Schichten läßt erwarten, daß sich gleiche oder ähnlich zusammengesetzte Minerale auch in Böden unter Torfbedeckung usw. finden: unsere Bemühungen, nach dieser Richtung Aufklärung zu erlangen, haben noch zu keinem abschließenden Ergebnis geführt.

Aus dem Mineralogischen Museum der Universität Berlin erhielt ich durch Herrn Th. Liebisch ein Stück Löwigit von der Grube „Königin Luise" bei Zabrze. U. d. M. unterscheidet sich das Mineral wesentlich von den besprochenen einfach lichtbrechenden Sulfaten. Die Masse ist einheitlich, feine Körnelung fehlt. Der Löwigit bedarf einer erneuten Durcharbeitung. Rechnet man die bisher veröffentlichten Analysen durch, so ergibt sich nicht nur ein beträchtlich höherer Wassergehalt, sondern auch ziemlich übereinstimmend ein höherer Gehalt an Tonerde, als der Alunitformel entspricht. So nahe es liegt, das Wurzener „Alunit"-Vorkommen mit dem von Zabrze parallel zu stellen und im Löwigit eine durch das höhere geologische Alter verursachte Änderung zu sehen, so gewinnt man doch aus Analysen wie physikalischen Eigenschaften den Eindruck eines abweichenden Minerals. Ehe hierüber jedoch eine Entscheidung getroffen ist, scheint es nicht angebracht, mit einer selbständigen Namengebung für das beschriebene Vorkommen vorzugehen.

Voraussichtlich werden aber drei artlich verschiedene wasserhaltige basische Kalium-Aluminiumsulfate zu unterscheiden sein: 1. Alunit, 2. das Mineral von Wurzen und Solfatara, 3. Löwigit. E. Ramann.

(Mitteil. a. d. bodenkundl. Laboratorium der forstl. Versuchsanstalt München.)

Bei der Redaktion eingegangen am 8. Oktober 1918.

Die einfachen Gitterformen oder gleichwertigen Gitterkomplexe.

Von **P. Niggli** (Tübingen).

Wie der eine Kristall von einer Flächenform begrenzt sein kann, die (infolge der allgemeinen Lage der Ausgangsfläche) schon an der Art der Ausbildung die Symmetrieklasse erkennen läßt, während ein anderer Kristall aus lauter vieldeutigen Flächenformen zusammengesetzt ist, so können auch die Massenschwerpunkte der Gitter ein- oder vieldeutige Anordnungen darstellen. Eindeutig ist die Anordnung, wenn mindestens eine Art von Massenschwerpunkten allgemeine Lage besitzt, d. h. auf keinem der gewöhnlichen Symmetrieelemente liegt; vieldeutig ist sie, wenn charakteristische Deckoperationen aus der Schwerpunktsanordnung deshalb nicht mehr ersichtlich sind, weil die Schwerpunkte durch diese Operationen in sich selbst übergeführt werden. Die Punkte liegen dann auf den zu den Operationen gehörigen Symmetrieelementen. Ob der Massenteilchenhaufen in einem solchen Falle der einen oder anderen Raumgruppe zugerechnet werden muß, hängt von den Eigensymmetrien ab, die den Massenteilchen zugeschrieben werden. Handelt es sich um Molekel- oder Atomschwerpunkte, so ist nicht wahrscheinlich, daß diese Symmetrie ohne weiteres als Kugelymmetrie in Rechnung gestellt werden darf. Es wird dann notwendig, einerseits die Vieldeutigkeit derartiger gleichwertiger Gitterkomplexe oder einfacher Gitterformen, sowie ihrer Kombinationen, andererseits die Unterschiede in den Eigensymmetrien, zu studieren. Vielleicht ermöglicht später auch hier ein dem Ätzverfahren analoges Verfahren die Entscheidung. Wie wichtig derartige Diskussionen sind, zeigt am besten ein Studium der bis jetzt erhaltenen Strukturbilder. Sie lassen sich in den wenigsten Fällen einer einzigen Raumgruppe, bezw. einem einzigen Raumsystem, zuordnen, und die Erörterungen über die Minimalsymmetrien der Atome waren, wegen Nichtberücksichtigung dieses Umstandes, sehr oft unvollständig.

Um die Vieldeutigkeit eines gleichwertigen Gitterkomplexes oder einer einfachen Gitterform[1] festzustellen, benötigt man offenbar Tabellen, welche angeben, in was für Raumsystemen eine gegebene Schwerpunktsanordnung auftreten kann, wie ja auch jeder Kristallograph wissen muß, in welchen Symmetrieklassen beispielsweise tetragonale Bipyramiden oder hexagonale Prismen vorkommen. In dem Buche „Geometrische Kristallographie des Diskontinuums“ habe ich die ganze Problemstellung zweigeteilt. Zuerst werden Tabellen mitgeteilt, die angeben, welche „Zähligkeiten“ die Gitterkomplexe in den einzelnen Raumsystemen besitzen können, d. h. wieviel gleichwertige Punkte je nach der Lage von einem Elementarparallelepiped absorbiert werden. Eine einfache Gitterform mit n einander zugeordneten, elementar unabhängigen[2] Punktlagen ist ein n-Punktner.

Man bestimmt in diesem Falle die Zähligkeit des vorhandenen Gitterkomplexes und schaut dann in den Tabellen nach, welche Raumsysteme überhaupt derartige n-Punktner besitzen. Hat man die konvenierenden Raumsysteme herausgeschrieben, so muß nun noch einzeln nachgeforscht werden, ob auch die spezielle Anordnung die entsprechende sein kann.

Das analoge Verfahren in der gewöhnlichen Kristallographie wäre folgendes. Um zu prüfen, welche Symmetrieklassen tetra-

---

[1] Unter gleichwertigen Gitterkomplexen oder einfachen Gitterformen des homogenen Diskontinuums verstehe ich einen Massenteilchenhaufen, der aus lauter gleichwertigen Teilchen besteht. Vorbedingung dazu ist erfahrungsgemäß, daß es sich um im chemischen und physikalischen Sinne gleiche, eventuell isomorph ersetzbare, Massenteilchen handelt.

[2] Elementar unabhängig bedeutet, durch Translationen von Länge und Richtung der Kanten des Elementarparallelepipeds (Koordinatenachsenparallelepipeds) nicht auseinander ableitbar.

gonale Bipyramiden besitzen, bestimmt man zuerst, welche tetragonale Klassen überhaupt 8-Flächner aufweisen. Dann ist zu untersuchen, ob diese 8-Flächner in der Tat als Bipyramiden entwickelt sind. Dieser Weg führt natürlich immer zum Ziel, und die Zweiteilung ist bei der großen Zahl der Raumsysteme durchaus am Platz. Ein einziges Beispiel möge dies demonstrieren. In der rhombisch-hemimorphen Klasse gibt es nicht weniger als 11 von 22 Raumsystemen, die, auf das Koordinatentranslationenparallelepiped (Elementarparallelepiped) bezogen, Zweipunktner besitzen können. In $\mathfrak{C}_{2v}^{4}$, $\mathfrak{C}_{2v}^{8}$ und $\mathfrak{C}_{2v}^{11}$ können diese Zweipunktner als basiszentrierte Elementarparallelepipede auftreten. Ist somit von einer rhombisch-hemimorph kristallisierenden Substanz nur bekannt, daß die Massenschwerpunkte basiszentrierte Gitter bilden, so ist die Struktur immer noch dreideutig. In $\mathfrak{C}_{2v}^{4}$ würden durch die Schwerpunkte eine vertikale Spiegelebene gehen, in $\mathfrak{C}_{2v}^{8}$ eine Digyre, in $\mathfrak{C}_{2v}^{11}$ beide Symmetrieelemente gleichzeitig.

Wenn röntgenometrisch eine bestimmte Massenschwerpunktsanordnung gefunden worden ist, so wird man im allgemeinen, schon aus zeichnerischen Gründen, die Gitterlinien von einem Schwerpunkt ausgehen lassen, man wird also, auf ein Massenteilchen als Nullpunkt bezogen, die Koordinaten der übrigen Punkte des Gitterkomplexes angeben. In der analytisch-geometrischen Darstellung der 230 Raumsysteme von mir ist jedes Raumsystem auf einen fixen Nullpunkt bezogen worden, und es ist deshalb bei komplizierten Raumgruppen nicht sofort ersichtlich, ob eine dem Gitterkomplex gleichzählige Punktlage auch gleiche Anordnung besitzt. Man muß die Koordinaten aufschreiben und auf einen Punkt als Nullpunkt transformieren. Das mag es als wünschenswert erscheinen lassen, eine zweite Methode der Vieldeutigkeitsbestimmung kennen zu lernen.

Eine Einzelbenennung der zahlreichen gleichwertigen Gitterkomplexe, analog der Benennung der einfachen Flächenformen, halte ich für unnötigen Ballast. Hingegen wird es zweckmäßig sein, einige sehr häufigen Gitterformen durch leicht verständliche Symbole zu kennzeichnen und ganz allgemein eine Bezeichnungsweise für gleichwertige Gitterkomplexe einzuführen. Diese kann nach zwei Gesichtspunkten erfolgen.

Wird die von mir vorgeschlagene jeweilige Nullpunktswahl angenommen, so genügt es, darauf bezogen, die Koordinaten irgend eines Gitterpunktes in doppelt eckige Klammern zu fassen und das Raumsystemzeichen als Kennziffer anzuhängen [1].

[1] Die Koordinatenwerte beziehen sich natürlich stets auf die Elementarperioden als Einheitsmaßstäbe. Wenn in den abgekürzten Symbolen $\frac{a}{2}$ usw. geschrieben wird, so geschieht dies nur um die 0-Werte von y und z, bzw. n und p, nicht angeben zu müssen.

So ist z. B. [[m, n, p]]$_{\{\mathfrak{C}_{2v}^{8}\}}$ der Gitterkomplex eines beliebigen Punktes im Raumsystem $\mathfrak{C}_{2v}^{8}$; [[$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 0]]$_{\{\mathfrak{C}_{2v}^{8}\}}$ der Gitterkomplex in diesem Raumsystem bei der speziellen Lage des Punktes in der Mitte des Basisrechteckes.

Aus einem derartigen Symbol herauszulesen, welcher Art die zugehörige einfache Gitterform ist, verlangt natürlich vollständige Vertrautheit mit den Symmetrieverhältnissen eines jeden Raumsystemes, wie man ja auch nur dann weiß, welche Flächenform {111} in der tetragonal bisphenoidischen Klasse bildet, wenn Aufstellung und Symmetrieelemente dieser Klasse bekannt sind.

Um unabhängig von der Raumsystemszugehörigkeit die Anordnung eines gegebenen gleichwertigen Gitterkomplexes zu kennzeichnen, möchte ich folgendes Verfahren vorschlagen. Ein Gitterpunkt wird als Nullpunkt gewählt, die Koordinaten der elementar unabhängigen, übrigen Punkte der Form werden, wie nachstehendes Beispiel zeigt, mitgeteilt.

[[0 | x, 0, z | x_1, y_1, z_1 | 0, y_2, z_2 | 0, 0, z_3]] ist das Symbol eines 5-Punktners bei dem, auf einen Punkt als Nullpunkt bezogen, die Koordinaten der übrigen elementar unabhängigen Punkte durch x, z; x_1, y_1, z_1; y_2 z_2; z_3 gegeben sind. Um die Symbolik nicht zu unförmig zu gestalten, sind einige sehr häufig auftretende Abkürzungen am Platz. In Anlehnung an die SCHOENFLIES'sche Nomenklatur bezeichnet [[.. .. .. ..]] einen Gitterkomplex in einfacher Eckpunktswiederholung des Elementarparallelepipeds [1]; [[.. .. .. ..]]$'_3$ daß zu jedem der hingeschriebenen Gitterpunkte noch ein Punkt gehört, der um $\frac{a}{2}$, $\frac{b}{2}$, 0 davon entfernt ist (aber es muß nicht notwendigerweise das zugehörige Massenteilchen in paralleler Lage vorkommen). [[.. .. .. ..]]$'_2$ bedeutet, daß die Anordnung in (010) zentrierten Elementargittern sich wiederholt, [[.. .. .. ..]]$'_1$ in (100) zentrierten Elementargittern.

Gehören zu jedem Punkt noch Punkte in Entfernungen $\frac{a}{2} + \frac{b}{2}$, $\frac{a}{2} + \frac{c}{2}$, $\frac{b}{2} + \frac{c}{2}$ (allseitig flächenzentriert), so schreibt man [[.. .. .. ..]]$'''$. Jedem innerhalb der eckigen Klammern stehenden Punkt ist in der Entferuung $\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b + \frac{1}{2}c$ ein Punkt zugeordnet, wenn geschrieben wird [[.. .. .. ..]]$''$ oder [[..|.. .. ..|]]^{i}.

[[0]]$'''$ ist also ein Vierpunktner von der Form des allseitig flächenzentrierten Elementarparallelepipeds, unabhängig davon, ob

[1] Das Symbol [[.. .. .. ..]] vertritt das allgemeine Gitterkomplexsymbol, die Punkte stehen an Stelle der Koordinatenwerte, sie sind durch vertikale Striche getrennt.

die einzelnen Teilchen parallel gestellt sind, wenn sie nur gleichwertig sind. Die Raumsysteme $\mathfrak{C}_{2v}^{4}$, $\mathfrak{C}_{2v}^{8}$, $\mathfrak{C}_{2v}^{11}$ besitzen alle Zweipunktner $[[0]]'_3$.

$\left[[0 \;\; \frac{a}{2}]\right]$ ist eine Gitterform von der Art des Elementarparallelepipeds mit zentrierten a-Kanten. $\left[[0 \;\; \frac{a}{2}]\right]'''$ besitzt außer in den Ecken, in allen Kantenmitten und Flächenmitten, sowie wie im Zentrum eines Gitters von der Form des Elementarparallelepipeds gleichwertige Punkte. Das Symbol ist identisch mit $\left[[0 \;\; \frac{b}{2}]\right]'''$, $\left[[0 \;\; \frac{c}{2}]\right]'''$, $\left[[0 \;\; \frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{c}{2}]\right]'''$. Es ist ein 8-Punktner, und die Gitterpunkte bilden Maschen von ähnlicher Gestalt wie das Elementarparallelepiped, aber $\frac{1}{8}$ Volumen. Deshalb läßt sich die Form auch als $\frac{v}{8}\,[[0]]$ bezeichnen.

Das allgemeine Gittersymbol eines Raumsystemes erhält man aus den zusammengehörigen Koordinatenwerten (die beispielsweise Schoenflies und ich angeben), wenn man diese auf den Ausgangspunkt als Nullpunkt transformiert. Beispielsweise lauten für $\mathfrak{C}_{2v}^{8}$, bezogen auf einen in der Drehungsachse (Digyre) liegenden Nullpunkt, diese Werte (statt x, y, z = m, n, p):

$$[[m, n, p]] \;\; [[m \; \bar{n} \; p]] \;\; [[m + \tfrac{1}{2}, n + \tfrac{1}{2}, p]] \;\; [[m + \tfrac{1}{2}, \bar{n} + \tfrac{1}{2}, p]].$$

Die allgemeinste Gitterform ist daher:

$$[[0 \mid 2m, 2\bar{n}, 0 \mid 2\bar{m} + \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, 0 \mid \tfrac{1}{2}, 2\bar{n} + \tfrac{1}{2}, 0]].$$

Welcher Art die speziellen einfachen Gitterformen sind, ergibt sich daraus sofort; man hat nur für m und n die speziellen Werte einzusetzen. Sind beispielsweise beide gleich Null, so resultiert $[[0 \mid \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0]]$ also $[[0]]'_3$, ein Zweipunktner. Sind m und n einzeln gleich $\frac{1}{4}$, so wird die Gitterform zu

$$[[0 \mid \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, 0 \mid 0, \tfrac{1}{2}, 0 \mid \tfrac{1}{2}, 0, 0]] = \left[[0 \;\; \tfrac{a}{2}]\right]'_3$$

einer Grenzform des allgemeinen Vierpunktners. Niemals entsteht hier etwa eine einfache Gitterform $[[0]]''$, da immer alle elementar unabhängigen Gitterpunkte in einer Horizontalebene liegen müssen. Zur Bestimmung, ob eine Kombination einfacher Gitterformen in einem Raumsystem vorkommen kann, muß man den Nachweis führen, daß erstens die Einzelformen darin auftreten, und zweitens, daß diese in der verlangten Beziehung zueinander stehen. Kochsalz stellt eine Kombination Cl = $[[0]]'''$ Na = $[[0]]'''$ mit der Verschiebung $\frac{a}{2}$, oder $\frac{a}{2} + \frac{b}{2} + \frac{c}{2}$ dar. Diese Kombination tritt in einer ganzen Anzahl kubischer Raumsysteme auf, beispielsweise in zweien der kubischen Holoedrie. Natürlich sind die Symmetriebedingungen für die Punktlagen verschiedene.

Die Kombination $[[0]]'_3$, $\left[\left[0 \quad \frac{a}{2}\right]\right]'$ verlangt in $\mathfrak{C}_{2v}^{8}$ eine Verschiebung um $\pm \frac{1}{4}$, $\pm \frac{1}{4}$, p.

Noch möge zum Schluß an Hand eines Beispieles gezeigt werden, wie vorteilhaft die Anwendung des erläuterten Verfahrens sein kann. Brieflich wurde mir gegenüber einmal bestritten, daß eine von Vegard und Tammann vorgeschlagene Kombination zweier Gitterformen in kubischen Raumsystemen überhaupt möglich sei. Es handelte sich um die Kombination zweier Formen $[[0 \mid \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0 \mid \frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4} \mid 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}]]'''$ in $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ Verschiebung. Man erkennt aus der Figur Tammann's sofort, daß durch je einen Gitterpunkt beider Komplexe eine trigonale Drehungsachse (Trigyre) geht. Handelt es sich wirklich um zwei einfache Gitterformen, so müssen durch alle Gitterpunkte je eine Trigyre gehen. Dies ist nun aus einer diesbezüglichen Figur nicht ohne weiteres erkenntlich, auch läßt sich der Schnittpunkt von je 4 Trigyren nicht leicht auffinden. Unsere Methode gestattet sofort die Entscheidung. Liegen die Ausgangspunkte auf Trigyren, so haben sie die Koordinaten $[[m, m, m]]$; von den Koordinatentripeln eines gleichwertigen Punktkomplexes brauchen daher alle die nicht berücksichtigt zu werden, welchen nur eine Vertauschung von m, n, p, im Sinne der 120°-Drehung als Deckoperation, entspricht.

Von den Dreizeilenkomplexen, die Schoenflies in seinem Buche p. 549/550 angibt, müssen nur jeweilen die ersten Zeilen in Betracht gezogen werden. Es ergibt sich nun, um nur die kubisch-enantiomorphe Klasse zu erwähnen, beispielsweise folgendes allgemeine Symbol für die Gitterform eines auf einer Trigyre liegenden Punktes in $\mathfrak{O}^4$:

$$[[0 \mid 0, 2\bar{m}, 2\bar{m} \mid 2\bar{m}, 0, 2\bar{m} \mid 2m, 2m, 0 \mid 2m + \tfrac{1}{4}, 2m + \tfrac{1}{4}, 2m + \tfrac{1}{4}$$
$$\tfrac{1}{4}, 2\bar{m} + \tfrac{1}{4}, \tfrac{1}{4} \mid 2m + \tfrac{1}{4}, \tfrac{1}{4}, \tfrac{1}{4} \mid \tfrac{1}{4}, \tfrac{1}{4}, 2\bar{m} + \tfrac{1}{4} \mid]]'''.$$

Das m bezieht sich auf den Schnittpunkt der Trigyren als Nullpunkt. Ist $m = \frac{1}{8}$, so spezialisiert sich die Gitterform zu $[[0 \mid 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0 \mid]]'''$, d. h. sie wird zu der gewünschten Form. Ist $m = \frac{1}{8} + \frac{1}{2} = \frac{5}{8}$, so geschieht das gleiche. Die Kombination ist somit tatsächlich in kubischen Raumsystemen[1], z. B. wie bewiesen in $\mathfrak{O}^4$, möglich; die Ausgangspunkte sind um $\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$ von den Schnittpunkten der Trigyren entfernt.

---

[1] Auch in dem daraus abgeleiteten $\mathfrak{O}_h^7$.

Bei der Redaktion eingegangen am 30. Oktober 1918.