



## Über die Krystalstruktur des Pyrochroits

G. Aminoff

To cite this article: G. Aminoff (1919) Über die Krystalstruktur des Pyrochroits, Geologiska Föreningen i Stockholm Förhandlingar, 41:5, 407-431, DOI: [10.1080/11035891909447000](https://doi.org/10.1080/11035891909447000)

To link to this article: <http://dx.doi.org/10.1080/11035891909447000>



Published online: 04 Jan 2010.



Submit your article to this journal [↗](#)



Article views: 5



View related articles [↗](#)



Citing articles: 5 View citing articles [↗](#)

## Über die Krystallstruktur des Pyrochroits.

Von

G. AMINOFF.

(Mit 8 Textfiguren.)

In der folgenden Mitteilung wird über einen Versuch berichtet aus Luediagrammen von dem Mineral Pyrochroit,  $\text{Mn}(\text{OH})_2$ , die Atomanordnung desselben zu berechnen.

Als Material wurden in Glasbüfen aufbewahrte Pyrochroitkristalle angewendet, die, trotzdem dass 5 Jahre verflossen waren seit sie aus der Grube — Långbans Gruben — entnommen wurden, noch ganz frisch, völlig klar und von schwach violetter Farbe waren. Als Vergleichsmaterial wurden auch Photographien von dem Mineral Bruzit,  $\text{Mg}(\text{OH})_2$ , und, da diese Substanz in der Regel keine besonders guten Röntgenogramme abgab, von zwei bisher nicht beschriebenen manganhaltigen Bruziten von Långbanshyttan, das eine 10.46 %, das andere 6.48 %  $\text{MnO}$  enthaltend, genommen. Diese gaben vorzügliche Röntgenogramme ab. Ungefähr  $\frac{1}{2}$  mm dicke Spaltblätter wurden senkrecht zu (0001) durchstrahlt. Das Verfahren war dasselbe, das zuvor bei Untersuchung der Symmetrie<sup>1</sup> des Molybdophyllits angewendet worden ist. Lilienfeld-Röhre mit Pt-Antikathode wurde angewendet. Die Expositionszeit war 15—20 Min.

Die Röntgenogramme sowohl des Pyrochroits als auch des Bruzits auf (0001) zeigen eine Trigyr nebst drei Symmetrieebenen, was mit den morphologischen Symmetriestimm-

<sup>1</sup> Geol. Fören. förh. 40 (1918), p. 923.

mungen, welche die beiden Mineralien der ditrigonal-skalaenodrischen Symmetrieklasse ( $D_{3d}$ ) zuführen, im Einklang steht. Die Pyrochroitdiagramme zeigen indessen eine sehr starke Annäherung an hexagonale Symmetrie, indem bis auf ein paar Ausnahmen alle Punkte in sowohl positiven als nega-

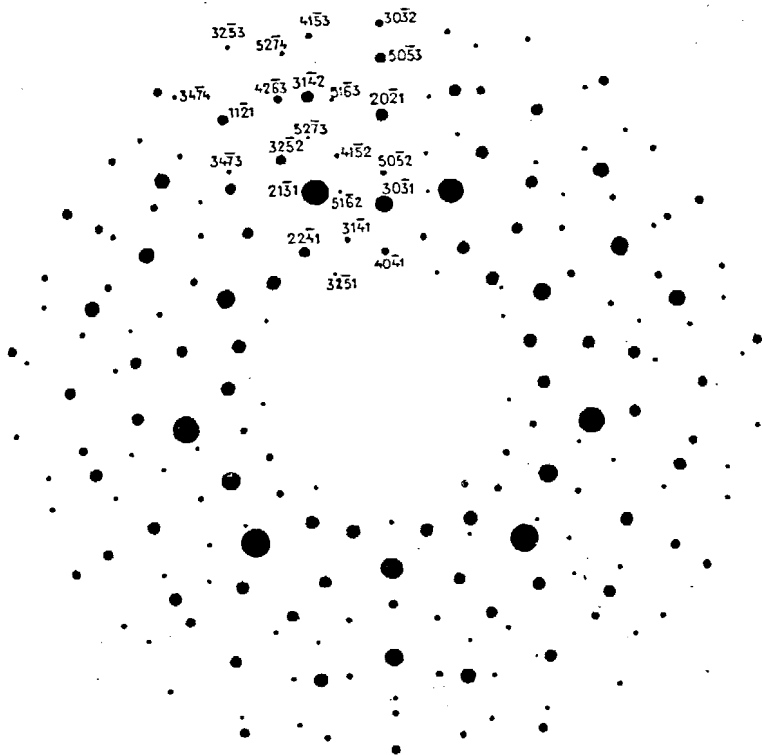


Fig. 1.

tiven Sextanten<sup>1</sup> auftreten, wengleich mit in den meisten Fällen verschiedener Intensität. Die Röntgenogramme von Bruzit und Mn-Bruzit zeigen, wie zu erwarten war, vollkommene Übereinstimmung mit den Pyrochroit-Diagrammen. Sie unterscheiden sich indessen von diesen dadurch, dass wo ein Intensitätsunterschied für positive und negative Formen

<sup>1</sup> + und — willkürlich gewählt.

vorliegt, dieser Unterschied bei  $Mg(OH)_2$  grösser ist als bei  $Mn(OH)_2$  und zwar für alle Flecke.

Da alle Flecke mit Ausnahme von drei (schwachen) sowohl in positiven als in negativen Sextanten auftraten, schien es naheliegend Strukturen mit hexagonalen Raumgitter (Translationsgruppe  $\Gamma_h$ ) zu prüfen. Auch eine Prüfung mit der von NIGGLI<sup>1</sup> und SCHIEBOLD<sup>2</sup> angegebenen »Rhomboederbedingung« fällt nicht zum Vorteil für  $\Gamma_{rh}$  aus.

Unter Annahme der Translationsgruppe  $\Gamma_h$  muss zuerst die Anzahl Moleküle im Elementarparallelepiped bestimmt werden. Nach NIGGLI<sup>3</sup> kann dies approximativ mit Hilfe von Lauediagrammen, senkrecht zu den Kanten des Elementarparallelepipeds, und mit Kenntnis von der für die Röhre unter den gegebenen Umständen charakteristischen  $\lambda$ -Intensitäts-Kurve geschehen. Wie wiederholt nachgewiesen<sup>4</sup> ist, zeigt nämlich die spektrale Intensität für eine Lilienfeld-Röhre einen raschen Fall gegen die  $\lambda_{\min}$ . Die in dem weissen Licht vorhandenen kürzesten Wellenlängen können noch sichtbare Flecke auf der Platte abgeben. Wenn ein Kristall also parallel mit einer der Kanten des Elementarparallelepipeds durchstrahlt wird, kann man in dem erhaltenen Diagramm den oder die Punkte aufsuchen, die den kleinsten Wellenlängen entsprechen und approximativ für diese den Wert der  $\lambda_{\min}$  einsetzen, der aus der  $\lambda$ -Intensitätskurve erhalten wird. Man leitet für die Fläche (hkl), wenn der Kristall in der Richtung der a-Achse durchstrahlt wird, die Formel

$$a \infty \frac{\lambda_{\min} h}{2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \dots \dots \dots (1)$$

<sup>1</sup> Geometrische Krystallographie des Diskontinuums p. 481.

<sup>2</sup> Die Verwendung der Lauediagramme etc. Sächs. Akademie der Wiss. Math.-phys. Kl. 36, p. 53.

<sup>3</sup> Geometrische Kryst. des Diskont. p. 513.

<sup>4</sup> R. GROSS und N. BLASSMANN, N. Jahrb. f. Min., etc. Beil.-Bd 42 (1918) p. 728, R. GROSS, Centralbl. f. Min. etc. 1919, p. 203, E. SCHIEBOLD, l. c., p. 40.

ab, wo  $a$  die Elementarperiode,  $h$  der Index für die  $a$ -Achse und  $\frac{\vartheta}{2}$  der Gleitwinkel ist. Für eine hexagonale Struktur, parallel mit der  $c$ -Achse durchstrahlt, erhält dieser Ausdruck die Form:

$$c \propto \frac{\lambda_{\min} l}{2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \dots \dots \dots (2)$$

wo  $c$  die Höhe des Elementarparallelepipedes und  $l$  der vierte Index in den Bravais'schen Symbolen ist.

Für die Konstruktion der  $\lambda$ -Intensitäts-Kurve wurde eine Platte von KCl auf (101) angewendet, exponiert zur selben Zeit und unter denselben Bedingungen wie die Pyrochroit- und die Bruzitplatten. Die Intensität im reflektierten Strahl kann geschrieben werden:<sup>1</sup>

$$V \propto (1 + \cos^2 \vartheta) \sum_r \frac{\left| \sum_n A_n e^{2\pi i r (\alpha_n h + \beta_n k + \gamma_n l)} \right|^2}{A^2(hkl) r^2} \times I_{l,r} \times \text{Absorptionsfaktor} \times \text{Wärmefaktor} \dots (3)$$

Die KCl-Struktur kann nun approximativ als ein einfaches kubisches Raumbgitter  $\Gamma_c$  angesehen werden aus dem Grunde weil die Atomgewichte für K und Cl einander sehr nahe liegen. Der Strukturfaktor kann also als eine Konstante angesehen werden und man kann sich mit Rücksicht auf den Grad von Genauigkeit, der hier bezweckt wird, darauf beschränken, bei der Berechnung der  $\lambda$ -Intensitätskurve nur mit dem Lorentzfaktor zu rechnen, d. h. (für Flecke, die nur von Reflexion in erster Ordnung herrühren):

$$V \propto \frac{S}{A^2(hkl)} \cdot I_{\lambda} \dots \dots \dots (4)$$

<sup>1</sup> Vgl. R. GROSS und NORA BLASSMANN, Neues Jahrbuch für Mineralogie etc. l. c., R. GROSS, Centralbl. f. Min., l. c., und R. GROSS, Jahrbuch der Radioaktivität etc. 15 (1919), p. 305.

Für eine Serie Flecke mit nicht allzu grossem Unterschied in  $\frac{D}{\lambda}$  wurde die Schwärzung auf der Platte mit Hilfe von einfachen photometrischen Hilfsmitteln so genau wie möglich geschätzt und in beliebigem Mass ausgedrückt, worauf  $I_2$  nach der vorstehenden Formel berechnet wurde. Hierbei erhielt man als Resultat die Kurve, die in fig. 2 wiedergegeben ist. Die Flächen (22̄1) und (130) mit den Grundwellenlängen  $0.490 \times 10^{-8}$  und  $0.443 \times 10^{-8}$  spiegeln sowohl in erster wie in zweiter Ordnung. Ihre Intensität in der zweiten Ordnung

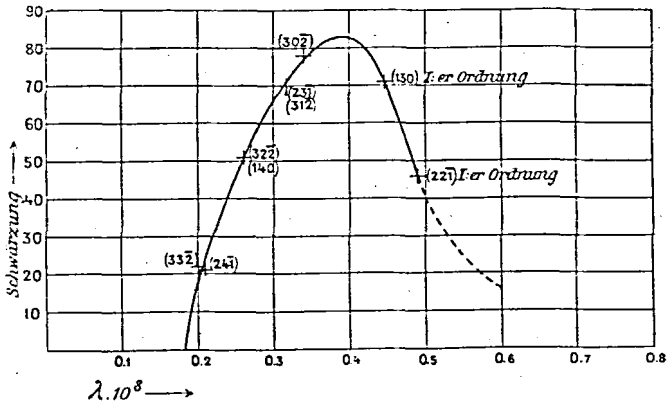


Fig. 2.

ist durch den linken Ast der Kurve gegeben. Die Intensitäten für 0.490 und 0.443 sind also als Rest abgesetzt. Über den Verlauf der Kurve bei grösserem  $\lambda$  als 0.5 dürfte es schwer sein sich mit Bestimmtheit zu äussern. Die Kurve zeigt vollkommen denselben Charakter, wie die von Gross (l. c.) publizierte. Sie zeigt ein Maximum bei  $\lambda = 0.4 \times 10^{-8}$  und ein  $\lambda_{\min} = 0.18 \times 10^{-8}$ .

Die (äusserst schwachen) Flecke in den Pyrochroitdiagrammen, welche der kleinsten Wellenlänge entsprechen, gehören der Form (32̄51) an (die Indizes bei Annahme des Achsenverhältnisses  $c:a = 1.4004:1$  bestimmt). Für diese Form wird

$\frac{\theta}{2} = 8^\circ 04'$  berechnet. Bei Annahme der  $\lambda_{\min} = 0.18 \times 10^{-8}$  wird dann approximativ nach (2)

$$c = \frac{0.18}{2 \sin^2 8^\circ 04'} \cdot 10^{-8} = 4.57 \times 10^{-8} \text{ cm.}$$

Aus dem Achsenverhältnis  $c:a = 1.40$  wird daraus  $a = 3.26 \times 10^{-8} \text{ cm}$  berechnet. Wird die Anzahl Moleküle in einem hexagonalen Elementarparallelepiped mit Kanten von der nun berechneten Länge mit  $N$  bezeichnet, so ergibt sich dann (Dichte des Pyrochroits = 3.26):

$$N = \frac{3.26 \times (3.26)^2 \times 10^{-16} \times 4.57 \times 10^{-8} \sqrt{3}}{2(55 + 2 \times 17) \times 1.64 \times 10^{-24}} = 0.94.$$

In einem Elementarparallelepiped, berechnet nach den vorstehend gemachten Voraussetzungen, würde also *ein* Molekül  $\text{Mn}(\text{OH})_2$  kommen. Die nahe Übereinstimmung mit der Zahl 1 spricht dafür dass die Voraussetzungen richtig sind.

Unter der Voraussetzung eines Moleküls in einem hexagonalen Elementarparallelepiped mit dem Achsenverhältnis  $c:a = 1.40 : 1$ , werden dann die exakten Kantenlängen berechnet zu

$$\begin{aligned} c &= 4.68 \times 10^{-8} \text{ cm} \\ a &= 3.34 \times 10^{-8} \text{ cm} \end{aligned}$$

Wünschenswert wäre natürlich eine Kontrolle durch Photographieren parallel mit der  $a$ -Achse. Die Beschaffenheit des Materials gestattet indessen kaum die Anfertigung von orientierten Präparaten (anderen als Spaltblättern).

Wird die Translationsgruppe  $\Gamma_h$  angenommen, so kommen die Raumsysteme  $\mathcal{D}_{3a}^{1 \dots 4}$  in Frage. Man hat dann diejenigen derselben zu untersuchen, die für die eine Atomart eine zwei-zählige<sup>1</sup> und für die Atomgruppe (OH) eine vierzählige Lage

<sup>1</sup> Orthohexagonales Elementarparallelepiped. Vgl. NIGGLI Geom. Kryst. des Diskont., p. 242 u. f.

ergeben, welche letztere Punktlage einen Freiheitsgrad besitzen soll. Nach NIGGLI'S Tabellen<sup>1</sup> können dann die Raumsysteme  $\mathfrak{D}_{3d}^1$  und  $\mathfrak{D}_{3d}^3$  in Frage kommen. Das System  $\mathfrak{D}_{3d}^1$  mit nur zweizähligen und vierzähligen Punktlagen besetzt, d. h. für die zweizähligen Lagen  $[[000]]$ ,  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right]\right]$  oder  $\left[\left[00 \frac{1}{2}\right]\right]$ ,  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$  und für die vierzähligen  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} p\right]\right]$ ,  $[[00 p]]$  gibt indessen hexagonale holoedrische Symmetrie  $D_{6h}$ , die durch die Wasserstoffatome nicht herabgesetzt wird. Das Raumsystem  $\mathfrak{D}_{3d}^3$  mit zwei- und vierzähligen Punktlagen besetzt, kann dagegen ohne weiteres die gewünschte Symmetrieklasse  $D_{3d}$  abgeben. Die Mn-Atome besitzen dann die zweizähligen Lagen  $[[000]]$ ,  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right]\right]$  ohne Freiheitsgrad und mit der Symmetriebedingung  $D_{3d}$ , die (OH)-Gruppen sitzen auf den dreizähligen Achsen  $[001]_{\frac{1}{3}0}$  und  $[001]_{\frac{2}{3}0}$ , welche Lage vierzählig und mit einem Freiheitsgrad versehen ist. Ihre Symmetriebedingung ist  $C_{3v}$ . Diese Anordnung hat ausserdem den Vorteil eine Erklärung für die Tatsache zu gewähren, dass wo zwischen positiven und negativen Formen ein Intensitätsunterschied vorhanden ist, dieser Unterschied bei dem Mg-Hydrat grösser ist als bei dem Mn-Hydrat. Der Strukturfaktor erhält nämlich für die Flecke des einen Sextanten die Form  $|S|^2 = \left\{ \overset{II}{R} + m (\text{OH}) \right\}^2$ , für die des anderen  $|S|^2 = \left\{ \overset{II}{R} - n (\text{OH}) \right\}^2$ . Wenn sich hier das Atomgewicht des  $\overset{II}{R}$  dem des (OH) nähert, was bei Mg der Fall ist, wird also der Unterschied zwischen den beiden Ausdrücken grösser. (Vergl. S. 422.)

Die Lage der Hydroxylgruppen (bezw. der Sauerstoffatome) auf den dreizähligen Achsen muss nun näher bestimmt werden. Hierbei wurde wie folgt verfahren. Wird die Höhe

<sup>1</sup> l. c. p. 406.



des Elementarparallelepeds mit 1 bezeichnet, so werden die Koordinaten der Hydroxylgruppen resp.  $\left[ \begin{matrix} 2 & 1 \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & x \end{matrix} \right]$  und  $\left[ \begin{matrix} 1 & 2 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & (1-x) \end{matrix} \right]$ . Der Strukturfaktor kann dann geschrieben werden:<sup>1</sup>

$$|S|^2 = \left| \sum_n A_n e^{2\pi i (\alpha n h + \beta n i + \gamma n l)} \right|^2 = Mn + (OH) e^{2\pi i \left( \frac{2h}{3} + \frac{i}{3} + xl \right)} + (OH) e^{2\pi i \left( \frac{h}{3} + \frac{2i}{3} + (1-x) l \right)} = \left\{ Mn + (OH) \left( \cos 2\pi \left( \frac{2h}{3} + \frac{i}{3} + xl \right) + \cos 2\pi \left( \frac{h}{3} + \frac{2i}{3} + (1-x) l \right) \right) \right\}^2 + \left\{ (OH) \left( \sin 2\pi \left( \frac{2h}{3} + \frac{i}{3} + xl \right) + \sin 2\pi \left( \frac{h}{3} + \frac{2i}{3} + (1-x) l \right) \right) \right\}^2 \dots \dots \dots (5)$$

Wird die dieser Ausdruck für ein paar charakteristische Flecke auf der Platte, die nur in der 1:sten Ordnung spie-

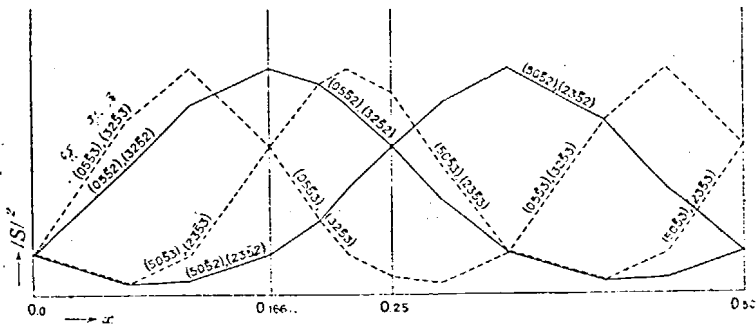


Fig. 3.

geln, berechnet, so erhält man das Resultat, welches graphisch in Fig. 4 wiedergegeben ist, wo die Ordinate  $|S|^2$  und die Abscisse  $x$  (die Atomkoordinate für die eine Hydroxylgruppe) ist. Verfolgt man die Kurve für beispielsweise die beider Rhomboeder  $(50\bar{5}2)$  und  $(0\bar{5}\bar{5}2)$ , die mit der Kurve für  $(2\bar{3}\bar{5}2)$

<sup>1</sup> Vgl. MARX, Handbuch der Radiologie, p. 583.

bezw.  $(3\bar{2}\bar{5}2)$  zusammenfällt, so findet man dass  $(50\bar{5}2)$  bezw.  $(2\bar{3}\bar{5}2)$  für  $x > 0.25$  grössere Intensität hat als  $(0\bar{5}\bar{5}2)$  bezw.  $(3\bar{2}\bar{5}2)$ . Auf der Platte kann man indessen mit aller Deutlichkeit wahrnehmen dass  $(0\bar{5}\bar{5}2)$  und  $(3\bar{2}\bar{5}2)$  stärker sind als  $(50\bar{5}2)$  bzw.  $(2\bar{3}\bar{5}2)$ .  $x$  muss also kleiner als 0.25 sein. In ähnlicher Weise wird bestimmt dass  $x$  grösser als 0.166... sein muss, da nämlich auf der Platte  $(50\bar{5}3)$  und  $(2\bar{3}\bar{5}3)$  stärker sind als  $(0\bar{5}\bar{5}3)$  bezw.  $(3\bar{2}\bar{5}3)$ . Für die Sauerstoffatome resultiert also

$$0.25 > x > 0.166\dots$$

Dieses Gebiet kann graphisch näher untersucht werden indem man die Intensität auch bei verschiedenen Formen<sup>1</sup> angehörenden Flecken vergleicht, wobei ausser dem Strukturfaktor auch der Lorentzfaktor und die Intensitätsverteilung im Spektrum in Betracht gezogen werden. Als dem mit der Intensitätsverteilung auf der Platte am besten übereinstimmenden Werte ist Verf. bei  $x = \frac{2}{9} = 0.222\dots$  stehen geblieben.

Die Hydroxylgruppen erhalten also die Koordinaten  $\left[ \begin{matrix} 2 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & 9 \end{matrix} \right]$  bezw.  $\left[ \begin{matrix} 1 & 2 & 7 \\ 3 & 3 & 9 \end{matrix} \right]$ .<sup>2</sup>

Im Anschluss an ein Verfahren, das von Gross<sup>3</sup> angewendet ist, wurde hierauf das »Indizesfeld« der angenommenen Struk-

<sup>1</sup> D. h. nicht bloss Flecke mit denselben Indizes in positiven und negativen Sextanten.

<sup>2</sup> Zu bemerken ist, dass in dieser Struktur die Sauerstoffatome (Hydroxylgruppen), wenn z. B.  $\left[ \begin{matrix} 2 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & 9 \end{matrix} \right]$  die Koordinaten  $[000]$  gegeben wird, die Koordinaten  $[000]$  und  $\left[ \begin{matrix} 2 & 1 & 4 \\ 3 & 3 & 9 \end{matrix} \right]$  bezw.  $\left[ \begin{matrix} 2 & 1 & 5 \\ 3 & 3 & 9 \end{matrix} \right]$  erhalten. Bei  $\left[ \begin{matrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 \end{matrix} \right]$  wäre diese Sauerstoffstruktur die Struktur der O-Atome im kristallisiertem Wasser, wie es Gross in seiner Eisarbeit gezeigt hat.  $\left[ \begin{matrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 2 \end{matrix} \right]$  wäre bei  $0 = 0.25$  erfüllt, während im Pyrochroit  $(OH) = 0.222\dots$  gefunden ist. Das erwähnte Verhältnis ladet zu weitere Schlussfolgerungen ein. Zuerst muss jedoch klargestellt werden, dass hier nicht nur ein Zufall vorliegt.

<sup>3</sup> Centralblatt für Mineralogie etc. I. c. Vgl. auch P. P. EWALD, Ann. d. Physik. 44 (1914), p. 257.

tur konstruiert. Die Begrenzung etwaiger Flecke auf der Platte, die damit zusammenhängt dass in dem angewendeten Licht Wellenlängen  $< 0.18 \times 10^{-8}$  cm nicht vorhanden sind, wird berechnet aus der Formel

$$\lambda_{\min} = \frac{3a^2 l}{2c \left( h^2 + i^2 + hi + \frac{3}{4} \frac{a^2}{c^2} \cdot l^2 \right)} \dots \dots (6)$$

( $h, i, l$  = Bravaische Indices). Der Wert ( $h^2 + i^2 + hi$ ) wird als Ordinate auf jeder  $l$ -Linje abgesetzt (Vgl. Fig. 4).

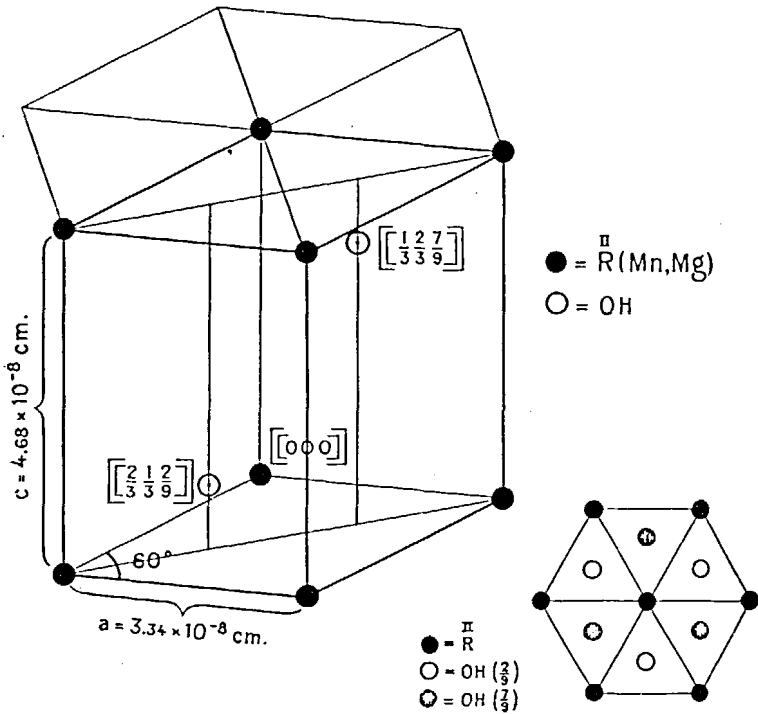


Fig. 4.

Eine untere Grenze für jedes  $l$  wird durch die Dimensionen der Platte bestimmt. Auf Grund von Unzuverlässigkeit in den äusseren Teilen derselben, sind nur die Indizes innerhalb

eines Gebietes mit 4.3 cm Radius mitgenommen worden, was der Bedingung entspricht

$$\varrho > 65^{\circ} 48'$$

$$\frac{\beta}{\alpha} < 24^{\circ} 12'$$

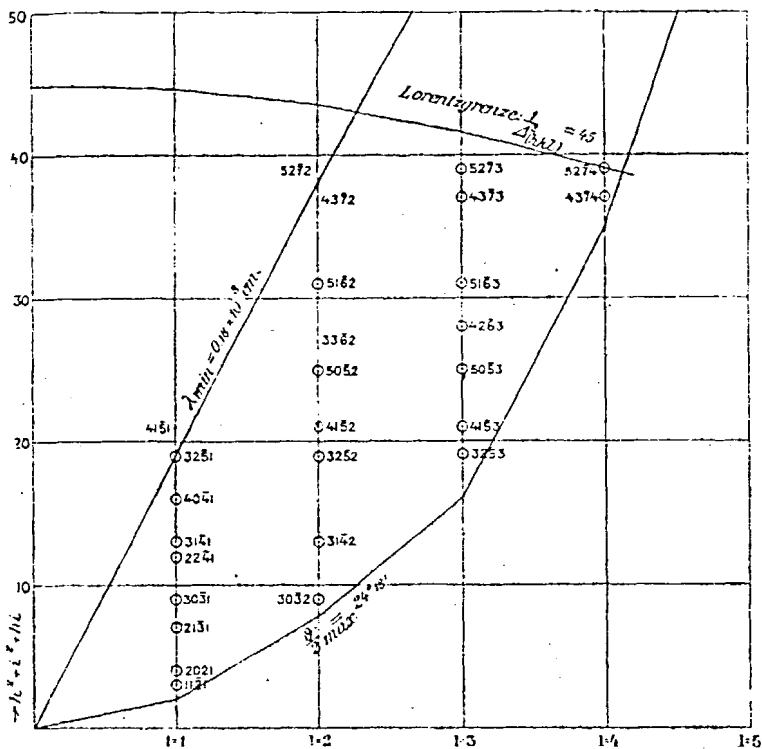


Fig. 5.

Der Lorentzfaktor endlich bildet eine dritte Grenze für das Indizesfeld. Von den vorhandenen Flecke hat (5274) der grösste Flächeninhalt des Elementarparallelogrammes oder

$$L^2_{(5274)} = h^2 + i^2 + hi + \frac{3}{4} \cdot \frac{a^2}{c^2} l^2 = 45.1$$

$$(c = 1.40).$$

Als Lorentzgrenze wurde demnach angenommen:

$$\frac{1}{\mathcal{A}^2_{hkl}} = \frac{1}{45}$$

Bei der Berechnung der Intensität für die einzelnen Flecke sind der Strukturfaktor, der Lorentzfaktor und die Intensität der spielgelnden Wellenlänge, die in der in Fig. 2 abgebildeten Kurve erhalten wurde, berücksichtigt worden. Für den Fall dass Spiegelung in mehr als einer Ordnung stattfand, sind die Intensitäten der einzelnen Ordnungen addiert worden. Die in dieser Weise berechneten Intensitäten sind in Fig. 6 graphisch dargestellt. Die innerhalb der vorstehend angegebenen beiden Grenzen liegenden etwaigen Indizeskombinationen sind auf der Abscisse nach steigendem 3ten und 4ten Index geordnet. Die Intensitätswerte sind um grössere Übersicht zuwegezubringen durch eine ausgezogene Linie verbunden. Die auf der Platte geschätzte Schwärzung in den einzelnen Punkten ist in beliebiger Masstab durch eine gestrichelte Linie dargestellt. Die Gute Übereinstimmung zwischen den Variationen in der berechneten Intensität und in der Kurve, welche die Schwärzung in den resp. Flecken angibt, scheint Verf. deutlich für die Richtigkeit der angenommenen Struktur zu sprechen. Wird bei der Berechnung der Intensitäten auch der Faktor  $(1 + \cos^2 \vartheta)$  mitgenommen so verändert sich die Intensitätskurve nur unbedeutend und der gedachte Faktor kann in diesem Zusammenhang unberücksichtigt werden.<sup>1</sup>

Mangelnde Übereinstimmung wird für die Punkte  $(20\bar{2}1)$  und  $(02\bar{2}1)$  beobachtet. Für diese Punkte ist der Verlauf der Kurve umgekehrt, indem auf der Pyrochroitplatte  $(02\bar{2}1)$  unbedeutend stärker ist als  $(20\bar{2}1)$ . (Auf den Bruzitplatten bedeutend stärker.) Laut der Tabelle Seite 431 ist der Strukturfaktor in der 1:sten Ordnung für  $(02\bar{2}1)$  grösser als für  $(20\bar{2}1)$ , in der 2:ten Ordnung dahingegen ist das Verhältnis

<sup>1</sup> Die Wirkung der Absorbition ist auch unberücksichtigt worden.

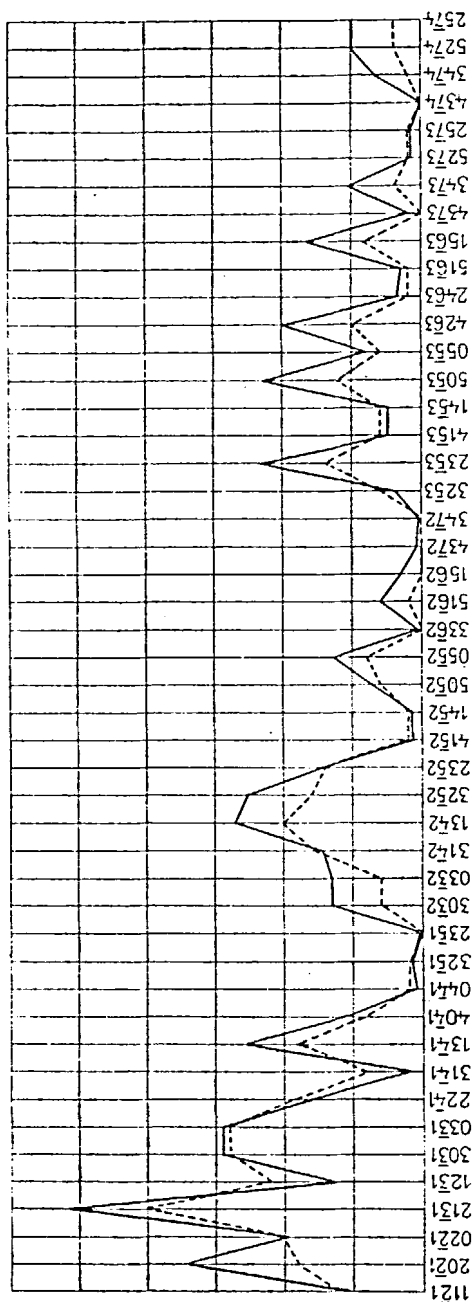


Fig. 6.  
(graphische Darstellung der Tabelle Seite 431.)

umgekehrt. Nach dem Intensitätsverlauf in dem angewendeten Spektralgebiet muss indessen hauptsächlich die 2:te Ordnung photographisch wirksam sein, da die berechnete Grundwellenlänge  $\lambda = 0.817 \times 10^{-8}$  ist. Die Schwärzung würde indessen mit der berechneten Intensität übereinstimmen wenn man annehmen dürfte dass die Intensität in der Wellenlänge  $0.817 \times 10^{-8}$  grösser sei als der Verlauf der Kurve zu zeigen scheint. Wie bereits bemerkt, gibt es keine sicheren Anhaltspunkte für die Bestimmung der Intensität in diesem Teil des Spektrums, wengleich ein Vergleich mit Gross' Kurven schliessen lässt, dass die Intensität hier sehr unbedeutend sein sollte.<sup>1</sup>

Die Mineralien Pyrochroit und Bruzit sind isomorph. Sie haben die gleiche Symmetrie,  $D_{3a}$ , und besitzen Achsenverhältnisse, die nahe bei einander liegen:

	c:a
Pyrochroit:	1.4004 <sup>2</sup>
Bruzit:	1.5208 <sup>3</sup>

Ausserdem bilden sie Mischkristalle, indem sich herausgestellt hat, dass MnO bis zu 10.46 % in dem Bruzitmolekül des Mn-Bruzits von Långbanshyttan, der vorstehend erwähnt wurde, anhalten ist. Über diese Mn-Bruziten wird eine besondere Mitteilung erfolgen. Die äusserst ausgeprägte Spaltbarkeit nach (0001) sowohl wie auch die Biegsamkeit der Spaltblätter ist für beide Mineralien charakteristisch.

Werden die Kantenlängen in einem hexagonalen Elemen-

<sup>1</sup> Zu bemerken ist, dass die Wellenlänge 0.817 ein Gebiet selektiver Sensibilität, der Eigenstrahlung des Broms entsprechend ( $\lambda = 0.926 \times 10^{-8}$ ), gehört. In wie weit diese Strahlung das Glas der Röhre durchdringt, ist jedoch unsicher.

<sup>2</sup> G. FLINK: Bihang till K. Vet. Akad. Handl. Stockholm. Bd 12, No 2, p. 13. (10 $\bar{1}$ 1): (0001) = 58° 16'.

<sup>3</sup> DANA, System. (Nach HESSENBERG.)

tarparallelepiped berechnet, so erhält man für Bruzit (Dichte 2.38)

$$c = 4.75 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$a = 3.13 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

Die Wellenlänge für die Fläche (32 $\bar{5}$ 1) wird zu  $\lambda = 0.160 \times 10^{-8}$  berechnet, welche Wellenlänge in dem angewendeten Spektrum nicht vorhanden ist. Auch auf den Bruzit- und den Mn-Bruzitplatten kommen diese Flecke nicht vor. Für (40 $\bar{4}$ 1) wird  $\lambda = 0.189 \times 10^{-8}$  berechnet. Dieser Fläche entsprechen schwache Flecke. Im übrigen sind alle Flecke der Pyrochroitplatte auf den Bruzitplatten wiederzufinden, wobei indessen zu bemerken ist dass, da der Intensitätsunterschied zwischen positiven und negativen Formen hier grösser ist, den auf den Pyrochroitplatten befindlichen schwachen Flecken hier in einigen Fällen Flecke entsprechen, die hart an der Schwelle der photographischen Schwärzung liegen.

Wie zu wiederholten Malen erwähnt wurde, ist der Intensitätsunterschied in verschiedenen Sextanten grösser bei dem Mg: als bei dem Mn-Hydrat und dies gilt durchweg für alle Fleckpaare. Eine Erklärung für diesen Sachverhalt scheint Verf. darin zu liegen, dass der Strukturfaktor in allen solchen Fällen, wo ein Intensitätsunterschied vorhanden ist, die Form  $\{\overset{II}{R} + m(\text{OH})\}^2$  bzw.  $\{\overset{II}{R} - n(\text{OH})\}^2$  oder für ein paar Flächen  $\{\overset{II}{R} + m(\text{OH})\}^2$  bzw.  $\{\overset{II}{R} + n(\text{OH})\}^2$  erhält, wo  $m > n$  ist. Wenn in diesen Ausdrücken Mn durch Mg ersetzt wird, dessen Atomgewicht sich dem des Hydroxyls nähert, wird der Unterschied zwischen den beiden Ausdrücken grösser. Für beispielsweise das Fleckenpaar (21 $\bar{3}$ 1), (12 $\bar{3}$ 1) wird das Verhältnis zwischen den Intensitäten, wenn Strukturfaktor, Lorentzfaktor und die photographische Schwärzungsintensität berücksichtigt werden:

$$\text{Pyrochroit: } \frac{I(21\bar{3}1)}{I(12\bar{3}1)} = 4.1 : 1$$

$$\text{Bruzit: } \frac{I(21\bar{3}1)}{I(12\bar{3}1)} = 10.6 : 1$$



Diese Ziffern scheinen recht gut übereinzustimmen mit den Intensitätsverhältnissen bei den  $(21\bar{3}1)$  — bzw.  $(12\bar{3}1)$  — Flecken auf den Pyrochroit- und den Bruzitplatten. Wirksame Wellenlängen sind für Pyrochroit  $0.484 \times 10^{-8}$  in erster,  $0.242 \times 10^{-8}$  in zweiter Ordnung, für Bruzit  $0.419 \times 10^{-8}$  in erster,  $0.209 \times 10^{-8}$  in zweiter Ordnung.

Ein anderer Weg zur Erklärung des grösseren Intensitätsunterschiedes bei den Bruzit- als bei den Pyrochroitflecken wäre eine Annahme dass die (OH)-Gruppen in den Bruzitkristallen nicht völlig dieselbe Lage besitzen wie in den Pyrochroitkristallen. Bekanntlich ist EWALD<sup>1</sup> in Bezug auf die isomorphen Kristallarten  $\text{FeS}_2$  und  $\text{MnS}_2$  zu dem Resultat gekommen dass die Koordinaten der S-Atome nicht dieselben sind. (An den trigonalen Achsen  $x = 0.20$  für  $\text{MnS}_2$ ,  $0.223$  für  $\text{FeS}_2$ ). Im Hinweis auf Fig. 3 hält Verf. es für unwahrscheinlich dass dieser Weg zu dem gewünschten Ziel führt. Die Hydroxylgruppen in Pyrochroit und Bruzit können schwerlich verschiedene Koordinaten besitzen. Wie aus dem Verlauf der Kurven in der Figur ersichtlich ist, muss nämlich wenn  $x$ , d. h. die Lage der Hydroxylgruppe auf den trigonalen Achsen sich verändert, der Intensitätsunterschied für eines der mit Kurven angegebenen Fleckenpaare kleiner werden. Wird z. B.  $x$  kleiner, so wird der Unterschied in Intensität zwischen  $(05\bar{5}2)$  bzw.  $(32\bar{5}2)$  und  $(50\bar{5}2)$  bzw.  $(23\bar{5}2)$  grösser, während der Unterschied zwischen  $(50\bar{5}3)$  bzw.  $(23\bar{5}3)$  und  $(05\bar{5}3)$  bzw.  $(32\bar{5}3)$  *abnimmt*. Nimmt  $x$  zu, so wird das Verhältnis das umgekehrte. Nach den Beobachtungen auf den Platten nimmt, wie bereits bemerkt, der Intensitätsunterschied nicht nur für diese, sondern für alle Flecke zu. Hier ist indessen zu bemerken dass sich nicht entscheiden lässt ob der Schwerpunkt der (OH)-Gruppen oder die Sauerstoffatome die berechneten Lagen  $\frac{2}{9}$  und  $\frac{7}{9}$  einnehmen. Es wäre vielleicht denkbar, dass die Sauerstoffatome bei Bruzit und

<sup>1</sup> Ann. der Physik 44 (1914), p. 1183.

Pyrochroit dieselbe Lage hätten, während die Lage der Wasserstoffatome auf den trigonalen Achsen nicht dieselbe wäre.

\* \* \*

Die Anordnung der Atome im Kristall muss sowohl mit seinen Kohäsionseigenschaften als auch mit seiner Formentwicklung in Zusammenhang gebracht werden können. Spaltbarkeits- und Translationsflächen sowohl wie auch im übrigen gekennzeichnete (Habitus-bestimmende u. a.) Flächen müssen in Bezug auf Belastung und Schichtabstand spezielle Eigenschaften besitzen. NIGGLI<sup>1</sup> und SCHIEBOLD<sup>2</sup> haben in dieser Beziehung besonders bemerkenswerte Gesichtspunkte dargelegt. Könnte man in diesem Punkte, d. h. in Bezug auf den Zusammenhang zwischen Struktureigentümlichkeiten in gewissen Richtungen und der Formentwicklung des Kristalls, dem Vorkommen von Zwillings- und Translationsflächen etc., zu voller Klarheit gelangen, so wäre damit der Weg geebnet zur Möglichkeit mit Kenntnis von allen den nun genannten Eigenschaften einer Kristallart die Atom-anordnung derselben zu berechnen. Bei flächenarmen Kristallen könnte man sich dann natürlich, wie GOLDSCHMIDT es mit so glänzendem Resultat getan hat, des Studiums des Lösungsprozesses des Kristalles bedienen um über seine Formentwicklung, das Vorkommen der wichtigsten Flächen und der wichtigsten Zonen volle Klarheit zu erhalten.

Die hier untersuchten Mineralien Pyrochroit und Bruzit sind besonders schlecht kristallisierend und nur ganz wenige Formen sind mit Sicherheit bestimmt. Auch sind keine Lösungsversuche bewerkstelligt. Ein paar morphologische Eigenschaften verdienen jedoch im Zusammenhang mit der Struktur diskutiert zu werden. Charakteristisch für beide Mineralien

<sup>1</sup> Geom. Kristallographie des Diskontinuums, p. 463 u. f.

<sup>2</sup> Die Verwendung der Lauediagramme etc. Sächs. Akad. d. Wiss. Math.-phys. Kl. 36, p. 106 u. f.

ist die sehr ausgeprägte Spaltbarkeit 11 (0001). MÜGGE<sup>1</sup> vermutet dass (0001) auch Translationsfläche ist. Hiermit hängt in diesem Falle die grosse Biegsamkeit der Spaltblätter, insbesondere des Bruzits, zusammen. Beim Pyrochroit muss ferner die Rolle, welche das Prisma 2:ter Ordnung (11 $\bar{2}$ 0)<sup>2</sup> spielt, hervorgehoben werden. Diese Form ist neben (0001) für die (bisher beobachteten) Kristalle entschieden die wichtigste. Die meisten Pyrochroitkristalle zeigen nur die Kombination (11 $\bar{2}$ 0) (0001). Dass das Prisma (11 $\bar{2}$ 0) und nicht (10 $\bar{1}$ 0) ist, hat an diesen Kristallen erst mit Hilfe von Röntgenogrammen entschieden werden können. Das Prisma (10 $\bar{1}$ 0) ist beobachtet, aber selten und dann in Kombination mit Rhomboedern. (Vgl. FLINK.)<sup>3</sup> Am Bruzit scheint dagegen kein Prisma mit Sicherheit beobachtet zu sein.<sup>4</sup>

Wenn  $A_1, A_2, \dots$  die Atomgewichte (oder die Ordnungszahlen) für die Atome sind, welche  $q_1, q_2, \dots$  mal von den Elementarparallelogrammen absorbiert werden, und  $A_{(hkl)}$  die Fläche der Elementarparallelogramme ist, so ist nach NAGLI<sup>5</sup> die »Belastung« der Schicht

$$L = \frac{q_1 A_1 + q_2 A_2 + q_3 A_3 \dots}{A_{(hkl)}} \dots \dots \dots (7)$$

Für die hexagonale Struktur ist der Abstand zwischen den Atomschichten

$$\delta = \frac{a \sqrt{3}}{2 \sqrt{h^2 + i^2 + hi + \frac{3}{4} \frac{a^2 l^2}{c^2}}} \dots \dots \dots (8)$$

Für  $a = l$  werden dann für die wichtigsten Flächen der Pyrochroitstruktur berechnet:

<sup>1</sup> Neues Jahrbuch für Mineralogie etc. 1898, I, p. 110.

<sup>2</sup> G<sub>1</sub>.

<sup>3</sup> Arkiv för kemi, mineralogi etc. 3, No 35.

<sup>4</sup> GOLDSCHMIDT, Atlas I, Text. p. 245.

<sup>5</sup> Geom. Krist. des Diskont. p. 465.

$$(0001) L = 1.555 \underbrace{\text{Mn}} \cdot \underbrace{1.555 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{1.555 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{1.555 \text{ Mn}}$$

$$\delta = \quad \quad \quad 0.31 \quad \quad \quad 0.78 \quad \quad \quad 0.31$$

$$(10\bar{1}0) L = 0.714 \underbrace{\text{Mn}} \cdot \underbrace{0.714 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.714 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.714 \text{ Mn}}$$

$$\delta = \quad \quad \quad 0.29 \quad \quad \quad 0,29 \quad \quad \quad 0.29$$

$$(11\bar{2}0) L = 0.412 \text{ Mn} + \underbrace{0.824 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.412 \text{ Mn} + 0.824 \text{ (OH)}}$$

$$\delta = \quad \quad \quad \quad \quad 0.50$$

$$(10\bar{1}1) L = 0.607 \underbrace{\text{Mn}} \cdot \underbrace{0.607 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.607 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.607 \text{ Mn}}$$

$$\delta = \quad \quad \quad 0.08 \quad \quad \quad 0.58 \quad \quad \quad 0.08$$

$$(0111) L = 0.607 \underbrace{\text{Mn}} \cdot \underbrace{0.607 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.607 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.607 \text{ Mn}}$$

$$\delta = \quad \quad \quad 0.33 \quad \quad \quad 0.08 \quad \quad \quad 0.33$$

$$(11\bar{2}1) L = 0.388 \underbrace{\text{Mn}} \cdot \underbrace{0.388 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.388 \text{ (OH)}} \cdot \underbrace{0.388 \text{ Mn}}$$

$$\delta = \quad \quad \quad 0.10 \quad \quad \quad 0.37 \quad \quad \quad 0.10$$

Wie aus den angeführten Ziffern ersichtlich ist, zeichnet sich (0001) sowohl durch die grösste Belastung als auch durch den grössten mittleren Abstand zwischen den Atomschichten aus. Hier ist auch der extrakomplexare Raum am grössten, was nach SCHIEBOLD<sup>1</sup> die Entstehung von Spaltfläche begünstigen sollte. (Die H-Atome sind negligiert.) Weiter geht hervor, dass (11 $\bar{2}$ 0) (10 $\bar{1}$ 0) in Bezug auf den Schichtabstand, der für (11 $\bar{2}$ 0) nahezu das doppelte gegen den für (10 $\bar{1}$ 0) ist, übertrifft. Auch die Belastung ist, wenn nur die Anzahl Atome berücksichtigt wird, für (11 $\bar{2}$ 0) grösser, obwohl mit Rücksicht auf die Atomgewichte das Verhältnis umgekehrt wird (Vgl. Fig. 7). Mit Rücksicht auf unsere Erfahrung in diesen Problemen scheint die hier vorgeschlagene Struktur des Pyrochroits der Spaltbarkeit 11 (0001) und dem Verhältnis dass (11 $\bar{2}$ 0) wichtiger ist als (10 $\bar{1}$ 0) wenigstens nicht zu widersprechen.

<sup>1</sup> Die Verwendung der Lauediagramme etc. p. 115.

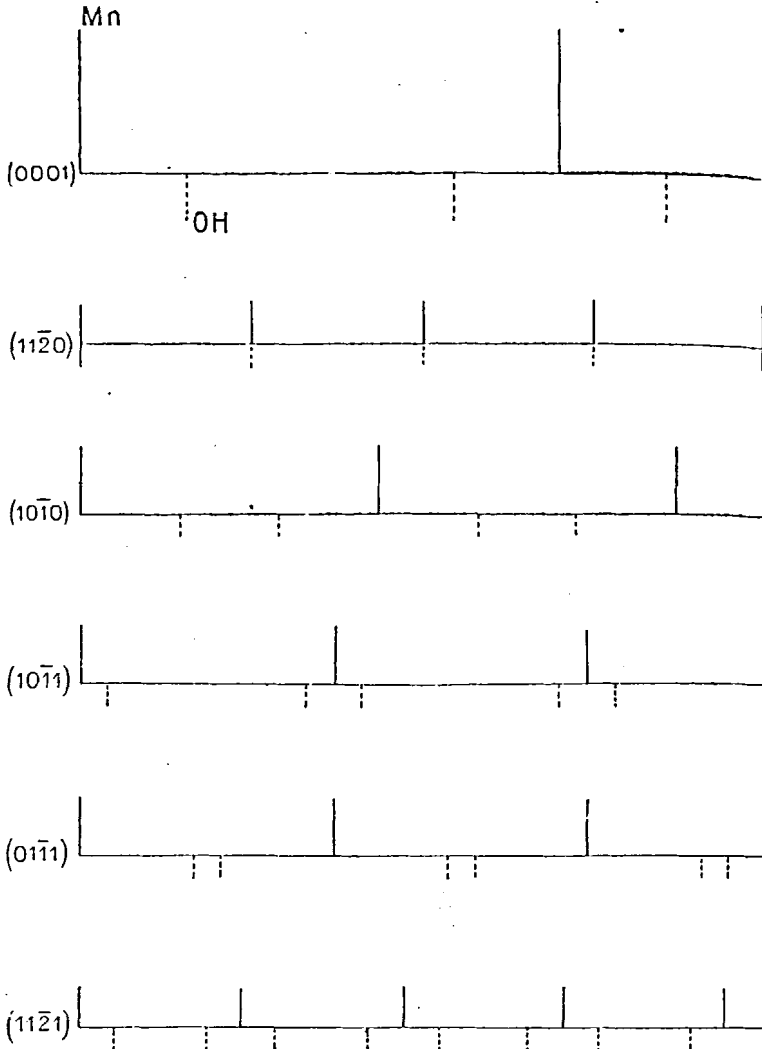
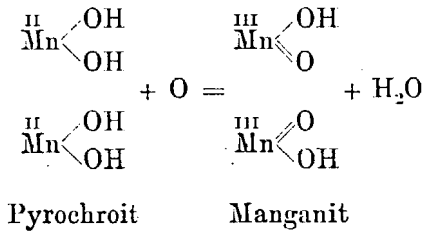


Fig. 7.

Graphische Darstellung der Atombelastung. Ordinata  $L$ , Abscissa  $\delta$ .

In aller Kürze seien in diesem Zusammenhang präliminär einige Beobachtungen in Bezug auf Strukturveränderungen bei den Mineralien Pyrochroit und Bruzrit mitgeteilt. Die chemische Zusammensetzung des Pyrochroits ist offenbar von

der Art, dass eine chemische Veränderung ziemlich rasch erfolgen muss, wenn das Mineral an der Luft aufbewahrt wird. Tatsächlich werden die Pyrochroitkristalle nach kurzer Zeit schwarz und undurchsichtig. Nach einer Analyse von Dr. Phil. R. MAUZELIUS, die künftighin veröffentlicht werden wird, nähert sich das Umwandlungsprodukt der chemischen Zusammensetzung des Minerals *Manganit*. Die chemische Reaktion könnte also geschrieben werden:



Die Reaktion ist indessen, wenigstens an den untersuchten Kristallen, nicht vollständig, indem in diesen Pseudomorphosen noch einige % zweiwertiges Mangan vorhanden waren. Die Kristalle behalten ihre Spaltbarkeit bei. Spaltblätter von diesen Pseudomorphosen wurden nun in gleicher Weise wie die frischen Kristalle photographiert. Hierbei wurden Röntgenogramme (von 0001) erhalten, die durchaus dieselbe Symmetrie zeigten wie der frische Pyrochroit, wengleich anstatt Punkte ausgezogene Strahlen von dem Aussehen wie es RINNE<sup>1</sup> bei der Durchstrahlung von krummen Kristallblättern erhalten hat, beobachtet wurden.

Wie die Figuren andeuten, strahlen vom Primärfleck sechs gleich starke Strahlen aus, während daneben auch, der Rhomboederzone und den Flächen (21 $\bar{3}$ 1) entsprechend, Strahlen sichtbar sind.

Im Zusammenhang hiermit wurden Versuche mit frischen Pyrochoritblättern gemacht, die in einer Kristallpresse einem

<sup>1</sup> Berichte über die Verhandl. K. Sächs. Gesellsch. d. Wiss. Leipzig. Math.-Phys. Kl. 1915, p. 303.

Druck  $\perp$  (0001) ausgesetzt wurden. Solche gepresste Spaltblätter wurden nach dem Pressen durchstrahlt, wobei sich herausstellte dass sie *ein in gleicher Weise veränderten Laue-Bild* abgaben.

Bruzit lässt sich, wie RINNE<sup>1</sup> gezeigt hat, ohne dass die äussere Begrenzung des Kristalls zerstört wird, durch Er-

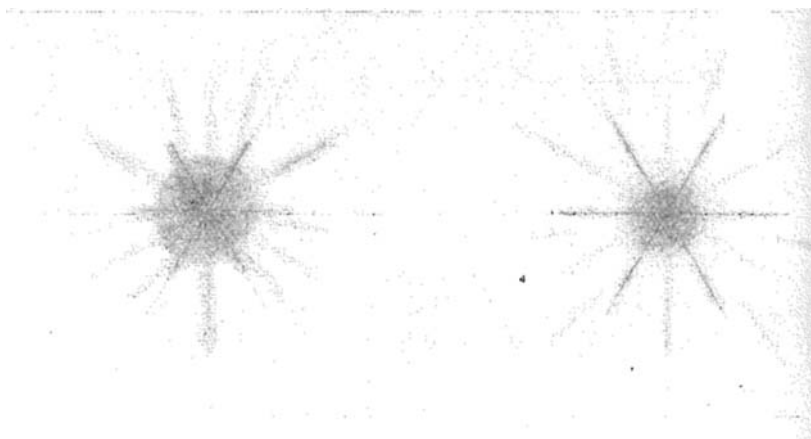
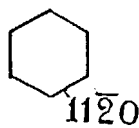
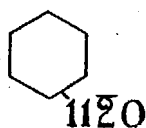


Fig. 8.

Linko: Pseudomorphyse nach  $Mn(OH)_2$ . Rechts:  $Mg(OH)_2$ , entwässert.  $Mg(OH)_2$  sowie  $Mn(OH)_2$   $\perp$  0001 gepresst geben genau dasselbe Bild.

hitzung in eine Modifikation von  $MgO$  überführen, die optisch einachsig ist. Verf. hat im Anschluss an die Versuche mit Pyrochroit auch solchen »Metabruzit« durchstrahlt, wobei die gleiche Veränderung des Lauebildes erhalten wurde wie beim Pyrochroit, d. h. in ein Strahlendiagramm mit der Symmetrie des Bruzits. Ebenfalls zeigten gepresste Bruzitblätter in Einzelheiten dasselbe Lauebild wie der entwässerte Bruzit.

<sup>1</sup> Zeitschr. der deutschen geol. Gesellsch. 1891, p. 231.

Eine Veränderung des Lauebildes von Punkt- in Strahlendiagramm mit beibehaltener Symmetrie wurde also betreffend Pyrochroit und Bruzit erhalten:

- 1) Bei natürlichen Pseudomorphosen nach  $Mn(OH)_2$ .
- 2) Durch Pressung  $\perp$  0001 von  $Mn(OH)_2$ .
- 3) » » » »  $Mg(OH)_2$ .
- 4) Bei künstlichen Pseudomorphosen nach  $Mg(OH)_2$ .

Verf. ist mit experimentellen Arbeiten in dieser Frage beschäftigt und es hat sich gezeigt dass sowohl natürliche wie künstliche Pseudomorphosen häufig diese charakteristische Veränderung des Lauebildes zeigen. Von ersterer Art können erwähnt werden Pseudomorphosen von  $Fe_2O_3$  nach  $FeO$ .  $Fe_2O_3$ , d. h. s. g. *Martit*, unter künstlichen  $Fe_2O_3$  nach  $FeS_2$ ,  $ZnO$  nach  $ZnS$  (und möglicherweise auch  $CaO$  nach  $CaCO_3$ ). Diese Versuche, die sich noch in einem präliminären Stadium befinden, scheinen ein gut Teil von Interesse für die Strukturforschung darzubieten und Verf. hofft bald die erhaltenen Resultate mitteilen zu können.

Es ist also klar dass nach künstlicher oder natürlicher Pseudomorphosenbildung in vorstehend angeführten Fällen: 1) der Kristall immer noch eine regelmässige (oder nahezu regelmässige) Struktur hat, 2) der Symmetriehalt derselbe ist wie zuvor, 3) dass jedoch gewisse Veränderungen der Atomschwerpunkte stattgefunden haben, die das Lauebild von einem Punktbild in ein Strahlendiagramm überführen. Verf. hofft binnen kurzen hierauf zurückzukommen, wünscht aber nur hervorzuheben, dass bei einer Erklärung dieses »Röntgenstrahlen-Asterismus« vor allem klargelegt werden muss: 1) warum, wenn ein Fleck in einen »Strahl« ausgezogen wird (was experimentell durch successive stärkere Pressung von z. B.  $KCl$ -Kristallen verfolgt werden kann), überhaupt ein (offenbar) *regelmässig verlaufender Strahl und nicht ein unregelmässig begrenzter grösserer Fleck entsteht*, 2) eine einfache Erklärung der Tatsache dass die vor der Veränderung der Struktur senkrecht zur fotogr. Platte stehenden Atom-



schichten *nach der Veränderung reflektierten und starke Strahlen entsprechen*. Dies ist nämlich ersichtlich der Fall bei z. B. den Strahlendiagrammen des Pyrochroits und des Bruzits, wo die sechs von der Primärfleck (*durch die Primärfleck?*) gehenden Strahlen durch Reflexion gegen die Flächen (11 $\bar{2}$ 0) entstanden sein müssen.

Röntgenographisches Laboratorium der Universität zu Stockholm Sept. 1919.

---

$V_{2,3} \cdot 10^{-3}$	$\frac{1}{V_{2,3}^2 \cdot J^2(\text{min})}$	$ S ^2$	$I_{2,3}$	$7 \cdot 10^{-5}$	$V_{2,3} \cdot 10^{-3}$	$\frac{1}{V_{2,3}^2 \cdot J^2(\text{min})}$	$ S ^2$	$I_{2,3}$	$7 \cdot 10^{-5}$
4	6.6	6.6	39.6	51	4	6.6	6.6	39.6	51
4	6.6	6.6	39.6	51	4	6.6	6.6	39.6	51
4	6.6	6.6	39.6	51	4	6.6	6.6	39.6	51

$V_2 \cdot 10^{-3}$	$\frac{1}{V_2^2 \cdot J^2(\text{min})}$	$ S ^2$	$I_2$	$7 \cdot 10^{-5}$
8.7	29.6	29.6	89	0.212
4.9	17.6	17.6	83	0.408
1.3	13.2	13.2	83	0.517
13	42.0	42.0	77	0.329
12.1	42.0	42.0	77	0.329
0.4	58.0	58.0	42	0.246
2.7	58.0	58.0	42	0.246

$V_2 \cdot 10^{-3}$	$\frac{1}{V_2^2 \cdot J^2(\text{min})}$	$ S ^2$	$I_2$	$7 \cdot 10^{-5}$
1.7	19.4	19.4	5	0.184
1.7	19.4	19.4	5	0.184
0.2	19.4	19.4	5	0.184
19.1	10.5	10.5	2 10	0.679
18.1	10.5	10.5	2 10	0.679
14.2	14.5	14.5	54	0.492
25.4	20.5	20.5	79	0.349
14.2	14.2	14.2	79	0.349
1.6	22.5	22.5	70	0.317
1.6	22.5	22.5	70	0.317
12.9	26.5	26.5	52	0.270
0.8	26.5	26.5	52	0.270
6.1	32.5	32.5	30	0.230
3.4	32.5	32.5	30	0.230
0.9	38.5	38.5	5	0.186
0.5	38.5	38.5	5	0.186

$V_2 \cdot 10^{-3}$	$\frac{1}{V_2^2 \cdot J^2(\text{min})}$	$ S ^2$	$I_2$	$7 \cdot 10^{-5}$
0.4	97.4	97.4	25	0.219
0.4	97.4	97.4	25	0.219
0.4	97.4	97.4	25	0.219

$V_2 \cdot 10^{-3}$	$\frac{1}{V_2^2 \cdot J^2(\text{min})}$	$ S ^2$	$I_2$	$7 \cdot 10^{-5}$
1.6	42.4	42.4	47	0.253
1.6	42.4	42.4	47	0.253
1.6	42.4	42.4	47	0.253
10.4	40.4	40.4	53	0.266
1.9	40.4	40.4	53	0.266
16.6	34.4	34.4	72	0.321
3.0	34.4	34.4	72	0.321
3.0	34.4	34.4	72	0.321
3.0	34.4	34.4	72	0.321
3.0	34.4	34.4	72	0.321
4.2	28.4	28.4	83	0.377
4.2	28.4	28.4	83	0.377
4.2	28.4	28.4	83	0.377
19.7	31.4	31.4	78	0.341
19.7	31.4	31.4	78	0.341
19.7	31.4	31.4	78	0.341
3.0	31.4	31.4	78	0.341
3.0	31.4	31.4	78	0.341
3.0	31.4	31.4	78	0.341
3.0	31.4	31.4	78	0.341
3.0	31.4	31.4	78	0.341
5.0	24.4	24.4	77	0.439
5.0	24.4	24.4	77	0.439
5.0	24.4	24.4	77	0.439
23.2	22.4	22.4	56	0.478
23.2	22.4	22.4	56	0.478
23.2	22.4	22.4	56	0.478
4.2	22.4	22.4	56	0.478
4.2	22.4	22.4	56	0.478
4.2	22.4	22.4	56	0.478

$$\theta = \text{Gl. Winkel.}$$

$$V = \sum_r \left| \sum_n \Delta h e^{2\pi i r (\alpha_n h + \beta_n k + \gamma_n)} \right|^2 J^2(h, \theta)$$

<sup>2</sup>  $V$  ist aus der Kurve Fig. 2 entnommen

$$|S|^2 = \left| \sum_n \Delta h e^{2\pi i r (\alpha_n h + \beta_n k + \gamma_n)} \right|^2$$