

# Beziehungen zwischen der Symmetrie des Kristall-, Fourier- und Patterson-Raumes. II, Die Harker-Maxima in den triklinen, monoklinen und orthorhombischen Raumgruppen

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

Objektyp: **Article**

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

Band (Jahr): **30 (1950)**

Heft 2

PDF erstellt am: **11.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-24447>

## **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.

# Beziehungen zwischen der Symmetrie des Kristall-, Fourier- und Patterson-Raumes.

## II. Die Harker-Maxima in den triklinen, monoklinen und orthorhombischen Raumgruppen\*).

Von *Werner Nowacki* (Bern)

Als Fortsetzung der Arbeit in H. 1, S. 147 (NOWACKI, 1950)<sup>1)</sup> dieser Zeitschrift wurde begonnen, die Harker-Maxima der allgemeinen Punktgruppen in allen Raumgruppen zusammenzustellen. Es ist üblich geworden, als „Harker-Maxima“ diejenigen Maxima einer Pattersonsynthese, welche den Abständen gleichwertiger Punkte (gleichwertig in bezug auf eine Raumgruppe) entsprechen, zu bezeichnen; die übrigen als „Nicht-Harker-Maxima“. Dabei sei vorausgesetzt, dass kristallographisch gleichwertige Punkte auch von chemisch gleichwertigen Teilchen der Elektronenzahl  $Z_r$  besetzt werden.

Um die Harker-Maxima nach Lage und Gewicht zu erhalten, geht man vom allgemeinen Gitterkomplex (NIGGLI, 1919), der für eine Raumgruppe charakteristisch ist, aus und berechnet sich die Komponenten aller Vektoren zwischen gleichwertigen Punkten durch Differenzbildung ihrer Koordinaten. Die Gewichte erhält man, indem man nachsieht, wie oft derselbe Vektor vorkommt. Dies sei an einigen Beispielen erläutert.

1. Raumgruppe =  $C_s^3 - Cm$ ; allgemeiner Gitterkomplex =  $\left[ \begin{array}{c} xyz | x\bar{y}z \\ \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, z | \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, z \end{array} \right]_a^b^c^d$ ; die Differenzbildung ergibt die Harker-Maxima der Tabelle 1.

Tabelle 1

Vektoren zwischen den Punkten	Gewicht	Harker-Maxima u, v, w	Charakter
aa, bb, cc, dd	$4 Z_r^2$	0 0 0	Punkt $P_1$
ab, cd	$2 Z_r^2$	0 $2\bar{y}$ 0	Gerade $G_1$
ba, dc	$2 Z_r^2$	0, $2y$ , 0	Gerade $G_1$
ac, bd	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	Punkt $P_2$
ca, db	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0	Punkt $P_2$
ad, cb	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2} - 2y$ , 0	Gerade $G_2$
da, bc	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2} + 2y$ , 0	Gerade $G_2$

\*) Mitteilung Nr. 56 von W. N. und Mitarbeitern.

<sup>1)</sup> Diese Arbeit sei als I bezeichnet.

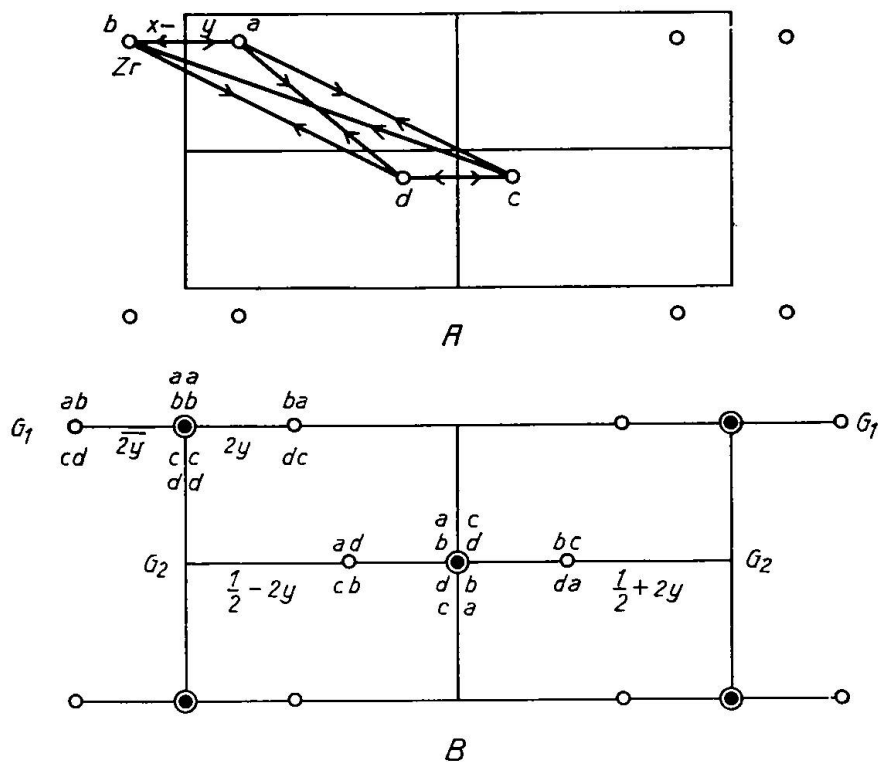


Fig. 1. A. Kristallraum  $C_s^3$ -Cm mit allgemeiner Punktlage  $a, b, c, d$   
 B. Harker-Maxima des zugehörigen Pattersonraumes:  $(000)$  und  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$  mit dem Gewicht  $4Z_r^2$ ;  $(0, 2y, 0)$ ,  $(0, \bar{2y}, 0)$ ,  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 0)$  und  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2y, 0)$  mit dem Gewicht  $2Z_r^2$ .

Das Maximum am Nullpunkt ( $u, v, w, = 0, 0, 0$ ) ist trivial; sein Gewicht ist überall gleich der Zähligkeit der allgemeinen Punktlage mal  $Z_r^2$ . Zum Maximum  $(0, 2y, 0)$  gehört als gleichwertiges (aber davon verschiedenes) dasjenige auf derselben Harker-Geraden  $G_1$  bei  $(0, \bar{2y}, 0)$ , da jeder Pattersonraum zentrosymmetrisch ist (vgl. I). Die Maxima  $(ac, bd)$  und  $(ca, db)$  fallen zusammen und ergeben in  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$  ein solches vom Gewicht  $4Z_r^2$ , das auch aus  $(000)$  durch die Translation  $C = \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$  entstanden gedacht werden kann, da die Symmetrie des Pattersonraumes  $C_{2h}^3$  —  $C2/m$  (vgl. Tab. 3, S. 156 in I) ist. Die Maxima  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 0)$  und  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2y, 0)$  je vom Gewicht  $2Z_r^2$  sind auf einer zweiten Harker-Geraden  $G_2$  zentrosymmetrisch zum Punkt  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$  gelegen ( $G_2$  ist durch die Translation  $C$  mit  $G_1$  gleichwertig) (Fig. 1) und sind mit den Maxima  $(0, 2y, 0)$  und  $(0, \bar{2y}, 0)$  gleichwertig. — In abgekürzter Schreibweise, unter Weglassung des Maximums am Nullpunkt und des Buchstabens  $Z_r^2$  und unter Berücksichtigung der Translationsgruppe  $C$  ergibt sich für  $C_s^3$ —Cm folgende Charakteristik:

$$C_s^3$$
—Cm;  $0, 2y, 0/2$ ; + C

2. Raumgruppe =  $D_2^8 - I 222$ ; allgemeiner Gitterkomplex =  $\left[ \begin{matrix} xyz \\ a \\ \overline{xyz} \\ b \\ \overline{xyz} \\ c \\ \overline{xyz} \\ d \\ + \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) \\ e \\ f \\ g \\ h \end{matrix} \right]$ ; die Differenzenbildung ergibt die Harker-Maxima der Tabelle 2.

Tabelle 2

Vektoren zwischen den Punkten	Gewicht	Harker-Maxima u, v, w	Charakter
aa bis hh	$8 Z_r^2$	0 0 0	Punkt $P_1$
ab, ef	$2 Z_r^2$	$\overline{2x}, \overline{2y}, 0$	Ebene $E_1$
ba, fe	$2 Z_r^2$	$2x, 2y, 0$	Ebene $E_1$
ac, eg	$2 Z_r^2$	$0, \overline{2y}, \overline{2z}$	Ebene $E_2$
ca, ge	$2 Z_r^2$	$0, 2y, 2z$	Ebene $E_2$
ad, eh	$2 Z_r^2$	$\overline{2x}, 0, \overline{2z}$	Ebene $E_3$
da, he	$2 Z_r^2$	$2x, 0, 2z$	Ebene $E_3$
ae, bf, cg, dh	$4 Z_r^2$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	Punkt $P_2$
ea, fb, gc, hd	$4 Z_r^2$	$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	Punkt $P_2$
af, eb	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} - 2x, \frac{1}{2} - 2y, \frac{1}{2}$	Ebene $E_4$
fa, be	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2}$	Ebene $E_4$
ag, ec	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2y, \frac{1}{2} - 2z$	Ebene $E_5$
ga, ce	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z$	Ebene $E_5$
ah, ed	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} - 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2z$	Ebene $E_6$
ha, de	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z$	Ebene $E_6$
bc, fg	$2 Z_r^2$	$2x, 0, \overline{2z}$	mit ad und da gleichwertig
cb, gf	$2 Z_r^2$	$\overline{2x}, 0, 2z$	
bd, fh	$2 Z_r^2$	$0, 2y, \overline{2z}$	mit ac und ca gleichwertig
db, hf	$2 Z_r^2$	$0, \overline{2y}, 2z$	
cd, gh	$2 Z_r^2$	$\overline{2x}, 2y, 0$	mit ab und ba gleichwertig
dc, hg	$2 Z_r^2$	$2x, \overline{2y}, 0$	
bg, fc	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2z$	mit ah und ha gleichwertig
gb, cf	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} - 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z$	
bh, fd	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} - 2z$	mit ag und ga gleichwertig
hb, df	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - 2y, \frac{1}{2} + 2z$	
ch, gd	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} - 2x, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2}$	mit af und fa gleichwertig
hc, dg	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} - 2y, \frac{1}{2}$	

Abgekürzt lautet für  $D_2^8 - I 222$  die Charakteristik:

$$D_2^8 - I 222; 2x, 2y, 0/2; 0, 2y, 2z/2; 2x, 0, 2z/2; + I$$

3. Raumgruppe =  $D_2^8 - I 2_1 2_1 2_1$ ; allgemeiner Gitterkomplex =  $\left[ \begin{matrix} xyz \\ a \\ \frac{1}{2} - x, \overline{y}, \frac{1}{2} + z \\ b \\ \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \overline{z} \\ c \\ \frac{1}{2} - z, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - x \\ d \\ + \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) \\ e \\ f \\ g \\ h \end{matrix} \right]$ ; die Differenzenbildung ergibt die Harker-Maxima der Tabelle 3.

Tabelle 3

Vektoren zwischen den Punkten	Gewicht	Harker-Maxima u, v, w	Charakter
aa bis hh	$8 Z_r^2$	0 0 0	Punkt $P_1$
ab, ef	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2} + 2x, 2y, \frac{1}{2}$	Ebene $E_1$
ac, eg	$2 Z_r^2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z$	Ebene $E_2$
ad, eh	$2 Z_r^2$	$2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z$	Ebene $E_3$

+ zentrosymmetrische  $+(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

abgekürzt:

$D_2^9 - I 2_1 2_1 2_1; \frac{1}{2} + 2x, 2y, \frac{1}{2}/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z/2; 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/2; + I.$

Bemerkung:  $D_2^8 - I 222$  und  $D_2^9 - I 2_1 2_1 2_1$  gehören zur selben Auslöschungseinheit  $mmmI---$  (vgl. I.) und können mittels Auslöschungen alleine nicht voneinander unterschieden werden. Die Patterson-Harker-Synthesen gestatten eine eindeutige Unterscheidung.

4. Raumgruppe =  $C_1^1 - P\bar{1}$ ; allgemeiner Gitterkomplex =  $[xyz | \overline{xyz}]$ ; die Differenzenbildung ergibt die Harker-Maxima (000) vom Gewicht  $2Z_r^2$  und  $(2x, 2y, 2z)$  vom Gewicht  $Z_r^2$ , während bei der Raumgruppe  $C_1^1 - P1$  nur ein Harker-Maximum (000) vom Gewicht  $1Z_r^2$  auftritt.  $C_1^1 - P\bar{1}$  und  $C_1^1 - P1$  gehören zur selben Auslöschungseinheit  $\bar{1}P\bar{1}$ , unterscheiden sich aber durch ihre Harker-Maxima.

Auf diese Weise wurde Tabelle 4 berechnet, welche für die triklinen, monoklinen und orthorhombischen Raumgruppen die Harker-Maxima der allgemeinen Punktlage in der abgekürzten Schreibweise angibt; diejenigen der speziellen Punktlagen sind durch Einsetzen spezieller Parameterwerte leicht zu erhalten (die Gewichte müssen gesondert berechnet werden). Ausser bei  $C_1^1 - P1$  ist das Maximum am Nullpunkt und translatorisch identische stets weggelassen. Translatorisch identische Harker-Punkte (0 Parameter), —Geraden (1 Parameter), —Ebenen (2 Parameter) oder —Räume (3 Parameter) sind nur durch das Symbol C, A, F oder I gekennzeichnet.

Diese Harker-Maxima sind für die Raumgruppen ebenso charakteristisch wie die Koordinaten der allgemeinen Punktlage, aus denen sie gewonnen worden sind. Lage und Gewichte der Harker-Maxima gestatten im triklinen, monoklinen und orthorhombischen Fall eine eindeutige Raumgruppenbestimmung. Von den enantiomorphen Paaren abgesehen, gilt dies allgemein. Die praktische Schwierigkeit liegt im Erkennen der Maxima einer aus den beobachteten  $|F|^2$ -Werten berechneten Pattersonsynthese als Harker-Maxima und in der Notwendigkeit der Verwendung dreidimensionaler Synthesen auf absoluter Basis.

Tabelle 4

Raumgruppe	Lage und Gewichte der Harker-Maxima
<b>Triklin</b>	
$C_1^1 - P 1$	000/1
$C_i^1 - P \bar{1}$	2x, 2y, 2z/1
<b>Monoklin</b>	
$C_s^1 - Pm$	0, 2y, 0/1
$C_s^2 - Pc$	0, 2y, $\frac{1}{2}$ /1
$C_s^3 - Cm$	0, 2y, 0/2 + C
$C_s^4 - Cc$	0, 2y, $\frac{1}{2}$ /2 + C
$C_2^1 - P 2$	2x, 0, 2z/1
$C_2^2 - P 2_1$	2x, $\frac{1}{2}$ , 2z/1
$C_2^3 - C 2$	2x, 0, 2z/2 + C
$C_{2h}^1 - P 2/m$	0, 2y, 0/2; 2x, 0, 2z/2; 2x, 2y, 2z/1
$C_{2h}^2 - P 2_1/m$	0, $\frac{1}{2} + 2y$ , 0/2; 2x, $\frac{1}{2}$ , 2z/2; 2x, 2y, 2z/1
$C_{2h}^3 - C 2/m$	0, 2y, 0/4; 2x, 0, 2z/4 + C
$C_{2h}^4 - P 2/c$	0, 2y, $\frac{1}{2}$ /2; 2x, 0, $\frac{1}{2} + 2z/2$
$C_{2h}^5 - P 2_1/c$	0, $\frac{1}{2} + 2y$ , $\frac{1}{2}$ /2; 2x, $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2} + 2z/2$
$C_{2h}^6 - C 2/c$	0, 2y, $\frac{1}{2}$ /4; 2x, 0, $\frac{1}{2} + 2z/4 + C$
<b>Orthorhombisch</b>	
$C_{2v}^1 - Pmm$	2x, 0, 0/2; 0, 2y, 0/2; 2x, 2y, 0/1
$C_{2v}^2 - Pmc$	2x, 0, 0/2; 0, 2y, $\frac{1}{2}$ /2; 2x, 2y, $\frac{1}{2}$ /1
$C_{2v}^3 - Pcc$	2x, 0, $\frac{1}{2}$ /2; 0, 2y, $\frac{1}{2}$ /2; 2x, 2y, 0/1
$C_{2v}^4 - Pma$	$\frac{1}{2} + 2x$ , 0, 0/2; $\frac{1}{2}$ , 2y, 0/2; 2x, 2y, 0/1
$C_{2v}^5 - Pca$	$\frac{1}{2} + 2x$ , 0, $\frac{1}{2}$ /2; $\frac{1}{2}$ , 2y, 0/2; 2x, 2y, $\frac{1}{2}$ /1
$C_{2v}^6 - Pnc$	2x, $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2}$ /2; 0, $\frac{1}{2} + 2y$ , $\frac{1}{2}$ /2; 2x, 2y, 0/1
$C_{2v}^7 - Pmn$	2x, 0, 0/2; $\frac{1}{2}$ , 2y, $\frac{1}{2}$ /2; $\frac{1}{2} + 2x$ , 2y, $\frac{1}{2}$ /1
$C_{2v}^8 - Pba$	$\frac{1}{2} + 2x$ , $\frac{1}{2}$ , 0/2; $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2} + 2y$ , 0/2; 2x, 2y, 0/1
$C_{2v}^9 - Pna$	$\frac{1}{2} + 2x$ , $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2}$ /2; $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2} + 2y$ , 0/2; 2x, 2y, $\frac{1}{2}$ /1
$C_{2v}^{10} - Pnn$	$\frac{1}{2} + 2x$ , $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2}$ /2; $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2} + 2y$ , $\frac{1}{2}$ /2; 2x, 2y, 0/1
$C_{2v}^{11} - Cmm$	2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4; 2x, 2y, 0/2 + C
$C_{2v}^{12} - Cmc$	2x, 0, 0/4; 0, 2y, $\frac{1}{2}$ /4; 2x, 2y, $\frac{1}{2}$ /2 + C
$C_{2v}^{13} - Ccc$	2x, 0, $\frac{1}{2}$ /4; 0, 2y, $\frac{1}{2}$ /4; 2x, 2y, 0/2 + C
$C_{2v}^{14} - Amm$	2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4; 2x, 2y, 0/2 + A
$C_{2v}^{15} - Abm$	2x, $\frac{1}{2}$ , 0/4; 0, $\frac{1}{2} + 2y$ , 0/4; 2x, 2y, 0/2 + A
$C_{2v}^{16} - Ama$	$\frac{1}{2} + 2x$ , 0, 0/4; $\frac{1}{2}$ , 2y, 0/4; 2x, 2y, 0/2 + A
$C_{2v}^{17} - Aba$	$\frac{1}{2} + 2x$ , $\frac{1}{2}$ , 0/4; $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2} + 2y$ , 0/4; 2x, 2y, 0/2 + A
$C_{2v}^{18} - Fmm$	2x, 0, 0/8; 0, 2y, 0/8; 2x, 2y, 0/4 + F
$C_{2v}^{19} - Fdd$	$\frac{1}{4} - 2x$ , $\frac{1}{4}$ , $\frac{1}{4}$ /4; $\frac{1}{4}$ , $\frac{1}{4} - 2y$ , $\frac{1}{4}$ /4; 2x, 2y, 0/4 + F
$C_{2v}^{20} - Imm$	2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4; 2x, 2y, 0/2 + I
$C_{2v}^{21} - Iba$	$\frac{1}{2} + 2x$ , $\frac{1}{2}$ , 0/4; $\frac{1}{2}$ , $\frac{1}{2} + 2y$ , 0/4; 2x, 2y, 0/2 + I
$C_{2v}^{22} - Ima$	$\frac{1}{2} + 2x$ , 0, 0/4; $\frac{1}{2}$ , 2y, 0/4; 2x, 2y, 0/2 + I

(Fortsetzung Tabelle 4)

Raumgruppe	Lage und Gewichte der Harker-Maxima
$D_2^1 - P 222$	$2x, 2y, 0/1; 0, 2y, 2z/1; 2x, 0, 2z/1$
$D_2^2 - P 222_1$	$2x, 2y, \frac{1}{2}/1; 0, 2y, 2z/1; 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/1$
$D_2^3 - P 2_1 2_1 2$	$2x, 2y, 0/1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/1$
$D_2^4 - P 2_1 2_1 2_1$	$\frac{1}{2} + 2x, 2y, \frac{1}{2}/1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1; 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/1$
$D_2^5 - C 222_1$	$2x, 2y, \frac{1}{2}/2; 0, 2y, 2z/2; 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/2 + C$
$D_2^6 - C 222$	$2x, 2y, 0/2; 0, 2y, 2z/2; 2x, 0, 2z/2 + C$
$D_2^7 - F 222$	$2x, 2y, 0/4; 0, 2y, 2z/4; 2x, 0, 2z/4 + F$
$D_2^8 - I 222$	$2x, 2y, 0/2; 0, 2y, 2z/2; 2x, 0, 2z/2 + I$
$D_2^9 - I 2_1 2_1 2_1$	$\frac{1}{2} + 2x, 2y, \frac{1}{2}/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z/2; 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/2 + I$
$D_{2h}^1 - P m m m$	$2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4; 0, 0, 2z/4; 2x, 2y, 0/2; 0, 2y, 2z/2;$ $2x, 0, 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^2 - P n n n$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 2y, 0/2;$ $0, 2y, 2z/2; 2x, 0, 2z/2; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/1$
$D_{2h}^3 - P c c m$	$2x, 0, \frac{1}{4}/4; 0, 2y, \frac{1}{4}/4; 0, 0, 2z/4; 2x, 2y, 0/2; 0, 2y, \frac{1}{2} + 2z$ $/2; 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^4 - P b a n$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 0/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2z/4; 2x, 2y, 0/2; 0, 2y,$ $2z/2; 2x, 0, 2z/2; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1$
$D_{2h}^5 - P m m a$	$\frac{1}{2} + 2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4; \frac{1}{2}, 0, 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, 2y, 0/2; \frac{1}{2},$ $2y, 2z/2; 2x, 0, 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^6 - P n n a$	$2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, 0, 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, 2y, 0/2; 0,$ $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^7 - P m n a$	$2x, 0, 0/4; \frac{1}{2}, 2y, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} + 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, 2y, \frac{1}{2}/2; 0, 2y,$ $2z/2; \frac{1}{2} + 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^8 - P c c a$	$\frac{1}{2} + 2x, 0, \frac{1}{4}/4; 0, 2y, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, 0, 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, 2y, 0/2; \frac{1}{2},$ $2y, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^9 - P b a m$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 0/4; 0, 0, 2z/4; 2x, 2y, 0/2; \frac{1}{2},$ $\frac{1}{2} + 2y, 2z/2; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^{10} - P c c n$	$\frac{1}{2} + 2x, 0, \frac{1}{4}/4; 0, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y,$ $0/2; \frac{1}{2}, 2y, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^{11} - P b c m$	$2x, \frac{1}{2}, 0/4; 0, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{4}/4; 0, 0, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 2y, \frac{1}{2}/2; 0,$ $\frac{1}{2} + 2y, 2z/2; 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^{12} - P n n m$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{4}/4; 0, 0, 2z/4; 2x, 2y, 0/2; \frac{1}{2},$ $\frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^{13} - P m m n$	$2x, 0, 0/4; 0, 2y, 0/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2z/4; 2x, 2y, 0/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y,$ $2z/2; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/2; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y, 2z/1$
$D_{2h}^{14} - P b e n$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/4; 0, 2y, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2} + 2y,$ $\frac{1}{2}/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z/2; 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^{15} - P b c a$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/4; 0, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{4}/4; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} + 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, 2y,$ $\frac{1}{2}/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z/2; 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$
$D_{2h}^{16} - P n m a$	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}/4; 0, \frac{1}{2} + 2y, 0/4; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} + 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, 2y,$ $\frac{1}{2}/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2} + 2z/2; 2x, \frac{1}{2}, 2z/2; 2x, 2y, 2z/1$

(Fortsetzung Tabelle 4)

Raumgruppe	Lage und Gewichte der Harker-Maxima
$D_{2h}^{17}$ – Cmcm	$2x, 0, 0/8; 0, 2y, \frac{1}{2}/8; 0, 0, \frac{1}{2} + 2z/8; 2x, 2y, \frac{1}{2}/4; 0, 2y, 2z/4; 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + C$
$D_{2h}^{18}$ – Cmca	$2x, 0, 0/8; 0, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2}/8; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/8; 2x, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2}/4; 0, 2y, 2z/4; 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + C$
$D_{2h}^{19}$ – Cmmm	$2x, 0, 0/8; 0, 2y, 0/8; 0, 0, 2z/8; 2x, 2y, 0/4; 0, 2y, 2z/4; 2x, 0, 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + C$
$D_{2h}^{20}$ – Ccem	$2x, 0, \frac{1}{2}/8; 0, 2y, \frac{1}{2}/8; 0, 0, 2z/8; 2x, 2y, 0/4; 0, 2y, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + C$
$D_{2h}^{21}$ – Cmca	$\frac{1}{2} + 2x, 0, 0/8; 0, 2y, 0/8; \frac{1}{2}, 0, 2z/8; \frac{1}{2} + 2x, 2y, 0/4; \frac{1}{2}, 2y, 2z/4; 2x, 0, 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + C$
$D_{2h}^{22}$ – Ccca	$\frac{1}{2} + 2x, 0, \frac{1}{2}/8; 0, 2y, \frac{1}{2}/8; \frac{1}{2}, 0, 2z/8; \frac{1}{2} + 2x, 2y, 0/4; \frac{1}{2}, 2y, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 0, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + C$
$D_{2h}^{23}$ – Fmmm	$2x, 0, 0/16; 0, 2y, 0/16; 0, 0, 2z/16; 2x, 2y, 0/8; 0, 2y, 2z/8; 2x, 0, 2z/8; 2x, 2y, 2z/4 + F$
$D_{2h}^{24}$ – Fddd	$\frac{1}{4} + 2x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}/16; \frac{1}{4}, \frac{1}{4} + 2y, \frac{1}{4}/16; \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} + 2z/16; 2x, 2y, 0/8; 0, 2y, 2z/8; 2x, 0, 2z/8; \frac{1}{4} + 2x, \frac{1}{4} + 2y, \frac{1}{4} + 2z/4 + F$
$D_{2h}^{25}$ – Immm	$2x, 0, 0/8; 0, 2y, 0/8; 0, 0, 2z/8; 2x, 2y, 0/4; 0, 2y, 2z/4; 2x, 0, 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + I$
$D_{2h}^{26}$ – Ibam	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/8; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 0/8; 0, 0, 2z/8; 2x, 2y, 0/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z/4; \frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + I$
$D_{2h}^{27}$ – Ibca	$\frac{1}{2} + 2x, \frac{1}{2}, 0/8; 0, \frac{1}{2} + 2y, \frac{1}{2}/8; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} + 2z/8; \frac{1}{2} + 2x, 2y, \frac{1}{2}/4; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2y, 2z/4; 2x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + I$
$D_{2h}^{28}$ – Imma	$\frac{1}{2} + 2x, 0, 0/8; 0, 2y, 0/8; \frac{1}{2}, 0, 2z/8; \frac{1}{2} + 2x, 2y, 0/4; \frac{1}{2}, 2y, 2z/4; 2x, 0, 2z/4; 2x, 2y, 2z/2 + I$

### Literatur

- P. NIGGLI: Geometrische Kristallographie des Diskontinuums. Leipzig, Gebr. Bornträger, 1919.  
W. NOWACKI: Beziehungen zwischen der Symmetrie des Kristall-, Fourier- und Patterson-Raumes. Schweiz. Min. Petr. Mitt. **30** (1950) 147—160.

Eingegangen, den 2. Oktober 1950.

Abteilung für Kristallographie und Strukturlehre, Mineral.-Petr. Inst. Univ. Bern.