

## Anhang

### Anhang 1: Umrechnung der Orbitaldichte

Bei der Zerlegung der Zustandsdichte nach  $d_{2z^2-x^2-y^2}$  und  $d_{x^2-y^2}$  tritt das Problem auf, daß  $d_{z^2-x^2}$  als Mischung erscheint. Die Projektion der Spindichte auf die (1, 1, 0)-Ebene zeigt die Bilder der Orbitale  $d_{z^2-x^2}$  und  $d_{z^2-y^2}$ , die z.B. für  $\text{KCuF}_3$  mit einer LDA+ $U$ -Rechnung besonders klar erkennbar sind (Abb.3 in Kap.6.4). Die Zustandsdichte als Funktion der Energie zeigt jedoch "Peaks", die einer Linearkombination von  $d_{2z^2-x^2-y^2}$  und  $d_{x^2-y^2}$  entsprechen würden (Abb.4 in Kap.6.4).

Die Frage ist, wie groß ist das Verhältnis zwischen dem  $d_{2z^2-x^2-y^2}$  und  $d_{x^2-y^2}$  Lorbital in diesem Fall. Man sieht, daß die Orbitale

$$z^2 - x^2 = \frac{1}{2}[(2z^2 - x^2 - y^2) - (x^2 - y^2)] \quad (*)$$

und

$$z^2 - y^2 = \frac{1}{2}[(2z^2 - x^2 - y^2) + (x^2 - y^2)] \quad (**)$$

sich aus  $d_{2z^2-x^2-y^2}$  und  $d_{x^2-y^2}$  zusammensetzen lassen.

Wählt man als Normierungskonstante des  $(x^2 - y^2)$ -Wellenfunktion  $\frac{1}{2}$ , dann ist sie für  $(2z^2 - x^2 - y^2)$  gleich  $\frac{1}{\sqrt{12}}$ . Damit sieht man, daß das Verhältnis von  $d_{2z^2-x^2-y^2}$  zu  $d_{x^2-y^2}$  gleich  $\sqrt{3}:1$  ist statt 1:1, wie man zunächst mit (\*) und (\*\*) ohne die korrekte Normierung vermuten würde.

## Anhang 2: Reale Struktur der Perowskite – $\text{GdFeO}_3$

### 2.a Nur eine Rotation für $\text{SrRuO}_3$

Die einfachste Drehung von Oktaedern ist die, bei der nur um eine Achse gedreht wird. Nimmt man die  $z$ -Achse, so erhält man bei einem Schnitt durch die Oktaeder parallel zur  $xy$ -Ebene das folgende Bild mit

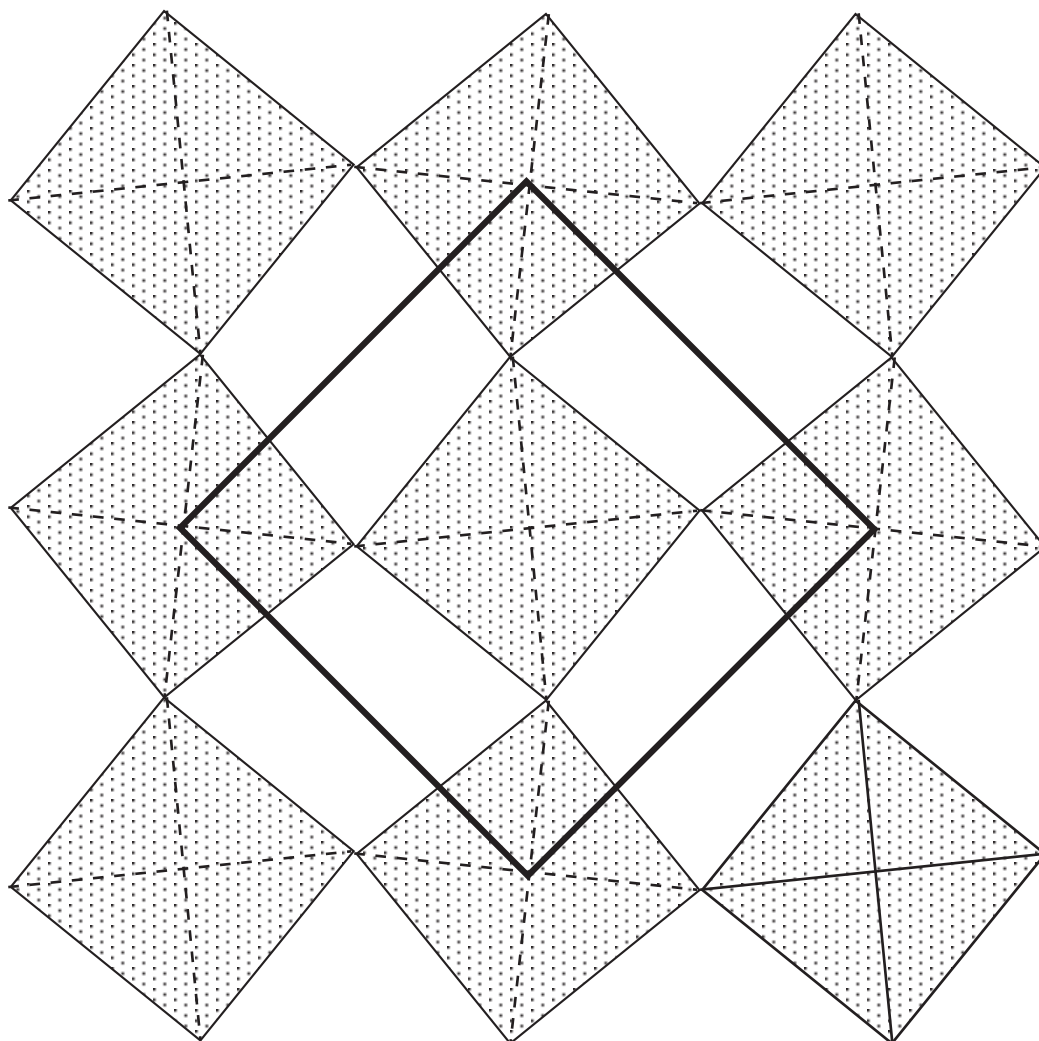


Abb.1 Um die  $z$ -Achse rotierende Oktaeder verdoppeln die Einheitszelle.

abwechselnd in positiver und in negativer Richtung rotierender Quadrate. Dabei verdoppelt sich der Zelleninhalt, wie er in der Abb.1 durch das dicker gezeichnete Quadrat markiert ist. Die neue Zelle ist um  $45^\circ$  gedreht und hat, wenn man zweite Ordnungseffekte im Drehwinkel vernachlässigt, eine um  $\sqrt{2}$  größere Seitenlänge. Für die alte kubische Zelle kann man das Quadrat nehmen, das ein schraffiertes Quadrat enthält. Seine Ecken, die die Positionen der  $\text{O}^{2-}$  bedeuten, sind dann bei  $(\frac{1}{2}, 0)$ ,  $(0, \frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{2}, 1)$  und bei  $(1, \frac{1}{2})$ .

In der neuen Zelle ist die Lage der Rutheniumionen an der Ecken bei  $(0, 0)$  und in der Mitte bei  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ . Die Lage der Sauerstoffionen bekommt man durch Rotation um  $90^\circ$

$$(x, y) \xrightarrow{90^\circ} (-y, x) \xrightarrow{90^\circ} (-x, -y) \xrightarrow{90^\circ} (y, -x) \quad (*)$$

die vier äquivalenten Positionen. In der idealen nichtrotierten Struktur ist die Position von Sauerstoff bei  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ . Mit der Drehmatrix bestimmt man die neuen Positionen

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \implies \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right) \xrightarrow{\alpha} \frac{1}{4} (\cos \alpha - \sin \alpha, \cos \alpha + \sin \alpha)$$

$(x, y)$  wie angegeben als Funktion von  $\alpha$ . In Abb.1 ist  $\alpha = -6^\circ$ . Die Gitterkonstante ist  $a' = \sqrt{2}a \cos \alpha \approx \sqrt{2}a$ . Vernachlässigt man diese zweiten Ordnungskorrekturen auch für die Koordianten von  $O^{--}$ , dann ist

$$(x, y)_O = \frac{1}{4} (1 - \alpha, 1 + \alpha) ,$$

so daß die vier Sauerstoffpositionen, ergänzt mit der  $z$ -Komponente Null, mit Hilfe der Drehungen um  $90^\circ$  (\*) durch

$$O_1 : \quad \frac{1}{4} (1 - \alpha, 1 + \alpha, 0) , \quad \frac{1}{4} (3 - \alpha, 1 - \alpha, 0) , \quad \frac{1}{4} (3 + \alpha, 3 - \alpha, 0) , \quad \frac{1}{4} (1 + \alpha, 3 + \alpha, 0)$$

definiert sind. Dabei sind die negativen Koordinaten  $-\frac{1}{4} \pm \frac{\alpha}{4}$  in die äquivalenten positiven Koordinaten  $\frac{3}{4} \pm \frac{\alpha}{4}$  umgewandelt worden.

Die noch fehlende Positionen brauchen eine von Null verschiedene  $z$ -Komponente. Für zwei weiteren Sauerstoffionen über den beiden Ruthenatomen sind die Position durch

$$O_2 : \quad (0, 0, \frac{1}{2}) , \quad (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) ; \quad Ru : \quad (0, 0, 0) , \quad (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) ; \quad Sr : \quad (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) , \quad (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

gegeben. Die ideale Lage für die beiden Strontiumionen wird durch die Rotation der Oktaeder nicht geändert. Soweit die etwas umständliche Bestimmung der Positionen in einer tetragonalen Einheitszelle mit  $a' = b' = \sqrt{2}a$  und  $c' = a$ , die zwei Formeleinheiten enthält.

Benutzt man Raumgruppen, dann braucht nur jeweils eine Koordinate angegeben zu werden, wie in der Tabelle 6.2 i, die die Raumgruppe 127 mit dem Symbol  $P4/mbm$  braucht, um die notierten und in der Tabelle fehlende Koordinaten zu erzeugen. Diese Information kann man in der Liste von Glazer [5.3] finden, der diese Raumgruppe dem Rotationssystem  $\mathbf{a}^0 \mathbf{a}^0 \mathbf{a}^+$  zuordnet. Das Symbol bedeutet, daß nur in  $z$ -Richtung die

$p4g$

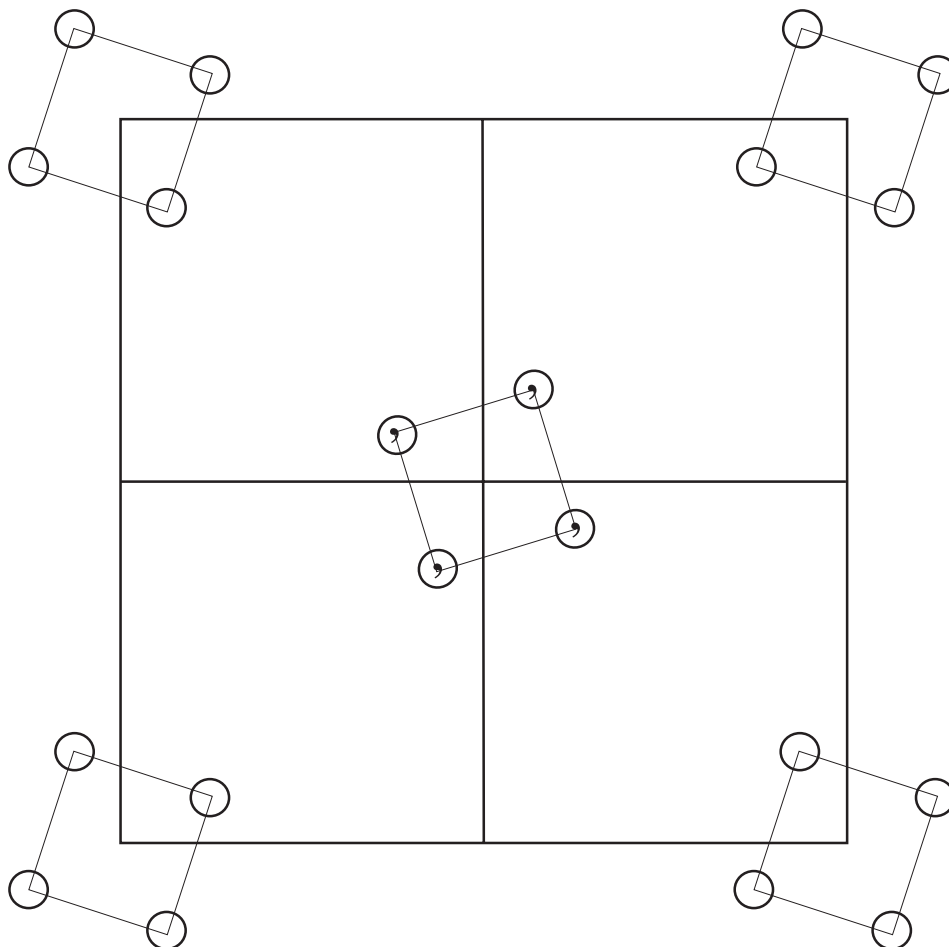


Abb.2  $2d$ -Gruppe  $p4g$  nach "International Tables for X-ray Crystallography".

Oktaeder um den Winkel  $\alpha$  sich drehen, und zwar alle entlang dieser Richtung im gleichem Drehsinn.

Mit dieser Vereinfachung und Abb.1 kann man unter den 21 zweidimensionalen Gruppen die mit quadratischer Symmetrie aussuchen. Von den drei Möglichkeiten paßt nur Nummer 12 mit dem Symbol  $p4g$ . Außer den Drehungen (\*) um  $90^\circ$  gibt es noch Gleitspiegelungen, wie an beiden Abb.1 und Abb.2 ohne Schwierigkeiten zu sehen ist, so daß ein allgemeiner Punkt  $x, y$  in der quadratischen Einheitszelle insgesamt 8-fach erscheint

$$\begin{aligned}
 &x, y; \quad y, \bar{x}; \quad \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y; \quad \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y; \\
 &\bar{x}, \bar{y} \quad \bar{y}, x; \quad \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y; \quad \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y;
 \end{aligned}
 \tag{**}$$

Zum Beispiel sind die Diagonalen, die die Ecken der dick gezeichneten Einheitszelle in Abb.1 verbinden, solche Gleitspiegelungsgeraden. Ebenso die Geraden  $x = \frac{1}{4}$  und  $y = \frac{1}{4}$ , wobei die  $x$ - und  $y$ -Richtungen längs der Seiten der Einheitszelle zu nehmen sind. Zur

Raumgruppe 127 mit Symbol  $P4/mbm$  kommt man, indem in der obigen Liste die  $z$ -Koordinaten hinzugefügt wird, so daß ein allgemeiner Punkt  $(x, y, z)$  ist, der dann durch Spiegelung an der Ebene  $z = 0$  in  $x, y, \bar{z}$  transformiert wird, wobei die Abkürzung  $\bar{z} = -z$  bedeutet. Solch ein allgemeiner Punkt hat damit die zweifache Vielfachheit  $2 \times 8 = 16$  der  $2d$ -Gruppe  $p4g$ , siehe (\*\*). Ein mehr symmetrisch positioniertes Ion hat weniger Abbilder. Nach ihrer Vielfachheit sind nach Wyckoff mit kleinen lateinischen Buchstaben beginnend mit  $a$  für die kleinste Vielfachheit und die höchste Symmetrie "numeriert".

Ein kurzer Blick auf Glazers Liste von möglichen Rotationen ergibt für die einfache Variante  $\mathbf{a}^0 \mathbf{a}^0 \mathbf{a}^-$  die Raumgruppe  $I4/mcm$  mit Nummer 140. Es ist jedoch unmittelbar zu verstehen, daß die geometrische Anordnung für das vorherige Rotationsystem  $\mathbf{a}^0 \mathbf{a}^0 \mathbf{a}^+$  nur ergänzt werden muß. In der nächsten Schicht von Oktaeder müssen die Rotationen in umgekehrten Richtung ausgeführt werden. Man hat also "zwei Etagen" übereinander. In der ersten ist der Drehwinkel positiv und in der zweiten negativ. Dies führt auf eine innenzentrierte tetragonale Struktur. Nach Abb.1 dreht sich der Oktaeder bei  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$  im Gegensinn zu dem bei  $(0, 0, 0)$ , so daß der bei  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  die gleichen Drehsinn hat wie der bei  $(0, 0, 0)$ .

Die Oktaedersysteme mit zwei Rotationen sind im Prinzip nicht anders als mit einer Rotation. Nimmt die gleichen Winkel, dann erhält man meistens eine höhere Symmetrie. Zu  $\mathbf{a}^0 \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^+$  gehört nach Glazer die Raumgruppe 87 mit dem Symbol  $I4/m$ . Das Rotationsystem  $\mathbf{a}^0 \mathbf{a}^- \mathbf{a}^-$  gehört zu  $Imcm$  mit Nummer 74 oder auch nach Schönflies als  $D_{2h}^{28}$  bezeichnet. Im Prinzip kann man es als Vereinfachung von Glazers  $\mathbf{b}^+ \mathbf{a}^- \mathbf{a}^-$  auffassen mit der Raumgruppe 62, die wir im sehr oft gebrauchen werden. Bleibt noch die Rotation  $\mathbf{a}^0 \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^-$ , die zur Raumgruppe  $Bmmb$  mit der Nummer 63 gehört. Dies ist ebenfalls ein orthorhombisches System mit dem Schönflies Symbol  $D_{2h}^{17}$  bezeichnet.

Bei dem Systemen mit Rotationen um drei gleiche Winkel, gibt es auch noch weitere Möglichkeiten außer  $\mathbf{a}^- \mathbf{a}^- \mathbf{a}^+$  mit der orthorhombischen Raumgruppe 62. Rotiert um dem gleichen Winkel, wenn man längs der Rotationachse zum nächsten Oktaeder geht, symbolisch als  $\mathbf{a}^+ \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^+$  bezeichnet, dann bekommt man ein System 204 mit Tetradersymmetrie  $T_h^5$  oder  $Im\bar{3}$ . Es hat acht Formeleinheiten in der Einheitszelle. Als wirkliche Alternative wäre noch  $\mathbf{a}^+ \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^-$  aufzufassen, denn es ist wie  $\mathbf{a}^- \mathbf{a}^- \mathbf{a}^+$  ein orthorhombisches System. Zu ihm gehört die Raumgruppe  $Pm\bar{m}n$  mit Nummer 59 oder als  $D_{2h}^{13}$  bezeichnet. Das System  $\mathbf{a}^- \mathbf{a}^- \mathbf{a}^-$  ist mit der Raumgruppe 167 verknüpft, die rhomboedrisch oder trigonal ist:  $R\bar{3}c$  oder  $D_{3d}^6$ . Die Frage, welche Rotationsysteme wirklich wichtig sind, liegt natürlich außerhalb dieser Betrachtungen.

## 2.b Die Raumgruppe Imma und die Perowskite

Zurück zu dem System  $\mathbf{a}^- \mathbf{a}^- \mathbf{a}^0$  mit zwei aber gleichen Rotationen, das zu der orthorhombische Raumgruppe 74 mit der Kurznotation *Imma* gehört. Dieses Rotationsystem ist eine Vereinfachung von  $\mathbf{a}^- \mathbf{a}^- \mathbf{b}^+$ , das man bei vielen Perowskiten vom  $\text{GdFeO}_3$ -Typ findet. Zu *Imma* gehört eine orthorhombische innenzentrierter Zelle. Die Koordinaten einer allgemeinen Position  $(x, y, z)$  transformiert auf Grund der Raumgruppe in 16 äquivalente

$$\begin{aligned} x, y, z; \quad x, \bar{y}, \bar{z}; \quad x, \frac{1}{2} + y, \bar{z}; \quad x, \frac{1}{2} - y, z; \\ \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}; \quad \bar{x}, y, z; \quad \bar{x}, \frac{1}{2} - y, z; \quad \bar{x}, \frac{1}{2} + y, \bar{z} \end{aligned} \quad (1)$$

Durch Addition von  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$  verdoppeln sich diese 8 äquivalenten Positionen. Es gibt bei der Raumgruppe *Imma* zwei Spiegelungen und eine Gleitspiegelung

$$\begin{aligned} \text{Spiegelebene } x = 0 & \quad x, y, z \xrightarrow{m_x} -x, y, z \\ \text{Spiegelebene } y = \frac{1}{4} & \quad x, y, z \xrightarrow{m_y} x, \frac{1}{2} - y, z \\ \text{Gleitspiegelebene } z = 0 & \quad x, y, z \xrightarrow{a} x, y + \frac{1}{2}, -z \end{aligned} \quad (2)$$

Aus diese Elemente kann man alle äquivalenten Positionen bekommen, z.B. die Inversion

$$x, y, z \xrightarrow{m_x} \bar{x}, y, z \xrightarrow{a} \bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} \xrightarrow{m_y} \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$$

Für den Perowskit  $\text{SrRuO}_3$  sind folgende nach Wyckhoff klassifizierten Positionen relevant

$$\begin{aligned} 4 \text{ a:} & \quad 0, 0, 0; \quad 0, \frac{1}{2}, 0 \\ 4 \text{ e:} & \quad 0, \frac{1}{4}, z; \quad 0, \frac{3}{4}, \bar{z} \\ 8 \text{ g:} & \quad \frac{1}{4}, y, \frac{1}{4}; \quad \frac{3}{4}, \bar{y}, \frac{3}{4} \quad \frac{3}{4}, y, \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4}, \bar{y}, \frac{3}{4} \end{aligned} \quad (3)$$

die durch die Addition von  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ , weil es sich um ein raumzentriertes Gitter handelt, sich verdoppeln. Ru hat die Position a und kommt viermal vor und Sr hat die Position e mit  $z = \frac{1}{2}$ . Es gibt zwei inäquivalente Positionen für Sauerstoff. Einmal ist die Position von e und die doppelte Anzahl hat die Position g. Die Parameter  $z$  und  $y$  sind klein und müssen noch bestimmt, so daß sie einer starren Rotation vom Typ  $\mathbf{a}^- \mathbf{a}^0 \mathbf{a}^-$  entsprechen. Hier folgen wir den Konventionen der Kristallographie, die die  $y$ -Achse und nicht die  $z$ -Achse bevorzugt.

Die Oktaeder rotieren um Achsen in der  $xz$ -Ebene, und zwar nach dem Schema  $\mathbf{a}^- \mathbf{a}^0 \mathbf{a}^-$  entsprechend dieser kristallographischen Konvention. Die beiden Drehungen entlang der Verbindung der Oktaeder müssen immer entgesetzte Richtungen haben. Diese Drehungen kann man zu einer einzigen Drehung in Richtung einer Oktaederkante zusammenfassen, die in  $x$ -Richtung des Kristalls ist, wie in Abb.3 zu sehen ist. Der  $y$ -Wert für



Abb.3 Bewegung der Oktaeder bei der *Imma*-Symmetrie.

Sauerstoff in der *g*-Position bei  $(\frac{1}{4}, y, \frac{1}{4})$  ist damit  $\frac{1}{4}\alpha$  und der *z*-Wert  $-\frac{1}{2}\alpha$  für Sauerstoff in der *e*-Position bei  $(0, \frac{1}{4}, z)$ . Für die Abb.3 ist  $z = -0.050$  und  $y = 0.025$  gewählt worden. Die Frage nach der Position der Strontiumionen (Kugeln in Abb.3) bleibt offen, denn sie nehmen auch eine *e*-Position nach Wyckhoff ein. Mit der Wahl  $(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$  läßt man keine Änderung gegenüber der kubischen Perowskitstruktur zu, obwohl sich die Sauerstoffumgebung bewegt hat. Letzlich kann man dies nur entscheiden, indem die energetisch günstigste Lage durch Rechnungen herausfindet.

In der Abb.4 ist ein Schnitt bei  $y = 0$  durch die Oktaeder von Abb.3 gezeichnet, an dem man besser die zu Anfang diskutierte Symmetrien sehen kann. Die Spiegelebene bei  $x = 0$  entsprechend der *z*-Achse ist unmittelbar zu sehen, ebenso die Gleitspiegelung an





### Anhang 3: Antiferromagnetismus in Perowskiten

Das Studium der Perowskite und ihrer verschiedenen antiferromagnetischen Ordnungen intensiviert sich mit dem Beginn der Strukturuntersuchung mit Neutronen. In einer grundlegenden Veröffentlichung über die Lanthan–Calcium–Manganite von Wollan und Koehler\* aus dem Jahre 1955 ist eine Klassifikation zu finden, die auch heute noch benutzt wird. Trotz aller strukturellen Veränderungen, die bei den Perowskiten auftreten, bleibt das Gitter für die magnetisch aktiven Ionen einfach kubisch. Die Liste von Wollan und Koehler auf Seite 160 ihrer Arbeit nummeriert die beobachteten einfachen Strukturen von A bis G und außerdem noch Kombinationen davon. Hier werden nur folgende drei Grundstrukturen gebraucht. Bei der Struktur A wechseln ferromagnetischen Schichten entlang der Richtung  $[0,0,1]$  ihre Orientierung, bei C entlang  $[1,1,0]$  und bei G entlang  $[1,1,1]$ . Hilfreicher als diese Beschreibung sind sicherlich die folgenden Abbildungen.

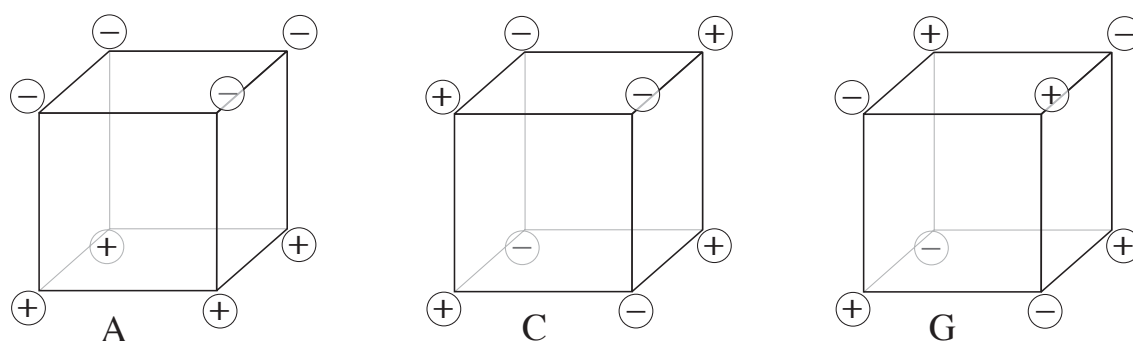


Abb.1 Schema der wichtigsten antiferromagnetischen Ordnungen für die Perowskite\*.

Bei vielen Bandstrukturprogrammen sind die Angaben über die Positionen der Atome mit Hilfe der Raumgruppen möglich. Man braucht mit dieser Hilfe nur die Koordinaten eines Atoms einzugeben, die Gruppenoperationen wie Spiegelungen und Drehungen erzeugen die Koordinaten der anderen Atome in der Einheitszelle, die äquivalent sind. Im Wien–Kode, der hier meistens für die Rechnungen benutzt wird, sind darüber hinaus die gebräuchlichsten Varianten der Raumgruppen aufgenommen worden.

Die antiferromagnetischen Strukturen sind jedoch oft nicht mit der strukturellen Raumgruppe verträglich. Die Positionen der Atome vieler Perowskite können mit der orthorhombischen Raumgruppe Nr. 62  $Pnma$  oder mit der Variante  $Pbmn$  angegeben werden. Es handelt sich um die  $GdFeO_3$ –Struktur, bei der die Eisenionen die Wyckoffposition  $b$ , d.h., vier äquivalente Positionen  $(0,0,\frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{2},0,0)$ ,  $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$  und  $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$  innehaben. Die Einheitszelle enthält vier Formeleinheiten und alle vier Fe–Ionen sind äquivalent und

---

\* *Neutron Diffraction Study of the Magnetic Properties of the Series of Perovskite-Type Compounds  $[(1-x)La_xCa]MnO_3$* , E.O. Wollan & W.C. Koehler, Phys. Rev. 100, 545 (1955).

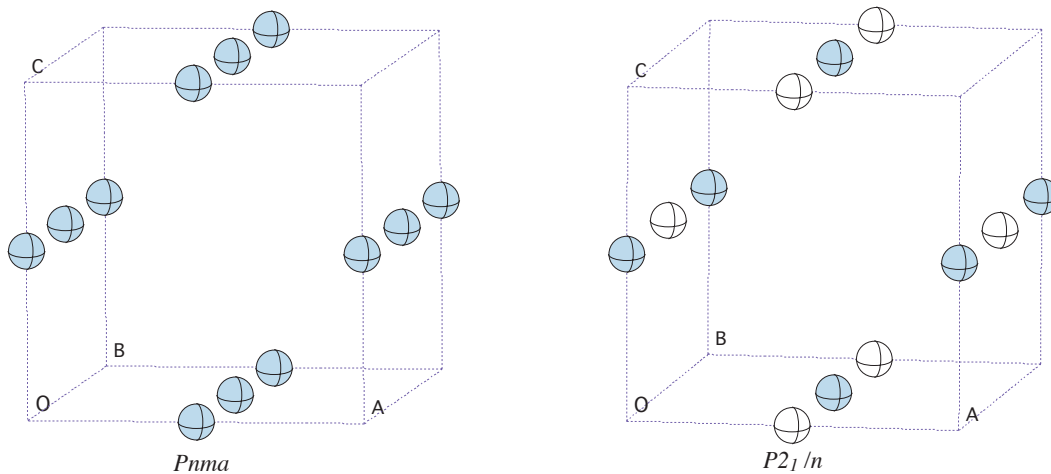


Abb.2 GdFeO<sub>3</sub>-Struktur: Ferro mit  $Pnma$  und Antiferro-G mit  $P2_1/n$ . Nur magnetischen Ionen sind gezeichnet, unterschiedlich für Spin  $\uparrow$  und  $\downarrow$ .

müssen daher denselben Spin haben. Die rechte Einheitszelle von Abb.2 zeigt diese Positionen.

Die orthorhombische Raumgruppe 62,  $Pnma$  oder als  $P2_1/n2_1/m2_1/a$  mit dem vollständigen Symbol bezeichnet, hat folgende monokline Raumgruppen als Untergruppen

$$P2_1/n2_1/m2_1/a \implies \begin{cases} P12_1/n1 & \text{oder } P2_1/n \text{ Nr. 14} \\ P12_1/c1 & \text{oder } P2_1/c \text{ Nr. 14} \\ P12_1/m1 & \text{oder } P2_1/m \text{ Nr. 11} \end{cases}$$

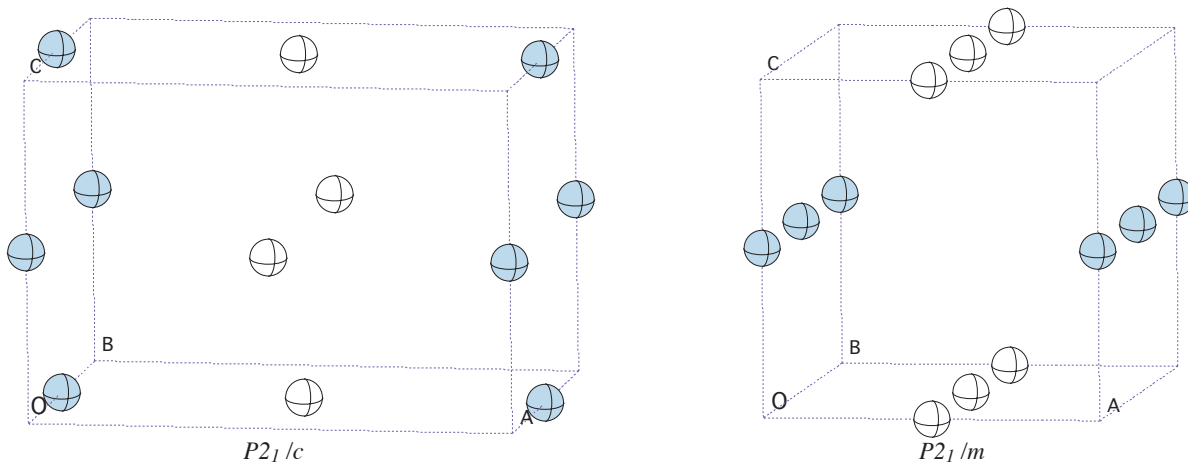


Abb.3 GdFeO<sub>3</sub>-Struktur: Antiferro-A mit  $P2_1/c$  und Antiferro-C mit  $P2_1/m$ .

was unmittelbar einzusehen ist, denn von den drei 180° "Schrauben"  $2_1$  in  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung mit ihren dazu senkrechten Spiegelung  $m$  bzw. Gleitspiegelungen  $n$  und  $c$  bleibt nur eine Schraube mit der Rotationsachse in  $y$  Richtung übrig und der Spiegelebene (in Abb.2 und 3 ist  $\overline{OB}$  die  $y$ -Achse und die Spiegelebenen sind parallel zu  $zx$ -Ebenen). Der

Winkel  $\beta$ , den die  $x$ - und die  $z$ -Achse miteinander bilden, ist dann nicht mehr notwendigerweise  $90^\circ$  ( $\angle(AOC)$  in Abb.2 und 3).

Hier kommt es aber nur darauf an, bei fixierter Geometrie nichtäquivalente Positionen für die magnetisch aktiven Ionen zu bekommen. Wie man an den Beispielen in Abb.2 und Abb.3 sieht, funktioniert die Rezeptur, geeignete Untergruppen zur Raumgruppe der Kristallstruktur herauszusuchen, um einfache antiferromagnetischen Anordnung der Spins zusammen mit der  $GdFeO_3$ -Struktur der Perowskiten schließlich zu erzeugen. Es lohnt nicht, dies im Detail darzustellen. Nur soviel, um die Abb.1 mit den kristallographischen Abb.2 und 3 in Übereinstimmung zu bringen, muß man sich die Einheitszellen um die langen Kristallachsen um  $45^\circ$  gedreht denken. Die langen Achsen sind für  $Pnma$ ,  $P2_1/n$  und  $P2_1/m$  die  $y$ -Achsen oder  $\overline{OB}$ , aber für  $P2_1/c$  die  $x$ -Achse oder  $\overline{OA}$ . Die Gitterkonstante der langen Kristallachse ist  $\approx 2a$  und die der kürzeren Achsen  $\approx \sqrt{2}a$  mit der kubischen Gitterkonstante  $a$ . Dadurch bekommt man vier Formeleinheiten statt einer Formeleinheit wie in Abb.1.

Eine wichtige Hilfe bei diesen kristallographischen Überlegungen ist die Kristallographie mit Computern statt mit Tabellen wie die "International Tables for X-Ray Crystallography". Man braucht natürlich beides, aber Computergraphik erhöht die Anschaulichkeit und die Leichtigkeit, Kristallstrukturen zu erzeugen, ist sehr hilfreich. Hier sind die kristallographischen Abbildungen mit dem Programm "CrystalMaker – Interactive Crystallography for Macintosh" von David Palmer erzeugt worden.