

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 Punktage verwirklichen lassen. Wegen der wechselseitigen Transformierbarkeit zweier Punktage, welche zum gleichen Gitterkomplex gehören, genügt es in all diesen Fällen den Gitterkomplex anstelle der zugehörigen Punktage 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 Wirkungsbereichen und die Abgrenzung der einzelnen Teilungstypen in Abhängigkeit von Koordinaten und metrischen Parametern. Schliesslich sei noch darauf hingewiesen, dass Punktage, 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 Punktage 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 Punktage 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

richtig sind). Ausserdem ist es bei dieser Art der Ableitung schwierig, die Ergebnisse kristallchemisch nutzbar zu machen, da keine Beziehungen zu den Koordinaten der Kugelmittelpunkte und zur Metrik der Zelle hergestellt werden und damit die Bezugsmöglichkeiten auf reale Kristallstrukturen fehlen.

Denkt man also z.B. daran, eine Klassifizierung der anorganischen Strukturen mit Hilfe von Kugelpackungen zu versuchen, so muss man wohl oder übel, einen Schritt zurückgehend, entsprechend der Anregung von Niggli (1927, 1928) als notwendige Bedingungen für das mögliche Auftreten von Kugelpackungen Grenzen von Symmetriebereichen\* berechnen und ihre Abhängigkeit von Achsenverhältnissen und -winkeln untersuchen. Der damit verbundene beträchtliche Rechenaufwand braucht heute nicht mehr abzuschrecken, da weite Teile der Rechnungen ohne weiteres programmierbar sind. Es soll in dieser Arbeit am Beispiel des zweidimensionalen Modells der homogenen Kreispackungen erläutert werden, wie vor allem durch Einführung des Gitterkomplexbegriffs der Umfang der Rechenarbeit erheblich reduziert werden kann.

### Die Reduktion der zu untersuchenden Fälle mit Hilfe des Gitterkomplexbegriffs

Der Begriff des Gitterkomplexes ist von C. Hermann in der ersten Auflage der *Internationalen Tabellen* (1935) in dem Sinne eingeführt worden, dass zwei verschiedene Punktlagen dem gleichen Gitterkomplex zugerechnet werden, wenn sie voll ineinander transformierbar sind. D.h. zu jeder Punktanordnung, die durch eine bestimmte Wahl der freien Parameter der einen Punktlage erhalten werden kann, existiert bei geeigneter Parameterwahl der anderen Punktlage eine deckungsgleiche bzw. spiegelbildlich deckungsgleiche Punktanordnung dieser zweiten Punktlage, und umgekehrt. Interessiert man sich also für spezielle Punktanordnungen, wie sie bei einfacher Besetzung einer Punktlage unter einschränkenden Bedingungen möglich sind, so ist es nicht erforderlich, solche Punktlagen, die zum gleichen Gitterkomplex gehören, jede für sich zu untersuchen; es genügt, eine von ihnen als Vertreter des betreffenden Gitterkomplexes zu betrachten. D.h. mit anderen Worten, man hat das Verhalten der Gitterkomplexe zu analysieren und erhält damit die gewünschten Auskünfte auch für alle Punktlagen.

Genau diese Situation liegt aber vor, wenn alle homogenen Kreispackungen der zweifach periodischen Ebene aufgesucht werden sollen. Gefordert ist zunächst, dass alle diejenigen zweifach periodischen Anordnungen sich berührender Kreise aufgefunden werden sollen, bei denen jeder beliebige Kreis sich in jeden

anderen Kreis der Anordnung überführen lässt durch eine Symmetrietransformation, welche die Anordnung als Ganzes auf sich selbst abbildet. Das bedeutet aber, dass alle Kreise kristallographisch gleichwertig sind und ihre Mittelpunkte eine Punktlage in einer der 17 Ebenengruppen einfach besetzen. Um alle in diesem Sinne 'homogenen' Kreispackungen zu erfassen, müssten demnach die 72 verschiedenen Punktlagen der 17 Ebenengruppen daraufhin überprüft werden, unter welchen Bedingungen für Metrik und Koordinatenwahl die Punkte einer Punktlage Mittelpunkte einer Anordnung sich berührender Kreise sein können.

Gehören nun aber zwei verschiedene Punktlagen zum gleichen Gitterkomplex, so liefern sie wegen der oben erwähnten Transformierungseigenschaft Kreispackungsbedingungen, die sich nur bezüglich Achsen- und Nullpunktswahl voneinander unterscheiden können, also in einfacher Weise ineinander transformierbar sind. Zum Beispiel sind die fünf Punktlagen  $1(a)00$ ,  $1(b)0\frac{1}{2}$ ,  $1(c)\frac{1}{2}0$ ,  $1(d)\frac{1}{2}\frac{1}{2}$  in  $p2$  sowie  $1(a)xy$  in  $p1$  dem gleichen Gitterkomplex  $mP$  (monoklines primitives Gitter) zuzurechnen; dementsprechend ist die Kreispackungsbedingung in allen fünf Fällen die gleiche: eine nichtzerfallende Kreispackung kann nur dann auftreten, wenn die beiden kürzesten Translationen gleich lang sind (bei entsprechender Auswahl ist  $a=b$  und  $60^\circ \leq \gamma \leq 120^\circ$ ). Führt man in dieser Weise alle Punktlagen der Ebenengruppen auf zweidimensionale Gitterkomplexe zurück, so vermindert sich die Anzahl der zu untersuchenden Fälle von 72 auf 30, nämlich auf die Zahl dieser 'Netzkomplexe' (vgl. Burzlaff, Fischer & Hellner, 1968).

### Weitere Reduktion durch Symmetrieabbau

Damit sind jedoch die Reduktionsmöglichkeiten noch nicht erschöpft. Betrachtet man nämlich Netzkomplexe mit weniger als zwei Freiheitsgraden, so sind zwei Fälle möglich: In 'hemimorphen' Ebenengruppen kann die zugeordnete Punktlage die Punktsymmetrie 1 besitzen. Für einen solchen Gitterkomplex existiert dann aber stets auch der andere Fall einer Punktlage höherer Punktsymmetrie. Man kann nun im Zweidimensionalen durch Übergang zu einer Untergruppe die Gesamtsymmetrie so vermindern, dass die Punktsymmetrie auf 1 herabgesetzt wird, gleichzeitig aber die Punktzähligkeit erhalten bleibt, der Gitterkomplex also nicht aufspaltet\*. Diese Reduktion der Symmetrie kann im allgemeinen auf mehrere verschiedene Arten vorgenommen werden, führt aber in jedem Fall auf den Gitterkomplex einer allgemeinen Punktlage, von dem zusätzlich stets verlangt werden kann, dass er ein Gitterkomplex mit zwei Freiheitsgraden sein soll. Ist die Bedingung erfüllt, so werde dieser eine 'Symmetriewurzel' des Gitterkomplexes genannt, von dem beim Symmetrieabbau ausgegangen wurde.

\* Der Begriff des Symmetriebereichs wird von Niggli (1927, S.395) folgendermassen eingeführt: 'Den einzelnen Symmetrieelementen ordnen wir nach folgendem Grundsatz Symmetriebereiche zu: Es sollen innerhalb des Symmetriebereichs die in bezug auf das Symmetrieelement gleichwertigen Punkte voneinander kleinere Abstände haben als von allen übrigen gleichwertigen Punkten'.

\* Im Dreidimensionalen existiert eine Ausnahme hiervon, nämlich die Punktlage  $48(f) x0\frac{1}{2}$  in  $Ia3d$ .

Hierzu einige Beispiele: Die Gitterkomplexe  $tP4x$  und  $tP4xx$  (beide als Punktlagen mit der Punktsymmetrie  $m$  in  $p4m$  auftretend) besitzen die gemeinsame Symmetriewurzel  $tP4xy$  (allgemeine Punktlage in  $p4$ ); ausserdem ist  $oC2x2y$  Symmetriewurzel von  $tP4x$ ,  $oP2x2y$  von  $tP4xx$ . Aus  $oP2x$  kann man die allgemeinen Punktlagen von  $p2$  und  $pm$  erhalten, doch liefert die letztere keine Symmetriewurzel, da sie ebenfalls zum Gitterkomplex  $oP2x$  gehört, also als Gitterkomplex nur einen Freiheitsgrad hat. Allgemein ist es möglich, die Symmetriewurzeln von Gitterkomplexen den von Burzlaff, Fischer & Hellner (1968) gegebenen Tabellen zur Verwandtschaft von Gitterkomplexen zu entnehmen. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass diese Tabellen nur nichttriviale Untergruppenrelationen berücksichtigten, also nicht die Fälle enthalten, dass eine Gruppe Untergruppe von sich selbst ist, was nach Zellvergrößerung immer möglich ist. Dies ist insbesondere wichtig, wenn man eine Symmetriewurzel zu  $mP$  suchen will. In diesem Fall muss nämlich eine der beiden Gitterkonstanten verdoppelt und dementsprechend die Hälfte der zweizähligen Achsen entfernt werden, damit man eine Ebenengruppe, nämlich wieder  $p2$ , erhalten kann, bei der aus  $mP$  ein Gitterkomplex mit zwei Freiheitsgraden ( $mP2xy$ ) entstanden ist. Da man jeden ebenen Gitterkomplex, der ein zweidimensionales Bravaisgitter darstellt, zunächst auf  $mP$  zurückführen kann, ist  $mP2xy$  Symmetriewurzel aller dieser Gitterkomplexe (und darüber hinaus auch von  $oP2x$ ,  $oC2x$ ,  $o.gPa1y$  sowie  $hG$ ).

Aus der Definition der Symmetriewurzel eines Gitterkomplexes geht nun hervor, dass jede mögliche Punktanordnung eines Gitterkomplexes auch von dessen Symmetriewurzeln erzeugt werden kann, jedoch im allgemeinen nicht umgekehrt. Insbesondere bedeutet dies, dass die Kreispackungsbedingungen eines ebenen Gitterkomplexes mit zwei Freiheitsgraden, welcher Symmetriewurzel gewisser anderer Gitterkomplexe ist, die Kreispackungsbedingungen aller dieser Gitterkomplexe mit umfasst. Sie können in expliziter Form aus den allgemeineren Bedingungen abgeleitet werden, indem Metrik und/oder Koordinaten geeignet spezialisiert werden. Es sei dann sowohl bei den Gitterkomplexen als auch bei den Kreispackungen von 'Grenzformen' des allgemeineren Falles die Rede. So ist z.B.  $tP4x$  Grenzform von  $tP4xy$  mit  $y=0$ , sowie von  $oC2x2y$  mit  $a=b$  und  $x=y$ , seine Kreispackungsbedingungen sind bei diesen Symmetriewurzeln zu finden. Allgemein ergibt sich aus diesem Konzept der Symmetriewurzeln eine weitere Reduktion der rechnerisch zu untersuchenden Fälle von 30, als der Anzahl aller zweidimensionalen Gitterkomplexe, auf 13, nämlich der Zahl derjenigen unter ihnen, welche zwei Freiheitsgrade aufweisen.

#### Festlegung des zu untersuchenden Parameterbereichs

Sollen für einen dieser Gitterkomplexe nun die Kreispackungsbedingungen in Form von Beziehungen

(Gleichungen oder Ungleichungen) zwischen seinen Parametern aufgestellt werden, so ist zunächst zu klären, welcher Parameterbereich untersucht werden muss, um bereits alle Informationen zu erhalten. Als Parameter können dabei auftreten die Koordinaten  $x, y$ , das Achsenverhältnis  $B=b/a$  im orthogonalen bzw. monoklinen System sowie der Achsenwinkel  $\gamma$  bzw.  $C=\cos \gamma$  im monoklinen System. Im allgemeinen ist es nun aber nicht erforderlich, für jeden Parameter alle Werte zuzulassen, zumindest kann ja der Wertevorrat der Koordinaten auf die asymmetrische Einheit beschränkt werden. Will man jedoch den kleinsten zulässigen Parameterbereich ermitteln, so sind darüber hinaus zwei Überlegungen von Bedeutung.

Der Bereich der metrischen Parameter kann nämlich durch Verwendung von Standardaufstellungen verkleinert werden, etwa indem man bei  $oP2x2y$  in  $pmm$  verlangt, dass die  $a$ -Translation nicht länger als die  $b$ -Translation sein darf (d.h.  $B \geq 1$ ). Dies ist genau dann möglich, wenn die beiden Achsenrichtungen sich nicht hinsichtlich ihrer Symmetrie unterscheiden, also in  $p2$ ,  $pmm$ ,  $pgg$  und  $cm$ , aber nicht in  $pmg$ .

Zum anderen lässt sich die asymmetrische Einheit in einigen Ebenengruppen weiter reduzieren. So hat z.B. Laves (1931a) am Beispiel der Berechnung von Wirkungsbereichen in  $pgg$  gezeigt, dass man alle metrischen Eigenschaften der allgemeinen Punktlage dieser Ebenengruppe bereits erfasst, wenn man nur ein Sechzehntel der Elementarzelle ( $0 \leq x, y \leq \frac{1}{4}$ ) betrachtet. Das liegt daran, dass die ungleichwertigen, aber gleichartigen zweizähligen Achsen in  $00$ ,  $\frac{1}{2}0$ ,  $0\frac{1}{2}$  und  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}$  jeweils die gleichen, lediglich translatorisch verschobenen Punktanordnungen erzeugen können. Ausserdem gibt eine Koordinatenwahl  $x_0, y_0$  Anlass zu einer Punktanordnung, die deckungsgleich der von  $-x_0, -y_0$  und spiegelbildlich deckungsgleich der von  $-x_0, y_0$ , bzw.  $x_0, -y_0$  aus aufgebauten Punktanordnung ist. Damit reduziert sich die asymmetrische Einheit von  $pgg$  für die Untersuchung von Punktanordnungen und daher auch für das Berechnen von Kreispackungsbedingungen genau auf den oben genannten Bereich.

Ähnliche Überlegungen lassen sich für die meisten der 17 Ebenengruppen anstellen; das Prinzip ist dabei immer das gleiche: es werden ungleichwertige Symmetrieelemente, die deckungsgleiche bzw. spiegelbildlich deckungsgleiche Punktanordnungen erzeugen, als gleich behandelt. Das kann dadurch geschehen, dass zusätzliche Symmetrieelemente hinzugenommen werden, welche solche Symmetrieelemente ineinander überführen.

In der gruppentheoretischen Terminologie sind dies nun aber stets äussere Automorphismen der Gruppe; sie bilden zusammen mit den Gruppenelementen der betrachteten Gruppe wiederum eine Gruppe, die sogenannte Automorphismengruppe. Der zu untersuchende Parameterbereich lässt sich dann folgendermassen charakterisieren: Sollen mögliche Punktanordnungen der allgemeinen Punktlage einer Ebenengruppe (eines ebenen Gitterkomplexes mit zwei Frei-

heitsgraden) untersucht werden, so besteht der zu berücksichtigende Koordinatenbereich genau aus einer asymmetrischen Einheit der zugehörigen Automorphismengruppe. Anschaulich lässt sich die Automorphismengruppe  $A$  einer (Symmetrie-) Gruppe  $G$  übrigens folgendermassen deuten: Man stelle sich die Symmetrieelemente von  $G$  zweifach periodisch gezeichnet vor, etwa so wie für eine Elementarzelle in den Internationalen Tabellen dargestellt. Diese Zeichnung hat als Symmetrie einerseits die Elemente von  $G$ , kann aber darüber hinaus noch weitere Symmetrien aufweisen. Diese zusätzlichen Symmetrien sind stets äussere Automorphismen von  $G$ , die Gesamtsymmetrie der Zeichnung entspricht der Automorphismengruppe  $A$ , die stets wieder eine der 17 Ebenengruppen sein muss,

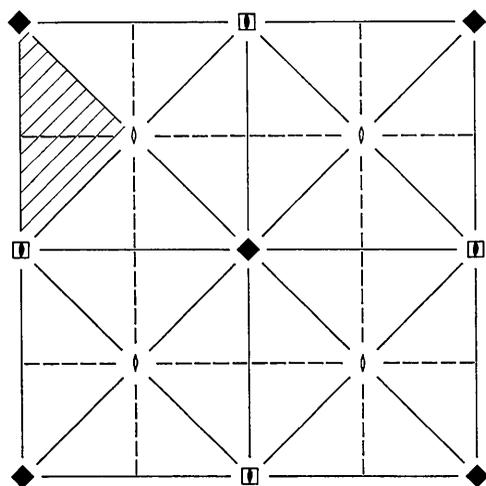


Fig. 1. Symmetrieelemente von  $p4$  (Achsen  $\blacklozenge$   $\blacklozenge$ ) und der zugehörigen Automorphismengruppe  $(p4m)_v = c4mm$  (Achsen  $\square$  und  $\circ$ ) sowie die Spiegel- und Gleitspiegelgeraden). Die asymmetrische Einheit der Automorphismengruppe ist schraffiert.

allerdings u.U. in anderer Aufstellung und mit kürzeren Translationen als  $A$ . Ein Beispiel hierzu gibt Fig. 1, in der die Symmetrieachsen von  $p4$  durch ausgefüllte Symbole angedeutet worden sind. Die zugehörige Automorphismengruppe enthält dann als Elemente ausserdem noch die eingezeichneten Spiegel- und Gleitspiegelgeraden, sowie weitere Drehachsen, die durch unausgefüllte Symbole dargestellt sind (das Symbol der vierzähligen Achse der Automorphismengruppe, die mit einer zweizähligen Achse von  $p4$  zusammenfällt, ist in anderer Orientierung gezeichnet als üblich, um eine sonst mögliche Verwechslung mit dem Symbol einer  $\bar{4}$ -Achse zu vermeiden). Natürlich ist die Automorphismengruppe wieder eine der 17 Ebenengruppen, hier  $p4m$ , jedoch bei gleicher Orientierung wie die Ausgangsgruppe  $p4$  in  $c$ -Aufstellung. Soll dieser Zusammenhang deutlich gemacht werden, so ist also die Automorphismengruppe von  $p4$  entweder zu schreiben als  $c4mm$  oder – unter Übertragung der von Hermann (1960) für Gitterkomplexe vorgeschlagenen Transformationsindizes auf Symbole von Ebenengruppen – als  $(p4m)_v$ .

Auf diese Weise sind im übrigen in Tabelle 1 die Automorphismengruppen bezeichnet. Diese Tabelle gibt ausserdem für die 13 Ebenengruppen, deren allgemeine Punktlagen Gitterkomplexe mit zwei Freiheitsgraden sind, die reduzierten Parameterbereiche sowohl hinsichtlich der Metrik als auch für die Koordinaten.

#### Aufstellung von Kreispackungsbedingungen

Nachdem auf diese Weise der Umfang der Untersuchung so weit als allgemein möglich reduziert worden ist, kann nunmehr die Aufstellung von Kreispackungsbedingungen behandelt werden. Es soll dabei noch eine Einschränkung getroffen werden, und zwar sollen nur solche Kreispackungen betrachtet werden, die dem Zerfallsverbot (Heesch & Laves, 1933) genü-

Tabelle 1. Aufstellungsbedingungen und Reduktion der asymmetrischen Einheit mit Hilfe der Automorphismengruppe

Ebenengruppe	Aufstellungsbedingungen	Automorphismengruppe	Reduzierte asymmetrische Einheit
$p2$	$b \geq a$ ( $B \geq 1$ ) $120^\circ \geq \gamma \geq 90^\circ$ ( $-\frac{1}{2} \leq C \leq 0$ )	$(p2)_{ab}$	$0 \leq x \leq \frac{1}{2}$ $0 \leq y \leq x$
$pmm, pgg$	$b \geq a$ ( $B \geq 1$ )	$(pmm)_{ab}$	$0 \leq x \leq \frac{1}{2}$ $0 \leq y \leq \frac{1}{4}$
$pmg$		$(pmm)_{ab}$	$0 \leq x \leq \frac{1}{4}$ $0 \leq y \leq \frac{1}{4}$
$cmm$	$b \geq a$ ( $B \geq 1$ )	$(cmm)_{ab}$	$0 \leq x \leq \frac{1}{4}$ $0 \leq y \leq x$
$p4, p4m, p4g$		$(p4m)_v$ $= c4mm$	$0 \leq x \leq \frac{1}{2}$ $0 \leq y \leq \text{Min}(x, \frac{1}{2} - x)$
$p3, p3m1$		$(p6m)_v = h6m$	$0 \leq x \leq \frac{1}{3}$ $0 \leq y \leq x/2$
$p31m, p6, p6m$		$p6m$	$0 \leq x \leq \frac{2}{3}$ $\text{Max}(0, 2x - 1) \leq y \leq x/2$

gen. D.h. mit anderen Worten dass jeder Kreis mit jedem beliebigen anderen Kreis der Packung durch eine Kette sich berührender Kreise verknüpft sein soll. Der Begriff 'Kreispackung' wird damit im folgenden so verwendet, wie ihn Sinogowitz (1939) einführt als Spezialisierung des Begriffs 'Kreislage'.

Wie bereits erwähnt, ist nach Niggli (1927, 1928) notwendige Bedingung dafür, dass ein Punkt Kreispackungspunkt sein kann (d.h. Mittelpunkt eines Kreises in einer Kreispackung), seine Lage auf einer Symmetriebereichsgrenze. Eine nicht zerfallende Kreispackung kann nämlich nur dann entstehen, wenn mindestens die drei kürzesten Abstände eines Punktes zu seinen symmetrisch gleichwertigen gleich lang sind. Zur Erzeugung dieser drei Nachbarpunkte sind aber mindestens zwei Symmetrieelemente erforderlich (eine Translation und ihre Gegentranslation sind dabei ebenfalls als 'Symmetrieelement' aufzufassen), und der betrachtete Punkt liegt dann auf der Grenze der Symmetriebereiche dieser beiden Symmetrieelemente. Diese Bedingung reicht jedoch nicht aus, um zu erzwingen, dass die erzeugte Kreispackung nicht zerfällt. Wie Nowacki (1935) gezeigt hat, ist es dazu ausserdem notwendig, dass die betreffenden Symmetrieelemente ein Erzeugendensystem der Gruppe bilden. Übrigens gilt diese einfache Formulierung nur dann, wenn wie hier nur allgemeine Punktlagen betrachtet werden. Zu beachten ist ausserdem, dass die Symmetriebereichsgrenzen im allgemeinen abhängen von den metrischen Parametern  $B$  und  $C$ . Die Berechnung von Symmetriebereichsgrenzen führt ganz allgemein auf Gleichungen zweiten Grades, so dass in der Ebene die geometrischen Orte der Kreispackungspunkte Teile von Kegelschnitten und deren Schnittpunkte sein müssen. Zur Vereinfachung der Ausdrucksweise sei an dieser Stelle ein neuer Begriff eingeführt, und zwar sollen diejenigen Teile der Symmetriebereichsgrenzen, die Anlass zu nicht zerfallenden Kreispackungen geben können, 'Kreispackungsskelett' genannt werden. Des weiteren seien diejenigen Symmetrieelemente, die einen Kreis in einen ihn berührenden Kreis überführen, als 'kontakterzeugende Symmetrieelemente' bezeichnet.

Formal geht die Aufstellung der Gleichungen bzw. Ungleichungen, welche das Kreispackungsskelett mathematisch beschreiben, folgendermassen vor sich. Es werden zunächst diejenigen Symmetrieelemente ausgewählt, welche für Punkte der verwendeten asymmetrischen Einheit der Automorphismengruppe kürzeste Abstände zu gleichwertigen Punkten erzeugen können. Die Formeln für die Quadrate solcher Abstände werden bereitgestellt. Dann werden aus diesen Symmetrieelementen alle diejenigen Kombinationen gebildet, die Erzeugendensysteme der Ebenengruppe sind. Die Gleichung des einem solchen Satz von Symmetrieelementen zugeordneten Teiles des Kreispackungsskelettes erhält man dann durch Gleichsetzen der entsprechenden Abstandsquadrate. Zuletzt wird der Gültigkeitsbereich einer solchen Gleichung durch Ungleichungen festgelegt, die sich aus der Bedingung ab-

leiten, dass kein anderer Abstand kürzer werden darf als die gleichgesetzten Abstände.

Dieses Verfahren sei am Beispiel von  $tP4xy$ , der allgemeinen Punktlage in  $p4$ , ausführlich erläutert. Für die asymmetrische Einheit der zugehörigen Automorphismengruppe (vgl. Fig.1) können drei Symmetrieelemente kontakterzeugend wirken, nämlich die vierzählige Achsen in  $00$  und in  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}$  sowie die zweizählige Achse in  $\frac{1}{2}0$ , bezeichnet mit  $4(00)$ ,  $4(\frac{1}{2}\frac{1}{2})$  bzw.  $2(\frac{1}{2}0)$ . Ein Punkt  $x, y$  wird durch  $4(00)$  überführt in  $y, x$ , durch  $4(\frac{1}{2}\frac{1}{2})$  in  $y, 1-x$  und durch  $2(\frac{1}{2}0)$  in  $1-x, y$ . Für diese drei Punkte lauten die Gleichungen für das Quadrat ihres Abstandes vom Punkt  $x, y$

$$d^2(00) = (x-y)^2 + (x+y)^2 = 2(x^2 + y^2),$$

$$d^2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) = (x-y)^2 + (x+y-1)^2 = 2(x^2 + y^2) - 2(x+y) + 1$$

bzw.

$$d^2(\frac{1}{2}0) = (2x-1)^2 + 4y^2.$$

Es sind drei Kombinationen dieser Gleichungen möglich, die Kreispackungen liefern, da die entsprechenden Kombinationen der Symmetrieelemente jeweils ein Erzeugendensystem von  $p4$  bilden. Es sind dies im einzelnen folgende Möglichkeiten:

$$\text{Fall 1: } 4(00) + 4(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) + 2(\frac{1}{2}0) \rightarrow d^2(00) = d^2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) = d^2(\frac{1}{2}0)$$

$$\text{Fall 2: } 4(00) + 4(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) \rightarrow d^2(00) = d^2(\frac{1}{2}\frac{1}{2})$$

$$\text{Fall 3: } 4(00) + 2(\frac{1}{2}0) \rightarrow d^2(00) = d^2(\frac{1}{2}0)$$

$$d^2(00) = d^2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) \text{ ergibt die lineare Gleichung } x+y = \frac{1}{2} \text{ (Gerade durch } \frac{1}{2}0 \text{ und } 0\frac{1}{2} \text{),}$$

$$d^2(00) = d^2(\frac{1}{2}0) \text{ dagegen die quadratische Gleichung } (x-1)^2 + y^2 = \frac{1}{2} \text{ (Kreis um } 1,0 \text{ mit } r = \frac{1}{2}\sqrt{2} \text{).}$$

$d^2(00) = d^2(\frac{1}{2}\frac{1}{2}) = d^2(\frac{1}{2}0)$  liefert dementsprechend diejenigen der beiden Schnittpunkte von Kreis und Gerade, welcher im Untersuchungsbereich liegt, nämlich den Punkt mit den Koordinaten  $x = \frac{1}{4}(3 - \sqrt{3})$ ,  $y = \frac{1}{4}(\sqrt{3} - 1)$ .

Begrenzt wird Fall 2 einerseits durch Fall 1, andererseits durch die Grenzform, welche an der Grenze des asymmetrischen Bereichs ( $y=x$ ) entsteht:

$$\frac{1}{4}(\sqrt{3} - 1) < y \leq \frac{1}{4}.$$

Fall 3 erhält seine Begrenzung ebenfalls durch Fall 1 sowie durch die Bereichsgrenze  $y=0$ :

$$0 \leq y < \frac{1}{4}(\sqrt{3} - 1).$$

Die Packungsbedingungen dieser drei Fälle sind in Fig.2 zeichnerisch dargestellt.

### Diskussion der Ergebnisse

Die Resultate dieses Verfahrens sind in Tabellenform zusammengestellt, und zwar enthalten die Tabellen 2(a) und (b) die Kreispackungsbedingungen für die 13 Gitterkomplexe mit zwei Freiheitsgraden, die Tabellen 3(a) und (b) die daraus durch Spezialisierung der Parameter

Tabelle 2. Kreispackungsbedingungen für zweidimensionale Gitterkomplexe mit zwei Freiheitsgraden

(a) Monoklin und orthogonal							
Gitterkomplex	Ebenen- gruppe	Fall Nr.	Kontakterzeugende Symmetrieeoperationen	Metrische Bedingungen	Koordinatenbedingungen	Topolog. Symbol	Kreislage bei Sinogowitz
$mP2xy$	$p2$	1	$2(00, \frac{1}{2}0, 0\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}), t(a)$	$C=0, B=\sqrt{3}$	$x=y=\frac{1}{2}$	$3^6$	$108-6N_1$
		2	$2(00, \frac{1}{2}0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}), t(a)$	$C=-\frac{1}{2}, B=2$	$x=\frac{1}{2}, y=\frac{1}{2}$	$3^6$	$108-6N_1$
		3	$2(00, \frac{1}{2}0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}), t(a)$	$-\frac{1}{2} < C < 0$	$x=\frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\sqrt{3} \cdot C}{\sqrt{1-C^2}} \right]$	$3^3 4^2$	$11-5N_1$ $(55-5N_2)$
		4	$2(00, \frac{1}{2}0, 0\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$B=-C+\sqrt{3}(1-C^2)$	$y=\frac{\sqrt{3}}{4} [ \sqrt{3(1-C^2)} - C\sqrt{1-C^2} ]^{-1}$	$4^4$	$47-4N_3$ $(67-4N_6)$
		5	$2(\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}), t(a)$	$C=0$ $1 \leq B < \sqrt{3}$ $-\frac{1}{2} < C \leq 0$	$x=y=\frac{1}{2}$ $x=\frac{1}{2} \left[ 1 - (B+C) \sqrt{\frac{-B^2-2BC+3}{(1-C^2)(B^2+2BC+1)}} \right]$	$4^4$	$10-4N_1$ $(36-4N_2, 47-4N_3,$ $67-4N_6)$
		6	$2(00, \frac{1}{2}\frac{1}{2}), t(a)$	$-C+\sqrt{3}(1-C^2) < B \leq 2$ $-\frac{1}{2} \leq C < 0$ $-C+\sqrt{3}(1-C^2) < B$ $B \leq -C+\sqrt{3}+C^2$	$y=\frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{1+BC}{B} \sqrt{\frac{-B^2-2BC+3}{(1-C^2)(B^2+2BC+1)}} \right]$ $x=\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4-B^2}{1-C^2}} \right)$ $y=\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{C}{B} \sqrt{\frac{4-B^2}{1-C^2}} \right)$	$4^4$	$10-4N_1$ $(36-4N_2, 47-4N_3,$ $67-4N_6)$
		7	$2(00, \frac{1}{2}0, \frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$-\frac{1}{2} \leq C < 0$ $1 \leq B < -C+\sqrt{3}(1-C^2)$	$x=\frac{1}{2} \left( 1 - C \frac{B+C}{1-C^2} \right)$ $y=\frac{B+C}{4B(1-C^2)}$	$6^3$	$9-3N_1$ $(54-3N_3,$ $110-3N_{13})$
$oP2 \times 2y$	$pm$	1	$m(x0, x\frac{1}{2}, 0y, \frac{1}{2}y)$	$B=1$	$x=y=\frac{1}{2}$	$4^4$	$67-4N_6$
$om \cdot Pa2xy$	$pmg$	1	$m(\frac{1}{2}y), 2(00, 0\frac{1}{2}), t(b)$	$B=2-\sqrt{3}=0.2679$	$x=\frac{1}{2}(\sqrt{3}-\frac{3}{2})=0.1160, y=\frac{1}{2}$	$3^3 4^2$	$55-5N_2$
		2	$m(\frac{1}{2}y, -\frac{1}{2}y), 2(00, 0\frac{1}{2})$	$B=1$	$x=0, y=\frac{1}{2}$	$4^4$	$67-4N_6$
		3	$m(\frac{1}{2}y), 2(00), t(b)$	$\frac{1}{2} \leq B < 2-\sqrt{3}$	$x=\frac{1}{2} - \frac{B}{2}, y=\frac{1}{2B} \sqrt{B-4}$	$4^4$	$44-4N_4$ $(67-4N_6)$
		4	$m(\frac{1}{2}y), 2(00, 0\frac{1}{2})$	$2-\sqrt{3} < B < 1$	$x=\frac{1}{2}(1-B^2), y=\frac{1}{2}$	$6^3$	$54-3N_3$ $(110-3N_{13})$

Tabelle 2 (Fortsetzung)

Gitterkomplex	Ebenen- gruppe	Fall Nr.	Kontakterzeugende Symmetrieeoperationen	Metrische Bedingungen	Koordinatenbedingungen	Topolog. Symbol	Kreislage bei Sinogowitz	
<i>og</i> · <i>C</i> 2 <i>xy</i>	<i>pgg</i>	1	$g(x\frac{1}{2}, \frac{1}{2}y), 2(00, \frac{1}{2}0)$	$B = \frac{2}{3}\sqrt{3} = 1 \cdot 1547$	$x = \frac{1}{2}, y = \frac{1}{2}$	3 <sup>6</sup>	108-6 <i>N</i> <sub>1</sub>	
		2	$g(x\frac{1}{2}), 2(00, \frac{1}{2}0), t(a)$	$B = 2\sqrt{3} = 3 \cdot 4641$	$x = \frac{1}{2}, y = \frac{1}{2}$	3 <sup>6</sup>	108-6 <i>N</i> <sub>1</sub>	
		3	$g(x\frac{1}{2}), 2(00, 0\frac{1}{2})$	$B = 1$	$x = 0, y = \frac{1}{2}$	4 <sup>4</sup>	67-4 <i>N</i> <sub>6</sub>	
		4	$g(\frac{1}{2}y), 2(00, \frac{1}{2}0)$	$1 \leq B < \frac{2}{3}\sqrt{3}$	$x = \frac{1}{2}, y = \frac{1}{4B} \sqrt{B^2 - 1}$	4 <sup>4</sup>	36-4 <i>N</i> <sub>2</sub> (67-4 <i>N</i> <sub>6</sub> )	
		5	$g(x\frac{1}{2}, \frac{1}{2}y), 2(00)$	$1 \leq B < \frac{2}{3}\sqrt{3}$	$x = x_5, \frac{1}{4}(\sqrt{3}-1) \leq x_5 < \frac{1}{2}$ $256x_5^2 - 32(1+B^2)x_5^2 + 32B^2x_5 + 1 - 2B^2$ $- 3B^4 = 0$ $y = y_5, \frac{1}{4}(\sqrt{3}-1) \geq y_5 > \frac{1}{8}$ $256B^4y_5^2 - 32(1+B^2)B^2y_5^2 + 32B^2y_5 + B^4$ $- 2B^2 - 3 = 0$	3 <sup>2</sup> 4 <sup>3</sup> 4	29-5 <i>N</i> <sub>4</sub> (81-5 <i>N</i> <sub>3</sub> )	
	<i>oC</i> 2 <i>x</i> 2 <i>y</i>	<i>mmm</i>	6	$g(x\frac{1}{2}), 2(00, \frac{1}{2}0)$	$\frac{2}{3}\sqrt{3} < B < 2\sqrt{3}$	$x = \frac{1}{2}, y = \frac{1}{8}$	4 <sup>4</sup>	47-4 <i>N</i> <sub>3</sub> (67-4 <i>N</i> <sub>6</sub> )
			7	$g(x\frac{1}{2}), 2(00), t(a)$	$2\sqrt{3} < B$ $B \leq 2 + \sqrt{3} = 3 \cdot 7321$	$x = \frac{1}{4} \sqrt{1 + 2B\sqrt{3} - B^2} = x_7$ $y = \frac{1}{4} \left( 1 - \frac{\sqrt{3}}{B} \right)$	3 <sup>3</sup> 4 <sup>2</sup>	30-5 <i>N</i> <sub>6</sub> (55-5 <i>N</i> <sub>2</sub> )
			8	$g(x\frac{1}{2}), 2(00)$	$1 \leq B < 2 + \sqrt{3}$	$0 \leq x < \text{Min}(x_5, \frac{1}{2}, x_7)$ $y = -\frac{2}{B^2}x^2 + \frac{1}{8} \left( 1 + \frac{1}{B^2} \right)$	6 <sup>3</sup>	27-3 <i>N</i> <sub>2</sub> (54-3 <i>N</i> <sub>3</sub> , 110-3 <i>N</i> <sub>13</sub> )
			9	$g(\frac{1}{2}y), 2(00)$	$1 \leq B < \frac{2}{3}\sqrt{3}$	$\frac{1}{4B} \sqrt{B^2 - 1} < y < y_5$ $x = -2B^2y^2 + \frac{1}{8}(1 + B^2)$	6 <sup>6</sup>	27-3 <i>N</i> <sub>2</sub> (54-3 <i>N</i> <sub>3</sub> , 110-3 <i>N</i> <sub>13</sub> )
			10	$g(x\frac{1}{2}, \frac{1}{2}y)$	$1 \leq B < \frac{2}{3}\sqrt{3}$	$x_5 < x \leq \frac{1}{2}$ $(2y - \frac{1}{4})^2 B^2 - (2x - \frac{1}{2})^2 = \frac{1}{4}(B^2 - 1)$	4 <sup>4</sup>	28-4 <i>N</i> <sub>11</sub> (36-4 <i>N</i> <sub>2</sub> , 67-4 <i>N</i> <sub>6</sub> , 80-4 <i>N</i> <sub>5</sub> )
<i>oC</i> 2 <i>x</i> 2 <i>y</i>	<i>mmm</i>	1	$m(x \cdot 0, 0y, \frac{1}{2}y), 2(\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$B = 2$	$x = \frac{1}{2}, y = \frac{1}{8}$	4 <sup>4</sup>	67-4 <i>N</i> <sub>6</sub>	
		2	$m(x \cdot 0, 0y), 2(\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$1 \leq B < 2$	$x = \frac{1}{4}(1 + B - \sqrt{2B})$ $y = \frac{1}{4B}(1 + B - \sqrt{2B})$	4 <sup>8</sup> 2	61-3 <i>N</i> <sub>6</sub> (73-3 <i>N</i> <sub>7</sub> )	

Tabelle 2 (Fortsetzung)

(b) Tetragonal und hexagonal									
Gitterkomplex	Ebenen- gruppe	Fall Nr.	Kontakterzeugende Symmetrieeoperationen	Koordinatenbedingungen	Topologisches Symbol	Kreislage bei Sinogowitz			
$tP4xy$	$p4$	1	$4(00, \frac{1}{2}\frac{1}{2}), 2(\frac{1}{2}0)$	$x = \frac{1}{4}(3 -  3 ) = 0.3170$ $y = \frac{1}{4}(3 - 1) = 0.1830$	3·2434	81-5N <sub>3</sub>			
		2	$4(00, \frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$\frac{1}{4}(3 - 1) < y \leq \frac{1}{4}$ $x = \frac{1}{2} - y$	44	80-4N <sub>5</sub> (67-4N <sub>6</sub> )			
		3	$4(00), 2(\frac{1}{2}0)$	$0 \leq y < \frac{1}{4}(3 - 1)$ $(x - 1)^2 + y^2 = \frac{1}{2}$	482	65-3N <sub>4</sub> (73-3N <sub>7</sub> )			
$tP4x2y$	$p4m$	1	$m(x0, \frac{1}{2}y, xx)$	$x = \frac{1}{4}(2 - 0.3535)$ $y = \frac{1}{4}(2 - \sqrt{2}) = 0.1465$	482	73-3N <sub>7</sub>			
<i>t. g. C2xx</i>	$p4g$	1	$m(\frac{1}{2} - xx, \frac{1}{2} + xx), 4(00)$	$x = \frac{1}{4}, y = 0$	44	67-4N <sub>6</sub>			
		2	$m(\frac{1}{2} - xx), 4(00)$	$0 < y \leq \frac{1}{4}(2 - \sqrt{2})$ $x = \frac{1 - 4y}{4(1 - 2y)}$	482	85-3N <sub>5</sub> (73-3N <sub>7</sub> )			
$hP3xy$	$p3$	1	$3(00, \frac{2}{3}\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\frac{2}{3})$	$x = \frac{1}{3}, y = 0$	3 <sup>6</sup>	108-6N <sub>1</sub>			
		2	$3(00, \frac{2}{3}\frac{1}{3})$	$x = \frac{1}{3}, 0 < y \leq \frac{1}{6}$	3636	94-4N <sub>8</sub> (112-4N <sub>7</sub> )			
$hP3x\bar{x}2y$	$p3m1$	1	$m(2xx, x\bar{x}, x2x - 1)$	$x = \frac{1}{3}, y = 0$	63	110-3N <sub>13</sub>			
$hP3x2y\bar{y}$	$p31m$	1	$m(x0, xx), 3(\frac{2}{3}\frac{1}{3})$	$x = 1 - \frac{1}{3}\sqrt{3} = 0.4226$ $y = \frac{1}{3}(1 - \frac{1}{3}\sqrt{3}) = 0.2113$	3464	119-4N <sub>10</sub>			
		2	$m(x0), 3(\frac{2}{3}\frac{1}{3})$	$1 - \frac{1}{3}\sqrt{3} < x \leq \frac{1}{3}\sqrt{3}$ $y = \frac{1}{3x}(3x^2 - 3x + 1)$	3·122	98-3N <sub>9</sub> (123-3N <sub>10</sub> )			
$hP6xy$	$p6$	1	$6(00), 3(\frac{2}{3}\frac{1}{3}), 2(\frac{1}{2}0)$	$x = \frac{2}{3} = 0.4286, y = \frac{1}{3} = 0.1429$	346	106-5N <sub>5</sub>			
		2	$6(00), 3(\frac{2}{3}\frac{1}{3})$	$\frac{1}{3} < y \leq \frac{1}{3}(1 - \frac{1}{3}\sqrt{3})$ $2(x^2 + y^2 - xy) - 3x + 1 = 0$	3464	105-4N <sub>9</sub> (119-4N <sub>10</sub> )			
		3	$6(00), 2(\frac{1}{2}0)$	$0 \leq y < \frac{1}{3}$ $3(x^2 + y^2 - xy) - 4x + 2y + 1 = 0$	63	104-3N <sub>8</sub> (110-3N <sub>13</sub> )			
		4	$3(\frac{2}{3}\frac{1}{3}), 2(\frac{1}{2}0)$	$\frac{1}{3} < y \leq \frac{2}{3}\sqrt{3} - 1 = 0.1547$ $(x^2 + y^2 - xy) - x + 2y = 0$	3·122	103-3N <sub>11</sub> (123-3N <sub>10</sub> )			
$hP6x2y\bar{y}$	$p6m$	1	$m(x0, 2xx, x2x - 1)$	$x = \frac{1}{6}(3 + 1) = 0.4553$ $y = \frac{1}{6}(3 - 1) = 0.1220$	46·12	131-3N <sub>12</sub>			

Tabelle 3. Kreispackungsbedingungen für zweidimensionale Gitterkomplexe mit weniger als zwei Freiheitsgraden

(a) Monoklin und orthogonal						
Gitterkomplex	Symmetriewurzel	Fall Nr.	Metrische Bedingungen	Koordinatenbedingungen	Topologisches Symbol	Kreislage bei Sinogowitz
<i>mP</i>	<i>mP2xy</i>	1	$B=1, C=-\frac{1}{2}$		3 <sup>6</sup>	$108-6N_1$
		2	$B=1$ $-\frac{1}{2} < C \leq 0$		4 <sup>4</sup>	$47-4N_3$ $(67-4N_6)$
<i>oP</i>	<i>oP2x2y</i> <i>mP2xy</i>	1	$B=1$		4 <sup>4</sup>	$67-4N_6$
<i>oC</i>	<i>og . C2xy</i> <i>mP2xy</i>	1	$B=\sqrt{3}$		3 <sup>6</sup>	$108-6N_1$
		2	$1 \leq B < \sqrt{3}$		4 <sup>4</sup>	$47-4N_3$ $(67-4N_6)$
<i>oP2y</i>	<i>oP2x2y</i> <i>mP2xy</i>	1	$B=2$	$y=\frac{1}{4}$	4 <sup>4</sup>	$67-4N_6$
<i>o.gPa1y</i>	<i>og . C2xy</i> <i>mP2xy</i>	1	$B=\frac{1}{3}\sqrt{3}=0.5773$	$y=\frac{1}{4}$	3 <sup>6</sup>	$108-6N_1$
		2	$B=\sqrt{3}$	$y=\frac{1}{4}$		
		3	$\frac{1}{2} \leq B < \frac{1}{3}\sqrt{3}$	$y=(1/4B)/4B^2-1$	4 <sup>4</sup>	$36-4N_2$ $(67-4N_6)$
		4	$\frac{1}{3}\sqrt{3} < B < \sqrt{3}$	$y=\frac{1}{4}$	4 <sup>4</sup>	$47-4N_3$ $(67-4N_6)$
<i>oC2y</i>	<i>og . C2xy</i> <i>mP2xy</i>	1	$B=1$	$y=\frac{1}{4}$	4 <sup>4</sup>	$67-4N_6$
		2	$B=2+\sqrt{3}$	$y=1-\frac{1}{2}\sqrt{3}=0.1340$	3 <sup>342</sup>	$55-5N_2$
		3	$1 < B < 2+\sqrt{3}$	$y=\frac{1}{8}(1+1/B^2)$	6 <sup>3</sup>	$54-3N_3$ $(110-3N_{13})$
(b) Tetragonal und hexagonal						
Gitterkomplex	Symmetriewurzel	Fall Nr.	Koordinatenbedingungen		Topologisches Symbol	Kreislage bei Sinogowitz
<i>tP</i>	<i>tP4xy</i> <i>mP2xy</i>	1			4 <sup>4</sup>	$67-4N_6$
<i>tP4x</i>	<i>tP4xy</i> <i>oC2x2y</i>	1	$x=1-\frac{1}{2}\sqrt{2}=0.2929$		48 <sup>2</sup>	$73-3N_7$
<i>tP4xx</i>	<i>tP4xy</i> <i>oP2x2y</i>	1	$x=\frac{1}{4}$		4 <sup>4</sup>	$67-4N_6$
<i>t.g . C2xx</i>	<i>tP4xy</i> <i>og . C2xy</i>	1	$x=\frac{1}{4}(3-\sqrt{3})=0.3170$		32434	$81-5N_3$
		2	$\frac{1}{4} \leq x < \frac{1}{4}(3-\sqrt{3})$		4 <sup>4</sup>	$80-4N_5$ $(67-4N_6)$
<i>hP</i>	<i>hP3xy</i> <i>mP2xy</i>	1			3 <sup>6</sup>	$108-6N_1$
<i>hG</i>	<i>hP6xy</i> <i>mP2xy</i>	1			6 <sup>3</sup>	$110-3N_{13}$
<i>hN</i>	<i>hP3xy</i>	1			3636	$112-4N_7$
<i>hP3x</i>	<i>hP3xy</i>	1	$x=\frac{1}{3}$		3 <sup>6</sup>	$108-6N_1$
<i>hP3x\bar{x}</i>	<i>hP3xy</i>	1	$x=\frac{1}{3}$		3636	$112-4N_7$
<i>hP6x</i>	<i>hP6xy</i>	1	$x=\frac{1}{3}$		6 <sup>3</sup>	$110-3N_{13}$
<i>hP6x\bar{x}</i>	<i>hP6xy</i>	1	$x=1-\frac{1}{3}\sqrt{3}=0.4226$ $y=\frac{1}{2}(1-\frac{1}{3}\sqrt{3})=0.2113$		3464	$119-4N_{10}$
		2	$x=\frac{1}{3}\sqrt{3}=0.5774$ $y=\frac{2}{3}\sqrt{3}-1=0.1547$		3·12 <sup>2</sup>	$123-3N_{10}$

gewonnenen Bedingungen für die restlichen 17 Gitterkomplexe.\* Die Parameterrelationen sind dabei jeweils aufgeteilt in metrische Bedingungen und Koordinatenbedingungen. In den Tabellen 2(a) und (b) werden darüber hinaus für jede Kreispackung die kontaktierenden Symmetrieeoperationen für einen Punkt im Koordinatenbereich angegeben. Da eine solche Zuordnung bei den Gitterkomplexen mit weniger als zwei Freiheitsgraden nicht eindeutig möglich ist, wurde in den Tabellen 3(a) und (b) auf eine entsprechende Angabe verzichtet. Dafür werden hier im allgemeinen zwei Symmetriewurzeln verzeichnet und zwar nach Möglichkeit eine aus dem gleichen Kristallsystem und eine von niedrigster Symmetrie.

Die beiden letzten Spalten der Tabellen enthalten Beschreibungen der Kreispackungen, nämlich einerseits eine topologische Symbolisierung und andererseits einen Bezug auf die Beschreibung bei Sinogowitz (1939), indem die Nummer der betreffenden Abbildung und die Bezeichnung bei Sinogowitz angeführt werden (Grenzformen erscheinen in Klammern). Die topologische Charakterisierung geht davon aus, dass zwei Kreispackungen dann als topologisch äquivalent angesehen werden, wenn sie durch irgendwelche Bewegungen ihrer Kreise in der Ebene ineinander übergeführt werden können mit der einzigen Bedingung, dass während und nach diesen Bewegungen keine neuen Kontakte zwischen Kreisen entstehen und keine der vorhandenen Kontakte verloren gehen dürfen. Damit wird eine Symbolisierung möglich, die der Laves'schen Symbolik für die Ebenenteilungen (Laves, 1931b) dual entspricht. Der Zusammenhang wird deutlich, wenn man die Kreise der Packung durch ihre Mittelpunkte ersetzt und diese genau dann durch eine 'Kante' verbindet, wenn die betreffenden Kreise sich berühren. Man erhält dadurch Ebenenteilungen, die eckenhomo-

\* Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, dass ein Teil dieser Ergebnisse bereits von Niggli (1928) gefunden wurde.

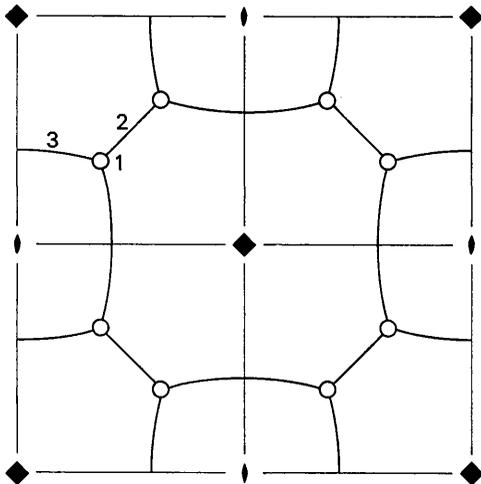


Fig. 2. Kreispackungsskelett von  $p4$ .

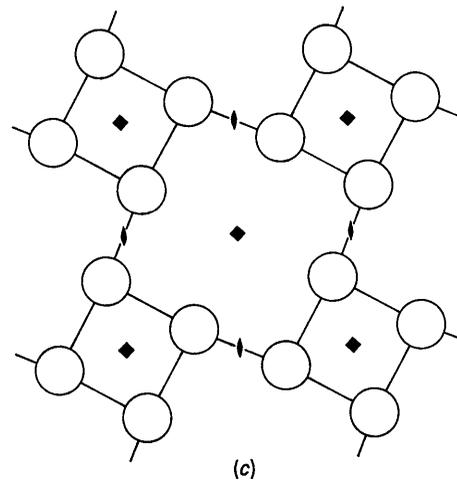
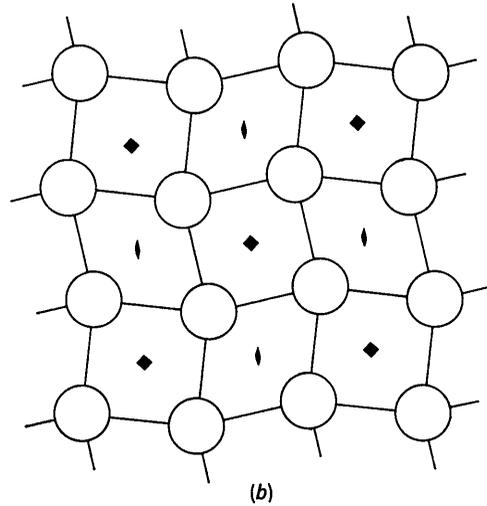
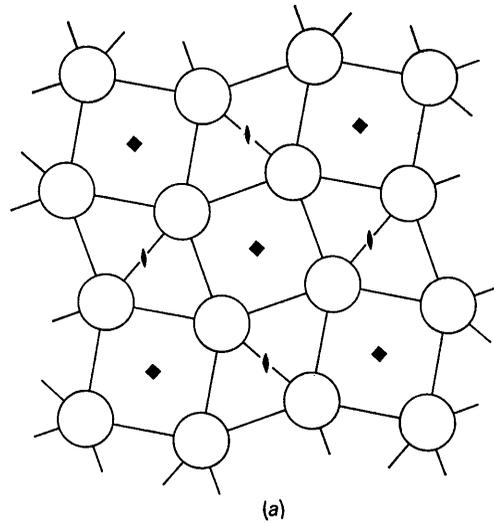


Fig. 3. Kreispackungen in  $p4$ . (a) Fall 1. (b) Fall 2. (c) Fall 3.

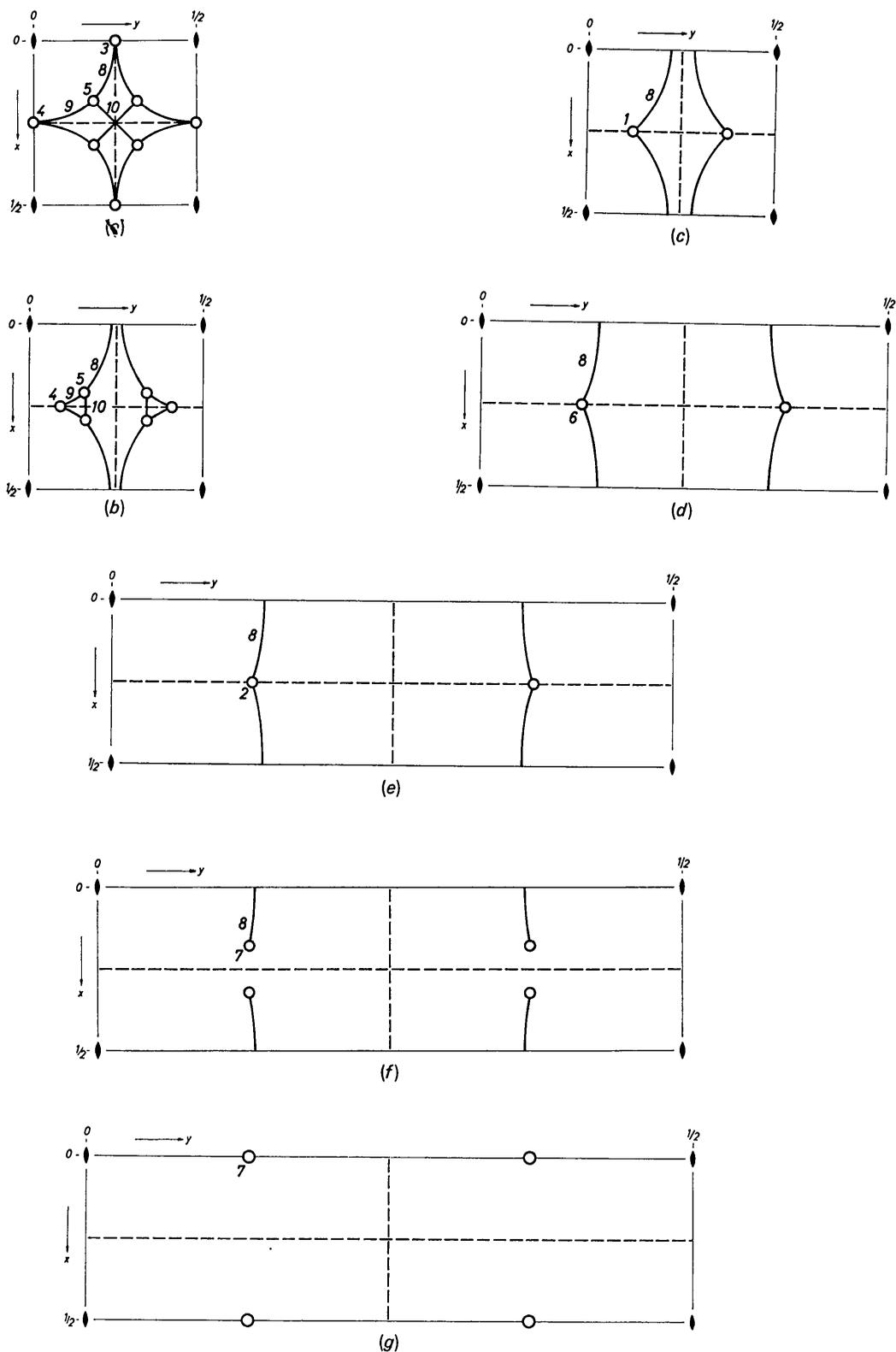


Fig. 4. Kreispackungsskelett von  $pgg$  in Abhängigkeit vom Achsenverhältnis  $B$ . Gezeichnet ist nur ein Viertel der Zelle, da bereits nach  $x = \frac{1}{2}$  bzw.  $y = \frac{1}{2}$  translatorische Wiederholung eintritt. (a)  $B=1$ . (b)  $B=1.07$  als Beispiel für  $1 < B < \frac{2}{3}\sqrt{3}$ . (c)  $B = \frac{2}{3}\sqrt{3} = 1.155$ . (d)  $B=2.5$  als Beispiel für  $\frac{2}{3}\sqrt{3} < B < 2/\sqrt{3}$ . (e)  $B=2/\sqrt{3} = 3.464$ . (f)  $B=3.6$  als Beispiel für  $2/\sqrt{3} < B < 2 + \sqrt{3}$ . (g)  $B = 2 + \sqrt{3} = 3.732$ .

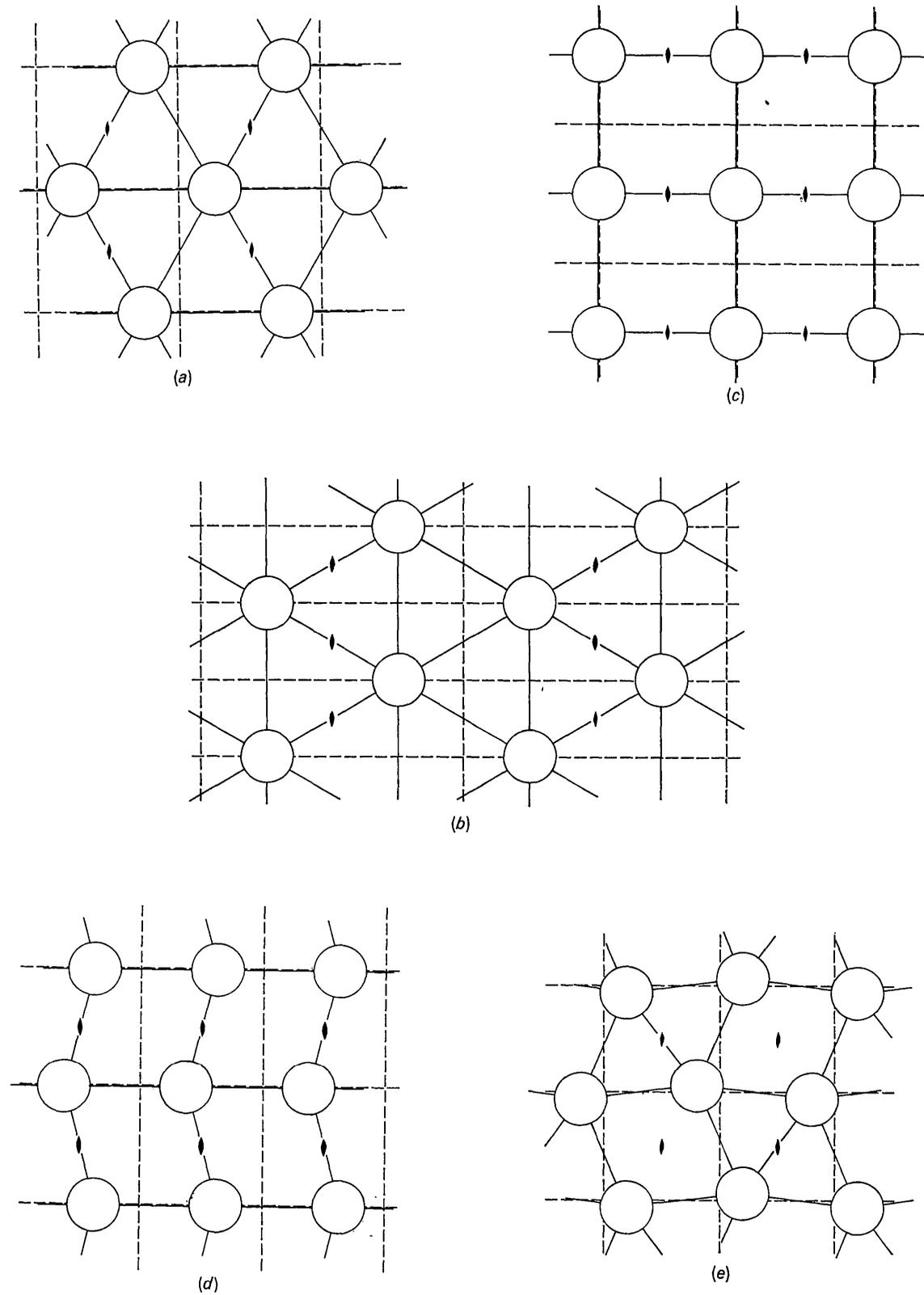


Fig. 5 (a)–(e). Kreispackungen in *pgg*. (a) Fall 1. (b) Fall 2. (c) Fall 3. (d) Fall 4. (e) Fall 5.

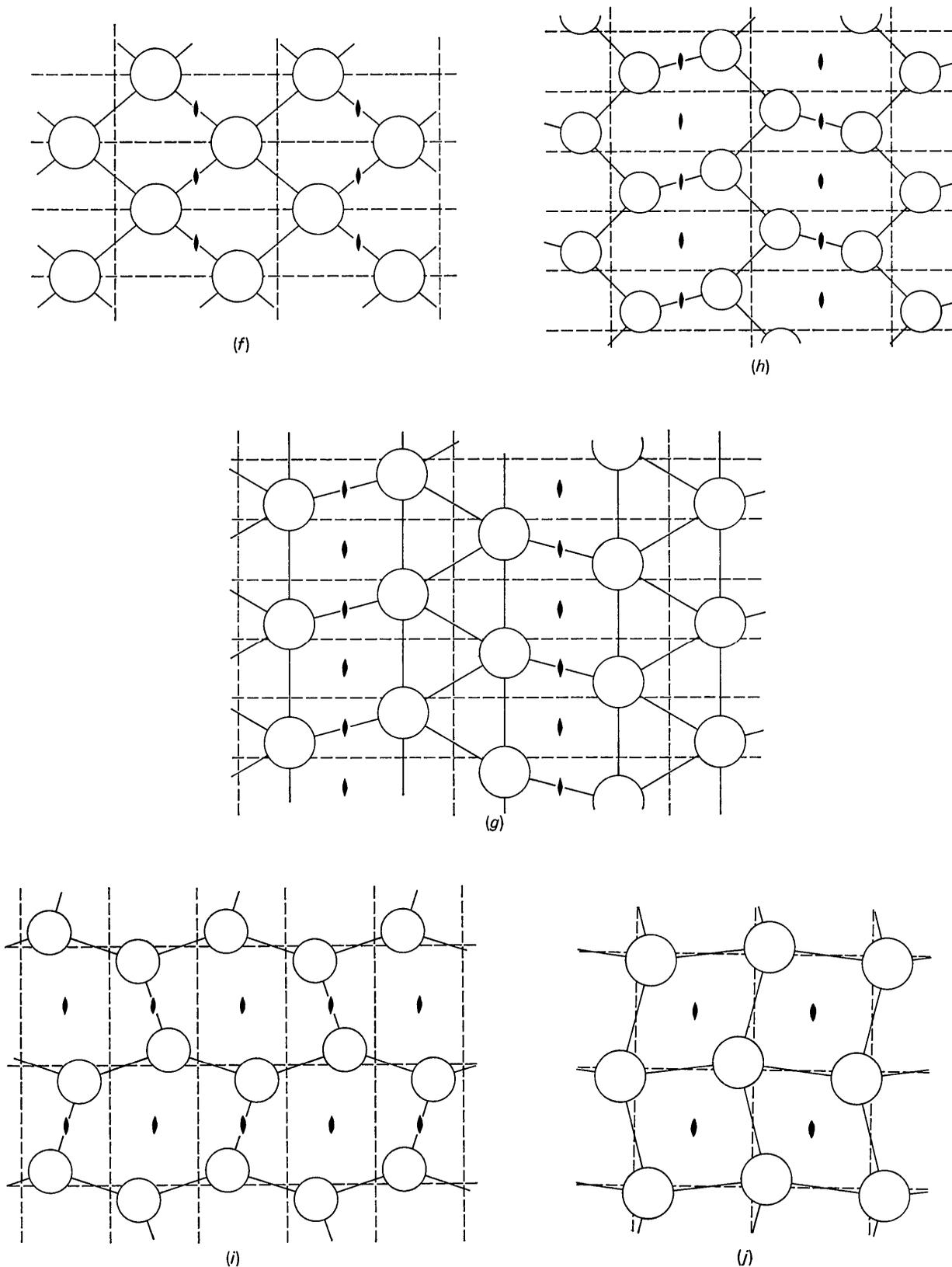


Fig. 5 (f)–(j). Kreispackungen in  $pgg$ . (f) Fall 6. (g) Fall 7. (h) Fall 8. (i) Fall 9. (j) Fall 10.

gen und also das Duale der flächenhomogenen Laves-Teilungen sind.\* Das topologische Symbol gibt in diesem Fall die Eckenzahlen der in einer Ecke zusammenstossenden Polygone, geordnet entsprechend der Reihenfolge ihres Auftretens, wenn der gemeinsame Eckpunkt einmal umlaufen wird. Die Symbole sind dadurch abgekürzt, dass für aufeinanderfolgende Wiederholungen der gleichen Eckenzahl Exponenten verwendet werden, welche angeben, wie oft die betreffende Eckenzahl nacheinander auftritt. Es zeigt sich, dass die und nur die Teilungen der Ebene auftreten, die einer der 11 Laves-Teilungen dual sind.

Zur Veranschaulichung der in den Tabellen enthaltenen Informationen seien drei Beispiele illustriert, nämlich  $tP4xy$ ,  $og.C2xy$  und  $mP2xy$ .

Im Falle  $tP4xy$ , der allgemeinen Punktlage in  $p4$ , liegen die Verhältnisse einfach, da das Kreispackungsskelett nicht von metrischen Parametern abhängt. Fig. 2 zeigt dieses Skelett, das die Symmetrie der Automorphismengruppe  $(p4m)_v$  aufweist (vgl. Fig. 1). Wie oben gezeigt, sind drei verschiedene Fälle von Kreispackungen möglich, wobei stets die vierzählige Symmetrieebene der Achse in  $00$  kontakterzeugend ist, zusammen entweder mit der vierzähligen Achse in  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}$  (Fall 2) oder mit der zweizähligen Achse in  $\frac{1}{2}0$  (Fall 3) oder mit beiden gleichzeitig (Fall 1). Die Abbildungen 3a-c zeigen diese drei verschiedenen Kreispackungen.

Als etwas komplizierterer Fall sei die allgemeine Punktlage von  $pgg$  (Gitterkomplex  $og.C2xy$ ) ausgewählt, da hier das Kreispackungsskelett von einem Parameter, dem Achsenverhältnis  $B$  abhängt. Diese Abhängigkeit kann dadurch beschrieben werden, dass man die einparametrische Mannigfaltigkeit der möglichen Skelette zu Typen zusammenfasst, indem man zwei Skelette dann zum gleichen Typ rechnet, wenn sie in ihrer Topologie und in den Kreispackungen, deren Bedingungen sie enthalten, übereinstimmen. Jedem Typ ist bei dieser Betrachtungsweise ein bestimmtes  $B$  oder ein bestimmter Bereich von  $B$  zugeordnet.

\* Solche eckenhomogenen Ebenenteilungen wurden bereits 1916 von Schubnikow untersucht (Bl. Acad. Sc. Petrograd, russisch, zitiert bei Laves, 1931b).

Bei  $pgg$  findet man so 7 verschiedene Skelett-Typen, die in den Fig. 4(a)-(g) dargestellt sind. Sie liefern die Bedingungen für 10 Kreispackungen [vgl. Fig. 5(a)-(j)], von denen streng genommen noch einige übereinstimmen (z.B. 8 und 9) und nur deshalb getrennt erscheinen, weil eine möglichst einfache Begrenzung des Parameterbereichs gewählt wurde.

Der komplizierteste Fall überhaupt liegt schliesslich bei  $mP2xy$  ( $p2$ ) vor. In diesem Falle hängt das Kugelpackungsskelett von den beiden Parametern  $B$  und  $C = \cos \gamma$  ab. Eine Einteilung in Typen ist auch dann möglich, allerdings wird die Beschreibung umfangreicher. Es sei daher eine andere Darstellungsweise kurz skizziert. Statt nämlich metrische Parameter und Koordinaten zu separieren, kann man beide auch als gleichberechtigte Parameter behandeln und damit die Kreispackungsbedingungen als 'Flächen' in einem allgemeinen Parameterraum behandeln. Im Beispiel  $mP2xy$  ist dieser Parameterraum demnach vierdimensional, ein Kreispackungsskelett wäre ein Schnitt durch den Parameterraum mit  $B = \text{const}$  und  $C = \text{const}$ . Bei der am vorigen Beispiel ausgeführten Darstellung werden die Bedingungsflächen durch solche Schnitte charakterisiert. Doch ist es stattdessen natürlich auch möglich, geeignete Projektionen des Parameterraumes zu benutzen, im Beispiel etwa eine Projektion parallel  $x$  und  $y$  (Fig. 6). Bis auf eine Überschneidung der Existenzbereiche für Fall 5 und Fall 6 gehört nämlich im Kreispackungsfall zu jedem Parameterpaar  $B, C$  eindeutig ein Parameterpaar  $x, y$ , so dass gerade die genannte Projektion besonders informativ ist.

### Verallgemeinerung für dreidimensionale Kugelpackungen

Das geschilderte Verfahren zur Ableitung von Kreispackungsbedingungen lässt sich ohne weiteres verallgemeinern und zur Aufstellung von Kugelpackungsbedingungen im dreidimensionalen, dreifach periodischen Raum verwenden. Der hierfür erforderliche Rechenaufwand wird zwar entsprechend grösser, doch gibt das hier benutzte Reduktionsverfahren relativ noch stärkere Beschränkungen, nämlich von 1731 Punktlagen auf 166 Gitterkomplexe mit drei Freiheitsgraden

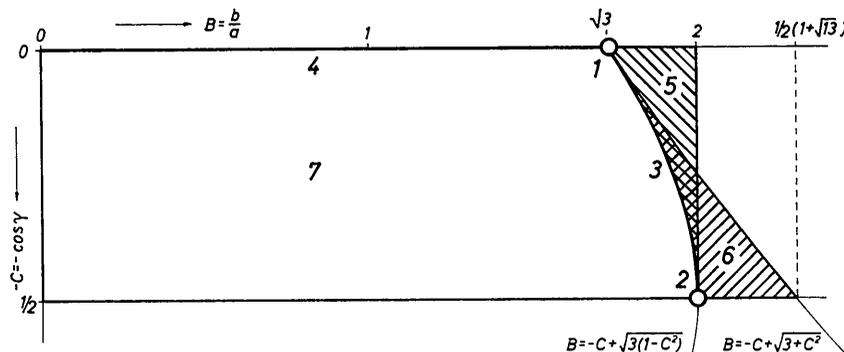


Fig. 6. Kreispackungsbedingungen in  $p2$  in Abhängigkeit vom Achsenverhältnis und vom Cosinus des Achsenwinkels.

und den Spezialfall der Punktlage 48(*f*) in  $Ia3d$  (ein Freiheitsgrad). Schwieriger wird im dreidimensionalen Fall vor allem die anschauliche Darstellung der Ergebnisse, da einerseits die zu betrachtenden Parameter Räume höhere Dimensionszahlen aufweisen können (maximal 8 für  $P\bar{1}$ ), andererseits die topologische Symbolisierung nicht auf so einfache Weise wie im Falle der Kreispackungen möglich ist.

Mein Dank gilt an dieser Stelle Herrn Prof. Dr E. Hellner, der die Anregung zur Beschäftigung mit diesen Problemen gegeben hat und darüber hinaus durch zahlreiche Diskussionen zum Fortschritt der Arbeit beigetragen hat.

*Acta Cryst.* (1968). A24, 81

## Many-Beam Dynamical Theory of the Line in the Middle of a Kikuchi Band

BY YOSHIRO KAINUMA AND MOTOKAZU KOGISO

*Department of General Education, Nagoya University, Nagoya, Japan*

(Received 10 June 1967)

The unindexed line which runs along the middle line of a Kikuchi band is explained in the case of the 200 band from magnesium oxide by the theory of Kikuchi patterns [Kainuma, *Acta Cryst.* (1955) 8, 247]. The intensity profile across the line is estimated without solving the equation of the dispersion surface, by using a matrix formulation of the many-beam dynamical theory. In the estimation, the 000, 200 and 400 reflexions of elastically scattered waves and the  $\bar{2}00$ , 000 and 200 reflexions of inelastically scattered waves are taken into account. The result of the calculation agrees qualitatively with the observation.

### Introduction

Many researchers on electron diffraction have observed a line which runs along the middle line of a Kikuchi band. For example, Ichinokawa & Fukano (1952) observed it for molybdenite, Pfister (1953) for lead iodide, and Uyeda & Nonoyama (1965*b*) for magnesium oxide. The line cannot be indexed as a Kikuchi line. It appears as an excess, deficient or excess-deficient line according to experimental conditions. The excess line is black, and the deficient line white, on photographic plates. The excess-deficient line is black on one side and white on the other side of the line. In this article, the unindexed line is explained by the theory of Kikuchi patterns (Kainuma, 1955). The intensity profile across the line is calculated in the case of magnesium oxide. A matrix formulation of the many-beam dynamical theory is used in the calculation, where three beams of elastically scattered electrons and three beams of inelastically scattered electrons are taken into account. The result of the calculation is qualitatively in agreement with the observation.

### Intensity formula of Kikuchi patterns

A number of photographs of diffraction patterns from magnesium oxide were taken by Uyeda & Nonoyama (1965*a*). In the diffraction patterns the unindexed line

### Literatur

- BURZLAFF, H., FISCHER, W. & HELLNER, E. (1968). *Acta Cryst.* A24, 57.  
 HEESCH, H. & LAVES, F. (1933). *Z. Kristallogr.* 85, 443.  
 HERMANN, C. (1960). *Z. Kristallogr.* 113, 142.  
*Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* (1935). 1. Aufl. Band 1.  
 LAVES, F. (1931*a*). *Z. Kristallogr.* 76, 277.  
 LAVES, F. (1931*b*). *Z. Kristallogr.* 78, 208.  
 NIGGLI, P. (1927). *Z. Kristallogr.* 65, 391.  
 NIGGLI, P. (1928). *Z. Kristallogr.* 68, 404.  
 NOWACKI, W. (1935). *Homogene Raumteilung und Kristallstruktur*. (Diss.) Zürich.  
 SINOGOWITZ, U. (1939). *Z. Kristallogr.* 100, 461. (Diss.)  
 SINOGOWITZ, U. (1943). *Z. Kristallogr.* 105, 23.

runs along the middle line of the 200 Kikuchi band as shown in Fig. 1. The intensity of this line becomes appreciable near the Bragg condition for the 400 reflexion.

The 000, 200 and 400 reflexions are strong in this case. Therefore, these three waves are taken into account in the theory. Their wave vectors are denoted by  $\mathbf{k}_O, \mathbf{k}_H, \mathbf{k}_{2H}$  and the amplitudes by  $u_O, u_H, u_{2H}$ , where  $O$  represents 000 and  $H$ , 200. These waves are excited by the vacuum incident wave with the wave vector  $\mathbf{K}_O$ , as shown in Fig. 2(*a*). The amplitude of the incident wave is normalized to unity.

The inelastically scattered waves produce the Kikuchi pattern and continuous background. We consider an inelastically scattered wave which propagates to the observation point on or near the unindexed line. The wave vector of this wave is denoted by  $\mathbf{K}'_O$  and its amplitude on the exit surface is normalized to unity. This wave is connected with the crystal waves taking account of three waves,  $\bar{2}00$ , 000 and 200. These waves have the wave vectors  $\mathbf{k}'_{-H}, \mathbf{k}'_O, \mathbf{k}'_H$  and the amplitudes  $u'_{-H}, u'_O, u'_H$  as shown in Fig. 2(*b*).

The intensity of the Kikuchi pattern is given as a function of  $\mathbf{K}_O$  and  $\mathbf{K}'_O$ . For wedge-shaped crystals it is written as follows (Kainuma & Kogiso, 1967),

$$J(\mathbf{K}'_O; \mathbf{K}_O) \propto \sum_{h,g} \sum_{h',g'} \frac{S(\mathbf{b}_{gg'}, \mathbf{b}_{hh'})}{b_{gg'}^2 \cdot b_{hh'}^2} \cdot I_{hg} \cdot I_{h'g'}^* \quad (1)$$