The authors thank Professor K. Alexopoulos and Dr S. Mourikis for helpful discussions.

Reference

Begbie, G. H. (1947). *Proc. Roy. Soc.* A**188**, 189–208.
Begbie, G. H. & Born, M. (1947). *Proc. Roy. Soc.* A**188**, 179–188.
Born, M. & Huang, K. (1954). *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, pp. 132–134. Oxford: Clarendon Press.
Corbeau, J. (1964). *J. de Physique*, **25**, 925–932.
Herman, F. (1959). *J. Phys. Chem. Solids*, **8**, 405–418.
Huntington, H. B. (1958). *Solid State Phys.* **7**, 213–351.
Kleinman, L. (1962). *Phys. Rev.* **128**, 2614–2621.
Kleinman, L. (1963). *Phys. Rev.* **130**, 2283–2289.
Koumelis, C. N. (1965). Thesis, Athens.
Reifenberger, R., Keck, M. J. & Trivissono, J. (1969). *J. Appl. Phys.* **40**, 5403–5404.
Segmüller, A. (1963). *Phys. Lett.* **4**, 277.
Segmüller, A. (1964). *Phys. Cond. Matter*, **3**, 18–30.
Segmüller, A. & Neyer, H. R. (1965). *Phys. Cond. Matter.* **4**, 63–70.
Smith, H. M. J. (1948). *Phil. Trans.* **241**, 105–145.
Weil, R. & Groves, W. O. (1968). *J. Appl. Phys.* **39**, 4049–4051.

Acta Cryst. (1975). A**31**, 88

Automorphismengruppen von Raumgruppen und die Zuordnung von Punktlagen zu Konfigurationslagen

Von Elke Koch und Werner Fischer
Institut für Mineralogie, 44 Münster, Gievenbecker Weg 61, Deutschland (BRD)

(*Eingegangen am* 25. *April* 1974; *angenommen am* 3. *September* 1974)

For all space groups the groups of inner automorphisms are given. They are isomorphic with groups of motions, but fall into four sets according to their dimension. In the triclinic and monoclinic systems, however, the corresponding groups of all automorphisms cannot be represented by groups of motions. These groups of automorphisms therefore are only tabulated for the other cases. The relation between groups of automorphisms and Cheshire groups is discussed. By means of automorphisms sets of equivalent points are combined to 'Konfigurationslagen'. For these complete tables are included.

Einleitung

Die Automorphismen der Raumgruppen wurden von Fischer & Koch (1974) zur Definition des Begriffs Gitterkomplex verwendet. Insbesondere wurde vorgeschlagen, Punktlagen mit Hilfe von äusseren Automorphismen zu Konfigurationslagen zusammenzufassen. In diesem Zusammenhang erschien es jedoch nicht angebracht, alle Konfigurationslagen aufzuzählen, ohne dabei die Automorphismengruppen der Raumgruppen näher zu beschreiben. Beides soll an dieser Stelle nachgeholt werden. Ausserdem soll auf den Zusammenhang mit dem von Hirshfeld (1968) eingeführten Begriff Cheshire-Symmetrie und auf die Vertauschbarkeit von Punktlagen nach Boyle & Lawrenson (1973) eingegangen werden.

Dabei werden in Übereinstimmung mit dem üblichen Sprachgebrauch folgende Begriffe zugrunde gelegt: Eine umkehrbar eindeutige Abbildung σ einer Gruppe G auf sich selbst heisst ein *Automorphismus*, wenn dabei alle Gruppenrelationen erhalten bleiben. Ist $a \in G$ ein beliebiges festes Gruppenelement, so stellt die Abbildung σ_a: $g \to aga^{-1}$ für alle Elemente $g \in G$ einen Automorphismus der Gruppe dar. Jeder derartige Automorphismus wird *innerer Automorphismus* genannt, alle übrigen heissen *äussere Automorphismen*. Die Menge aller Automorphismen von G ist eine Gruppe, die *Automorphismengruppe A* von G. Die inneren Automorphismen für sich bilden eine Untergruppe von A, und zwar einen Normalteiler.

Innere Automorphismen von Raumgruppen

Definitionsgemäss gibt jedes Element a einer Gruppe G Anlass zu einem inneren Automorphismus σ_a von G. Ist die Gruppe G speziell eine Raumgruppe,* so ist a eine Bewegung des dreidimensionalen Raumes R^3. In diesem Fall erhebt sich die Frage nach dem Zusammenhang zwischen dieser Abbildung a des R^3 auf sich und der damit verknüpften Abbildung σ_a der Symmetrieoperationen von G auf sich.

g und h seien zwei Symmetrieoperationen von G, die durch den inneren Automorphismus σ_a aufeinander abgebildet werden, sodass gilt: $\sigma_a(g)=h=aga^{-1}$, d.h. $ha=ag$. Die Symmetrieoperation g führt jeden Punkt $x \in R^3$ in den Punkt $g(x)$, die Symmetrieoperation h

* Im folgenden wird unter Raumgruppe immer ein Exemplar aus einer der 219 Raumgruppenklassen verstanden (vgl. Fischer & Koch, 1974). Wegen der Isomorphiebeziehungen zwischen allen Raumgruppen einer Klasse genügt es in diesem Zusammenhang, jeweils eine Raumgruppe als Vertreter der Klasse zu betrachten.

jeden Punkt $y \in R^3$ in $h(y)$ über. Wählt man jetzt y speziell so, dass $y = a(x)$ gilt, dann folgt:

$$h(y) = h[a(x)] = ha(x) = ag(x) = a[g(x)],$$

d.h. die gleiche Bewegung a, die x in y überführt, bildet auch $g(x)$ auf $h(y)$ ab. Speziell bildet a dann auch die Fixpunktmenge von g auf die Fixpunktmenge von h ab. Das bedeutet in anderen Worten: Wird die Symmetrieoperation g durch den inneren Automorphismus σ_a auf die Symmetrieoperation h abgebildet, dann führt die zugehörige Bewegung a das Symmetrieelement zu g in das Symmetrieelement zu h über.

Wendet man diese Überlegung z.B. auf die Raumgruppe $P2$ an, so stellt sich heraus, dass jede Translation in Richtung der zweizähligen Achse zwar keinen Punkt des R^3 festlässt, aber jedes Symmetrieelement von $P2$ auf sich selbst abbildet. Deshalb liegt die Vermutung nahe, dass nicht alle Symmetrieoperationen einer Raumgruppe verschiedene Automorphismen erzeugen müssen.

Allgemein gilt der Satz: Die Gruppe der inneren Automorphismen einer Gruppe G ist isomorph zur Faktorgruppe ihres Zentrums.* Daraus folgt, dass zwei Elemente $a, b \in G$ genau dann den gleichen inneren Automorphismus erzeugen, wenn sie zur gleichen Nebenklasse des Zentrums von G gehören (vgl. z.B. Kurosh, 1960). Es ist daher zweckmässig, zunächst die Zentren der Raumgruppen zu bestimmen, d.h. diejenigen Symmetrieoperationen, die mit allen Symmetrieoperationen der Raumgruppe vertauschbar sind.

Jede Symmetrieoperation des R^3 lässt sich als $(R, \mathbf{t})$ darstellen, wobei der rotative Anteil R durch eine 3×3-Matrix und der translative Anteil $\mathbf{t}$ durch einen dreikomponenten Vektor gegeben ist. Die Verknüpfungsvorschrift (Gruppenmultiplikation) lautet in dieser Schreibweise: $(R_1, \mathbf{t}_1)\,(R_2, \mathbf{t}_2) = (R_1R_2, \mathbf{t}_1 + R_1\mathbf{t}_2)$. Man kann zunächst zeigen, dass von allen Symmetrieoperationen der Raumgruppen nur reine Translationen $(E, \mathbf{t})$ zum Zentrum gehören können: Wegen der Periodizität gibt es zu jeder Symmetrieoperation $(R, \mathbf{t})$ einer Raumgruppe unendlich viele Symmetrieoperationen

$$(E, \mathbf{n})\,(R, \mathbf{t}) = (R, \mathbf{n} + \mathbf{t}),$$

wobei $\mathbf{n}$ ein beliebiger Vektor mit ganzzahligen Komponenten ist. Ist $(R, \mathbf{t})$ ein Element des Zentrums, so muss es auch speziell mit $(R, \mathbf{n} + \mathbf{t})$ vertauschbar sein, d.h.

$$\begin{aligned}
&(R, \mathbf{t})\,(R, \mathbf{n} + \mathbf{t}) = (R, \mathbf{n} + \mathbf{t})\,(R, \mathbf{t}) \\
&(R^2, \mathbf{t} + R\mathbf{n} + R\mathbf{t}) = (R^2, \mathbf{n} + \mathbf{t} + R\mathbf{t}) \\
&\mathbf{t} + R\mathbf{n} + R\mathbf{t} = \mathbf{n} + \mathbf{t} + R\mathbf{t} \\
&R\mathbf{n} = \mathbf{n}\,.
\end{aligned}$$

Da diese Beziehung für jeden Vektor $\mathbf{n}$ mit ganzzahligen Komponenten gelten muss, folgt $R = E$, d.h. die betrachtete Symmetrieoperation ist eine reine Translation.

Als nächstes ist zu untersuchen, ob der gesamte Translationennormalteiler einer Raumgruppe zum Zentrum gehören muss. Für $P1$, der einzigen abelschen Raumgruppe, ist dieses natürlich der Fall. Enthält die Raumgruppe jedoch ausser den Translationen $(E, \mathbf{t}_1)$ noch weitere Symmetrien $(R_2, \mathbf{t}_2)$, dann muss für die Translationen des Zentrums gelten:

$$\begin{aligned}
&(R_2, \mathbf{t}_2)\,(E, \mathbf{t}_1) = (E, \mathbf{t}_1)\,(R_2, \mathbf{t}_2) \\
&(R_2, \mathbf{t}_2 + R_2\mathbf{t}_1) = (R_2, \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2) \\
&R_2\mathbf{t}_1 = \mathbf{t}_1\,.
\end{aligned}$$

Ist R_2 die Matrix einer Spiegelung an einer Ebene bzw. die Matrix einer Drehung, so erfüllen genau die Translationen parallel zur Spiegelebene bzw. zur Drehachse diese Beziehung. Ist R_2 dagegen die Matrix einer Drehinversion, so muss $\mathbf{t}_1$ der Nullvektor sein, damit die Beziehung erfüllt ist. Kombiniert man diese Aussagen für die Symmetrien verschiedener Richtungen, so erhält man vier grundsätzlich verschiedene Typen von Raumgruppen:

(1) Die Raumgruppe $P1$ ist ihr eigenes Zentrum. Entsprechend besteht die Gruppe ihrer inneren Automorphismen nur aus der Identität.

(2) Für die Raumgruppen zur Kristallklasse m wird das Zentrum aus allen Translationen parallel zur Spiegelebene gebildet. Infolge dessen ist in diesen Fällen die Gruppe der inneren Automorphismen isomorph einer Geradengruppe (Raumgruppe des R^1).

(3) Die Raumgruppen zu den Kristallklassen 2, $mm2$, 4, $4mm$, 3, $3m$, 6 und $6mm$ besitzen ein Zentrum aus allen Translationen parallel zur Drehachse. Die zugehörigen Gruppen innerer Automorphismen sind deshalb isomorph zu Ebenengruppen (Raumgruppen des R^2).

(4) Für alle übrigen Raumgruppen enthält das Zentrum nur die Identität. Raumgruppe und Gruppe der inneren Automorphismen sind also isomorph.

Bei Raumgruppen des Typs 4 erhält man daher auf die oben beschriebene Weise eine eineindeutige Zuordnung der Symmetrieoperationen und der inneren Automorphismen zueinander. Bei allen übrigen Raumgruppen erzeugen dagegen verschiedene Raumgruppensymmetrien den gleichen inneren Automorphismus. Ihre Automorphismengruppen sind jeweils den Vertretern einer bestimmten Raumgruppenklasse des ${}^3R^2$, ${}^2R^1$, ${}^1R^0$ isomorph.

Die Symmetrieoperationen $(R, \mathbf{t})$ einer Raumgruppe des Typs 3 haben z.B. die Eigenschaft, dass ihr rotativer Anteil durch eine Matrix der Form

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 \\ r_{21} & r_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

dargestellt werden kann. Symmetrieoperationen, die sich lediglich im translativen Teil $\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix}$ durch eine

* Das Zentrum einer Gruppe ist derjenige Normalteiler, dessen Elemente mit allen Gruppenelementen vertauschbar sind.

Translation des Zentrums $\begin{pmatrix}0\\0\\n\end{pmatrix}$ unterscheiden, gehören zur gleichen Nebenklasse und erzeugen daher den gleichen inneren Automorphismus. Die Betrachtung der Matrizen zeigt sofort, dass die zugehörige Faktorgruppe nach dem Zentrum einer Matrizengruppe $\{(R',\mathbf{t}')\}$ mit $R'=\begin{pmatrix}r_{11}r_{12}\\r_{21}r_{22}\end{pmatrix}$, $\mathbf{t}'=\begin{pmatrix}t_1\\t_2\end{pmatrix}$ isomorph ist. Nach Konstruktion dieser Gruppe aus einer Raumgruppe des R^3 muss es sich hierbei um eine Raumgruppe des R^2, also eine Ebenengruppe, handeln. Man erhält auf diese Weise aber nicht nur eine bestimmte Raumgruppenklasse des R^2, deren Vertreter der Gruppe der inneren Automorphismen der Ausgangsgruppe isomorph sind, sondern sogar ein bestimmtes Exemplar aus dieser Klasse, dessen Translationen entweder mit den entsprechenden Translationen der Ausgangsgruppe übereinstimmen oder auf einfache Weise daraus hervorgehen. Analoge Überlegungen lassen sich auch für die Raumgruppen der Typen 1 und 2 anstellen.

In Tabelle 1 werden die Gruppen der inneren Automorphismen für alle Raumgruppen der Typen 1–3 angegeben. Zur Bezeichnung wird dabei die zugehörige Klasse isomorpher Raumgruppen des ${}^3R^2$, ${}^2R^1$ und ${}^1R^0$ verwendet. Für zweidimensionale Raumgruppen wird die Bezeichnung der *International Tables for X-ray Crystallography* (1965) benutzt. Die einzige auftretende eindimensionale Gruppe wird zur Unterscheidung von der Ebenengruppe *pm* mit *πm* bezeichnet. Da die Beziehungen zwischen den Translationen der Ausgangsraumgruppe und denen der Raumgruppe des ${}^3R^2$, ${}^2R^1$ oder ${}^1R^0$, die der Gruppe der inneren Automorphismen isomorph ist und die man auf die oben beschriebene Weise erhält, nützliche Informationen darstellen, werden sie in Tabelle 1 berücksichtigt. Stimmen die Translationen der Raumgruppe und der Ebenen- bzw. Geradengruppe nicht überein, dann wird dies in Anlehnung an einen Vorschlag von Hermann (1960) durch Indizes gekennzeichnet. Dabei bedeutet *a*, *b* und *c* eine Halbierung der Translationen in *a*-, *b*- bzw. *c*-Richtung und 2 eine Halbierung aller Translationen. Der Index *v* im tetragonalen Kristallsystem bzw. *V* im hexagonalen Kristallsystem steht für eine Drehung der Translations richtungen um die *c*-Achse um 45° bzw. um 30° und eine gleichzeitige Verkürzung der *a*- und der *b*-Translation entsprechend dem Faktor $\sqrt{2}$ bzw. $\sqrt{3}$.

Wie die Tabelle 1 zeigt, treten nicht beide Geradengruppen und nur 13 der 17 Ebenengruppen als Gruppen der inneren Automorphismen von Raumgruppen auf. Dafür wird aber in den meisten Fällen die gleiche Gruppe in mehreren Aufstellungen benötigt.

Allerdings lässt sich auch für Raumgruppen der Typen 1, 2 und 3 stets eine Bewegungsgruppe des R^3 finden, welche der Gruppe der inneren Automorphismen isomorph ist und das Symmetriegerüst der Raumgruppe auf sich abbildet, nämlich eine Schicht-, Balken- oder Punktgruppe. Dabei ist jedoch zu beachten, dass es – wie bei den Punktgruppen des R^3 (Beispiel: $\bar{1}$,2,*m*)

Tabelle 1. *Die Gruppen der inneren Automorphismen von Raumgruppen*

Es werden nur solche Raumgruppen aufgeführt, die nicht isomorph zur Gruppe ihrer inneren Automorphismen sind.

Gruppe innerer Automorphismen	Zugehörige Raumgruppen
1	$P1$
πm	Pm, Pc
$(\pi m)_b$	Cm, Cc
$p2$	$P2$, $P2_1$
$(p2)_a$	$C2$
pmm	$Pmm2$, $Pmc2_1$, $Pcc2$
$(pmm)_b$	$Amm2$, $Abm2$
$(pmm)_{ab}$	$Fmm2$
pmg	$Pma2$, $Pca2_1$, $Pcn2(\equiv Pnc2)$, $Pmn2_1$
$(pmg)_b$	$Ama2$, $Aba2$
pgg	$Pba2$, $Pna2_1$, $Pnn2$
$(pgg)_{ab}$	$Fdd2$
cmm	$Cmm2$, $Cmc2_1$, $Ccc2$, $Imm2$, $Iba2$, $Ima2$
$p4$	$P4$, $P4_{1,3}$, $P4_2$
$(p4)_v$	$I4$, $I4_1$
$p4m$	$P4mm$, $P4_2cm$, $P4cc$, $P4_2mc$
$(p4m)_v$	$I4mm$, $I4cm$
$p4g$	$P4bm$, $P4_2nm$, $P4nc$, $P4_2bc$
$(p4g)_v$	$I4_1md$, $I4_1cd$
$p3$	$P3$, $P3_{1,2}$
$(p3)_V$	$R3$
$p3m1$	$P3m1$, $P3c1$
$p31m$	$P31m$, $P31c$
$(p31m)_V$	$R3m$, $R3c$
$p6$	$P6$, $P6_{1,5}$, $P6_{2,4}$, $P6_3$
$p6m$	$P6mm$, $P6cc$, $P6_3cm$, $P6_3mc$

– sowohl Balken- als auch Schichtgruppen gibt, welche in der Kristallographie unterschieden werden, obwohl sie als Gruppen isomorph sind. Daher lassen sich in den Fällen 2 und 3 immer mehrere Balken- bzw. Schichtgruppen finden, welche der Gruppe innerer Automorphismen der betrachteten Raumgruppe isomorph sind und das Symmetriegerüst der Raumgruppe in sich überführen. Die Untersuchung zeigte, dass höchstens eine dieser Gruppen Untergruppe der Raumgruppe ist. So ist z.B. die Gruppe der inneren Automorphismen von $Pmc2_1$ der Ebenengruppe *pmm* und damit den Schichtgruppen $P12/m(1)$, $Pmm(2)$, $P22(2)$, $Pma(a)$, $Pmm(a)$ und $Cmm(a)$ isomorph [zur Bezeichnung der Schichtgruppen siehe Bohm & Dornberger-Schiff (1967)]. In diesem Beispiel ist keine der Schichtgruppen Untergruppe der Raumgruppe.

Äussere Automorphismen von Raumgruppen

Da die äusseren Automorphismen einer Raumgruppe nicht an Symmetrieoperationen der Raumgruppe geknüpft sind, ist es nicht verwunderlich, dass sich nicht jede volle Automorphismengruppe als Bewegungsgruppe des R^3 darstellen lässt.

Bieberbach (1912) hat jedoch folgendes gezeigt: Zu jedem Isomorphismus zweier Raumgruppen $G=\{(G_i,\mathbf{g}_i)\}$ und $H=\{(H_i,\mathbf{h}_i)\}$, der jedes Element $(G_i,\mathbf{g}_i)$ auf das entsprechende Element $(H_i,\mathbf{h}_i)$ abbildet, existiert eine von i unabhängige und nicht singuläre Matrix S und ein dreikomponentiger Vektor $\mathbf{s}$, so dass $(H_i,\mathbf{h}_i)=(S,\mathbf{s})\ (G_i,\mathbf{g}_i)\ (S,\mathbf{s})^{-1}$ für alle i gilt. Daraus folgt insbesondere, dass jeder Automorphismus einer Raumgruppe sich in dieser Weise darstellen lässt. Mit $(S, \mathbf{s})$ ist aber gleichzeitig eine affine Abbildung des Raumes definiert. Ähnlich wie bei den inneren Automorphismen lässt sich folgendes zeigen: Gilt $(G_j, \mathbf{g}_j) = (S, \mathbf{s})\ (G_i, \mathbf{g}_i)\ (S, \mathbf{s})^{-1}$ und $x' = (G_i, \mathbf{g}_i)x$, $y' = (G_j, \mathbf{g}_j)y$, dann folgt aus $y = (S, \mathbf{s})x$ auch $y' = (S, \mathbf{s})x'$. Insbesondere wird daher das Symmetriegerüst von G durch $(S, \mathbf{s})$ auf sich selbst abgebildet. Infolgedessen kann man in gleicher Weise, wie man jedem inneren Automorphismus eine Bewegung des R^3 zuordnen kann, jedem äusseren Automorphismus eine affine Abbildung des R^3 zuordnen. Dementsprechend ist dann die Gruppe aller Automorphismen einer Raumgruppe auch einer Gruppe affiner Abbildungen des R^3 isomorph.

Genau wie ein innerer Automorphismus kann auch ein äusserer Automorphismus von mehr als einer affinen Abbildung erzeugt werden. Betrachtet man nämlich zwei affine Abbildungen $(S, \mathbf{s})$ und $(E, \mu\mathbf{t}_0)\ (S, \mathbf{s}) = (S, \mathbf{s} + \mu\mathbf{t}_0)$, wobei $(E, \mathbf{t}_0)$ ein Element aus dem Zentrum der Gruppe und μ eine beliebige reelle Zahl ist, so bilden beide ein Element $(R_1, \mathbf{t}_1)$ aus der Gruppe auf das gleiche Element $(R_2, \mathbf{t}_2)$ ab:

$$\begin{aligned}(S, \mathbf{s} + \mu\mathbf{t}_0)\ (R_1, \mathbf{t}_1)\ (S, \mathbf{s} + \mu\mathbf{t}_0)^{-1} \\ = (E, \mu\mathbf{t}_0)\ (S, \mathbf{s})\ (R_1, \mathbf{t}_1)\ (S, \mathbf{s})^{-1}(E, \mu\mathbf{t}_0)^{-1} \\ = (E, \mu\mathbf{t}_0)\ (R_2, \mathbf{t}_2)\ (E, \mu\mathbf{t}_0)^{-1} = (R_2, \mathbf{t}_2)\,.\end{aligned}$$

Das bedeutet, dass die Zuordnung von Raumgruppen zu Typen von Automorphismengruppen für die vollen Automorphismengruppen die gleiche ist wie für die Gruppen innerer Automorphismen. Da aber mit Hilfe von äusseren Automorphismen auch für Raumgruppen der Typen 1–3 jede Translation auf ihr Inverses abgebildet werden kann, sind die Automorphismengruppen dieser Raumgruppen nicht isomorph zu Raumgruppen niedrigerer Dimension. Als Folge davon sind für Raumgruppen des Typs 3, soweit sie nicht zur Kristallklasse 2 gehören (s.u.), die zu den vollen Automorphismengruppen gehörigen Schichtgruppen eindeutig bestimmt.

Man betrachte jetzt eine beliebige affine Abbildung $(S, \mathbf{s})$. Bildet man jede Symmetrieoperation $(R, \mathbf{t})$ einer Raumgruppe G auf $(S, \mathbf{s})\ (R, \mathbf{t})\ (S, \mathbf{s})^{-1}$ ab, so handelt es sich bei dieser Abbildung um einen Isomorphismus von $G = \{(R, \mathbf{t})\}$ auf $\{(S, \mathbf{s})\ (R, \mathbf{t})\ (S, \mathbf{s})^{-1}\} = G'$. Fordert man zusätzlich, dass $(S, \mathbf{s})$ jedes Paar von Punkten x, x', die bezüglich einer Symmetrieoperation von G äquivalent sind, auf ein Paar von Punkten y, y' abbildet, welche nicht nur bezüglich einer Symmetrieoperation von G' sondern auch bezüglich einer Symmetrieoperation von G äquivalent sind, so lässt $(S, \mathbf{s})$ das Symmetriegerüst von G fest, und G' ist eine zu G isomorphe Raumgruppe. G und G' sind also zwei isomorphe Raumgruppen mit identischem Symmetriegerüst, d.h. $G = G'$. Eine solche affine Abbilding des Symmetriegerüsts einer Raumgruppe auf sich selbst ist also eindeutig mit einem bestimmten Automorphismus der Raumgruppe verknüpft. Deshalb kann man die Automorphismengruppe einer Raumgruppe finden, indem man die Gruppe affiner Abbildungen bestimmt, die das Symmetriegerüst der Raumgruppe auf sich selbst abbildet.

Dieses Verfahren wurde auf alle Raumgruppen (-klassen) des R^3 angewendet. Dabei stellte sich heraus, dass man mit Hilfe der vollen Automorphismengruppen jede Raumgruppenklasse G einem der folgenden drei Typen zuordnen kann:

(*a*) Jede affine Abbildung des R^3, die einem Automorphismus einer Raumgruppe $G \in \mathsf{G}$ zugeordnet ist, lässt alle Abstände konstant, d.h. ist eine Bewegung. Dann ist die von den Automorphismen erzeugte Gruppe affiner Abbildungen für jedes $G \in \mathsf{G}$ eine Bewegungsgruppe. Dies ist bei allen kubischen, tetragonalen, hexagonalen und einem Teil der orthorhombischen Raumgruppen der Fall, nämlich immer dann, wenn die Automorphismengruppe einer Bewegungsgruppe isomorph ist, die dem gleichen Kristallsystem wie G angehört.

(*b*) In G existieren solche Raumgruppen G, bei denen man nicht jedem Automorphismus eine Bewegung zuordnen kann. Dennoch ist die Automorphismengruppe von G einer Bewegungsgruppe isomorph. Dieser Fall ist lediglich für orthorhombische Raumgruppen möglich. Die Automorphismengruppe ist dann einer kubischen oder tetragonalen Bewegungsgruppe isomorph. Betrachtet man z.B. ein beliebiges Exemplar $P222$, dann gibt es äussere Automorphismen, die einer Bewegung entsprechen. Dazu gehören alle Translationen, die um den halben Betrag einer Raumgruppentranslation verschieben. Andererseits existieren auch solche Automorphismen von $P222$, welche die Basistranslationen vertauschen. Diese Automorphismen entsprechen nur im Sonderfall gleich langer Basisvektoren Bewegungen des R^3, etwa einer dreizähligen Drehung. Im allgemeinen Fall ist die zugehörige Gruppe affiner Abbildungen jedoch lediglich einer Bewegungsgruppe – hier $(Pm3m)_2$ – isomorph.

(*c*) Die Automorphismengruppe von G ist keiner Bewegungsgruppe des R^3 isomorph. Dieser Fall liegt z.B. für $P2/m$ vor: Die Symmetrien können so vertauscht werden, wie es einerseits $P4/mmm$, andererseits $P6/mmm$ entspricht. Daher muss die Gruppe A aller Automorphismen von $P2/m$ zwei Untergruppen besitzen, die $P4/mmm$ bzw. $P6/mmm$ isomorph sind. A selbst kann deshalb keiner Raumgruppe des R^3 isomorph sein. Im Beispiel $P2/m$ enthält A insbesondere auch alle diejenigen Automorphismen, welche die beiden Basistranslationen senkrecht zur ausgezeichneten Richtung auf irgendein anderes Paar solcher Basistranslationen abbilden. Da Automorphismen dieses Typs jedoch für jede monokline oder trikline Raumgruppe existieren, können die Automorphismengruppen aller dieser Raumgruppen keiner Bewegungsgruppe isomorph sein. Sie können allerdings auch keiner kontinuierlichen Gruppe isomorph sein, da ja die zugehörige Gruppe affiner Abbildungen Gittervektoren wieder in Gittervektoren überführt.

Das folgende Schema zeigt die Verteilung der Raumgruppen auf die Typen 1,2,3,4 bzw. a, b, c:

	1	2	3	4
a	0	0	46	120
b	0	0	10	28
c	1	4	3	7.

Die Kombinationen $1a, 1b, 2a, 2b$ sind nicht möglich. Zu $3a$ gehören alle Raumgruppen der Kristallklassen 4, $4mm$, 3, $3m$, 6, $6mm$ und 12 der Raumgruppen zu $mm2$, zu $4a$ sämtliche kubischen, die restlichen hexagonalen und tetragonalen Raumgruppen sowie neun Raumgruppen zu mmm. $3b$ umfasst die restlichen zehn Raumgruppen zu $mm2$, $4b$ die Raumgruppen zu 222 und 19 Raumgruppen zu mmm. $1c$ enthält nur $P1$, $2c$ die Raumgruppen zu m, $3c$ zu 2 und $4c$ zu $\bar{1}$ und $2/m$. Von den monoklinen und triklinen Raumgruppen abgesehen, sind die Automorphismengruppen aller Raumgruppen des R^3 in Tabelle 2 zusammengefasst. Sie sind – auch für Gruppen des Typs b – durch das Symbol einer Bewegungsgruppe des R^3 gekennzeichnet. Soweit es sich dabei um Schichtgruppen handelt, wurde auf die Bezeichnungsweise von Bohm & Dornberger-Schiff (1967) zurückgegriffen. Wie in Tabelle 1 wird mit Hilfe von Indizes der Zusammenhang zwischen den Translationen der Raumgruppe und denen der Gruppe affiner Abbildungen, die der Automorphismengruppe zugeordnet ist, angegeben. Lediglich der dem Raumgruppensymbol vorangestellte Apostroph ist neu gegenüber Tabelle 1. Er bedeutet eine Drehung um 180° um die dreizählige Achse in rhomboedrischen Raumgruppen.

Zwischen den in Tabelle 2 angegebenen Automorphismengruppen und den Cheshire-Gruppen besteht in vielen Fällen ein enger Zusammenhang. Cheshire-Gruppen wurden von Hirshfeld (1968) als Gruppen aller derjenigen Bewegungen des R^3 eingeführt, welche das Symmetriegerüst einer Raumgruppe auf sich abbilden. Sie sind daher stets Raumgruppen oder degenerierte Raumgruppen, d.h. Raumgruppen mit infi-

Tabelle 2. *Die Automorphismengruppen der rhombischen, tetragonalen, hexagonalen und kubischen Raumgruppen*

Automorphismen-gruppen	Zugehörige Raumgruppen
$[Pmm(m)]_{ab}$	$Pmc2_1$, $Pma2$, $Pca2_1$, $Pnc2$, $Pmn2_1$, $Pna2_1$, $Cmc2_1$, $Amm2$, $Abm2$, $Ama2$, $Aba2$, $Ima2$
$[P(4/m)11]_v$	$P4_{1,3}$
$[P(4/m)mm]_v$	$P4$, $P4_2$, $I4$, $P4mm$, $P4bm$, $P4_2cm$, $P4_2nm$, $P4cc$, $P4nc$, $P4_2mc$, $P4_2bc$, $I4mm$, $I4cm$
$[P(4/m)mm]_{ab}$	$Pmm2$, $Pcc2$, $Pba2$, $Pnn2$, $Cmm2$, $Ccc2$, $Fmm2$, $Imm2$, $Iba2$
$[P(4/n)bm]_v$	$I4_1$, $I4_1md$, $I4_1cd$
$[P(4/n)bm]_{ab}$	$Fdd2$
$[P(\bar{3})1m]_V$	$R3$, $R3m$, $R3c$
$P(6)22$	$P6_{1,5}$, $P6_{2,4}$
$[P(6)22]_V$	$P3_{1,2}$
$P(6/m)mm$	$P31m$, $P31c$, $P6$, $P6_3$, $P6mm$, $P6cc$, $P6_3cm$, $P6_3mc$
$[P(6/m)mm]_V$	$P3$, $P3m1$, $P3c1$
$(Pmmm)_2$	$Pmma$, $Pnna$, $Pmna$, $Pcca$, $Pbcm$, $Pbcn$, $Pnma$, $Cmcm$, $Cmca$
$(P4_222)_{vc}$	$P4_{1,3}22$, $P4_{1,3}2_12$
$(P4/mmm)_{vc}$	$P\bar{4}$, $P4/m$, $P4_2/m$, $P4/n$, $P4_2/n$, $I4/m$, $P422$, $P42_12$, $P4_222$, $P4_22_12$, $I422$, $P\bar{4}2m$, $P\bar{4}2c$, $P\bar{4}2_1m$, $P\bar{4}2_1c$, $P\bar{4}m2$, $P\bar{4}c2$, $P\bar{4}b2$, $P\bar{4}n2$, $I\bar{4}2m$, $P4/mmm$, $P4/mcc$, $P4/nbm$, $P4/nnc$, $P4/mbm$, $P4/mnc$, $P4/nmm$, $P4/ncc$, $P4_2/mmc$, $P4_2/mcm$, $P4_2/nbc$, $P4_2/nnm$, $P4_2/mbc$, $P4_2/mnm$, $P4_2/nmc$, $P4_2/ncm$, $I4/mmm$, $I4/mcm$
$(P4/mmm)_2$	$P2_12_12$, $C222$, $Pccm$, $Pban$, $Pbam$, $Pccn$, $Pnnm$, $Pmmn$, $Cmmm$, $Cccm$, $Cmma$, $Ccca$, $Ibam$
$(P4_2/mmc)_2$	$P222_1$, $C222_1$, $Imma$
$(P4_2/nnm)_{vc}$	$I4_1/a$, $I4_122$, $I\bar{4}2d$, $I4_1/amd$, $I4_1/acd$
$(I4/mmm)_{vc}$	$I\bar{4}$, $I\bar{4}m2$, $I\bar{4}c2$
$'(R\bar{3}m)_c$	$R\bar{3}$, $R32$, $R\bar{3}m$, $R\bar{3}c$
$(P6_{2,4}22)_c$	$P3_{1,2}21$, $P6_{1,5}22$, $P6_{4,2}22$
$(P6_{2,4}22)_{Vc}$	$P3_{1,2}12$
$(P6/mmm)_c$	$P\bar{3}$, $P321$, $P\bar{3}1m$, $P\bar{3}1c$, $P\bar{3}m1$, $P\bar{3}c1$, $P6/m$, $P6_3/m$, $P622$, $P6_322$, $P\bar{6}2m$, $P\bar{6}2c$, $P6/mmm$, $P6/mcc$, $P6_3/mcm$, $P6_3/mmc$
$(P6/mmm)_{Vc}$	$P312$, $P\bar{6}$, $P\bar{6}m2$, $P\bar{6}c2$
$(Pm3)_2$	$Pbca$
$Ia3$	$Pa3$
$I4_132$	$P4_{1,3}32$
$(Pm3m)_2$	$P222$, $I222$, $Pmmm$, $Pnnn$, $Fmmm$, $Immm$, $Fm3$, $F432$, $Fm3m$, $Fm3c$
$(Pm3n)_2$	$P2_12_12_1$, $I2_12_12_1$, $Ibca$
$(Pn3m)_2$	$Fddd$, $Fd3$, $F4_132$, $Fd3m$, $Fd3c$
$Im3m$	$P23$, $I23$, $Pm3$, $Pn3$, $Im3$, $P432$, $P4_232$, $I432$, $P\bar{4}3m$, $I\bar{4}3m$, $P\bar{4}3n$, $Pm3m$, $Pn3n$, $Pm3n$, $Pn3m$, $Im3m$
$(Im3m)_2$	$F222$, $F23$, $F\bar{4}3m$, $F\bar{4}3c$
$Ia3d$	$P2_13$, $I2_13$, $Ia3$, $I4_132$, $I\bar{4}3d$, $Ia3d$

nitesimaler Translation in mindestens einer Richtung. Bei den Raumgruppen des Typs 4*a* sind Automorphismengruppe und Cheshire-Gruppe isomorph, bei den Typen 4*b* und 4*c* hat die Automorphismengruppe eine der Cheshire-Gruppe isomorphe echte Untergruppe, beim Typ 3*a* enthält umgekehrt die Cheshire-Gruppe eine echte Untergruppe, die der Automorphismengruppe isomorph ist. In allen übrigen Fällen gibt es immer eine Bewegungsgruppe des R^3, welche Untergruppe der Cheshire-Gruppe ist und gleichzeitig einer Untergruppe der Automorphismengruppe isomorph ist. Enthält die Automorphismengruppe Elemente, welche direkt nur mit affinen Abbildungen des R^3 und nicht mit Bewegungen verknüpft werden können, so gibt es in der Cheshire-Gruppe keine entsprechenden Elemente. Dagegen enthalten die Cheshire-Gruppen von Raumgruppen hemimorpher Kristallklassen oder deren Untergruppen immer die infinitesimale Translation, zu welcher kein eigenes Element in der Automorphismengruppe gehören kann, da sie mit dem identischen Automorphismus verknüpft ist. Der Zusammenhang zwischen Automorphismengruppe und Cheshire-Gruppe ist also nur für Raumgruppen des Typs 4 so einfach, wie in früheren Arbeiten (Fischer, 1971; Koch, 1973) dargestellt.

Zusammenfassend lässt sich sagen: Die vollen Automorphismengruppen der Raumgruppen sind im Gegensatz zu den Gruppen ihrer inneren Automorphismen immer unendliche Gruppen. Es gibt insgesamt 32 verschiedene Automorphismengruppen zu den Raumgruppen des R^3. Davon sind 17 einer Raum- und sieben einer Schichtgruppe isomorph. Die restlichen acht sind Gruppen affiner Abbildungen des R^3 isomorph. Drei davon besitzen einen dreidimensionalen Translationennormalteiler (die Automorphismengruppen zu $P\bar{1}$; $P2/m, P2_1/m$; $C2/m, P2/c, P2_1/c, C2/c$), je zwei einen zweidimensionalen bzw. eindimensionalen Translationennormalteiler (zu $P2, P2_1$; $C2$ bzw. zu Pm; Pc, Cm, Cc) und eine ist eine affine Punktgruppe (zu $P1$).

Bestimmung der Konfigurationslagen mit Hilfe der äusseren Automorphismen

Die Automorphismengruppen bilden nicht nur die Symmetrieoperationen der Raumgruppen aufeinander ab sondern auch die Punktsymmetriegruppen. Interpretiert man die Automorphismengruppen als Gruppen affiner Bewegungen des R^3, so werden auch die Fixpunktmengen der Symmetrieoperationen und Punktsymmetriegruppen, die Symmetrieelemente, einander zugeordnet. Deshalb ist jeder Automorphismus eindeutig mit einer Abbildung der Menge der Punktlagen einer Raumgruppe auf sich selbst verknüpft. Da die Anzahl der verschiedenen Punktlagen einer Raumgruppe aber immer endlich ist, existieren auch nur endlich viele Permutationen der Punktlagen. Es kann daher nicht jeder Automorphismus zu einer eigenen Abbildung der Punktlagen führen. Aus der Definition der Punktlage (vgl. Fischer & Koch, 1974) folgt, dass ein innerer Automorphismus jede Punktlage auf sich selbst abbildet und nur die Symmetrien der gleichen Punktlage untereinander vertauscht. Alle inneren Automorphismen führen also zur identischen Permutation der Punktlagen. Die äusseren Automorphismen dagegen können weitere Permutationen der Punktlagen erzeugen, sie müssen es jedoch nicht. Alle diese Permutationen der Punktlagen bilden ihrerseits wieder eine Gruppe, die der Gruppe aller Automorphismen der Raumgruppe homomorph ist. Punktlagen, welche durch diese Permutationsgruppe einander zugeordnet werden, gehören zur gleichen Konfigurationslage (Fischer & Koch, 1974).

Will man das Verhalten der Punktlagen der Raumgruppen unter den äusseren Automorphismen vollständig untersuchen, so kann man das in zwei Schritten tun: (1) Man fasst die Punktlagen einer Raumgruppe, die miteinander vertauschbar sind, zu Konfigurationslagen zusammen. (2) Man gibt die möglichen Permutationen explizit an.

Der erste dieser beiden Schritte liess sich für die meisten Raumgruppen leicht durchführen. Es können nämlich nur solche Punktlagen zur gleichen Konfigurationslage gehören, welche gleichartige Punktsymmetrien besitzen. Könnte man z.B. eine Punktlage der Punktsymmetrie 2 mit einer anderen der Punktsymmetrie *m* vertauschen, dann müssten $P2$ und Pm isomorph sein. Könnte man die Punktlagen auf den Spiegelebenen senkrecht zur *x*-Achse und senkrecht zur *y*-Achse aus $Amm2$ miteinander vertauschen, so müssten die Raumgruppen Pm und Cm isomorph sein. Eine weitere Einschränkung wird in folgendem Beispiel deutlich: In der Raumgruppe $Cccm$ besitzen die Punktlage (*i*) und (*k*) jeweils die Punktsymmetrie einer zweizähligen Achse parallel zur *c*-Achse. Im Fall (*i*) ist die zweizählige Drehung Teil der Punktsymmetrie 222 der Punktlage (*a*) und $2/m$ der Punktlage (*c*), im Falle (*k*) dagegen Teil der Punktsymmetrie $2/m$ der Punktlagen (*e*) und (*f*). Die Punktlagen (*i*) und (*k*) gehören also nicht zur gleichen Konfigurationslage, da ja sonst $P222$ und $P2/m$ isomorph sein müssten.

In allen Fällen liess sich entweder auf diese Weise ausschliessen, dass zwei Punktlagen der gleichen Konfigurationslage angehören, oder es liess sich ein Automorphismus finden, der die Punktlagen ineinander überführt. Es ergab sich nur ein Fall, in dem dieser Automorphismus zu einer affinen Abbildung entsprechend Typ *c* gehörte. Es handelt sich dabei um die Punktlagen (*a*) und (*b*) einerseits und (*c*) und (*d*) andererseits aus $C2/c$, die auch von Zimmermann & Burzlaff (1974) als Beispiel zitiert werden. Die Tabelle 3 enthält die Zuordnung aller Punktlagen zu den 1127 Konfigurationslagen.

Für den zweiten Schritt müsste untersucht werden, wie die Vertauschungen von Punktlagen miteinander gekoppelt sind. Hierzu werden keine expliziten Angaben gemacht, da die entsprechende Tabelle zu umfangreich würde. In der Raumgruppe $P\bar{1}$ z.B. gehören die

Tabelle 3. *Zuordnung der Punktlagen zu Konfigurationslagen*

Alle Punktlagen zur gleichen Konfigurationslage sind in Klammern eingeschlossen, Konfigurationslagen zu verschieden Gitterkomplexen sind durch Komma getrennt.

P1	(a)
$P\bar{1}$	(abcdefgh),(i)
P2	(abcd),(e)
$P2_1$	(a)
C2	(ab),(c)
Pm	(ab),(c)
Pc	(a)
Cm	(a),(b)
Cc	(a)
P2/m	(abcdefgh),(ijkl),(mn),(o)
$P2_1/m$	(abcd),(e),(f)
C2/m	(abcd),(ef),(gh),(i),(j)
P2/c	(abcd),(ef),(g)
$P2_1/c$	(abcd),(e)
C2/c	(abcd),(e),(f)
P222	(abcdefgh),(ijklmnopqrst),(u)
$P222_1$	(abcd),(e)
$P2_12_12$	(ab),(c)
$P2_12_12_1$	(a)
$C222_1$	(ab),(c)
C222	(abcd),(efgh),(ij),(k),(l)
F222	(abcd),(efghij),(k)
I222	(abcd),(efghij),(k)
$I2_12_12_1$	(abc),(d)
Pmm2	(abcd),(efgh),(i)
$Pmc2_1$	(ab),(c)
Pcc2	(abcd),(e)
Pma2	(ab),(c),(d)
$Pca2_1$	(a)
Pnc2	(ab),(c)
$Pmn2_1$	(a),(b)
Pba2	(ab),(c)
$Pna2_1$	(a)
Pnn2	(ab),(c)
Cmm2	(ab),(c),(de),(f)
$Cmc2_1$	(a),(b)
Ccc2	(ab),(c),(d)
Amm2	(ab),(c),(de),(f)
Abm2	(ab),(c),(d)
Ama2	(a),(b),(c)
Aba2	(a),(b)
Fmm2	(a),(b),(cd),(e)
Fdd2	(a),(b)
Imm2	(ab),(cd),(e)
Iba2	(ab),(c)
Ima2	(a),(b),(c)
Pmmm	(abcdefgh),(ijklmnopqrst),(uvwxyz),(α)
Pnnn	(abcd),(ef),(ghijkl),(m)
Pccm	(abcd)(efgh),(ijkl)(mnop),(q),(r)
Pban	(abcd),(ef),(ghij),(kl),(m)
Pmma	(abcd),(ef),(gh),(ij),(k),(l)
Pnna	(ab),(c),(d),(e)
Pmna	(abcd),(ef),(g),(h),(i)
Pcca	(ab),(c),(de),(f)
Pbam	(abcd),(ef),(gh),(i)
Pccn	(ab),(cd),(e)
Pbcm	(ab),(c),(d),(e)
Pnnm	(abcd),(ef),(g),(h)
Pmmn	(ab),(cd),(ef),(g)
Pbcn	(ab),(c),(d)
Pbca	(ab),(c)
Pnma	(ab),(c),(d)
Cmcm	(ab),(c),(d),(e),(f),(g),(h)
Cmca	(ab),(c),(d),(e),(f),(g)
Cmmm	(abcd),(ef),(ghij),(kl),(m),(no),(pq),(r)
Cccm	(ab)(cd),(ef),(gh),(ij),(k),(l),(m)
Cmma	(ab)(cdef),(g),(hijk)(l),(mn),(o)
Ccca	(ab),(cd),(ef)(g),(h),(i)
Fmmm	(ab),(cde)(f),(ghi),(jkl),(mno),(p)
Fddd	(ab),(cd),(efg),(h)
Immm	(abcd),(efghij),(k),(lmn),(o)
Ibam	(ab)(cd),(e),(fg),(hi),(j),(k)
Ibca	(ab),(cde),(f)
Imma	(abcd),(e),(fg),(hi),(j)
P4	(ab)(c),(d)
$P4_{1,3}$	(a)
$P4_2$	(ab),(c),(d)
I4	(a),(b),(c)
$I4_1$	(a),(b)
$P\bar{4}$	(abcd),(ef),(g),(h)
$I\bar{4}$	(abcd),(ef),(g)
P4/m	(abcd)(ef),(gh)(i),(jk),(l)
$P4_2/m$	(ab)(ef),(cd),(gh),(i),(j),(k)
P4/n	(ab)(de),(c),(f),(g)
$P4_2/n$	(ab)(cd),(e),(f),(g)
I4/m	(ab),(c)(d)(f),(e),(g),(h),(i)
$I4_1/a$	(ab),(cd),(e),(f)
P422	(abcd)(ef),(gh)(i),(jk),(lmno),(p)
$P42_12$	(ab),(c),(d),(ef),(g)
$P4_{1,3}22$	(ab),(c),(d)
$P4_{1,3}2_12$	(a),(b)
$P4_222$	(ab)(ef),(cd),(gh),(i),(jklm),(no),(p)
$P4_22_12$	(ab),(c),(d),(ef),(g)
I422	(ab),(c)(d),(e),(f),(g),(hi),(j),(k)
$I4_122$	(ab),(c),(de),(f),(g)
P4mm	(ab)(c),(d),(ef),(g)
P4bm	(a)(b),(c),(d)
$P4_2cm$	(ab)(c),(d),(e)
$P4_2nm$	(a),(b),(c),(d)
P4cc	(ab)(c),(d)
P4nc	(a),(b),(c)
$P4_2mc$	(ab),(c),(de),(f)
$P4_2bc$	(a)(b),(c)
I4mm	(a),(b),(c),(d),(e)
I4cm	(a)(b),(c),(d)
$I4_1md$	(a),(b),(c)
$I4_1cd$	(a),(b)
$P\bar{4}2m$	(abcd)(ef),(gh)(m),(ijkl),(n),(o)
$P\bar{4}2c$	(ac)(ef),(bd),(ghij),(kl),(m),(n)
$P\bar{4}2_1m$	(ab),(c),(d),(e),(f)
$P\bar{4}2_1c$	(ab),(c),(d),(e)
$P\bar{4}m2$	(abcd),(ef),(g),(hi),(jk),(l)
$P\bar{4}c2$	(ab)(cd),(ef),(gh),(i),(j)
$P\bar{4}b2$	(ab)(cd),(ef),(gh),(i)
$P\bar{4}n2$	(ab)(cd),(e)(h),(fg),(i)
$I\bar{4}m2$	(abcd),(ef),(gh),(i),(j)
$I\bar{4}c2$	(ad)(bc),(eh),(fg),(i)
$I\bar{4}2m$	(ab),(c)(d),(e),(fg),(h),(i),(j)
$I\bar{4}2d$	(ab),(c),(d),(e)
P4/mmm	(abcd)(ef),(gh)(i),(jk),(lmno),(pq),(r),(st),(u)
P4/mcc	(ac)(bd)(e)(f),(gh)(i),(j),(kl),(m),(n)
P4/nbm	(ab)(cd)(ef),(g)(h),(ij),(kl),(m),(n)
P4/nnc	(ab),(c)(d)(f),(e),(g),(h),(ij),(k)
P4/mbm	(ab)(cd),(e)(f),(gh),(ij),(k),(l)
P4/mnc	(ab),(c)(d),(e),(f),(g),(h),(i)
P4/nmm	(ab)(de),(c),(f),(gh),(i),(j),(k)
P4/ncc	(a)(b)(d),(c),(e),(f),(g)
$P4_2/mmc$	(ab)(ef),(cd),(gh),(i),(jklm),(n),(op),(q),(r)
$P4_2/mcm$	(ac)(bd)(e)(f),(gh)(k),(ij),(lm),(n),(o),(p)
$P4_2/nbc$	(a)(b)(c)(d)(e),(f)(g),(hi),(j),(k)
$P4_2/nnm$	(ab)(ef),(c)(d),(g),(h),(ij),(kl),(m),(n)
$P4_2/mbc$	(a)(b)(c)(d),(e)(f),(g),(h),(i)
$P4_2/mnm$	(ab),(c)(d),(e),(fg),(h),(i),(j),(k)
$P4_2/nmc$	(ab),(c),(d),(e),(f),(g),(h)
$P4_2/ncm$	(a)(b),(cd),(e),(f),(gh),(i),(j)
I4/mmm	(ab),(c)(d)(f),(e),(g),(h),(ij),(k),(l),(m),(n),(o)
I4/mcm	(a)(b)(c)(d)(e),(f)(g),(h),(i),(j),(k),(l),(m)
$I4_1/amd$	(ab),(cd),(e),(f),(g),(h),(i)
$I4_1/acd$	(a)(b)(c),(d),(e),(f),(g)
P3	(abc),(d)
$P3_{1,2}$	(a)
R3	(a),(b)
$P\bar{3}$	(ab),(c),(d),(ef),(g)
$R\bar{3}$	(ab),(c),(de),(f)
P312	(abcdef),(ghi),(jk),(l)
P321	(ab),(c),(d),(ef),(g)
$P3_{1,2}12$	(ab),(c)
$P3_{1,2}21$	(ab),(c)
R32	(ab),(c),(de),(f)
P3m1	(abc),(d),(e)
P31m	(a),(b),(c),(d)
P3c1	(abc),(d)
P31c	(a),(b),(c)
R3m	(a),(b),(c)
R3c	(a),(b)
$P\bar{3}1m$	(ab),(cd),(e),(fg),(h),(ij),(k),(l)
$P\bar{3}1c$	(a)(b),(cd),(e),(f),(g),(h),(i)
$P\bar{3}m1$	(ab),(c),(d),(ef),(gh),(i),(j)
$P\bar{3}c1$	(a)(b),(c),(d),(e),(f),(g)
$R\bar{3}m$	(ab),(c),(de),(fg),(h),(i)
$R\bar{3}c$	(a)(b),(c),(d),(e),(f)
P6	(a),(b),(c),(d)
$P6_{1,5}$	(a)
$P6_{2,4}$	(a),(b),(c)
$P6_3$	(a),(b),(c)
$P\bar{6}$	(abcdef),(ghi),(jk),(l)
P6/m	(ab),(cd),(e),(fg),(h),(i),(jk),(l)
$P6_3/m$	(a)(b),(cd),(e),(f),(g),(h),(i)
P622	(ab),(cd),(e),(fg),(h),(i),(jk),(lm),(n)
$P6_{1,5}22$	(a),(b),(c)
$P6_{2,4}22$	(ab), (cd),(e),(f),(gh),(ij),(k)
$P6_322$	(a)(b),(cd),(e),(f),(g),(h),(i)
P6mm	(a),(b),(c),(d),(e),(f)
P6cc	(a),(b),(c),(d)
$P6_3cm$	(a),(b),(c),(d)
$P6_3mc$	(a),(b),(c),(d)
$P\bar{6}m2$	(abcdef),(ghi),(jk),(lm),(n),(o)
$P\bar{6}c2$	(ace)(bdf),(ghi),(j),(k),(l)
$P\bar{6}2m$	(ab),(cd),(e),(fg),(h),(i),(jk),(l)
$P\bar{6}2c$	(a)(b),(cd),(e),(f),(g),(h),(i)
P6/mmm	(ab),(cd),(e),(fg),(h),(i),(jk),(lm),(n),(o),(pq),(r)
P6/mcc	(a)(b),(c)(d),(e),(f)(g),(h),(i),(j),(k),(l),(m)
$P6_3/mcm$	(a)(b),(c)(d),(e),(f),(g),(h),(i),(j),(k),(l)
$P6_3/mmc$	(a)(b),(cd),(e),(f),(g),(h),(i),(j),(k),(l)
P23	(ab),(cd),(e),(fi),(gh),(j)
F23	(abcd),(e),(fg),(h)
I23	(a),(b),(c),(d),(e),(f)
$P2_13$	(a),(b)
$I2_13$	(a),(b),(c)
Pm3	(ab),(cd),(eh),(fg),(i),(jk),(l)
Pn3	(a),(bc),(d),(e),(f),(g),(h)
Fm3	(ab),(c),(d),(e),(f),(g),(h),(i)
Fd3	(ab),(cd),(e),(f),(g)
Im3	(a),(b),(c),(d),(e),(f),(g),(h)
Pa3	(ab),(c),(d)
Ia3	(ab),(c),(d),(e)
P432	(ab),(cd),(ef),(g),(h),(ij),(k)
$P4_232$	(a),(bc),(d),(ef),(g),(h),(ij),(kl),(m)
F432	(ab),(c),(d),(e),(f),(gh),(i),(j)
$F4_132$	(ab),(cd),(e),(f),(g),(h)
I432	(a),(b),(c),(d),(e),(f),(g),(h),(i),(j)
$P4_{1,3}32$	(ab),(c),(d),(e)
$I4_132$	(ab),(cd),(e),(f),(gh),(i)
$P\bar{4}3m$	(ab),(cd),(e),(fg),(h),(i),(j)
$F\bar{4}3m$	(abcd),(e),(fg),(h),(i)
$I\bar{4}3m$	(a),(b),(c),(d),(e),(f),(g),(h)
$P\bar{4}3n$	(a),(b),(cd),(e),(f),(gh),(i)
$F\bar{4}3c$	(ab),(cd),(e),(fg),(h)
$I\bar{4}3d$	(ab),(c),(d),(e)
Pm3m	(ab),(cd),(ef),(g),(h),(ij),(kl),(m),(n)
Pn3n	(a),(b),(c),(d),(e),(f),(g),(h),(i)
Pm3n	(a),(b),(cd),(e),(f),(gh),(i),(j),(k),(l)
Pn3m	(a),(bc),(d),(e),(f),(g),(h),(ij),(k),(l)
Fm3m	(ab),(c),(d),(e),(f),(g),(hi),(j),(k),(l)
Fm3c	(a)(b),(c)(d),(e)(f),(g),(h),(i),(j)
Fd3m	(ab),(cd),(e),(f),(g),(h),(i)
Fd3c	(a),(b)(c),(d),(e),(f),(g),(h)
Im3m	(a),(b),(c),(d),(e),(f),(g),(h),(i),(j),(k),(l)
Ia3d	(a),(b),(c),(d),(e),(f),(g),(h)

acht speziellen Punktlagen (*a*)–(*h*) zur gleichen Konfigurationslage. Von den 8! möglichen Permutationen dieser Punktlagen ist wegen der Koppelung zwar nur $\frac{1}{30}$ zulässig; das sind aber immerhin noch 1344.

In diesem Zusammenhang sei auf eine Arbeit von Boyle & Lawrenson (1973) hingewiesen, in welcher alle die Permutationen der Punktlagen explizit angegeben werden, welche einer Translation in der Automorphismengruppe entsprechen, alle übrigen Permutationen aber unberücksichtigt bleiben.

Die hier vorgelegte Arbeit beruht auf Untersuchungen, die von uns im Fachbereich Geowissenschaften der Philipps-Universität Marburg mit Unterstützung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft durchgeführt wurden. Der deutschen Forschungsgemeinschaft gilt daher unser besonderer Dank.

Literatur

BIEBERBACH, L. (1912). *Math. Ann.* **72**, 400–412.
BOHM, J. & DORNBERGER-SCHIFF, K. (1967). *Acta Cryst.* **23**, 913–933.
BOYLE, L. & LAWRENSON, J. E. (1973). *Acta Cryst.* A**29**, 353–357.
FISCHER, W. (1971). *Z. Kristallogr.* **133**, 18–42.
FISCHER, W. & KOCH, E. (1974). *Z. Kristallogr.* **139**, 268–278.
HERMANN, C. (1960). *Z. Kristallogr.* **113**, 142–154.
HIRSHFELD, F. L. (1968). *Acta Cryst.* A**24**, 301–311.
International Tables for X-ray Crystallography (1965). Vol. I, 2nd ed. Birmingham: Kynoch Press.
KOCH, E. (1973). *Z. Kristallogr.* **138**, 196–215.
KUROSH, A. G. (1960). *Theory of Groups*, Vol. I. New York: Chelsea.
ZIMMERMANN, H. & BURZLAFF, H. (1974). *Z. Kristallogr.* **139**, 252–267.

Acta Cryst. (1975). A**31**, 95

Thermal Diffuse X-ray Scattering for Small Samples and Small Coherent Scattering Domains

BY J. P. URBAN

Department of Physics, University of the Witwatersrand, Johannesburg, South Africa

(*Received* 6 *May* 1974; *accepted* 19 *August* 1974)

The influences of sample size and mosaic block size upon X-ray thermal diffuse scattering have been investigated. Surface and edge vibrational modes were incorporated into the Debye spectrum. Two additional terms, which depend on the surface/volume and edge-length/volume ratios, appear therefore in the expression for the scattered intensity. The TDS contributions of the volume and surface terms to the integrated Bragg intensity are calculated numerically.

Introduction

Various authors have performed studies of the thermal diffuse scattering contributions to X-ray reflexions. The most recent of this is the refined model of Walker & Chipman (1972). But in all of these studies, the influences of mosaic particle size and sample size (in the case of powders the powder grain size) have been neglected. These influences become important for mosaic and grain sizes below $\simeq 250$ Å.

The influence of particle size on the Debye–Waller factor has been studied by Schoening (1968), whose work is based on the complete counting of vibrational frequencies through the introduction of surface and edge terms into the Debye spectrum. These additional terms were used first by Bolt (1939), Maa (1939) and Roe (1941).

The influences of the additional surface terms on the expression for the integrated one-phonon scattering of acoustic modes are discussed in the present paper. Furthermore, the effect of the size of coherent scattering domains will be considered.

It is useful to write the scattered X-ray intensity in terms of multiple-phonon processes:

$$I(\mathbf{b}) \propto I_0(\mathbf{b}) + I_1(\mathbf{b}) + \dots \quad (1)$$

$I_0(\mathbf{b})$ and $I_1(\mathbf{b})$ are the zero- and one-phonon intensity functions, which can be written as:

$$I_0(\mathbf{b}) = N/V_{el}\,\delta(\Delta\mathbf{b}) \quad (1a)$$

and

$$I_1(\mathbf{b}) = \tfrac{1}{2} \sum_{jk} G_{kj}\{I_0(\mathbf{b}+\mathbf{k}) + I_0(\mathbf{b}-\mathbf{k})\} \quad (1b)$$

where

$$G_{kj} = 4\pi^2 b^2 \cos^2 \xi_{kj} k_B T/\omega_{kj}^2 N m_{el} \quad (1c)$$

and $\delta(\Delta\mathbf{b})$ is a three-dimensional δ function.

$\mathbf{k}$ = wave vector of the phonons, $|\mathbf{k}| = 1/\lambda_{phon}$
V_{el} = volume of the elementary cell
m_{el} = mass of the elementary cell
N = number of the elementary cells in the crystal
ω_{kj} = frequency of a phonon of wave vector $\mathbf{k}$ and polarization j