

1 Symmetrie

Die Invarianz des Kristallgitters gegenüber bestimmten Symmetrioperationen, speziell gegenüber Verschiebungen (Translationen) des Gitters um bestimmte Beträge in bestimmte Richtungen, ist die charakteristische Eigenschaft der Kristalle. Im Gegensatz zu Symmetrielementen wie Spiegelung oder Drehung ist die Symmetrie gegenüber Translationen in der Natur nur im Kristallgitter realisiert. Die Symmetrie prägt viele physikalische Eigenschaften der Kristalle, deshalb ist dieses Kapitel an den Anfang dieser Vorlesung gestellt.

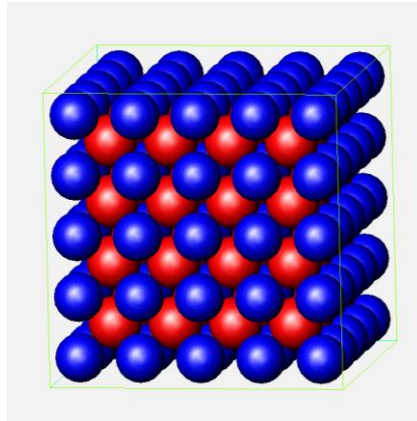


Abbildung 1 Gitter eines Kalium-Chlorid Kristalls

In der Physik bezeichnet Symmetrie die Regelmäßigkeit einer geometrischen oder mathematischen Struktur in der Weise, dass sie bei Ausführen einer bestimmten Transformation, der *Symmetrioperation* bzw. Symmetrietransformation, unverändert bleiben bzw. wieder in sich überführt werden. Schon früh vermutete man, dass Symmetrie eng mit unserem Weltbild verknüpft ist.

1.1 Symmetrie im naturwissenschaftlichen Weltbild Platons (428-348) und bei Kepler (1571-1630)

Die regelmäßigen Polyeder, der Würfel, der Tetraeder, der Oktaeder und der Ikosaeder, gelten nach Platon als die kleinsten Teile der vier Elemente Feuer, Erde, Luft und Wasser. Die Symmetrieeigenschaft der kleinsten Teile ist bei Platon der einheitliche Zusammenhang aller realisierten Erscheinungen.

Kepler nahm an, dass die Radien der Umlaufbahnen der fünf zu seiner Zeit bekannten Planeten (Merkur, Venus, Erde, Mars, Jupiter) sich wie die Radien von Kugeln verhalten, die durch die Ecken platonischer Körper verlaufen, die ineinander geschachtelt sind: Der dem Merkur zugeordnete Ikosaeder liegt im Dodekaeder der Venus, dieses im Oktaeder der Erde, der im Würfel des Mars, dieser schließlich im Tetraeder des Jupiters. Kepler sah die Symmetrie als einheitliches Prinzip für die Gestaltung der Bahnen der Planeten und erklärte ihren Unterschied mit unterschiedlichen Symmetrieeigenschaften der zugeordneten Körper.

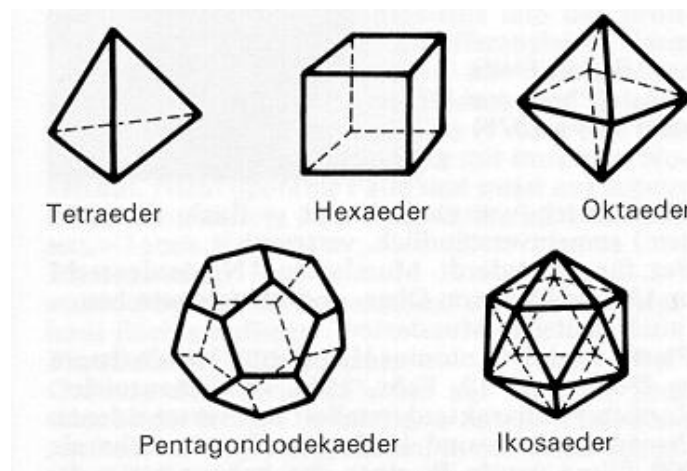


Abbildung 2 Die fünf platonischen Körper. Sie sind dreidimensionale Polyeder mit Kanten gleicher Länge. In allen Ecken ist die Anzahl der zusammentreffenden Kanten gleich, die Winkel zwischen diesen Kanten sind gleich.

1.2 Symmetrie in physikalischen Naturgesetzen

1.2.1 Homogenität der Zeit

In einem zeitlich homogenen System hängen die physikalischen Größen nicht von der absoluten Zeit, sondern nur von Zeitdifferenzen ab, die Zeit kann also beliebig verschoben werden. Aus der Homogenität der Zeit folgt die Energieerhaltung.

1.2.2 Homogenität des Raums

In diesen Systemen kann der Ort beliebig verschoben werden, nur Differenzen zwischen den Ortsvektoren der Teilchen bestimmen die physikalischen Größen. Daraus folgt die Impulserhaltung.

1.2.3 Isotropie des Raums

Hier kann das System um einen beliebigen Winkel gedreht werden, alle Raumrichtungen sind gleichberechtigt. Daraus folgt die Drehimpulserhaltung.

Da alle Erscheinungen dieser Welt den Naturgesetzen folgen, sind die Symmetrieeigenschaften ihre gemeinsame Basis. Das war auch schon Platons Vorstellung, ebenso wie, in Anwendung auf die Planetenbewegung, die von Kepler. *Gemeinsam und in diesem Sinne zeitlos ist die Vorstellung einer einheitlichen mathematischen Struktur von allem, was uns umgibt, die sich in Symmetrieeigenschaften zeigt.* Der Unterschied von Platon zur modernen naturwissenschaftlichen Sicht ist lediglich die Wahl der Realisierung bzw. Veranschaulichung dieser Struktur, früher wurde die Symmetrie an den Körpern gezeigt, jetzt am Naturgesetz. Die abstrakte Grundlage ist in beiden Fällen die Theorie der Gruppen und ihrer Darstellungen.

1.2.4 Symmetrie in der Atomphysik

Symmetrie zeigen die Formen der Orbitale, das sind die Gebiete hoher Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen eines Atoms oder Moleküls. Die Orbitale der s, p, und d Elektronen unterscheiden sich in ihren Symmetrie-Eigenschaften.

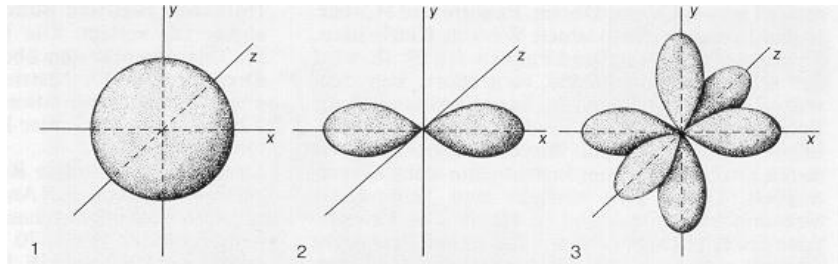


Abbildung 3 Orbital (1) eines s-Elektrons, (2) eines p-Elektrons, (3) Orbitale von drei d-Elektronen. Gezeichnet sind die Gebiete, in denen die Teilchen bei vielen Beobachtungen in mindestens 95% aller Beobachtungen angetroffen werden („mit 95%iger Wahrscheinlichkeit“).

Im Modell unabhängiger Teilchen bewegt sich jedes Atom unabhängig von den andern in seinem effektiven Potential. Es ist offensichtlich, dass die Potentiale - und damit die Orbitale - unabhängiger Elektronen nicht durch alle Symmetrioperationen des Raums ineinander überführbar sein dürfen: Das würde die Identität der Orbitale und Potentiale zeigen, was im Widerspruch zur geforderten Unabhängigkeit steht.

1.3 Symmetrie in Kristallen

Spricht man bei einem Objekt von Symmetrie, dann gibt es eine Abbildungsvorschrift, nach deren Ausführung das Objekt in sich selbst übergeht. Auch eine Funktion zeigt Symmetrie, wenn sie nach bestimmten Transformationen ihrer Variablen unverändert bleibt.

Symmetrioperation	Transformation, nach deren Ausführung das transformierte Objekt mit dem ursprünglichen im Ganzen deckungsgleich ist
Symmetrieelement	Geometrisches Gebilde, das bei einer Symmetrioperation seine Lage nicht ändert

Tabelle 1 Grundbegriffe zur Symmetrie

1.3.1 Die Translationssymmetrie

Gegenüber beliebigen Objekten mit Symmetrie sind Kristalle dadurch ausgezeichnet, dass es Vektoren gibt, die Betrag und Richtung von Verschiebungen angeben, die den Kristall in sich selbst überführen. Diese Vektoren sind Linearkombinationen der „Basisvektoren des Gitters“ mit ganzzahligen Koeffizienten. Allerdings gilt diese Symmetrie gegenüber Verschiebung streng nur bei Objekten, die in Verschiebungsrichtung unendlich ausgedehnt sind. Bei den beobachtbaren physikalischen Effekten, z. B. in Beugungsexperimenten, erscheint aber ein Objekt mit mehr als ca. 100 Elementarzellen in der Verschiebungsrichtung wie ein unendlich ausgedehntes. Ein reales, endliches Objekt bezeichnet man als Realkristall, im Gegensatz zum unendlich ausgedehnten Idealkristall.

Als „Elementarzelle“ bezeichnet man das von den Basisvektoren aufgespannte Parallelepiped. Es ist die kleinste Volumen-Einheit, aus der durch Parallelverschiebung der Kristall gebildet werden kann, ohne Lücken und Überdeckungen in den Volumina.

$\mathbf{v} = n_1 \cdot \mathbf{a}_1 + n_2 \cdot \mathbf{a}_2 + n_3 \cdot \mathbf{a}_3$	Gittervektor: Verschiebung, die den Kristall in sich selbst überführt
$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ oder $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$	Basisvektoren des Gitters
n_1, n_2, n_3	Ganze Zahlen

Tabelle 2 Gittervektor und Basisvektoren des Gitters

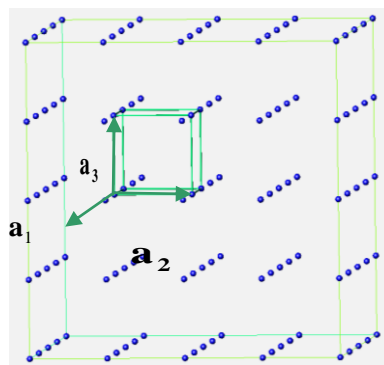


Abbildung 4 Basisvektoren eines Gitters

Man kann –formal- den Kristall aus einem „leeren Gitter“ und dem Zellinhalt aufbauen. Dazu wird der Inhalt einer Elementarzelle entsprechend oft kopiert und auf alle Zellen des leeren Gitters verteilt. Diese Zerlegung ist sinnvoll, weil auch in der Berechnung des Beugungsbildes der Kristalle der Einfluss des Inhalts der Elementarzelle von dem des Gitters separiert werden kann.

Elementarzelle	Von den Basisvektoren $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ oder $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ aufgespanntes Parallelepiped
Ideal- und Realkristall	Unendlich ausgedehnter Kristall und seine „real existierende“, endliche Variante

Tabelle 3 Begriffe: Elementarzelle, Ideal- und Realkristall

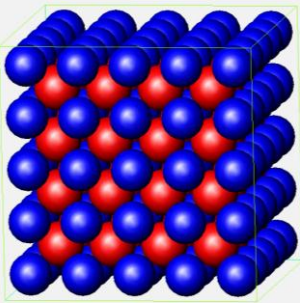
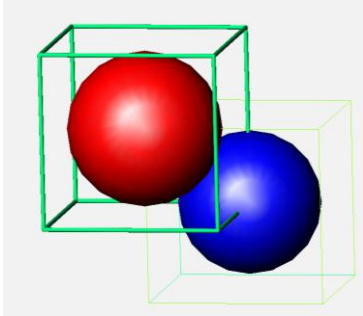
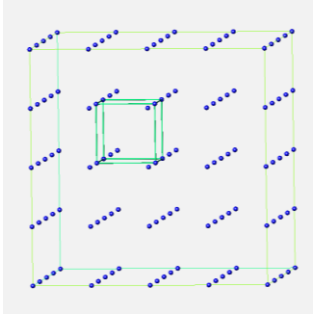
Kristall	Inhalt der Elementarzelle	„Leeres Gitter“
		

Tabelle 4 Das reale Kristallgitter und seine Bausteine: Der Inhalt einer Elementarzelle und das „leere Gitter“, im Beispiel ein CsCl Kristall.

1.3.2 Punktsymmetrioperationen und Symmetrioperationen mit Translationsanteilen

Symmetrioperationen, die mindestens einen Punkt unverändert lassen, bezeichnet man als „Punktsymmetrioperationen“. Dazu gehören Drehungen, Spiegelungen und Drehspiegelungen. Aus ihnen werden die Elemente der „Punktgruppen“ ausgewählt. Im Gegensatz dazu gibt es bei Translation und bei Operationen, die mit Translationsanteilen zusammengesetzt sind, keine festen Punkte. Diese Operationen überführen Objekte eines unendlich ausgedehnten Gitters in sich.

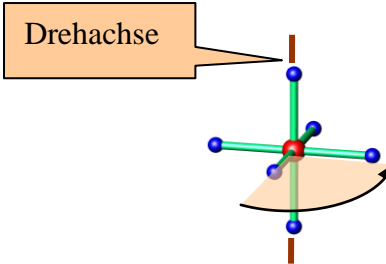
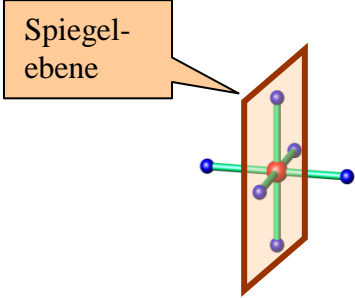
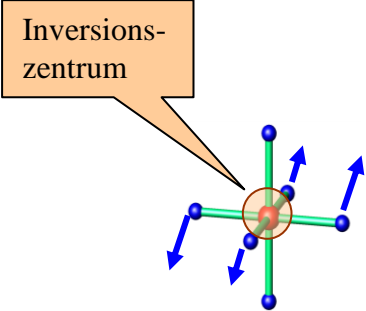
Symmetrioperation	Symmetrieelemente	
Drehung		
Spiegelung an Linien im R^2 , an Ebenen oder an Punkten im R^3		

Tabelle 5 Einfache Symmetrioperationen und Symmetrieelemente dazu. (Hellrot kennzeichnet Symmetrioperationen, bei denen es ortsfeste Punkte gibt, Operationen der „Punktgruppen“).

Einfache Symmetrieelemente sind beliebig oft und in beliebiger Reihenfolge ausführbar, jede zusammengesetzte Operation erfordert die Ausführung beider Anteile.

Symmetrie-operation	Symmetrieelemente
Schraubung	
Gleitspiegelung	
Drehinversion	

Tabelle 6 Wirkung der zusammengesetzten Symmetrieelemente

	Inversionszentrum	Translation
Drehung	Drehspiegelung	Schraubung
Spiegellinie oder Ebene		Gleitspiegelung

Tabelle 7 Bausteine (Spalten- und Zeilenüberschriften) der zusammengesetzten Symmetrioperationen (Tabelleninhalt). Hellrot: Symmetrioperationen, bei denen es ortsfeste Punkte gibt, Hellgrün: Symmetrioperationen mit Translationsanteilen

Zusammengesetzte Operationen mit Translationsanteilen sind Operationen der „Raumgruppen“, sie erfordern unendlich ausgedehnte Objekte, also Idealkristalle, sie sind Operationen der „Raumgruppen“.

1.3.3 Elemente der Gruppentheorie

Symmetrioperationen verhalten sich wie die Elemente einer Gruppe im mathematischen Sinn. Eine Gruppe ist eine Menge von Elementen, zwischen denen eine Verknüpfung definiert ist. Das Ergebnis der Verknüpfung muss eindeutig sein:

$G = \{e, a, b, c, \dots\}$	Die Gruppe G ist die Menge der Elemente e, a, b, c, \dots
$ G $	Die Ordnung der Gruppe ist die Anzahl der Elemente, sie kann endlich oder unendlich sein.
$a \circ b$	Das „Produkt“ zwischen zwei Elementen ist das Ergebnis der Verknüpfung zwischen den Elementen a und b . Das Ergebnis muss eindeutig sein. Die Verknüpfung ist im Allgemeinen nicht kommutativ.

Tabelle 8 Ordnung der Gruppe und Verknüpfung

Die Elemente bilden eine Gruppe, wenn die folgenden vier Axiome erfüllt sind:

Die vier Gruppenaxiome:	
(1)	Gehören a und b zur Menge, dann muss auch das Produkt $a \circ b$ zur Gesamtheit gehören.
(2)	Die Verknüpfung ist assoziativ: $a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$.
(3)	Die Menge enthält ein Element e , das „Eins-Element“, so dass für jedes Element a aus der Menge $e \circ a = a \circ e = a$ gilt.
(4)	Zu jedem Element a aus der Menge gibt es auch ein Element b , so dass $a \circ b = b \circ a = e$ gilt. Dieses Element heißt „Inverses“ zu a , man schreibt $a^{-1} = b$.

Tabelle 9 Definition der Gruppe

Aus den Symmetrieeoperationen der Punktgruppe kann man durch entsprechende Auswahl endliche oder, bei Symmetrie „Drehung um beliebige Winkel“, sogar unendliche Gruppen bilden. Jedem Gruppenelement im abstrakten Sinn entspricht eine Symmetrieeoperation. Der Verknüpfung zwischen zwei Elementen entspricht „nacheinander Ausführen“ von zwei Symmetrieeoperationen.

	<ul style="list-style-type: none"> Die Gruppenelemente sind die Drehungen z. B. des grauen Punktes um $0^\circ, 60^\circ, \dots, 300^\circ$ $G = \{e, 6^1, 6^2, 6^3, 6^4, 6^5\}, G = 6$ Die Symmetrieeoperation 6^3 z. B. ist das „Produkt“ $6^1 \circ 6^2$. Das Inverse Element zu 6^4 z. B. ist 6^2
--	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Tabelle 10 Beispiel: Punktgruppe 6 der sechszähligen Drehung

Die Gruppen-Eigenschaft der in einer periodischen Anordnung von Objekten realisierten Symmetrieeoperationen hat zur Folge, dass man sich zwar einen „Kristall“ durch irgendeine Aufzählung von Symmetrieelementen wünschen kann, aber die Realisierung scheitert, wenn die Elemente auf der Wunschliste keine Gruppe bilden. Deshalb entstehen beim Kristallwachstum keine beliebigen Zufallsmuster, wie z. B. bei der Verteilung von Farbspritzern, sondern eine Struktur mit untereinander verträglichen Kombinationen von Symmetrieelementen. Letztere bilden die im Folgenden besprochenen Punkt- und Raumgruppen.

1.3.4 Mit Gittern verträgliche Punktsymmetrieeoperationen

Punkte, die über Gittervektoren miteinander verbunden sind, gehen bei Anwendung einer beliebigen Punkt-Symmetrieeoperation wie Drehung, Spiegelung oder Drehspiegelung in Bildpunkte über, die auch mit Gittervektoren verbunden sind.

Diese Bedingung führt zu einer Auswahl der in einem Gitter möglichen Punktsymmetrieeoperationen, insbesondere den Drehungen. Die erlaubten Elemente bilden die „kristallographisch zulässigen“ Punktgruppen.

Es sei z. B. \vec{a} ein Gittervektor. Unter der Annahme, eine Drehung um den Winkel φ sei eine erlaubte Operation, wird \vec{a} an beiden Enden um φ bzw. $-\varphi$ gedreht und aus den so entstandenen Schenkeln und der Verbindungsline zwischen ihnen ein Trapez erzeugt (Abbildung 5). Wenn φ eine Symmetrieeoperation aus der Punktgruppe des Gitters ist, dann sind alle Eckpunkte des Trapezes äquivalente Punkte, d. h., sie gehen durch Translationen ineinander über. Die lange Seite ist eine Translation parallel zur Translation \vec{a} , also muss ihre Länge A ein Vielfaches von $|\vec{a}|$ sein. Diese Bedingung ist aber nur für Drehungen um $60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$ und 180° zu erfüllen.

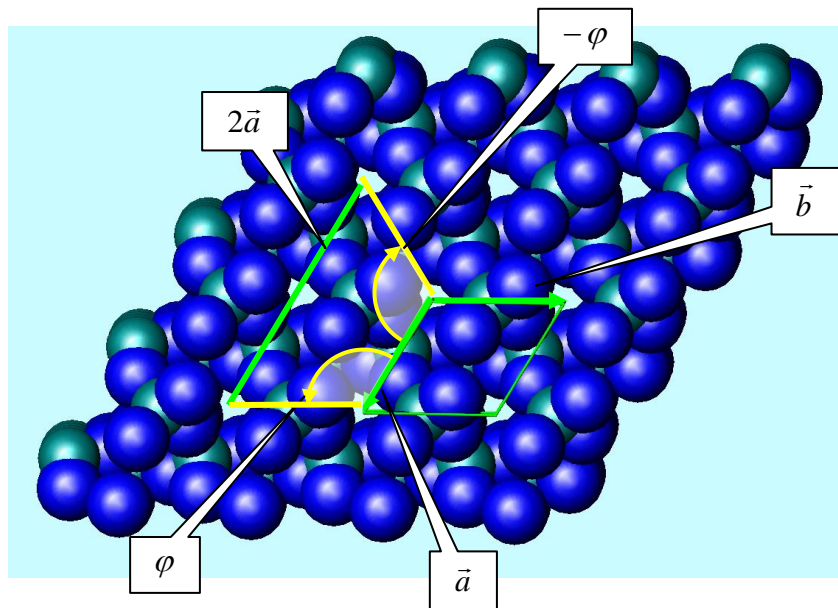


Abbildung 5 Gitter der Symmetrie 3 (Beispiel: SiO_2 , „Tiefquarz“, die dreizählige Symmetrieachse steht senkrecht zur Zeichenebene). Konstruktion eines zu \vec{a} parallelen Translationsvektors $2\vec{a}$ durch Drehung des Translationsvektors \vec{a} um in zwei äquivalenten Gitterpunkten liegende Achsen um 120° bzw 240° ($= -120^\circ$).

$A = a + 2 \cdot a \cdot \sin\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right) = a - 2 \cdot a \cdot \cos \varphi$						Länge der langen Seite des Trapezes, parallel zu \vec{a} , $\sin(\varphi - \pi/2) = -\cos \varphi$
$A = p \cdot a$						A ist ein Translationsbetrag, deshalb ist p ganzzahlig
	$\cos \varphi = \frac{1-p}{2}$					Mit den Bedingungen <ul style="list-style-type: none"> • ganzzahliges p • $\cos \varphi \leq 1$ folgt die Auswahl der möglichen Drehwinkel φ . Das Symbol der dazugehörigen Punktgruppe ist n.
p	-1	0	1	2	3	
cos φ	1	1/2	0	-1/2	-1	
φ	0	60	90	120	180	
n	1	6	4	3	2	

Tabelle 11 Berechnung der im Gitter möglichen Drehungen

Enthält das Gitter eine Spiegelebene, dann wird der Gittervektor nur dann in sich oder ein Vielfaches von sich selbst überführt, wenn er in der Spiegelebene liegt oder senkrecht zur Spiegelebene steht. Bei einer einzigen Spiegelebene entsteht so das „monokline“ Kristallsystem, die Normale zur Spiegelebene gilt als „bevorzugte Richtung“ und ist die Richtung einer Translation.

1.3.4.1 Nomenklatur zu Symmetrieelementen in Kristallen

Die Bezeichnung der Symmetrieelemente der Punktgruppen folgt der „Internationalen Nomenklatur“ nach Hermann-Mauguin.






Bezeichnung	Symbol	Anmerkung
1		Einheitselement der Symmetrieoperationen
2		Drehung um 180°
3		Drehung um 120°
4		Drehung um 90°
6		Drehung um 60°
m		In R^2 Spiegellinie, In R^3 Spiegelebene \perp zur Zeichenebene

Tabelle 12 Punktsymmetrieelemente der Bravaisgitter in R^2 und R^3

In R^3 gibt es zusätzlich die Inversion und zu jeder Drehung die Drehspiegelung






R^3	Symbol	Anmerkung
$\bar{1}$		Inversionszentrum
$\bar{2} = m$		Spiegelebene in der Zeichenebene
$\bar{3}$		Drehinversion: Drehung um 120° , gefolgt von einer Inversion*
$\bar{4}$		Drehinversion: Drehung um 90° , gefolgt von einer Inversion
$\bar{6}$		Drehinversion: Drehung um 60° , gefolgt von einer Inversion

Tabelle 13 Punktsymmetrieelemente der Bravaisgitter in R^3 . Alle Drehachsen stehen senkrecht zur Zeichenebene, bei Drehung muss die Inversion folgen. * das Inversionszentrum liegt auf der Drehachse

1.3.5 Punktsymmetrie der „leeren Gitter“: Die Kristallsysteme

Durch die Translationssymmetrie sind in Gittern die Richtungen der Basisvektoren (zwei in R^2 , drei in R^3) bevorzugt.

Erzeugt man aus einem einzigen Punkt durch Anwendung aller Gittervektoren ein Gitter, dann erhält man ein „leeres Gitter“, entsprechend der Darstellung in Tabelle 4. Dieses „leere Gitter“ zeigt aber außer der Translationssymmetrie auch Symmetrien der Punktgruppen (vgl. 1.3.4): Die dazugehörigen Symmetrieelemente definieren weitere im Gitter bevorzugte Punkte oder Richtungen.

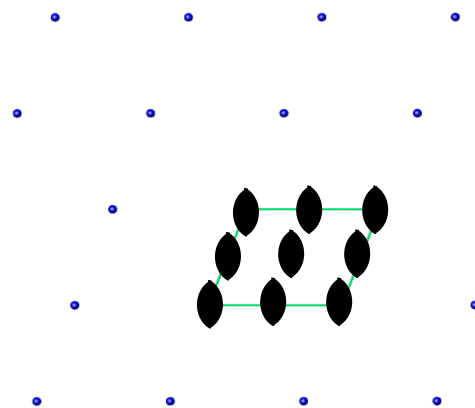


Abbildung 6 Punktgruppen Symmetrieelemente in einem schiefwinkligen „leeren Gitter“ in R^2

Nach der Symmetrie der „leeren Gitter“ werden die Kristallsysteme eingeteilt. Anhand der Kristallsysteme ist auch die Bedeutung der Symbole für die Bezeichnung der Punktgruppen festgelegt

Kristallsystem	Punktgruppe des leeren Gitters	Beziehung zwischen der Position des Symbols in der Punktgruppe und den Translationsvektoren		
		1. Stelle	2. Stelle	3. Stelle
Schiefwinklig	2	Drehachse senkrecht zur Ebene		
Rechtwinklig	2mm		[10]	[01]
Quadratisch	4mm		[10]	[11]
Hexagonal	6mm		[10]	[1 $\bar{1}$]

Tabelle 14 Die vier Kristallsysteme in R^2 und die Beziehung zwischen den Symmetrieelementen der Punktgruppe des leeren Gitters und den Translationsvektoren (Codiert in der Position der Symbole zur Bezeichnung der Punktgruppe)

Kristallsystem	Punktgruppe des „leeren Gitters“	Beziehung zwischen der Position des Symbols in der Punktgruppe und den Translationsvektoren			Anmerkung
		1. Stelle	2. Stelle	3. Stelle	
Triklin	$\bar{1}$	Inversionszentrum			sonst 1 in beliebigem Punkt
Monoklin	$\frac{2}{m}$	Verkürztes Symbol:			
		[010]			Eine bevorzugte Achse, [001] oder [010]*
		Ausführliches Symbol:			
		1	1	[001]	Bevorzugte Achse [001] (<i>Chell Choice 1</i>)
		1	[010]	1	Bevorzugte Achse [010] (<i>Chell Choice 2</i>)
Orthorhombisch	$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	[100]	[010]	[001]	Drei orthogonale Richtungen bevorzugt
Tetragonal	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	[001]	[100]	[110]	Zwei orthogonale Richtungen äquivalent
Hexagonal	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	[001]	[100]	$[\bar{1} \bar{1} 0]$	Richtungen in einer Ebene im Abstand von 60° äquivalent
Trigonal, Rhomboedrisch	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$	[001]	[100]	$[\bar{1} \bar{1} 0]$	Hexagonale Aufstellung: Richtungen in einer Ebene im Abstand von 120° äquivalent
	$\bar{3} \frac{2}{m}$	[111]	$[\bar{1} \bar{1} 0]$		Rhomboedrische Aufstellung
Kubisch	$\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$	[001]	[111]	[110]	Drei orthogonale Richtungen äquivalent

*Tabelle 15 Die sieben Kristallsysteme in R^3 und die Beziehung zwischen den Symmetrieelementen der Punktgruppe des leeren Gitters und den Translationsvektoren (Codiert in der Position der Symbole zur Bezeichnung der Punktgruppe). *) Im monoklinen System gibt es zwei Konventionen für die Wahl der durch Symmetrie bevorzugten Translationsrichtung, die nur im vollständigen Symbol explizit sichtbar wird.*

1.3.5.1 Punktgruppen der „leeren Gitter“ und ihre Untergruppen: Punktgruppen der „gefüllten Gitter“, die Kristallklassen

Die Punktgruppen der leeren Gitter sind von höchster Symmetrie („Holoedrie“). Der Zellinhalt kann die holoedrische Symmetrie erniedrigen, es bleibt in jedem Fall die Symmetrie einer ihrer Untergruppen. Der Bezug zwischen der Stellung der Symbole und der Ausrichtung der Symmetrieelemente bleibt auch bei den Untergruppen erhalten. Die Symmetrierniedrigung wird im Beispiel des schiefwinkligen Systems in R^2 (Abbildung 7) deutlich. Als Einteilung der Kristalle, also der Gitter mit Inhalt, in „Kristallklassen“ bezeichnet man die Zuordnung der Kristalle zur Punktgruppe der leeren Gitter oder, je nach Zellinhalt, zu einer ihrer Untergruppen.

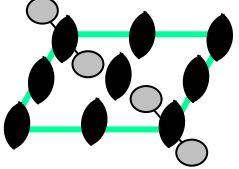
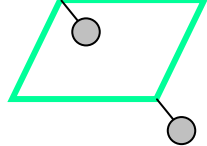
Kristallsystem	Punktgruppe des leeren Gitters	Punktgruppe bei Berücksichtigung des Zellinhalts	
		2	1
Schiefwinklig	2		

Abbildung 7 Beispiel für die Erniedrigung der Punktgruppen-Symmetrie durch den Zellinhalt. Das leere Gitter zeigt in beiden Fällen die Symmetrie 2.

Die Symmetrieelemente der Kristallklassen bilden Untergruppen der Punktgruppen der „leeren Gitter“. Zur Bestimmung der Kristallklassen in einem Kristallsystem werden deshalb alle Untergruppen zur Punktgruppe des „leeren Gitters“ bestimmt. Es ist offensichtlich, dass es die gleiche Untergruppe in mehreren Kristallsystemen geben kann, man denke nur an das Eins-Element, das ja in jeder Gruppe enthalten ist und selbst eine triviale Untergruppe bildet. Die Kristallklassen zu allen Kristallsystemen in R^2 oder R^3 können nach folgendem Schema bestimmt werden:

Schleife über alle Kristallsysteme, beginne mit dem System niederster Symmetrie (schiefwinklig in R^2 , triklin in R^3)			
	Bestimme alle Untergruppen zur Punktgruppe des Kristallsystems		
		Ist die Untergruppe schon in einer Kristallklasse vorhanden?	
		Nein	
		Ja	Die Untergruppe ist eine Kristallklasse zu diesem Kristallsystem

Tabelle 16 Flussdiagramm zur Bestimmung der Kristallklassen

Auf diese Weise erhält man die 10 zweidimensionalen Kristallklassen:

	1	2	3	4	6	m	$2mm$	$3m$	$4mm$	$6mm$
1	G									
$2mm$	UG	UG				UG	G			
$4mm$	UG	UG		UG		UG	UG		G	
$6mm$	UG	UG	UG		UG	UG	UG	UG		G

Tabelle 17 In R^2 : Zerlegung der Punktgruppen der 4 „leeren Gitter“ (Kristallsysteme), Inhalt der ersten Spalte, nach ihren Untergruppen (Inhalt der ersten Zeile). Die 10 Kristallklassen sind Gesamtheit der unterschiedlichen Gruppen(G) und Untergruppen (UG).

Die Liste aller 32 Kristallklassen in R^3 findet sich in Abbildung 8 und http://www.uni-tuebingen.de/uni/pki/skripten/VK_32PG.DOC.

Die Symmetrie der Kristallklasse zeigt sich in physikalischen Messgrößen, die von der Richtung der Beobachtung im Bezug auf die Orientierung der Symmetrieelemente im Kristall abhängen, z. B. in der thermischen Ausdehnung, der elastische Deformation unter der Wirkung äußerer Kräfte, dem Brechungsindex bei Durchgang von Licht, der elektrischen oder magnetischen Polarisierbarkeit. Bei Messungen dieser Eigenschaften verhält sich ein Kristall wie ein homogener dichter Körper, die Translationssymmetrie in seinem mikroskopischen Aufbau ist nicht zu erkennen. Vom Gitter überträgt sich aber die Punktgruppen Symmetrie auf die physikalischen Eigenschaften. Das ist die Aussage des „**Curieschen-Prinzips**“

„Ursache und Wirkung zeigen die gleiche Symmetrie“

und des „**Von Neumannschen Prinzips**“:

„Die Symmetrieelemente jeder physikalischen Eigenschaft enthalten die Symmetrieelemente der Punktgruppe des Kristalls“

oder, mit anderen Worten, die Symmetrie der physikalischen Eigenschaften ist nicht niedriger als die der Punktgruppe des „gefüllten Gitters“.

In manchen Kristallen erscheinen deshalb verschiedene Richtungen äquivalent, entsprechend der Lage der Symmetrieelemente. Die Punktgruppen-Symmetrie des Gitters mit Inhalt ist durch die Gesamtheit der Spiegelebenen und Drehachsen des Gitters gegeben, deshalb ist bei zusammengesetzten Symmetrieelementen (Tabelle 7) der Translationsanteil ohne Bedeutung.

Jeden Kristall kann man einer der 32 Kristallklassen zuordnen, die man für die sieben Kristallsysteme in R^3 erhält. Für die vier Kristallsysteme des R^2 gibt es 10 Kristallklassen. Die Stellung der Symbole im Bezug auf die Translationsvektoren ist hier ohne Bedeutung, weil in der Kristallklasse – abgesehen davon, dass die Symmetrie des leeren Gitter in jedem Kristallsystem die Ausgangs-Gruppe definiert - das Translationsgitter nicht berücksichtigt wird. Deshalb gibt es in manchen Kristallklassen unterschiedliche, mit „or“ verknüpfte Bezeichnungen für die gleiche Klasse.

1.3.5.2 Die 32 kristallographischen Punktgruppen im R^3

Schoenflies	Shubnikov	International Tables, short symbol	International Tables, full symbol	Kristallsystem
C_1 <u>C_i</u>	$\bar{1}$ <u>$\bar{2}$</u>	1 <u>$\bar{1}$</u>	1 <u>$\bar{1}$</u>	Triklin
C_2 C_s <u>C_{2h}</u>	2 m <u>$2:m$</u>	2 m <u>$2/m$</u>	2 m <u>$2/m$</u>	Monoklin
D_2 C_{2v} <u>D_{2h}</u>	$2:2$ $2 \cdot m$ <u>$m \cdot 2:m$</u>	222 $mm2$ <u>mmm</u>	222 $mm2$ <u>$2/m \ 2/m \ 2/m$</u>	Orthorhombisch
C_4 S_4 C_{4h} D_4 C_{4v} D_{2d} <u>D_{4h}</u>	4 $\bar{4}$ $4:m$ $4:2$ $4 \cdot m$ $\bar{4}:2$ <u>$m \cdot 4:m$</u>	4 $\bar{4}$ $4/m$ 422 $4mm$ $\bar{4}2m$ or $\bar{4}m2$ <u>$4/mmm$</u>	4 $\bar{4}$ $4/m$ 422 $4mm$ $\bar{4}2m$ or $\bar{4}m2$ <u>$4/m \ 2/m \ 2/m$</u>	Tetragonal
C_3 C_{3i} D_3 C_{3v} D_{3d}	3 $\bar{6}$ $3:2$ $3 \cdot m$ $\bar{6} \cdot m$	3 $\bar{3}$ 32 or 321 or 312 $3m$ or $3m1$ or $31m$ $\bar{3}m$ or $\bar{3}m1$ or $\bar{3}1m$	3 $\bar{3}$ 32 or 321 or 312 $3m$ or $3m1$ or $31m$ $\bar{3} \ 2/m$ or $\bar{3} \ 2/m \ 1$ or $\bar{3} \ 1 \ 2/m$	Trigonal
C_6 C_{3h} C_{6h} D_6 C_{6v} D_{3h} <u>D_{6h}</u>	6 $3:m$ $6:m$ $6:2$ $6 \cdot m$ $m \cdot 3:m$ <u>$m \cdot 6:m$</u>	6 $\bar{6}$ $6/m$ 622 $6mm$ $\bar{6}m2$ or $\bar{6}2m$ <u>$6/mmm$</u>	6 $\bar{6}$ $6/m$ 622 $6mm$ $\bar{6}m2$ or $\bar{6}2m$ <u>$6/m \ 2/m \ 2/m$</u>	Hexagonal
T T_h O T_d <u>O_h</u>	$3/2$ $\bar{6}/2$ $3/4$ $3/\bar{4}$ <u>$\bar{6}/4$</u>	23 $m\bar{3}$ 432 $\bar{4}3m$ <u>$m\bar{3}m$</u>	23 $2/m \ \bar{3}$ 432 $\bar{4}3m$ <u>$4/m \ \bar{3} \ 2/m$</u>	Kubisch

Abbildung 8 Die 32 kristallographischen Punktgruppen, Kopie aus den „International Tables For Crystallography“, Volume A. Die blau unterstrichenen Punktgruppen beschreiben die Symmetrie der „leeren Gitter“ der einzelnen Kristallsysteme

1.3.6 Die Bravais-Gitter: Eine Nutzer-freundliche Konvention

Der Inhalt einer Elementarzelle kann aus mehreren Einheiten bestehen, die durch Vektoren ineinander überführbar sind. Wenn die Basisvektoren des Gitters Linearkombinationen dieser Vektoren mit ganzzahligen Koeffizienten sind, dann wählt man die kürzeren Vektoren als Basisvektoren und definiert mit ihrer Hilfe eine möglichst kleine Elementarzelle. Wenn aber durch die Wahl der kleineren Zelle die Translationsvektoren mit den Symmetrieelementen des leeren Gitters nicht mehr übereinstimmen, dann behält man die längeren, orthogonal stehenden Basisvektoren bei und nennt das Gitter „zentriert“.

Durch diese Konvention zeigen die Translationsvektoren immer die Lage der Symmetrieelemente: Sonst müsste man sich z. B. merken, dass ein rhomboedrisches Gitter mit $\alpha = 60^\circ$ einem kubisch flächenzentrierten Gitter, also der kubisch dichtesten Kugelpackung, entspricht.

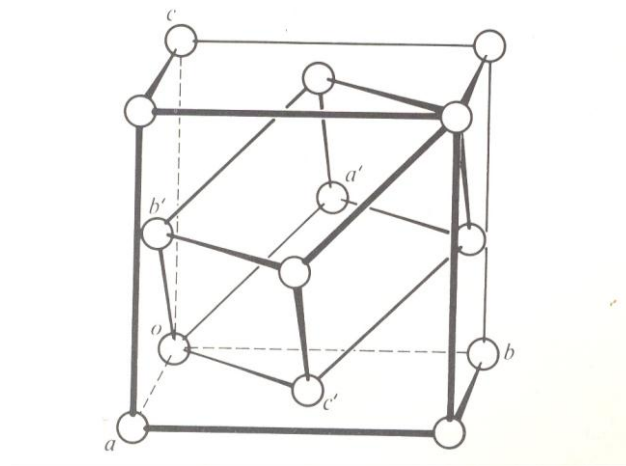


Abbildung 9 Beispiel zur Wahl des zentrierten Gitters: Flächenzentrierte Zelle mit Gitterkonstanten a, b, c und eine primitive Zelle mit a', b', c' . ($a' = a\sqrt{2}/2$, $\angle a', b' = 60^\circ$)

Die Gesamtheit der mit dieser Unterscheidung entstehenden Gitter bezeichnet man als die „Bravais-Gitter“.

Bravais-Gitter mp (Schiefw. System)	Bravais-Gitter oc (Rechtw. Syst., zentriert)

Abbildung 10 Beispiel zur Unterscheidung der Bravais-Gitter in R^2 . Die strichlierten Zellen enthalten zwei durch einen Translationsvektor des Gitters verbundene äquivalente Punkte. Die Symmetrie der kleinen grünen sowohl der großen, strichlierten Zelle ist schiefwinklig, Punktsymmetrie 2, man wählt deshalb die kleine grüne Zelle: $p2$. Rechts: Die große, strichlierte Zelle zeigt die Punktsymmetrie $2mm$, deshalb wählt man sie als zentrierte Zelle: $c2mm$.

Symbol	Zahl der Formeleinheiten	Translationsvektoren innerhalb der Zelle	Gittertyp
p	1	Keine	Primitiv
c	2	$(0,1/2)$	Zentriert

Tabelle 18 Translationsgitter in R^2 . Es gibt es nur p (primitiv) und c Gitter, die c Zentrierung liegt in der Mitte der Fläche, Beispiel Abbildung 10.

Symbol	Zahl der Formeleinheiten	Translationsvektoren innerhalb der Zelle	Gittertyp
P	1	Keine	Primitiv
I	2	$(1/2, 1/2, 1/2)$	Innnenzentriert
A		$(0, 1/2, 1/2)$	Einseitig flächenzentriert
B		$(1/2, 0, 1/2)$	
C		$(1/2, 1/2, 0)$	
F	4	$(0, 1/2, 1/2), (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0)$	Allseitig flächenzentriert

Tabelle 19 Translationsgitter in R^3 . Die „Anzahl der Formeleinheiten“ ist die Zahl der Translations-äquivalenten Motive in der Zelle

In den Elementarzellen der Bravais Gitter zeichnet die Zentrierung entweder drei orthogonale Flächen oder nur eine Fläche aus, zusätzlich gibt es die Innenzentrierung in der Zellmitte. Eine Zentrierung auf nur zwei zueinander orthogonalen Mantelflächen erzeugt, entgegen der Erwartung, keine kürzeren Translationsvektoren des Gitters: Sind z.B. nur die $[001]$ Flächen nicht zentriert, dann ist $(0, 1/2, 1/2)$ kein Translationsvektor des Gitters, denn, wird er auf die Lage $(1/2, 0, 1/2)$ angewandt, so entsteht die Lage $(1/2, 1/2, 1)$, äquivalent zu $(1/2, 1/2, 0)$. Diese Lage war aber als unbesetzt vorausgesetzt.

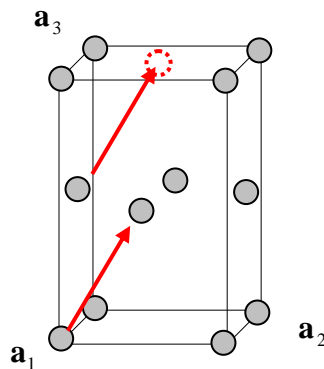


Abbildung 11 Zentrierung auf zwei zueinander orthogonalen Flächen: Der Vektor $(0, 1/2, 1/2)$ zur Zentrierung ist kein Translationsvektor des Gitters, weil er, angewandt auf Lage $(1/2, 0, 1/2)$, auf die unbesetzte Position $(1/2, 1/2, 1)$ führt.

1.3.6.1 Die fünf Bravais-Gitter in zwei Dimensionen

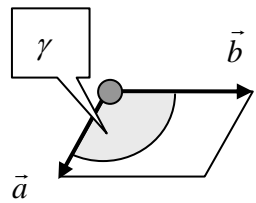
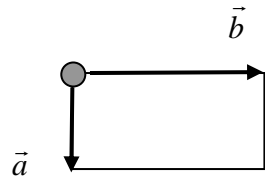
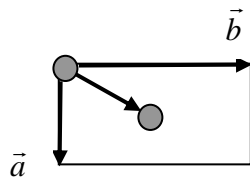
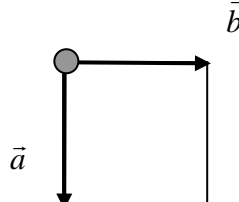
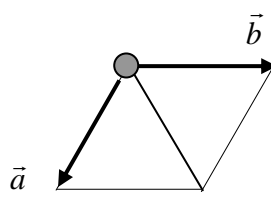
Symmetrie des Bravais-Gitters	Elementarzelle des Bravais-Gitters	Punktsymmetrieelemente des „leeren Gitters“	Gitterkonstanten	Kristallsystem
$p2$		Zweizählige Achse im Ursprung des Gitters	$a \neq b$, $\gamma \neq 90^\circ$	Schiefwinklig
$p2mm$		Spiegellinien \vec{a}, \vec{b} , zweizählige Achse im Ursprung	$a \neq b$, $\gamma = 90^\circ$	Orthogonal
$c2mm$				
$p4mm$		\vec{a}, \vec{b} sind Spiegellinien, vierzählige Achse im Ursprung	$a = b$, $\gamma = 90^\circ$	Quadratisch
$p6mm$		$\vec{a}, \vec{b}, \vec{a} + \vec{b}$ sind Spiegellinien, sechszählige Achse im Ursprung	$a = b$, $\gamma = 120^\circ$	Hexagonal

Tabelle 20 Die fünf Bravais-Gitter in R^2

1.3.6.2 Die 14 Bravais-Gitter in drei Dimensionen

Das „schiefwinklige System“ in R^2 wird in R^3 durch einen dritten Translationsvektor \vec{c} zum „triklinen System“. Steht \vec{c} aber senkrecht auf der von \vec{a} und \vec{b} aufgespannten Fläche, dann ist \vec{c} eine zweizählige Achse und Normale einer Spiegelebene. Diese Richtung ist durch Symmetrie ausgezeichnet, das Gitter gehört zum „monoklinen System“. Anstelle von \vec{c} („1st setting“) kann auch die \vec{b} - Achse als bevorzugte Richtung gewählt werden („2nd setting“)

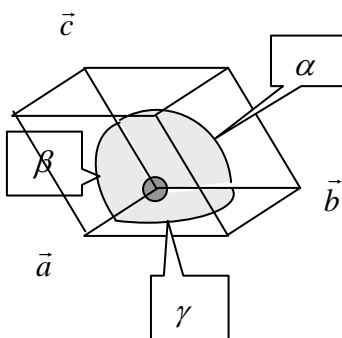
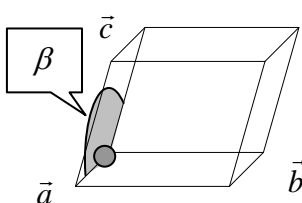
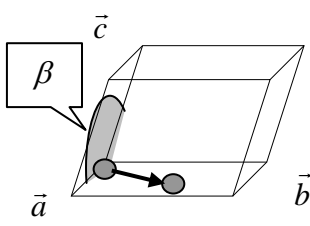
Symmetrie des Bravais-Gitters	Elementarzelle des Bravais-Gitters	Punktsymmetrieelemente des „leeren Gitters“	Gitterkonstanten	Kristallsystem
$P\bar{1}$		$\bar{1}$ Inversionszentrum im Ursprung	$a \neq b \neq c,$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Triklin
$P\frac{2}{m}$		$\frac{2}{m}$	$a \neq b \neq c,$ $\alpha = \gamma = 90^\circ,$ $\beta \neq 90^\circ$	monoklin
$C\frac{2}{m}$		\vec{b} ist zweizählige Achse und Normale einer Spiegelebene		

Tabelle 21 Die Bravais-Gitter des triklinen und monoklinen Kristallsystems

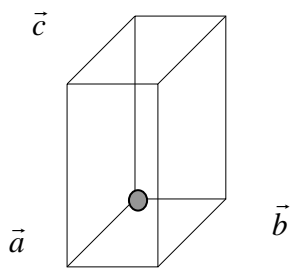
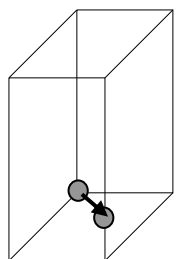
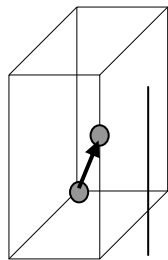
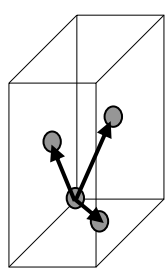
Symmetrie des Bravais-Gitters	Elementarzelle des Bravais-Gitters	Punktsymmetrieelemente des „leeren Gitters“	Gitterkonstanten	Kristallsystem
$P \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$		$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ sind zweizählige Achsen und Normale zu Spiegelebenen	$a \neq b \neq c,$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Orthorhombisch
$C \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$				
$I \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$				
$F \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$				

Tabelle 22 Die vier Bravais-Gitter des orthorhombischen Kristallsystems

Das Gitter eines Kristalls mit dreizähliger Punktgruppensymmetrie des Zell-Inhalts wird in R^2 im hexagonalen Bravais Gitter aufgestellt, auch in R^3 ist das Bravais-Gitter eines trigonalen Kristalls hexagonal. Zeigt in R^3 der Kristall aber eine dreizählige Drehinversions-Achse, dann ist das Bravais-Gitter rhomboedrisch. Im rhomboedrischen Gitter erkennt man die Stapelfolge der kubisch dichtesten Kugelpackung, allerdings sind die Schichten auseinandergezogen oder gestaucht.

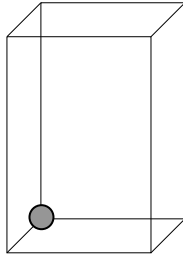
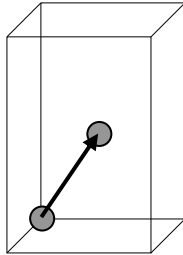
Symmetrie des Bravais-Gitters	Elementarzelle des Bravais-Gitters	Punktsymmetrieelemente des „leeren Gitters“	Gitterkonstanten	Kristallsystem
$P \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$		$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ \vec{c} ist vierzählige Achse und Normale zu einer Spiegelebene, \vec{a}, \vec{b} sowie $\vec{a} + \vec{b}, \vec{a} - \vec{b}$ sind zweizählige Achsen und Normale zu Spiegelebenen	$a = b,$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Tetragonal
$I \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$				

Tabelle 23 Die Bravais-Gitter des tetragonalen Systems


Symmetrie des Bravais-Gitters	Elementarzelle des Bravais-Gitters	Punktsymmetrieelemente des „leeren Gitters“	Gitterkonstanten	Kristallsystem
$R\bar{3} \frac{2}{m}$		$\bar{3} \frac{2}{m}$ Dreizählige Drehinversions-Achse in Richtung von $\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}$, drei zweizählige Achsen senkrecht dazu	$a = b = c,$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Trigonal

Tabelle 24 Rhomboedrisches Bravais-Gitter zum trigonalen Kristallsystem

Im rhomboedrischen System ist schon z. B. das Ergebnis der Addition von zwei Ortsvektoren schwer vorstellbar, weil die Winkel zwischen allen Basisvektoren schief sind. Deshalb wählt man oft eine hexagonale Einheitszelle, womit zwei rechte Winkel gewonnen werden. Wie beim Übergang zu zentrierten Zellen erkaufte man sich aber mehrere „Formeleinheiten“ in der Elementarzelle, weil die rhomboedrische Zelle aus drei ineinandergestellten hexagonalen Bravaisgittern besteht.

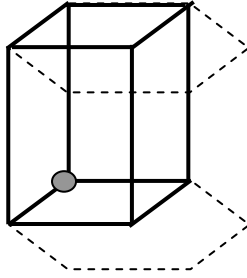
Symmetrie des Bravais-Gitters	Elementarzelle des Bravais-Gitters	Punktsymmetrieelemente des „leeren Gitters“	Gitterkonstanten	Kristallsystem
$P \frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$		$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ Siehe Legende zur Tabelle	$a = b, \gamma = 120^\circ$	Hexagonal oder Trigonal

Tabelle 25 Das hexagonale Bravais-Gitter. Punktsymmetrieelemente des „leeren Gitters“: \vec{c} ist sechszählige Achse und Normale einer Spiegelebene, $\vec{a}, \vec{b}, \vec{a} + \vec{b}, \vec{a} - \vec{b}, 2\vec{a} + \vec{b}, \vec{a} + 2\vec{b}$ sind sowohl zweizählige Achsen als auch Normale zu Spiegelebenen

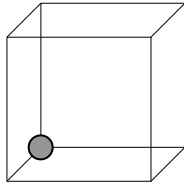
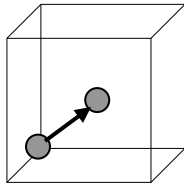
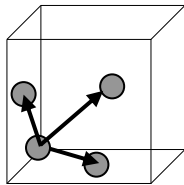
Symmetrie des Bravais-Gitters	Elementarzelle des Bravais-Gitters	Punktsymmetrieelemente des „leeren Gitters“	Gitterkonstanten	Kristallsystem
$P \frac{4}{m} \frac{\bar{3}}{m} \frac{2}{m}$		$\frac{4}{m} \frac{\bar{3}}{m} \frac{2}{m}$	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Kubisch
$I \frac{4}{m} \frac{\bar{3}}{m} \frac{2}{m}$		$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ sind vierzählige Achsen und Normale zu Spiegelebenen, alle drei Translationsvektoren sind durch eine dreizählige Achse in Richtung von $\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}$ ineinander überführbar, $\vec{a} + \vec{b}, \dots$ sind zweizählige Achsen und Normale zu Spiegelebenen		
$F \frac{4}{m} \frac{\bar{3}}{m} \frac{2}{m}$				

Tabelle 26 Die Bravais-Gitter des kubischen Systems

1.3.7 Die Raumgruppen

Die Raumgruppe enthält die Information über das Kristallsystem, das Bravaisgitter und die Punktgruppenelemente, die dem atomaren Aufbau entsprechen.

1.3.7.1 Schraubungen und Gleitspiegelungen

In manchen Raumgruppen gibt es Symmetrieelemente, bei denen bei Drehung oder Spiegelung eine Translation mit bestimmter Richtung und bestimmtem Betrag folgen **muss**: Die Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen. Verknüpfung zwischen Symmetrieeoperationen gibt es auch in der Drehinversion, wo auf die Drehung eine Inversion folgen muss, das Neue ist jetzt aber die Verknüpfung von Elementen aus der endlichen Punktgruppe der Drehungen und Spiegelungen mit Elementen aus der unendlichen Translationsgruppe.

1.3.7.1.1 Schraubungen

Bezeichnung	Ausführung
n_p	<ol style="list-style-type: none"> 1. Drehung um $\frac{2\pi}{n}$, 2. Translation um $p \cdot \frac{\vec{c}}{n}$ in Richtung der Achse nach der „Korrenzieherregel“

Tabelle 27 Bezeichnung und Transformationsvorschrift für die Schraubenachsen

Bezeichnung	Ausführung	Graphisches Symbol
3_1	<ol style="list-style-type: none"> 1. Drehung um $\frac{2\pi}{3}$ 2. Translation um $1 \cdot \frac{\vec{c}}{3}$ in Richtung der Achse nach der „Korrenzieherregel“ 	
3_2	<ol style="list-style-type: none"> 1. Drehung um $\frac{2\pi}{3}$ 2. Translation um $2 \cdot \frac{\vec{c}}{3}$ in Richtung der Achse nach der „Korrenzieherregel“ 	

Tabelle 28 Beispiel mit grafischem Symbol: Schraubenachsen 3_1 und 3_2 . Das Symbol zeigt auch die Umkehrung des Drehsinns

Die vollständige Darstellung der standardisierten graphischen Symbole findet sich in „International Tables for Crystallography“ „Volume A: Space Group Symmetry“, S. 7-10.

Schraubenachsen erzeugen einen Drehsinn, die Strukturen erscheinen als „rechts-“ oder „linksdrehend“. Im Symbol für die Schraubenachse ist immer die gleiche Richtung für die reine Drehung vorausgesetzt, der unterschiedliche Drehsinn wird durch den mit der Drehung verknüpften Translationsbetrag ausgedrückt. Bei z. B. 4_1 muss einer Drehung um $\pi/2 = 90^\circ$ eine Translation um $1/4$ in Richtung der Achse folgen, Drehung und Translationsrichtung sind nach der „Daumen-“ oder „Korkenzieherregel“ miteinander verknüpft. Die gegenläufige Schraubung wird durch 4_3 erzeugt, bei der auf die Drehung um $\pi/2 = 90^\circ$ eine Verschiebung um $3/4$ der Translationsperiode, auch nach der „Daumen-“ oder „Korkenzieherregel“, folgen muss. Das zeigt sich bei Aufbau des Musters durch mehrfache Anwendung der Symmetrieelemente:

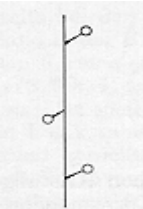
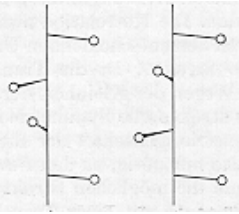
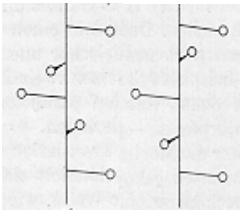
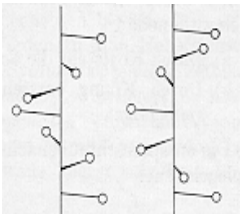
			
2_1	$3_1, 3_2$	$4_1, 4_3$	$6_1, 6_5$

Abbildung 12 Schraubenachsen in Kristallen und Paare zu enantiomorphen Strukturen (Abbildung neu arrangiert aus Bild in Kleber, „Einführung in die Kristallographie“)

1.3.7.1.2 Gleitspiegelungen

Bezeichnung	Mögliche Lagen der Spiegelebene	Translation bei Spiegelung	Anmerkung
a	$(010), (001), (011)$	$\vec{a}/2$	Axiale Gleitspiegelebene
b	$(100), (001), (101)$	$\vec{b}/2$	
c	$(100), (010), (1,1,0)$	$\vec{c}/2$	
n	(100)	$(\vec{b} + \vec{c})/2$	Diagonale Gleitspiegelebene
	(010)	$(\vec{c} + \vec{a})/2$	
	(001)	$(\vec{a} + \vec{b})/2$	
d	$(011), (101), (110)$	$(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c})/4$	Nur im tetragonalen und kubischen System

Tabelle 29 Bezeichnungen und Symbole für die Gleitspiegelebenen. Für die Spiegelebenen sind die Vektoren der Normalen angegeben.






Art der Gleitspiegelebene	Graphische Symbole	Anmerkung
a, b, c Gleitspiegelebenen, Gleitvektor = $\frac{1}{2}$ Translationsvektor		Spiegelebene senkrecht zur Zeichenebene, Gleitvektor liegt in der Zeichenebene
		Spiegelebene senkrecht zur Zeichenebene, Gleitvektor liegt in der Zeichenebene
		Spiegelebene liegt in der Zeichenebene, der Gleitvektor auch
n Gleitspiegelebene Jede Komponente des Gleitvektors = $\frac{1}{2}$ Translationsvektor		Spiegelebene senkrecht zur Zeichenebene, Gleitvektor besteht aus zwei Komponenten: eine liegt in der Zeichenebene, eine senkrecht dazu
		Spiegelebene liegt in der Zeichenebene, Gleitvektor in Richtung des Pfeils besteht aus zwei Komponenten, beide liegen in der Zeichenebene

Tabelle 30 Grafische Symbole für die oft vorkommenden axialen und diagonalen Gleitspiegelebenen senkrecht und parallel zur Zeichenebene. (Symbole für Gleitspiegelebenen in anderen Lagen: „International Tables for Crystallography Volume A: Space Group Symmetry“, S. 7-10)

1.3.7.2 Die Bezeichnung der Raumgruppen

Die Bezeichnung der Raumgruppen folgt der in „International Tables for Crystallography“ eingeführten Nomenklatur nach Hermann-Mauguin. Die Raumgruppen-Symbole enthalten in maximal vier alphanumerischen Zeichen Information über das Bravais-Gitter, die Symmetrieelemente der Punktgruppe eines Punktes in allgemeiner Lage und gegebenenfalls zu Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen. Die Position der Symbole für die Punktgruppe zeigt den Bezug der Richtung der Symmetrieelemente zu den Richtungen der Translationsvektoren.

Art der Symbole	Anmerkung
Vollständig	<p>Immer vierstellig. An erster Stelle steht der Typ des Bravais-Gitters (Tabelle 18 für R^2, Tabelle 19 für R^3), gefolgt von Generatoren für Drehungen oder Schraubungen und Spiegelungen bzw. Gleitspiegelungen für jede im Symbol vorgesehene Richtung.</p> <p>Der Bezug eines Symmetrieelements zur Richtung der Translationsvektoren ist durch seine Position im Symbol eindeutig festgelegt, entsprechend der Vereinbarung für die Elemente der Punktgruppe für jedes Kristallsystem (Tabelle 14 für R^2, Tabelle 15 für R^3).</p>
Ausführlich	<p>Wie das vollständige Symbol, aber nicht durch Symmetrieelemente ausgezeichnete Richtungen werden im Symbol nur dann mit „1“ berücksichtigt, wenn es zur eindeutigen Kennzeichnung nötig ist. Andernfalls werden die Positionen weggelassen. Deshalb ist dieses Symbol nicht immer vierstellig</p>
Verkürzt	<p>Nicht als Generator benötigte Elemente der Raumgruppe werden weggelassen.</p> <p>Aber: In jedem Fall enthält das Symbol die vollständige Symmetrie-Information zum Aufbau aller Elemente der Raumgruppe. In primitiven Gittern des monoklinen Systems ist die Wahl der bevorzugten Achse nicht ersichtlich und muss deshalb eigens genannt werden.</p>

Tabelle 31 Symbol der Raumgruppe (Symbol for Space Group)

Vollständig	Ausführlich	Verkürzt	Nr.	Anmerkung
$P 1 2 1$	$P 1 2 1$	$P 2$	3	<ul style="list-style-type: none"> • monoklin, • primitives Gitter, • b-Achse ist 2-zählige Drehachse Die bevorzugte b -Achse ist im verkürzten Symbol nicht zu erkennen
$B 1 1 2/b$	$B 1 1 2/b$	$B 2/b$	15	<ul style="list-style-type: none"> • monoklin, • B-zentriertes Gitter, • c-Achse ist 2-zählige Drehachse und Normale einer b Gleitspiegelebene Das verkürzte Symbol enthält die volle Information, weil in B -zentrierten monoklinen Gittern die c -Achse bevorzugt ist. (Auch die a -Achse könnte bevorzugt sein, das ist aber kein Standard)
$P 2/b 2_1/c 2/m$	$P 2/b 2_1/c 2/m$	$P b c m$	57	<ul style="list-style-type: none"> • Orthorhombisch • Primitives Gitter • a-Achse ist 2-zählige Drehachse und Normale einer b Gleitspiegelebene • b-Achse ist 2-zählige Schraubachse und Normale einer c Gleitspiegelebene • c-Achse ist 2-zählige Drehachse und Normale einer Spiegelebene Das verkürzte Symbol enthält Generatoren, aus denen alle weiteren Symmetrieelemente erzeugt werden können
$I 4/m 1 1$	$I 4/m$	$I 4/m$	87	<ul style="list-style-type: none"> • Tetragonal • Innenzentriertes Gitter • c-Achse ist 4-zählige Drehachse und Normale einer Spiegelebene Es gibt keine Mehrdeutigkeit, deshalb ist auch das ausführliche Symbol nur zweistellig
$P 2/n \bar{3} 1$	$P 2/n \bar{3}$	$P n 3$	201	<ul style="list-style-type: none"> • Kubisch • Primitives Gitter • a- und b-Achsen ist 2-zählige Drehachsen und Normale zu n- Gleitspiegelebenen Im Kubischen steht 3 oder $\bar{3}$ an dritter Stelle, die Richtung $[110]$ und ihre Symmetrie-äquivalenten sind keine Symmetrieelemente. n und 3 sind Generatoren.

Tabelle 32 Beispiele zur Bezeichnung der Raumgruppen. Nummer der Raumgruppen nach den Int. Tabellen.

1.3.7.3 Gitterkomplexe

Als Gitterkomplexe bezeichnet man die Menge der symmetrisch äquivalenten Lagen in Raumgruppen. In der Praxis ist diese Information sehr wichtig, weil sie die Anzahl der verfügbaren Plätze zeigt. Die Angabe der Raumgruppe definiert ein Gerüst von Symmetrieelementen, denen der Zellinhalt genügen muss.

Begriff	Anmerkung
Gitterkomplex (<i>Lattice Complex, Orbit</i>)	Menge von Punkten $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)$ innerhalb einer Elementarzelle, die aus einem beliebigen Punkt \mathbf{x}_i durch Anwendung der Symmetrieeoperationen der Raumgruppe erzeugt werden. Diese Punkte sind „Symmetrie-äquivalent“.
Punktsymmetrie des Gitterkomplexes, Punktgruppe der Lage (<i>Site Symmetry</i>)	Gesamtheit aller Elemente aus \mathbf{G} , die einen Punkt des Gitterkomplexes in sich selbst überführen. Diese Elemente bilden eine Untergruppe zu \mathbf{G} , $\mathbf{G}' \subset \mathbf{G}$, der „Index“ der Untergruppe ist $p = \mathbf{G} / \mathbf{G}' $
Zähligkeit des Gitterkomplexes (<i>Multiplicity</i>)	Anzahl n äquivalenter Punkte
Allgemeine Lage (<i>General Position</i>)	Die Punkte liegen auf keinem nichttrivialen Symmetrieelement, Zahl der Punkte $n = \mathbf{G} $
Spezielle Lage (<i>Special Position</i>)	Die Punkte liegen auf mindestens einem nichttrivialen Symmetrieelement, Zahl der Punkte $n' = \mathbf{G}' = n/p$
Koordinaten des Gitterkomplexes (<i>Coordinates</i>)	Im Koordinatensystem des Translationsgitters angegebene Koordinaten der äquivalenten Punkte, die volle Translationsperiode entspricht für jede Richtung der Koordinate „1“, vgl. die Angaben im blau umrandeten Teil von Abbildung 14
Wyckoff-Position (<i>Wyckoff-Letter</i>)	Buchstabensymbol zur Kennzeichnung der Gitterkomplexe innerhalb einer Raumgruppe, beginnend mit a für den Gitterkomplex mit der kleinsten Zähligkeit

Tabelle 33 Begriffe zu Gitterkomplexen. Kursiv die Bezeichnung der Internationalen Tabellen, vgl. Abbildung 14

Beginnt man mit einem Punkt im Gitter in „allgemeiner Lage“, damit ist gemeint, dass er nicht gerade „speziell“ auf einem Symmetrieelement liegt, dann erzeugt jede Symmetrieeoperation der Raumgruppe einen weiteren Punkt. In einer Elementarzelle gibt es deshalb so viele symmetrisch äquivalente Punkte in allgemeiner Lage, wie es der Ordnung der Punktgruppe der Kristallklasse entspricht.

Wird der Punkt zu Beginn auf ein Symmetrieelement gelegt, das ihn in sich selbst überführt, dann reduziert sich diese Zahl: Der Punkt wird nur noch durch Elemente einer Untergruppe (der Punktgruppe der Kristallklasse) in äquivalente überführt. Die Anzahl der Punkte in speziellen Lagen ist deshalb ein Teiler der Anzahl der Punkte in allgemeiner Lage.

Punkte auf Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen werden durch den Translations-Anteil der Symmetrioperationen nicht auf sich selbst abgebildet, sie liegen deshalb nicht „speziell“. Es ist offensichtlich, dass alle Punkte eines Gitterkomplexes aus identischen Teilchen bestehen.

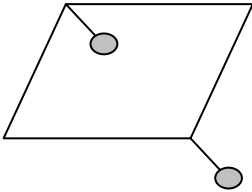
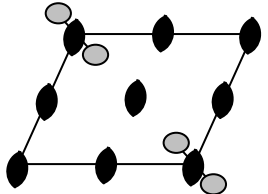
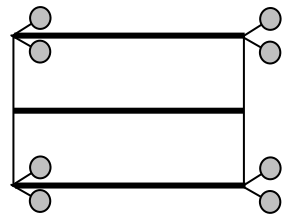
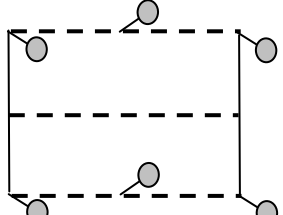
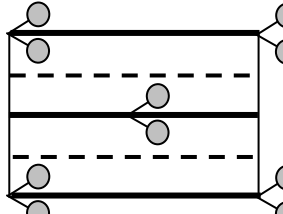
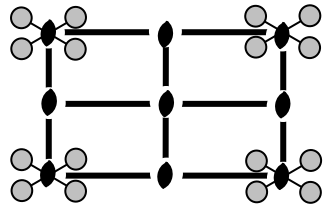
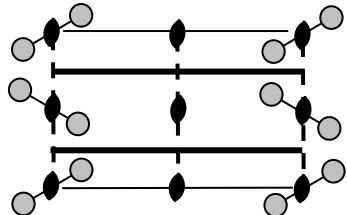
Die Gitterkomplexe für jede Raumgruppe sind in „International Tables for Crystallography Vol. A“, eingetragen, vgl. Beispiel in Abbildung 14.

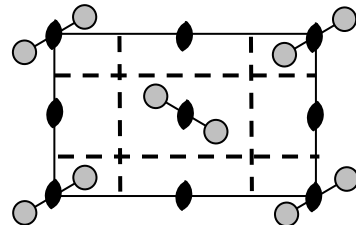
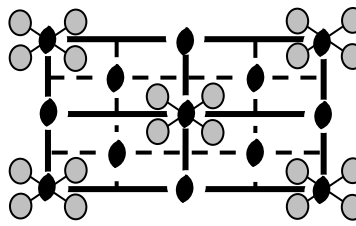
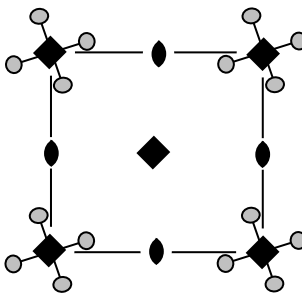
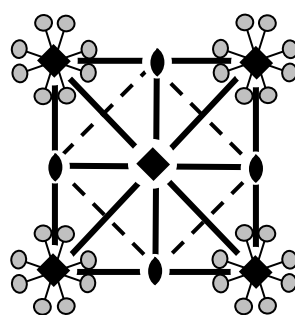
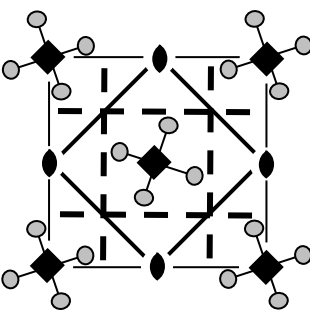
1.3.7.4 Die 17 ebenen Raumgruppen

Abbildung 13 zeigt die Einheitszellen mit ihren Symmetrieelementen und die durch ihre Anwendung auf einen Punkt in allgemeiner Lage entstehenden Punkte. Die vollständige Informationen zu allen 17 kristallographischen Raumgruppen in R^2 und allen 230 Raumgruppen in R^3 sind im Band „Volume A: Space Group Symmetry“ der „International Tables for Crystallography“ in standardisierter Form aufgeschrieben. In Abbildung 14 sind die wichtigsten Informationen am Beispiel der Raumgruppe $p2mg$ erklärt.

Kristallsystem	Kristallklasse	Bravaisgitter	Raumgruppe
Bezeichnung und Symmetrie des leeren Gitters (Punktgruppe)	Symmetrie des gefüllten Gitters* (Untergruppe der Punktgruppe des leeren Gitters), Symmetrie makroskopischer Eigenschaften	Translationsvektoren der Elementarzelle liegen in Richtung der Symmetrieelemente der Kristallklasse	Klasse +Bravaisgitter + Gleitspiegelungen

*Tabelle 34 Zusammenfassung der Begriffe zu Symmetrieeigenschaften von Gittern. *)Die Punktgruppe des „gefüllten Gitters“ lässt bei Gleitspiegellinien den Translationsanteil unberücksichtigt*

Kristallsystem, Punktgruppe	Kristallklasse	Bravaisgitter	Raumgruppe				Mult
			Symbol		Nr		
Schiefwinklig (<i>Oblique</i>)	1	<i>p</i>	<i>p1</i>		1		1
	2		<i>p2</i>		2		2
Rechtwinklig (<i>Rectangular</i>)	<i>m</i>	<i>p</i>	<i>p1m1</i>	<i>pm</i>	3		2
			<i>p1g1</i>	<i>pg</i>	4		2
		<i>c</i>	<i>c1m1</i>	<i>cm</i>	5		4
	<i>2mm</i>	<i>p</i>	<i>p2mm</i>	<i>p2mm</i>	6		4
			<i>p2mg</i>	<i>p2mg</i>	7		4

Kristallsystem, Punktgruppe	Kristallklasse	Bravaisgitter	Raumgruppe				
			Symbol		Nr		Mult
Rechtwinklig (<i>Rectangular</i>) <i>2mm</i>			<i>p2gg</i>	<i>p2gg</i>	8		4
		<i>c</i>	<i>c2mm</i>	<i>c2mm</i>	9		8
Quadratisch (<i>Square</i>) <i>4mm</i>	4	<i>p</i>	<i>p4</i>	<i>p4</i>	10		4
	<i>4 mm</i>		<i>p4mm</i>	<i>p4mm</i>	11		8
			<i>p4gm</i>	<i>p4gm</i>	12		8

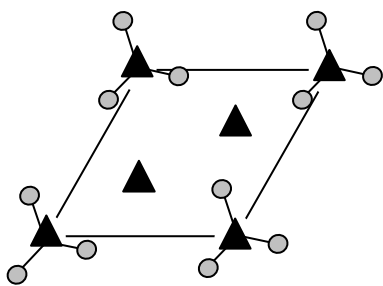
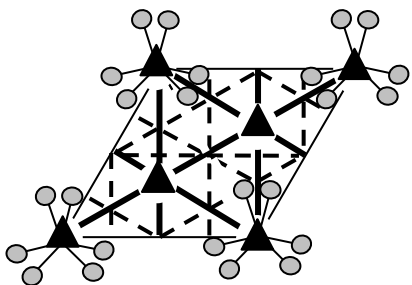
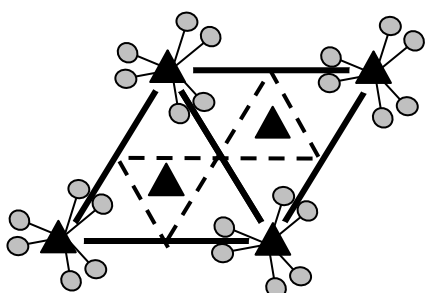
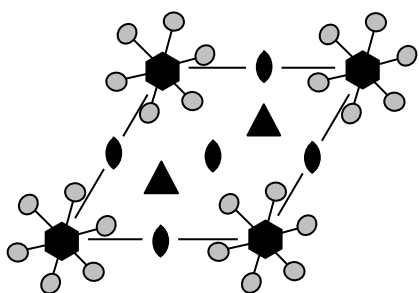
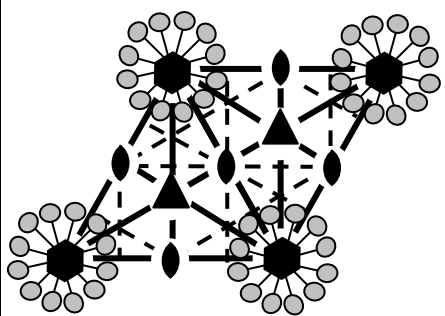
Kristallsystem, Punktgruppe	Kristallklasse	Bravaisgitter	Raumgruppe				
			Symbol		Nr		Mult
Hexagonal (Hexagonal) 6mm	3	p	p3	p3	13		3
	3m		p3m1	p3m1	14		6
			p31m	p31m	15		6
			6	p6	p6	16	
	6mm		p6mm	p6mm	17		12

Abbildung 13 Die 17 ebenen Raumgruppen mit vollständigen und verkürzten Symbolen

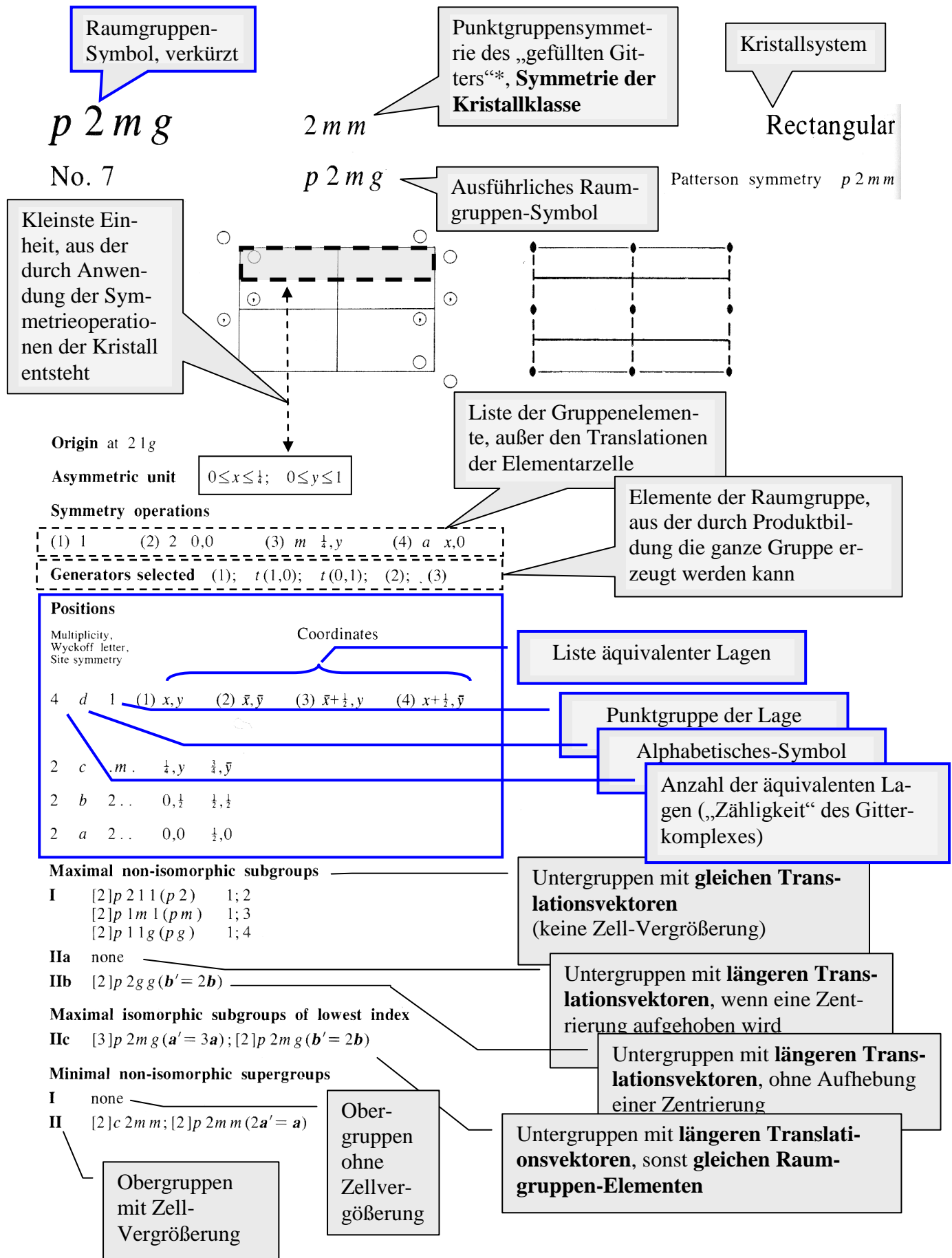


Abbildung 14 Information zu den Raumgruppen in „International Tables for Crystallography“ am Beispiel der ebenen Raumgruppe $p2mg$. *) vgl. Notiz bei Tabelle 36

1.3.7.5 Die 230 Raumgruppen im dreidimensionalen Raum

Analog zu den 17 Raumgruppen im Zweidimensionalen erhält man im Dreidimensionalen die 230 Raumgruppen, wenn man die 14 Bravaisgitter mit den Punktgruppen der leeren Bravaisgitter und ihren Untergruppen kombiniert und zusätzlich Schraubenachsen und Gleitspiegelenen berücksichtigt.

Der Zusammenhang zwischen Kristallsystem, Kristallklasse, Bravaisgitter und den 230 Raumgruppen ist in Tabelle 36 dargestellt.

Kristallsystem		Kristallklasse	Bravais-Gitter	Raumgruppe
Bezeichnung	Symmetrie des leeren Gitters (Punktgruppe)	Symmetrie des gefüllten Gitters* (Untergruppe der Pg. des leeren Gitters)	Translationsvektoren liegen in Richtung der Symmetrieelemente der Kristallklasse	Klasse + Bravais Gitter + Schraubungen, Gleitspiegelungen

Tabelle 35 Zusammenfassung der Begriffe zu Symmetrieeigenschaften von Gittern in R^3 .

**)Die Punktgruppe des „gefüllten Gitters“ lässt bei Gleitspiegellinien und Schraubenachsen den Translationsanteil unberücksichtigt, sie ist die Punktgruppe der Kristallklasse und der makroskopischen Eigenschaften*

Kristallsystem Bezeichnung, Punktgruppe			Kristallklasse		Bravais-Gitter						Raumgruppe	
Triklin	$\bar{1}$		1		P						1	
			$\bar{1}$								2	
Mono- klin	$2/m$		2		P			C			3-5	
			m								6-9	
			$2/m$								10-15	
Or- thorhom bisch	$2/m \ 2/m \ 2/m$		222		P	C		I	F		16-24	
			$mm2$		P	C	A	I	F	25-46		
			$2/m \ 2/m \ 2/m$		P	C		I	F	47-79		
Tetra- gonal	$4/m \ 2/m \ 2/m$		4		P			I			75-80	
			$\bar{4}$								81-82	
			$4/m$								83-88	
			422								89-99	
			$4mm$								99-110	
			$\bar{4}2m$								111-122	
			$4/m \ 2/m \ 2/m$								123-142	
Trigonal	$\bar{3}2/m\bar{1}$ (hex)	$\bar{3}2/m$ (rho)	3 (hex) (rho)		P (hex)			R (hex) (rho)			143-145	
											146	
			$\bar{3}$ (hex) (rho)		P (hex)			R (hex) (rho)			147	
											148	
			321 (hex)		(rho) 32	P (hex)			R (hex) (rho)			149-154
			$3m\bar{1}$ (hex)		(rho) $3m$	P (hex)						155
			$\bar{3}2/m\bar{1}$ (hex)		$\bar{3}2/m$ (rho)	P (hex)			R (hex) (rho)			156-159
						P (hex)						160-161
				P (hex)			R (hex) (rho)			162-165		
				P (hex)						166-167		
Hexa- gonale	$6/m \ 2/m \ 2/m$		6		P						168-173	
			$\bar{6}$								174	
			$6/m$								175-176	
			622								177-182	
			$6mm$								183-186	
			$\bar{6}m2$								187-190	
			$6/m \ 2/m \ 2/m$								191-194	
Kubisch	$4/m \ \bar{3} \ 2/m$		23		P	F		I		195-199		
			$2/m \ \bar{3}$							200-206		
			432							207-214		
			$\bar{4}3m$							215-220		
			$4/m \ \bar{3} \ 2/m$							221-230		

Tabelle 36 Zusammenhang zwischen Kristallsystem, Kristallklasse, Bravaisgitter und den 230 Raumgruppen in R^3 . (hex) hexagonales, (rho) rhomboedrisches Koordinatensystem. *)Die Punktgruppe des „gefüllten Gitters“ lässt bei Gleitspiegellinien und Schraubenachsen den Translationsanteil unberücksichtigt

1.3.7.6 Untergruppen zu den Raumgruppen

In „International Tables for Crystallography“, Volume A, sind für die Raumgruppen in R^2 und R^3 einige Untergruppen angegeben (vgl. Abbildung 14). Untergruppen erhält man durch Streichung eines Symmetrieelements oder mehreren von ihnen. Einige für Untergruppen relevante Begriffe wurden schon in Verbindung mit den Gitterkomplexen eingeführt, weil innerhalb einer Raumgruppe die Punktgruppe eines Gitterkomplexes in spezieller Lage eine Untergruppe des Gitterkomplexes in allgemeiner Lage ist (vgl. Tabelle 33).

Die kristallographischen Punktgruppen sind endliche Gruppen, für die es jeweils eine endliche Anzahl von Untergruppen gibt. Für jede Raumgruppe gibt es aber unendlich viele Untergruppen, weil man neue Strukturen erzeugen kann, indem man Elementarzellen mit Vielfachen der kürzesten Translationsvektoren ansetzt: Man erzeugt Untergruppen mit längeren Translationsvektoren, sonst gleichen Raumgruppen-Elementen. Untergruppen enthalten eine Auswahl der in der Ausgangsgruppe vorhandenen Symmetrieelemente, deshalb können die Translationsvektoren nur auf bestimmte Vielfache der ursprünglichen verlängert werden.

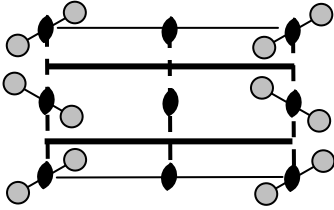
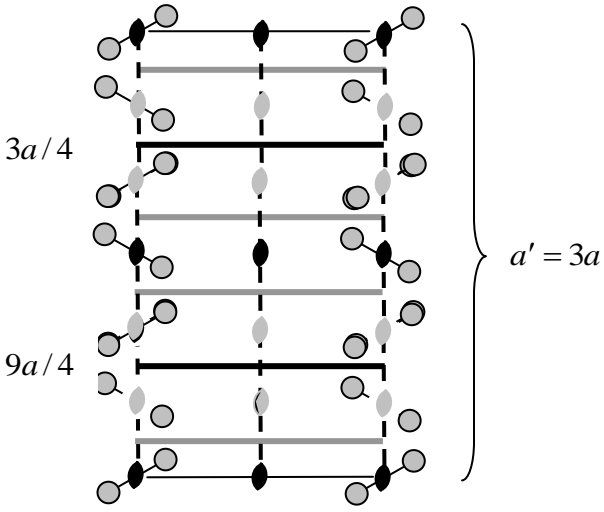
Gruppe: Ausgangs-Struktur $p2mg$	
	Ausgangs-Raumgruppe: $p2mg$
$(x, y) = (1/4, y), (x, y) = (3/4, y)$	Koordinaten der Spiegelebenen
$(x \cdot a, y \cdot b) = ((2n+1) \cdot a/4, y \cdot b)$	Allgemeine Formulierung aller Spiegelebenen $n = 1, 2, \dots, \infty$ mit metrischen Koordinaten
Untergruppe: Struktur $p2mg$ mit verlängerter a -Achse: $a' = 3a$	
	Zellvergrößerung: $a' = 3a, b' = b$

Tabelle 37 Untergruppe zu $p2mg$ mit verlängerter a -Achse, $a' = 3a$. Hellgrau: In der Untergruppe nicht mehr vorhandene Symmetrieelemente

$(x' \cdot a', y' \cdot b') = ((2n' + 1) \cdot a' / 4, y' \cdot b')$	Allgemeine Formulierung aller Spiegelebenen $n = 1, 2, \dots, \infty$ mit metrischen Koordinaten in der verlängerten Zelle
$(x' \cdot 3a, y' \cdot b) = ((2n + 1) \cdot 3a / 4, y' \cdot b)$	Lage der Spiegelebenen in der vergrößerten Elementarzelle
$(2n + 1) \cdot 3a / 4 = (2 \cdot (3n + 1) + 1)a / 4 = (2n' + 1)a / 4$	Diese Spiegelebenen sind in der Ausgangs-Raumgruppe enthalten, sie liegen bei $n' = 3n + 1$, d.h. bei $3a/4, 9a/4, \dots$

Tabelle 38 Koordinaten der Spiegelebenen in der Untergruppe zu $p2mg$ mit $a' = 3a$: Alle Symmetrieelemente der Untergruppe sind in der Gruppe vorhanden

Nicht jede Zellvergrößerung führt zu einer Untergruppe. Bei Verdoppelung der a Gitterkonstanten, z. B., erscheinen Spiegelebenen an Orten, an denen zuvor keine waren: Deshalb stehen die Strukturen $p2mg$ und $p2mg$ mit $a' = 2a$ nicht im Verhältnis von Gruppe zu Untergruppe.

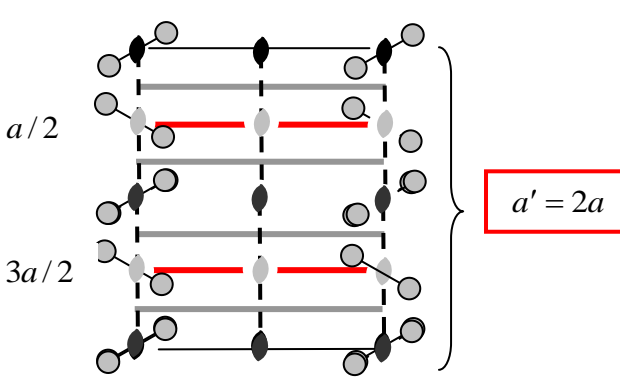
Annahme, Struktur $p2mg$ mit $a' = 2a$ wäre Untergruppe von $p2mg$	
	Zellvergrößerung $a' = 2a$
$(x' \cdot 2a, y' \cdot b) = ((2n + 1) \cdot 2a / 4, y' \cdot b)$	Lage der Spiegelebenen in der vergrößerten Elementarzelle
$(2n + 1) \cdot 2a / 4 = 2 \cdot (2n + 1)a / 4 = (2n' + 1)a / 4$	Diese Spiegelebenen bei $n' = 2n + 1/2$, d.h. bei $a/2, 3a/2, \dots$ sind in der Ausgangsstruktur nicht vorhanden , deshalb ist Struktur $p2mg$ mit $a' = 2a$ keine Untergruppe zu $p2mg$

Tabelle 39 Bei Zellvergrößerung in $p2mg$ auf $a' = 2a$ erreicht man keine Untergruppe zu $p2mg$ mit a , weil vorher nicht vorhandene Symmetrieelemente (rot in der Zeichnung) entstehen.

Alle Strukturen $p2mg$ mit $a' = 3a \cdot n$, $n = 1, 2, \dots, \infty$, führen zu Untergruppen von $p2mg$. Deshalb beschränkt man sich in der Diskussion dieser und anderer Untergruppen auf die Vertreter mit „kleinstem Index“. Diese Untergruppen sind gewissermaßen die nächsten Verwandten zur Ausgangsgruppe. Weil sie die größte Anzahl von Elementen enthalten, heißen sie „maximale Untergruppen“.

In den Internationalen Tabellen sind die Untergruppen nach unterschiedlichen Merkmalen gruppiert, zu jeder sind ihre Generatoren angegeben (vgl. Abbildung 14).

Begriff		Anmerkung
$p = \mathbf{G}' / \mathbf{G} $		„Index“ der Untergruppe
	$ \mathbf{G} , \mathbf{G}' $	Ordnungen der Gruppe \mathbf{G} und der Untergruppe \mathbf{G}'
Untergruppe mit kleinstem Index (<i>Subgroups of lowest index</i>)		Untergruppe mit der größten Anzahl von Elementen (<i>Maximal subgroups</i>)
Generatoren einer Gruppe		Menge von Elementen, die selbst keine Gruppe bilden, aus denen aber durch Multiplikation alle Elemente ei- ner Gruppe erzeugt werden können

Tabelle 40 Index, maximale Untergruppe, Generatoren