

Durchdringungen von Kugelpackungen mit kubischer Symmetrie

VON WERNER FISCHER UND ELKE KOCH

Institut für Mineralogie, 44 Münster, Gievenbecker Weg 61, BR Deutschland

(Eingegangen am 17. Juli 1975; angenommen am 29. September 1975)

An interpenetrating sphere packing is defined as a set of crystallographically equivalent spheres, which form two or more sphere packings without mutual contact. All types of interpenetrating sphere packings with cubic symmetry have been deduced, using the known symmetry regions for cubic space groups. These 39 types show 12 different kinds of interpenetration. Different types are called related if an interpenetrating sphere packing of one type can be generated from another one by omitting contacts or spheres. All such relations are tabulated.

Einleitung

Wie Heesch & Laves (1933) gezeigt haben, gibt es homogene Kugelpackungen, in denen jede Kugel von jeder anderen aus über Kontakte zwischen den Kugeln erreichbar ist, obwohl die Kugeln den Raum nur zu einem sehr geringen Teil (minimal 5,6%) ausfüllen. Daher ist die Frage naheliegend, ob man mehrere solcher Kugelpackungen so ineinanderstellen kann, dass sie sich gegenseitig ungehindert durchdringen, d.h. dass sich nirgends Kugeln aus verschiedenen Einzelpackungen berühren oder überschneiden.

Tatsächlich sind einige solcher Fälle schon seit längerem bekannt. So erwähnt z.B. Hermann (1960), dass zu den Gitterkomplexen† Y^{**} und V^* keine zusammenhängenden Kugelpackungen gehören, sondern dass in beiden Fällen nur jeweils die Hälfte aller Kugeln von einer Ausgangskugel aus über Kontakte erreichbar ist. Fig. 1 und 2 zeigen, wie sich dabei die Einzelpackungen durchdringen. Ausserdem fand Fischer (1969) bei der Ableitung dünner tetragonaler Kugelpackungen vier Beispiele dafür, wie sich drei Einzelpackungen, und ein Beispiel dafür, wie sich fünf Einzelpackungen mit tetragonaler Gesamtsymmetrie gegenseitig durchdringen können. Bisher fehlte jedoch ein Überblick darüber, ob ein solches Durchdringen von Kugelpackungen häufiger auftritt. Deshalb wurden für das kubische Kristallsystem alle Möglichkeiten abgeleitet, wie Kugelpackungen einander so durchdringen können, dass all Kugeln symmetrisch gleichwertig sind.

Kugellagerungen

Eine unendliche Menge von Punkten, die dadurch erzeugt wird, dass man alle Symmetrioperationen einer Raumgruppe auf einen beliebigen Ausgangspunkt anwendet, werde homogene Punktanzordnung oder *Punktanordnung* genannt. Jeder solchen Punktanzordnung lässt sich eineindeutig eine Menge von Kugeln

mit folgenden Eigenschaften zuordnen: (1) Jeder Punkt der Punktanzordnung ist Mittelpunkt einer Kugel. (2) Alle Kugeln sind gleich gross, d.h. die Symmetrie der Kugelmenge stimmt mit der Symmetrie der Punktanzordnung überein. (3) Es existieren keine zwei Kugeln, die sich gegenseitig überschneiden. (4) Es existieren Kugeln, welche sich gegenseitig berühren. Eine solche Kugelmenge soll *Kugellagerung* genannt werden. Verzichtet man auf die Forderung (4), dann ist einer Punktanzordnung nicht mehr eindeutig eine Kugelmenge zugeordnet. Derartige Kugelmengen werden bei Sinogowitz (1943) *Kugellagen* genannt.

Wählt man aus einer Kugellagerung willkürlich eine Kugel als Ausgangskugel aus, so kann man über Kugelkontakte weitere Kugeln der Kugellagerung erreichen. Kommt man auf diese Weise zu sämtlichen Kugeln der Kugellagerung, so liegt eine *Kugelpackung* vor (vgl. Heesch & Laves, 1933; Nowacki, 1935; Sinogowitz, 1943; Fischer, 1971). Anderenfalls zerfällt die Kugellagerung in *Teillagerungen*, welche ihrerseits über Kugelkontakte zusammenhängen. Alle Teillagerungen, aus denen eine zerfallende Kugellagerung besteht, sind untereinander kongruent oder spiegelbildlich kongruent, da auch sie durch die Raumgruppensymmetrie aufeinander abgebildet werden. Kugellagerungen, deren Teillagerungen nur endlich viele Kugeln enthalten, sollen *polyedrische Kugellagerungen* heissen. Handelt es sich bei den Teillagerungen um eindimensional oder zweidimensional unendlich ausgedehnte Anordnungen, so soll von *balkenartigen* oder *schichtartigen Kugellagerungen* gesprochen werden. In jedem dieser drei Fälle zerfällt die Kugellagerung in unendlich viele Teillagerungen. Setzt sich die Kugellagerung jedoch nur aus endlich vielen Teillagerungen zusammen, so muss jede dieser Teillagerungen dreidimensional unendlich ausgedehnt, also eine Kugelpackung sein. Solche Kugellagerungen sollen *einander durchdringende Kugelpackungen* genannt werden.

Betrachtet man eine Kugellagerung, deren zugehörige Punktanzordnung eine Punktsymmetrie der Ordnung n besitzt, so wird eine bestimmte Ausgangskugel durch genau n Symmetrioperationen der Raum-

† Nomenklatur der Gitterkomplexe nach Donnay, Hellner & Niggli (1966).

gruppe (linksseitige Nebenklasse* bezüglich der Punktsymmetriegruppe der Ausgangskugel) auf jede andere Kugel der Kugellagerung abgebildet. Alle jene Symmetrieeoperationen der Raumgruppe, welche eine Ausgangskugel in ihre Nachbarkugeln überführen, d.h. in all diejenigen Kugeln, mit denen sie Kontakt hat, sollen *kontakterzeugende Symmetrieeoperationen* heißen. Sie erzeugen zusammen gerade die Symmetriegruppe derjenigen Teillagerung, zu der die Ausgangskugel gehört. Diese ist stets eine Untergruppe der Raumgruppe. Wird von den kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen die ursprüngliche Raumgruppe erzeugt, so bildet die Teillagerung selbst schon die gesamte Kugellagerung, d.h. es handelt sich um eine Kugelpackung (vgl. Fischer, 1971, 1973). Ist die Symmetriegruppe der Teillagerung zwar eine Raumgruppe, aber nicht mit der ursprünglichen Raumgruppe identisch, so besteht die Kugellagerung aus einander durchdringenden Kugelpackungen. In vielen Fällen ist die von den kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen erzeugte Untergruppe jedoch nur eine Schicht-, Balken- oder Punktgruppe, und es liegen entsprechend schichtartige, balkenartige oder polyedrische Kugellagerungen vor.

In Erweiterung des entsprechenden Begriffes für Kugelpackungen (Fischer, 1971) auf Kugellagerungen sollen alle solche Kugellagerungen zur gleichen *Symmetriesorte* gehören, deren entsprechende Punktfigurationen in der gleichen Raumgruppe realisiert sind und deren kontakterzeugende Symmetrieeoperationen durch einen Automorphismus der Raumgruppe aufeinander abgebildet werden.

In Anlehnung an Niggli (1927) kann man jede Punktage einer Raumgruppe in *Symmetriebereiche* einteilen. Ein Punkt soll zu den Symmetriebereichen aller der Symmetrieeoperationen gehören, welche aus ihm einen Nachbarpunkt mit kürzestem Abstand vom Ausgangspunkt erzeugen. Diese Symmetrieeoperationen sind aber gerade die kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen der zugehörigen Kugellagerung. Das bedeutet, dass man aus der Einteilung einer Punktage in Symmetriebereiche für jeden einzelnen Punkt die kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen entnehmen kann. Lässt man also den Mittelpunkt der Ausgangskugel einer Kugellagerung innerhalb der Symmetriebereiche der zugehörigen kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen wandern, so ändert sich die Symmetriesorte nicht. Wandert der Mittelpunkt jedoch aus dem Inneren eines Symmetriebereiches auf dessen Rand oder umgekehrt, dann ändern sich die kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen, d.h. es entstehen

andere Kontakte zwischen den Kugeln und die Symmetriesorte der Kugellagerung wechselt.

Die Symmetriebereiche verschiedener Symmetrieeoperationen können insgesamt übereinstimmen. Dies ist z.B. bei gleichartigen Translationen oder bei einer Symmetrieeoperation mit zugehöriger inverser Symmetrieeoperation immer der Fall. Zusätzlich haben in speziellen Punktlagen alle Symmetrieeoperationen, die den gleichen Nachbarpunkt erzeugen, identische Symmetriebereiche. Dasselbe gilt auch für Symmetrieeoperationen, welche Nachbarpunkte erzeugen, die in bezug auf die Punktsymmetriegruppe der Ausgangskugel gleichwertig sind. Gehört nur ein Teil der Punkte eines Symmetriebereichs zum Symmetriebereich einer weiteren Symmetrieeoperation, so müssen alle diese Punkte Randpunkte des ersten Symmetriebereichs sein.

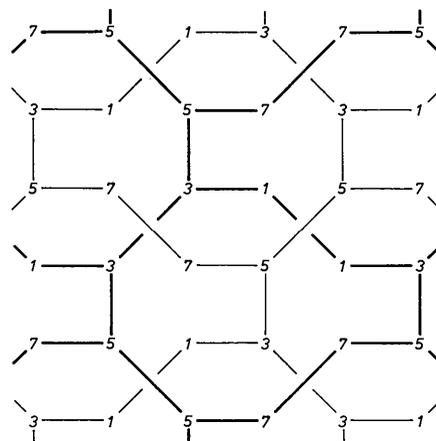


Fig. 1. Einander durchdringende Kugelpackungen zu Y^{**} , z-Koordinaten der Kugelmittelpunkte in $n/8$ der Gitterkonstanten.

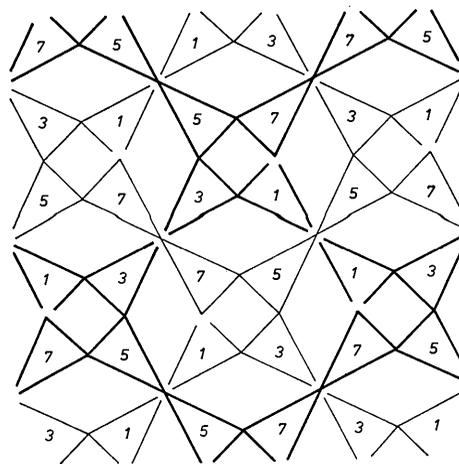


Fig. 2. Einander durchdringende Kugelpackungen zu V^* , z-Koordinaten der Dreiecksmittelpunkte in $n/8$ der Gitterkonstanten.

* Das Produkt s_2s_1 zweier Symmetrieeoperationen bedeute, dass s_1 vor s_2 ausgeführt wird. Ist P die Punktsymmetriegruppe der Ausgangskugel und s eine Symmetrieeoperation, welche die Ausgangskugel auf eine bestimmte zweite Kugel abbildet, dann bilden sämtliche Elemente der linksseitigen Nebenklasse sP die Ausgangskugel ebenfalls auf diese zweite Kugel ab. Die Elemente der rechtsseitigen Nebenklasse Ps sind gerade alle zu s bezüglich P gleichwertigen Elemente $ps^{-1}sp_1$.

Einander durchdringende Kugelpackungen können in allgemeinen Punktlagen genau wie Kugelpackungen nur dann entstehen, wenn die Punkte der zugehörigen Punktfigurationen auf Symmetriebereichsgrenzen liegen (vgl. Niggli 1927, 1928; Fischer 1971), da Symmetrieeoperationen mit identischen Symmetriebereichen in einer allgemeinen Punktlage normalerweise keine Raumgruppe* erzeugen. Sie führen höchstens auf eine Schichtgruppe, wie z.B. die vier einfachsten mit einer n -Gleitspiegelebene verknüpften Symmetrieeoperationen. Diese Aussage lässt sich jedoch nicht auf spezielle Punktlagen übertragen, da in diesen die Symmetriebereiche von sehr viel mehr und auch von ganz verschiedenartigen Symmetrieeoperationen übereinstimmen können.

* Die einzige Ausnahme für der artiges Auftreten von Kugelpackungen bilden die Raumgruppenexemplare $P1$ mit $a=b=c$. Solche Kugelpackungen entsprechen speziellen Bravaisgittern und lassen sich daher nicht ineinanderstellen.

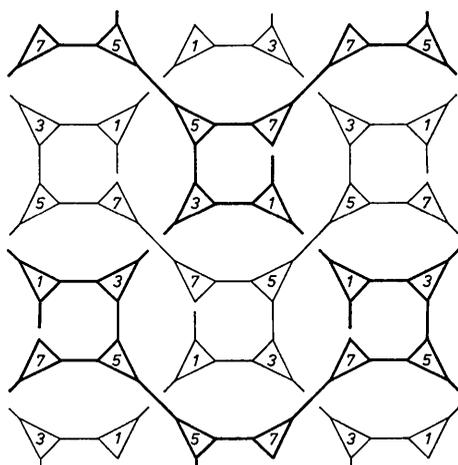


Fig. 3. Einander durchdringende Kugelpackungen zu $[3/3/c]_{II}^2$. z-Koordinaten der Dreiecksmittelpunkte in $n/8$ der Gitterkonstanten.

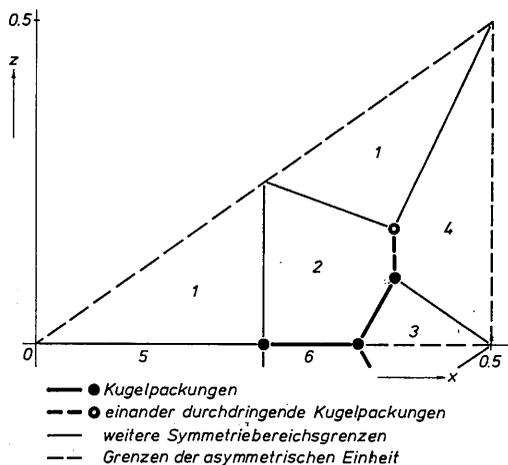


Fig. 4. Symmetriebereiche und Existenzfelder für Symmetriesorten von Kugellagerungen zu $Pn3m(k) \ xxz$.

Ableitung aller Typen einander durchdringender Kugelpackungen mit kubischer Gesamtsymmetrie

Die Symmetriebereichsrechnungen, mit deren Hilfe Fischer (1973, 1974) die kubischen Kugelpackungen abgeleitet hatte, bildeten die Grundlage für die Bestimmung der Typen einander durchdringender Kugelpackungen mit kubischer Gesamtsymmetrie. Vollkommen analog war es auch hierbei möglich, die Untersuchungen auf eine Punktlage zu jedem kubischen Gitterkomplex und innerhalb dieser Punktlage auf die Punkte einer asymmetrischen Einheit der Cheshire-Gruppe, die in diesen Fällen der Automorphismengruppe der zugehörigen Raumgruppe isomorph ist, zu beschränken (vgl. Hirshfeld, 1968; Fischer & Koch, 1974; Koch & Fischer, 1975). Die Symmetriesorten von Kugellagerungen, die sich aus der Einteilung dieser Punktlagen in Symmetriebereiche ergeben, mussten daraufhin untersucht werden, ob die zugehörigen kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen ein Erzeugendensystem irgendeiner Raumgruppe bilden. Solche Symmetriesorten, welche in Punktlagen mit drei Freiheitsgraden nicht zu Symmetriebereichsgrenzen gehören (siehe oben) und solche, welche zu den bekannten Kugelpackungen führen, konnten ausgeschlossen werden.

Zur Veranschaulichung des Verfahrens diene der einzige bivariate Gitterkomplex des kubischen Kristallsystems, für den einander durchdringende Kugelpackungen existieren. Seine charakteristische Punktlage ist $Pn3m(k)$. Entsprechend der Cheshire-Gruppe $Im3m$ von $Pn3m$ muss der Teil der Punktlage (k) mit $0 < x < \frac{1}{2}$, $0 \leq z < x$ betrachtet werden. Wie Fig. 4 zeigt, wird er in vier zweidimensionale Symmetriebereiche geteilt. Tabelle 1 enthält für diese vier Symmetriebereiche sowie für die beiden bei $z=0$ an den Untersuchungsbereich angrenzenden Symmetriebereiche die Koordinaten der Mittelpunkte der zugehörigen Nachbarkugeln und die kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen. In Tabelle 2 sind für diese Symmetriebereiche und für alle Grenzen erzeugenden Symmetrieeoperationen erzeugten Gruppen angegeben. Ausserdem sind die zugehörigen Teillagerungen beschrieben. Dabei sind die Kugelpackungen durch das Referenzsymbol (Fischer, 1973, 1974) für den entsprechenden Kugelpackungstyp gekennzeichnet. Bei einander durchdringenden Kugelpackungen lassen sich Typ und Referenzsymbol für die zugehörigen Einzelpackungen in den Tabellen von Fischer (1973) finden, wenn man mit halbierten Parametern in der Raumgruppe $Fd3m$ nachschlägt. Ausser dem Referenzsymbol für die Einzelpackung in eckigen Klammern ist die Anzahl der Einzelpackungen in den betreffenden Kugellagerungen als Exponent angegeben.

Ergebnisse

Auf die oben beschriebene Weise wurden für sämtliche kubischen Gitterkomplexe die Symmetriesorten ein-

Tabelle 1. Symmetriebereiche für $Pn3m(k)$

Symmetrie- bereich	Nachbarkugeln	Kontakterzeugende Symmetrieeoperationen
1	zxx xzx	$m(xy\bar{x})$ } $3(xxx)$ $m(xy\bar{y})$ }
2	$\frac{1}{2}-z, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x$ $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-z, \frac{1}{2}-x$	$2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$ } $\bar{3}(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x)$ $2(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-x, x)$ }
3	$1-x, x, \bar{z}$ $x, 1-x, \bar{z}$	$2(\frac{1}{2}y0)$ } $\bar{4}_z(\frac{1}{2}\bar{1}0)$ $2(x\frac{1}{2}0)$ }
4	$1-x, 1-x, z$	$2(\frac{1}{2}\bar{1}z), m(1-x, x, z)$
5	$\bar{z}x\bar{x}$ $x\bar{z}\bar{x}$	$m(xy\bar{x})$ } $3(\bar{x}\bar{x}x)$ $m(xy\bar{y})$ }
6	$\frac{1}{2}+z, \frac{1}{2}-x, -\frac{1}{2}+x$ $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+z, -\frac{1}{2}+x$	$2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x)$ } $\bar{3}(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, -\frac{1}{2}+x)$ $2(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}+x, x)$ }

Tabelle 2. Symmetriesorten der Kugellagerungen zu $Pn3m(k)$

Symmetrie- bereiche	Symmetrie der Teillagerung	Teillagerung
1	$3m$	Dreieck um xxx
2	$\bar{3}m$	gewelltes Sechseck um $\frac{1}{2}\bar{1}\bar{1}$
3	$\bar{4}2m$	gewelltes Quadrat um $\frac{1}{2}\bar{1}0$
4	$mm2$	Hantel um $\frac{1}{2}\bar{1}z$
1, 2	$\bar{3}m$	Oktaeder um $\frac{1}{2}\bar{1}\bar{1}$
1, 4	$\bar{4}3m$	abgestumpftes Tetraeder um $\frac{1}{2}\bar{1}\bar{1}$
1, 5	$\bar{4}3m$	3,4-Kuboktaeder um 000
2, 3	$Pn3m$	$4/4/c7$
2, 4	$(Fd3m)_2$	$[3/6/c3]^2$
2, 6	$Pn3m$	$4/4/c3$
3, 4	$\bar{4}2m$	Tetraeder um $\frac{1}{2}\bar{1}0$
1, 2, 4	$(Fd3m)_2$	$[5/3/c10]^2$
2, 3, 4	$Pn3m$	$5/3/c9$
2, 3, 6	$Pn3m$	$6/3/c6$
1, 2, 5, 6	$Pn3m$	$8/3/c2$

ander durchdringender Kugelpackungen abgeleitet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 3 zusammengefasst. Sie sind nach den Typen der zugehörigen Einzelpackungen (Spalte 1) geordnet. Im allgemeinen liegt der gleiche Kugelpackungstyp bei verschiedenen Symmetriesorten einander durchdringender Kugelpackungen nur dann vor, wenn die zugehörigen Gitterkomplexe über Grenzformen bzw. umfassende Gitterkomplexe (vgl. Koch, 1974) miteinander verknüpft sind. In allen diesen Fällen war die Zuordnung der einander durchdringenden Kugelpackungen zu Typen kein Problem. Eine Ausnahme bilden lediglich die einander durchdringenden Kugelpackungen, welche sich aus Einzelpackungen des Typs $3/3/c1$, zu dem auch die von Heesch & Laves (1933) gefundene 'dünnste Kugelpackung' gehört, aufbauen. Man kann nämlich zwei, vier oder acht solcher Einzelpackungen ineinanderstellen, um eine Kugellagerung zu erzeugen. Das führt natürlich zu verschiedenen Typen einander durchdringender Kugelpackungen. Ausserdem gibt es aber auch Symmetriesorten, welche aus der gleichen Anzahl Einzelpackungen des Typs $3/3/c1$ bestehen und zwischen denen sich keine Grenzform-Beziehung finden lässt.

Die genauere Untersuchung dieser Fälle zeigte, dass man verschiedene Arten der Durchdringung unterscheiden muss, je nachdem, wie die Maschen der verschiedenen Teilpackungen durcheinander durchgreifen. Diese verschiedenen Arten werden in Tabelle 3 durch römische Indizes unterschieden.

Sieht man von den Details der jeweiligen Einzelpackung ab und betrachtet nur die gegenseitige Verflechtung der verschiedenen Einzelpackungen, so lässt sich die Art der Durchdringung von Kugelpackungen auch bei verschiedenen Typen miteinander vergleichen. Ersetzt man z.B. in $[3/3/c1]_{III}^2$, einer der Möglichkeiten, wie sich zwei der 'dünnsten Kugelpackungen' ineinanderstellen lassen, jedes der Dreiecke (siehe Fig. 3) durch nur eine Kugel mit drei Kontakten, so erhält man eine Kugellagerung, die dem Gitterkomplex Y^{**} (siehe Fig. 1) entspricht. Fasst man andererseits alle die Paare benachbarter Kugeln zusammen, welche über eine achsenparallele zweizählige Achse miteinander verknüpft sind, so ergibt sich eine Kugellagerung zu V^* (vgl. Fig. 2). Die Einzelpackungen zu Y^{**} , V^* und $[3/3/c1]_{III}^2$ durchdringen einander auf die gleiche Art. Die Unterschiede zwischen diesen Kugellagerungen stehen nur in der Maschengrösse und der Existenz solcher Maschen, welche für die Durchdringung nicht wesentlich sind.

In diesem Sinne wurde die Art der Durchdringung für alle 39 Typen einander durchdringender Kugelpackungen miteinander verglichen. Dabei wurden nur 12 verschiedene Arten der Durchdringung gefunden. Sie sind in Tabelle 3 in Spalte 2 durch kleine Buchstaben gekennzeichnet. Spalte 3 enthält die Raumgruppe und Punktlage für die verschiedenen Symmetriesorten zu einem Typ. In Spalte 4 sind die kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen für Punktlagen mit drei Freiheitsgraden oder aber die Mittelpunkte der Nachbarkugeln in allen anderen Fällen angegeben. Als Ausgangspunkt wurde immer der in den *International Tables for X-ray Crystallography* (1965) für die Punktlage zuerst aufgeführte Punkt gewählt. Spalte 5 enthält die Symmetriegruppe der Einzelpackung, d.h. die von den kontakterzeugenden Symmetrieeoperati-

Tabelle 3. Typen einander durchdringender Kugelpackungen

1	2	3	4	5	6	7
$[3/3/c1]_i^2$	<i>e</i>	<i>I4₁32</i>	$3(xxx); 2(\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}, x)$	<i>P4₁32</i>	2	$2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x) 4/3/c25 - 2(\frac{1}{4}y0) 4/3/c22 - 2(x, -\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}) 4/3/c21 - 2(x0\bar{x}) 4/3/c19 - 2(\frac{1}{8}, x, -\frac{1}{4}+x) 4/3/c21 - 2(0\frac{1}{2}z) 4/3/c20 - 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}-x) 4/3/c24$
$[3/3/c1]_{ii}^1$	<i>f</i>	<i>I4₁32</i>	$2(\frac{1}{4}y0); 3(xxx)$	<i>I2₁3</i>	2	$2(\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}, x) 4/3/c22 - 2(x, -\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}) 4/3/c19 - 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}+x) 4/3/c20 - 2(x, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}) 4/3/c23 - 2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x) 4/3/c26$
$[3/3/c1]_{iii}^1$	<i>a</i>	<i>Ia3d(g)</i> <i>Ia3</i> <i>I\bar{4}3d</i>	$x, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}; \frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x; \frac{1}{8}, \bar{x}, \frac{1}{4}+x$ $2(\frac{1}{4}y0); 3(xxx)$ $2(\frac{1}{4}y0); 3(xxx)$	<i>I4₁32(h)</i> <i>I2₁3</i> <i>I2₁3</i>	0 2 2	$0, 1250, 0, 0580, 0, 1920$ $\bar{3}(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}+x, -\frac{1}{4}-x) 5/3/c16 - 2(0\frac{1}{2}z) [4/3/c4]^2 - \bar{3}(x, \frac{1}{2}+x, \bar{x}) 5/3/c17 - \bar{3}(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-x) 5/3/c3 - \bar{3}(\frac{1}{2}+x, \bar{x}, x) 5/3/c16 - 2(x0\frac{1}{4}) [4/3/c4]^2 - \bar{3}(\frac{1}{4}+x, -\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-x) 5/3/c17 - \bar{3}(xxx) 5/3/c3$ $4_z(0\frac{1}{4}\frac{1}{8}) 5/3/c36 - 2(0\frac{1}{2}z) [4/3/c4]^2 - 4_y(\frac{1}{4}\frac{1}{8}0) 5/3/c35 - 4_x(\frac{1}{4}\frac{1}{8}\frac{1}{8}) 5/3/c34 - 4_x(\frac{1}{8}0\frac{1}{4}) 5/3/c34$
$[3/3/c1]_i^1$	<i>g</i>	<i>Ia3d</i>	$3(xxx); 2(\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}, x)$	<i>P4₁32</i>	2	$2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x) [4/3/c25]^2 - 2(\frac{1}{4}y0) [4/3/c22]^2 - \bar{3}(xxx) - 5/3/c43 - 2(0\frac{1}{2}z) [4/3/c20]^2 - 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}-x) [4/3/c24]^2$
$[3/3/c1]_{ii}^1$	<i>h</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{4}y0); 3(xxx)$	<i>I2₁3</i>	2	$2(\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}, x) [4/3/c22]^2 - \bar{3}(xxx) [5/3/c3]^2 - 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}+x) [4/3/c20]^2 - 2(x, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}) [4/3/c23]^2 - 2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x) [4/3/c26]^2$
$[3/3/c1]_{iii}^1$	<i>i</i>	<i>P4₂32(k)</i> <i>P23</i> <i>F4₁32</i>	$x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{4}; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{4}, x; \frac{1}{4}, \bar{x}, \frac{1}{2}+x$ $2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx)$ $3(\bar{x}\bar{x}x); 2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x)$	<i>(I4₁32)₂(h)</i> <i>(I2₁3)₂</i> <i>P4₃32</i>	0 2 2	$0, 2500, 0, 1160, 0, 3840$ $3(x\bar{x}\bar{x}) 5/3/c5 - 2(x\frac{1}{2}0) 4/3/c7 - 2(\frac{1}{2}z) 4/3/c11 - 3(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x) 5/3/c5 - 2(\frac{1}{2}0z) 4/3/c7 - 2(x00) 4/3/c11$ $3(x\bar{x}x) 5/3/c19 - 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}-x) 4/3/c9 - 2(\frac{1}{4}z) 4/3/c14 - 3(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}+x, -\frac{1}{4}-x) 5/3/c19 - 2(\frac{1}{4}+x, x, \frac{1}{8}) 4/3/c9 - 2(x00) 4/3/c14$
$[3/3/c1]_i^0$	<i>j</i>	<i>I23</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx)$	<i>(I2₁3)₂</i>	2	$2(x00) [4/3/c11]^2 - 3(\bar{x}, \frac{2}{3}+x, -\frac{1}{3}-x) 5/3/c13$
$[3/3/c1]_{ii}^0$	<i>k</i>	<i>Fd\bar{3}c</i>	$3(\bar{x}\bar{x}x); 2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x)$	<i>P4₃32</i>	2	$2(x00) [4/3/c14]^2 - 3(x\bar{x}x) [5/3/c19]^2 - \bar{3}(\frac{1}{8}-x, \frac{1}{8}-x, -\frac{1}{8}+x) 5/3/c39$
$[3/4/c5]^2$	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{4}y0); 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}-x)$	<i>I4₁32</i>	1	$2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x) [4/3/c27]^2 - \bar{3}(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}+x, -\frac{1}{4}-x) 5/4/c7$
$[3/4/c6]^2$	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}-x); 2(\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}, x); 2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x)$	<i>I4₁32</i>	1	$2(\frac{1}{4}y0) [4/3/c27]^2 - 3(x\bar{x}x) [5/3/c30]^2$
$[3/4/c7]^2$	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{4}y0); 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}-x); 2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x)$	<i>I4₁32</i>	1	$2(\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}, x) [4/3/c27]^2 - 3(x\bar{x}x) [5/3/c31]^2$
$[3/6/c3]^2$	<i>b</i>	<i>Pn3m(k)</i> <i>Pn3</i> <i>P4₁32</i> <i>Fd\bar{3}c</i> <i>Fd\bar{3}c</i>	$\frac{1}{2}-z, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x; \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-z, \frac{1}{2}-x; 1-x, 1-x, z$ $2(x00); \bar{3}(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-x)$ $2(x00); 2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{4}, x); 2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{4})$ $2(x00); \bar{3}(\frac{1}{8}-x, \frac{1}{8}-x, -\frac{1}{8}+x)$ $2(x00); 2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x); 2(x, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{8})$	<i>(Fd3m)₂(g)</i> <i>(Fd3)₂</i> <i>(F4₁32)₂</i> <i>Fd3</i> <i>F4₁32</i>	1 2 1 2 1	$zxx; xzx [5/3/c10]^2 - 1-x, x, \bar{z}; x, 1-x, \bar{z} 5/3/c9$ $3(x\bar{x}x) [5/3/c10]^2 - \bar{3}(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}-x, -\frac{1}{4}+x) 5/4/c2 - 2(\frac{1}{2}y0) 4/4/c10 - 2(\frac{1}{2}0z) 4/4/c10 - \bar{3}(\frac{1}{4}-x, -\frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}-x) 5/4/c2$ $3(x\bar{x}x) [5/3/c10]^2 - 2(\frac{1}{2}y0); 2(\frac{1}{2}0z) 5/3/c9$ $3(\bar{x}\bar{x}x) [5/3/c10]^2 - 2(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x) 4/5/c1 - \bar{4}_x(\frac{1}{4}00) 5/3/c9 - 2(\frac{1}{4}-x, \bar{x}, \bar{x}) 4/5/c1$ $3(x\bar{x}x) [5/3/c10]^2 - 4_x(\frac{1}{4}00) 5/3/c9$
$[3/6/c5]^2$	<i>c</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{4}y0); \bar{3}(xxx)$	<i>Ia3</i>	2	$3(x\bar{x}x) [5/3/c3]^2 - 2(\frac{1}{4}+x, \frac{1}{8}, x) 4/4/c23 - 2(x, -\frac{1}{4}+x, -\frac{1}{8}) 4/5/c2 - 4_y(\frac{1}{4}\frac{1}{8}0) 5/3/c40 - 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}+x) 4/5/c3$
$[3/8/c2]^2$	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{4}y0); 2(\frac{1}{8}, x, \frac{1}{4}+x); 2(x, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{8})$	<i>I4₁32</i>	1	$3(x\bar{x}x) [5/3/c28]^2 - \bar{4}_x(\frac{1}{4}\frac{1}{8}0) 5/3/c44$
$[3/10/c1]^2$	<i>a</i>	<i>Ia3d(b)</i> <i>Ia3(c)</i> <i>I\bar{4}3d(c)</i>	$\frac{1}{10}\frac{3}{8}, \frac{3}{10}\frac{1}{8}, \frac{1}{10}\frac{1}{8}$ $x, \bar{x}, \frac{1}{2}-x; \bar{x}, \frac{1}{2}-x, x; \frac{1}{2}-x, x, \bar{x}$ $\frac{1}{2}-x, x, \bar{x}$ $\frac{1}{2}-x, x, \bar{x}$	<i>I4₁32(a), (b)</i> <i>I2₁3(a)</i> <i>I2₁3(a)</i>	0 1 1	$\bar{x}\bar{x}\bar{x} 4/6/c4 - \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x 4/6/c4$ $\frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}+x; -\frac{1}{4}+x, -\frac{1}{4}+x, -\frac{1}{4}+x 5/5/c1$
$[4/3/c1]^2$	<i>a</i>	<i>Ia3d(c)</i> <i>Ia3(d)</i> <i>I\bar{4}3d(d)</i> <i>Pa3</i>	$0\frac{1}{4}\frac{1}{8}; 0\frac{1}{4}\frac{1}{8}; \frac{1}{4}\frac{1}{8}0; \frac{1}{4}\frac{1}{8}\frac{1}{8}$ $0\frac{1}{4}x; 0\frac{1}{4}\frac{1}{2}-x; \frac{1}{4}x0; \frac{1}{4}\bar{x}\frac{1}{2}$ $0\frac{1}{4}x; 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}-x; \frac{1}{4}x0; \frac{1}{4}\bar{x}\frac{1}{2}$ $3(x\bar{x}x); 3(\frac{1}{2}-x, x, \bar{x})$	<i>I4₁32(c), (d)</i> <i>I2₁3(b)</i> <i>I2₁3(b)</i> <i>P2₁3</i>	0 1 1 2	$0\bar{x}\bar{x}; 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}+x; \bar{x}\bar{x}0; \frac{1}{4}x\frac{1}{2} 8/3/c2 - \frac{1}{4}\bar{x}x; \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}-x; \frac{1}{4}, -\frac{1}{2}+x, 0; \frac{1}{4}, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{4} 8/3/c2 - \frac{1}{4}-x, 0, \frac{1}{4} 5/3/c2 - \frac{1}{4}-x, 0, \frac{1}{4} 5/3/c2$ $\bar{3}(x\bar{x}x) 6/3/c19 - \bar{3}(\frac{1}{2}-x, x, \bar{x}) 6/3/c19 - \bar{3}(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-x, \bar{x}) 6/3/c21 - \bar{3}(\bar{x}, \frac{1}{2}-x, x) 6/3/c21$
$[4/3/c4]^2$	<i>a</i>	<i>Ia3d(g)</i> <i>Ia3</i> <i>I\bar{4}3d</i>	$x, \frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}; \frac{1}{4}-x, \frac{1}{8}, x; \frac{1}{8}, x, -\frac{1}{4}+x; \frac{1}{8}, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{4}-x$ $2(\frac{1}{4}y0); 2(0\frac{1}{2}z); 3(x\bar{x}x)$ $2(\frac{1}{4}y0); 2(0\frac{1}{2}z); 3(x\bar{x}x)$	<i>I4₁32(h)</i> <i>I2₁3</i> <i>I2₁3</i>	0 1 1	$0, 1250, 0, 2286, 0, 0214$ $\bar{3}(\frac{1}{4}-x, \frac{1}{4}+x, -\frac{1}{4}-x) 6/3/c23 - \bar{3}(x, \frac{1}{2}+x, \bar{x}) 6/3/c23$ $4_z(0\frac{1}{4}\frac{1}{8}) 6/3/c29 - 4_x(\frac{1}{4}\frac{1}{8}0) 6/3/c29$

Tabelle 3 (Fort.)

1	2	3	4	5	6	7
[4/3/c6] ²	<i>b</i>	<i>Pn3m(e)</i>	$x\bar{x}\bar{x}; \bar{x}x\bar{x}; \bar{x}\bar{x}x;$ $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x$	$(Fd3m)_2(e)$	0	0,1372, 0,1372, 0,1372
[4/3/c11] ²	<i>c</i>	<i>I23</i>	$2(x00); 2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx)$	<i>P23</i>	1	$3_1(\bar{x}, \frac{2}{3}+x, -\frac{1}{3}-x) 6/3/c16 - 3_1(\bar{x}, \frac{2}{3}+x, -\frac{1}{3}-x);$ $3_2(\frac{1}{2}-x, \bar{x}, \frac{1}{2}+x); 2(\frac{1}{2}0z) 9/3/c4$
[4/3/c13] ²	<i>d</i>	<i>Ia3</i>	$3(xxx);$ $3(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+x, -\frac{1}{2}-x)$	<i>Pa3</i>	2	$3(xxx) 6/3/c22 - 2(\frac{1}{2}y0) 5/3/c16 - 2(0\frac{1}{2}z) 5/3/c17$
[4/3/c14] ²	<i>b</i>	<i>Fd3c</i>	$2(x00); 3(\bar{x}\bar{x}x);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>F4_32</i>	1	$3(xxx) [6/3/c25]^2 - 3(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, -\frac{1}{2}+x) 6/3/c34$
[4/3/c15] ²	<i>b</i>	<i>P4_32</i>	$2(x00); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	$(F4_32)_2$	1	$2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}) [5/3/c10]^2 - 3(\bar{x}\bar{x}x); 2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x) 7/3/c1$
		<i>Fd3c</i>	$2(x00); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>F4_32</i>	1	$2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}) [5/3/c10]^2 - 3(\bar{x}\bar{x}x) [6/3/c25]^2$
[4/3/c20] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}+x)$	<i>I4_32</i>	1	$2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}) [5/3/c28]^2 - 3(xxx) 6/3/c38$
[4/3/c22] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x)$	<i>I4_32</i>	1	$2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x) [5/3/c29]^2 - 3(xxx) 6/3/c39$
[4/3/c23] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx);$ $2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2})$	<i>I4_32</i>	1	$2(\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}+x) [5/3/c28]^2 - 2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x) [5/3/c31]^2$
[4/3/c24] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$3(xxx); 2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-x);$ $2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x)$	<i>I4_32</i>	1	$2(0\frac{1}{2}z) [5/3/c28]^2 - 2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x) [5/3/c30]^2$
[4/3/c25] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$3(xxx); 2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>I4_32</i>	1	$2(\frac{1}{2}y0) [5/3/c29]^2 - 2(\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}-x) [5/3/c30]^2$
[4/3/c26] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>I4_32</i>	1	$2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x) [5/3/c29]^2 - 2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}) [5/3/c31]^2$
[4/3/c27] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 2(\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}-x);$ $2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x); 2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>I4_32</i>	0	0,1768, 0,1768, 0
[5/3/c3] ²	<i>c</i>	<i>Im3m(e)</i>	$00x; 00\bar{x}; 0x0; 0\bar{x}0;$ $1-x, 0, 0$	<i>Pm3m(e)</i>	0	0,2929, 0, 0
[5/3/c10] ²	<i>b</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx); 3(xxx)$	<i>Ia3</i>	1	$2(\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}+x) 6/3/c38 - 2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x) 6/3/c39$
		<i>Pn3m(k)</i>	$zxx, xzx;$ $\frac{1}{2}-z, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x;$ $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-z, \frac{1}{2}-x;$ $1-x, 1-x, z$	$(Fd3m)_2(g)$	0	0,3928, 0,3928, 0,1786
		<i>Pn3</i>	$2(x00); 3(xxx);$ $3(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x)$	$(Fd3)_2$	1	$3(\bar{x}\bar{x}x); 3(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, -\frac{1}{2}+x) 9/3/c3 - 3(\bar{x}\bar{x}\bar{x});$ $3(\frac{1}{2}-x, -\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-x) 9/3/c3$
		<i>P4_32</i>	$2(x00); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x); 2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2})$	$(F4_32)_2$	0	0,3214, 0,1036, 0,1036
		<i>Fd3c</i>	$2(x00); 3(\bar{x}\bar{x}x);$ $3(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, -\frac{1}{2}+x)$	<i>Fd3</i>	1	$2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x) 6/3/c34 - 2(\frac{1}{2}+x, x, \frac{1}{2}) 6/3/c34$
		<i>Fd3c</i>	$2(x00); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x); 2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2})$	<i>F4_32</i>	0	0,1607, 0,0536, 0,0536
[5/3/c19] ²	<i>b</i>	<i>Fd3c</i>	$3(xxx); 3(\bar{x}\bar{x}x);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>F4_32</i>	1	$2(x00) [6/3/c25]^2 - 3(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-x, -\frac{1}{2}+x);$ $2(\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}-x) 8/3/c2$
[5/3/c28] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx);$ $2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}); 2(\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}+x)$	<i>I4_32</i>	0	0,1523, -0,0341, 0,0591
[5/3/c29] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x); 2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>I4_32</i>	0	0,1544, 0,0574, 0
[5/3/c30] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$3(xxx); 2(\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}-x);$ $2(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}, x); 2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>I4_32</i>	0	0,1250, 0,1250, 0
[5/3/c31] ²	<i>a</i>	<i>Ia3d</i>	$2(\frac{1}{2}y0); 3(xxx);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x); 2(x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2})$	<i>I4_32</i>	0	0,1679, 0,0392, 0,0392
[6/3/c25] ²	<i>b</i>	<i>Fd3c</i>	$2(x00); 3(xxx); 3(\bar{x}\bar{x}x);$ $2(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}, x)$	<i>F4_32</i>	0	0,1402, 0,0866, 0
[3/4/t1] ³	<i>l</i>	<i>I4_3d</i>	$4_x(\frac{1}{8}0\frac{1}{2}); 2(\frac{1}{2}y0)$	<i>I4_2d</i>	2	$2(x0\frac{1}{2}) [4/3/t1]^3 - 3(\frac{1}{2}-x, x, \bar{x}) 5/3/c36$ $- 4_x(0\frac{1}{8}\frac{1}{2}) 5/4/c1 - 3(xxx) 5/3/c34 - 4_x(\frac{1}{4}\frac{1}{8}0) 5/3/c33$
[4/3/t1] ³	<i>l</i>	<i>I4_3d</i>	$4_x(\frac{1}{8}0\frac{1}{2}); 2(\frac{1}{2}y0); 2(x0\frac{1}{2})$	<i>I4_2d</i>	1	$4_x(\frac{1}{8}\frac{1}{8}0) 6/3/c7 - 3(\frac{1}{2}-x, x, \bar{x}) 6/3/c29$

onen erzeugte Gruppe. Dabei bedeutet der Index 2 eine Verdoppelung der Elementarzelle der Ausgangsgruppe in jeder Richtung. In Spalte 6 ist die Dimension des Existenzbereiches der entsprechenden Symmetriesorte angegeben, und in Spalte 7 findet man für die verschiedenen Ränder des Existenzbereiches die jeweils zusätzlichen kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen (bzw. Nachbarpunkte) und den zugehörigen Kugelpackungstyp bzw. Typ einander durchdringender Kugelpackungen. Bei einem Existenzbereich ohne Frei-

heitsgrade enthält Spalte 7 die Koordinaten des Ausgangspunktes.

Die Einzelpackungen zu den beiden letzten Typen einander durchdringender Kugelpackungen besitzen lediglich tetragonale Symmetrie. Die kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen führen in diesen Fällen daher nur auf eine tetragonale Raumgruppe. Das Symbol bezieht sich entsprechend auf die Kugelpackungstypen des tetragonalen Kristallsystems (vgl. Fischer 1969, 1971).

Die Arten der Durchdringung

Wie Tabelle 3 zeigt, ist die häufigste Art *a* der Durchdringung bei 19 der insgesamt 39 verschiedenen Typen einander durchdringender Kugelpackungen verwirklicht. Alle Kugellagerungen, die zu dieser Art der Durchdringung gehören, haben die Symmetrie von $Ia3d$ oder einer ihrer Untergruppen. Hierzu gehören auch die früher erwähnten Kugellagerungen zu Y^{**} und V^* (Fig. 1 und 2) und $[3/3/c1]_{III}^2$ (Fig. 3).

Die nächsthäufigste Art *b* der Durchdringung tritt bei sieben verschiedenen Kugelpackungstypen auf. Sämtliche zugehörigen Kugellagerungen haben die Symmetrie von $Pn3m$ oder einer ihrer Untergruppen. Sie alle lassen sich auf folgende Weise veranschaulichen: Zwei Kugelpackungen zu den Gitterkomplexen *D* oder *T* werden innen zentrierend ineinander gestellt. Dann wird jede Kugel durch ein Polyeder so ersetzt, dass die Verknüpfungen zwischen den Polyedern genau den Verknüpfungen der Kugeln in den Ausgangskugelpackungen entsprechen. Ein Beispiel für diese Art von Durchdringung (allerdings zweier inhomogener Kugelpackungen) bildet nach Wells (1975) die Cupritstruktur.

Als weitere Möglichkeit kann man einander durchdringende Kugelpackungen erzeugen, indem man Polyeder um zwei innen zentrierend ineinandergestellte *P*-Gitter so miteinander verknüpft, wie es den Kontakten innerhalb der einzelnen *P*-Gitter entspricht. Diese Art *c* der Durchdringung tritt dreimal auf. Die zugehörigen Raumgruppen hierfür sind $Im3m$ und ihre Untergruppen. Die *B*-Atome in der Kristallstruktur von CaB_6 bilden z.B. eine solche Kugelpackung aus Oktaedern um ein *P*-Gitter. Anstelle der um $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ verschobenen gleichartigen zweiten Kugelpackung besetzen die Ca in dieser Struktur allerdings nur eine einfache *P*-Konfiguration.

Bei den beiden Typen einander durchdringender Kugelpackungen, in denen die Einzelpackungen nur tetragonale Symmetrie besitzen, besteht die Kugellagerung jeweils aus Polyedern um eine Punktconfiguration zum Gitterkomplex *S*. Die Polyeder sind jedoch nur so verknüpft, dass die Teillagerungen drei ineinandergestellten, tetragonal deformierten *D*-Konfigurationen ($c/a = \frac{1}{2}\sqrt{2}$) entsprechen (*l* in Tabelle 3). $I\bar{4}3d$ ist die einzige Raumgruppe, in der eine solche Durchdringung möglich ist.

Alle übrigen Arten der Durchdringung (*d-k*) treten jeweils nur bei einem Typ einander durchdringender Kugelpackungen auf.

Beziehungen zwischen Typen einander durchdringender Kugelpackungen

Zwischen den verschiedenen Typen einander durchdringender Kugelpackungen lassen sich über die Gesamtsymmetrie der jeweiligen Kugellagerungen und über die zugehörigen kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen folgende unterschiedliche Beziehungen herstellen:

1. Zwei Typen einander durchdringender Kugelpackungen lassen sich so in der gleichen Punktlage verwirklichen, dass der Existenzbereich für die Symmetriesorte des ersten Typs eine Grenze für den Existenzbereich der Symmetriesorte des zweiten Typs bildet. Dann sind zwei Fälle zu unterscheiden:

(a) Die Anzahl der Einzelpackungen ist für beide Typen gleich: Ein Beispiel hierfür bilden die beiden Typen $[6/3/c25]^2$ und $[5/3/c19]^2$. In $[5/3/c19]^2$ liegen verzerrte 4,3-Kuboktaeder um zwei innen zentrierend ineinander gestellte *D*-Konfigurationen vor, welche jeweils durch dreiseitige Prismen um die entsprechenden *T*-Konfigurationen miteinander verknüpft sind. Der Existenzbereich der zugehörigen Symmetriesorte in $Fd3c$ wird unter anderem durch den Symmetriebereich der achsenparallelen 2-Achse begrenzt. Die zusätzlichen Kontakte zwischen den Kugeln machen die Kuboktaeder zu Ikosaedern in $[6/3/c25]^2$. Die Verknüpfung der Ikosaeder erfolgt ebenfalls über dreiseitige Prismen. In diesem und in allen anderen derartigen Fällen im kubischen Kristallsystem ist die Art der Durchdringung stets für beide Typen die gleiche.

(b) Die Anzahl der Einzelpackungen für den zweiten Typ ist grösser als für den ersten: Ein Beispiel dafür bilden die beiden Typen $[4/3/c25]^2$ und $[3/3/c1]_I^4$. In $[4/3/c25]^2$ liegen verzerrte dreiseitige Prismen um zwei Konfigurationen von $+Y^*$ und $-Y^*$ vor, welche entsprechend den Kontakten in der Kugelpackung zu Y^* durch Vierecke um eine $+V$ - bzw. $-V$ -Konfiguration verknüpft sind. In $[3/3/c1]_I^4$ fehlt jetzt ein Kontakt über eine der diagonalen 2-Achsen, so dass die dreiseitigen Prismen in zwei nicht miteinander verknüpfte Dreiecke aufspalten und aus den Vierecken jeweils zwei Hanteln werden. Dadurch erhöht sich die Anzahl der Einzelpackungen auf vier und die Art der Durchdringung ändert sich.

2. Zwei Typen einander durchdringender Kugelpackungen lassen sich mit entsprechenden Parametern in zwei verschiedenen Raumgruppen, zwischen denen eine Untergruppenbeziehung besteht, verwirklichen. Dann enthält der zur Untergruppe gehörige Typ immer weniger Kugeln als der zu Obergruppe gehörige. Die Menge der kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen aus der Untergruppe soll in der Menge der kontakterzeugenden Symmetrieeoperationen aus der Obergruppe enthalten sein. Auch hierbei sind wieder zwei Fälle zu unterscheiden:

(a) Die Anzahl der Teilpackungen ist in beiden Fällen die gleiche: Dann werden aus den Einzelpackungen zur Obergruppe Kugeln auf solche Weise fortgelassen, dass die übrigbleibenden Kugeln jeder Einzelpackung noch alle über Kontakte miteinander verknüpft sind. Es ändert sich also der Kugelpackungstyp der Einzelpackungen. Im kubischen Kristallsystem ist ein derartiger Symmetrieabbau immer mit einem Wechsel in der Art der Durchdringung der Kugellagerung verbunden. Ein Beispiel hierfür bilden die Typen $[5/3/c3]^2$ und $[3/3/c1]_{II}^2$. In $[5/3/c3]^2$ liegen Oktaeder um zwei innen zentrierend ineinandergestellte

P_2 -Gitter vor. In der allgemeinen Punktlage von $Ia3d$ bilden $2(\frac{1}{2}y0)$, $3(xxx)$ und $\bar{3}(xxx)$ die kontakt erzeugenden Symmetrieoperationen für die Kugellagerungen dieses Typs. Beim Übergang zur Untergruppe $I4_132$ bleibt nur die eine Hälfte der Kugeln erhalten, und die $\bar{3}$ -Operationen sind nicht mehr vorhanden. Demzufolge treten Dreiecke an die Stelle der Oktaeder, und von den sechs Verknüpfungen des P -Gitters fehlen drei. Man kommt auf diese Weise zu einer Durchdringung von zwei 'dünnsten Kugelpackungen'.

(b) Die Anzahl der Teilpackungen ist in der Untergruppe kleiner als in der Obergruppe: Dieser Fall tritt im kubischen Kristallsystem nur für die Durchdringungen der 'dünnsten Kugelpackung' auf. Die kontakt erzeugenden Symmetrieoperationen bleiben erhalten, und es fehlt in der Untergruppe jeweils eine Hälfte der Teilpackungen.

In Tabelle 4 sind alle oben beschriebenen Beziehungen zwischen den Typen einander durchdringender Kugelpackungen angegeben.

Tabelle 4. Beziehungen zwischen Typen einander durchdringender Kugelpackungen

Fall	Typ	Durch Weglassen von Kontakten bzw. Kugeln erhaltene Typen	
1(a)	$[4/3/c27]^2$	$[3/4/c5]^2, [3/4/c6]^2, [3/4/c7]^2$	
	$[5/3/c10]^2$	$[4/3/c14]^2, [4/3/c15]^2, [3/6/c3]^2$	
	$[5/3/c28]^2$	$[4/3/c20]^2, [4/3/c23]^2, [4/3/c24]^2, [3/8/c2]^2$	
	$[5/3/c29]^2$	$[4/3/c22]^2, [4/3/c25]^2, [4/3/c26]^2$	
	$[5/3/c30]^2$	$[4/3/c24]^2, [4/3/c25]^2, [3/4/c6]^2$	
	$[5/3/c31]^2$	$[4/3/c23]^2, [4/3/c26]^2, [3/4/c7]^2$	
	$[6/3/c25]^2$	$[5/3/c19]^2, [4/3/c14]^2, [4/3/c15]^2$	
	$[4/3/t1]^3$	$[3/4/t1]^3$	
	1(b)	$[4/3/c11]^2$	$[3/3/c1]_{II}^8$
		$[4/3/c14]^2$	$[3/3/c1]_{II}^8$
$[4/3/c20]^2$		$[3/3/c1]_{II}^4, [3/3/c1]_{II}^4$	
$[4/3/c22]^2$		$[3/3/c1]_{II}^4, [3/3/c1]_{II}^4$	
$[4/3/c23]^2$		$[3/3/c1]_{II}^4$	
$[4/3/c24]^2$		$[3/3/c1]_{II}^4$	
$[4/3/c25]^2$		$[3/3/c1]_{II}^4$	
$[4/3/c26]^2$		$[3/3/c1]_{II}^4$	
$[5/3/c3]^2$		$[3/3/c1]_{II}^4$	
$[5/3/c19]^2$		$[3/3/c1]_{II}^8$	
2(a)	$[4/3/c6]^2$	$[3/3/c1]_{II}^2$	
	$[5/3/c3]^2$	$[3/3/c1]_{II}^2, [3/3/c1]_{II}^2$	
2(b)	$[3/3/c1]_{II}^4$	$[3/3/c1]_{II}^2$	
	$[3/3/c1]_{II}^4$	$[3/3/c1]_{II}^2, [3/3/c1]_{II}^2$	
	$[3/3/c1]_{II}^8$	$[3/3/c1]_{II}^4$	
	$[3/3/c1]_{II}^8$	$[3/3/c1]_{II}^4$	

Zusammenfassung

Die vorliegenden Untersuchungen ergaben für das kubische Kristallsystem 39 verschiedene Typen einander durchdringender Kugelpackungen. Sie bauen sich aus Kugelpackungen zu 30 der insgesamt 199 Typen kubischer Kugelpackungen und zu zwei Typen tetragonaler Kugelpackungen auf. Dabei konnten 12 Arten der Durchdringung unterschieden werden. Die 39 Typen treten in den stellvertretend für die kubischen Gitterkomplexe untersuchten Punktlagen in 60 Symmetriesorten auf. Entsprechende Symmetriesorten kubischer Kugelpackungen gibt es etwa siebenmal so viele, nämlich 414. Betrachtet man die Symmetriesorten in allen zu einem Gitterkomplex gehörigen Klassen von Konfigurationslagen (vgl. Fischer & Koch, 1974), so erhält man alle Fälle, in denen der gleiche Typ mit unterschiedlicher Symmetrie erzeugt werden kann. Es ergeben sich dann im kubischen System 74 Symmetriesorten einander durchdringender Kugelpackungen und 538 Symmetriesorten von Kugelpackungen.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Unterstützung dieser Arbeit.

Literatur

- DONNAY, J. D. H., HELLNER, E. & NIGGLI, A. (1966). *Z. Kristallogr.* **123**, 255–262.
- FISCHER, W. (1969). *Existenzbedingungen homogener Kugelpackungen in Raumgruppen tetragonaler Symmetrie*. Marburg: Habilitationsschrift.
- FISCHER, W. (1971). *Z. Kristallogr.* **133**, 18–42.
- FISCHER, W. (1973). *Z. Kristallogr.* **138**, 129–146.
- FISCHER, W. (1974). *Z. Kristallogr.* **140**, 50–74.
- FISCHER, W. & KOCH, E. (1974). *Z. Kristallogr.* **139**, 268–278.
- HEESCH, H. & LAVES, F. (1933). *Z. Kristallogr.* **85**, 443–453.
- HERMANN, C. (1960). *Z. Kristallogr.* **113**, 142–154.
- HIRSHFELD, F. L. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 301–311.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1965). Vol. I. 2nd ed. Birmingham: Kynoch Press.
- KOCH, E. (1974). *Z. Kristallogr.* **140**, 75–86.
- KOCH, E. & FISCHER, W. (1975). *Acta Cryst.* **A31**, 88–95.
- NIGGLI, P. (1927). *Z. Kristallogr.* **65**, 391–415.
- NIGGLI, P. (1928). *Z. Kristallogr.* **68**, 404–466.
- NOWACKI, W. (1935). *Homogene Raumteilung und Kristallstruktur*. Zürich: Diss.
- SINOGOWITZ, U. (1943). *Z. Kristallogr.* **105**, 23–52.
- WELLS, A. F. (1975). *Structural Inorganic Chemistry*, 4th. ed. Oxford: Clarendon Press.