

## Die Symmetrie des Diamanten.

Von A. Johnsen in Kiel.

### I. Voraussetzung.

W. H. BRAGG<sup>1</sup> und W. L. BRAGG<sup>1</sup> untersuchten den Diamanten nach ihrer Reflexionsmethode und nach LAUE's photographischem Verfahren. Bei der ersten Untersuchungsart lieferte die Rhodium-Antikathode wesentlich Röntgenstrahlen von  $\lambda = 0,607 \times 10^{-8}$  cm. Aus den Werten der größten Reflexionswinkel der (111)-Ebenen und der (110)-Ebenen ergab sich als Translationsgruppe das flächenzentrierte Würfelgitter. Da der größte Reflexionswinkel („Spektrum 1. Ordnung“) der (111)-Ebenen gleich  $81^{\circ} 48'$  ermittelt wurde, so folgte als Kantenlänge  $a$  des flächenzentrierten Würfels  $3,55 \times 10^{-8}$  cm. Um die Dichte 3,51 des Diamanten zu erhalten, muß man aber zwei solche Gitter ineinanderstellen, wenn das Atomgewicht des Kohlenstoffs gleich  $12 \times 1,64 \times 10^{-24}$  g und das Atom als Strukturpartikel angenommen wird.

BRAGG's betrachten das eine Gitter um  $T = \frac{a\sqrt{3}}{4}$ , d. h. um ein Viertel der Würfeldiagonale gegen das andere verschoben und finden diese Vorstellung bestätigt. Da nämlich das Spektrum 2. Ordnung der (111)-Ebenen völlig fehlt, so muß der Abstand von zwei solchen Ebenen durch eine dritte im Verhältnis 1:3 geteilt werden; denn interferieren die an den beiden ersteren gebeugten Strahlen um  $2\lambda$ , so liefert die zwischenliegende mit ihnen Gangunterschiede von  $\frac{\lambda}{2}$  bzw.  $\frac{3\lambda}{2}$ , so daß Vernichtung des Spektrums 2. Ordnung eintritt. Ferner fehlt das Spektrum 1. Ordnung der (100)-Ebenen; in der Tat wird für  $T = \frac{a\sqrt{3}}{4}$  der Gangunterschied  $2d \cos \vartheta_1 = \frac{\lambda}{2}$ , wo  $d$  der Abstand benachbarter (100)-Ebenen und  $\vartheta_1$  der theoretische Reflexionswinkel des Spektrums 1. Ordnung der (100)-Ebenen des flächenzentrierten Gitters ist. Außer  $T = \frac{a\sqrt{3}}{4}$  ist für zwei flächenzentrierte Würfelgitter nur noch möglich  $T = \frac{a\sqrt{3}}{2}$ , was BRAGG's nicht erörtert haben. Es ist aber leicht zu erkennen, daß dann weder das Spektrum 1. Ordnung der (100)-Ebenen noch dasjenige 2. Ordnung der (111)-Ebenen vernichtet wird.

W. H. BRAGG und W. L. BRAGG machten überdies nach der LAUE'schen Methode mit heterogen strahlender Pt-Antikathode ein

<sup>1</sup> W. H. BRAGG und W. L. BRAGG, *Proceed. Roy. Soc.* 89. p. 277. London 1914.

Photogramm einer Spaltungsplatte (111). Die 19 beobachteten Arten von Schwärzungsflecken, entsprechend ebensovielen Flächenarten, erhalten die einfachsten Indizes (MILLER'sche) dann, wenn man (111) als Einheitsfläche und die Kanten [011], [101] und [110] als Koordinatenachsen wählt; diese Kanten stellen im flächenzentrierten Gitter die dichtest punktierten Netzlinien dar. Transformieren wir die von BRAGG's auf diese Achsen bezogenen Indizes auf die drei vierzähligen Achsen, welche im einfachen Würfelgitter die dichtest punktierten Netzlinien sind, so erfahren die Indizes der stärksten Schwärzungsflecke, nach abnehmender Schwärzung geordnet, folgende Änderung: (120)  $\rightarrow$  ( $\bar{1}$ 13), (130)  $\rightarrow$  ( $\bar{1}$ 12), (100)  $\rightarrow$  ( $\bar{1}$ 11), (010)  $\rightarrow$  (111), (001)  $\rightarrow$  (11 $\bar{1}$ ). Transformieren wir von drei zweizähligen auf drei dreizählige Achsen, entsprechend dem Übergang vom flächenzentrierten in das raumzentrierte Würfelgitter, so erfahren obige Indizes folgende Änderung: (120)  $\rightarrow$  (153), (130)  $\rightarrow$  (02 $\bar{1}$ ), (100)  $\rightarrow$  (311), (010)  $\rightarrow$  (131), (001)  $\rightarrow$  (113). Die Indizes werden also in der Tat in beiden Fällen komplizierter.

Auch rühren, wie schon BRAGG's bemerkten, die meisten und stärksten Flecke von der Reflexion an solchen Flächen her, die einer der Achsen [011], [101] und [110] parallel laufen. Der Umstand, daß die auf diese Achsen bezogenen Indizes beim Diamanten stets entweder eine ungerade oder eine durch vier teilbare Summe ergeben, spricht, wie BRAGG's zeigten, speziell für zwei um  $T = \frac{a\sqrt{3}}{4}$  gegeneinander verschobene flächenzentrierte Gitter.

Schließlich untersuchte E. KELLER<sup>1</sup> Diamantröntgenogramme von LAUE und von W. FRIEDRICH<sup>2</sup>, sowie das obige von W. H. BRAGG und W. L. BRAGG, im ganzen Beugungen von etwa 100 verschiedenen Gitterebenen. Er fand folgende zwei von ihm aus der BRAGG'schen Diamantstruktur gezogene Schlüsse glänzend bestätigt. Erstens dürfen keine Schwärzungspunkte vorhanden sein, deren „LAUE'sche Indizes“ die Summe  $s = 4n + 2$  geben, wo  $n$  irgendeine ganze Zahl ist. Zweitens müssen die Flecke mit der Indizesumme  $s = 4n$  doppelte Intensität der Schwärzung zeigen. So ist z. B. auf KELLER's Fig. 1 (p. 159) der Fleck (466) der stärkste von allen, der Fleck (335) einer der schwächsten.

## II. Fragestellung.

Die BRAGG'sche Folgerung, Diamant bestehe aus zwei flächenzentrierten Würfelgittern, die um ein Viertel der Raundiagonale des flächenzentrierten Würfels gegeneinander verschoben seien, wird nach obigem vielfach und durchweg gestützt. Daher dürfen

<sup>1</sup> E. KELLER, Ann. d. Phys. 46. p. 157. 1915.

<sup>2</sup> W. FRIEDRICH, ibid. 44. p. 1169. 1914; Fig. 3 auf p. 1178 und Tab. 2 auf p. 1179.

wir aus jener Folgerung wiederum Schlüsse ziehen, um mit diesen irgendeine Frage zu beantworten oder irgendeine Streitfrage zu entscheiden.

Da der Diamant von den einen zur Holoedrie, von den andern zur tetraedrischen Hemiedrie gestellt wird, fragen wir jetzt: Welche Schlüsse kann man aus der BRAGG'schen Struktur des Diamanten auf dessen Symmetrie ziehen?

Zu diesem Zwecke betrachten wir den Diamant wie üblich als regulär, machen die einzige und bei einem chemischen Element wohl unbedenkliche Annahme, daß alle Partikeln der BRAGG'schen Anordnung einander direkt kongruent oder spiegelbildlich kongruent sind, und bedenken schließlich, daß das LAUE'sche Verfahren über die Symmetrie der Partikel nichts anzusagen vermag. Nimm mehr nimmt obige Frage die präzisere Form an: Welche regulären Symmetrieklassen entstehen, wenn die Partikel der BRAGG'schen Anordnung alle möglichen Symmetrien durchläuft?

Demgemäß suchen wir jetzt für jede der fünf regulären Symmetrieklassen eine Partikelsymmetrie zu ermitteln, welche im Verein mit der BRAGG'schen Anordnung die Symmetrie der betreffenden Klasse ergibt.

### III. Untersuchung.

Setzt man in irgendeine der 230 SCHOENFLIES'schen Raumgruppen eine symmetrieloze Partikel derart ein, daß sie von keinem einzigen Symmetrieelement getroffen wird, und führt dann mit dieser Partikel alle Deckschiebungen (Translationen) und alle Symmetrieoperationen jener Raumgruppe aus, so entsteht ein Kristall derjenigen Symmetrieklasse, der die betreffende Raumgruppe angehört. Dann befinden sich in jedem Elementarparallelepiped so viele symmetrieloze Partikeln, als die allgemeinste Kristallform der Symmetrieklasse Flächen besitzt. Diesen ebenso wichtigen wie einleuchtenden Satz hat SCHOENFLIES<sup>1</sup> soeben ausgesprochen.

Da jedes Rauggitter ebensoviele Elementarparallelepiped als Gitterpunkte besitzt, so umfaßt ein flächenzentrierter Würfel seinen 4 Gitterpunkten entsprechend 4 Elementarparallelepiped, also 4n symmetrieloze Partikeln, wenn n die Flächenzahl der allgemeinsten Form einer regulären Symmetrieklasse ist. Tetartoedrie,  $n = 12$ ; pentagonale Hemiedrie,  $n = 24$ ; tetraedrische Hemiedrie,  $n = 24$ ; plagiedrische Hemiedrie,  $n = 24$ ; Holoedrie,  $n = 48$ . Nach BRAGG's aber enthält der Raum eines der flächenzentrierten Würfel des

<sup>1</sup> A. SCHOENFLIES, Zeitschr. f. Krist. 54. p. 545. 1915. Der Güte der Herren SCHOENFLIES und GROTH verdanke ich die Korrekturbogen dieses demnächst erscheinenden Artikels.

Diamanten statt obiger  $4n$  nur  $4 \times 2 = 8$  Kohlenstoffpartikeln, weil letztere lediglich die Gitterpunkte zweier (statt  $n$ ) ineinander gestellter flächenzentrierter Gitter innehaben. Die BRAGG'sche Diamantpartikel umfaßt also  $\frac{4n}{8} = N$  symmetrieloze Partikeln.

Tetartoedrie,  $N = \frac{48}{8} = 6$ ; pentagonale Hemiedrie,  $N = \frac{96}{8} = 12$ ;

tetraedrische Hemiedrie,  $N = \frac{96}{8} = 12$ ; plagiedrische Hemiedrie,

$N = \frac{96}{8} = 12$ ; Holoedrie,  $N = \frac{192}{8} = 24$ .

Man hat daher die BRAGG'sche Partikel, um die Diamantstruktur einer Raumgruppe zuzuordnen, in gewisse von Symmetrieelementen getroffene Punkte dieser Raumgruppe einzusetzen, welche durch jene Symmetrieelemente auf  $N$ -fache und nur auf  $N$ -fache Weise in sich selbst übergeführt werden. Solche Punkte wollen wir allgemein als  $N$ -wertig, speziell als 12-wertig, 24-wertig etc. bezeichnen.

Ist z. B.  $N = 6$ , so muß der Punkt entweder von einer dreizähligen Drehungsachse und drei zweizähligen Drehungsachsen oder von einer dreizähligen Drehungsachse und drei Spiegelungsebenen oder von einer dreizähligen Drehungsachse und einem Inversionszentrum getroffen werden.

Wir untersuchen jetzt jede reguläre Raumgruppe, deren Translationsgruppe  $T$  das flächenzentrierte Würfelgitter  $\Gamma_c$  ist, daraufhin, ob sie  $N$ -wertige Punkte in BRAGG'scher Anordnung enthält.

1. Tetartoedrie.  $N = 6$ . Die Translationsgruppe  $\Gamma_c$  ist nur in einer Raumgruppe<sup>1</sup> enthalten, nämlich in  $\mathfrak{T}^2$ ; diese enthält aber keine 6-wertigen Punkte.

2. Pentagonale Hemiedrie.  $N = 12$ . Die Translationsgruppe  $\Gamma_c$  ist nur in den beiden Raumgruppen  $\mathfrak{T}_h^3$  und  $\mathfrak{T}_h^4$  enthalten. In jeder derselben umfaßt der Raum eines flächenzentrierten Würfels acht 12-wertige Punkte. Die Anordnung ist aber nur in der Gruppe  $\mathfrak{T}_h^4$  mit der BRAGG'schen ident. Die in einen 12-wertigen Punkt gesetzte Partikel erhält durch die sie treffenden Symmetrieelemente die Form eines rechten oder eines linken Tetartoeders; die rechten Tetartoeder bilden ein einfaches flächenzentriertes Gitter, die linken ein gleiches, welches um  $\frac{1}{4}$  der Würfeldiagonale gegen das erstere verschoben ist. Dagegen trägt in der Gruppe  $\mathfrak{T}_h^3$  diese Verschiebung  $\frac{1}{2}$  der Würfeldiagonale.

3. Tetraedrische Hemiedrie.  $N = 12$ . Die Translationsgruppe  $\Gamma_c$  ist nur in den beiden Raumgruppen  $\mathfrak{T}_d^2$  und  $\mathfrak{T}_d^3$

<sup>1</sup> Die folgenden Raumgruppensymbole  $\mathfrak{T}^2$  etc. sind diejenigen von A. SCHOENFLIES, Kristallsysteme und Kristallstruktur, p. 534 ff. 1891.

enthalten. Erstere besitzt überhaupt keine 12-wertigen Punkte; letztere besitzt zwar solche, doch ist deren Anordnung nicht die BRAGG'sche, da die beiden Gitter um  $\frac{1}{2}$  statt um  $\frac{1}{4}$  der Diagonale des flächenzentrierten Würfels gegeneinander verschoben sind.

4. Plagiedrische Hemiedrie.  $N = 12$ . Die Translationsgruppe  $T_c$  ist nur in den beiden Raumgruppen  $\mathfrak{D}^3$  und  $\mathfrak{D}^4$  enthalten.  $\mathfrak{D}^3$  besitzt zwar 12-wertige Punkte, doch ist die Verschiebung der beiden Gitter gleich  $\frac{1}{2}$  der Diagonale. Dagegen enthält  $\mathfrak{D}^4$  12-wertige Punkte von der BRAGG'schen Anordnung. Die Partikeln erhalten sämtlich die Form eines und desselben Tetartoeders. Die Tetartoeder des einen Gitters sind gegen diejenigen des andern um  $180^\circ$  um eine Richtung [110] gedreht.

5. Holoedrie.  $N = 24$ . Die Translationsgruppe  $T_c$  ist nur in den Raumgruppen  $\mathfrak{D}_h^5$ ,  $\mathfrak{D}_h^6$ ,  $\mathfrak{D}_h^7$  und  $\mathfrak{D}_h^8$  enthalten.  $\mathfrak{D}_h^5$  und  $\mathfrak{D}_h^8$  besitzen keine 24-wertigen Punkte;  $\mathfrak{D}_h^6$  enthält zwar solche, doch ist die relative Verschiebung der beiden Gitter gleich  $\frac{1}{2}$  der Diagonale. Nur  $\mathfrak{D}_h^7$  besitzt 24-wertige Punkte von der BRAGG'schen Anordnung. Die Partikel erhält die Form eines Hexakis-tetraeders; die Hexakistetraeder des einen Gitters sind in Inversionsstellung zu denen des andern<sup>1</sup>.

#### IV. Ergebnisse.

1. Ermittelt man alle Raumgruppen, denen eine experimentell gefundene Kristallstruktur zugeordnet werden kann, so erscheint letztere im allgemeinen nicht mit allen Symmetrieklassen ihres Kristallsystems in Übereinstimmung. Daher kann die SCHOENFLIES'sche Strukturtheorie im Verein mit experimentellen Methoden über die Symmetrieklasse einer Kristallart entscheiden.

2. Die BRAGG'sche Diamantstruktur läßt sich nur der holoedrischen Raumgruppe  $\mathfrak{D}_h^7$ , der plagiedrischen  $\mathfrak{D}^4$  und der pentagonalen  $\mathfrak{D}_h^5$  zuordnen. Diamant kann also weder tetraedrisch noch tetartoedrisch sein.

3. Die in manchen, übrigens recht seltenen Fällen beobachtete Tetraedrie von Habitus oder Oberflächenzeichnung beruht auf Zufällen, d. h. auf Ursachen, die außerhalb des Diamanten liegen.

4. Wollte man die spärlichen Diamantkristalle mit gekerbten Kanten als Ergänzungszwillinge deuten, so hätte man entweder das „Gesetz des Eisernen Kreuzes“ (Pentagonale Hemiedrie) anzunehmen oder parallelachsige Verwachsung eines Rechtsers und eines Linkers (Plagiedrische Hemiedrie).

5. Als Symmetrieklasse des Diamanten ergibt sich mit größter Wahrscheinlichkeit die Holoedrie.

<sup>1</sup> Diese Raumgruppe hat bereits SCHOENFLIES, holoedrische Symmetrie des Diamanten voraussetzend, der BRAGG'schen Struktur zugesprochen (Zeitschr. f. Krist. 54, p. 566. 1915).

6. Da die fraglos tetraedrische (oder tetartoedrische) Zinkblende die gleiche Partikelanordnung hat wie Diamant, diese Anordnung aber nach obigen bei Gleichheit aller Partikeln tetraedrische (oder tetartoedrische) Symmetrie nicht besitzen kann, so folgt, daß die Partikeln nicht gleichartige Zn-S-Molekeln, sondern wohl — wie BRAGG's<sup>1</sup> auch bereits aus andern Gründen<sup>2</sup> annahm — zur Hälfte Zn-Atome, zur Hälfte S-Atome darstellen, welche je ein flächenzentriertes Gitter aufbauen.

## Beiträge zur Kenntnis der oberjurassischen Schildkrötengattung *Hydropelta*.

Von **Walter Oertel**, München.

Mit einer Abbildung.

Als Ergänzung zu meiner Monographie über die Schildkröten des oberen nordwestdeutschen Jura nahm ich auch eine Sichtung des aus dem lithographischen Schiefer von Solnhofen, Eichstätt und Kelheim stammenden Testudinatenmaterials, das sich auf die Gattungen *Eurysternum*, *Idiochelys* und *Hydropelta* verteilt, vor. Schon damals fiel mir auf, daß auf einen großen Teil der Stücke, die der noch recht ungenügend bekannten Gattung *Hydropelta* angehören sollten, die Beschreibung, wie sie H. VON MEYER, LORTET und RÜTIMEYER von diesem Genus gegeben haben, nicht paßt; es fiel mir ferner bei der Einsicht der in Betracht kommenden Literatur an, daß überhaupt unter dem Begriff „*Hydropelta*“ recht verschiedenartige Typen zusammengefaßt wurden. So paßt auf das von H. VON MEYER begründete Genus *Hydropelta* durchaus nicht immer der später von LORTET, RÜTIMEYER, MAACK und von ZITTEL in erweitertem Sinne gebrauchte Gattungsbegriff. Um diese, wie es scheint, bisher noch nicht aufgedeckten Unstimmigkeiten klarzustellen, nahm ich eine Neubearbeitung des in der Münchener paläontologischen Staatssammlung aufbewahrten Materials vor, welches seinerzeit die Originale zu den von H. VON MEYER, MAACK und von ZITTEL vorgenommenen Untersuchungen lieferte. Für die lebenswürdige Bereitwilligkeit, mit der die Herren Professor ROTH-PLETZ und BROILI meine Untersuchungen unterstützten, möchte ich ihnen auch an dieser Stelle meinen verbindlichsten Dank aussprechen.

Das in der Münchener Sammlung aufbewahrte, *Hydropelta* zugeschriebene Material setzt sich aus zwei Rückenpanzern, einem

<sup>1</sup> W. H. BRAGG und W. L. BRAGG, Proceed. Roy. Soc. 89. p. 286. London 1914.

<sup>2</sup> Schwaches, aber doch gegenüber Diamant deutliches Spektrum 1. Ordnung der (100)-Ebenen wie Spektrum 2. Ordnung der (111)-Ebenen.

# ZOBODAT - [www.zobodat.at](http://www.zobodat.at)

Zoologisch-Botanische Datenbank/Zoological-Botanical Database

Digitale Literatur/Digital Literature

Zeitschrift/Journal: [Centralblatt für Mineralogie, Geologie und Paläontologie](#)

Jahr/Year: 1915

Band/Volume: [1915](#)

Autor(en)/Author(s): Johnsen Arrien

Artikel/Article: [Die Symmetrie des Diamanten. 331-336](#)