

## Die Gitterkomplexe der Ebenengruppen

VON HANS BURZLAFF, WERNER FISCHER UND ERWIN HELLNER

Mineralogisches Institut der Universität Marburg, 355 Marburg/Lahn, Deutschhausstrasse 10, Deutschland

(Eingegangen am 13. Juni 1967)

The concept of lattice complexes due to C. Hermann is applied to the sets of equivalent points in planar groups. Based on his nomenclature for invariant lattice complexes a symbolism is derived with the use of symbols for point complexes and their arrangement in addition. It is possible to construct each lattice complex from its symbol. The concept can be applied to space groups. All of these lattice complexes are tabulated together with their sets of equivalent points. Some applications are discussed. The efficiency of the conception is demonstrated by tables containing the relations between sets of equivalent points in different planar groups.

### 1. Einführung und Benennung der Gitterkomplexe

In der ersten Auflage der *Internationalen Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* (1935, S. 419) führt C. Hermann den Gitterkomplexbegriff folgendermassen ein: 'Der Begriff des Gitterkomplexes ist von Niggli geschaffen worden (*Geometrische Kristallographie des Diskontinuums*, S. 414 ff). Allerdings ist der hier benutzte Begriff des Gitterkomplexes etwas von der ursprünglichen Definition Niggli's verschieden. In den vorliegenden Tabellen werden zwei Punktlagen dem gleichen Gitterkomplex zugerechnet, wenn sie sich durch irgendwelche Drehungen und Massstabsänderungen ineinander überführen lassen, vorausgesetzt, dass dabei das betreffende Kristallsystem und die Richtung seiner Achsen nicht geändert wird.' Es folgen zwei Beispiele, aus denen hervorgeht, dass Hermann in diesem Zusammenhang unter 'Achsen' die Symmetriachsen (und nicht die Koordinatenachsen) versteht. Es heisst dann weiter: 'Die hier benutzte Definition gibt keine so unmittelbaren Beziehungen zur Darstellung in Koordinaten wie die Niggli's, da man den Symbolen nicht ansieht, wie sich die Zelle des Gitterkomplexes zu derjenigen der Raumgruppe verhält. Andererseits hat unsere Definition den Vorzug, dass hier der "Gitterkomplex" einer Punktlage invariant ist gegen verschiedene Wahlen des Koordinatenkreuzes.'

Dieser letzte Satz ist deshalb wichtig, weil er die Rechtfertigung des Hermann'schen Gitterkomplexbegriffes enthält und einen Hinweis darauf gibt, wo die Anwendungsmöglichkeiten dieses Begriffes liegen. Durch die Zuordnung verschiedener Punktlagen zu ein und demselben Gitterkomplex schafft C. Hermann eigentlich eine Zusammenfassung von Punktlagen zu Äquivalenzklassen im folgenden Sinne: Zwei Punktlagen werden als äquivalent angesehen ('dem gleichen Gitterkomplex zugerechnet'), wenn jede Punktanordnung der einen Punktlage auch innerhalb der anderen möglich ist und umgekehrt. Genau so wirkt sich nämlich die Loslösung der Punktlage – oder genauer der Gesamtheit aller in einer Punktlage realisierbaren Punktanordnungen – von speziellen Raumgruppen und

Koordinatenachsen aus. Eine mathematisch exakte Definition des Gitterkomplexbegriffes ist auf dieser Grundlage möglich, sie wird in Kürze an anderer Stelle gegeben werden. In diesem Zusammenhang genügt es, der Hermann'schen Einführung des Begriffes zu folgen. Dabei wird allerdings die von Donnay, Hellner & Niggli (1966) vorgeschlagene Erweiterung verwendet, auch enantiomorphe Punktlagen dem gleichen Gitterkomplex zuzurechnen.

Dieser Gitterkomplexbegriff soll nach Übertragung ins Zweidimensionale im folgenden näher erläutert werden. Die Punktlagen der 17 Ebenengruppen werden – analog zu dem Vorgehen im Dreidimensionalen – den zweidimensionalen Gitterkomplexen (auch 'ebene Gitterkomplexe' oder 'Netzkomplexe' genannt) zugeordnet. Hierzu einige Beispiele: Die Punktlagen  $1(a)00$  und  $1(b)0\frac{1}{2}$  aus  $p2$  gehören zum gleichen Gitterkomplex  $mP$  (monoklines primitives Gitter), da sie durch Translation oder andere Wahl des Nullpunkts ineinander überführt werden können. Eine Vertauschung der Koordinatenachsen in  $pmm$  transformiert die Punktlage  $2(e)x0, \bar{x}0$  in  $2(g)0y, 0\bar{y}$ , somit sind beide Punktlagen dem gleichen Gitterkomplex zuzurechnen. In den drei tetragonalen Ebenengruppen  $p4$ ,  $p4m$  und  $p4g$  schliesslich gehören alle Punktlagen auf 2- oder 4-zähligen Achsen dem gleichen Gitterkomplex an, da sie durch Nullpunktverschiebungen oder durch Drehungen des Achsenkreuzes um  $45^\circ$  mit anschliessender Massstabsänderung um den Faktor  $1/2$  oder durch die Kombination beider Operationen miteinander zur Deckung gebracht werden können. Als letztes Beispiel sei die allgemeine Punktlage in  $p1$  betrachtet. Unabhängig von der Wahl von  $x$  und  $y$  entsteht in diesem Falle immer ein monoklines primitives Gitter, d.h. diese Punktlage ist ebenfalls dem oben erwähnten Gitterkomplex  $mP$  zuzuordnen.

Dies führt auf die wichtige Unterscheidung zwischen den Freiheitsgraden von Punktlagen und denen von Gitterkomplexen. Bei einer Punktlage versteht man unter Freiheitsgraden alle unabhängig voneinander variierbaren Koordinaten. Demgegenüber verwendet Hermann (*Internationale Tabellen*, 1935) die Bezeich-

Tabelle 1. Zweidimensionale Gitterkomplexe und ihr Auftreten als Punktlagen in Ebenengruppen

| Gitterkomplex                  | Zähligkeit | Punktsymmetrie            | Auftreten (Ebenengruppe, Punktlage, Verschiebungsvektor) |                          | Achsentransformation   |
|--------------------------------|------------|---------------------------|--|--------------------------|--|
| $mP$                           | 1          | 2                         | $p2$   | (a)<br>(b)<br>(c)<br>(d) | $0\frac{1}{2}$<br>$\frac{1}{2}0$<br>$\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ |
| $mP(1xy)$                      |            | 1                         | $p1$   | (a)                      |  |
| $mP2xy$                        | 2          | 1                         | $p2$   | (e)                      |  |
| $oP$                           | 1          | $mm$                      | $pmm$  | (a)<br>(b)<br>(c)<br>(d) | $0\frac{1}{2}$<br>$\frac{1}{2}0$<br>$\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ |
| $oP(1y)$                       |            | $m.$                      | $pm$   | (a)<br>(b)               | $\frac{1}{2}0$   |
| $oP_a$                         | 2          | 2                         | $pmg$  | (a)<br>(b)               | $0\frac{1}{2}$   |
| $oP_{ab}$                      | 4          | 2                         | $cmm$  | (c)                      | $\frac{1}{4}\frac{1}{4}$                                     |
| $oC$                           | 2          | $mm$                      | $cmm$  | (a)<br>(b)               | $0\frac{1}{2}$   |
|                                |            | 2                         | $pgg$  | (a)<br>(b)               | $0\frac{1}{2}$   |
| $oC(1y)$                       |            | $m.$                      | $cm$   | (a)                      |  |
| $oP2x$                         | 2          | $.m$                      | $pmm$  | (e)<br>(f)               | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}$                                     |
| $oP2y$                         |            | $m.$                      | $pmm$  | (g)<br>(h)               | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}$                                     |
| $oP2x(1y)$                     |            | 1                         | $pm$   | (c)                      |  |
| $o.gP_a1y$<br>$og.P_b1x(1y)$   | 2          | $m.$<br>1                 | $pmg$<br>$pg$  | (c)<br>(a)               | $\frac{1}{2}0$   |
| $oC2x$<br>$oC2y$<br>$oC2x(1y)$ | 4          | $.m$<br>$m.$<br>1         | $cmm$<br>$cmm$<br>$cm$                                   | (d)<br>(e)<br>(b)        | $b, a$   |
| $oP2x2y$                       | 4          | 1                         | $pmm$  | (i)                      |  |
| $om.P_a2xy$                    | 4          | 1                         | $pmg$  | (d)                      |  |
| $og.C2xy$                      | 4          | 1                         | $pgg$  | (c)                      |  |
| $oC2x2y$                       | 8          | 1                         | $cmm$  | (f)                      |  |
| $tP$                           | 1          | $4mm$                     | $p4m$  | (a)<br>(b)               | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}$                                     |
|                                |            | 4                         | $p4$   | (a)<br>(b)               | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}$                                     |
| $tC$                           | 2          | $.mm.$<br>4<br>$.mm$<br>2 | $p4m$<br>$p4g$<br>$p4$                                   | (c)<br>(a)<br>(b)<br>(c) | $\frac{1}{2}0$<br>$\frac{1}{2}0$<br>$\frac{1}{2}0$           |
|                                |            |                           |  |                          | $a-b, a+b$   |
| $tP4x$                         | 4          | $.m.$                     | $p4m$  | (d)<br>(e)               | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}$                                     |

Table 1 (Fort.)

| Gitterkomplex   | Zähligkeit | Punktsymmetrie               | Auftreten (Ebenengruppe,<br>Punktlage, Verschiebungsvektor) | Achsentrans-<br>formation  |
|-----------------|------------|------------------------------|---|--|
| $tP4xx$         | 4          | $..m$                        | $p4m$ (f)   |  |
| $t.g.C2xx$      | 4          | $..m$                        | $p4g$ (c) $0\frac{1}{2}$                                    |  |
| $tP4xy$         | 4          | 1                            | $p4$ (d)  |  |
| $tP4x2y$        | 8          | 1                            | $p4m$ (g)   |  |
| $t.g.C4xy$      | 8          | 1                            | $p4g$ (d)   |  |
| $hP$            | 1          | $6mm$<br>6<br>$3.m$<br>$3m.$ | $p6m$ (a)<br>$p6$ (a)<br>$p31m$ (a)<br>$p3m1$ (a)           | (b) $\frac{1}{3}\frac{2}{3}$<br>(c) $\frac{2}{3}\frac{1}{3}$                                 |
|                 |            | 3                            | $p3$  | (a) $\frac{1}{3}\frac{2}{3}$<br>(b) $\frac{2}{3}\frac{1}{3}$<br>(c) $\frac{2}{3}\frac{1}{3}$ |
| $hG$            | 2          | $3m.$<br>3                   | $p6m$ (b)<br>$p6$ (b)<br>$p31m$ (b)                         |  |
| $hN$            | 3          | $2mm$<br>2                   | $p6m$ (c)<br>$p6$ (c)                                       |  |
| $hP3x$          | 3          | $..m$                        | $p31m$ (c)  |  |
| $hP3x\bar{x}$   | 3          | $.m.$                        | $p3m1$ (d)  |  |
| $hP6x$          | 6          | $..m$                        | $p6m$ (d)   |  |
| $hP6x\bar{x}$   | 6          | $.m.$                        | $p6m$ (e)   |  |
| $hP3xy$         | 3          | 1                            | $p3$ (d)  |  |
| $hP3x\bar{x}2y$ | 6          | 1                            | $p3m1$ (e)  |  |
| $hP3x2y\bar{y}$ | 6          | 1                            | $p31m$ (d)  |  |
| $hP6xy$         | 6          | 1                            | $p6$ (d)  |  |
| $hP6x2y\bar{y}$ | 12         | 1                            | $p6m$ (f)   |  |

nung Freiheitsgrade für Gitterkomplexe nur noch für diejenigen dieser Koordinaten, welche die gegenseitige Lage der Punkte eines Komplexes ändern können. In diesem Sinne ist der Gitterkomplex  $mP$  ein Komplex ohne Freiheitsgrade, auch 'invarianter Gitterkomplex' genannt, obwohl er als Punktlage mit zwei Freiheitsgraden in  $p1$  auftritt.

Insgesamt existieren für die Ebenengruppen 30 Gitterkomplexe und 72 Punktlagen. Im monoklinen System gibt es 2 Gitterkomplexe und 6 Punktlagen, im orthorhombischen 9 Gitterkomplexe und 28 Punktlagen, im tetragonalen 7 Gitterkomplexe und 15 Punktlagen und im hexagonalen System 12 Gitterkomplexe und 23 Punktlagen.

Die 30 Netzkomplexe sind in der Tabelle 1 einzeln aufgeführt. Bei jedem Komplex sind alle zugehörigen Punktlagen verzeichnet. Auf die Angabe der Punktsymmetrie sei besonders hingewiesen. Diese wird hier als 'orientierte Punktsymmetrie' aufgeführt; dabei werden die Symmetrieelemente der Punktsymmetrie auf die Blickrichtungen des Systems bezogen. Blickrichtungen ohne Symmetrien werden durch Punkte symbolisiert. Dadurch wird die Beschreibung auch dann eindeutig, wenn in einem höheren System mehrere Symmetrieelemente einer Blickrichtung zugeordnet werden müssen. Z.B. wird so im tetragonalen System unterschieden, ob die Punktsymmetrie  $mm$  mit achsenparallelen Spiegelgeraden ( $.mm.$ ) oder mit diagonalen Spiegelgeraden ( $.mm$ ) auftritt.

Die nähere Betrachtung der für einen Gitterkomplex möglichen Punktsymmetrien liefert eine wichtige Eigenschaft der Gitterkomplexe. Zu jedem Gitterkomplex lässt sich nämlich eine Punktsymmetriegruppe maximaler Ordnung finden, mit welcher der Gitterkomplex als Punktlage realisiert ist. Diese Punktsymmetrie kann mehrfach auftreten, doch liegen dann alle diese Punktlagen in der gleichen Ebenengruppe. Es kann somit jedem Gitterkomplex eindeutig eine Ebenengruppe zugeordnet werden. Diese Eigenschaft könnte ebenfalls zur Definition des Gitterkomplexbegriffes verwendet werden. C. Hermann hat sie in den *Internationalen Tabellen* (1935) für die Bezeichnung von Gitterkomplexen benutzt. Ein (dreidimensionaler) Gitterkomplex wurde nach dieser charakteristischen Raumgruppe zusammen mit dem (niedrigsten) Wyckoff-Buchstaben einer Punktage benannt, die diesen Gitterkomplex verwirklicht. Diese Symbole sind eindeutig, allerdings sind sie nicht so instruktiv, dass sich aus dem Symbol ohne zusätzliche Informationen (d.h. im allgemeinen ohne Benutzung der *Internationalen Tabellen*) der Gitterkomplex konstruieren liesse. Die Gitterkomplexe sind daher in Tabelle 1 in anderer Weise symbolisiert.

Die hier verwendete Symbolik für Gitterkomplexe geht ebenfalls auf C. Hermann zurück. Er schlug 1960 vor, Gitterkomplexe mit einem Freiheitsgrad mit Hilfe invarianter Komplexe zu beschreiben und für diese invarianter Gitterkomplexe grosse lateinische und griechische Buchstaben als Symbole zu benutzen. Donnay, Hellner & Niggli verwendeten 1966 für diese Sym-

bolik ausschliesslich lateinische Buchstaben und wiesen darauf hin, dass auch Gitterkomplexe mit mehreren Freiheitsgraden mit Hilfe von invarianten Komplexen charakterisiert werden können. Hierfür ist inzwischen ein System ausgearbeitet worden, das im folgenden auf die Netzkomplexe angewendet werden soll. Es bietet die Möglichkeit, aus dem Symbol den Gitterkomplex herzuleiten.

Erstes Bauelement eines solchen Symbols ist der grosse lateinische Buchstabe, der einen invarianten Gitterkomplex bezeichnet. Hierfür werden die Hermannschen Vorschläge (1960) übernommen, nämlich die Buchstaben  $P$ ,  $C$ ,  $G$  und  $N$ , mit dem Unterschied, dass sie hier die entsprechenden zweidimensionalen Anordnungen bezeichnen, die aus diesen dreidimensionalen Gitterkomplexen durch Weglassen der  $c$ -Translation entstehen. Untere und obere Indizes an diesen Buchstaben haben wie bei Hermann (1960) die Bedeutung von Achsentransformationen; so beschreibt  $P_a$  ein primitives Gitter, dessen Translation in  $a$ -Richtung halb so gross ist wie die  $a$ -Translation der Elementarzelle. Zur Unterscheidung der verschiedenen Kristallsysteme werden dem Symbol analog zu Hermann (1960) kleine lateinische Buchstaben  $m$ ,  $o$ ,  $t$  oder  $h$  vorangestellt, wenn immer dies erforderlich oder aus Gründen der Systematik erwünscht ist. Insgesamt entstehen so folgende Symbole der 7 invarianten Netzkomplexe:  $mP$ ,  $oP$ ,  $oC$ ,  $tP$  (in anderer Aufstellung  $tC$ ),  $hP$  (in orthohexagonaler Aufstellung  $hC$ , in  $h$ -Aufstellung  $hH$ ),  $hG$  und  $hN$ .

Bei einem Gitterkomplex mit Freiheitsgraden kann durch spezielle Koordinatenwahl in einer zugehörigen Punktage entweder ein invarianter Gitterkomplex entstehen, in dem mehrere Punkte des betrachteten Komplexes zusammenfallen, oder es kann eine Punktanordnung erreicht werden, die mit einem invarianten Komplex übereinstimmt, jedoch einen oder mehrere Freiheitsgrade aufweist. In diesem Falle werde von einer Grenzform gesprochen. Im ersten Fall entsteht z.B. aus der allgemeinen Punktage in  $p4$  mit  $x=y=0$  der invariante Komplex  $tP$ . Für den Gitterkomplex von  $2(c) \frac{1}{2}y; \frac{3}{4}\bar{y}$  in  $pmg$  dagegen treten nur die Grenzformen  $oP_a$  (bei  $y=0$ ) und  $oC$  (bei  $y=\frac{1}{2}$ ) auf. Man erreicht so stets einen oder mehrere invariante Gitterkomplexe bzw. mehrere Grenzformen, die man nach den angenommenen invarianten Gitterkomplexen benennt. Der Komplex mit Freiheitsgraden kann von jedem dieser invarianten Komplexe aus beschrieben werden. Für die Darstellung von Verwandtschaftsrelationen zwischen Gitterkomplexen oder zwischen Ebenen- bzw. Raumgruppen wäre es nun wünschenswert, alle diese Möglichkeiten im Symbol sichtbar zu machen, doch entstehen dadurch so unhandliche Symbole, dass man im allgemeinen auf solche Mehrfachbenennungen verzichten wird. Damit wird es erforderlich, Regeln aufzustellen, welche einen der erreichbaren invarianten Gitterkomplexe für die Standardbeschreibung auswählen. Im zweidimensionalen Fall wird dies durch folgendes Regelsystem geleistet:

(1) Man wähle in der charakteristischen Ebenengruppe den invarianten Komplex bzw. die Grenzform, deren Punktsymmetriegruppe die höchste Ordnung besitzt.

(2) Lässt (1) mehrere Möglichkeiten offen, so ist ein invarianter Komplex gegenüber einer Grenzform zu bevorzugen.

(3) Bleiben nach (2) noch mehrere Möglichkeiten, so ist der Komplex zu wählen, dessen Punktsymmetrie dem höchsten System angehört.

(4) Ist auch nach (3) keine Entscheidung möglich, so verwende man denjenigen invarianten Komplex, der entsteht, wenn alle freien Koordinaten der Beschreibung der *International Tables for X-ray Crystallography* (1952) null gesetzt werden.

Hierzu einige Beispiele: Der Komplex der allgemeinen Punktlage von  $p6$  wird nach (1) von  $hP$  (in  $00$  mit Punktsymmetrie  $6$ ) her beschrieben, nicht von  $hG$  (in  $\frac{1}{2}0$  mit Punktsymmetrie  $3$ ) und nicht von  $hN$  (in  $\frac{1}{2}0$  mit Punktsymmetrie  $2$ ). Für den Komplex der allgemeinen Punktlage von  $pmg$  erhält [gemäss (2)] der invariante Komplex  $oP_a$  den Vorzug vor den Grenzformen von  $2(c)$ , nämlich  $oC$  und  $oP_a$  (vgl. oben). In der allgemeinen Punktlage von  $p4g$  wird  $2(a)00$  wegen der tetragonalen Punktsymmetrie  $4$  nach Regel (3) ausgezeichnet vor  $2(b)\frac{1}{2}0$  (Punktsymmetrie  $mm$ , also orthogonal). Schliesslich wird von den beiden Grenzformen, die  $2(c)$  in  $pmg$  annehmen kann,  $oP_a$  nach Regel (4) vorgezogen.

Ist auf diese Weise ein invarianter Gitterkomplex ausgewählt worden, so soll der nächste Teil des Symbols deutlich machen, wie sich Punkte eines Gitterkomplexes mit Freiheitsgraden auf die Punkte des invarianten Komplexes verteilen lassen und sich entsprechend deren Punktsymmetrie um diese anordnen. Eine Anordnung von Punkten, welche in Bezug auf eine Punktsymmetriegruppe gleichwertig sind, werde 'Punkt-komplex' genannt. Ein solcher Punkt-komplex lässt sich beschreiben, indem man die sukzessive Aufspaltung des Ursprunges unter den Elementen der Punktsymmetriegruppe in Form von Aufspaltungszahl und -richtung sichtbar macht. So erfolgt z.B. unter der Punktsymmetrie  $mm$  eine doppelte Aufspaltung jeweils in zwei Punkte mit Freiheitsgraden  $x$  und  $y$ ; der Punkt-komplex allgemeiner Lage bezüglich  $mm$  wird demnach symbolisiert durch  $2x2y$ . Eine sechszählige Achse dagegen bewirkt eine nicht weiter differenzierbare Aufspaltung in sechs Punkte, der Punkt-komplex für  $x, y$  heisst daher  $6xy$ . In Tabelle 2 sind alle allgemeinen und speziellen ebenen Punkt-komplexe verzeichnet; Symbole in Klammern bezeichnen Grenzformen. Es sei darauf hingewiesen, dass der Begriff des Punkt-komplexes und eine Symbolik für dreidimensionale Punkt-komplexe im Laufe einer Diskussion mit J. D. H. Donay entwickelt wurde (noch nicht publiziert).

Mit diesen Hilfsmitteln ist es nunmehr möglich, auch Gitterkomplexe mit Freiheitsgraden anschaulich zu symbolisieren. Zum Beispiel erhält die allgemeine Punktlage in  $pmm$  als Gitterkomplex das Symbol  $oP2x2y$ , da  $2x2y$  das Symbol des betreffenden Punkt-komplexes

Tabelle 2. *Zweidimensionale Punkt-komplexe*

## (a) Hexagonales System

|       | $xy$          | $x0$   | $x\bar{x}$    |
|-------|---------------|--------|---------------|
| $6mm$ | $6x2y\bar{y}$ | $6x$   | $6x\bar{x}$   |
| $6$   | $6xy$         | $(6x)$ | $(6x\bar{x})$ |
| $3m1$ | $3x\bar{x}2y$ | $(6x)$ | $3x\bar{x}$   |
| $31m$ | $3x2y\bar{y}$ | $3x$   | $(6x\bar{x})$ |
| $3$   | $3xy$         | $(3x)$ | $(3x\bar{x})$ |

## (b) Tetragonales System

|      | $xy$   | $x0$   | $xx$    |
|------|--------|--------|---------|
| $4m$ | $4x2y$ | $4x$   | $4xx$   |
| $4$  | $4xy$  | $(4x)$ | $(4xx)$ |

## (c) Orthogonales System

|      | $xy$   | $x0$   | $0y$   |
|------|--------|--------|--------|
| $mm$ | $2x2y$ | $2x$   | $2y$   |
| $m.$ | $2x1y$ | $(2x)$ | $1y$   |
| $.m$ | $2y1x$ | $1x$   | $(2y)$ |

## (d) Monoklines System

|     | $xy$  | $x0$   | $0y$   |
|-----|-------|--------|--------|
| $2$ | $2xy$ | $(2x)$ | $(2y)$ |
| $1$ | $1xy$ | $(1x)$ | $(1y)$ |

um einen Punkt des zur Beschreibung ausgewählten invarianten Komplexes  $oP$  ist. Umgekehrt kann aus dem Symbol  $oP2x2y$  der betreffende Gitterkomplex folgendermassen abgeleitet werden: Man nehme ein orthogonales primitives Gitter und ersetze seine Punkte jeweils durch Punkt-komplexe  $2x2y$ , d.h. man spalte die Punkte von  $oP$  zunächst auf in je zwei Punkte in  $x$ -Richtung, diese anschliessend in je zwei Punkte in  $y$ -Richtung.

Diese Art der Beschreibung ist jedoch noch nicht in allen Fällen eindeutig. Sind nämlich für den Punkt-komplex verschiedene Orientierungen an verschiedenen Punkten des invarianten Komplexes möglich, so fehlt eine Angabe darüber, wie diese verschiedenen Orientierungen sich auf die verschiedenen Punkte des invarianten Komplexes verteilen. Z.B. baut sich der Netzkomplex der allgemeinen Punktlage in  $pmg$  aus Hanteln allgemeiner Lage um  $oP_a$  auf, symbolisiert nach den bisher dargestellten Überlegungen als  $oP_a2xy$ . Diesem Symbol ist jedoch nicht zu entnehmen, dass die Hanteln um  $00$  anders orientiert sind als um  $\frac{1}{2}0$ . Dies wird nun dadurch berücksichtigt, dass in solchen Fällen eines der Symmetrieelemente vorangestellt wird, welches den Übergang zwischen den einzelnen Orientierungen bewirkt. Die Auswahl ist im allgemeinen nicht eindeutig. Im genannten Beispiel kann entweder eine Spiegelgerade senkrecht **a** ( $m.$ ) oder eine Gleit-spiegelgerade senkrecht **b** ( $.g$ ) benutzt werden. Es wird vorgeschlagen, Spiegeloperationen den Vorzug vor Drehoperationen zu geben und innerhalb dieser Arten von Symmetrieelementen solche ohne Gleit-komponenten auszuzeichnen. Der Gitterkomplex des Beispiels erhält infolgedessen das Symbol  $o-m.P_a2xy$ , wobei der Systembuchstabe  $o$  an den Anfang des Symbols gestellt wird, da er sich auf den Komplex als Ganzes bezieht.\* Die Gesamtheit der Symmetrieelemente,

\* Es empfiehlt sich aus Gründen der Deutlichkeit, den Systembuchstaben von der folgenden Anordnungssymmetrie durch einen Bindestrich zu trennen; dieser ist in den Tabellen fortgelassen.

die zur Erzeugung der verschiedenen Orientierungen des Punktkomplexes benötigt wird, werde im übrigen mit 'Anordnungssymmetrie' bezeichnet. Sie wird im Gitterkomplexsymbol in der Art einer orientierten Punktsymmetrie geschrieben, doch ist zu bemerken, dass sie im allgemeinen keine Gruppe darstellt.

Diese Symbole der Gitterkomplexe werden in der ersten Spalte von Tabelle 1 verwendet. Zu erwähnen ist hierbei noch, dass ausser dem Symbol der Standardaufstellung (eingerahmt in Tabelle 1) auch noch die Symbole gegeben werden, wie sie aufgrund des Auftretens in Form anderer Punktlagen entstehen. Um dies zu ermöglichen, mussten Freiheitsgrade, die nur der Punktlage, nicht aber dem Gitterkomplex zu eigen sind, mit angegeben werden. Zur Unterscheidung von den Freiheitsgraden des Komplexes werden diese dem Symbol des Komplexes in Klammern eingeschlossen angefügt. Beispielsweise wird  $mP$  von  $p1$  her als  $mP(1xy)$  geschrieben. Die bei der Beschreibung in anderen Aufstellungen oder anderen Ebenengruppen erforderlichen Transformationen lassen sich nach Hermann (1960) den Indizes des Symboles insgesamt entnehmen, sie werden jedoch auch noch ausdrücklich in der letzten Spalte von Tabelle 1 angegeben. Dort sind jeweils die Achsenvektoren der Ebenengruppe ausgedrückt durch die Achsenvektoren des Gitterkomplexes, sofern die beiden Achsensysteme nicht übereinstimmen. Weiter sei noch darauf hingewiesen, dass bei der Angabe der Punktlage jeweils die Verschiebung des Komplexes gegenüber der Standardaufstellung des zugrunde liegenden invarianten Komplexes aufgeführt ist.

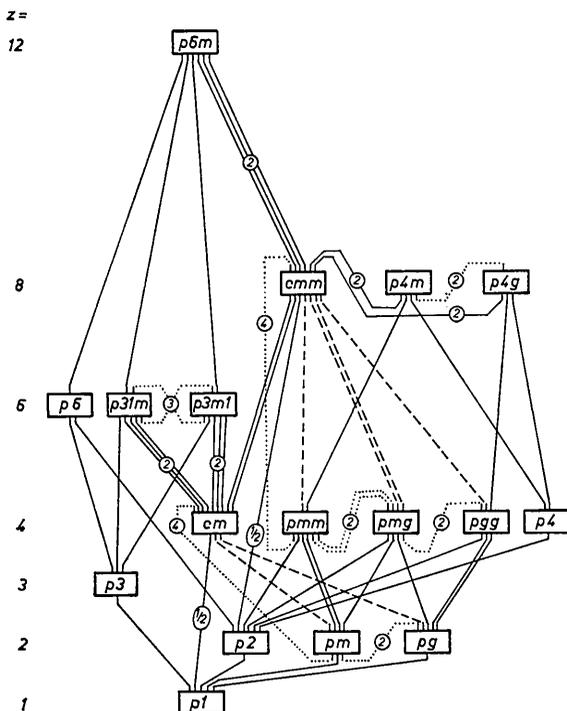


Fig. 1. Untergruppenverband der Ebenengruppen.

## 2. Anwendungsmöglichkeiten des Gitterkomplexbegriffs

Diese Verschiebungsvektoren spielen eine Rolle, wenn man an Anwendungsmöglichkeiten des Gitterkomplexbegriffs denkt. Eine Möglichkeit wäre etwa die Beschreibung von Punktlagen und Ebenen- bzw. Raumgruppen mit Hilfe von Gitterkomplexen. Dabei muss die Lage der auftretenden Gitterkomplexe bezogen auf den Koordinatenursprung berücksichtigt werden. Daher werden dem Gitterkomplexsymbol die Komponenten des Verschiebungsvektors vorangestellt (auch hier wird der Systembuchstabe davorgesetzt). Auf diese Weise gewinnt man eine ausserordentlich komprimierte Beschreibung der Gruppen, die es ausserdem erleichtert, Zusammenhänge innerhalb von Gruppen und zwischen ihnen zu erkennen. Als Beispiel diene die folgende Beschreibung von  $p4m$ :

|      |       |                  |
|------|-------|------------------|
| 1(a) | $4mm$ | $P$              |
| 1(b) | $4mm$ | $\frac{1}{2}P$   |
| 2(c) | $.mm$ | $\frac{1}{2}C$   |
| 4(d) | $.m$  | $P4x$            |
| 4(e) | $.m$  | $\frac{1}{2}P4x$ |
| 4(f) | $.m$  | $P4xx$           |
| 8(g) | $1$   | $P4x2y$          |

Diese Art der Punktlagenbeschreibung wurde dazu benutzt, um in den Tabellen 3–5 Verwandtschaften zwischen den Punktlagen einer Ebenengruppe und ihrer Untergruppen zu verdeutlichen. Zugrunde liegt diesen Tabellen der Untergruppenverband, wie er in Fig. 1 dargestellt ist (die Untergruppenrelationen hierfür wurden einer noch nicht veröffentlichten Arbeit von Neubüser und Wondratschek über maximale Untergruppen von Raumgruppen entnommen). Die einzelnen Ebenengruppen sind hier in Rechtecke eingeschlossen; Gruppen gleicher Zähligkeit der allgemeinen Punktlage stehen in der gleichen Zeile, die Zähligkeit steht links. Eine Gruppe ist mit ihren maximalen Untergruppen durch Linien verbunden, welche den unteren Rand des betreffenden Rechtecks mit dem oberen des Rechtecks der Untergruppe verbinden. Diese Verbindungslinien sind durchgezogen für zellen-gleiche Untergruppen (Translationen unverändert), unterbrochen für Untergruppen, die durch Dezentrierung gewonnen werden können, und punktiert für Untergruppen, welche nur über eine Zellvergrößerung zu erhalten sind. Wenn die Untergruppe in einer anderen Aufstellung beschrieben ist als die Gruppe selbst, wird der für den Abbau nötige Vergrößerungsfaktor in einem Oval an der Verbindungslinie angegeben. Dieser Faktor ermöglicht es zusammen mit der Zähligkeit der allgemeinen Punktlage, dem Diagramm den Index der Untergruppe zu entnehmen. Ist eine Ebenengruppe in einer anderen mehrfach als Untergruppe enthalten, so werden die beiden Gruppen durch die entsprechende Anzahl von Linien verbunden, wie z.B.  $p6m$  mit  $emm$ . Abgesehen von den trivialen Untergruppenbeziehungen (eine Ebenengruppe als Untergruppe von sich selbst) ist das Schema vollständig.

Tabelle 3. Verwandtschaften zwischen Gitterkomplexen, hervorgerufen durch Symmetrieabbau in hexagonalen Ebenengruppen

(a) Ohne Zellvergrößerung innerhalb des hexagonalen Systems

|        |                  |  |  |                           |                           |                            |                            |                    |
|--------|------------------|--|--|---------------------------|---------------------------|----------------------------|----------------------------|--------------------|
| $p6m$  | $P$<br>$1(a)6mm$ | $G$<br>$2(b)3m.$                       | $N$<br>$3(c)2mm$                       | $P6x$<br>$6(d)..m$        | $P6x\bar{x}$<br>$6(e).m.$ |                            |                            |                    |
| $p6$   | $P$<br>$1(a)6$   | $G$<br>$2(b)3$                         | $N$<br>$3(c)2$                         | $P6xy$<br>$6(d)1$         | $P6xy$<br>$6(d)1$         |                            |                            |                    |
| $p31m$ | $P$<br>$1(a)3.m$ | $G$<br>$2(b)3$                         | $P3x$<br>$3(c)..m$                     | $+P3x$<br>$3(c)..m$       | $-P3x$<br>$3(c)..m$       | $P3x2y\bar{y}$<br>$6(d)1$  |                            |                    |
| $p3m1$ | $P$<br>$1(a)3m.$ | $\frac{1}{3}\frac{2}{3}P$<br>$1(b)3m.$ | $\frac{2}{3}\frac{1}{3}P$<br>$1(c)3m.$ | $P3x\bar{x}$<br>$3(d).m.$ | $P3x\bar{x}2y$<br>$6(e)1$ | $+P3x\bar{x}$<br>$3(d).m.$ | $-P3x\bar{x}$<br>$3(d).m.$ |                    |
| $p3$   | $P$<br>$1(a)3$   | $\frac{1}{3}\frac{2}{3}P$<br>$(1b)3$   | $\frac{2}{3}\frac{1}{3}P$<br>$1(c)3$   | $P3xy$<br>$3(d)1$         | $+P3xy$<br>$3(d)1$        | $-P3xy$<br>$3(d)1$         | $+P3xy$<br>$3(d)1$         | $-P3xy$<br>$3(d)1$ |

(b) Mit Zellvergrößerung innerhalb des hexagonalen Systems

(1)

|  |                         |  |  |                           |                           |   |   |
|--|-------------------------|--|--|---------------------------|---------------------------|---|---|
| $p31m$<br>$\downarrow (2a+b, b-a)$<br>$h3m1$ | $P$<br>$1(a)3.m$<br>$H$ | $G$<br>$2(b)3$<br>$G_v$                | $P3x$<br>$3(c)..m$<br>$H3x\bar{x}$     |                           |                           |   |   |
| $p3m1$                                       | $P$<br>$1(a)3m.$        | $\frac{1}{3}\frac{2}{3}P$<br>$1(b)3m.$ | $\frac{2}{3}\frac{1}{3}P$<br>$1(c)3m.$ | $P3x\bar{x}2y$<br>$6(e)1$ | $P3x\bar{x}$<br>$3(d).m.$ | $\frac{1}{3}\frac{2}{3}P3x\bar{x}$<br>$3(d).m.$ | $\frac{2}{3}\frac{1}{3}P3x\bar{x}$<br>$3(d).m.$ |

(2)

|  |                         |   |   |                                    |                    |                           |
|--|-------------------------|---|---|------------------------------------|--------------------|---------------------------|
| $p3m1$<br>$\downarrow (2a+b, b-a)$<br>$h31m$ | $P$<br>$1(a)3m.$<br>$H$ | $\frac{1}{3}\frac{2}{3}P$<br>$1(b)3m.$<br>$\frac{1}{3}0H$ | $\frac{2}{3}\frac{1}{3}P$<br>$1(c)3m.$<br>$\frac{2}{3}0H$ | $P3x\bar{x}$<br>$3(d).m.$<br>$H3x$ |                    |                           |
| $p31m$                                       | $P$<br>$1(a)3.m$        | $G$<br>$2(b)3$  | $P3x$<br>$3(c)..m$  | $P3x$<br>$3(c)..m$                 | $P3x$<br>$3(c)..m$ | $P3x2y\bar{y}$<br>$6(d)1$ |

(c) Aus dem hexagonalen System hinausführend

(1)

|  |                          |   |  |                                 |                                     |                     |                    |                     |
|--|--------------------------|---|--|---------------------------------|-------------------------------------|---------------------|--------------------|---------------------|
| $p6m$<br>$\downarrow (2a+b, b)$<br>$c6m$ | $hP$<br>$1(a)6mm$<br>$C$ | $hG$<br>$2(b)3m.$<br>$\{\frac{1}{3}0C, \frac{2}{3}0C\}$ | $hN$<br>$3(c)2mm$<br>$\{\frac{1}{2}C, \frac{1}{3}P_{ab}\}$ | $hP6x$<br>$6(d)..m$<br>$C6y$    | $hP6x\bar{x}$<br>$6(e).m.$<br>$C6x$ |                     |                    |                     |
| $cmm$                                    | $oC$<br>$2(a)mm$         | $oC2x$<br>$4(d).m$                                      | $o0\frac{1}{2}C$<br>$2(b)mm$                               | $o\frac{1}{3}P_{ab}$<br>$4(c)2$ | $oC2y$<br>$4(e).m.$                 | $oC2x2y$<br>$8(f)1$ | $oC2x$<br>$4(d).m$ | $oC2x2y$<br>$8(f)1$ |

(2)

|      |                 |                    |                             |                             |                                       |
|------|-----------------|--------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------------------------|
| $p6$ | $hP$<br>$1(a)6$ | $hG$<br>$2(b)3$    | $hN$<br>$3(c)2$             |                             |                                       |
| $p2$ | $mP$<br>$1(a)2$ | $mP2xy$<br>$2(e)1$ | $m0\frac{1}{2}P$<br>$1(b)2$ | $m\frac{1}{2}0P$<br>$1(c)2$ | $m\frac{1}{3}\frac{1}{3}P$<br>$1(d)2$ |

Tabelle 4. Verwandtschaften zwischen Gitterkomplexen, hervorgerufen durch Symmetrieabbau in tetragonalen Ebenengruppen

(a) Ohne Zellvergrößerung innerhalb des tetragonalen Systems

|       |                  |  |                               |                    |  |                                    |
|-------|------------------|--|-------------------------------|--------------------|--|------------------------------------|
| $p4m$ | $P$<br>$1(a)4mm$ | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$<br>$1(b)4mm$ | $\frac{1}{2}0C$<br>$2(c).mm.$ | $P4x$<br>$4(d).m.$ | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}P4x$<br>$4(e).m.$ | $P4xx$<br>$4(f)..m$                |
| $p4g$ | $C$<br>$2(a)4$   |  | $\frac{1}{2}0C$<br>$2(b)..mm$ |                    |  | $0\frac{1}{2}.g.C2xx$<br>$4(c)..m$ |
| $p4$  | $P$<br>$1(a)4$   | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$<br>$1(b)4$   | $\frac{1}{2}0C$<br>$2(c)2$    | $P4xy$<br>$4(d)1$  | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}P4xy$<br>$4(d)1$  | $P4xy$<br>$4(d)1$                  |

(b) Mit Zellvergrößerung innerhalb des tetragonalen Systems

|                                   |                         |   |   |                              |  |  |
|-----------------------------------|-------------------------|---|---|------------------------------|--|--|
| $p4m$<br>↓ $(a-b, a+b)$<br>$c4mm$ | $P$<br>$1(a)4mm$<br>$C$ | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$<br>$1(b)4mm$<br>$\frac{1}{2}0C$ | $\frac{1}{2}0C$<br>$2(c).mm.$<br>$\frac{1}{2}\frac{1}{2}P_{ab}$ | $P4x$<br>$4(d).m.$<br>$C4xx$ | $\frac{1}{2}\frac{1}{2}P4x$<br>$4(e).m.$<br>$\frac{1}{2}0C4xx$ | $P4xx$<br>$4(f)..m$<br>$C4x$                               |
| $p4g$                             | $C$<br>$2(a)4$          | $\frac{1}{2}0C$<br>$2(b)..mm$                             | $0\frac{1}{2}.g.C2xx$<br>$4(c)..m$                              | $.g.C4xy$<br>$8(d)1$         | $0\frac{1}{2}.g.C2xx$<br>$4(c)..m$                             | $\frac{1}{2}0.g.C2xx$<br>$4(c)..m$<br>$.g.C4xy$<br>$8(d)1$ |

(c) Aus dem tetragonalen System hinausführend  
(1)

|   |                          |  |  |                               |   |   |
|---|--------------------------|--|--|-------------------------------|---|---|
| $p4m$<br>↓ $(a-b, a+b)$<br>$c4mm$                         | $tP$<br>$1(a)4mm$<br>$C$ | $t\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$<br>$1(b)4mm$<br>$\frac{1}{2}0C$ | $t\frac{1}{2}0C$<br>$2(c).mm.$<br>$\frac{1}{2}\frac{1}{2}P_{ab}$ | $tP4x$<br>$4(d).m.$<br>$C4xx$ | $t\frac{1}{2}\frac{1}{2}P4x$<br>$4(e).m.$<br>$\frac{1}{2}0C4xx$ | $tP4xx$<br>$4(f)..m$<br>$C4x$                         |
| $p4g$<br>↓ $(a-b, a+b)$<br>$c4mg(\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ |                          | $t\frac{1}{2}0C$<br>$2(b)..mm$<br>$P_{ab}$                 | $tC$<br>$2(a)4$<br>$\frac{1}{2}\frac{1}{2}P_{ab}$                |                               |   | $t0\frac{1}{2}.g.C2xx$<br>$4(c)..m$<br>$..ggP_{ab}2x$ |
| $cmm$   | $oC$<br>$2(a)mm$         | $o\frac{1}{2}0C$<br>$2(b)mm$                               | $o\frac{1}{2}\frac{1}{2}P_{ab}$<br>$4(c)2$                       | $oC2x2y$<br>$8(f)2$           | $o\frac{1}{2}0C2x2y$<br>$8(f)2$                                 | $oC2x$<br>$4(d).m$<br>$oC2y$<br>$4(e)m.$              |

(2)

|       |                   |   |                                |                              |   |                      |  |  |                     |
|-------|-------------------|---|--------------------------------|------------------------------|---|----------------------|--|--|---------------------|
| $p4m$ | $tP$<br>$1(a)4mm$ | $t\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$<br>$1(b)4mm$ | $t\frac{1}{2}0C$<br>$2(c).mm.$ | $tP4x$<br>$4(d).m.$          | $t\frac{1}{2}\frac{1}{2}P4x$<br>$4(e).m.$ | $tP4xx$<br>$4(f)..m$ |  |  |                     |
| $pmm$ | $oP$<br>$1(a)mm$  | $o\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$<br>$1(d)mm$  | $o\frac{1}{2}0P$<br>$1(c)mm$   | $o0\frac{1}{2}P$<br>$1(b)mm$ | $oP2x$<br>$2(e).m$                        | $oP2y$<br>$2(g)m.$   | $o\frac{1}{2}\frac{1}{2}P2x$<br>$2(f).m$ | $o\frac{1}{2}\frac{1}{2}P2y$<br>$2(h)m.$ | $oP2x2y$<br>$4(i)1$ |

(3)

|       |                 |                                |                                     |
|-------|-----------------|--------------------------------|-------------------------------------|
| $p4g$ | $tC$<br>$2(a)4$ | $t\frac{1}{2}0C$<br>$2(b)..mm$ | $t0\frac{1}{2}.g.C2xx$<br>$4(c)..m$ |
| $pgg$ | $oC$<br>$2(a)2$ | $o\frac{1}{2}0C$<br>$2(b)2$    | $o0\frac{1}{2}g.C2xy$<br>$4(c)1$    |

Tabelle 5. Verwandtschaften zwischen Gitterkomplexen, hervorgerufen durch Symmetrieabbau in orthogonalen Ebenengruppen

(a) Ohne Zellvergrößerung innerhalb des orthogonalen Systems

| <i>cmm</i>                    | <i>C</i><br>2(a)mm                    | $0\frac{1}{2}C$<br>2(b)mm            | $\frac{1}{2}P_{ab}$<br>4(c)2          | <i>C</i> <sub>2x</sub><br>4(d).m      | <i>C</i> <sub>2y</sub><br>4(e)m.       |
|-------------------------------|---------------------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|--|
| <i>pmm</i>                    | $\frac{1}{2}P$<br>1(a)mm              | $0\frac{1}{2}P$<br>1(b)mm            | $\frac{1}{2}P_{ab}$<br>4(i)1          | $\frac{1}{2}P_{2x}$<br>2(e).m         | $\frac{1}{2}P_{2y}$<br>2(g)m.          |
| <i>pmg</i> ( $\frac{1}{2}g$ ) | $0\frac{1}{2}g.P_{a1y}$<br>2(c)m.     | $\frac{1}{2}g.P_{a1y}$<br>2(c)m.     | $\frac{1}{2}P_a$<br>2(b)2             | $\frac{1}{2}m.P_{a2xy}$<br>4(d)1      | $+0\frac{1}{2}g.P_{a1y}$<br>2(c)m.     |
| <i>pgg</i>                    | <i>C</i><br>2(a)2                     | $0\frac{1}{2}C$<br>2(b)2             | <i>g.C</i> <sub>2xy</sub><br>4(c)1    | <i>g.C</i> <sub>2xy</sub><br>4(c)1    | <i>g.C</i> <sub>2xy</sub><br>4(c)1     |
| <i>cm</i>                     | <i>C</i> (1y)<br>2(a)m.               | $0\frac{1}{2}C$ (1y)<br>2(a)m.       | <i>C</i> <sub>2x</sub> (1y)<br>4(b)1  | <i>C</i> <sub>2x</sub> (1y)<br>4(b)1  | <i>C</i> (1y)<br>2(a)m.                |
| <i>pm</i>                     | <i>P</i> (1y)<br>1(a)m.               | $0\frac{1}{2}P$ (1y)<br>1(a)m.       | $\frac{1}{2}P_{2x}$ (1y)<br>2(c)1     | $\frac{1}{2}P_{2x}$ (1y)<br>2(c)1     | $+P$ (1y)<br>1(a)m.                    |
| <i>p1g</i>                    | $0\frac{1}{2}g.P_{a1y}$ (1x)<br>2(a)1 | $\frac{1}{2}g.P_{a1y}$ (1x)<br>2(a)1 | $0\frac{1}{2}g.P_{a1y}$ (1x)<br>2(a)1 | $0\frac{1}{2}g.P_{a1y}$ (1x)<br>2(a)1 | $+0\frac{1}{2}g.P_{a1y}$ (1x)<br>2(a)1 |

\* Kann auch .gC1y geschrieben werden.

(b) Mit Zellvergrößerung innerhalb des orthogonalen Systems

|  |                        |                           |                                    |                                       |  |
|--|------------------------|---------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|--|
| <i>pmm</i> ↓<br>( <i>pmm</i> ) <sub>ab</sub> | <i>P</i><br>1(a)mm     | $0\frac{1}{2}P$<br>1(b)mm | $\frac{1}{2}P$<br>1(d)mm           | $0\frac{1}{2}P_{2x}$<br>2(f).m        | $\frac{1}{2}P_{2y}$<br>2(g)m.          |
| <i>cmm</i>                                   | <i>P</i> <sub>ab</sub> | $0\frac{1}{2}P_{ab}$      | $\frac{1}{2}P_{ab}$                | $0\frac{1}{2}(P_{2x})_{ab}$           | $\frac{1}{2}0(P_{2y})_{ab}$            |
| <i>(pmg)</i> <sub>b</sub>                    | <i>C</i><br>2(a)mm     | $0\frac{1}{2}C$<br>2(b)mm | $\frac{1}{2}P_{ab}$<br>4(c)2       | <i>C</i> <sub>2x</sub><br>4(d).m      | $\frac{1}{2}0C_{2y}$<br>4(e)m.         |
| <i>pgg</i>                                   | <i>C</i><br>2(a)2      | $0\frac{1}{2}C$<br>2(b)2  | $\frac{1}{2}g.P_{a1y}$<br>4(c)m.   | $0\frac{1}{2}(m.P_{a2xy})_b$<br>8(d)1 | $+0\frac{1}{2}(g.P_{a1y})_b$<br>4(c)m. |
|  | <i>C</i><br>2(a)2      | $0\frac{1}{2}C$<br>2(b)2  | <i>g.C</i> <sub>2xy</sub><br>4(c)1 | <i>g.C</i> <sub>2xy</sub><br>4(c)1    | <i>g.C</i> <sub>2xy</sub><br>4(c)1     |

Table 5 (Fort.)

(c) Aus dem orthogonalen System hinausführend

|  |                             |   |  |                               |                               |
|--|-----------------------------|---|--|-------------------------------|-------------------------------|
| $cmm \rightarrow (a/2 - b/2, a/2 + b/2)$<br>( $cmm$ ) <sup>v</sup> | $oC$<br>$2(a)mm$<br>$P$     | $o0_1^1C$<br>$2(b)mm$<br>$\frac{1}{2}P$ | $o\frac{1}{2}P_{ab}$<br>$4(c)2$<br>$\frac{1}{2}0C$ | $oC2x$<br>$4(d).m$<br>$P2xx$  | $oC2y$<br>$4(e)m.$<br>$P2xy$  |
|  | $oP$<br>$1(a)mm$            | $o\frac{1}{2}P$<br>$1(d)mm$             | $o0_1^1P$<br>$1(b)mm$                              | $oP2x$<br>$2(e).m$            | $oP2y$<br>$2(g)m.$            |
| $pmm$  | $o\frac{1}{2}P$<br>$1(d)mm$ | $o\frac{1}{2}P$<br>$1(b)mm$             | $o\frac{1}{2}0P$<br>$1(c)mm$                       | $o\frac{1}{2}P2x$<br>$2(f).m$ | $o\frac{1}{2}P2y$<br>$2(h)m.$ |
| $pgg$  | $oC$<br>$2(a)2$             | $o\frac{1}{2}0C$<br>$2(b)2$             |  |                               |                               |
| $p2$   | $mP$<br>$1(a)2$             | $m\frac{1}{2}P$<br>$1(d)2$              | $m\frac{1}{2}0P$<br>$1(c)2$                        | $mP2xy$<br>$2(e)1$            | $m\frac{1}{2}P2xy$<br>$2(e)1$ |

(2)

|       |                             |                             |
|-------|-----------------------------|-----------------------------|
| $pmg$ | $oP_a$<br>$2(a)2$           | $o0_1^1gPa_1y$<br>$2(c)m.$  |
| $p2$  | $mP$<br>$1(a)2$             | $m\frac{1}{2}0P$<br>$1(b)2$ |
|       | $m\frac{1}{2}0P$<br>$1(c)2$ | $mP2xy$<br>$2(e)1$          |

Dieser Untergruppenverband wird nun aus Gründen der Übersicht für die Tabellen 3–5 in mehrere Teile aufgelöst. Dabei sind die Beziehungen zu den Gitterkomplexen der ‘hemimorphen’ Ebenengruppen ( $p1$ ,  $pm$ ,  $pg$ ,  $cm$ ) nicht tabelliert. In jeder Teiltabelle werden die Punktlagen einer Ebenengruppe in Gitterkomplexschreibweise in einer Doppelzeile aufgeführt. Dabei enthält die erste Zeile das nullpunktsbezogene Gitterkomplexsymbol der Punktlage, die zweite Zeile Zähligkeit, Wyckoff-Buchstaben und orientierte Punktsymmetrie. Ist der Abbau zu einer Untergruppe mit einer Zelltransformation verknüpft, so wird diese an der Obergruppe ausgeführt und die Symbolisierung der Ebenengruppe und ihrer Punktlagen nach Transformation in einer dritten Zeile angegeben. Dabei werden sowohl für die Gitterkomplexe als auch für die Ebenengruppen die Transformationsindizes nach Hermann (1960) benutzt.\* Zur Verdeutlichung der Transformation werden in der zweiten Zeile der ersten Spalte in diesen Fällen die neuen Achsenvektoren, ausgedrückt durch die vorherigen Vektoren  $a$  und  $b$ , verzeichnet. Jede Einzeltabelle enthält nun jeweils eine oder mehrere Ebenengruppen mit einigen ihrer (gemeinsamen) Untergruppen. Die einzelnen Niveaus des Abbaus (charakterisiert durch den gleichen Untergruppenindex) sind durch Doppelstriche getrennt. Während in den Obergruppen alle speziellen Punktlagen genau einmal in der Reihenfolge ihrer Wyckoff-Buchstaben gegeben werden, tritt in den Untergruppen eine Punktlage unter Umständen mehrfach auf. Das Anordnungsprinzip dieser Tabellen besteht nämlich darin, unter eine Punktlage der Obergruppe stets diejenige Punktlage oder diejenigen Punktlagen der Untergruppe zu setzen, welche beim Symmetrieabbau aus der Punktlage der Obergruppe hervorgehen. Auf diese Weise wird der Symmetriezusammenhang zwischen Punktlagen bzw. Gitterkomplexen deutlich. Es sind dabei folgende Fälle möglich:

(a) Die Punktsymmetrie bleibt erhalten; dann spaltet der Gitterkomplex auf in zwei Teilkomplexe. Beispiel:  $oC$  beim Abbau von  $cmm$  nach  $pmm$  in  $oP$  und  $o\frac{1}{2}P$ .

(b) Die Punktsymmetrie wird vermindert, ohne dass sich dabei die Zahl der Freiheitsgrade des Komplexes und das Kristallsystem ändern; dann gehören beide Punktlagen zum gleichen Gitterkomplex. Beispiel:  $hP$  in allen hexagonalen Ebenengruppen.

(c) Die Punktsymmetrie wird herabgesetzt und dabei entweder die Zahl der Freiheitsgrade vergrößert oder das System verlassen oder beides gleichzeitig; dann geht der Komplex in einen anderen Gitterkomplex gleicher Zähligkeit über. Der ursprüngliche Komplex ist Grenzform des neuen. Beispiel:  $hP6x$  (aus  $p6m$ ) ist Grenzform von  $hP6xy$  (aus  $p6$ ).

(d) Der Komplex kann in Teilkomplexe unterschiedlicher Punktsymmetrie aufspalten; dann kann es vor-

\* Im Fall der  $c$ -Aufstellung von  $p6m$  fehlt ein entsprechendes Symbol. Hier werden zwei Teile des Komplexes orthogonal beschrieben und durch geschweifte Klammern zusammengefasst.

kommen, dass einer dieser Teilkomplexe die Punktsymmetrie des ursprünglichen Komplexes behält, während der andere Teilkomplex eine niedrigere Punktsymmetrie aufweist. Beispiel:  $hN$  mit Punktsymmetrie  $mm$  zerfällt beim Abbau von  $p6m$  nach  $cm$  in  $o\frac{1}{2}C$  und  $o\frac{1}{4}P_{ab}$  mit den Punktsymmetrien  $mm$  bzw. 2.

In den Untergruppen wird beim Zerfallen eines Komplexes nach Möglichkeit durch Verwendung entsprechender Verschiebungsvektoren oder im Fall enantiomorpher Teilkomplexe durch Voranstellen von + und - angezeigt, auf welche Weise die Aufspaltung erfolgt.

Eine Anwendung dieser Verwandtschaftsrelationen ergibt sich z.B. beim Aufsuchen von ebenen Kreispackungen (Fischer, 1968). Ausserdem ist ihre Kenntnis unerlässlich, wenn Gitterkomplexe zur Beschreibung von Kristallstrukturtypen verwendet werden sollen, wie es mit Hilfe von Netzkomplexen für Schichtstrukturen versucht worden ist (Hellner, 1966).

Seine besondere Bedeutung erhält der Gitterkomplexbegriff immer dann, wenn in irgendeiner Form Eigenschaften derjenigen Punktanordnungen untersucht werden sollen, die sich innerhalb einer Punktlage verwirklichen lassen. Wegen der wechselseitigen Transformierbarkeit zweier Punktlagen, welche zum gleichen Gitterkomplex gehören, genügt es in all diesen Fällen den Gitterkomplex anstelle der zugehörigen Punktlagen zu betrachten. So enthalten z.B. die Kreis-

packungsbedingungen der ebenen Gitterkomplexe bereits alle Aussagen über das Auftreten homogener Kreispackungen in der zweifach periodischen Ebene (Fischer, 1968). Ein anderes Beispiel wäre das Aufsuchen aller Ebenenteilungen in Wirkungsbereiche und die Abgrenzung der einzelnen Teilungstypen in Abhängigkeit von Koordinaten und metrischen Parametern. Schliesslich sei noch darauf hingewiesen, dass Punktlagen, die zum gleichen Gitterkomplex gehören, auch den gleichen Pattersonraum erzeugen. Bei all diesen Problemen bedeutet die Einführung des Gitterkomplexbegriffs eine erhebliche Reduzierung der zu analysierenden Fälle. Der Vorteil dieser Konzeption wird noch deutlicher, wenn man die analogen Probleme im dreidimensionalen Raum behandeln will, denn in diesem Falle stehen den 1731 Punktlagen nur 402 Gitterkomplexe gegenüber.

#### Literatur

- DONNAY, J. D. H., HELLNER, E. & NIGGLI, A. (1966). *Z. Kristallogr.* **123**, 255.  
 FISCHER, W. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 000  
 HELLNER, E. (1966). *Acta Cryst.* **21**, A252.  
 HERMANN, C. (1960). *Z. Kristallogr.* **113**, 142.  
*Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* (1935). 1. Auflage, Band 1. Berlin: Gebr. Bornträger.  
*International Tables for X-Ray Crystallography* (1952). Vol. I. Birmingham: Kynoch Press.

*Acta Cryst.* (1968). **A24**, 67

## Kreispackungsbedingungen in der Ebene

VON WERNER FISCHER

*Mineralogisches Institut der Universität Marburg, 355 Marburg, Deutschhausstr. 10, Deutschland*

(Eingegangen an 13. Juni 1967)

The conditions for packing crystallographically equivalent spheres in three-dimensional space have not yet been evaluated systematically because of the great number of calculations involved. For the case of circles packed in the plane, this effort can be reduced by using the concept of lattice complexes (the metrical behaviour of 72 different sets of equivalent points is represented by 30 lattice complexes) and by taking into account the fact that - owing to symmetry relations - the 13 lattice complexes with 2 degrees of freedom contain all the others as special configurations. The results of these investigations are tabulated for all lattice complexes in two dimensions.

### Problemstellung

Das Problem des Aufsuchens aller homogenen, d.h. aus der einfachen Besetzung einer Punktlage erzeugbaren Kugel- bzw. Kreispackungen wurde bisher am ausführlichsten von U. Sinogowitz im Rahmen von zwei grösseren Arbeiten behandelt. Dabei enthält die erste dieser Arbeiten (Sinogowitz, 1939) die Herleitung aller Kreislagen und speziell aller nicht zerfallenden Kreispackungen der Ebene (unter Voraussetzung der Homogenität), in der zweiten (Sinogowitz, 1943) wird

ein Verfahren angegeben, bei dem es durch Zerfällen in ebene Schnitte möglich ist, alle nichtkubischen dreidimensionalen, homogenen Kugelpackungstypen im Wesentlichen ohne Rechnung aufzufinden. Der Nachteil dieses eleganten Verfahrens liegt darin, dass es nur schlecht auf Elektronenrechner übertragbar ist und damit eine wirksame und bei der Fülle des Materials unbedingt erforderliche Kontrollmöglichkeit entfällt (Sinogowitz räumt 1943 ausdrücklich ein, dass die von ihm ermittelten Anzahlen von triklinen bis orthorhombischen Kugelpackungen wahrscheinlich nicht exakt