A. S. } & \bar{k}\bar{i}hl \\ \text{R. S. } & \bar{i}hkl \end{aligned}$$

Platzwechsel der ersten drei Indizes, kein Vorzeichenwechsel, Operation ternär.

$$\text{I. Gls. } k = \bar{i}, \bar{i} = h, h = k, l = l$$

Da  $h + k = i$  ist und  $i > h > k$ , kann für keine von Null verschiedene Zahl  $h = k = \bar{i}$  sein. Das ergibt das Achsensymbol 0001.

$$\text{II. Gls. } \bar{k} = \bar{i}, i = h, \bar{h} = k, \bar{l} = l, \text{ also } 0000.$$

Es ist also die Achse  $\left[ \frac{3}{3} \right] [0001]$ .

Beispiel 6.

$$\begin{aligned} \text{A. S. } & \bar{k}\bar{i}hl \\ \text{R. S. } & h\bar{k}\bar{l} \end{aligned}$$

Platzwechsel der ersten drei Indizes mit drei Vorzeichenwechsel, also eine senäre Operation. Das unveränderte Vorzeichen bei  $l$  zeigt an, dass es sich nicht um eine Inversion bzw. Spiegelungsachse handelt.



I. Gls.  $\bar{k} = h, i = k, \bar{h} = \bar{i}, l = l$ , also 0001  
 II. Gls.  $k = h, \bar{i} = k, h = \bar{i}, \bar{l} = l$ , also 0000'

woraus  $\left[ \frac{6}{6} \right] [0001]$  folgt.

3. Die Spiegelungen sind den Drehungen um zweizählige Achsen in Bezug auf Vorzeichenwechsel entgegengesetzt, weil die Symmetrieebene einer zweizähligen Inversionsachse gleichkommt. Das hat zur Folge, dass die Zeichen für Spiegelungen  $\left[ \begin{smallmatrix} -2 \\ -2 \end{smallmatrix} \right]$  in der Tabelle durch Vertauschen der ausgezogenen Striche in punktierte und umgekehrt hervorgehen, der Zeichentypus aber sonst unverändert bleibt. Infolgedessen werden bei den Symmetrieebenen im Vergleich mit den entsprechenden zweizähligen Achsen die Gleichsetzungen umgestellt, so dass nun die erste Gleichsetzung ein mehrdeutiges Resultat ergibt, die zweite aber das spezielle Symbol der Ebene. Analog dem Beispiel 1. wird die Spiegelung  $\left[ \begin{smallmatrix} -2 \\ -2 \end{smallmatrix} \right] (001)$  folgendermassen ausfallen:

A. S.  $hkl$   
 R. S.  $hk\bar{l}$  (dem  $h\bar{k}l$  des Beispiels 1 entgegengesetzt)  
 I. Gls.  $h = h, k = k, l = \bar{l}$ , daraus  $hk0$   
 II. Gls.  $\bar{h} = h, \bar{k} = k, \bar{l} = \bar{l}$ , daraus  $001$

Geometrisch ausgedrückt, bedeutet das, dass bei der Spiegelung alle Flächen derjenigen Zone in sich selbst als Einzelflächen gespiegelt werden, welche bei der Drehung um die gleichnamige zweizählige Achse in Gegenflächen umgewandelt werden, und dass nur eine einzige Fläche in ihre Gegenfläche übergeführt wird, nämlich diejenige, welche zur Spiegelebene parallel ist und bei der Drehung Einzelfläche bleibt, in unserem Falle (001).

Direkte Addition und Subtraktion geben auch hier die Operationssymbole, und zwar die Addition das mehrdeutige Symbol der zur Spiegelebene senkrechten Flächen, die Subtraktion das Symbol der Spiegelebene. Aus diesen Gründen ist eine besondere Betrachtung über die Symmetrieebenen wohl überflüssig.

4. Ebenso ist die Inversion  $\left[ \begin{smallmatrix} \bar{2} \\ \bar{2} \end{smallmatrix} \right]$  der Identität entgegengesetzt. Die erste Gleichsetzung und die Addition geben 000 bzw. 0000, die zweite und die Subtraktion  $hkl$  bzw.  $hk\bar{l}$ .

5. Die gleiche Beziehung besteht zwischen den drei-, vier- und sechszähligen Drehachsen und den Drehinversions- und Spie-

g e l i n v e r s i o n s a c h s e n. Durch Änderung aller Vorzeichen bei unverändertem Zeichentypus entstehen:

aus der dreizähligen Drehachse  $\left[\frac{3}{3}\right]$  die sechszählige Spiegelinversionsachse  $\left[\frac{\bar{6}}{\bar{6}}\right]$  und zwar ebensowohl im kubischen, als auch im rhomboedrischen System,

aus der sechszähligen Drehachse  $\left[\frac{6}{6}\right]$  die sechszählige Drehinversionsachse  $\left[\frac{-6}{-6}\right]$

aus der vierzähligen Drehachse  $\left[\frac{4}{4}\right]$  die vierzählige Spiegelinversionsachse  $\left[\frac{\bar{4}}{\bar{4}}\right]$ .

In allen diesen Fällen gibt die erste Gleichsetzung 000 bzw. 0000, die zweite das Symbol der Achse.

Auf Grund der beiden Gleichsetzungen ergibt sich also folgende Unterscheidung der Operationstypen:

Ist das Resultat

der I. Gleichsetzung	der II. Gleichsetzung	so ist das betreffende Symmetrieelement
1. speziell	mehrdeutig	zweizählige Drehachse
2. speziell	000, 0000	3, 4, 6-zählige Drehachse
3. hkl, hk $\bar{l}$	000, 0000	Identität
4. 000, 0000	hkl, hk $\bar{l}$	Inversion
5. 000, 0000	speziell	4 und 6-zählige Drehinversions- oder Spiegelinversionsachse
6. mehrdeutig	speziell	Symmetrieebene

Nur bei den allgemeinen Symbolen (hkl) bzw. (hk $\bar{l}$ ) lässt sich eindeutig bestimmen, durch welche von den 48 bzw. 24 Operationen das eine Symbol aus dem anderen entsteht. Sind die Symbole mehrdeutig oder ganz speziell, wie (hkk), (hk0), (110), (hk $\bar{i}$ 0), (0001) usw., so gibt es auch mehrere Operationen, die das gegebene Paar verbinden können. Je weniger Flächen die dem Symbol entsprechende einfache Form im Vergleich mit (hkl) bzw. (hk $\bar{l}$ ) besitzt, desto mehrdeutiger wird diese Beziehung sein.

So kann man z. B. hkk in hk $\bar{k}$  auf zweierlei Weise umwandeln: einmal durch die Spiegelung in der Symmetrieebene (010), dann auch durch die Linksdrehung um die vierzählige Drehachse [100]. Schreibt man die beiden Symbole übereinander, so sieht man, dass

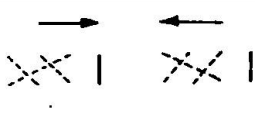


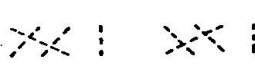


Tabelle 1

Zeichen für Symmetrieeoperationen an kristallographischen Symbolen

N.		$\rightarrow$	$\leftarrow$			
$\left[\frac{4}{4}\right]$	[100]	×	×	$\left[\frac{2}{2}\right]$	[100]	:
(4)	[010]	×	×	(2)	[010]	:
H.M.	[001]	×	×		[001]	:
$\left[\frac{4}{4}\right]$	[100]	: ×	: ×		[011]	: ×
(4)	[010]	× :	× :		[0 $\bar{1}$ 1]	: ×
	[001]	× :	× :		[101]	× ×
$\left[\frac{3}{3}\right]$	[111]	× ×	× ×		[ $\bar{1}$ 01]	× ×
(3)	[1 $\bar{1}$ 1]	× ×	× ×		[110]	×
	[ $\bar{1}$ $\bar{1}$ 1]	× ×	× ×	$\left[\frac{-2}{-2}\right]$	(100)	:
	[ $\bar{1}$ 11]	× ×	× ×	(m)	(010)	:
$\left[\frac{6}{6}\right]$	[111]	× ×	× ×		(001)	:
(3)	[1 $\bar{1}$ 1]	× ×	× ×		(011)	×
	[ $\bar{1}$ $\bar{1}$ 1]	× ×	× ×		(0 $\bar{1}$ 1)	×
	[ $\bar{1}$ 11]	× ×	× ×		(101)	× ×
	$\left[\frac{1}{1}\right]$ (1)				( $\bar{1}$ 01)	× ×
	$\left[\frac{2}{2}\right]$ ( $\bar{1}$ )	: : :			(110)	×
					(1 $\bar{1}$ 0)	×

die beiden h nur durch den senkrechten Strich verbunden werden können, hingegen die k entweder durch senkrechte Striche oder kreuzweise. Führt man aber diese beiden Operationen mit hkl als Ausgangssymbol aus, so überzeugt man sich, dass daraus als resultierende Flächen  $hk\bar{l}$  und  $h\bar{l}k$  entstehen. Dieselben R. S. bekommt

Tabelle 1 (Fortsetzung)

$\begin{bmatrix} 6 \\ 6 \end{bmatrix} (6)$	[0001]				
$\begin{bmatrix} -6 \\ -6 \end{bmatrix} (\bar{6})$	[0001]				
$\begin{bmatrix} 3 \\ 3 \end{bmatrix} (3)$	[0001]				
$\begin{bmatrix} \bar{6} \\ \bar{6} \end{bmatrix} (\bar{3})$	[0001]				
$\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} (2)$	[0001]	$\begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix} (m)$	(0001)		
	$[2\bar{1}\bar{1}0]$	$ \times $		$(2\bar{1}\bar{1}0)$	$ \times $
	$[1\bar{2}10]$	$\times $		$(1\bar{2}10)$	$\times $
	$[11\bar{2}0]$	$\times $		$(11\bar{2}0)$	$\times $
	$[01\bar{1}0]$	$ \times $		$(01\bar{1}0)$	$ \times $
	$[10\bar{1}0]$	$\times $		$(10\bar{1}0)$	$\times $
	$[1\bar{1}00]$	$\times $		$(1\bar{1}00)$	$\times $
	$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} (1)$	$    $		$\begin{bmatrix} \bar{2} \\ \bar{2} \end{bmatrix} (\bar{1})$	$    $

In [ ] Symbole nach NIGGLI, in ( ) Symbole nach HERMANN-MAUGUIN

man aber auch aus  $hkl$  als A. S. und zwar in umgekehrter Reihenfolge. Also kommen dem Symbolenpaar  $hkk$  und  $\bar{h}\bar{k}\bar{k}$  dieselben zwei Operationen zu, wie zweien Paaren  $hkl$ ,  $h\bar{k}\bar{l}$  und  $\bar{h}\bar{k}l$ ,  $\bar{h}k\bar{l}$ . Nun wissen wir, dass der Fläche  $(hkk)$  auf der Kugel ein deltoides Gebiet entspricht, welches aus den beiden Dreiecken  $(hkl)$  und  $(h\bar{k}\bar{l})$  besteht. Die Summe beider Symbole ergibt  $2h$ ,  $k+1$ ,  $1+k$ , woraus  $h'k'k'$  folgt. Um also alle zwischen zwei Symbolen speziellerer Formen bestehende Beziehungen abzuleiten, kann man entweder die Symbole selber vergleichen, wie es oben vorgeschlagen wurde, oder aber die entsprechende Fläche in Teilgebiete zerlegen und die entsprechenden Beziehungen ableiten. Die Zahl der Operationen wird der Anzahl dieser Teildreiecke gleich sein, im Falle von  $(hkk)$  also 2.

Die Symbole des Rhombendodekaeders ergeben für jedes Paar  $48:12 = 4$  Operationen. Für den Übergang vom A. S. (110) zum R. S.  $(\bar{1}01)$  sind es Rechtsdrehungen um die Spiegelinversionsachsen  $[100]$  und  $[\bar{1}\bar{1}1]$ , Linksdrehung um die Drehachse  $[1\bar{1}1]$  und zweizählige Drehung um  $[011]$ . Stellt man diese Operationen als zu verschiedenen  $(hkl)$  gehörend auf, so zeigt es sich, dass (110) die Flächen  $hkl$ ,  $khl$ ,  $hk\bar{l}$  und  $kh\bar{l}$  repräsentiert, welche tatsächlich im Pol 110 den gemeinsamen Punkt haben.

Für den Übergang vom A. S.  $10\bar{1}0$  zum R. S.  $01\bar{1}0$  taugen: die Linksdrehung um die sechszählige Achse  $[0001]$ , Rechtsdrehung um die gleichnamige Spiegelinversionsachse, Spiegelung nach  $(1\bar{1}00)$  und zweizählige Drehung um  $[11\bar{2}0]$ , also vier Operationen, entsprechend der Flächenzahl 6 des Prismas und den 4 im Punkte  $10\bar{1}0$  zusammenstossenden Flächen  $hk\bar{l}$ ,  $hk\bar{l}$ ,  $ik\bar{h}l$  und  $ik\bar{h}l$ , deren Summe  $2h + 2i, 0, -2h - 2i, 0$  beträgt, entsprechend dem Symbol  $10\bar{1}0$ .

Besondere Beachtung verdienen schliesslich alle mehrfachen Operationen, die ein mehrdeutiges oder spezielles Symbol unverändert lassen. Für allgemeine Symbole ist es nur die Identität, in den Spezialfällen sind es diejenigen Operationen, welche die höchste mögliche Flächensymmetrie angeben. Nimmt man z. B. das Symbol (100) und sucht in der Tabelle alle Zeichen aus, welche an erster Stelle den ausgezogenen vertikalen Strich führen, welcher die Unveränderlichkeit des Index 1 anzeigt, so findet man als Flächensymmetrie: die 4-zählige Achse  $[100]$  mit zweifachem Drehungssinn, die gleichnamige zweizählige Achse und die Spiegelebenen (010), (001), (011) und  $(0\bar{1}1)$ . Im tetragonalen System müssen für die Fläche (100) alle diejenigen Zeichen wegfallen, welche den Platzwechsel des zweiten und des dritten Index erfordern, weil in diesem System der auf die c-Achse bezogene Index nicht permutiert. Es bleiben also nur die zweizählige Drehachse  $[100]$  und die Spiegelungen (010) und (001), deren Zeichen bloss vertikale Striche enthalten. Diese Operationen können aber für die Fläche (100) auch im rhombischen System gelten, weil in ihnen kein Platzwechsel vorkommt. Das tun sie auch.

Anders bei dem Symbol (110), wo im kubischen System ausser der Identität alle diejenigen Operationen das Symbol unverändert lassen, bei welchen Zeichen mit zwei vertikalen ausgezogenen Strichen bei den ersten zwei Indizes, oder mit ebenfalls ausgezogenen Kreuzchen am Anfang stehen. Es sind dies: Drehung um die zweizählige

Achse  $[110]$  und Spiegelungen nach  $(001)$  und  $(1\bar{1}0)$ . Im rhombischen System kann davon nur die Spiegelung nach  $(001)$  bestehen, die keinen Platzwechsel (Kreuzchen) erfordert. Im tetragonalen System dagegen kann die kubische Flächensymmetrie in diesem Falle bestehen.

Der Verfasser glaubt, in dem beschriebenen Verfahren ein nützliches Hilfsmittel für manche Zwecke der theoretischen Kristallographie vorgeschlagen zu haben. Manche Aufgabe lässt sich an Hand der Operationszeichen schneller lösen als durch geometrische Konstruktion. Einen weiteren Schritt würde das Ausarbeiten eines Verfahrens für Punktsysteme der Raumgruppen bilden.

### Summary

A graphical procedure is proposed to bring out clearly the relationship existing between the 48 crystallographic symbols  $(h\ k\ l)$  or the 24 symbols  $(h\ k\ \bar{l})$  respectively. The ideographs represented in the chart on page 123 when placed beneath a given symbol indicate the effect of the corresponding symmetry operation. Thus the directions of the lines in the ideographs show the displacements (if any) of the symbols from their original position while dotted lines signify in addition a change in sign.

Symbols of every symmetry operation may be found by two equations (c. f. examples 1—6 p. 122). The first („I Gls“ in the examples) between the original symbol (AS) and the resulting symbol (RS); the second („II Gls“) between the inverted original symbol and the resulting symbol. The first equation gives an invariant definite symbol in the case of the symmetry axes, the second a definite symbol for inversion axes and symmetry planes. The indefinite results 000 and 0000 signify the non-existence of identity as of inversion in the given operation.

In the case of special face symbols as  $(100)$ ,  $(10\bar{1}0)$  etc. the relationship is multiple as several transformations may give the same resulting symbol. The result is as though the face consisted of a number of general faces, e. g. the face  $(110)$  of  $(h\ k\ l)$ ,  $(k\ h\ l)$ ,  $(h\ k\ \bar{l})$ ,  $(h\ k\ \bar{l})$ . In such cases the number of operations is equal to 48 (or 24) divided by the number of faces contained in the form (for  $(110)$  it is  $48:12 = 4$ ).

Finally the highest possible face symmetry and the symbols of its symmetry elements may be found by seeking with the aid of the chart those operations which leave the original symbol unchanged.

Eingegangen: 25. November 1947.