

# Symmetrie und physikalisch-chemische Eigenschaften kristallisierter Verbindungen. V, Über Ellipsenpackungen in der Kristallebene

Autor(en): **Nowacki, Werner**

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-23058>

## **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.

## **Symmetrie und physikalisch-chemische Eigenschaften kristallisierter Verbindungen**

### **V. Über Ellipsenpackungen in der Kristallebene**

Von *Werner Nowacki*, Bern

In seinen grundlegenden Arbeiten zur topologischen Strukturanalyse hat P. NIGGLI (4, 5) durch Konstruktion der Symmetriebereiche in allen 17 ebenen Gruppen (EG) alle 31 Kreispackungen (KP) abgeleitet und mittels Figuren veranschaulicht. F. HAAG (1, 2) fügte zwei weitere hinzu, die man unter bestimmten Voraussetzungen als von den übrigen verschieden ansehen kann. Eine Übersicht über Kreis- und Kugelpackungen wurde vom Verfasser in seiner Dissertation (6) gegeben. In dieser Arbeit haben wir uns die Aufgabe gestellt, alle Ellipsenpackungen (EP), die in der Kristallebene möglich sind, abzuleiten. Dabei versteht man unter einer Ellipsenpackung (EP) eine Anordnung von Ellipsen, welche bezüglich einer zweidimensionalen, eigentlich-diskontinuierlichen Bewegungsgruppe (mit zwei linear unabhängigen Translationen) [kurz ebene Gruppe (EG) genannt; Beschreibung in P. NIGGLI (3)] gleichwertig und so gelagert sind, dass man von irgend einer Ellipse ausgehend über die berührenden zu allen übrigen Ellipsen gelangen kann. Die zweite Bedingung schliesst insel- oder bandartige Gebilde aus. Das Problem wurde als Vorstufe zum bedeutend komplizierteren der Ellipsoidpackungen im Kristallraum in Angriff genommen. Es ist an sich, rein mathematisch betrachtet, von Interesse; darüber hinaus findet es ausserdem in der Kristallchemie organischer Verbindungen eine unmittelbare Anwendung. Viele, insbesondere aromatische Moleküle, haben in erster Annäherung die Form von Ellipsoiden, so dass die Frage nach deren Packungen im Kristallraum zu einer zentralen Frage der Kristallstereochemie organischer Verbindungen wird. Besonderes Augenmerk wird man der dichtesten Ellipsoidpackung und ihrer Symmetriegruppe im Hinblick auf die Selektion unter den Raumgruppen durch die Kristalle orga-

nischer Verbindungen [ $C_2^2 - P2_1$ ,  $C_{2h}^5 - P2_1/c$ ,  $D_2^4 - P 2_1 2_1 2_1 =$  häufigste Raumgruppen; vgl. W. NOWACKI (7)] schenken müssen (eventuell gibt es mehrere verschiedene Packungen gleicher maximaler Dichte,?) (vgl. auch A. KITAIGORODSKY (10)).

Schon eine mathematisch exakte Ableitung aller Ellipsenpackungen (EP) ist schwierig und komplex. Um deshalb überhaupt einer Lösung des Problems näher zu kommen, wurde folgendermassen vorgegangen: a) die Eigensymmetrie einer Ellipse kann nur  $C_{2v} - 2m$ ,  $C_s - m$ ,  $C_2 - 2$  oder  $C_1 - 1$  sein, d. h. als Ellipsenzentren treten nur Punkte der Symmetriebedingung (SB)  $C_{2v}$ ,  $C_s$ ,  $C_2$  oder  $C_1$  der 17 ebenen Gruppen auf, welche den expliziten Tabellen dieser Gruppen (z. B. P. NIGGLI (3)) sofort entnommen werden können; b) hierauf ist zu prüfen, ob diese Punkte als Ellipsenzentren aufgefasst wirklich zu Ellipsenpackungen (EP) Anlass geben, ob bei gegebener Symmetriebedingung eine einzige oder mehrere verschiedene EP resultieren und ob sich EP ergeben, die mit schon abgeleiteten identisch sind. Zu diesem Zwecke wurde eine Ellipse mit vollkommen beliebigem Achsenverhältnis aus Karton ausgeschnitten und nachgesehen, ob und wie sie sich symmetriemässig an den verschiedenen  $C_{2v}$ -,  $C_s$ -,  $C_2$ - und  $C_1$ -Punkten der 17 EG derart placieren lässt, dass zusammen mit ihren gleichwertigen eine Packung entsteht. Es handelt sich also nicht um mathematische Konstruktionen, sondern um ein Probieren, allerdings unter voller Berücksichtigung sämtlicher Symmetrieverhältnisse und unter Beachtung vieler geometrischer Überlegungen, auf die hier nicht eingegangen werden kann. Auf diese Weise wurden 54 wesentlich verschiedene Ellipsenpackungen, welche auf den beigegebenen Tafeln abgebildet sind, gefunden. Für die SB =  $C_{2v}$ ,  $C_s$  und  $C_2$  ist die Aufzählung vollständig; bei  $C_1$  in niedrigsymmetrischen EG ( $C_2^1$  z. B.) konnte nicht streng bewiesen werden, dass weitere EP nicht existieren. Ein derartiger Beweis dürfte ziemlich schwierig zu führen sein.

In den Figuren 1—54, welche nach EG angeordnet und fortlaufend numeriert sind, wurden aus äusseren Gründen relativ wenige Ellipsen gezeichnet; der mit der Materie einigermaßen vertraute Leser wird das Motiv aber ohne weiteres fortsetzen können. Durch Einzeichnen des Elementarparallelogramms wird dies noch erleichtert. Weiter wurde das Koordinationsschema angegeben, d. h. die Figur, welche durch Verbinden eines Ellipsenzentrums mit den Berührungspunkten der umgebenden Ellipsen entsteht. Die Zahl (KZ) dieser Strecken entspricht der „molekularen Koordinationszahl“ mKz in unserer Abhandlung (7, III, S. 46), wenn wir das Ver-

Tabelle 1

Nr.	EG der EP	SB	KZ	KP	Fig. in (4, I)	EG der KP
1	$C_2^I$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_1$	7 a	$C_2^I$
2	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_1$	9 a	"
3	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5$	$5 N_1$	11 f	"
4	"	$C_2$	$2 + 2 = 4$	$4 N_3$	9 c	$C_{2v}^{IV}$
5	"	"	$2 + 2 + 2 = 6$	$6 N_1$	11 a	$C_{6v}^I$
6	$C_s^{III}$	$C_1$	$1 + 1 + 1 + 3$	$3 N_3$	7 c	$C_{2v}^{IV}$
7	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_4$	9 d	$C_{2v}^{III}$
8	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5$	$5 N_2$	11 e	$C_{2v}^{IV}$
9	$C_{2v}^I$	$C_{2v}$	$2 + 2 = 4$	$4 N_6$	9 f	$C_{4v}^I$
10*)	$C_2^{II}$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_2$	7 b	$C_{2v}^{II}$
11	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_{11}$	38 in (4, II)	"
12	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5$	$5 N_4$	11 d	"
13	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5$	$5 N_6$	41 in (4, II)	"
14	"	$C_2$	$2 + 2 = 4$	$4 N_3$	9 c	$C_{2v}^{IV}$
15	"	"	$2 + 2 + 2 = 6$	$6 N_1$	11 a	$C_{6v}^I$
16	$C_{2v}^{III}$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_3$	7 c	$C_{2v}^{IV}$
17	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_4$	9 d	$C_{2v}^{III}$
18	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5$	$5 N_2$	11 e	$C_{2v}^{IV}$
19, a	"	$C_s$	$2 + 1 + 1 = 4$	$4 N_2$	9 b	$C_{2v}^{III}$
20	"	$C_2$	$2 + 2 = 4$	$4 N_6$	9 f	$C_{4v}^I$
21	$C_{2v}^{IV}$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_6$	7 f	$C_{2v}^{IV}$
22	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_6$	9 f	$C_{4v}^I$
23, a**)	"	$C_s$	$2 + 1 = 3$	$3 N_3$	7 c	$C_{2v}^{IV}$
24, a	"	"	$2 + 2 + 1 = 5$	$5 N_2$	11 e	$C_{2v}^{IV}$
25	"	$C_2$	$2 + 2 = 4$	$4 N_6$	9 f	$C_{4v}^I$
26	"	$C_{2v}$	4	$4 N_3$	9 c	$C_{2v}^{IV}$
27	"	"	$4 + 2 = 6$	$6 N_1$	11 a	$C_{6v}^I$
28	$C_4^I$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_4$	7 d	$C_4^I$

\*) Nach F. HAAG (2) =  $3 N_{15}$  = Fig. 2b,  $C_{2v}^{II}$

\*\*\*) Nach F. HAAG (2) =  $3 N_{14}$  = Fig. 1b,  $C_{2v}^{IV}$

EG = ebene Gruppe

EP = Ellipsenpackung

SB = Symmetriebedingung

KZ = Koordinationszahl

KP = Kreispackung

Nr.	EG der EP	SB	KZ	KP	Fig. in (4, 1)	EG der KP
29	$C_4^I$	$C_1$	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_5$	9 e	$C_{4v}^{II}$
30	"	$C_2$	$2 + 2 = 4$	$4 N_6$	9 f	$C_{4v}^I$
31	$C_{4v}^I$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_7$	8 a	$C_{4v}^I$
32,a	"	$C_s$	$2 + 1 = 3$	$3 N_7$	8 a	"
33	"	$C_{2v}$	4	$4 N_6$	9 f	"
34	$C_{4v}^{II}$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_5$	7 e	$C_{4v}^{II}$
35	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_5$	9 e	"
36,a	"	$C_s$	$2 + 2 = 4$	$4 N_5$	9 e	"
37,a	"	"	$2 + 2 + 1 = 5$	$5 N_3$	11 c	"
38	"	$C_{2v}$	$2 + 2 = 4$	$4 N_6$	9 f	$C_{4v}^I$
39	$C_3^I$	$C_1$	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_8$	10 b	$C_{3v}^{II}$
40	$C_{3v}^I$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_{13}$	8 g	$C_{6v}^I$
41,a	$C_{3v}^{II}$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_9$	8 c	$C_{3v}^{II}$
42	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_{10}$	10 d	$C_{6v}^I$
43,a	"	$C_s$	$2 + 2 = 4$	$4 N_8$	10 b	$C_{3v}^{II}$
44,a	"	"	$2 + 2 + 2 = 6$	$6 N_1$	11 a	$C_{6v}^I$
45	$C_6^I$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_8$	8 b	$C_6^I$
46	"	"	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_{11}$	8 e	"
47	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 = 4$	$4 N_9$	10 c	"
48	"	"	$1 + 1 + 1 + 1 + 1 = 5$	$5 N_5$	11 b	"
49	"	$C_2$	$2 + 2 = 4$	$4 N_7$	10 a	$C_{6v}^I$
50,a	$C_{6v}^I$	$C_1$	$1 + 1 + 1 = 3$	$3 N_{12}$	8 f	"
51,a	"	$C_s$	$2 + 1 = 3$	$3 N_{10}$	8 d	"
52,a	"	"	$2 + 2 = 4$	$4 N_{10}$	10 d	"
53,a	"	"	$2 + 1 = 3$	$3 N_{13}$	8 g	"
54,a	"	$C_{2v}$	4	$4 N_7$	10 a	"

binden durch kürzeste Bindungsabstände dem Berühren der Ellipsen gleichsetzen. Bei den  $SB = C_{2v}$  oder  $C_2$  sind einzig die  $KZ = 4, 6$ , bei  $SB = C_s$  oder  $C_1$  auch die  $KZ = 3, 5$  möglich. Sechs ist die maximale  $KZ$ .

Tabelle 1 gibt eine Zusammenstellung von Figurennummer, ebener Gruppe (EG) der Ellipsenpackung (EP), Symmetriebedingung (SB) und Koordinationszahl (KZ) der Einzelellipse. Wenn das Achsenverhältnis der Ellipse gleich 1 wird, geht die EP in eine

Kreispackung (KP) über, was u. U. mit einer Änderung der Metrik oder der Symmetriegruppe (EG) verknüpft ist. In der 5. Kolonne der Tabelle 1 ist diejenige KP, in welche die EP übergeht, zusammen mit der Bezeichnung ( $xN_y$ ), der Angabe der Figur von P. NIGGLI (4, I, II) und der EG aufgeführt. Die Figuren wie z. B. 19 und 19a beziehen sich auf die beiden Fälle:  $m //$  der langen bzw. der kurzen Hauptachse.

Nach der KZ geordnet, ergibt sich folgende Übersicht:

1. KZ = 3: Nr. 1, 6, 10, 16, 21, 23(a), 28, 31, 32(a), 34, 40, 41(a), 45, 46, 50(a), 51(a) und 53(a) [17 EP].
2. KZ = 4: Nr. 2, 4, 7, 9, 11, 14, 17, 19(a), 20, 22, 25, 26, 29, 30, 33, 35, 36(a), 38, 39, 42, 43(a), 47, 49, 52(a) und 54(a) [25 EP].
3. KZ = 5: Nr. 3, 8, 12, 13, 18, 24(a), 37(a) und 48 [8 EP].
4. KZ = 6: Nr. 5, 15, 27 und 44(a) [4 EP].

Die Anzahl der EP ist der niedrigeren Symmetrie der Ellipse wegen grösser als diejenige der KP. Folgende EP gehen in dieselbe KP über (vgl. Tabelle 2):

In einer folgenden Arbeit sollen verschiedene metrische Probleme behandelt werden: u. a. Abhängigkeit der Form, speziell des Achsenverhältnisses des Elementarparallelogramms vom Achsenverhältnis der Ellipse, Untersuchung der Packungsdichte  $\rho$  (= Verhältnis der von den Ellipsen eingenommenen Fläche zur Gesamtfläche), der dichtesten Packungen (Nr. 5, 15, 27, 44, 44a;  $\rho = \pi/2\sqrt{3} = 0,907 =$  Dichte der dichtesten Kreispackung  $6N_1$ ; vgl. auch L. FEJES (8, 9)), der dünnsten Packung (= Nr. 51) und der gleichen.

Die Arbeit wurde in Pasadena (USA.) begonnen, als der Verfasser Gast der Gates and Crellin Laboratories of Chemistry des California Institute of Technology war. Er möchte auch an dieser Stelle Herrn Prof. LINUS PAULING, der American-Swiss Foundation for Scientific Exchange, der Stiftung zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung an der Bernischen Hochschule und der Regierung des Kantons Bern für Einladung, Unterstützung und Urlaub den besten Dank aussprechen.

### Summary

In the previous paper a deduction of 54 essentially different packings of ellipses in the crystal plane is given. A packing of ellipses is an arrangement of ellipses which are equivalent with respect to one of the 17 plane groups and which show positions such that, starting from a given ellipsis and passing by the surrounding ones, one may reach a n y other ellipsis. The symmetry of

Tabelle 2

Nr. mit EG	→ KP	mit EG	Nr. mit EG	→ KP	mit EG
1	$C_2^I$	$3 N_1$	22	$C_{2v}^{IV}$	$4 N_6$
10	$C_{2v}^{II}$	$3 N_2$ bzw. $3 N_{15}$	25	$C_{2v}^{IV}$	"
6	$C_s^{III}$	$3 N_3$ bzw. $3 N_{14}$	30	$C_4^I$	"
16	$C_{2v}^{III}$	"	33	$C_{4v}^I$	"
23(a)	$C_{2v}^{IV}$	"	38	$C_{4v}^{II}$	"
28	$C_4^I$	$3 N_4$	49	$C_6^I$	$4 N_7$
34	$C_{4v}^{II}$	$3 N_5$	54(a)	$C_{6v}^I$	"
21	$C_{2v}^{IV}$	$3 N_6$	39	$C_3^I$	$4 N_8$
31	$C_{4v}^I$	$3 N_7$	43(a)	$C_{3v}^{II}$	"
32(a)	"	"	47	$C_6^I$	$4 N_9$
45	$C_6^I$	$3 N_8$	42	$C_{3v}^{II}$	$4 N_{10}$
41(a)	$C_{3v}^{II}$	$3 N_9$	52(a)	$C_{6v}^I$	"
51(a)	$C_{6v}^I$	$3 N_{10}$	11	$C_{2v}^{II}$	$4 N_{11}$
46	$C_6^I$	$3 N_{11}$	3	$C_2^I$	$5 N_1$
50(a)	$C_{6v}^I$	$3 N_{12}$	8	$C_s^{III}$	$5 N_2$
40	$C_{3v}^I$	$3 N_{13}$	18	$C_{2v}^{III}$	"
53(a)	$C_{6v}^I$	"	24(a)	$C_{2v}^{IV}$	"
2	$C_2^I$	$4 N_1$	37(a)	$C_{4v}^{II}$	$5 N_3$
19(a)	$C_{2v}^{III}$	$4 N_2$	12	$C_{2v}^{II}$	$5 N_4$
4	$C_2^I$	$4 N_3$	48	$C_6^I$	$5 N_5$
14	$C_{2v}^{II}$	"	13	$C_{2v}^{II}$	$5 N_6$
26	$C_{2v}^{IV}$	"	5	$C_2^I$	$6 N_1$
7	$C_s^{III}$	$4 N_4$	15	$C_{2v}^{II}$	"
17	$C_{2v}^{III}$	"	27	$C_{2v}^{IV}$	"
29	$C_4^I$	$4 N_5$	44(a)	$C_{3v}^{II}$	"
35	$C_{4v}^{II}$	"			
36(a)	"	"			
9	$C_{2v}^I$	$4 N_6$			
20	$C_{2v}^{III}$	"			

an ellipsis being  $C_{2v}$ — $2m$ ,  $C_s$ — $m$ ,  $C_2$ — $2$  or  $C_1$ — $1$ , one has to pick out all points with these symmetries in all 17 plane groups and to look whether a packing is possible or not. The results are illustrated by the figures and summarized in Table 1. — The problem is a preliminary one, the main problem being the deduction of all packings of ellipsoids in crystal space, which is important for the crystal stereochemistry of organic compounds, because the shape of many organic molecules is about ellipsoidal.

### Literatur

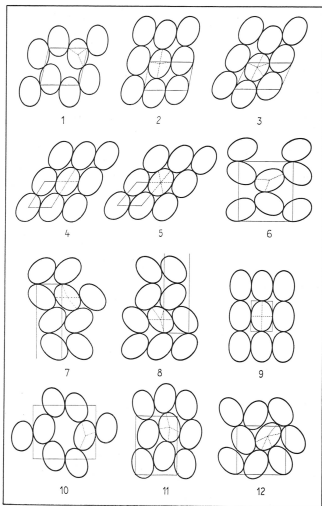
1. F. HAAG, Die Kreispackungen von NIGOLI. Z. Krist. 70 (1929) 353—366.
2. — Die Polygone der Ebenenteilungen. Z. Krist. 96 (1937) 78—80.
3. P. NIGOLI, Die Flächensymmetrien homogener Diskontinuen. Z. Krist. 60 (1926) 283—298.
4. — Die topologische Strukturanalyse. I. Z. Krist. 65 (1927) 391—415; II. *ibid.* 68 (1928) 404—466.
5. — Kristallographische und strukturtheoretische Grundbegriffe. Hdb. der Experimentalphysik Bd. 7, 1. Teil, Akad. Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1928.
6. W. NOWACKI, Homogene Raumteilung und Kristallstruktur. Dissertation E. T. H., Zürich 1935, AG. Gebr. Leemann & Co.
7. — Symmetrie und physikalisch-chemische Eigenschaften kristallisierter Verbindungen. I. Die Verteilung der Kristallstrukturen über die 219 Raumgruppen. *Helv. Chim. Acta* 25 (1942) 863—878; II. Die allgemeinen Bauprinzipien organischer Verbindungen. *ibid.* 26 (1943) 459—462; III. Zur Kristallchemie organischer Verbindungen. *Mitt. Naturf. Ges. Bern (N. F.)* 2 (1945) 43—74; IV. Bemerkungen zu einer Arbeit von G. HÄGG. *Helv. Chim. Acta* 28 (1945) 664—666.
8. L. FEJES, Extremális pontrendszerek a síkban a gömbfelületeken és a térben (Extremale Punktsysteme in der Ebene, auf der Kugelfläche und im Raum). *Acta Sci. Math. Nat.* 23 (Kolozsvár, 1944), S. 15.
9. — Eine Bemerkung über die Bedeckung der Ebene durch Eibereiche mit Mittelpunkt. *Acta Univ. Szegediensis, Acta Sci. Math.* XI (1946) 93—95. Hier wird bewiesen, dass die Dichte eines Systems kongruenter Ellipsen, die keine inneren Punkte gemein haben, unabhängig von der Exzentrizität und der Anordnung der Ellipsen  $\leq \sqrt{3} \pi/6 = 0,907 \dots$  ist. — Den Hinweis auf diese Arbeiten verdanke ich der Freundlichkeit von Herrn Prof. Dr. H. HADWIGER (Bern).
10. A. KITAIGORODSKY, *Acta Physicochim. USSR.* 21 (1946) 379. — Leider war es mir bis jetzt nicht möglich, Einblick in die Originalarbeit zu erhalten.

Bern, den 12. Dezember 1947.

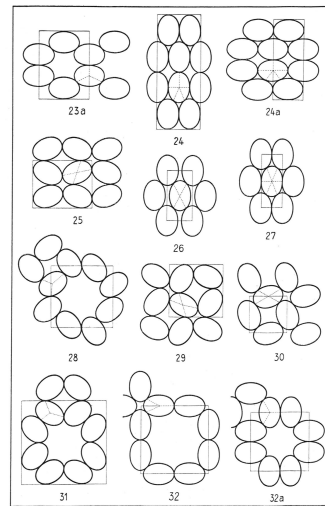
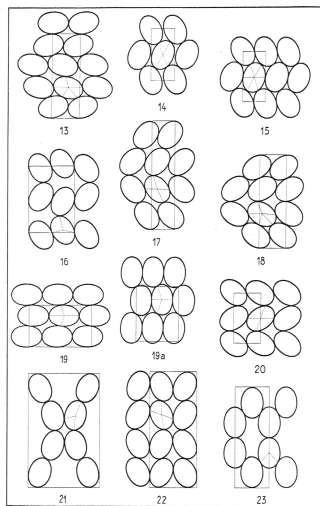
Mineralogisch-Petrographisches Institut der Universität Bern.

Eingegangen: Januar 1948.





Anmerkung zu Fig. 3. Die Richtung der langen Achsen der Ellipsen ist von der Richtung der langen Achse des Elementarparallelogramms verschieden. In der Figur ist dies vielleicht infolge des Auszeichens des Originals mit Tusch nicht ohne weiteres sichtbar.



Leere Seite  
Blank page  
Page vide

