

60. Bemerkungen zur vorstehenden Abhandlung von *E. Brandenberger*¹⁾.

Von *W. Nowacki*.

(20. I. 47.)

Es ist sicherlich begrüssenswert, wenn immer wieder auf Vieldeutigkeiten beim Bestimmen von Krystallstrukturen hingewiesen wird, besteht doch ein grosser Wert der mathematischen Strukturlehre gerade darin, die Vielfalt der geometrischen Möglichkeiten darzulegen, so dass man vor falschen oder voreiligen Schlüssen bewahrt bleibt.

Wir sind uns durchaus bewusst, dass eine kubische Metrik noch kein hinreichender Beweis für kubische Symmetrie ist. Hingegen ist uns bis jetzt kein Fall einer optisch-isotropen Substanz, welche nicht-kubisch krystallisieren würde, bekannt geworden. Es wäre theoretisch denkbar, dass die Abweichungen von der kubischen Symmetrie oder der kubischen Metrik so klein wären, dass sie nicht wahrgenommen würden; doch muss man sich fragen, ob man mit solcher Argumentation weiter käme, weil schliesslich jede Struktur als niedriger-symmetrisch angesehen werden kann.

Es ist wohl bekannt, dass die Auswahlregel „nur ungemischte Indizes vorhanden“ keineswegs eindeutig eine flächenzentrierte Translationsgruppe ergibt, sondern, dass noch andere Möglichkeiten in Betracht gezogen werden müssen. So hatten auch wir die Raumgruppen T^1-P23 , T^4-P2_13 , T_{h1}^2-Pn3 , T_{h1}^6-Pa3 , $T_{h1}^4-P4_2m$, O^2-P4_23 und O_{h1}^4-Pn3m mit einfach-primitiver Translationsgruppe P , bei welchen eine flächenzentrierte Anordnung nur der Molekelzentren, hingegen eine einfach-primitive der Molekelatome vorliegen würde (bei fixierter Lage aller Molekeln), berücksichtigt, sie aber wieder ausgeschlossen, denn es würden dann gemischte Indizes zu beobachten sein, was aber nicht der Fall ist. Es wäre nun allerdings an sich möglich, dass bei der starken Untergrundschwärzung der Filme Linien mit gemischten Indizes vorhanden, aber nicht beobachtbar wären. Unter dieser Voraussetzung wäre die Translationsgruppe nicht mehr flächenzentriert und obige einfach-primitive Raumgruppen wären durchaus in Betracht zu ziehen; damit aber auch eine fixierte Molekellage (der Symmetrie C_3-3 oder $C_{3v}-3m$). Eine statistische Anordnung der Molekeln mit flächenzentrierter Lage der Molekelzentren bei einfach-primitiver Translationsgruppe ist sicher von einer ebensolchen Anordnung bei flächenzentrierter Translationsgruppe nicht zu unterscheiden. Aus diesen Gründen wurde in unserer Arbeit über Chinuclidin auch keine spezielle Raumgruppe als die „richtige“ angegeben.

Um ganz vollständig zu sein, müsste man endlich auch die Möglichkeit einer Komposition, d. h. eines Ineinanderstellens zweier Gitter (mit 1- und 3-Zähligkeit) in Betracht ziehen, wofür aber bis jetzt keine Anzeichen vorliegen.

Wenn das Koordinationspolyeder um ein Teilchen einer Krystallstruktur z. B. die Form eines Oktaeders hat, die Symmetriebedingung seiner Punktlage in der Raumgruppe aber nur C_3-3 ist, so würden wir vorziehen, nicht zu sagen, die Teilchensymmetrie sei höher als die Punktsymmetrie, sondern das Teilchen habe in der betreffenden Struktur und Raumgruppe die Symmetrie C_3-3 . Die 6 „Oktaeder“-Ecken erweisen sich damit als ungleichwertig ($6 = 3 + 3$).

Was die Zuordnung der molekularen Verbindungen und der Krystallverbindungen zu den 219 Raumgruppen betrifft²⁾, so hat die Statistik zum mindesten bei den organischen Verbindungen die wesentlichen, allgemeinen krystallstrukturellen Bauprinzipien erkennen lassen³⁾, während für die übrigen Verbindungsklassen die Statistik im einzelnen noch nicht interpretiert worden ist.

Mineralogisch-petrographisches Institut der Universität Bern.

¹⁾ *E. Brandenberger*, Helv. **30**, 493 (1947). ²⁾ *W. Nowacki*, Helv. **25**, 863 (1942).

³⁾ *W. Nowacki*, Helv. **26**, 459 (1943); Mitt. Natf. Ges. Bern [N.F.] **2**, 43 (1945); Helv. **28**, 664 (1945).