Zeitschrift: Schweizerische mineralogische und petrographische Mitteilungen = Bulletin suisse de minéralogie et pétrographie

Band: 22 (1942)

Heft: 2

Artikel: Beziehungen zwischen hybokubischer und hybohexagonaler Syngonie

Autor: Niggli, Paul

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-19525

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 19.07.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

Beziehungen zwischen hypokubischer und hypohexagonaler Syngonie

von *Paul Niggli*

E. v. FEDOROW hat das Kristallreich in zwei morphologische Hauptreihen eingeteilt: die hypokubische und die hypohexagonale Syngonie. Vierzählige Drehungs- oder Inversionsachsen sind in der hypokubischen Reihe die höchstzähligen Achsen, in der zweiten sind es sechszählige Drehungs- oder Inversionsachsen. Dadurch werden die Symmetriegruppen O_h und D_{6h} zu zwei „inkommensurabeln" Gipfelpunkten der Kristallsymmetrie. Die kubischen und tetragonalen Symmetrien sind einzig der hypokubischen Reihe zugehörig, die im engeren Sinne hexagonalen nur der hypohexagonalen Syngonie. Die Symmetrien der übrigen Kristallsysteme können sich, gemäss den Beziehungen der Lage der Symmetrieelemente zur Metrik, auf beide Syngonien verteilen.

Die Erforschung der Kristallstrukturen hat diese morphologische Gliederung der Kristallwelt in glänzender Weise bestätigt. Nicht selten kennen wir von ein und derselben Substanz zweierlei Modifikationen, deren Hauptunterschied in der Zugehörigkeit zu der einen oder anderen morphologischen Entwicklungsreihe liegt. Fragen, die sich bereits v. FEDOROW gestellt hat, lassen sich nun besser beantworten. Sind die Entwicklungsreihen völlig voneinander getrennt oder durch Übergänge verbunden? Welches sind häufig realisierte Beziehungen zwischen analogen pseudokubischen und pseudohexagonalen Kristallarten?

Da die im kubischen und trigonal-rhomboedrischen System auftretenden dreizähligen Achsen zugleich Untergruppen der hexagonalen sind, lassen sich schon bei relativ hoher Gesamtsymmetrie enge Beziehungen zwischen den verschiedenen Typen erwarten. Bekannt ist der einfache Übergang der kubischen dichtesten Kugelpackung (Goldtypus) in die hexagonale dichteste Kugelpackung (Magnesiumtypus) auf dem Wege gesetzmässig gekoppelter Translationen von Ebenenpaketen senkrecht zu den dreizähligen Achsen. In einer gitterhaften Struktur scheint uns dies ein so erheblicher Ein-

griff zu sein, dass er die Trennung der Strukturtypen in zwei Kristallarten rechtfertigt. Ganz anders verhält es sich bei ausgesprochenen Schichtkristallen vom Typus der Halogensalze zweiwertiger Elemente. Hier ist die Oktaederdoppelschicht $[AB\frac{6}{3}]_\infty N$ das eigentliche Grundelement. Ob sich (durch Leerschichten getrennt) diese Oktaeder- bzw. Pseudooktaeder-Doppelschichten in einfach hexagonaler, in alternierend doppelthexagonaler oder in dreifach alternierend pseudokubischer Art übereinanderschichten, ist von sekundärer Bedeutung. Da auch komplexere Perioden, ja sogar mehr oder weniger willkürliche Reihenfolgen bekannt sind, kann streng genommen die Schichtenfolge ebenso wenig wie die Raumgruppenzugehörigkeit als arttrennendes Merkmal angesprochen werden. Analoges gilt für komplexere Struktureinheiten, wie wir sie bei den Schichtsilikaten antreffen.

Es ist wohl zweckmässig, in diesen Fällen nur von verschiedenen Modalitäten oder Unterarten zu sprechen und zuzugeben, dass sich innerhalb ein und derselben Kristallart der Wechsel vom hypohexagonalen zum hypokubischen Bauplan vollzieht. Die Struktureinheiten sind hier Schichten, die sowohl der einen wie der anderen Syngonie zugeordnet werden können, da sich die Trennung der Syngonien erst auf die dreidimensional kristallinen Konfigurationen bezieht.

Daneben gibt es aber auch gitterhaft struierte Kristallarten, die gewissermassen ein Doppelgesicht tragen. Dass dies mit den Strukturgesetzen durchaus verträglich ist, sei an zwei Beispielen erläutert.

1. Der Rutiltypus im weiteren Sinne. Ersetzen wir in der Steinsalzstruktur, einer typischen Struktur der hypokubischen Syngonie, $([AB\frac{6}{6}]_\infty G)$, das B durch eine symmetrische Hantel B_2, so sind bekanntlich verschiedene Substitutionsfälle möglich. Pyrit veranschaulicht den kubisch bleibenden Fall. Einerlei Hantelrichtung kann, wie in Carbiden, zu tetragonaler Symmetrie überführen; und gleiches gilt nun für zwei einen Winkel von 90^0 miteinander bildenden Hantelrichtungen, entsprechend der Rutilstruktur.

Fig. 1 stellt die 0c- und $\frac{1}{2}$c-Ebenen dieser Struktur dar, wobei nicht, wie das bei Rutil sonst üblich ist, das innenzentrierte, sondern das zugeordnete flächenzentrierte Gitter a, c als Einheit genommen ist. Gestrichelt gezeichnet ist das einfachere Quadrat mit a′ in Rutilaufstellung. Es ist begreiflich, dass eine derartige Substitution (parallel den a-Achsen der flächenzentrierten Aufstellung) eine Erweiterung in Richtung dieser Achse zur Folge hat. Mit anderen Worten: die c-Achse erscheint gegenüber den a-Achsen stark verkürzt, c/a

wird zu ungefähr 0,455. Daraus ergibt sich das Verhältnis $c/a' = 0{,}644$, wobei $a' = \frac{1}{2}\sqrt{a}$ ist.

Projiziert man nun die Struktur auf eine ⟨110⟩-Ebene der deformierten Steinsalzstruktur (Fig. 2), so erkennt man, dass in der Pro-

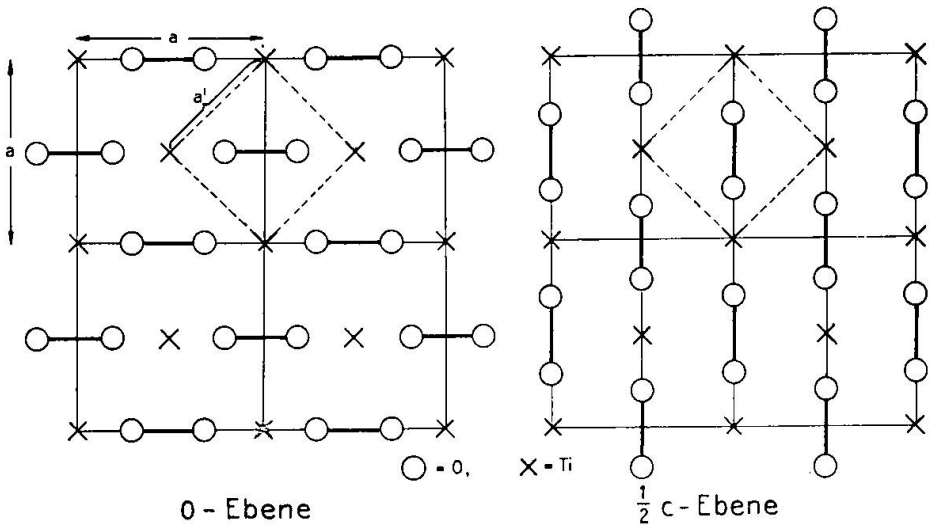


Fig. 1. Die Rutilstruktur als deformierte Steinsalzstruktur $[Ti(O_2)^{6}/_{6}]\infty G$

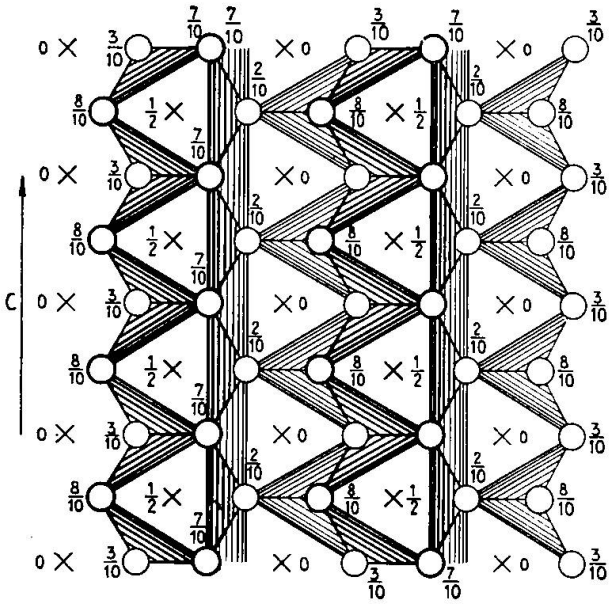


Fig. 2. Seitenansicht der Rutilstruktur mit k·po.

jektion die Sauerstoffverteilung sehr ähnlich derjenigen einer hexagonalen dichtesten Kugelpackung ist. Die Ti liegen in den Pseudooktaederschwerpunkten und bilden Ketten nach c. In jeder Schicht der hexagonalen Kugelpackung sind die Ketten voneinander isoliert und miteinander nur durch Ketten der nächsttieferen und nächsthöheren Schicht verbunden, die gerade zwischen den Ketten der

Mittelschicht liegen. In der normalen Rutilstruktur mit c/a = 0,455 ist allerdings das Oktaeder etwas deformiert, die bei hexagonaler dichtester Kugelpackung in einer Ebene ⟨110⟩ (in Rutilaufstellung ⟨100⟩) liegenden O-Atome sind um ca. $^1/_{10}$ a′ gegeneinander verschoben. Man kann nun aber versuchen, eine „Rutilstruktur" abzuleiten, deren B (z. B. O) metrisch genau eine hexagonal dichteste Kugelpackung bilden. Folgendes wird die Überlegung sein:

Tetragonale bzw. pseudotetragonale Kristallarten können eine der hexagonal dichtesten Kugelpackung nahestehende Punktkonfiguration aufweisen, weil im orthohexagonalen Elementarparallelepiped

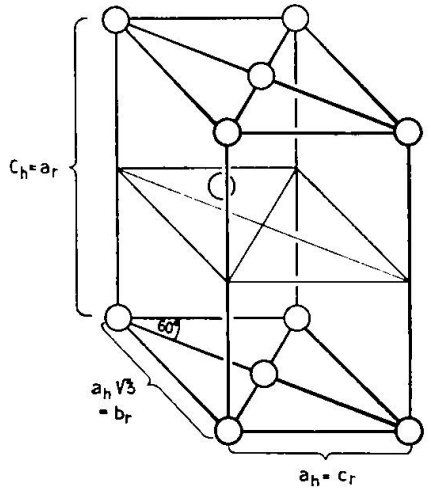


Fig. 3. Orthohexagonales Elementarparallelepiped der dichtesten hexagonalen Kugelpackung

(Fig. 3) dieser Struktur $a\sqrt{3} : c$ sich verhält wie 1,7325 : 1,633 = 1,067 : 1. Die Seitenfläche $a\sqrt{3}/c$ besitzt somit pseudotetragonale Metrik. Die a-Richtung muss der Pseudotetragyre, also der hypotetragonalen c-Achse entsprechen.

Das pseudotetragonale Achsenverhältnis $\frac{c_t}{a_t}$ wird somit $\frac{a_h}{c_h}$ = 0,612 bzw. $\frac{a_h}{a_h\sqrt{3}}$ = 0,577. Pseudotetragonal müssen derartige Kristalle metrisch der axialen Modalität zugeordnet sein. Streng lässt sich diese Struktur nur mit orthorhombischer Symmetrie verwirklichen bei einem Achsenverhältnis $a_r : b_r : c_r$ = 1,633 : 1,7325 : 1. Die Transformationen lauten dann:

orthorhombisch	$a_r : b_r$		c_r
pseudotetragonal	a′-Achsen		c_t
pseudohexagonal	c_h	$a_h\sqrt{3}$	a_h

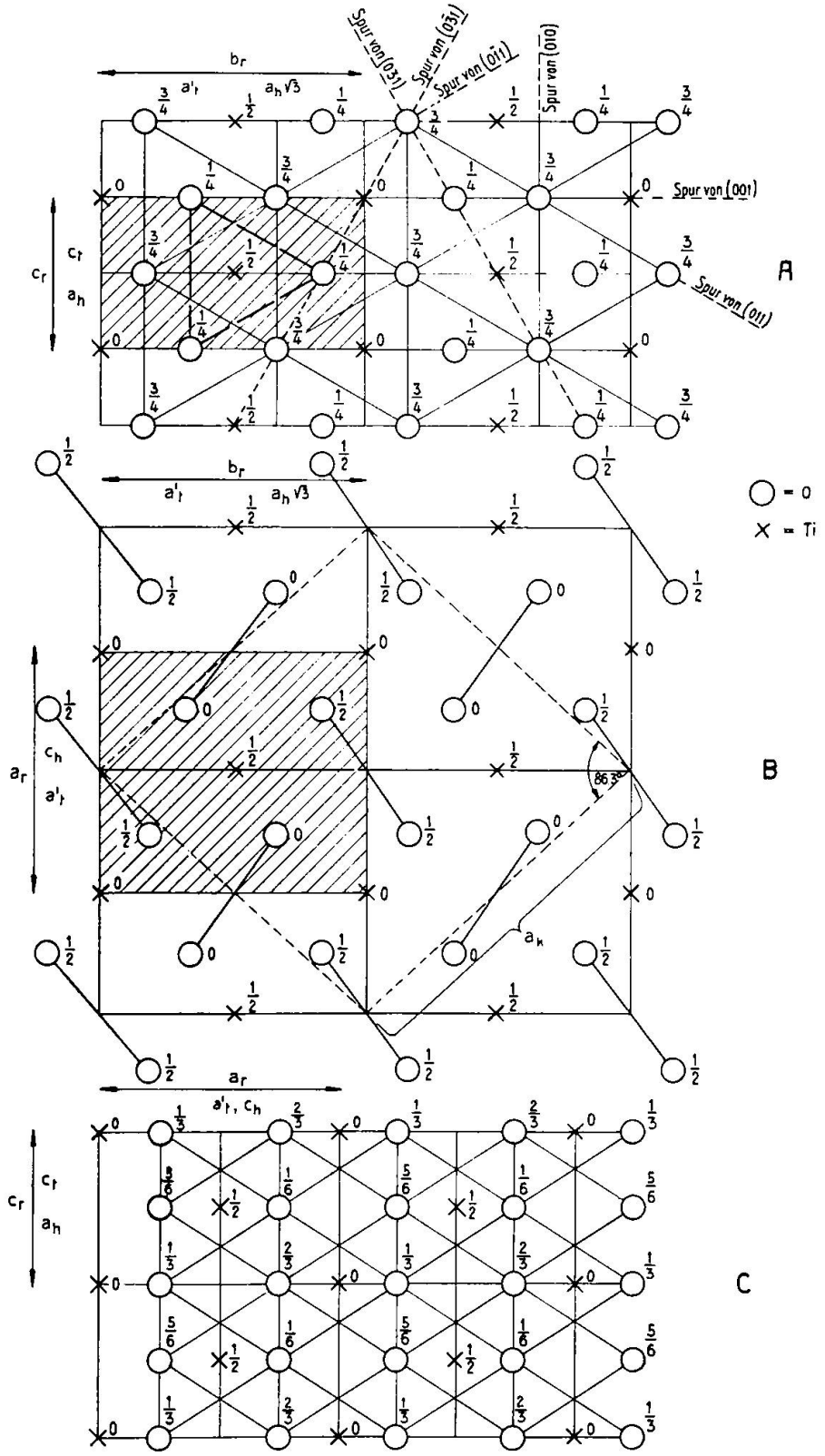


Fig. 4. Projektionen der orthorhombischen Rutilstruktur auf die Pinakoidebenen. A = (100), B = (001), C = (010).

Damit die O-Atome eine hexagonal dichteste Kugelpackung bilden, müssen deren Koordinaten auf ein Symmetriezentrum als Nullpunkt bezogen orthorhombisch lauten:

$$\tfrac{1}{4}\,\tfrac{1}{3}\,0;\ \bar{\tfrac{1}{4}}\,\bar{\tfrac{1}{3}}\,0;\ \tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{4},\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{3},\tfrac{1}{2};\ \tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{4},\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{3},\tfrac{1}{2}.$$

Die Projektionen auf orthorhombisch (100), (001) und (010) sind durch die Figuren 4 A, B, C gegeben. Ti würde die Punktlagen 000 und $\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}$ aufweisen. Während im tetragonalen Rutil nach keiner der beiden Achsen a'_t (normale Rutil a-Achsen) im strengen Sinne eine hexagonale Kugelpackung auftritt, da sich die O-Teilchen, welche in einer Ebene liegen sollten, auf zwei um ca. $^1/_{10}$ a' voneinander getrennte Ebenen verteilen, ist in dieser orthorhombischen, idealisierten Variante in bezug auf die O-Schwerpunkte allein a_r eine echte Hexagyre. Dafür ist b_r eine gegenüber der Rutilstruktur stärker deformierte Pseudohexagyre. Statt 1 : 1,7325 ist 1 : 1,633 vorhanden und die Punkte, welche in einer (010)-Ebene liegen sollten, verteilen sich auf zwei um $^1/_6$ b voneinander getrennte Netzebenen.

Die sogenannte idealisierte tetragonale Rutilstruktur mit c/a' = 0,586 (statt orthorhombisch c/a_r = 0,612, c_r/b_r = 0,577) und den Koordinaten von O = 0,293; 0,293; 0 usw. (statt wie orthorhombisch 0,25; 0,33; 0 usw.) ist hinsichtlich der O-Atome gerade der Mitteltypus, der zwei gleich schwach deformierte, aufeinander senkrecht stehende Pseudohexagyren senkrecht zur Tetragyre enthält und metrisch vollkommene Koordinationsoktaeder ermöglicht. Anders ausgedrückt gilt folgendes:

Während nach den geometrischen Gesetzen die Kombination zweier aufeinander senkrecht stehender, gleichwertiger Hexagyren unmöglich ist, lässt sich im Raumsystem D_{4h}^{14} eine Punktanordnung der Punktsymmetrie C_{2v} konstruieren, für welche die a'-Achsen n a h e z u Hexagyren (also Pseudohexagyren) sind. Sie kommt zugleich der hexagonal dichtesten Kugelpackung nahe. In letzterer sind nämlich die horizontalen Zwischenachsen, d. h. die $[01\bar{1}0]$-Zonen (weil a : c nahe 1 : 1,7325, nämlich 1 : 1,633), metrisch gleichfalls Pseudohexagyren. In hexagonalen Kristallen mit c/a $\sim$ 1,633 findet dies bereits darin seinen Ausdruck, dass Winkel $(11\bar{2}2)/(0001) \sim 60^0$ ist und Winkel $(11\bar{2}6)/(0001) \sim 30^0$. Flächen dieser Dipyramiden werden zusammen mit ⟨0001⟩-Flächen, bzw. $\langle 11\bar{2}0\rangle$-Flächen, zu pseudohexagonalen Prismen erster und zweiter Stellung. Sind die a_h-Achsen die Zonen $[11\bar{2}0]$, die Zwischenachsen die Zonen $[10\bar{1}0]$, so werden auch $[11\bar{2}3]$-Richtungen mit $[2\bar{1}\bar{1}0]$-Richtungen und $[11\bar{2}1]$-Richtungen mit [0001] zu pseudohexagonalen a-Achsen und Zwi-

schenachsen. Das hat in diesen Zonen wieder Winkelwerte ähnlich 30° und 60° zur Folge. Auch die Einheitsdipyramide erster Stellung bildet mit der Basis und mit Prismenflächen der um 60° gedrehten Lage Winkel um 60°. Es sei das an einigen hexagonalen Kristallarten dieses metrischen Typus nachgeprüft:

	Wurtzit 1 : 1,635	Greenockit 1 : 1,622
∢ (0001) (11$\bar{2}$2)		58,3°
∢ (0001) (11$\bar{2}$6)		
∢ (0001) (10$\bar{1}$1)	62,1°	61,9°
∢ (10$\bar{1}$1) (01$\bar{1}$1)	52,5°	52,3°
∢ (10$\bar{1}$1) (01$\bar{1}$0)	63,8°	
∢ (10$\bar{1}$3) (01$\bar{1}$3)	30,7°	
∢ (10$\bar{1}$2) (0001)	43,3°	43,7°

Allgemein lässt sich sagen, dass Flächen der Formen ⟨10$\bar{1}$1⟩ bis ⟨30$\bar{3}$4⟩, ⟨11$\bar{2}$2⟩ bis ⟨22$\bar{4}$3⟩, ⟨12$\bar{3}$3⟩, ⟨13$\bar{4}$4⟩, ⟨14$\bar{5}$6⟩, ⟨15$\bar{6}$7⟩, ⟨1. 7. $\bar{8}$. 10⟩, ⟨23$\bar{5}$5⟩ bis ⟨23$\bar{5}$6⟩, ⟨25$\bar{7}$8⟩, ⟨34$\bar{7}$6⟩ angenähert Winkel von 60° mit der Basis bilden, wobei die Empfindlichkeit den Winkelwerten gegenüber bei geringfügiger Veränderung des l-Indexes nicht sehr gross ist.

Entsprechend lassen sich Dipyramidenflächen finden, die Winkel von nahezu 30° mit ⟨0001⟩ einschliessen. Es seien nur die einfachsten genannt, z. B. ⟨10$\bar{1}$3⟩ bis ⟨10$\bar{1}$4⟩, ⟨11$\bar{2}$6⟩, ⟨21$\bar{3}$9⟩, ⟨1. 3. $\bar{4}$. 12⟩, ⟨2. 3. $\bar{5}$. 15⟩, ⟨1, 4. $\bar{5}$. 12⟩. ⟨10$\bar{1}$2⟩-Flächen liegen in ungefähr 45° zur Basis. Für ⟨31$\bar{4}$6⟩ ergibt sich zu den drei „orthorhombischen" Achsen a, a$\sqrt{3}$, c eine ähnliche Lage, wie die der Oktaederfläche im kubischen Kristallsystem. Viele Dipyramiden enthalten Flächen, die teilweise nahezu 60° miteinander bilden (z. B. ⟨11$\bar{2}$1⟩, ⟨30$\bar{3}$2⟩) usw.

Es ist somit metrisch in der hexagonal dichtesten Kugelpackung als Pseudostruktur der Fall verwirklicht: Pseudohexagyren (hexagonale Zwischenachsen) in Winkeln von 60° und Pseudotetragyren (hexagonale a-Achsen) im Winkel von 60°. Das sind Kombinationen, die als echte Symmetriegruppen unmöglich, jedoch als Pseudosymmetrien denkbar sind, da ja Tetragyren und Hexagyren zugleich Digyren darstellen und gleichwertige Digyren diese Winkel bilden können (Fig. 5).

Daraus geht zudem hervor, dass die hexagonale dichteste Kugelpackung eine wirklich ausgezeichnete intermediäre Metrik innerhalb D_{6h} besitzt, was bereits früher vom Autor zur Systematik benützt wurde (hexagonal intermediärer Subtypus b). Orthorhombisch kann die Punktanordnung der hexagonal dichtesten Kugelpackungen in verschiedenen Raumsystemen auftreten; bereits 1926 ist eine diesbezügliche Darstellung gegeben worden, wobei auf die Raumsysteme

D_{2h}^{16}, D_{2h}^{12}, D_{2h}^{15} usw. Hinweise erfolgten. Bei tetragonaler, orthorhombischer und noch niedrigerer Symmetrie besteht, wie die Figuren 3 und 4 zeigten, gleichzeitig die Möglichkeit einer Ablei-

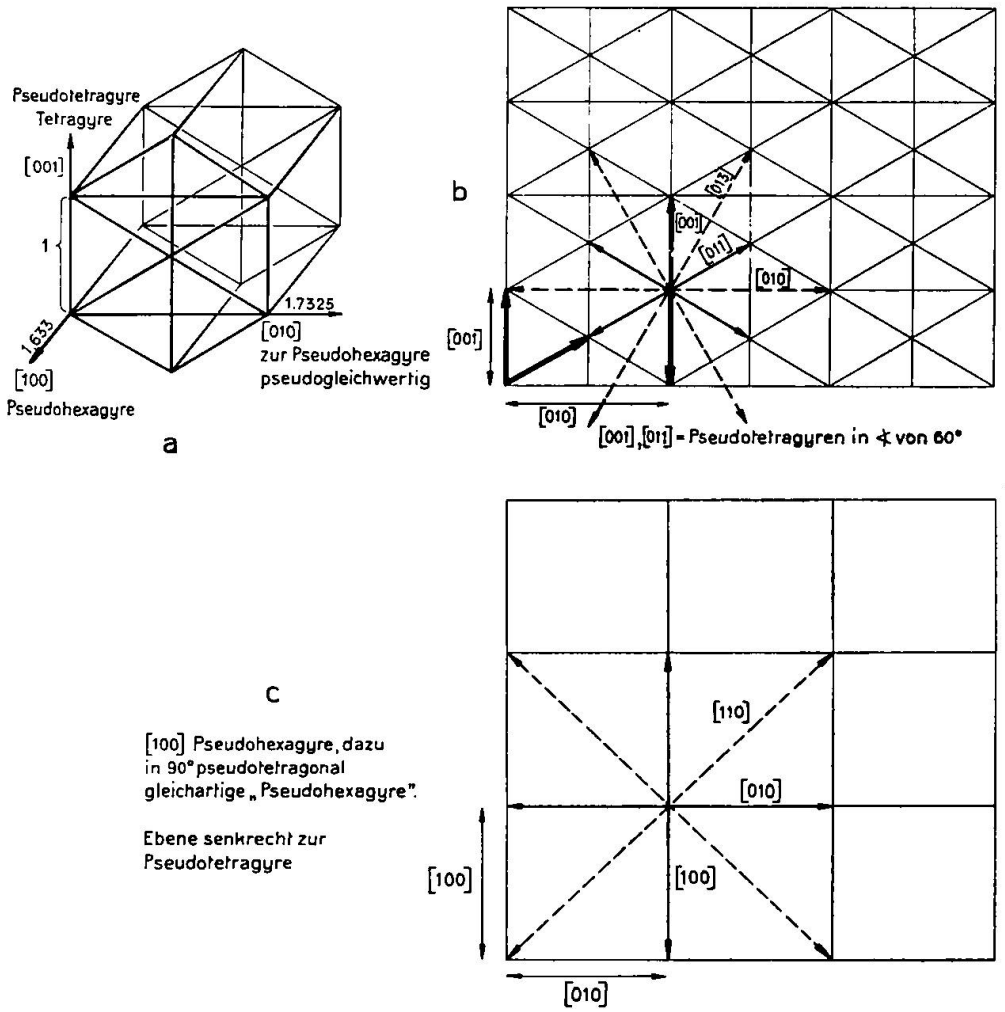


Fig. 5. Aufstellung der pseudotetragonalen und pseudohexagonalen Kristallarten.

tung derartiger Strukturen als Glieder der hypokubischen Entwicklungsreihe, im besonderen der tetragonalen bis pseudotetragonalen axialen Modalität.

Man hat die zahlreichen Kristallarten mit Anklängen an die Metrik des hexagonal intermediären Subtypus b ganz verschieden aufgestellt und man versteht jetzt auf Grund der soeben gemachten Angaben, dass es oft eine sehr müssige Frage ist, welche Aufstellung die zweckmässigste sei. Soll mehr der pseudotetragonale oder der pseudohexagonale Charakter betont werden? Nicht ungeschickt ist die Seite 308 für orthorhombisch angewandte Aufstellung. c_r ist dann Pseudotetragyre, a_r Pseudohexagyre, b_r sollte $\sqrt{3}$ mal grösser sein

als c_r. Somit lautet darauf bezogen das idealisierte Achsenverhältnis:

$$0{,}943 : 1 : 0{:}577.$$

In der Normallage kommt die Pseudotetragonalität zur Geltung entsprechend der Verwandtschaft mit Rutil, der die analoge tetragonale Aufstellung besitzt. Die hauptsächlichste Pseudohexagyre ist die orthorhombische a-Achse. Sie ist zugleich c-Achse der pseudohexagonal dichtesten Kugelpackung. Damit das Grundprisma dieser hexagonalen Kugelpackung zu $\langle 10\bar{1}0\rangle$ wird, sind folgende Transformationen durchzuführen:

orthorhombische Indizes bezogen auf 0,943 : 1 : 0,577	hexagonale Indizes
$h = l^*$	$h^* = 2\,l$
$k = k^* - i^*$	$k^* = -l + k$
$l = h^*$	$i^* = -l - k$
	$l^* = 2\,h$

Für einige wichtige Formen ergeben sich die Beziehungen der zweigeteilten Tabelle I, in der tetragonal bzw. pseudotetragonal gleichwertige Flächen nebeneinander gestellt sind. p bedeutet hier und im folgenden „partim", d. h. einen Teil der entsprechenden Form liefernd.

Tabelle I

Rutilaufstellung orthorhombisch	Deutung: pseudohexagonal	Rutilaufstellung pseudohexagonal	Deutung: orthorhombisch
$\langle 100\rangle$	$\langle 0001\rangle$	p $\langle 10\bar{1}0\rangle$	$\langle 010\rangle$
$\langle 010\rangle$	$\langle 10\bar{1}0\rangle$	$\langle 0001\rangle$	$\langle 100\rangle$
$\langle 011\rangle$		p $\langle 11\bar{2}2\rangle$	$\langle 101\rangle$
$\langle 001\rangle$	$\langle 11\bar{2}0\rangle$	p $\langle 11\bar{2}0\rangle$	$\langle 001\rangle$
$\langle 031\rangle$		p $\langle 11\bar{2}6\rangle$	$\langle 301\rangle$
$\langle 110\rangle$	$\langle 10\bar{1}2\rangle$	p $\langle 10\bar{1}2\rangle$	$\langle 110\rangle$
$\langle 211\rangle$		p $\langle 21\bar{3}2\rangle$	$\langle 121\rangle$
$\langle 120\rangle$	$\langle 10\bar{1}1\rangle$	p $\langle 10\bar{1}4\rangle$	$\langle 210\rangle$
$\langle 111\rangle$		p $\langle 10\bar{1}1\rangle$	$\langle 111\rangle$
$\langle 210\rangle$	$\langle 10\bar{1}4\rangle$	p $\langle 10\bar{1}1\rangle$	$\langle 120\rangle$
$\langle 411\rangle$		p $\langle 23\bar{5}2\rangle$	$\langle 141\rangle$
$\langle 130\rangle$	$\langle 30\bar{3}2\rangle$	p $\langle 10\bar{1}6\rangle$	$\langle 310\rangle$
$\langle 233\rangle$		p $\langle 15\bar{6}6\rangle$	$\langle 323\rangle$
$\langle 230\rangle$	$\langle 30\bar{3}4\rangle$	p $\langle 10\bar{1}3\rangle$	$\langle 320\rangle$
$\langle 433\rangle$		p $\langle 16\bar{7}6\rangle$	$\langle 343\rangle$
$\langle 160\rangle$	$\langle 30\bar{3}1\rangle$	p $\langle 1.0.\bar{1}.12\rangle$	$\langle 610\rangle$
$\langle 133\rangle$		p $\langle 12\bar{3}3\rangle$	$\langle 313\rangle$
$\langle 140\rangle$	$\langle 20\bar{2}1\rangle$	p $\langle 10\bar{1}8\rangle$	$\langle 410\rangle$
$\langle 122\rangle$		p $\langle 13\bar{4}4\rangle$	$\langle 212\rangle$
$\langle 101\rangle$	$\langle 11\bar{2}2\rangle$	p $\langle 10\bar{1}0\rangle$	$\langle 011\rangle$
$\langle 231\rangle$		p $\langle 12\bar{3}6\rangle$	$\langle 321\rangle$

Rutilaufstellung orthorhombisch	Deutung: pseudohexagonal	Rutilaufstellung pseudohexagonal	Deutung: orthorhombisch
⟨201⟩	⟨11$\bar{2}$4⟩	p ⟨21$\bar{3}$0⟩	⟨021⟩
⟨431⟩		p ⟨23$\bar{5}$6⟩	⟨341⟩
⟨102⟩	⟨11$\bar{2}$1⟩	p ⟨13$\bar{4}$0⟩	⟨012⟩
⟨131⟩		p ⟨10$\bar{1}$3⟩	⟨311⟩
⟨302⟩	⟨11$\bar{2}$3⟩	p ⟨41$\bar{5}$0⟩	⟨032⟩
⟨331⟩		p ⟨11$\bar{2}$3⟩	⟨331⟩
⟨301⟩	⟨11$\bar{2}$6⟩	p ⟨11$\bar{2}$0⟩	⟨031⟩
⟨631⟩		p ⟨25$\bar{7}$6⟩	⟨361⟩
⟨401⟩	⟨11$\bar{2}$8⟩	p ⟨23$\bar{5}$0⟩	⟨041⟩
⟨831⟩		p ⟨27$\bar{9}$6⟩	⟨381⟩
⟨121⟩	⟨12$\bar{3}$2⟩	p ⟨10$\bar{1}$2⟩	⟨211⟩
⟨213⟩		p ⟨15$\bar{6}$2⟩	⟨123⟩
⟨251⟩		p ⟨12$\bar{3}$.10⟩	⟨521⟩
⟨212⟩	⟨13$\bar{4}$4⟩	p ⟨20$\bar{2}$1⟩	⟨122⟩
⟨453⟩		p ⟨16$\bar{7}$.10⟩	⟨543⟩
⟨471⟩		p ⟨23$\bar{5}$.14⟩	⟨741⟩
⟨221⟩	⟨12$\bar{3}$4⟩	p ⟨12$\bar{3}$4⟩	⟨221⟩
⟨413⟩		p ⟨16$\bar{7}$2⟩	⟨143⟩
⟨451⟩		p ⟨23$\bar{5}$.10⟩	⟨541⟩
⟨312⟩	⟨13$\bar{4}$6⟩	p ⟨41$\bar{5}$2⟩	⟨132⟩
⟨653⟩		p ⟨36$\bar{9}$.10⟩	⟨563⟩
⟨671⟩		p ⟨25$\bar{7}$.14⟩	⟨761⟩
⟨021⟩	⟨12$\bar{3}$0⟩	p ⟨11$\bar{2}$4⟩	⟨201⟩
⟨013⟩		p ⟨33$\bar{6}$2⟩	⟨103⟩
⟨051⟩		p ⟨11$\bar{2}$.10⟩	⟨501⟩
⟨012⟩	⟨13$\bar{4}$0⟩	p ⟨11$\bar{2}$1⟩	⟨102⟩
⟨053⟩		p ⟨33$\bar{6}$.10⟩	⟨503⟩
⟨071⟩		p ⟨11$\bar{2}$.14⟩	⟨701⟩
⟨041⟩	⟨23$\bar{5}$0⟩	p ⟨11$\bar{2}$8⟩	⟨401⟩
⟨015⟩		p ⟨5.5.$\bar{10}$.2⟩	⟨105⟩
⟨073⟩		p ⟨33$\bar{6}$.14⟩	⟨703⟩
⟨032⟩	⟨14$\bar{5}$0⟩	p ⟨11$\bar{2}$3⟩	⟨302⟩
⟨035⟩		p ⟨5.5.$\bar{10}$.6⟩	⟨305⟩
⟨091⟩		p ⟨11$\bar{2}$.18⟩	⟨901⟩

Es gehören die

Zonen orthorhombisch	zu den	pseudohexagonalen Zonen:
[100]	zu	[0001]
[001]	zu	[11$\bar{2}$0]
[011]		
[010]	zu	[10$\bar{1}$0]
[013]		
[101]	zu	[11$\bar{2}$3]
[211]		

Zonen orthorhombisch zu den pseudohexagonalen Zonen:

[320] [313]	zu	$[20\bar{2}3]$
[110] [213]	zu	$[10\bar{1}1]$
[111] [102]	zu	[2243]
[201]	zu Zonen	$[11\bar{2}6]$

Ferner gehört: [103] zu Zonen $[11\bar{2}1]$; [012] zu Zonen $[14\bar{5}0]$; [120] zu Zonen $[20\bar{2}1]$ und [121] zu Zonen $[25\bar{7}3]$.

Allgemein ergibt sich aus dem orthorhombischen Zonensymbol [uvw] das hexagonale Zonensymbol [2w, 3v-w, — 3v-w, 3u].

An einfachen Gesetzmässigkeiten der Transformationen seien für die einzelnen Formengruppen noch genannt:

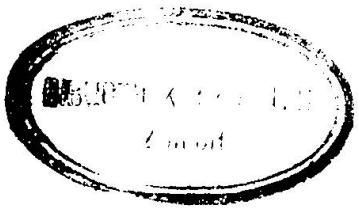
Hexagonal $\langle h0\bar{h}1\rangle$	liefert	$\langle 1hh\rangle$	und $\langle 1.2h.0\rangle$ orthorhombisch
$\langle hh.\overline{2h}.1\rangle$	„	$\langle 1.0.\overline{2h}\rangle$	und $\langle 1.3h.h\rangle$
$\langle h.2h.\overline{3h}.1\rangle$	„	$\langle 1.h.\overline{3h}\rangle$, $\langle 1.5h.h\rangle$, $\langle 1.4h.2h\rangle$	
$\langle h.3h.\overline{4h}.1\rangle$	„	$\langle 1.2h.\overline{4h}\rangle$, $\langle 1.5h.3h\rangle$, $\langle 1.7h.h\rangle$	
$\langle h.4h.\overline{5h}.1\rangle$	„	$\langle 1.6h.4h\rangle$, $\langle 1.3h.\overline{5h}\rangle$, $\langle 1.9h.h\rangle$	
$\langle h.5h.\overline{6h}.1\rangle$	„	$\langle 1.4h.\overline{6h}\rangle$, $\langle 1.7h.5h\rangle$, $\langle 1.11h.h\rangle$ usw.	

Die hier verwendete tetragonale bzw. orthorhombische Aufstellung wird u. a. normalerweise bei folgenden Mineralien verwendet, die alle dem Rutiltypus angehören:

TiO_2 Rutil	a : b : c = 1 : 1 : 0,644	
SnO_2 Kassiterit	a : b : c = 1 : 1 : 0,672	
MnO_2 Polianit	a : b : c = 1 : 1 : 0,665	
PbO_2 Plattnerit	a : b : c = 1 : 1 : 0,676	
MnOOH Manganit	a : b : c = 0,844 : 1 : 0,545	orthorhombisch oder pseudo-orthorhombisch.
FeOOH Goethit	a : b : c = 0,919 : 1 : 0,607	
AlOOH Diaspor	a : b : c = 0,937 : 1 : 0,604	

Trotz der im allgemeinen nicht unerheblichen metrischen Deformation (c-Achse meist zu gross) ist der nach der a-Achse pseudohexagonale Charakter dieser nach der c-Achse tetragonalen oder pseudotetragonalen Mineralien aus verschiedenen Anzeichen deutlich ersichtlich.

Die Zwillingsbildungen von Rutil und Kassiterit sind pseudomereoedrische Zwillinge nach den Flächen der Pseudoprismen $\langle 10\bar{1}0\rangle$ und $\langle 11\bar{2}0\rangle$. Im Sagenitgewebe (Zwillinge nach $\langle 011\rangle$ und $\langle 031\rangle$) findet diese Hinneigung zum hexagonalen Typus ihren nicht zu übersehenden Ausdruck. An solchen Zwillingsflächen kann bei Gleitspiegelung als Zwillingssymmetrie eine brookitähnliche Struktur entstehen. Die gesetzmässigen Verwachsungen des Rutils mit



Hämatit bringen die pseudohexagonalen bzw. hexagonalen Basisflächen zur Koinzidenz sowie (vielleicht mit den nötigen, durch die Deformation bei Rutil bedingten Abweichungen) die a-Achsen.

In der [001]- d. h. [11$\bar{2}$0]-Zone treten gerade diejenigen tetragonalen Prismen hervor, die bei hexagonal dichtester Kugelpackung die verbreitetsten hexagonalen Dipyramiden erster Stellung ergeben, nämlich: ⟨110⟩ = ⟨10$\bar{1}$2⟩, ⟨120⟩ = ⟨10$\bar{1}$1⟩ und ⟨10$\bar{1}$4⟩, ⟨130⟩ = ⟨30$\bar{3}$2⟩ und ⟨10$\bar{1}$6⟩, ⟨230⟩ = ⟨30$\bar{3}$4⟩ und ⟨10$\bar{1}$3⟩, ⟨140⟩ = ⟨20$\bar{2}$1⟩ und ⟨10$\bar{1}$8⟩. Zu diesen Pseudoformen gehören auch ⟨311⟩, ⟨111⟩, ⟨233⟩. Prismen und Dipyramiden ⟨011⟩ zweiter Stellung werden zur Basis der hexagonalen Prismenflächen erster Stellung und zu einem Teil von ⟨11$\bar{2}$2⟩. Die wichtigste ditetragonale Dipyramide gehört ⟨11$\bar{2}$2⟩ bzw. ⟨12$\bar{3}$6⟩ an.

Allgemein ergibt sich, dass die morphologischen Verhältnisse die Züge aufweisen, wie sie (den Grundgesetzen nach) einerseits einer nach der c-Achse gestauchten Steinsalzstruktur und andererseits einer deformierten hexagonalen Kugelpackung senkrecht zu den a-Achsen zukommen müssen. Die Beziehung zur Steinsalzstruktur wird, wie erwähnt, erst deutlich, wenn die [110]-Richtungen zu neuen a-Achsen gewählt werden, so dass gilt:

Gewöhnliche Rutilaufstellung	hypokubische Steinsalzstruktur	hypohexagonale Aufstellung
[001]	[001]	p [11$\bar{2}$0]
[110]	[010]	p [10$\bar{1}$1]
	[100]	
[100]	[110]	[0001]
[010]	[101]	p [10$\bar{1}$0]
[111]		p [22$\bar{4}$3]
[011]	[112]	p [11$\bar{2}$0]
[101]		p [11$\bar{2}$3]
[201]	[111]	p [11$\bar{2}$6]
[013]	[116]	p [10$\bar{1}$0]
[211]	[132]	p [11$\bar{2}$3]

Man erkennt von neuem, dass hier die Hypohexagonalität nichts mit der trigyrischen Symmetrie der kubischen Metrik zu tun hat. Erst eine starke Deformation gegenüber der kubischen Metrik ermöglichte das Neuauftreten einer pseudohexagonalen Symmetrie.

Die rutilähnliche Morphologie von Goethit und Manganit ist frühzeitig erkannt worden. Der pseudohexagonale Charakter wird wieder durch die Zwillingsbildungen nach ⟨011⟩ betont. Neben der Zone [001] tritt die Zone [101] stärker hervor. Vizinalen in beiden Zonen erhalten sowohl hypokubisch wie hypohexagonal komplexe

Indizes. ⟨212⟩ = p⟨13$\bar{4}$4⟩, ⟨121⟩ = p⟨12$\bar{3}$2⟩, ⟨313⟩ = p⟨12$\bar{3}$3⟩, ⟨221⟩ = p⟨12$\bar{3}$4⟩ heben die Bedeutung von Dipyramidenflächen ⟨h k$\bar{1}$ l⟩ hervor, in erster Linie jedoch die Wichtigkeit der Zonen [101] = [11$\bar{2}$3]. Die Morphologie von Diaspor weicht infolge der besonderen Anordnung der Metallatome etwas von derjenigen des Manganites ab. Übrigens soll Manganit nur pseudoorthorhombisch sein.

Um für die Mineralien des Markasittypus die Rutilaufstellung zu erlangen und die Transformationsformeln anwenden zu können, müssen vorgängig folgende Transformationen durchgeführt werden (Symmetrie als orthorhombisch angenommen, z. T. jedoch nur pseudoorthorhombisch): b (alt) = a (neu), c (alt) = b (neu), a (alt) = c (neu). Es wird also ⟨hkl⟩ zu ⟨klh⟩. Diese Verwandtschaft ist bereits von v. Fedorow und Niggli vorausgesagt und durch strukturelle Untersuchungen bestätigt worden.

Für Markasit erhält man aus dem Sadebeckschen Achsenverhältnis

$$a : b : c = 0{,}766 : 1 : 1{,}234 \text{ neu}$$
$$a' : b' : c' = 0{,}810 : 1 : 0{,}621$$

Für die Hauptformen gelten folgende Beziehungen:

Markasit (Sadebeck)	Markasit (Rutilaufstellung)	Markasit (hypohexagonal)
⟨011⟩	⟨110⟩	p ⟨10$\bar{1}$2⟩
⟨110⟩	⟨101⟩	p ⟨11$\bar{2}$2⟩
⟨001⟩	⟨010⟩	} ⟨10$\bar{1}$0⟩
⟨101⟩	⟨011⟩	
⟨111⟩	⟨111⟩	} ⟨10$\bar{1}$1⟩
⟨012⟩	⟨120⟩	
⟨014⟩	⟨140⟩	} ⟨20$\bar{2}$1⟩
⟨212⟩	⟨122⟩	
⟨013⟩	⟨130⟩	p ⟨30$\bar{3}$2⟩
⟨025⟩	⟨250⟩	p ⟨50$\bar{5}$4⟩
⟨010⟩	⟨100⟩	⟨0001⟩
⟨100⟩	⟨001⟩	p ⟨11$\bar{2}$0⟩
⟨321⟩	⟨213⟩	p ⟨12$\bar{3}$2⟩
[001]	[010]	p [10$\bar{1}$0]
[100]	[001]	p [11$\bar{2}$0]
[010]	[100]	[0001]
[101]	[011]	p [11$\bar{2}$0]
[110]	[101]	p [11$\bar{2}$3]

Man ersieht daraus, dass in pseudohexagonaler Aufstellung tatsächlich wichtige Formen des hexagonal intermediären Typus resultieren. Die Zwillinge nach ⟨110⟩ alt sind Zwillinge nach ⟨101⟩ neu, die Zwillinge nach ⟨101⟩ alt solche nach ⟨011⟩ neu. Die regelmässi-

gen Verwachsungen von Markasit (und Arsenkies) mit Magnetkies gehorchen dem Gesetz:

Markasit alte Aufstellung	Markasit neue Aufstellung	Markasit pseudohexagonal	Magnetkies
[010]	[100]	[0001]	‖ [0001]
(001)	(010)	$(10\bar{1}0)$	‖ $(10\bar{1}0)$

Für Arsenkies und Verwandte gelten einige auf die Sonderstruktur rückführbare Eigentümlichkeiten.

Im weiteren Sinne können wir zum hypokubischen und zugleich hypohexagonalen Typus (mit einer angenäherten dichtesten hexagonalen Kugelpackung der O-Teilchen, evt. O + F) die Mineralien der Olivingruppe, des echten Kupferglanzes, ferner Topas und Brookit rechnen, wobei indessen die individuelle Lage der elektropositiven Teilchen und dazu teilweise die alternierend hexagonale Kugelpackung der O-Atome charakteristische Besonderheiten zur Folge haben. Es genügen an dieser Stelle wenige Bemerkungen.

Bei Chrysoberyll und Olivin ist gegenüber dem üblichen Achsenverhältnis die a-Achse zu verdoppeln. Man erhält:

	a : b : c		a′ : b : c	
aus (Melczer)	0,4707 : 1 : 0,5823	neu	0,941 : 1 : 0,582	Chrysoberyll
	0,466 : 1 : 0,587	neu	0,932 : 1 : 0,587	Olivin

Die Pseudohexagonalität ist durch die Zwillingsbildungen nach pseudohexagonal $\langle 10\bar{1}0\rangle$ und $\langle 11\bar{2}0\rangle$ seit langem bekannt. Folgende Beziehungen sind wichtig:

Chrysoberyll, Olivin gew. Achsenverhältnis	Chrysoberyll, Olivin verdoppelte a-Achse, Rutilaufstellung	Chrysoberyll, Olivin pseudohexagonale Deutung
⟨120⟩	⟨110⟩	$\langle 10\bar{1}2\rangle$
⟨111⟩	⟨211⟩	
⟨110⟩	⟨210⟩	$\langle 10\bar{1}4\rangle$
⟨211⟩	⟨411⟩	
⟨100⟩	⟨100⟩	⟨0001⟩
⟨121⟩	⟨221⟩	$\langle 12\bar{3}4\rangle$
⟨213⟩	⟨413⟩	
⟨251⟩	⟨451⟩	
⟨010⟩	⟨010⟩	$\langle 10\bar{1}0\rangle$
⟨011⟩	⟨011⟩	
⟨001⟩	⟨001⟩	$\langle 11\bar{2}0\rangle$
⟨031⟩	⟨031⟩	
⟨021⟩	⟨021⟩	p $\langle 12\bar{3}0\rangle$
⟨101⟩	⟨201⟩	p $\langle 11\bar{2}4\rangle$

Chrysoberyll, Olivin gew. Achsenverhältnis	Chrysoberyll, Olivin verdoppelte a-Achse, Rutilaufstellung	Chrysoberyll, Olivin pseudohexagonale Deutung
⟨130⟩ ⟨233⟩	⟨230⟩ ⟨433⟩	⟨30$\bar{3}$4⟩
⟨230⟩ ⟨433⟩	⟨430⟩ ⟨833⟩	⟨30$\bar{3}$8⟩
⟨160⟩ ⟨133⟩	⟨130⟩ ⟨233⟩	⟨30$\bar{3}$2⟩
⟨112⟩ ⟨253⟩ ⟨271⟩	⟨212⟩ ⟨453⟩ ⟨471⟩	⟨13$\bar{4}$4⟩
⟨203⟩	⟨403⟩	p ⟨33$\bar{6}$8⟩
⟨140⟩ ⟨122⟩	⟨120⟩ ⟨111⟩	⟨10$\bar{1}$1⟩
⟨131⟩ ⟨102⟩	⟨231⟩ ⟨101⟩	⟨11$\bar{2}$2⟩
⟨142⟩ ⟨113⟩ ⟨151⟩	⟨121⟩ ⟨213⟩ ⟨251⟩	⟨12$\bar{3}$2⟩

Die Zonensymbole verändern sich wie folgt:

alt	neu	pseudohexagonal
[100]	[100]	[0001]
[001] [011]	[001] [011]	[11$\bar{2}$0]
[010] [013]	[010] [013]	[10$\bar{1}$0]
[210] [413]	[110] [213]	[10$\bar{1}$1]
[101] [211]	[102] [111]	[22$\bar{4}$3]
[110]	[120]	p [20$\bar{2}$1]
[201] [411]	[101] [211]	[11$\bar{2}$3]

Um Topas so aufzustellen, dass die c-Achse der pseudohexagonalen Kugelpackung zur a-Achse einer pseudotetragonalen Metrik wird, ist das v. Kokscharowsche Achsenverhältnis

$$a : b : c = 0{,}5285 : 1 : 0{,}9539$$

derart zu verändern, dass

$$a' : b' : c' = \tfrac{1}{2} b : a : \tfrac{1}{3} c = 0{,}500 : 0{,}5285 : 0{,}318 = 0{,}946 : 1 : 0{,}602$$

wird. Aus ⟨hkl⟩ wird neu ⟨3k.6h.2l⟩.

Die wichtigsten Formen erhalten folgende neuen Indizes:

Topas v. Kokscharowsche Aufstellung		Topas Rutilmetrik	Topas pseudohexagonal
⟨110⟩		⟨120⟩	p ⟨10$\bar{1}$1⟩
⟨120⟩		⟨110⟩	p ⟨10$\bar{1}$2⟩
⟨001⟩	Spaltbarkeit	⟨001⟩	p ⟨11$\bar{2}$0⟩
⟨011⟩		⟨302⟩	p ⟨11$\bar{2}$3⟩
⟨021⟩		⟨301⟩	p ⟨11$\bar{2}$6⟩
⟨112⟩		⟨364⟩	p ⟨14$\bar{5}$3⟩
⟨113⟩		⟨122⟩	p ⟨20$\bar{2}$1⟩
⟨111⟩		⟨362⟩	p ⟨22$\bar{4}$3⟩
⟨101⟩		⟨031⟩	p ⟨11$\bar{2}$0⟩
⟨010⟩		⟨100⟩	p ⟨0001⟩
⟨130⟩		⟨320⟩	p ⟨10$\bar{1}$3⟩
⟨122⟩		⟨332⟩	p ⟨14$\bar{5}$6⟩
⟨123⟩		⟨111⟩	p ⟨10$\bar{1}$1⟩
⟨103⟩		⟨011⟩	p ⟨10$\bar{1}$0⟩
⟨210⟩		⟨140⟩	p ⟨20$\bar{2}$1⟩
⟨230⟩		⟨340⟩	p ⟨20$\bar{2}$3⟩

Auf die Hypotetragonalität und Hypohexagonalität ist bereits im Lehrbuch der speziellen Mineralogie die Aufmerksamkeit gelenkt worden. Aus Zonen [uvw] werden pseudotetragonal Zonen [2v. u. 3w], z. B.

[001] → [001]	=	pseudohexagonal	p [11$\bar{2}$0]
[110] → [210]	=	„	p [10$\bar{1}$3]
[100] → [010]	=	„	p [10$\bar{1}$0]
[010] → [100]	=	„	p [0001]
[111] → [213]	=	„	p [10$\bar{1}$1]
[112] → [216]	=	„	p [13$\bar{4}$2]
[210] → [110]	=	„	p [10$\bar{1}$1]
[201] → [023]	=	„	p [12$\bar{3}$0]
[301] → [021]	=	„	p [25$\bar{7}$0]

Relativ stark deformiert ist die pseudohexagonale (alternienierende) dichteste Kugelpackung der Sauerstoffatome des Brookites. Die pseudohexagonalen Netze sind senkrecht zur Pseudohexagyre nicht unwesentlich gegeneinander verdreht. Viele merkwürdige Eigenschaften des Brookites sind vielleicht gerade auf diese Deformationen zurückzuführen. Da zur Zeit sowohl die Umwandlungen Brookit-Rutil als auch die optischen Anomalien der Brookite durch die Herren Barblan und Sigrist im mineralogischen Laboratorium der E. T. H. untersucht werden, begnügen wir uns mit der Darlegung der Verhältnisse einer idealisierten Brookitstruktur zu einer idealisierten Rutilstruktur.

Das v. KOKSCHAROWsche Achsenverhältnis

$$a : b : c = 0{,}842 : 1 : 0{,}944$$

muss zur Erläuterung der Verwandtschaft mit der Rutilstruktur wie folgt umgedeutet werden:

$$a' : b' : c' = 2a : 2c : b = 1{,}683 : 1{,}889 : 1 = 0{,}891 : 1 : 0{,}529,$$

oder $\langle hkl \rangle$ wird zu $\langle 2h \cdot 2l \cdot k \rangle$

$[uvw]$ wird zu $[u \cdot w \cdot 2v]$.

Es ist zu bedenken, dass die Periodizität doppelte a- und c-Achse verlangt, somit selbst für den idealisierten Fall keine einfachen Beziehungen zu erwarten sind. Insbesondere ist die Anordnung der Ti-Atome in bezug auf die Packung der O-Atome in beiden Modifikationen eine nicht unwesentlich verschiedene.

Folgende Vergleichstabelle ist daher nur als erstes Schema zu bewerten. Die Verdrehung der pseudohexagonalen Netze ungefähr senkrecht zur c-Achse könnte übrigens auch eine vergleichsweise Aufstellung ohne Vertauschung von b- und c-Achse nahelegen und bedingt die Wichtigkeit der Zonen $[uv\omega 0]$.

Brookit v. Kokscharow	Idealisierter Brookit „Rutilaufstellung"	Idealisierter Brookit pseudohexagonal
$\langle 100 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 0001 \rangle$
$\langle 122 \rangle$	$\langle 121 \rangle$	p $\langle 12\bar{3}2 \rangle$
$\langle 110 \rangle$	$\langle 201 \rangle$	p $\langle 11\bar{2}4 \rangle$
$\langle 021 \rangle$	$\langle 011 \rangle$	p $\langle 10\bar{1}0 \rangle$
$\langle 001 \rangle$	$\langle 010 \rangle$	p $\langle 10\bar{1}0 \rangle$
$\langle 104 \rangle$	$\langle 140 \rangle$	p $\langle 20\bar{2}1 \rangle$
$\langle 010 \rangle$	$\langle 001 \rangle$	p $\langle 11\bar{2}0 \rangle$
$\langle 210 \rangle$	$\langle 401 \rangle$	p $\langle 11\bar{2}8 \rangle$
$\langle 102 \rangle$	$\langle 120 \rangle$	p $\langle 10\bar{1}1 \rangle$
$\langle 112 \rangle$	$\langle 241 \rangle$	p $\langle 23\bar{5}4 \rangle$
$\langle 322 \rangle$	$\langle 321 \rangle$	p $\langle 12\bar{3}6 \rangle$
$\langle 012 \rangle$	$\langle 041 \rangle$	p $\langle 23\bar{5}0 \rangle$
$\langle 043 \rangle$	$\langle 032 \rangle$	p $\langle 14\bar{5}0 \rangle$
$\langle 134 \rangle$	$\langle 283 \rangle$	p $\langle 56.\bar{1}\bar{1}\,4 \rangle$
$\langle 111 \rangle$	$\langle 221 \rangle$	p $\langle 12\bar{3}4 \rangle$
$[001]$	$[010]$	p $[10\bar{1}0]$
$[100]$	$[100]$	$[0001]$
$[010]$	$[001]$	p $[11\bar{2}0]$
$[201]$	$[210]$	p $[10\bar{1}2]$
$[230]$	$[103]$	p $[11\bar{2}1]$
$[401]$	$[410]$	p $[10\bar{1}4]$
$[011]$	$[012]$	p $[14\bar{5}0]$
$[021]$	$[014]$	p $[17\bar{8}0]$
$[012]$	$[011]$	p $[11\bar{2}0]$
$[221]$	$[214]$	p $[17\bar{8}6]$
$[014]$	$[021]$	p $[25\bar{7}0]$

Weitere Beziehungen sind

⟨121⟩	⟨111⟩	p ⟨10$\bar{1}$1⟩
⟨234⟩	⟨483⟩	p ⟨56.$\bar{1}\bar{1}$.8⟩
⟨326⟩	⟨361⟩	p ⟨25$\bar{7}$6⟩
⟨410⟩	⟨801⟩	p ⟨1.1.$\bar{2}$.16⟩

Parallel ⟨100⟩ von Brookit folgen Schichten O_2-Ti-O_2-Ti aufeinander, ähnlich wie parallel ⟨100⟩ von Rutil. Die Zonen

[027] entsprechend [074] bzw. p [8. 17. $\bar{2}\bar{5}$. 0]
[023] entsprechend [034] bzw. p [8. 5. $\bar{1}\bar{3}$. 0]

sind in der Nähe von Richtungen innerhalb der pseudohexagonalen Ebenen, die infolge der Verdrehungen der pseudohexagonalen Netze eine gewisse Bedeutung erlangen.

Zur Erleichterung für die im Gange befindlichen Untersuchungen über die Beziehungen zwischen Rutil und Brookit geben wir vergleichsweise die Koordinaten der Teilchenschwerpunkte an, bezogen auf ein Parallelepiped.

Rutil: $a^* = 2a = 9{,}16$ Å, $b^* = b = 4{,}58$ Å, $c^* = 2c = 5{,}90$ Å.

Brookit: $a^* = a$ (strukturell) = 9,166 Å, $b^* = c$ (strukturell) = 5,135 Å, $c^* = b$ (strukturell) = 5,436 Å.

Morphologisch in Rutilaufstellung ist für Brookit $a^* = 2a$, $b^* = c$, $c^* = b$. Ein O-Schwerpunkt liegt, soweit tunlich, im Nullpunkt.

Tabelle II

Koordinaten für Sauerstoff

Rutil			Brookit idealisiert			Brookit (Strukturbericht)		
0	0	0	0	0	0	0,01	0,$\bar{0}\bar{7}$	0,03
0	0	0,5	0	0	0,5	0,$\bar{0}\bar{1}$	0,07	0,53
0,5	0	0	0,5	0	0	0,51	0,07	0,03
0,5	0	0,5	0,5	0	0,5	0,49	0,$\bar{0}\bar{7}$	0,53
0,25	0,87	0,25	0,25	0,83	0,25	0,23	0,785	0,27
0,25	0,87	0,75	0,25	0,83	0,75	0,27	0,785	0,77
0,19	0,38	0	0,25	0,33	0	0,23	0,285	0,$\bar{0}\bar{2}$
0,19	0,38	0,5	0,25	0,33	0,5	0,27	0,285	0,48
0,$\bar{0}\bar{6}$	0,5	0,25	0	0,5	0,25	0,01	0,43	0,22
0,$\bar{0}\bar{6}$	0,5	0,75	0	0,5	0,75	0,$\bar{0}\bar{1}$	0,57	0,72
0,44	0,5	0,25	0,5	0,5	0,25	0,51	0,57	0,22
0,44	0,5	0,75	0,5	0,5	0,75	0,49	0,43	0,72
0,75	0,87	0,25	0,75	0,17	0,25	0,73	0,215	0,27
0,75	0,87	0,75	0,75	0,17	0,75	0,77	0,215	0,77
0,69	0,38	0	0,75	0,67	0	0,73	0,715	0,$\bar{0}\bar{2}$
0,69	0,38	0,5	0,75	0,67	0,5	0,77	0,715	0,48

Ti-Atome

Rutil			Brookit idealisiert			Brookit (Strukturbericht		
0,845	0,69	0	0,125	0,67	0	0,127	0,623	$0,\bar{0}1\bar{2}$
0,845	0,69	0,5	0,875	0,33	0,5	0,873	0,377	0,488
0,345	0,69	0	0,625	0,33	0	0,627	0,377	$0,\bar{0}1\bar{2}$
0,345	0,69	0,5	0,375	0,67	0,5	0,373	0,623	0,488
0,095	0,19	0,25	0,125	0,167	0,25	0,127	0,123	0,262
0,095	0,19	0,75	0,375	0,167	0,75	0,373	0,123	0,762
0,595	0,19	0,25	0,625	0,83	0,25	0,627	0,877	0,262
0,595	0,19	0,75	0,875	0,83	0,75	0,873	0,877	0,762

Man erkennt die Lagen-Unterschiede eines Viertels der O-Atome (infolge der alternierenden hexagonalen Kugelpackung bei Brookit) und die starken Unterschiede in der Anordnung der Ti-Atome.

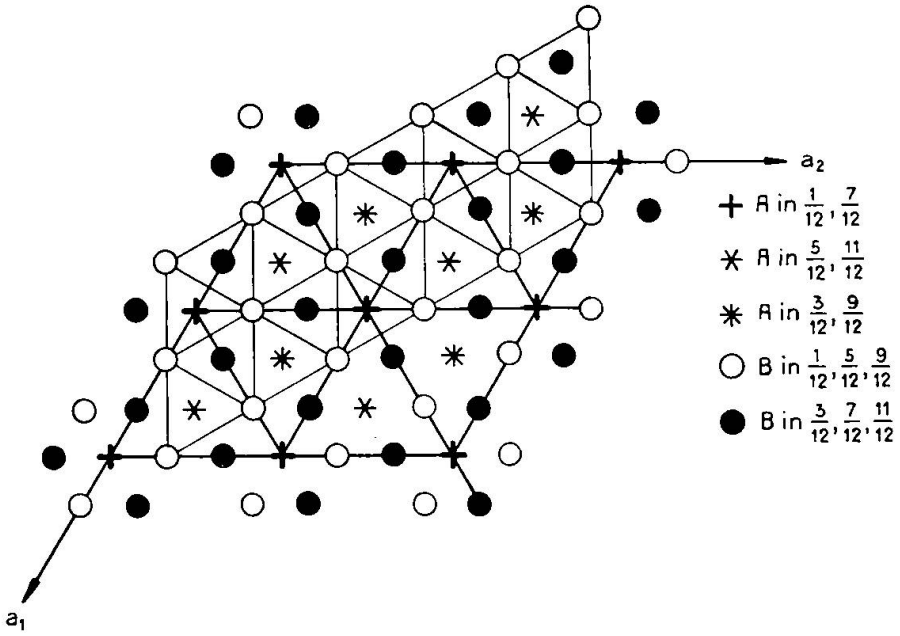


Fig. 6. Die Grundlage der Korundstruktur als AB_3-Struktur.

2. Der Korund-Hämatittypus. Eine gänzlich andere Beziehung zwischen kubischer und hexagonaler Syngonie wird durch die Struktur einiger Di-Trioxyde veranschaulicht. Eine trigonal rhomboedrisch deformierte kubische Struktur ist in diesem Falle zugleich hypohexagonal nach der bei der Deformation erhalten gebliebenen Trigyre. Im Raumsystem D^6_{3d} lassen sich beim Achsenverhältnis $a:c = 1:2{,}828$ Baugruppen AB_3 zweierlei Stellung so anordnen, dass die Schwerpunkte von A würfelähnliche Rhomboedergitter bilden, die B hexagonal innenzentrierte Gitter der um 30^0 verdrehten Stellung, mit dreifacher (paralleler) Übereinanderschichtung in Richtung von c. Das übliche Achsenverhältnis wird halb so gross gewählt 1:1,414, es ist bei Korund 1:1:365 (Melczer), bei Hämatit

1 : 1,366 (Melczer). A ist durch eine Hantel A'A" ersetzt, entsprechend A : B = 2 : 3. Das hexagonale Prisma $\langle 10\bar{1}0\rangle$ der nahezu dichtesten hexagonalen Kugelpackung hat, bezogen auf die übliche Aufstellung, die Indizes $[11\bar{2}0]$. Will man Flächen des Korundes oder Hämatites nach der hexagonalen Kugelpackung indizieren, müssen die Prismenstellungen vertauscht und gegenüber der gewöhnlichen Transformation auf die Zwischenachse die a-Achsen $^1/_3$ so gross, die c-Achsen $^2/_3$ so gross gewählt werden. Den Normaltransformationen gegenüber (siehe z. B. V. GOLDSCHMIDT) muss daher l verdoppelt werden. Man erhält folgende neuen Indizes:

Übliche Indizes	Indizes bezogen auf hexag. Kugelpackung der 0-Teilchen	pseudokubisch, bezogen auf übliche Aufstellung
$\langle 0001\rangle$	$\langle 0001\rangle$	$\langle 111\rangle$
$\langle 10\bar{1}0\rangle$	$\langle 11\bar{2}0\rangle$	$\langle 2\bar{1}\bar{1}\rangle$
$\langle 10\bar{1}1\rangle$	$\langle 11\bar{2}2\rangle$	$\langle 100\rangle$
$\langle h0\bar{h}1\rangle$	$\langle h.h.\overline{2h}.21\rangle$	
$\langle 40\bar{4}1\rangle$	$\langle 22\bar{4}1\rangle$	$\langle 3\bar{1}\bar{1}\rangle$
$\langle 50\bar{5}2\rangle$	$\langle 5.5.\bar{1}\bar{0}.4\rangle$	$\langle 4\bar{1}\bar{1}\rangle$
$\langle 20\bar{2}1\rangle$	$\langle 11.\bar{2}.1\rangle$	$\langle 5\bar{1}\bar{1}\rangle$
$\langle 50\bar{5}4\rangle$	$\langle 5.5.\bar{1}\bar{0}.8\rangle$	$\langle 14.\bar{1}.\bar{1}\rangle$
$\langle 50\bar{5}8\rangle$	$\langle 5.5.\bar{1}\bar{0}.16\rangle$	$\langle 611\rangle$
$\langle 20\bar{2}5\rangle$	$\langle 2.2.\bar{4}.10\rangle$	$\langle 311\rangle$
$\langle 10\bar{1}4\rangle$	$\langle 1.1.\bar{2}.8\rangle$	$\langle 211\rangle$
$\langle 10\bar{1}.16\rangle$	$\langle 1.1.\bar{2}.32\rangle$	$\langle 655\rangle$
$\langle 01\bar{1}8\rangle$	$\langle 1.1.\bar{2}.16\rangle$	$\langle 332\rangle$
$\langle 01\bar{1}5\rangle$	$\langle 1.1.\bar{2}.10\rangle$	$\langle 221\rangle$
$\langle 01\bar{1}4\rangle$	$\langle 11\bar{2}8\rangle$	$\langle 552\rangle$
$\langle 02\bar{2}7\rangle$	$\langle 11\bar{2}7\rangle$	$\langle 331\rangle$
$\langle 01\bar{1}2\rangle$	$\langle 11\bar{1}4\rangle$	$\langle 110\rangle$
$\langle 05\bar{5}7\rangle$	$\langle 5.5.\bar{1}\bar{0}.14\rangle$	$\langle 44\bar{1}\rangle$
$\langle 04\bar{4}5\rangle$	$\langle 22\bar{4}5\rangle$	$\langle 33\bar{1}\rangle$
$\langle 01\bar{1}1\rangle$	$\langle 11\bar{2}2\rangle$	$\langle 22\bar{1}\rangle$
$\langle 03\bar{3}2\rangle$	$\langle 33\bar{6}4\rangle$	$\langle 55\bar{4}\rangle$
$\langle 05\bar{5}4\rangle$	$\langle 5.5.\bar{1}\bar{0}.8\rangle$	$\langle 33\bar{2}\rangle$
$\langle 02\bar{2}1\rangle$	$\langle 11\bar{2}1\rangle$	$\langle 11\bar{1}\rangle$
$\langle 05\bar{5}1\rangle$	$\langle 5.5.\bar{1}\bar{0}.2\rangle$	$\langle 223\rangle$
$\langle 10\bar{1}2\rangle$	$\langle 11\bar{2}4\rangle$	$\langle 411\rangle$
$\langle 11\bar{2}0\rangle$	$\langle 10\bar{1}0\rangle$	$\langle 10\bar{1}\rangle$
$\langle 11\bar{2}1\rangle$	$\langle 30\bar{3}2\rangle$	$\langle 41\bar{2}\rangle$
$\langle 11\bar{2}3\rangle$	$\langle 10\bar{1}2\rangle$	$\langle 210\rangle$
$\langle 22\bar{4}5\rangle$	$\langle 30\bar{3}5\rangle$	$\langle 11.5.\bar{1}\rangle$
$\langle 22\bar{4}3\rangle$	$\langle 10\bar{1}1\rangle$	$\langle 31\bar{1}\rangle$
$\langle 44\bar{8}3\rangle$	$\langle 20\bar{2}1\rangle$	$\langle 51\bar{3}\rangle$
$\langle 33\bar{6}2\rangle$	$\langle 90\bar{9}4\rangle$	$\langle 11.2.\bar{7}\rangle$
$\langle 5.5.\bar{1}\bar{0}.3\rangle$	$\langle 50\bar{5}2\rangle$	$\langle 61\bar{4}\rangle$
$\langle 22\bar{4}1\rangle$	$\langle 30\bar{3}1\rangle$	$\langle 71\bar{5}\rangle$
$\langle 14.14.\overline{28}\,3\rangle$	$\langle 70\bar{7}1\rangle$	$\langle 15.1.\bar{1}\bar{3}\rangle$

Übliche Indizes	Indizes bezogen auf hexag. Kugelpackung der 0-Teilchen	pseudokubisch, bezogen auf übliche Aufstellung
$\langle 7.7.\bar{1}\bar{4}.3\rangle$	$\langle 70\bar{7}2\rangle$	$\langle 81\bar{6}\rangle$
$\langle 8.8.\bar{1}\bar{6}.3\rangle$	$\langle 40\bar{4}1\rangle$	$\langle 91\bar{7}\rangle$
$\langle 33\bar{6}1\rangle$	$\langle 90\bar{9}2\rangle$	$\langle 10.1.\bar{8}\rangle$
$\langle 21\bar{3}1\rangle$	$\langle 41\bar{5}2\rangle$	$\langle 20\bar{1}\rangle$
$\langle 42\bar{6}5\rangle$	$\langle 41\bar{5}5\rangle$	$\langle 51\bar{1}\rangle$
$\langle 21\bar{3}5\rangle$	$\langle 4.1.\bar{5}.10\rangle$	$\langle 320\rangle$
$\langle 32\bar{5}4\rangle$	$\langle 71\bar{8}8\rangle$	$\langle 41\bar{1}\rangle$
$\langle 42\bar{6}1\rangle$	$\langle 41\bar{5}1\rangle$	$\langle 31\bar{3}\rangle$
$\langle 21\bar{3}4\rangle$		$\langle 310\rangle$

Betrachtet man Habitusbilder von Korund und Hämatit, so erkennt man in ausgezeichneter Weise den Doppelcharakter dieser Mineralien. Die Dipyramiden zweiter Stellung, die oft tonnenförmige Gestalt zur Folge haben, lassen nicht selten den durch die Rhomboeder und Skalenoeder bedingten pseudokubischen Charakter in den Hintergrund treten. Nun zeigt sich, dass diese Formen wie $\langle 22\bar{4}3\rangle$, $\langle 44\bar{8}3\rangle$, $\langle 22\bar{4}1\rangle$, $\langle 11\bar{2}3\rangle$ einfache Formen der auf hexagonale Kugelpackung bezogenen Stellung sind. Das „Janusgesicht" dieser Mineralien wird jetzt verständlich; es ist das Resultat der hypokubischen Metallatom- und der hypohexagonalen Sauerstoffanordnung. Die regelmässige Verwachsung von Hämatit mit Rutil verdeutlicht die Analogie in der O-Anordnung. Da im Magnetit, in einzelnen Verbindungen R_2S und in den γ-Modifikationen der Di-Tri-Oxyde die Sauerstoffatome eine nahezu dichteste kubische Kugelpackung bilden, ergeben sich auch zu diesen Mineralien neue Beziehungen.

So lassen die erwähnten Beispiele erkennen, dass zwischen der kubischen und hexagonalen Hyposyngonie charakteristische Übergänge auftreten, die für die Systematik der Strukturen und die vergleichende Kristallmorphologie von grundlegender Bedeutung sind.

Eingegangen: 22. Oktober 1942.