

*Acta Cryst.* (1967). **22**, 431

**Phasenbeziehungen des kubischen Kristallsystems.** Von ERNST SCHULTZE-RHONHOF, *Anorganisch-Chemisches Institut der Universität, 53 Bonn, Meckenheimer Allee 168, Deutschland*

(Eingegangen am 13. April 1966 und wiedereingereicht am 23. September 1966)

Phase-relations of reflexions in cubic space groups missing in *International Tables for X-ray Crystallography* are listed.

Im allgemeinsten Fall kann man bekanntlich einer Netzebene ( $hkl$ ) im kubischen System weitere 47 Ebenen zuordnen, deren Indices sich aus den Indices ( $hkl$ ) durch Anwendung einer Gruppe von Operationen erzeugen lassen. Diese Operationen sind:

- Vorzeichenänderung von  $h$ ,  $k$  und  $l$ , entsprechend Spiegelungen an den Ebenen  $0kl$ ,  $h0l$  und  $hk0$  im reziproken Gitter,
- Cyklisches Vertauschen aller drei Indices  $h, k, l$ , entsprechend einer Drehung um die dreizählige Achse  $hhh$ , und
- Vertauschen zweier Indices, entsprechend einer Spiegelung an einer der Ebenen  $hhl$ ,  $lkl$  oder  $hkk$ .

Die Strukturamplituden  $|F(hkl)|$  und Phasen  $\alpha(hkl)$  dieser 48 Netzebenen sind durch Gesetzmässigkeiten verknüpft, die bisher nur für diejenigen Flächen tabelliert sind, die durch Vorzeichenänderung der Indices auseinander hervorgehen (*International Tables for X-ray Crystallography*, 1952). Diese Arbeit, die in Reihenfolge und Aufstellung der einzelnen Raumgruppen den *International Tables* (1952) folgt, gibt eine Tabelle der fehlenden Zusammenhänge. Die Formeln wurden für alle möglichen Fälle analytisch berechnet und davon unabhängig auf der IBM 7090 des Rheinisch-Westfälischen Institutes für Instrumentelle Mathematik, Bonn, nachgeprüft.

Für alle kubischen Raumgruppen gilt:

$$|F(hkl)| = |F(klh)| = |F(lhk)|, \quad \alpha(hkl) = \alpha(klh) = \alpha(lhk).$$

Für die Raumgruppen der Laueklasse  $m\bar{3} (T_h)$  (Nr. 195–206,  $T$ - und  $T_h$ -Raumgruppen) gilt:

$$|F(hkl)| \neq |F(khl)|.$$

Für die Raumgruppen der Laueklasse  $m\bar{3}m (O_h)$  (Nr. 207–230,  $O$ -,  $T_d$ - und  $O_h$ -Raumgruppen) gilt allgemein:

$$|F(hkl)| = |F(khl)|.$$

Die Phasenbeziehungen in diesen Raumgruppen lauten:

- |                       |                                   |
|-----------------------|-----------------------------------|
| 207. $P432 (O^1)$ :   | $\alpha(hkl) = -\alpha(khl)$      |
| 208. $P4_232 (O^2)$ : |                                   |
| für $h+k+l=2n$ :      | $\alpha(hkl) = -\alpha(khl)$      |
| für $h+k+l=2n+1$ :    | $\alpha(hkl) = \pi - \alpha(khl)$ |
| 209. $F432 (O^3)$ :   | wie 207                           |

- |                                |                                      |
|--------------------------------|--------------------------------------|
| 210. $F4_132 (O^4)$ :          |                                      |
| für $h+k+l=4n$ :               | $\alpha(hkl) = -\alpha(khl)$         |
| für $h+k+l=4n+1$ :             | $\alpha(hkl) = \pi/2 - \alpha(khl)$  |
| für $h+k+l=4n+2$ :             | $\alpha(hkl) = \pi - \alpha(khl)$    |
| für $h+k+l=4n+3$ :             | $\alpha(hkl) = 3\pi/2 - \alpha(khl)$ |
| 211. $I432 (O^5)$ :            | wie 207                              |
| 212. $P4_332 (O^6)$ :          | wie 210                              |
| 213. $P4_132 (O^7)$ :          |                                      |
| für $h+k+l=4n$ :               | $\alpha(hkl) = -\alpha(khl)$         |
| für $h+k+l=4n+1$ :             | $\alpha(hkl) = 3\pi/2 - \alpha(khl)$ |
| für $h+k+l=4n+2$ :             | $\alpha(hkl) = \pi - \alpha(khl)$    |
| für $h+k+l=4n+3$ :             | $\alpha(hkl) = \pi/2 - \alpha(khl)$  |
| 214. $I4_132 (O^8)$ :          |                                      |
| für $h+k+l=4n$ :               | $\alpha(hkl) = -\alpha(khl)$         |
| für $h+k+l=4n+2$ :             | $\alpha(hkl) = \pi - \alpha(khl)$    |
| 215. $P\bar{4}3m (T_d^1)$ :    | $\alpha(hkl) = \alpha(khl)$          |
| 216. $F\bar{4}3m (T_d^2)$ :    | wie 215                              |
| 217. $I\bar{4}3m (T_d^3)$ :    | wie 215                              |
| 218. $P\bar{4}3n (T_d^4)$ :    |                                      |
| für $h+k+l=2n$ :               | $\alpha(hkl) = \alpha(khl)$          |
| für $h+k+l=2n+1$ :             | $\alpha(hkl) = \pi + \alpha(khl)$    |
| 219. $F\bar{4}3c (T_d^5)$ :    | wie 218                              |
| 220. $I\bar{4}3d (T_d^6)$ :    |                                      |
| für $h+k+l=4n$ :               | $\alpha(hkl) = \alpha(khl)$          |
| für $h+k+l=4n+2$ :             | $\alpha(hkl) = \pi + \alpha(khl)$    |
| 221. $Pm\bar{3}m (O_h^1)$ :    | wie 215                              |
| 222. $Pn\bar{3}n (O_h^2)$ :    |                                      |
| für $h+k+l=2n$ :               | $\alpha(hkl) = \alpha(khl)$          |
| für $h+k+l=2n+1$ :             | $\alpha(hkl) = -\alpha(khl)$         |
| 223. $Pm\bar{3}n (O_h^3)$ :    | wie 222                              |
| 224. $Pn\bar{3}m (O_h^4)$ :    | wie 215                              |
| 225. $Fm\bar{3}m (O_h^5)$ :    | wie 215                              |
| 226. $Fm\bar{3}c (O_h^6)$ :    | wie 222                              |
| 227. $Fd\bar{3}m (O_h^7)$ :    | wie 215                              |
| 228. $Fd\bar{3}c (O_h^8)$ :    | wie 222                              |
| 229. $Im\bar{3}m (O_h^9)$ :    | wie 215                              |
| 230. $Ia\bar{3}d (O_h^{10})$ : |                                      |
| für $h+k+l=4n$ :               | $\alpha(hkl) = \alpha(khl)$          |
| für $h+k+l=4n+2$ :             | $\alpha(hkl) = -\alpha(khl)$         |

#### Literatur

*International Tables for X-ray Crystallography* (1952). Vol. I. S. 489 ff. Birmingham: Kynoch Press.