

Acta Cryst. (1952). 5, 842

Die 62 allgemeinen Auslöschungseinheiten. Von W. NOWACKI, *Mineralogisches Institut der Universität, Bern, Schweiz**

(Eingegangen am 18. Juni 1952)

In unserem Buche über *Fouriersynthese von Kristallen* (Nowacki, 1952, S. 163/4) wurde das Problem der 'allgemeinen Auslöschungseinheiten' erwähnt. Bekanntlich ist es bei gegebener Lauesymmetrie und gegebenen Auslöschungen nicht möglich, alle 219 = 230 - 11 wesentlich verschiedenen Raumgruppen auseinanderzuhalten; man wird vielmehr auf die 120 Auslöschungseinheiten ('diffraction groups') geführt. Nimmt man nun an, dass die Lauesymmetrie unbekannt sei, so fragt es sich, welche Gesamtheiten von Raumgruppen man unterscheiden und ermitteln kann, wenn man ausschliesslich Auslöschungen verwendet. Wir führen zu diesem Zweck den Begriff der 'allgemeinen Auslöschungseinheit' ein, indem wir darunter die Gesamtheit aller Raumgruppen verstehen, welche — unabhängig von der Lauesymmetrie — dieselben Auslöschungen aufweisen. Es wurde eine Bestimmungstabelle ausgearbeitet, welche erlaubt, bei gegebenen Auslöschungen alle dazu gehörigen Raumgruppen zu finden und zwar für sämtliche mögliche Orientierungen der Koordinatenachsen und für jede Aufstellungswahl. Das Resultat ist, dass es 62 allgemeine Auslöschungseinheiten im Gegensatz zu den 120 gewöhnlichen gibt.

Die Existenz der allgemeinen Auslöschungseinheiten ist z.T. eine Folge der Tatsache, dass die Struktur-

* Mitteilung Nr. 70.

Acta Cryst. (1952). 5, 842

The crystallographic relationship between the phases γ and ϵ in the system iron-manganese.

By J. GORDON PARR, *Department of Metallurgy, The University, Liverpool, England*

(Received 2 May 1952 and in revised form 23 July 1952)

Between compositions 10% and 30% manganese a close-packed hexagonal phase (ϵ) may be formed in iron-manganese alloys (Schmidt, 1929-30). Its formation in powder specimens has been explained in terms of athermal nucleation (Parr, 1952); and similar arguments apply to the formation of ϵ in solid specimens. To retain ϵ in powders the sample has to be water-quenched from the face-centred (γ) phase field; and in view of the slow diffusion rate in iron-manganese alloys (Jones & Pumphrey, 1949) it is reasonable to suppose that the transformation involves a 'martensite' reaction (Troiano & McGuire, 1943). Although solid specimens will retain ϵ on slow cooling (Parr, 1952) as well as on quenching, the phase is identical in structure and behaviour in solids and powders, and presumably forms by the same mechanism.

The close-packed arrangement of atoms in face-centred cubic and close-packed hexagonal structures suggests that face-centred cubic \rightarrow close-packed hexagonal shear transformations are such that $(111)_\gamma$ is parallel to $(0001)_\epsilon$. Nishiyama (1936) proposed a mechanism in which this relationship exists, and $(110)_\gamma$ is parallel to $(11\bar{2}0)_\epsilon$. Shear takes place in a $[\bar{2}11]_\gamma$ direction.

The oscillation photograph reproduced in Fig. 1 of a water-quenched sample of an 18.5% manganese alloy in

amplitude

$$F(h, k, l) = \sum_j \exp 2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)$$

(alle Punkte werden als gleichwertig vorausgesetzt) die Symmetrie eines Kristalles in einer nur eingeschränkten Weise enthält. Alle symmorphen Raumgruppen z.B. bilden eine einzige allgemeine Auslöschungseinheit, weil bei ihnen überhaupt keine Auslöschungen auftreten.

Im allgemeinen ist es unmöglich, Symmetrien durch Auslöschungen allein zu bestimmen; für die 31 + 2 Raumgruppen C_{2h}^5 , D_2^3 , C_{2v}^{19} , $D_{2h}^{4,6,8,10,14,15,22}$, C_{4h}^6 , $D_4^{(4,8),6}$, C_{4v}^{12} , D_{2d}^{14} , $D_{4h}^{3,4,8,11,12,15,16,19,20}$, O^4 , $(7,6),8$, T_d^6 und $O_h^{2,8,10}$ hingegen ist dies möglich.

Die allgemeinen Auslöschungseinheiten können bei Pseudosymmetrien und bei unsicher bekannter Lauesymmetrie praktisch wichtig werden, von der prinzipiellen Frage, wie weit man mit Auslöschungen allein kommt, abgesehen.

Die ausführliche Arbeit zusammen mit der Bestimmungstabelle wird in den *Schweizerischen Mineralogischen und Petrographischen Mitteilungen* erscheinen.

Literatur

NOWACKI, W. (1952). *Fouriersynthese von Kristallen und ihre Anwendung in der Chemie*. Basel: Birkhäuser.

needle form, was taken in a 5 cm. camera. Because pairs of spots indicate parallel planes of atoms (Barrett, Geisler & Mehl, 1941, 1943) it is immediately evident from the photograph that $(13\bar{1})_\gamma$ is parallel to $(11\bar{2})_\epsilon$. The plane $(13\bar{1})_\gamma$ lies in a zone which includes $(111)_\gamma$ and $(01\bar{1})_\gamma$; and $(11\bar{2})_\epsilon$ lies in a zone which includes $(0001)_\epsilon$ and $(11\bar{2}0)_\epsilon$. The angles between planes in the zones are:

γ Planes		ϵ Planes	
(111)		(0001)	
	58° 29'		58° 14'
(13 $\bar{1}$)		(11 $\bar{2}$)	
	31° 31'		31° 46'
(01 $\bar{1}$)		(11 $\bar{2}$ 0)	

Therefore the relationship between the γ and ϵ structures should lead to pairs of spots 222_γ and 0004_ϵ . This correspondence does exist, although it does not appear so clearly on Fig. 1 as the relationship between 311_γ and $11\bar{2}_\epsilon$. Because of almost identical interplanar spacings the diffraction spots 220_γ and $11\bar{2}0_\epsilon$ appear to be on a single arc; but as $(13\bar{1})_\gamma$ is parallel to $(11\bar{2})_\epsilon$, and $(111)_\gamma$ is parallel to $(0001)_\epsilon$, it follows that $(01\bar{1})_\gamma$ is parallel to $(11\bar{2}0)_\epsilon$.

The relationship demanded by the Nishiyama mechanism is therefore satisfied. A superimposed volume