

Original-Mitteilungen an die Redaktion.

Die einfachsten Bahnen der Atome während der Schiebungen im Eisenglanz und Korund.

Von **A. Johnsen** in Kiel.

Mit 4 Textfiguren.

Inhalt:

Einleitung. p. 433. — Die Struktur von Eisenglanz und Korund. p. 436. — Kristallschiebungen im Eisenglanz und Korund. p. 439. — Gitterschiebungen im Eisenglanz und Korund. p. 440. — Strukturschiebungen im Eisenglanz und Korund. p. 441. — Ergebnis. p. 445.

Einleitung.

In den letzten Jahren hat es sich gezeigt, daß die als „Schiebungen“ bezeichneten Kristalldeformationen im allgemeinen keine reinen Schiebungen im Sinne der Mechanik sind. So erfahren während der Schiebungen des Kalkspates und des Wismuts die Atome nicht nur Deformationen, die an sich nichts mit Schiebung gemein haben, sondern überdies derartige Ortsveränderungen, wie sie durch geradlinige Bewegung der Atome längs der Gleitrichtung nicht erzielt werden können.

Die nach vollzogener Kristallschiebung beobachteten Deformationen der Flächen und Kanten sowie der physikalischen Vektoren täuschen eine reine Schiebung vor. Gibt man nämlich irgend zweien parallel der Gleitfläche K_1 liegenden Kanten und einer parallel der Grundzone σ_2 gelegenen Kante oder irgend zweien parallel der zweiten Kreisschnittsebene K_2 liegenden Kanten und einer parallel der Gleitrichtung σ_1 gelegenen Kante drei beliebige Längen und betrachtet diese drei Vektoren als primitives Parametertripler eines Gitters G , so geht dieses Gitter stets dann in sich selbst über, wenn seine Gitterpunkte eine einfache Schiebung nach K_1 mit σ_2 oder nach σ_1 mit K_2 ansühren, d. h. sich parallel der Gleitrichtung σ_1 um Strecken verschieben, die proportional ihrem Abstände von der Gleitfläche K_1 sind.

Diese Tatsache liegt auch den drei Gleichungen zugrunde, die O. MÜGGE¹ für die durch Schiebung bewirkte Änderung der

¹ O. MÜGGE, N. Jahrb. f. Min. etc. 1889. II. 108 und *ibid.*, Beil.-Bd. VI. 286. 1889.

Flächenindizes abgeleitet hat. Nun ist leicht einzusehen, daß man G , wenn man den drei erzeugenden Parametern geeignete Längen zumißt, stets als ein Teilgitter des wirklichen Kristallgitters T betrachten darf, so daß n solche Teilgitter $G_1, G_2 \dots G_n$, in bestimmter Weise parallel ineinander gestellt, das wahre Gitter T des Kristalls aufbauen. Nach Obigem geht aber jedes dieser Teilgitter infolge der Kristallschiebung in sich über. Soll hierbei auch T in sich deformiert werden, so muß die gegenseitige Orientierung der n -Teilgitter $G_1, G_2 \dots G_n$ in sich selbst übergehen. Das ist jedoch stets und nur dann der Fall, wenn jedes primitive Parallelepiped der Gitter $G_1, G_2 \dots G_n$ nach der Schiebung ebensoviele Gitterpunkte von T absorbiert als vorher, also bei n -Teilgittern G nach wie vor n Gitterpunkte. Diese anschauliche Bedingung äußert sich, wenn irgend drei Parameter $[e_1 \cdot f_1 \cdot g_1]$, $[e_2 \cdot f_2 \cdot g_2]$ und $[e_3 \cdot f_3 \cdot g_3]$ durch die Kristallschiebung der Reihe nach in $[e'_1 \cdot f'_1 \cdot g'_1]$, $[e'_2 \cdot f'_2 \cdot g'_2]$ und $[e'_3 \cdot f'_3 \cdot g'_3]$ übergeführt werden, mathematisch in der Gleichung

$$\begin{vmatrix} e_1 & f_1 & g_1 \\ e_2 & f_2 & g_2 \\ e_3 & f_3 & g_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} e'_1 & f'_1 & g'_1 \\ e'_2 & f'_2 & g'_2 \\ e'_3 & f'_3 & g'_3 \end{vmatrix}$$

Indem man nun die eingestrichenen Indizes mittels der MÜGGESCHEN (l. c.) oder ähnlicher Formeln als Funktionen der ungestrichenen ausdrückt, gelangt man zu neun Gleichungen¹, in denen die Indizes h, k, l von K_1 bzw. von K_2 und die Indizes u, v, w von σ_2 bzw. von σ_1 als Koeffizienten fungieren. Dieselben sind die notwendige und hinreichende Bedingung dafür, daß der Übergang des Kristallgitters T in sich selbst durch reine Schiebung, also dadurch bewirkt werden kann, daß alle Gitterpunkte von T sich längs der Gleitrichtung σ_1 um Beträge fortbewegen, die ihrem Abstand von der Gleitfläche K_1 proportional sind. Solche Deformation von T nannte ich Gitterschiebung.

Im allgemeinen bilden jedoch die Atome eines Kristalles mehrere Gitter T , also $T_1, T_2 \dots T_n$, die als Punktgitter gedacht einander kongruent und parallel sind. Geht nun T durch Schiebung in sich über, so gilt offenbar das gleiche für $T_1, T_2 \dots T_n$. Soll aber die ganze Struktur und somit das ganze von $T_1, T_2 \dots T_n$ gebildete „regelmäßige Punktsystem“ in sich deformiert werden, so muß auch die gegenseitige Lage von $T_1, T_2 \dots T_n$ in sich selbst übergehen. Hierfür ergeben sich die Bedingungen² einfach aus der Tatsache, daß der Symmetrieeffekt einer Kristallschiebung stets entweder einer halben Umdrehung um die Normale von K_1 oder einer Spiegelung an K_1 oder einer halben Umdrehung um σ_1 oder einer Spiegelung an der Normalebene von σ_1 (oder allen diesen

¹ A. JOHNSEN, dies. Centralbl. 6. 121. 1916.

vier Symmetrioperationen zugleich) entspricht. Betrachtet man nämlich ein zu irgend einem der Gitter $\Gamma_1, \Gamma_2 \dots \Gamma_n$ gehörendes Gitterparallelepiped Π' , dessen drei Kanten identisch mit zwei beliebigen $\parallel K_1$ oder $\parallel K_2$ verlaufenden Parametern k_1 und k'_1 oder k_2 und k'_2 und dem $\parallel \sigma_2$ oder $\parallel \sigma_1$ liegenden Parameter s_2 oder s_1 sind, so müssen die in und auf Π' gelegenen Atome oder Atomkomplexe nach bestimmten Regeln geordnet sein. Diese Regeln erfordern eine paarige Verteilung der Schwerpunkte jener Atome oder Atomkomplexe und drücken sich in vier Gleichungen¹ aus, deren jede für einen der vier möglichen genannten Symmetrieffekte gilt. Sind nämlich x, y, z die auf k_1, k'_1 und s_2 oder auf k_2, k'_2, s_1 als X-, Y-, Z-Achse bezogenen Koordinaten eines Atom- oder Atomkomplex-Schwerpunktes, so muß dieser dem Schwerpunkte x', y', z' eines chemisch gleichen Atoms oder Atomkomplexes derart zugeordnet sein, daß eine der vier Gleichungen (1a) bis (2b) gilt:

$$(1a) \quad x' = k_1 - x, \quad y' = k'_1 - y, \quad z' = z$$

$$(1b) \quad x' = x, \quad y' = y, \quad z' = s_2 - z$$

$$(2a) \quad x' = k_2 - x, \quad y' = k'_2 - y, \quad z' = z$$

$$(2b) \quad x' = x, \quad y' = y, \quad z' = s_1 - z.$$

Ist eine dieser vier Gleichungen erfüllt, so kann die Struktur durch eine reine Schiebung in sich selbst deformiert werden. Solche Deformation der Struktur nannte ich *Strukturschiebung*; dieselbe setzt offenbar *Gitterschiebung* voraus.

„Gitterschiebung“ bedeutet also für die Punkte eines Gitters, „Strukturschiebung“ für die Punkte eines Punktsystems eine reine Schiebung im mechanischen Sinne, während das Wort „Kristallschiebung“ lediglich die schiebungsartige Deformation der Flächen, Kanten und physikalischen Vektoren eines Kristalles kennzeichnet.

Die 10 durch das primitive Rhomboeder $\{311\}$ charakterisierten, von den Atomen des Kalkspates gebildeten Gitter können nicht durch Gitterschiebung nach $K_1 = (011)$ mit $K_2 = (100)$ in sich deformiert werden, wohl aber die 2 durch das primitive Rhomboeder $\{\bar{1}11\}$ ausgezeichneten, von den Ca- und CO_3 -Schwerpunkten gebildeten Gitter; auch wird durch reine Schiebung die gegenseitige Lage dieser beiden Gitter in sich übergeführt, so daß Strukturschiebung möglich ist; während der geradlinigen Bewegung des CO_3 -Schwerpunktes längs der Gleitrichtung σ_1 erleidet der Komplex CO_3 eine Deformation in sich.

Die beiden durch das primitive Rhomboeder $\{\bar{1}11\}$ definierten Atomgitter des Wismuts können durch Gitterschiebung nach $K_1 = (011)$ mit $K_2 = (100)$ in sich übergeführt werden; hierbei geht jedoch ihre gegenseitige Lage nicht in sich über. Dagegen vermögen offenbar Komplexe Bi_2 eine Strukturschiebung auszuführen,

¹ A. JOHNSON, dies. Centralbl. 16. 385. 1916.

wobei dieselben. // σ_1 fortschreitend, eine Deformation in sich erfahren. Wünscht man ein deutlicheres Bild der Atombewegung, so kann man sich z. B. beim Wismut vorstellen, daß auf der $3 \times 10^{-8} \pi$ cm langen Peripherie eines Kreises zwei Bi-Atome einander diametral gegenüberliegen und daß der Kreis auf einer // K_1 verlaufenden Ebene in der Richtung σ_1 bis an ein bestimmtes Ziel rollt.

Die Struktur von Eisenglanz und Kornd.

Nach W. H. und W. L. BRAGG¹ kann man die röntgenometrisch ermittelte Struktur des Eisenglanzes etwa so beschreiben: Man setze an Stelle jedes Ca-Atoms des Kalkspates zwei Fe-Atome hantelartig in die dreizählige Achse, während man die O-Atome unverändert läßt und die C-Atome entfernt. Der Abstand zweier benachbarter Fe-Ebenen (111) scheint etwas geringer zu sein als derjenige zwischen einer Fe-Ebene (111) und der nächsten O-Ebene (111); das Verhältnis dieser beiden Distanzen ist in den folgenden Figuren gleich 2:3 angenommen. Die Abstände der O-Atome und der fingierten C-Atome sind in Richtung der drei zweizähligen Achsen derart, daß $x = O - C$ sich zu $d = C - C$ annähernd wie 1:2 verhält, während im Kalkspat $x:d$ etwa gleich 3:10 ist²; im folgenden ist jene Proportion gleich 2:5 angenommen. Demnach besitzen die O-Atome und die Fe-Atome je einen Freiheitsgrad. Das Ergebnis unserer folgenden Untersuchung der Atombewegungen ist unabhängig von den genauen Positionen jener zwei monovarianten Atomarten. Aus BRAGG's Angaben folgt: Die Raumgruppe des Eisenglanzes ergibt sich wie diejenige des Kalkspates als D_{3d}^6 . Die Fe-Atome gehören zur Tetartoedrie des rhomboedrischen Kristallsystems, während die O-Atome monoklin hemimorph sind. Vier Fe-Gitter und sechs O-Gitter vom primitiven Rhomboeder $\{3\bar{1}\bar{1}\}$ sind parallel ineinandergestellt. Diesen zehn rhomboedrischen Gittern entsprechend ist Eisenglanz durch $2 + 3(10 - 1) = 29$ Strukturkonstanten charakterisiert. Wir setzen den Polkantenwinkel des primitiven Rhomboeders $\{3\bar{1}\bar{1}\}$ gleich α (oder den äußeren Flächenwinkel an der Polkante gleich A) und die Längen dieser Kanten gleich a, während wir die letzteren als Vektoren mit a_1, a_2, a_3 und die ihnen parallelen Verschiebungsvektoren eines Gitters gegenüber den neun anderen mit t_2, t_3, \dots, t_{10} bezeichnen; hierbei betrachten wir ein Fe-Gitter als fest und beziehen t_2, t_3, t_4 auf die drei anderen Fe-Gitter sowie t_5 bis t_{10} auf die sechs O-Gitter.

Das in Fig. 1 dargestellte primitive Fe-Rhomboeder $\{3\bar{1}\bar{1}\}$ absorbiert also vier Fe-Atome und sechs O-Atome, die sämtlich abgebildet sind (Fe durch leere Kreise, O durch volle Kreise).

¹ W. H. and W. L. BRAGG, X rays and crystal structure. 169. London 1915.

² W. L. BRAGG, Proceed. Roy. Soc. Ser. A. 89. 486 u. 488. London 1914.

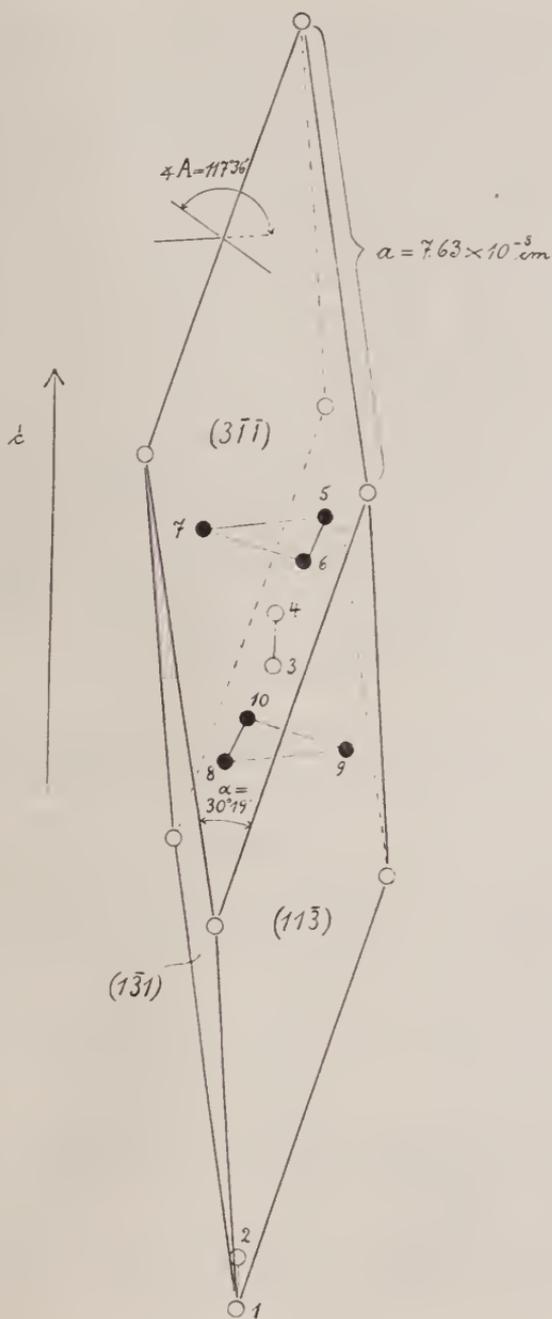


Fig. 1.

Die den Atomen beigeschriebenen Nummern 2 bis 10 sind den Vektoren t_2 bis t_{10} zugeordnet, so daß z. B. der Vektor t_3 den Schwerpunkt des Fe-Atoms No. 1 in denjenigen des Fe-Atoms No. 3, der Vektor t_6 das Zentrum des Fe-Atoms No. 1 in dasjenige des O-Atoms No. 6 überführt. Zur Auswertung der Vektoren t_2 bis t_{10} haben wir die Koordinaten jener Atome zu ermitteln. Man entnimmt der BRAGG'schen Strukturschilderung leicht die auf drei der vier BRAVAIS'schen Achsen bezogenen Indizes der Atomzentren und transformiert dieselben auf das MILLER'sche Achsensystem. Die erforderlichen Transformationsformeln sind den von LIEBISCH für Kantenindizes abgeleiteten sehr ähnlich. Gehen nämlich die drei Scharen von Gitterebenen $(h_1 k_1 l_1)$, $(h_2 k_2 l_2)$, $(h_3 k_3 l_3)$ der Reihe nach in (100) , (010) , (001) über und die Gitterebene $(\varrho h, \varrho k, \varrho l)$ in $(1, 1, 1)$ und demnach das (nicht notwendig primitive) Parametertripel $[\varrho_1 u_1 \cdot \varrho_1 v_1 \cdot \varrho_1 w_1]$, $[\varrho_2 u_2 \cdot \varrho_2 v_2 \cdot \varrho_2 w_2]$, $[\varrho_3 u_3 \cdot \varrho_3 v_3 \cdot \varrho_3 w_3]$ in $[1. 0. 0]$, $[0. 1. 0]$, $[0. 0. 1]$, dann gehen die Indizes τm , τn , τp eines Atomzentrums $[\tau m, \tau n, \tau p]$ in $\tau' m'$, $\tau' n'$, $\tau' p'$ über; hierbei bestehen die sechs Tripel $h_1 k_1 l_1$, $h_2 k_2 l_2$, $h_3 k_3 l_3$, $h k l$, $m n p$, $m' n' p'$ aus je drei teilerfremden ganzen Zahlen, während die im allgemeinen nichtganzzahligen Koeffizienten ϱ , ϱ_1 , ϱ_2 , ϱ_3 , τ , τ' entweder rational sind oder in beliebiger Annäherung rational gesetzt werden können; die neuen Indizes $\tau' m'$, $\tau' n'$, $\tau' p'$ ergeben sich aus

$$(I) \begin{cases} \tau' m' = \tau \varrho^2 \varrho_1^2 (m h_1 + n k_1 + p l_1) (h^2 u_1^2 + k^2 v_1^2 + l^2 w_1^2) \\ \tau' n' = \tau \varrho^2 \varrho_2^2 (m h_2 + n k_2 + p l_2) (h^2 u_2^2 + k^2 v_2^2 + l^2 w_2^2) \\ \tau' p' = \tau \varrho^2 \varrho_3^2 (m h_3 + n k_3 + p l_3) (h^2 u_3^2 + k^2 v_3^2 + l^2 w_3^2) \end{cases}$$

Bezieht man nun für Eisenglanz die Indizes der Atome No. 2 bis 10 in Fig. 1 auf die Parameter zweier zweizähligen Achsen und der dreizähligen Achse, indem man die dritte BRAVAIS'sche Achse eliminiert, so erhält man für die Atome No. 2 bis 10 folgende Symbole $[\tau m, \tau n, \tau p]$:

$$\begin{aligned} 2. &= [0. 0. \frac{1}{4}], & 3. &= [0. 0. \frac{1}{2}], & 4. &= [0. 0. \frac{3}{4}], & 5. &= [\frac{5}{15}. \frac{1}{15}. \frac{2}{3}], \\ 6. &= [\frac{4}{15}. \frac{5}{15}. \frac{2}{3}], & 7. &= [\frac{1}{15}. \frac{1}{15}. \frac{2}{3}], & 8. &= [\frac{5}{15}. \frac{1}{15}. \frac{2}{3}], & 9. &= [\frac{1}{15}. \frac{1}{15}. \frac{2}{3}], \\ & & & & & & 10. &= [\frac{5}{15}. \frac{1}{15}. \frac{2}{3}]. \end{aligned}$$

Transformiert man nunmehr die Atomindizes auf ein MILLER'sches Koordinatensystem, dem man die Polkanten a_1 , a_2 , a_3 des primitiven Rhomboeders $\{3\bar{1}\bar{1}\}$ der Fig. 1 zugrunde legt, so wird

$$\begin{aligned} (\varrho h, \varrho k, \varrho l) &= (0, 0, 3), & (h_1 k_1 l_1) &= (101), & (h_2 k_2 l_2) &= (\bar{1}11), & (h_3 k_3 l_3) &= (011), \\ [\varrho_1 u_1 \cdot \varrho_1 v_1 \cdot \varrho_1 w_1] &= [\frac{2}{3} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3}], & [\varrho_2 u_2 \cdot \varrho_2 v_2 \cdot \varrho_2 w_2] &= [\frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3}], \\ [\varrho_3 u_3 \cdot \varrho_3 v_3 \cdot \varrho_3 w_3] &= [\frac{1}{3} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{3}]; \end{aligned}$$

somit ergeben sich aus (I) für die Atome No. 2 bis 10 der Fig. 1 folgende Symbole $[\tau' m', \tau' n', \tau' p']$:

$$\begin{aligned}
 2. &= \left[\frac{1}{24}, \frac{1}{24}, \frac{1}{24} \right], & 3. &= \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right], & 4. &= \left[\frac{13}{24}, \frac{13}{24}, \frac{13}{24} \right], & 5. &= \left[\frac{65}{240}, \frac{65}{240}, \frac{65}{240} \right], \\
 6. &= \left[\frac{209}{240}, \frac{161}{240}, \frac{161}{240} \right], & 7. &= \left[\frac{161}{240}, \frac{65}{240}, \frac{209}{240} \right], & 8. &= \left[\frac{89}{240}, \frac{41}{240}, \frac{89}{240} \right], \\
 9. &= \left[\frac{89}{240}, \frac{185}{240}, \frac{41}{240} \right], & 10. &= \left[\frac{41}{240}, \frac{89}{240}, \frac{185}{240} \right].
 \end{aligned}$$

Als Verschiebungsvektoren der Gitter No. 2 bis 10 gegenüber No. 1 ergeben sich sonach

$$\begin{aligned}
 t_2 &= \frac{a_1}{24} + \frac{a_2}{24} + \frac{a_3}{24}, & t_3 &= \frac{a_1}{2} + \frac{a_2}{2} + \frac{a_3}{2}, & t_4 &= \frac{13 a_1}{24} + \frac{13 a_2}{24} + \frac{13 a_3}{24}, \\
 t_5 &= \frac{65 a_1}{240} + \frac{209 a_2}{240} + \frac{161 a_3}{240}, & t_6 &= \frac{209 a_1}{240} + \frac{161 a_2}{240} + \frac{65 a_3}{240}, \\
 t_7 &= \frac{161 a_1}{240} + \frac{65 a_2}{240} + \frac{209 a_3}{240}, & t_8 &= \frac{185 a_1}{240} + \frac{41 a_2}{240} + \frac{89 a_3}{240}, \\
 t_9 &= \frac{89 a_1}{240} + \frac{185 a_2}{240} + \frac{41 a_3}{240}, & t_{10} &= \frac{41 a_1}{240} + \frac{89 a_2}{240} + \frac{185 a_3}{240}.
 \end{aligned}$$

Jeder dieser neun Vektoren enthält drei Strukturkonstanten: dazu kommen noch zwei Strukturkonstanten, nämlich die oben definierten Gitterkonstanten a und $\sphericalangle \alpha$ oder a und $\sphericalangle A$. Aus KOKSCHAROW's Wert $c = 1,36557$ folgt $\sphericalangle \alpha = 30^{\circ} 19'$ und $\sphericalangle A = 117^{\circ} 36'$. Hieraus, aus der Dichte $D = 5,25$ und dem absoluten Molekulargewicht $m = 159,68 \times 1,65 \times 10^{-24}$ g findet man

$$a = \sqrt[3]{\frac{2m}{D \sin^2 \alpha \sin A}} = 7,63 \times 10^{-8} \text{ cm.}$$

Die Struktur des Korund ist innerhalb der empirischen Fehler derjenigen des Eisenglanzes gleich; die erstgenannten 27 Strukturkonstanten bleiben also bestehen; aus dem MILLER'schen Werte $c = 1,3630$ folgt $\sphericalangle \alpha = 30^{\circ} 24'$ und $\sphericalangle A = 117^{\circ} 35'$; aus $D = 4,10$ und $m = 102,2 \times 1,65 \times 10^{-24}$ g findet man $a = 7,13 \times 10^{-8}$ cm.

Kristallschiebungen im Eisenglanz und Korund.

Kürzlich hat K. VEIT¹ im hiesigen Mineralogischen Institut Schiebungen im Eisenglanz und Korund hervorgerufen; es wurde bei jedem Versuch ein Kristall innerhalb eines stählernen Hohlzylinders in Schwefelpulver festgestampft und sodann ein gut abgedichteter Stahlstempel unter Drucken von 5000 und 20000 Atmosphären in den Zylinder hineingetrieben. Die Kristalle waren einige Millimeter lang und breit und in Richtung der Stempelachse 0,5 bis 4 mm dick. Der Eisenglanz stammte von Elba und zeigte die Formen $\{100\} = \{10\bar{1}1\}$, $\{211\} = \{10\bar{1}4\}$, $\{3\bar{1}\bar{1}\} = \{22\bar{4}3\}$. Der Korund war australischer Saphir von grünlichblauer, zonar verteilter Färbung und der Form $\{513\} = \{44\bar{8}3\}$, $\{111\} = \{0001\}$ nebst gelegentlichen Absonderungsflächen $\{100\} = \{10\bar{1}1\}$.

¹ K. VEIT hat diese und andere Ergebnisse infolge des Krieges noch nicht veröffentlichen können.

Im Eisenglanz gingen die Schiebungen nach $K_1 = (100)$ mit $K_2 = (011)$, $\sigma_1 = [011]$, $\sigma_2 = [100]$ sehr leicht vor sich, während solche nach $K_1 = (111)$ mit $K_2 = (\bar{1}11)$, $\sigma_1 = [211]$, $\sigma_2 = [211]$ nur in senkrecht zur Gleitrichtung σ_1 orientierten Platten bei Parallelismus von Stempelachse und σ_1 zu erzielen waren. Im Korund vollzogen sich die Schiebungen nach $K_1 = (111)$ mit $K_2 = (\bar{1}11)$, $\sigma_1 = [211]$, $\sigma_2 = [211]$ ziemlich leicht, wogegen Schiebungen nach $K_1 = (100)$ merkwürdigerweise auch in solchen Platten, die senkrecht zur Gleitrichtung $\sigma_1 = [011]$ orientiert waren, nicht bewirkt werden konnten.

Die von K. VEIT mittels Reflexionsgoniometers gemessenen Winkel zwischen deformierten und undeformierten Oberflächen teilen stimmten sehr gut mit den aus obigen Schiebungselementen berechneten überein.

Gitterschiebungen im Eisenglanz und Korund.

Wenden wir die Gleichungen der Gitterschiebung (s. Einleitung) auf die Eisenglanzschiebung nach $K_1 = (100)$ mit $\sigma_2 = [100]$ an, so ergibt sich offenbar ebenso wie seinerzeit für die analoge Kalkspatschiebung, daß jene Gleichungen nur für diejenigen drei rhomboedrischen Gitter erfüllt sind, deren primitives Rhomboeder $II = \{\bar{1}11\}$ oder $\{100\}$ oder $\{011\}$ ist. Nunmehr ist festzustellen, welche von diesen drei Gittern eine Gitterschiebung nach $K_1 = (111)$ mit $\sigma_2 = [211]$ gestatten. Beziehen wir alle Indizes auf die drei Polkanten jener primitiven Rhomboeder II , so wird für $II = \{\bar{1}11\}$ offenbar $K_1 = (hkl) = (111)$ und $\sigma_2 = [uvw] = [011]$, also $hu + kv + lw = 2$; für $II = (100)$ dagegen wird $K_1 = (hkl) = (111)$ und $\sigma_2 [uvw] = [211]$, also $hu + kv + lw = 4$, und für $II = \{011\}$ folgt $K_1 = (hkl) = (111)$ nebst $\sigma_2 = [uvw] = [233]$, also $hu + kv + lw = 8$. Da nun $|hu + kv + lw|$ nur gleich 1 oder 2 sein darf, so ergibt sich $II = \{\bar{1}11\}$ als primitives Rhomboeder des einzigen Gitters, in welchem sich beide Eisenglanzschiebungen als Gitterschiebungen abspielen können. Dieses Gitter aber läßt sich aus der BRAGG'schen Eisenglanzstruktur nur so gewinnen, daß man mehrere der O-Atome, die ja sechs Gitter mit $II = \{\bar{3}\bar{1}\bar{1}\}$ bilden, zu einem Komplex zusammenfaßt. Am einfachsten ersetzt man je drei ein gleichseitiges Dreieck $//(111)$ bildende O-Atome, wie z. B. No. 5, 6, 7 der Fig. 1, durch ihren gemeinsamen Schwerpunkt. Diese O_3 -Schwerpunkte formieren dann ein einziges Gitter mit dem primitiven Rhomboeder $II = \{\bar{1}11\}$. Da sich nun die vier Fe-Gitter mit $II = \{\bar{3}\bar{1}\bar{1}\}$, wenn man die Fe-Atome punktförmig denkt, als zwei Fe-Gitter mit $II = \{\bar{1}11\}$ betrachten lassen, so haben wir zwei von Fe-Atomzentren aufgebaute Gitter und ein von O_3 -Schwerpunkten gebildetes, die alle drei kongruent und parallel und durch das primitive Rhomboeder $II = \{\bar{1}11\}$ angezeichnet sind.

Aus Fig. 1 gewinnt man diese drei Gitter, indem man mit den beiden Fe-Atomen No. 3 und 4 sowie mit dem gemeinsamen Schwerpunkt der drei O-Atome No. 5, 6, 7 die Translationen jenes durch $H = \{\bar{1}11\}$ charakterisierten Gitters ausführt.

Dieses Punktsystem vermag während der beiden Eisenglanzschiebungen stets und nur dann Strukturschiebungen zu erfahren, wenn während der Kristallschiebungen die gegenseitige Lage jener drei Gitter in sich selbst übergeht.

Strukturschiebungen im Eisenglanz und Korund (Fig. 2, 3, 4).

Wir untersuchen jetzt, ob die Ineinanderstellung der beiden Fe-Gitter und des O_3 -Gitters mit dem primitiven Rhomboeder $\{\bar{1}11\}$ während der beiden Kristallschiebungen des Eisenglanzes dadurch in sich übergehen kann, daß jeder Punkt dieses dreigitterigen Punktsystems eine gerade, der Gleitrichtung σ_1 parallele Strecke durchläuft, welche s mal so groß als sein Abstand von der Gleitfläche K_1 ist, wo s die „Größe der Schiebung“ bedeutet.

Nach dem in der Einleitung Gesagten hat man für jede der beiden Eisenglanzschiebungen die Atomverteilung in zwei Parallelepipeden II' zu untersuchen, nämlich in einem mit k_1, k'_1, s_2 und in einem mit k_2, k'_2, s_1 konstruierten; jedoch lassen sich beide Parallelepipeda II' identisch gestalten, indem man $k_1 = s_1, k_2 = s_2$ und $k'_1 = k'_2$ macht, wo $k'_1 = k'_2$ den Parameter der Schnittkante der beiden Kreisschnittsebenen K_1 und K_2 bedeutet. Die Indizes der Parameter beziehen wir im folgenden auf die Polkanten des positiven Grundrhomboeders $\{100\}$, so daß $\angle \alpha = 85^\circ 42'$, $\angle A = 94^\circ 0'$ ist¹.

1. Die Schiebung nach der Basis (Fig. 2).

Es ist $K_1 = (111)$, $K_2 = (11\bar{1})$, $\sigma_1 = [11\bar{2}]$, $\sigma_2 = [112]$. Behufs Anwendung der vier Gleichungen (1 a), (1 b), (2 a), (2 b) (s. Einleitung) legen wir den Parameter $k_1 = s_1 = [1.1.2]$ in die X-Achse (σ_1), $k_2 = s_2 = [1.1.2]$ in die Z-Achse (σ_2), $k'_1 = k'_2 = [\bar{1}.1.0]$ in die Y-Achse. Die Flächen unseres Parallelepipeds II' sind $K_1 = (111)$, $K_2 = (11\bar{1})$, $S = (1\bar{1}0)$; parallel S , der „Ebene der Schiebung“, liegt die neben Fig. 2 verzeichnete Hauptachsenrichtung \bar{c} . Fig. 2 ist im gleichen Maßstab und in gleicher Orientierung konstruiert wie Fig. 1 sowie die folgenden

¹ Man steht gegenwärtig vor der Prinzipienfrage, ob man das übliche „Achsenkreuz“ einer Kristallart beibehalten oder durch ein röntgenometrisch ermitteltes Parametertripel a_1, b_1, c_1 ersetzen will. Es erscheint mir zweckmäßig, vorläufig bei dem gebräuchlichen Achsenkreuz zu beharren. Jedoch wird man für Kristallarten mit rhomboedrischem Gitter ein MILLER'sches, für solche mit hexagonalem Gitter ein BRAVAIS'sches Achsensystem wählen.

Fig. 3 und 4; alle Figuren enthalten nur die in und auf dem dargestellten Parallelepiped liegenden Atome.

In den Ecken von II' (Fig. 2) mögen Fe-Atome liegen (leere Kreise); dann sind auch die Zentren der Rechtecke K_1 und K_2 sowie des Rhomboids S mit je einem Fe-Atom besetzt; wenig unterhalb jedes Fe-Atoms befindet sich ein zweites, das mit jenem eine Hantel in Richtung der Hauptachse \hat{c} bildet; daher liegen im

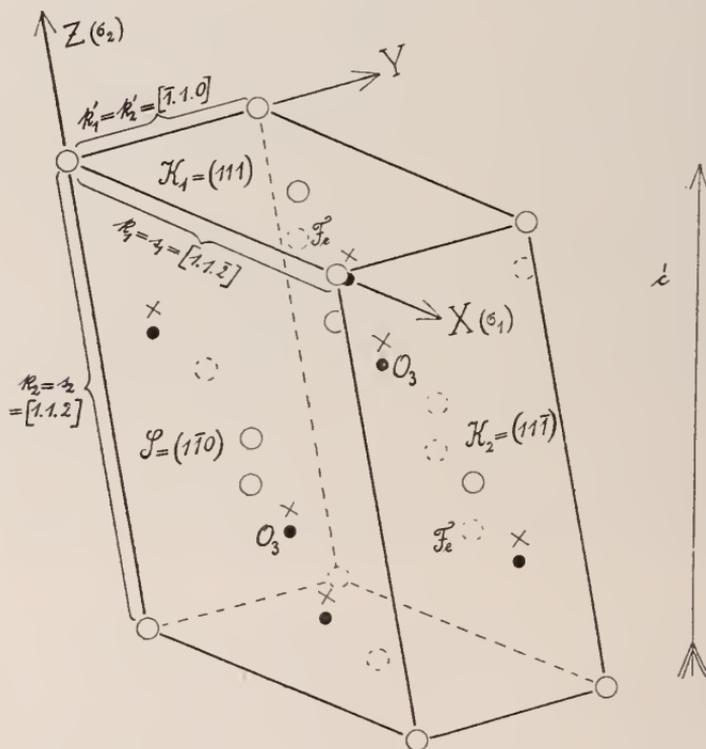


Fig. 2.

Innern jeder der beiden Flächen S außer dem zentralen Fe-Atom noch zwei weitere, während die beiden in Fig. 2 mit „Fe“ bezeichneten Atome ins Innere von II' sozusagen „hineinhangen“. In Richtung der \hat{c} -Achse oberhalb oder unterhalb der Fe-Atome befinden sich O_3 -Schwerpunkte (volle Kreise), deren je zwei in jeder der beiden S -Flächen liegen, während die beiden in Fig. 2 mit „ O_3 “ bezeichneten O_3 -Zentren im Innern des Parallelepipedons II' schweben. Letzteres absorbiert also $\frac{8}{8} + \frac{1}{2} \cdot 0 + 2 = 8$ Fe-Atome und $\frac{4}{2} + 2 = 4$ O_3 -Komplexe. Man sieht sofort, daß z. B. die beiden im Innern von II' schwebenden Fe-Atome, die in Fig. 2

mit „Fe“ bezeichnet sind, in keiner der durch die Gleichungen (1 a) bis (2 b) fixierten Beziehungen stehen. Es kann also nicht jedes Fe-Atom unabhängig von allen andern Atomen eine gerade // σ_1 gelegene und seinem Abstände von K_1 proportionale Strecke durchlaufen.

Betrachten wir jetzt statt der einzelnen Fe-Atome die hantelartigen Fe_2 -Komplexe, indem wir die Massen je zweier solcher Atome in dem oberen der beiden vereinigt denken. Dann rücken die O_3 -Zentren aus den mit vollen Kreisen bezeichneten Orten in die mit einem Kreuz markierten Punkte und es gehen z. B. die beiden im Innern von II' befindlichen O_3 -Zentren, die in Fig. 2 mit „ O_3 “ bezeichnet sind, in zwei Lagen über, die in keiner der vier Beziehungen (1 a) bis (2 b) zueinander stehen. Mithin können auch die Fe_2 -Komplexe und die O_3 -Komplexe keine Struktur-schiebung vollziehen.

Fassen wir aber schließlich einen Fe_2 -Komplex und einen O_3 -Komplex zusammen wie z. B. in Fig. 1 No. 3, 4 und No. 5, 6, 7, so erhalten wir Fe_2O_3 -Gruppen, deren Schwerpunkte lediglich in den 8 Ecken und den 6 Flächenzentren des Parallelepipedons II' liegen (Fig. 2) und daher alle vier Gleichungen (1 a) bis (2 b) zugleich erfüllen. Diese Gruppen Fe_2O_3 formieren ein einzelnes Gitter mit dem primitiven Rhomboeder $\{111\}$; die in seinen 8 Ecken gelegenen Fe_2O_3 -Schwerpunkte sind in Fig. 4 durch leere Kreise markiert (der volle Kreis hat hierbei keine Bedeutung); die Gitterkonstanten sind, wie Fig. 4 besagt, $a = 4,31 \times 10^{-8}$ cm, $\sphericalangle \alpha = 55^\circ 16'$ bzw. $\sphericalangle A = 111^\circ 17'$, während man für den analogen Korund $a = 4,03 \times 10^{-8}$ cm, $\sphericalangle \alpha = 55^\circ 22'$ bzw. $\sphericalangle A = 111^\circ 15'$ findet.

2. Die Schiebung nach den Flächen des positiven Grundrhomboeders (Fig. 3).

Wir konstruieren unser Parallelepipedon II' , wobei wir $k_1 = s_1 = [0.1.1]$ in die X-Achse (σ_1), $k_2 = s_2 = [1.0.0]$ in die Z-Achse (σ_2) und $k'_1 = k'_2 = [0.1.1]$ in die Y-Achse legen. II' ist von $K_1 = (100)$, $K_2 = (011)$ und $S = (01\bar{1})$ begrenzt; parallel S, der „Ebene der Schiebung“, liegt die neben Fig. 3 vermerkte Achsenrichtung \bar{c} . Dann liegen $\frac{8}{3}$ Fe-Atome (leere Kreise) in den 8 Ecken von II' der Fig. 3 sowie $\frac{2}{3}$ Fe-Atome in den beiden Flächen S, ein Fe-Atom im Schwerpunkt und eines in Richtung der Hauptachse \bar{c} ein wenig unterhalb des letztgenannten Atoms. Von den O_3 -Komplexen (volle Kreise) liegen $\frac{2}{3}$ in den beiden Flächen S und einer im Innern von II' . Man erkennt leicht, daß weder alle Fe-Atome noch alle O_3 -Komplexe eine Paarigkeit entsprechend einer der vier Gleichungen (1 a) bis (2 b) aufweisen; es können also jedenfalls nicht alle Fe-Atome und

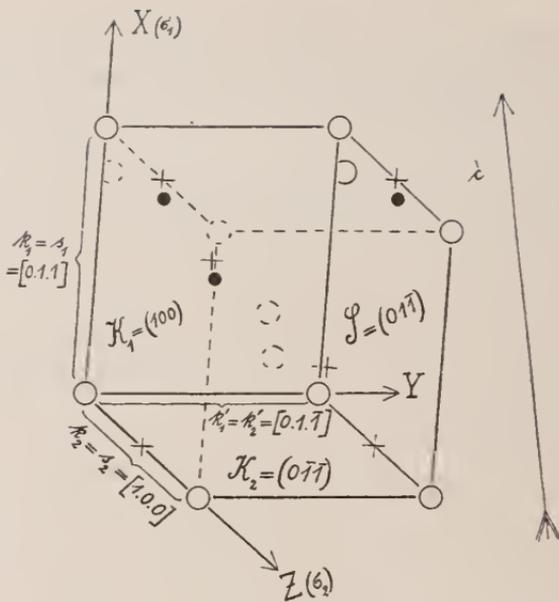


Fig. 3.

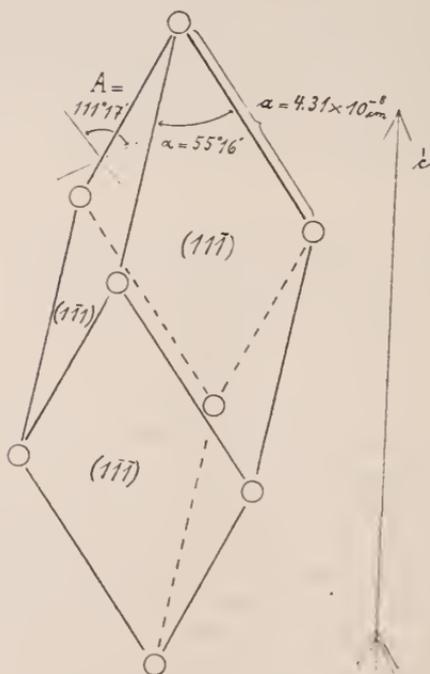


Fig. 4.

O_3 -Komplexe zugleich gerade Wege // σ_1 zurücklegen. Läßt man daher jetzt diejenigen Fe-Atome, die das untere Ende der Hanteln bilden, mit den oberen zusammenfallen, so rücken auch die O_3 -Komplexe nach oben und zwar an die mit einem Kreuz markierten Stellen der Fig. 3. Man erhält dann einen Fe_2 -Komplex in den 8 Ecken und einen zweiten im Schwerpunkte von II' sowie $\frac{4}{3}$ O_3 -Komplexe in den Zentren der vier Kanten $k_2 = s_2 = [1.0.0]$ und $\frac{2}{3}$ O_3 -Komplexe in den Zentren der beiden Flächen $K_1 = (100)$ bzw. $(\bar{1}00)$. Folglich sind alle vier Gleichungen (1 a) bis (2 b) zugleich erfüllt.

Das Punktsystem der Fe_2 -Schwerpunkte und der O_3 -Schwerpunkte vermag also eine Strukturschiebung nach $K_1 = (100)$ mit $\sigma_2 = [100]$ auszuführen. Die Fe_2 -Komplexe bilden die Ecken (leere Kreise), die O_3 -Komplexe die Schwerpunkte (volle Kreise) primitiver Rhomboeder $\{111\}$, wie in Fig. 4. Es ist leicht ersichtlich, daß auch Fe_2O_3 -Gruppen jener Strukturschiebung fähig sind.

Die obigen Ergebnisse werden nicht beeinflusst von experimentellen Fehlern, soweit diese innerhalb der Freiheitsgrade der Atompositionen liegen.

Das Verhalten des Korunds ist demjenigen des Eisenglanzes völlig analog; obwohl im Korund Schiebungen nach $K_1 = (100)$ bisher nicht bewirkt werden konnten, so werden solche doch durch natürliche Zwillingslamellen und Absonderungen sowie durch die Isomorphie mit Eisenglanz höchst wahrscheinlich gemacht.

Ergebnis.

Die einfachsten Bahnen, auf denen die Atome des Eisenglanzes während der Schiebungen nach (100) oder nach (111) sich bewegen können, sind Zykloiden; fungiert (100) als Gleitfläche, so vermögen sowohl „Komplexe“ Fe_2 und O_3 als auch „Gruppen“ Fe_2O_3 längs der Gleitrichtung σ_1 fortzuschreiten; bei Schiebung nach der Gleitfläche (111) dagegen können nur die Gruppen nicht aber jene Komplexe gerade Wege // σ_1 zurücklegen.

Ein Komplex Fe_2 wird durch die Atome No. 3 und 4 der Fig. 1, ein Komplex O_3 durch No. 5, 6, 7 der gleichen Figur dargestellt; Fe_2 ist rhomboedrisch pyramidal, O_3 rhomboedrisch tetartoedrisch. Die Atome No. 3, 4, 5, 6, 7 der Fig. 1 bilden eine Gruppe Fe_2O_3 von rhomboedrisch tetartoedrischer Symmetrie.

Eisenglanz besteht also wahrscheinlich aus Molekeln Fe_2O_3 , welche, nach einem einfachen Gitter mit dem primitiven Rhomboeder $\{111\}$ angeordnet, durch die Schiebungen nach (111) oder nach (100) in sich deformiert werden; hierbei vermag vielleicht die Schiebung nach (100), nicht aber diejenige nach (111), eine vorübergehende Auflösung der Molekeln in Komplexe Fe_2 und O_3 zu bewirken. Ganz gleichartig ist das Verhalten des Korunds.

ZOBODAT - www.zobodat.at

Zoologisch-Botanische Datenbank/Zoological-Botanical Database

Digitale Literatur/Digital Literature

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

Jahr/Year: 1917

Band/Volume: [1917](#)

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

Artikel/Article: [Die einfachsten Bahnen der Atome während der Schiebungen im Eisenglanz und Korund. 433-445](#)