Acta Cryst. (1951). **4**, 190

Vektorendarstellung der 230 Raumgruppen. Von PAUL NIGGLI, *Mineralogisch-petrographisches Institut der Eidg. Technischen Hochschule, Zürich, Schweiz*

(*Eingegangen am* 13. *Dezember* 1950)

Die meiner Meinung nach fundamentale Bedeutung der Darstellung der 230 Raumgruppen durch Charakterentafeln (Niggli, 1949, 1950*a*) ergibt sich u.a. daraus, dass durch sie auch die Tafeln von Buerger (1950) für die Pattersonpunkte (vector representations) sowie diejenigen für die Fourieranalysen (F-Punkte) unmittelbar und vollständig gegeben sind und nicht neu aufgestellt werden müssen. Es sei dies hier lediglich für die soeben publizierten Tabellen Buerger's der Vektordarstellung erläutert. Für die 'characteristics of the vector representations' einer allgemeinen Punktlage ist in der Charakterentafel lediglich der Inhalt neu zu deuten. Verstehen wir unter X, Y, Z die Koordinaten $2x$, $2y$, $2z$ eines Punktes, so lautet z.B. die Charakterentafel für D^1_{2h} der *Patterson-Punkte* eines Gitterkomplexes entsprechend Fig. 1.

$$\begin{array}{c|ccc|c} 8 & 0 & 0 & 0 & \sigma_1 \\ 4 & X & 0 & 0 & \alpha_1 \\ 2 & 0 & Y & Z & \alpha_2 \\ 4 & 0 & Y & 0 & \beta_1 \\ 2 & X & 0 & Z & \beta_2 \\ 4 & 0 & 0 & Z & \gamma_1 \\ 2 & X & Y & 0 & \gamma_2 \\ 1 & X & Y & Z & \sigma_2 \end{array} \quad = \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}$$

Fig. 1.

Hinsichtlich Null und von Null verschiedenen Werten verhält sich in der Fig. 1 rechts die mit Kreis versehene Koordinate jeder Zeile anders als die zwei andern. Links stehen die Faktoren, die mit zur Konzentration im Pattersondiagramm Veranlassung geben. Naturgemäss folgt die Beziehung der Fig. 1 aus bereits ausgearbeiteten allgemeinen Gesetzen der Matrixdarstellung (Niggli, 1950*b*), auf die hier nicht einzugehen ist. Kommen Zusatztranslationen $\frac{1}{2}$ hinzu, so bedeutet dies bekanntlich Umwandlung des Charakters 1 in $\bar{1}$. *In allen Raumgruppen D_{2h} liefern die i_s der Zeilen α_1, β_1, γ_1 die Sonderwerte der linearen Konzentrationen von Pattersonpunkten. Dort wo $\bar{1}$ steht, ist statt Null der Fig.* 1 *links der Wert $\frac{1}{2}$ zu schreiben. Die i_d der Zeilen α_2, β_2, γ_2 liefern in gleicher Weise die Sonderwerte der planaren Konzentrationen. Dort wo $\bar{1}$ steht, ist statt Null der Fig.* 1 *links der Wert $\frac{1}{2}$ einzusetzen.*

So liest man aus der Charakterentafel D^6_{2h} der Aufstellung Zeile 8 meiner Tabelle 2 (Niggli, 1949) direkt das Schema Fig. 2 in Buergerscher Symbolik ab. In der entsprechenden D_2-Untergruppe fehlen α_1, β_1, γ_1, also die linearen Konzentrationen, usw.

In D^{24}_{2h} treten als Charaktere 0-Grössen auf, die $\frac{1}{4}$ Zusatztranslationen entsprechen. Bezogen auf das Symmetriezentrum als Nullpunkt ergibt sich die Charakterentafel der Fig. 3, die in Wirklichkeit zugleich nichts anderes ist als eine andere Art der Zusammenstellung der 6 Zeilen von Buerger.

Da somit die Charakterentafeln, wie naturgemäss aus der Symmetrielehre folgt, zugleich in einfachster Zusammenfassung die von Buerger angegebene Vektorendarstellung enthalten, erübrigt sich, sofern diese Charakterentafeln mitgeteilt werden, jede besondere Tabulierung, und das gleiche gilt im Fourierraum für die Summation unter Berücksichtigung der Raumgruppensymmetrie.

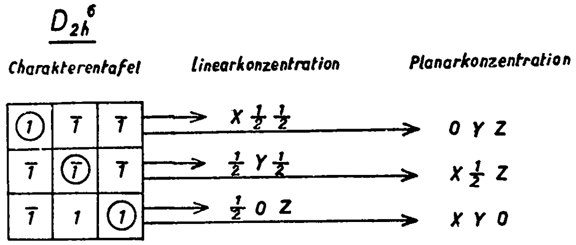

Fig. 2.

$$D_{2h}^{24} \quad \begin{array}{ccc} 1 & \bar{1} & \bar{1} \\ \bar{1} & 1 & \bar{1} \\ \bar{1} & \bar{1} & 1 \\ \hline 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \qquad \begin{array}{c} \text{Linearkonz.} \\ X\,\tfrac{1}{4}\,\tfrac{1}{4} \\ \tfrac{1}{4}\,Y\,\tfrac{1}{4} \\ \tfrac{1}{4}\,\tfrac{1}{4}\,Z \end{array} \qquad \begin{array}{c} \text{Planarkonz.} \\ 0\;Y\;Z \\ X\;0\;Z \\ X\;Y\;0 \end{array}$$

Fig. 3.

Zugleich liefert z. Beispiel für die digonalen Raumgruppen die Darstellung der zitierten Tabelle 2 bereite *alle* Formulierungen bei verschiedener Wahl der Koordinatenachsen. Die Vektorendarstellung ist nach den Symmetrie- und Transformationssätzen vom Nullpunkt unabhängig, jedoch sind X, Y, Z, bezogen auf x, y, z der konstituierenden Punkte, jeweilen auf den gewählten Nullpunkt zu beziehen. Die Uebertragung auf andere Raumgruppen bietet nach den Erörterungen der letzten Arbeit über Raumgruppencharakteristik keine Schwierigkeit. Auch lassen sich sofort die Beziehungen für Kombinationen verschiedener Gitterkomplexe aufschreiben.

Schrifttum

BUERGER, J. M. (1950). *Acta Cryst.* **3**, 465.
NIGGLI, P. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 263.
NIGGLI, P. (1950*a*). *Acta Cryst.* **3**, 429.
NIGGLI, P. (1950*b*). *Miner. Mag.* (im Druck).