

Teil II

Kristallsymmetrie

9 Kristallographische Symmetrie

Der Begriff *Symmetrie* kommt aus dem Griechischen und bedeutet *Ebenmaß*. Im kristallographischen Sinn bedeutet Symmetrie, daß eine starre Bewegung (sog. *Isometrie*) ein Muster mit sich selbst zur Deckung bringt, oder mit anderen Worten, auf sich abbildet.

$$\text{Symmetrieoperation} = \text{Deckoperation}$$

Kristallsymmetrie bedeutet, daß die Kristallstruktur einer Deckoperation unterworfen wird.

9.1 Affine Abbildungen und Isometrien

Mathematisch wird die lineare Abbildung eines Punktes $X \longrightarrow \tilde{X}$ bei festgehaltenem Koordinatensystem durch

$$\tilde{X} = R X + T = (R, T) X \quad (45)$$

beschrieben, wobei wir abkürzend den **Seitzoperator** (R, T) benutzt haben. R ist eine quadratische $n \times n$ -Matrix (*linearer Anteil*) und T eine $n \times 1$ -Spaltenmatrix (*translativer Anteil*). Der Seitzoperator erfüllt die Gruppenaxiome:

1. **Abgeschlossenheit:**

$$(Q, S)(R, T) X = (Q, S)(R X + T) = Q R X + Q T + S = (Q R, Q T + S) X$$

2. Es gibt das **Einselement:**

$$(I, 0)(R, T) = (R, T)(I, 0) = (R, T)$$

3. Es gibt das **inverse Element:**

$$(R, T)(R, T)^{-1} = (R, T)^{-1}(R, T) = (I, 0)$$

4. Das **Assoziativgesetz** gilt, weil es schon für die Matrixmultiplikation und Vektoraddition erfüllt ist.

Die so definierte Verknüpfung ist im allgemeinen nicht kommutativ. Den zu (R, T) inversen Operator findet man wie folgt:

$$\begin{aligned} (Q, S)(R, T) &= (I, 0) \\ (Q R, Q T + S) &= (I, 0) \\ \implies Q &= R^{-1} \quad ; \quad S = -R^{-1}T \\ \implies (R, T)^{-1} &= (R^{-1}, -R^{-1}T) \end{aligned} \quad (46)$$

Die inverse Abbildung existiert nur, wenn R eine reguläre Matrix ist. Das bedeutet, daß $\det R \neq 0$, d.h. die Spaltenvektoren von R sind linear unabhängig.

Die Länge eines Vektors (s. Gl. (9) und (14)) ändert sich nicht unter einer Symmetrieoperation $\tilde{X} = RX$. Weil es sich um eine starre Bewegung handelt, gilt

$$|\mathbf{x}|^2 = \tilde{X}^t G \tilde{X} = X^t R^t G R X,$$

folglich ist $R^t G R = G$. Wenn wir davon die Determinante bilden, finden wir, daß (R, T) nur dann eine Isometrie sein kann, wenn $|\det(R)| = 1$. Für $\det(R) = +1$ ist das eine Drehung, für $\det(R) = -1$ eine Drehinversion (oder Drehspiegelung).

9.2 Symmetrieoperationen in Translationsgittern

Ein Kristall zeichnet sich durch die Anordnung seiner Materie (Atome, Ionen, Moleküle) auf einem Gitter aus, was Translationssymmetrie impliziert.

9.2.1 Translationssymmetrie

Grundsätzlich lassen sich immer drei linear unabhängige *Translationsvektoren* \mathbf{t}_j finden, für die alle Linearkombinationen mit **ganzzahligen** Komponenten die Kristallbausteine wieder zur Deckung bringen. Jede Linearkombination von Translationsvektoren der Form

$$\mathbf{t}_n = \sum_{j=1}^m n_j \mathbf{t}_j; \quad j = 1, 2, \dots, m; \quad n_j, \in Z \quad (47)$$

ist wieder eine Gittertranslation.

Die Endpunkte aller Translationsvektoren $\mathbf{T}_n = \{\mathbf{t}_n\}$ bilden ein (Translations-)Gitter.

Für einen unendlich ausgedehnt gedachten Kristall bilden alle Gittertranslationen die Kristallstruktur wieder auf sich ab. Gittertranslationen sind Deckoperationen und daher auch Symmetrieoperationen.

Die Menge aller Translationsvektoren einer Kristallstruktur beschreibt die Translationssymmetrie dieser Struktur.

9.2.2 Translationengruppe

Der Vektor T der Operation (R, T) lässt sich immer als Summe $T = T_n + T'$ aus einer Gittertranslation T_n und einer Verschiebung T' schreiben, die keine Gittertranslation ist. Die Menge aller Gittertranslationen $\{t_n\}$ bildet (bezüglich der Vektoraddition) eine Gruppe:

Die Gruppe $\mathbf{T}_n = \{(I, T_n)\}$ heißt die Translationengruppe einer Kristallstruktur.

die Ordnung der Translationengruppe ist unendlich: $|\mathbf{T}_n| = \infty$.

In Gittern muß $T' = 0$ sein, weil im Translationsgitter nur reine Gittertranslationen T_n möglich sind. In Kristallstrukturen hingegen kann T' durchaus von Null verschieden sein (s.u., Abschnitt 9.5).

9.2.3 Symmetrieoperationen in Gittern

Die Operation (R, T) lässt sich in die Nacheinanderausführung einer Drehung oder Drehinversion und einer Translation zerlegen:

$$(I, T_n)(R, T) = (R, T_n + T) \quad (48)$$

$$(R, T)(I, T_n) = (R, RT_n + T) \quad (49)$$

Damit die Symmetrieoperationen einer Kristallstruktur eine Gruppe – nämlich die *Raumgruppe* der Struktur – bilden, muß $RT_n = \tilde{T}_n$ wieder ein Gittervektor sein. Daraus folgen Beschränkungen für die in Gittern möglichen Drehmatrizen R :

Es sind nur solche Matrizen R erlaubt, die ein Gitter auf sich selbst abbilden.

Jede dieser im Gitter erlaubten Operationen kann mehrfach nacheinander ausgeführt werden. Gelangt man durch k -fache Ausführung einer Drehoperation zum Ausgangspunkt zurück, dann ist $R^k = I$. Das kleinstmögliche k nennt man *Zähligkeit* des betreffenden Symmetrieelements; sie ist zugleich die *Ordnung* der zugehörigen Symmetrieoperation.

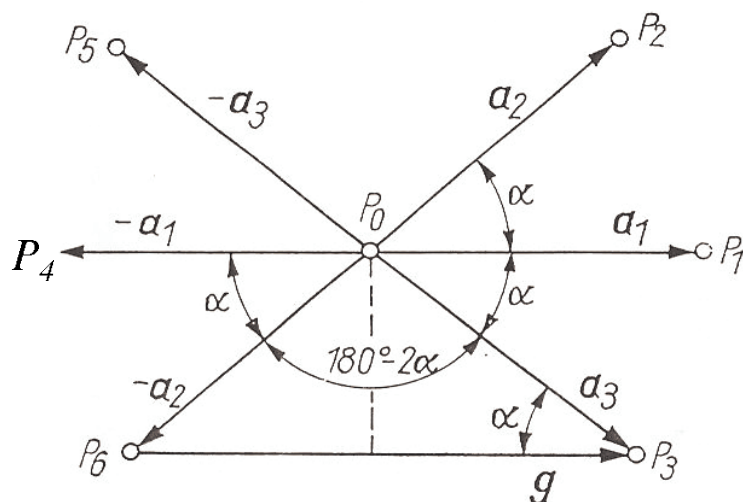


Abbildung 13: Herleitung der im Gitter erlaubten Drehwinkel α .

Der Abstand g zwischen P_3 und P_6 muß ein ganzzahliges Vielfaches einer Gittertranslation a sein: $g = 2a \cos \alpha = na \rightarrow \alpha = 0^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ$ und 180° .

In Gittern gibt es nur 1, 2, 3, 4 und 6-zählige Drehachsen.

Drehoperationen mit Drehwinkeln $\varphi = m \cdot 360^\circ/k$, $m \leq k$ und teilerfremd zu k , werden mit k^m bezeichnet, wobei k die *Zähligkeit* der Drehung angibt. In den IT/A (*International Tables for Crystallography, Vol.A.*) werden für diese Operationen folgende Symbole verwendet:

$$6^+ = 6^1; \quad 6^- = 6^5 = 6^{-1}; \quad 4^+ = 4^1; \quad 4^- = 4^3 = 4^{-1}; \quad (50)$$

$$3^+ = 3^1; \quad 3^- = 3^2 = 3^{-1}; \quad 2; \quad 1$$

Jedes Gitter ist zentrosymmetrisch. Zu jedem Gittervektor \mathbf{t}_n gibt es nämlich den Gegenvektor $-\mathbf{t}_n$. Die entsprechende Abbildung wird durch die Abbildungsmatrix $\bar{I} = (-1)I$ dargestellt. Diese Symmetrieoperation heißt *Inversion* und bedeutet eine Spiegelung an einem

Punkt (dem sog. *Inversionszentrum*). Die Inversionsoperation und das zugehörige Inversionszentrum werden mit dem Symbol $\bar{1}$ („eins quer“) bezeichnet. Inversion impliziert die Bildung eines Spiegelbildes: ein ursprünglich rechtshändiges Objekt wird dadurch linkshändig und umgekehrt.

Folglich sind auch Drehinversionen, das ist eine Kombination von Drehung und anschließender Inversion in eine **einzig**e Operation $\bar{I} \cdot R = (-R)$, ebenfalls Symmetrieoperationen, die im Gitter erlaubt sind. Man bezeichnet sie mit $\bar{6}, \bar{4}, \bar{3}, \bar{2} = m$ (Spiegelebene) und $\bar{1}$ (Inversionszentrum). Die Determinante einer Drehinversions-Operation ist $\det R = -1$.

Mit einem Gitter kompatibel sind die Drehinversionsachsen $\bar{1}, \bar{2} \equiv m, \bar{3}, \bar{4}$ und $\bar{6}$.

Insbesondere ist eine zweizählige Drehinversionsachse $\bar{2} \equiv m$ identisch mit einer Spiegelebene m senkrecht zu dieser Achse. Während die Zähligkeit (Ordnung) von einfachen Drehachsen durch das Symbol 1, 2, 3, 4, 6 gegeben ist, ist die Zähligkeit von $\bar{1}$ und $\bar{2} = m$ zwei, die von $\bar{4}$ vier und die von $\bar{3}$ und $\bar{6}$ sechs.

Anmerkung: In einem zweidimensionalen ebenen Gitter existieren dieselben Drehoperationen 1, 2, 3, 4, 6 wie in dreidimensionalen Gittern. Diese Drehachsen stehen immer senkrecht zur Gitterebene. Von den Drehinversionen bleiben in zwei Dimensionen nur die Operationen $\bar{1} = 2$ und $\bar{2} = m$ (Spiegellinie in der Projektionsebene). Die übrigen werden in der Projektion zu einfachen Drehachsen ($\bar{3} \rightarrow 6, \bar{4} \rightarrow 4, \bar{6} \rightarrow 3$).

9.2.4 Kristallographische Punktgruppen

Drehachsen können in Gittern nicht beliebige Orientierungen haben, weil sie Gittertranslationen wieder auf Gittertranslationen abbilden müssen.

- Parallel zu einer Drehachse liegt immer eine Gittergerade $[uvw]$; durch geeignete Wahl des Ursprungs läßt sich die Gittergerade $[uvw]$ in die Drehachse legen.
- Senkrecht zu einer Drehachse gibt es immer eine Netzebene (hkl); der Ursprung läßt sich grundsätzlich in einen Gitterpunkt der Netzebene legen.
- Die relative Orientierung mehrerer Drehachsen ist nicht beliebig, sondern nur unter bestimmten – mit dem Gitter verträglichen – Winkeln möglich.

Durch geeignete Wahl der kristallographischen Basis läßt sich erreichen, daß Symmetrieachsen entlang den Kanten, Flächen- und Raumdiagonalen der Elementarzelle (oder senkrecht dazu) liegen. Die durch diese Wahl resultierende Elementarzelle muß allerdings nicht mehr primitiv sein (s.u. *Bravaisgitter*, Abschnitt 9.4).

Die Raumdiagonale geht durch eine Ecke der Einheitszelle, an der drei ihrer Begrenzungsflächen zusammenstoßen. Daher sind in der Raumdiagonalen nur die Achsen 3 und $\bar{3}$ möglich. In der Flächendiagonalen kann es nur die Achsen 2 und $\bar{2} \equiv m$ geben. In den Kanten sind alle im Gitter erlaubten Dreh- und Drehinversionsachsen möglich.

Die systematische Kombination kristallographischer Symmetrieelemente in diesen ausgezeichneten Richtungen (s.u. *Blickrichtungen*) gibt insgesamt 32 verschiedene Kombinationen oder *kristallographische Punktgruppen*, wobei die jeweilige Anordnung der Symmetrieelemente zum Teil eine spezielle Metrik der Elementarzelle erfordert (s.u. *Kristallsysteme*).

Die Menge $\mathbf{P} = \{(R, 0)\} = \{R\}$ bildet eine Gruppe: die Punktgruppe \mathbf{P} .

Kristallographische Punktgruppen werden auch als *Kristallklassen* bezeichnet, weil die Punktgruppen der Klassifizierung nach makroskopischen Kristallformen zugrunde liegen.

Symmetrieelemente der kristallographischen Punktgruppen sind die in Gittern erlaubten kristallographischen Symmetrieeoperationen, nämlich Drehungen 1, 2, 3, 4, 6 und Drehinversionen $\bar{1}$, $\bar{2} \equiv m$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$.

Eine kristallographische Punktgruppe enthält nur kristallographische Punktsymmetrieelemente, die sich in einem gemeinsamen Punkt schneiden. Mindestens dieser Schnittpunkt ist unter allen Operationen der Punktgruppe invariant.

Die gegenseitige Lage der Symmetrieelemente einer Punktgruppe ist nicht beliebig. Sie wird dadurch eingeschränkt, daß jede Kombination von zwei Symmetrieeoperationen wieder eine Symmetrieeoperation sein muß, die mit dem Gitter kompatibel ist. Die Menge aller Symmetrieeoperationen muß immer eine Gruppe bilden.

Es gibt 32 dreidimensionale kristallographische Punktgruppen.

Eine n -zählige Drehachse senkrecht zu einer Spiegelebene m schreibt man in der **Hermann-Mauguin Nomenklatur** als n/m (gelesen als „ n über m “); z.B. $2/m$ für eine zweizählige Drehachse senkrecht zu einer Spiegelebene. Liegt die n -zählige Drehachse **in** der Spiegelebene, so schreibt man nm , z.B. $2m$ ($\rightarrow 2mm$, eine weitere Spiegelebene wird erzeugt).

9.2.5 Holoedrien und Kristallsysteme

Kombiniert man die 10 kristallographischen Symmetrieelemente mit einem passenden Gitter, dann werden durch die Gittertranslationen zusätzliche Symmetrieelemente erzeugt und es resultiert eine relativ geringe Anzahl verschiedener Gittersymmetrien oder *Holoedrien*.

Die Punktgruppen der Gittersymmetrien nennt man Holoedrien.

Zunächst einmal sind alle Gitter zentrosymmetrisch, denn zu jedem Gittervektor \mathbf{t} gibt es den Vektor $-\mathbf{t}$. Auf jedem Gitterpunkt (und auch in Mitte zwischen zwei Gitterpunkten) gibt es deshalb Inversionszentren. Hinzufügen eines Inversionszentrums zu den 10 Dreh- und Drehinversionsachsen gibt $\bar{1}$ aus 1 und $\bar{1}$, $2/m$ aus 2 und m , $\bar{3}$ aus 3 und $\bar{3}$, $4/m$ aus 4 und $\bar{4}$, sowie $6/m$ aus 6 und $\bar{6}$. Wiederholt man nun diese 5 Gruppen auf einem Gitter, so findet man die Gittersymmetrien $\bar{1}$ (triklin), $2/m$ (monoklin), $\bar{3}m$ (rhomboedrisch), $4/mmm$ (tetragonal) und $6/mmm$ (hexagonal). Zwei weitere Holoedrien findet man als Sonderfälle des rhomboedrischen bzw. tetragonalen sowie des monoklinen Gitters: macht man in einem rhomboedrischen Gitter $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ oder in einem tetragonalen Gitter $a = b = c$, dann erhält man ein kubisches Gitter der Symmetrie $m\bar{3}m$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ erzeugt aus einem monoklinen Gitter ein orthorhombisches der Symmetrie mmm .

Es gibt 7 Holoedrien, jede mit ihrem eigenen Achsensystem, mit HM-Symbolen: $6/mmm$, $m\bar{3}m$, $\bar{3}m$, $4/mmm$, mmm , $2/m$ und $\bar{1}$.

Diese 7 Holoedrien definieren **7 Kristallsysteme**: hexagonal (h), kubisch (c), trigonal (h,r), tetragonal (t), orthorhombisch (o), monoklin (m) und triklin oder anorthisch (a) mit folgender Metrik:

| Kristallsystem | Holoedrie | Metrik | |
|--------------------|-------------|--|--|
| hexagonal (h) | 6/mmm | $a = b, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ | hexagonale Achsen rhomboedr. Achsen |
| kubisch (c) | $m\bar{3}m$ | $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | |
| trigonal (h) | $\bar{3}m$ | $a = b, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ | |
| trigonal (r) | $\bar{3}m$ | $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma$ | |
| tetragonal (t) | 4/mmm | $a = b, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | „2nd setting“ |
| orthorhombisch (o) | mmm | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | |
| monoklin (m) | 2/m | $\alpha = \gamma = 90^\circ$ | „1st setting“ |
| monoklin (m) | 2/m | $\alpha = \beta = 90^\circ$ | |
| triklin (a) | $\bar{1}$ | keine Beschränkung | |

Die Symbole a, b, c bezeichnen die Längen der drei Basisvektoren \mathbf{a}, \mathbf{b} und \mathbf{c} (oben $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ genannt). Mit α ist der Winkel zwischen \mathbf{b} und \mathbf{c} gemeint, mit β der Winkel zwischen \mathbf{c} und \mathbf{a} und mit γ schließlich der Winkel zwischen \mathbf{a} und \mathbf{b} .

| Kristallsystem | Punktgruppe | Bravaisgitter |
|--------------------|---|-----------------|
| triklin (a) | 1, $\bar{1}$ | P |
| monoklin (m) | 2, m, 2/m | P, C bzw. B |
| orthorhombisch (o) | 222, mm2, mmm | P, A(B,C), I, F |
| tetragonal (t) | 4, $\bar{4}$, 4/m, 422, 4mm, $\bar{4}2m$, 4/mmm | P, I |
| trigonal (h,r) | 3, $\bar{3}$, 32, 3m, $\bar{3}m$ | P, R |
| hexagonal (h) | 6, $\bar{6}$, 6/m, 622, 6mm, $\bar{6}2m$, 6/mmm | P |
| kubisch (c) | 23, $m\bar{3}$, 432, $\bar{4}3m$, $m\bar{3}m$ | P, I, F |

Die kubische und die hexagonale Holoedrie bilden die beiden sog. *Symmetriegipfel*. Alle anderen Holoedrien sind Untergruppen von wenigstens einem dieser beiden Symmetriegipfel. Alle echten Untergruppen der Holoedrien nennt man *Meroedrien*. Typischerweise werden die 32 kristallographischen Punktgruppen nach ihrem Achsensystem in die 7 Kristallsysteme eingeordnet (wie in der obigen Tabelle).

9.3 Blickrichtungen

Punkt- und Raumgruppen werden bezüglich eines kristallographischen Koordinatensystems beschrieben, das aus einer kristallographischen Basis und einem kristallographisch sinnvoll gewählten Ursprung besteht. Der Ursprung wird in der Regel in ein Symmetriezentrum oder einen anderen Punkt hoher Symmetrie gelegt. Vereinbarungsgemäß wird eine *rechtshändige Basis* verwendet. Die Wahl des Koordinatensystems ist allerdings nicht zwingend vorgeschrieben. Sie erfolgt so, daß es der Symmetrie der Gitter und der Raumgruppen möglichst gut angepaßt ist. Die Basisvektoren sollen daher nicht nur Gittervektoren sein, sondern auch in symmetriebegabten Richtungen liegen.

Eine kristallographische Basis mit Basisvektoren in symmetriebegabten Richtungen bezeichnet man als konventionelle kristallographische Basis.

Mit dieser Wahl der Basis wird die Darstellung der Symmetrioperationen besonders einfach, weil Basisvektoren auf andere oder negative oder Summen von Basisvektoren abgebildet werden. Außerdem hängt die Darstellung der Symmetrioperation nicht vom Gittertyp ab. Mit der konventionellen Basis werden außerdem die Metriktensoren besonders einfach, d.h. sie enthalten möglichst wenige unabhängige und von Null verschiedene Koeffizienten.

| Kristallsystem | erste | zweite | dritte | |
|-----------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|---------------|
| | Blickrichtung | | | |
| kubisch | [100] [010] [001] | < 111 > | < 110 > | |
| hexagonal | [001] | [100] [010] [110] | [110] [120] [210] | |
| trigonal | [001] | [100] [010] [110] | | hexag. Achsen |
| trigonal | [111] | [110] [011] [101] | | rhomb. Achsen |
| tetragonal | [001] | [100] [010] | [110] [110] | |
| orthorhombisch | [100] | [010] | [001] | |
| monoklin | [010] | | | „2nd setting“ |
| monoklin | [001] | | | „1st setting“ |
| triklin | keine | | | |

In den beiden Symmetriegipfeln (kubisches und hexagonales System) werden die konventionellen Elementarzellen so gewählt, daß Symmetrieelemente parallel zu den Kanten, den Flächen- und den Raumdiagonalen (letztere nur im kubischen System) oder senkrecht zu diesen Richtungen zu liegen kommen. Da alle anderen Punktgruppen Untergruppen davon sind, bleibt beim Symmetrieabbau die relative Orientierung der verbleibenden Symmetrieelemente erhalten. Es gibt damit maximal drei symmetrisch unabhängige Richtungen (sog. *Blickrichtungen*, englisch: „lattice symmetry directions“); s. folgende Tabelle.

Die **Hermann-Mauguin Nomenklatur** beruht auf diesen Blickrichtungen: Punkt- und Raumgruppen werden mit bis zu drei aufeinanderfolgenden Symbolen beschrieben, wobei jede der drei Stellen eine von maximal drei *Blickrichtungen* bedeutet. Diese Beschreibung ist eindeutig und erlaubt die Erzeugung von Punkt- und Raumgruppen nur aus diesen Symbolen.

9.4 Bravaisgitter

Die verschiedenen erlaubten dreidimensionalen Gittertypen erhält man am schnellsten durch Stapelung zweidimensionaler Netze. Um die in den Netzen vorkommenden Symmetrieelemente zu beizubehalten, muß die Stapelung so erfolgen, daß entsprechende Symmetrieelemente aufeinanderfallen. Andernfalls, wenn schief gestapelt wird, gehen in den resultierenden Gittern Symmetrieelemente verloren.

Es gibt 14 topologisch verschiedene Gittertypen.

Man findet dabei Gitter, die sich zwar in ihrer Topologie unterscheiden, aber doch das gleiche Symmetriegerüst aufweisen und deshalb zur gleichen Holoedrie gehören.

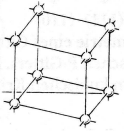
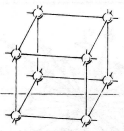
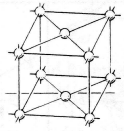
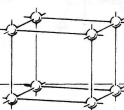
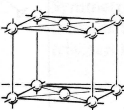
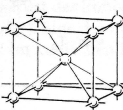
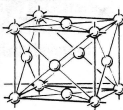
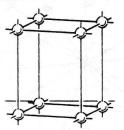
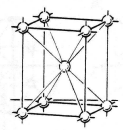
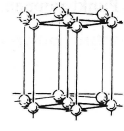
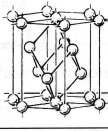
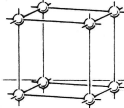
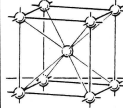
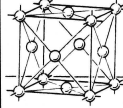
| | P | C | I | F |
|--|---|---|---|---|
| Triklin $a_0 \neq b_0 \neq c_0$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ |  | | | |
| Monoklin $a_0 \neq b_0 \neq c_0$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta > 90^\circ$ |  |  | | |
| Orthorhombisch $a_0 \neq b_0 \neq c_0$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |  |  |  |  |
| Tetragonal $a_0 = b_0 \neq c_0$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |  | |  | |
| Trigonal $a_0 = b_0 \neq c_0$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$ |  |  | | |
| Hexagonal $a_0 = b_0 \neq c_0$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$ | | | | |
| Kubisch $a_0 = b_0 = c_0$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |  | |  |  |

Abbildung 14: Die 14 konventionellen Bravaisgitter (nach Kristallsystemen sortiert).

In einer konventionellen Basis sind die erhaltenen Gitter nicht immer primitiv, sondern es entstehen durch diese spezielle Basiswahl auch **zentrierte Gitter**, die Gittervektoren mit rationalen Koeffizienten haben. Für jedes der zentrierten Gitter läßt sich eine primitive Basis finden, deren Basisvektoren jedoch nicht mehr alle in symmetriebegabten Richtungen liegen.

Die unendliche Menge aller möglichen Gitter teilt man in 14 Klassen ein, die Bravais-Gitter oder Bravais-Typen genannt werden.

Die konventionell zentrierten Gitter haben folgende zentrierende Gittervektoren und Bezeichnungen:

$$\begin{aligned}
 \text{A: } & 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; & \text{B: } & \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; & \text{C: } & \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; & \text{I: } & \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\
 \text{F: } & 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; & & \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; & & \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; & \text{R: } & \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}; & & \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{2}{3}
 \end{aligned}$$

Die hier gewählte Aufstellung des R-Gitters wird als *obverse* Aufstellung bezeichnet; die alternative *reverse* Aufstellung des R-Gitters hat Zentrierungen in $1/3, 2/3, 1/3$ und $2/3, 1/3, 2/3$. Primitive Gitter erhalten das Symbol P.

Es gibt die folgenden Bravaisgitter:

$$aP, mP, mC, oP, oA(B,C), oI, oF, tP, tI, hP, (hR, rR), cP, cI, cF .$$

hR und rR beziehen sich auf das R-Gitter in hexagonaler (h) bzw. rhomboedrischer (r) Aufstellung.

9.5 Symmetrieeoperationen in Kristallstrukturen

Die gefundenen zehn Dreh- und Drehinversionsachsen sind Symmetrieelemente, die in Gittern vorkommen können. Das sind jedoch noch nicht alle Symmetrieeoperationen, die in **Kristallstrukturen** auftreten können, wo zum Gitter noch die Atome der Struktur hinzukommen. Durch das Hinzufügen von Materie zum Gitter kann (a) die Punktgruppe des Kristalls eine Untergruppe der Holoedrie werden und (b) können in Kristallstrukturen Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen auftreten, die in Gittern allein nicht möglich sind.

Als weitere Deckoperationen (starre Bewegungen) können nämlich Kombinationen von Drehungen oder Drehinversionen mit Translationen auftreten, die nicht Gittertranslationen \mathbf{t}_n sind, aber nicht in Widerspruch zur Translationsymmetrie stehen dürfen. Wendet man eine Operation (R, T) k -mal an (k ist die Ordnung oder Zähligkeit von R), so hat man bezüglich des rotativen Anteils R eine identische Abbildung ausgeführt (d.h. $R^k = I$). Insgesamt kann sich dabei die Kristallstruktur (bzw. ihre Atome) nur um einen Gittervektor verschoben haben.

Der Anteil T' von $T = T_n + T'$ muss mit dem Gitter verträglich sein. Wenn k die Ordnung der Drehmatrix R ist, muß gelten:

$$(R, T)^k = (R^k, (R^{k-1} + \dots + R + I)T) = (I, \tilde{T}_n) \Rightarrow \sum_{j=0}^{k-1} R^j T = \tilde{T}_n$$

Diese Bedingung führt zu Einschränkungen für mögliche Translationen T' , die sich aus der Bedingung:

$$T_n = \sum_{j=0}^{k-1} R^j T'; \quad \text{mit } R^0 = I \quad (51)$$

ergeben. Die rechte Seite von (51) ist für die Drehinversionen $\bar{1}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ gleich Null. Für diese Operationen treten folglich keine neuen Kombinationen auf. Es bleiben Drehachsen und Spiegelebenen in der Diskussion. Für diese zerlegen wir den Vektor T' in einen senkrechten und einen parallelen Anteil bezüglich der Drehachse bzw. Spiegelebene:

$$T' = T_{\perp} + T_{\parallel} \quad (52)$$

Die Summe in (51) wird mit T_{\perp} allein ebenfalls Null. Folglich bleiben nur Translationsanteile T_{\parallel} übrig, die in Drehachsen bzw. Spiegelebenen liegen. Derartige Translationsanteile T_{\parallel} sind

jedoch invariant unter R^j , d.h. durch Mehrfachausführung werden sie einfach nur vervielfacht. Daraus folgt:

$$R^j T_{\parallel} = T_{\parallel} \implies \tilde{T}_n = \sum_{j=0}^{k-1} R^j T_{\parallel} = k T_{\parallel}; \quad (53)$$

$$\text{d.h. } T_{\parallel} = \frac{\tilde{T}_n}{k} \implies T_{\parallel} = \frac{m}{k} T_{n0} \quad \text{mit } 0 < m < k \quad (54)$$

T_n ist ein Vielfaches m der kürzesten Translationsperiode T_{n0} in Richtung der Drehachse bzw. Spiegelebene. Folglich können Translationen, die ganzzahlige Bruchteile von Gittervektoren sind, mit Drehachsen und Spiegelebenen so kombiniert werden, daß dabei die Translations-symmetrie des Gitters nicht verletzt wird. Man bezeichnet diese Symmetrieeoperationen als Schraubung bzw. Gleitspiegelung und die dazugehörigen Symmetrieelemente als Schraubenachsen bzw. Gleitspiegelebenen.

Durch Zerlegung von T' in je eine Komponente parallel und senkrecht zur Drehachse folgt:

- T' lässt sich nach $T' = T_{\parallel} + T_{\perp}$ in einen *Kennanteil* T_{\parallel} (parallel zur Drehachse) und in einen *Lageanteil* T_{\perp} (senkrecht zur Drehachse) zerlegen.
- $T_{\parallel} = T_n/k$ beschreibt eine *Gleitkomponente* entlang einer Drehachse oder parallel zu einer Spiegelebene.
- $T_{\perp} \neq 0$ bedeutet, daß das Symmetrieelement nicht im Ursprung liegt.

Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen sind nur in Kristallstrukturen, nicht aber in Punktgittern möglich.

(a) Schraubenachsen

In Kristallstrukturen können folgende Schraubenachsen k_m mit den Gleitanteilen $T_{\parallel} = m/k$ auftreten:

$$2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5.$$

Die dazu gehörigen Symmetrieeoperationen (Schraubungen) sind k_m^+ und k_m^- . Die in den IT/A angegebenen Schraubkomponenten T_{\parallel} betragen m/k bzw. $1 - m/k$. (Anmerkung: $4_1^2 \equiv 2_1$; $4_2^2 \equiv 2$; $6_2^2 \equiv 3_2^+$; $6_3^3 \equiv 2_1$; $6_4^2 \equiv 3_1^+$; $6_4^5 \equiv 6_4^-$.)

(b) Gleitspiegelebenen

Gleitspiegelebenen werden mit kleinen Buchstaben nach Richtung und Länge ihrer Gleitkomponenten bezeichnet: a, b, c sind Gleitspiegelebenen mit Gleitkomponenten $\frac{1}{2}$ in Richtung der Basisvektoren. n bzw. d haben flächen- oder raumdiagonale Gleitkomponenten $\frac{1}{2}$ bzw. $\frac{1}{4}$ oder $\frac{3}{4}$; d-Gleitspiegelebenen existiert nur in zentrierten Einheitszellen.³

Gleitspiegellinien der Ebenengruppen werden mit dem Symbol g bezeichnet.

³Die Bezeichnung d kommt von den Gleitspiegelebenen der Diamantstruktur.

| Gleitspiegelung | T_{\parallel} |
|----------------------------------|--|
| c[100], c[010], c[1 $\bar{1}$ 0] | 0 0 $\frac{1}{2}$ |
| a[010], a[001] | $\frac{1}{2}$ 0 0 |
| b[100], b[001] | 0 $\frac{1}{2}$ 0 |
| n[100] | 0 $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ |
| n[010] | $\frac{1}{2}$ 0 $\frac{1}{2}$ |
| n[001] | $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ 0 |
| n[1 $\bar{1}$ 0] | $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ |
| d[100] | 0 $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ |
| d[010] | $\frac{1}{4}$ 0 $\frac{1}{4}$ |
| d[001] | $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ 0 |
| d[110] | $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ |
| d[1 $\bar{1}$ 0] | $-\frac{1}{4}$ $\frac{1}{4}$ $\frac{3}{4}$ |

Die obigen Symbole definieren nur die Gleitrichtung T_{\parallel} . Die Orientierung der Gleitspiegelebene ergibt sich eindeutig aus der Position im HM-Symbol.

9.6 Fixpunkte von Symmetrielementen

Punkte X_F , die bei einer Abbildung invariant bleiben, also auf sich selbst abgebildet werden, nennt man *Fixpunkte* dieser Abbildung. Fixpunktgebilde oder Fixpunktmenge sind die Drehachsen, Spiegelebenen und Inversionszentren selbst. Die Fixpunkte der affinen Abbildung

$$\tilde{X}_F = R X_F + T \quad (55)$$

erhält aus der Bedingung $\tilde{X}_F = X_F$ als

$$X_F = R X_F + T; \quad \implies \quad (I - R) X_F = T \quad (56)$$

(a) Kennanteil

Für Schraubungen und Gleitspiegelungen hat diese Gleichung keine Lösung, weil der Translationsanteil T_{\parallel} immer eine Verschiebung bewirkt und deshalb kein Punkt fest liegen bleibt. Der Schraub- bzw. Gleitanteil T_{\parallel} kennzeichnet die Schraubenachsen bzw. Gleitspiegelebenen. T_{\parallel} wird deswegen auch *Gleit-* oder *Kennanteil* genannt.

(b) Lageanteil

Der senkrechte Anteil T_{\perp} bestimmt die Lage der Fixpunktmenge $X_{F\perp}$ im gewählten Bezugssystem. Aus (56) folgt

$$X_{F\perp} = R X_{F\perp} + T_{\perp}; \quad T_{\perp} = (I - R) X_{F\perp}. \quad (57)$$

Die Verschiebung einer Dreh- oder Schraubenachse, Spiegel- oder Gleitspiegelebene aus dem Ursprung um $X_{F\perp}$ erzeugt in der Spaltenmatrix T einen sog. *Lageanteil* T_{\perp} .

9.7 Raumgruppen

Eine vollständige Herleitung der 230 Raumgruppentypen erfolgte etwa zeitgleich und unabhängig voneinander durch FEDOROV 1890, SCHOENFLIES 1891 und BARLOW 1894. Der translationsperiodische Aufbau der Kristalle wurde jedoch erst 20 Jahre später durch Röntgenbeugungsaufnahmen von LAUE, FRIEDRICH und KNIPPING nachgewiesen. Aufgrund von Symmetriebetrachtungen an makroskopischen Kristallen hatte man deren gitterhaften Aufbau schon lange vorher vermutet.

Die Menge aller Symmetrieeoperationen $\mathbf{G} = \{(R, T)\}$ einer ebenen Kristallstruktur bildet eine Ebenengruppe.

Die Menge aller Symmetrieeoperationen $\mathbf{G} = \{(R, T)\}$ einer 3-dimensionalen Kristallstruktur bildet eine Raumgruppe.

Mögliche Symmetrieelemente in Raumgruppen sind neben den Gittertranslationen die kristallographischen Dreh- und Drehinversionsachsen sowie Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen. Wegen der Translationssymmetrie ist die Ordnung $|\mathbf{G}|$ der Raumgruppe immer unendlich.

Die Translationengruppe \mathbf{T} ist eine Untergruppe der Raumgruppe \mathbf{G} .

Für die trikline Raumgruppe P1 gibt es außer den Gittertranslationen \mathbf{T} keine weiteren Symmetrieeoperationen. Für alle anderen Raumgruppen ist die Translationengruppe \mathbf{T} eine echte Untergruppe $\mathbf{T} < \mathbf{G}$.

*Die Translationengruppe \mathbf{T} ist ein Normalteiler der Raumgruppe \mathbf{G} .
Die Faktorgruppe \mathbf{G} / \mathbf{T} ist isomorph zur Punktgruppe \mathbf{P} .*

Die Ordnung dieser Faktorgruppe ist endlich; sie ist gleich der Ordnung $|\mathbf{P}|$ der Punktgruppe \mathbf{P} der Raumgruppe \mathbf{G} (s. Anhang).

Es gibt zwei Typen von Raumgruppen: symmorph und nicht-symmorph Raumgruppen. Die ersteren erhält man aus Punktgruppe und Gitter, die letzteren erfordern zu ihrer Erzeugung translationshaltige Symmetrieelemente (Schraubenachsen und/oder Gleitspiegelebenen).

a) Symmorph Raumgruppen:

Wiederholung des Symmetriegerüsts einer kristallographischen Punktgruppe $\mathbf{P} = \{(R, 0)\}$ auf den Punkten eines (zur Symmetrie passenden) Translationsgitters führt zur Klasse der *symmorphen Raumgruppen*.

Das Produkt zwischen Translationengruppe \mathbf{T} und Punktgruppe \mathbf{P} erzeugt eine symmorph Raumgruppe.

Es gibt 13 symmorph Ebenengruppen und 73 symmorph Raumgruppen.

Wählt man den Nullpunkt im Fixpunkt des Symmetriegerüsts der Punktgruppe, dann bilden die Operationen $\{(R, 0)\}$ eine Untergruppe der erhaltenen Raumgruppe. Wenn der Ursprung

nicht im Fixpunkt der Punktgruppe liegt, dann tritt ein Lageanteil T_{\perp} bezüglich des Fixpunktes auf und die Untergruppe ist dann $\{(R, T_{\perp})\}$.

Dieser einfache Zusammenhang zwischen Punktgruppe und Raumgruppe findet sich auch im Hermann-Mauguin Symbol symmorpher Raumgruppen: das **Hermann-Mauguin Symbol** symmorpher Raumgruppen besteht immer aus dem Symbol des Bravaisgitters und einem Punktgruppensymbol.

In symmorphen Raumgruppen gibt es Punkte mit der vollen Symmetrie der Punktgruppe der Raumgruppe.

Im Symbol symmorpher Raumgruppen erscheinen keine Schraubenachsen oder Gleitspiegelebenen. Trotzdem können auch in symmorphen Raumgruppen solche Elemente vorhanden sein. Sie sind jedoch nie als erzeugende Operationen erforderlich.

Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen können in symmorphen Raumgruppen dann auftreten, wenn das Gitter zentriert ist oder wenn Drehachsen oder Spiegelebenen nicht parallel oder senkrecht zu den Elementarzellkanten liegen. In beiden Fällen lassen sich nämlich Gittertranslationen in einen Kennanteil T_{\parallel} und einen Lageanteil T_{\perp} zerlegen, was neben einem Lageanteil auch eine Gleitkomponente erzeugt.

b) Nicht-Symmorphe Raumgruppen:

Die **symmorphen** Raumgruppen sind dadurch ausgezeichnet, daß durch Wahl des Nullpunktes im Fixpunkt des Punktgruppen-Symmetriegerüsts als Repräsentanten für die Nebenklassen des Translationen-Normalteilers reine Punktgruppen-Operationen $(R, 0)$ gewählt werden können. Die Erweiterung auf **nichtsymmorphe** Raumgruppen kann so geschehen, daß man die Drehungen und Spiegelungen der Punktgruppen (in der Ebene nur die Spiegelgeraden) $(R, 0)$ systematisch durch Schraubungen und Gleitspiegelungen $(R, T_{\parallel} + T_{\perp})$ ersetzt, wobei sich nun nicht mehr alle Symmetrieelemente in einem Punkt schneiden müssen ($T_{\perp} \neq 0$).

In nicht-symmorphen Raumgruppen gibt es keine Punkte mit der vollen Symmetrie der Punktgruppe der Raumgruppe.

Das **Hermann-Mauguin Symbol** nicht-symmorpher Raumgruppen enthält immer wenigstens das Symbol einer Schraubenachse oder Geitspiegelebene. Auf das Symbol des Bravaisgitters folgt deshalb *kein* Punktgruppensymbol.

10 Beschreibung der Raumgruppen in IT Vol.A

Die Symmetrieoperationen einer Raumgruppe werden in den *International Tables A* auf drei verschiedene Weisen dargestellt:

1. durch ein oder mehrere Diagramme des Symmetriegerüsts;
2. durch ein Diagramm der Punkte der allgemeinen Punktlage;
3. durch Angabe der Koordinatentripel der allgemeinen Punktlage.

10.1 Diagramme

Im allgemeinen findet man zwei Diagramme, die jeweils orthogonale Projektionen einer Elementarzelle und ihrer unmittelbaren Umgebung auf die ab -Ebene darstellen: links ein Diagramm des Symmetriegerüsts, rechts ein Diagramm der Punkte eines Orbits allgemeiner Lage. Der Ursprung liegt normalerweise in der linken oberen Ecke; die \mathbf{a} -Achse weist nach unten, die \mathbf{b} -Achse horizontal nach rechts.

Die Symmetriegerüste trikliner, monokliner und orthorhombischer Raumgruppen sind durch drei Projektionen entlang den Achsen \mathbf{a} , \mathbf{b} und \mathbf{c} beschrieben. Monokline Raumgruppen sind außerdem noch in erster und zweiter Aufstellung („1st“ bzw. „2nd setting“) angegeben. Wenn es in der Ebene senkrecht zur Hauptachse einen Zentrierungsvektor oder eine Gleitkomponente gibt, werden drei verschiedene Zellwahlen (*cell choices*) unterschieden. Trigonale Raumgruppen mit R-Gittern werden sowohl in hexagonalen als auch in rhomboedrischen Achsen behandelt. Für kubische Raumgruppen mit F-Gitter ist nur $1/4$ der Elementarzelle graphisch dargestellt.

a) Diagramm des Symmetriegerüsts

Die Symmetriegerüste sind mit Hilfe von Symbolen beschrieben, die in IT A, Section 1.4 näher beschrieben sind. Art und Orientierung von Drehachsen und Ebenen geht aus dem graphischen Symbol hervor. Die Höhe von Inversionszentren oder horizontal liegenden Achsen und Ebenen ist als Bruch an das betreffende Element geschrieben, sofern sie von Null verschieden ist.

b) Diagramm der allgemeinen Punktlage

Für die allgemeine Punktlage gibt es jeweils nur ein Diagramm in der oben beschriebenen Standardorientierung (mit dem Ursprung in der linken oberen Ecke). Die Zellumrisse sind mit dünnen Linien eingezeichnet; zusätzlich noch die Linien durch $x, 1/2$ und $1/2, y$.

Der Ausgangspunkt x, y, z der allgemeinen Lage liegt im Innern der Zelle etwas oberhalb der Papierebene, was durch das Symbol '+' (für $+z$) angedeutet ist. Eingetragen sind die äquivalenten Punkte innerhalb und in der unmittelbaren Umgebung der Zelle; ggf. sind Höhenangaben wie $1/2+$ (für $1/2 + z$) an die Punkte geschrieben. Die Punkte des Orbits sind als kleine Kreise dargestellt; Punkte, die durch Inversionsoperationen aus dem Ausgangspunkt entstehen – also ein Spiegelbild darstellen – erhalten zusätzlich ein Komma im Zentrum des Kreises. Falls zwei Punkte aufeinander projizieren, ist der Kreis durch einen Vertikalstrich halbiert; beide Hälften erhalten ggf. noch Höhenangaben.

Die Diagramme der kubischen Raumgruppen enthalten Stereogramme, in denen Punktkonfigurationen um den Ursprung (und symmetrisch äquivalente Punkte) durch Verbindungslinien hervorgehoben sind.

10.2 Symmetrieoperationen

Unterhalb der Diagramme gibt es den Block **Symmetry Operations**, der die zur allgemeinen Punktlage gehörenden Symmetrieoperationen beschreibt. Dieser Eintrag enthält folgende Daten:

1. Die Nummer (n) der Symmetrieoperation und des zugehörigen Koordinatentripels.
2. Das Hermann-Mauguin Symbol der Symmetrieoperation. Der Drehsinn wird mit $+$ oder $-$ gekennzeichnet, z.B. 3^+ , 3^- . Eine etwaige Gleitkomponente \mathbf{T}_{\parallel} wird in Klammern angehängt, z.B. $n(1/2, 0, 1/2)$.
3. Die Position des Symmetrieelements, sofern es nicht im Ursprung liegt, z.B. $0,1/4,1/4$ oder $0,y,0$ oder $x,y,1/4$.

Raumgruppen mit zentrierten Gittern haben mehr als einen Block, je einen für $0,0,0$ und für jeden Zentrierungsvektor, der jeweils über dem Block steht.

10.3 Punktlagen

Unter **Positions** sind auf der rechten Tabellenseite die Koordinatentripel der allgemeinen und (soweit vorhanden) speziellen Lagen aufgeführt. Die Tripel der allgemeinen Punktlage sind eine Art Kurzschrift für ein Repräsentantensystem der Nebenklassenzerlegung der Raumgruppe nach ihren Translationen. Die Reihenfolge der Koordinatentripel allgemeiner Lage entspricht der Reihenfolge der Symmetrieoperationen unter dem Eintrag **Symmetry Operations**. Angegeben sind:

1. Zähligkeit (Multiplizität) der Punktlage.
2. Wyckoff-Symbol (beginnend mit a für die höchstsymmetrische Lage).
3. Orientiertes Hermann-Mauguin Symbol der Lagesymmetrie.
4. Koordinatentripel symmetrisch äquivalenter Punkte der betreffenden Lage.

Die Multiplizität der allgemeinen Punktlage ist das Produkt aus der Ordnung der Kristallklasse und der Anzahl der Zentrierungsvektoren, für spezielle Lagen noch dividiert durch die Ordnung der Lagesymmetriegruppe.

10.4 Untergruppen

Nach HERMANN sind maximale Untergruppen der Raumgruppen entweder translationen- oder klassengleich. Die Klassifizierung der maximalen Untergruppen von Raumgruppen erfolgt daher nach folgendem Schema:

Typ I: *Translationengleiche* maximale Untergruppen. Alle Translationen bleiben erhalten, aber es fallen ganze Nebenklassen weg; die Punktgruppe wird verkleinert.

Typ II: *Klassengleiche* maximale Untergruppen. Die Punktgruppe bleibt erhalten, aber es fallen Translationen weg.

- a) Die konventionelle Zelle bleibt gleich; es entfallen nur zentrierende Operationen.
- b) Die konventionelle Zelle wird vergrößert.
- c) Die Untergruppe gehört zum gleichen (affinen) Raumgruppentyp.

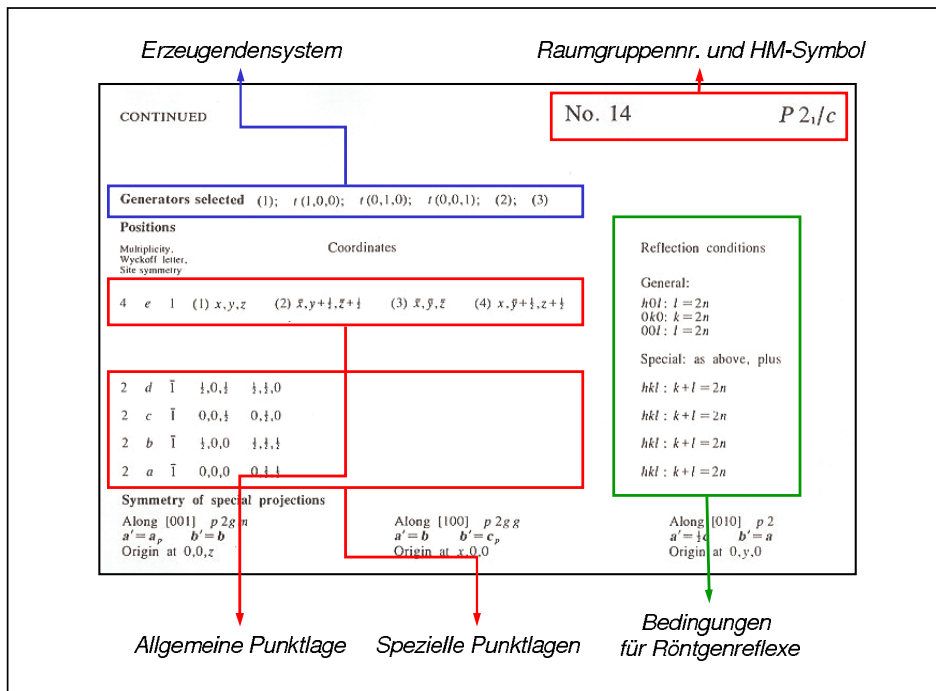
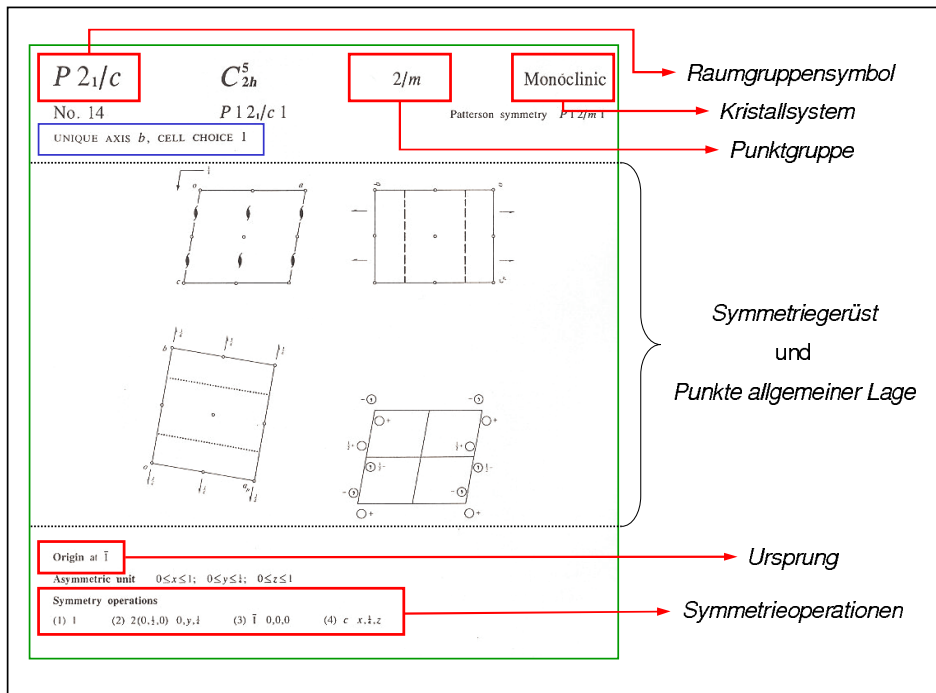


Abbildung 15: Raumgruppe $P2_1/c$ (2nd Setting) aus den IT Vol. A (oben: erste Seite, unten: obere Hälfte der zweiten Seite).

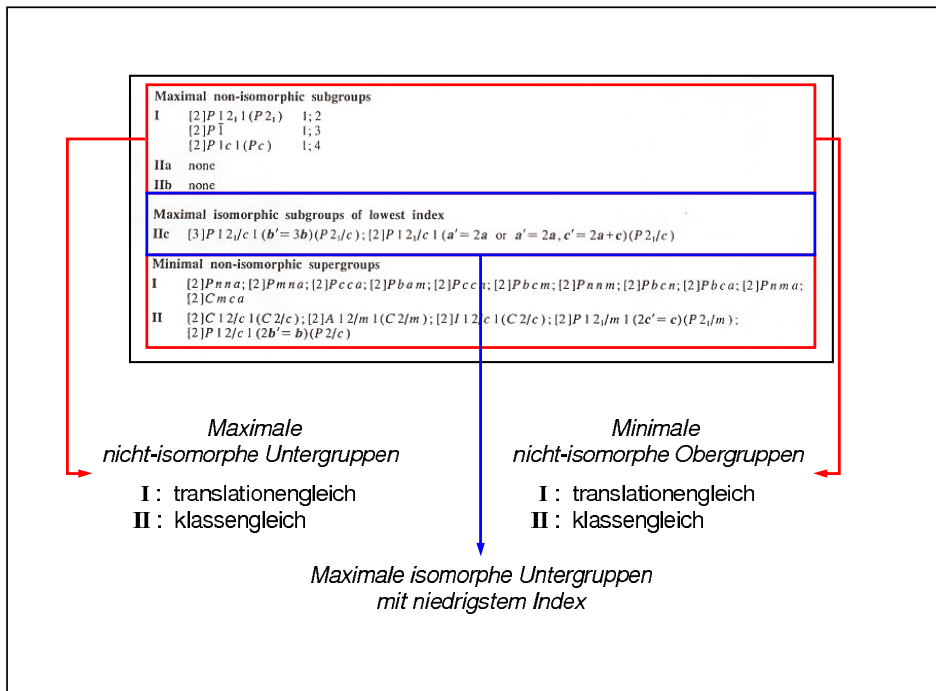


Abbildung 16: Raumgruppe $P2_1/c$ (2nd Setting) aus den IT Vol. A
(Fortsetzung: untere Hälfte der zweiten Seite).

11 Symmetrie makroskopischer Kristallpolyeder

11.1 Makroskopische Kristallsymmetrie

Unter der Punktsymmetrieoperation $\tilde{X} = RX$ transformieren die Komponenten des Produkts $\tilde{H}\tilde{X}$ nach

$$\begin{aligned}\tilde{H}\tilde{X} &= \tilde{H}(RX) = (\tilde{H}R)X = HX \quad \text{d.h.} \\ \tilde{H}R &= H \quad \implies \quad \tilde{H} = HR^{-1}.\end{aligned}$$

Millersche Indizes (hkl) transformieren also mit der inversen Operation R^{-1} . Wenn R alle Symmetrieoperationen der Punktgruppe $\mathbf{P} = \{R\}$ durchläuft, dann durchläuft $\{R^{-1}\}$ ebenfalls alle Elemente von \mathbf{P} , nur in einer anderen Reihenfolge. Die Symmetrie sowohl des reziproken Raums als auch die aller Flächennormalen (hkl) folgt daher der Symmetrie der Punktgruppe \mathbf{P} .⁴

- Die Menge aller Isometrien, die einen *idealen* Kristallpolyeder auf sich abbilden, nennt man die *Symmetrie* dieses Polyeders.
- Unter dieser Symmetrie werden *äquivalente* Flächen bzw. die dazugehörigen Flächennormalen aufeinander transformiert.
- Alle Symmetrieoperationen lassen wenigstens den Schwerpunkt fest; wählt man diesen als Ursprung, dann werden alle Symmetrieoperationen durch Seitzoperatoren der Form $(R, 0)$ dargestellt.
- Die Symmetrie des Kristalls bildet eine endliche Gruppe, nämlich die *Punktgruppe* (oder *Kristallklasse*) des Kristalls.
- Zwei Kristalle gehören zur gleichen Punktgruppe, wenn nach Wahl geeigneter Basissysteme ihre Matrixgruppen $\{(R, 0)\}$ übereinstimmen.

11.2 Kristallformen (äquivalente Flächen)

Die Menge symmetrisch äquivalenter Kristallflächen, die durch die Symmetrieoperationen der Punktgruppe aus einer Fläche (hkl) erzeugt werden, nennt man eine Form und schreibt dafür abkürzend $\{hkl\}$.

- Die Anzahl symmetrisch äquivalenter Flächen einer Form heißt ihre *Multiplizität* oder *Flächenhäufigkeit*.
- Eine Form, die ein geschlossenes Polyeder darstellt nennt man eine *geschlossene Form*. Andernfalls spricht man von einer *offenen Form*.

Geschlossene Formen im kubischen System sind z.B. die Formen $\{100\}$ (Würfel), $\{111\}$ (Oktaeder oder Tetraeder) oder $\{110\}$ (Rhombendodekaeder). Eine offene Form wäre $\{100\}$ im triklinen System (paralleles Flächenpaar in $\bar{1}$, sog. Pinakoid).

⁴Die Symmetrie des ideal gewachsenen Kristalls zeigt sich – besser als an seinen Flächen – an dem Bündel seiner Flächennormalen, weil dieses gegen Wachstumsstörungen unempfindlich ist.

11.3 Äquivalente Zonen

Die Menge symmetrisch äquivalenter Richtungen (Kristallkanten oder Zonenachsen), die durch Symmetrioperationen der Punktgruppe aus einer Gitterrichtung $[uvw]$ erzeugt werden, schreibt man abkürzend $\langle uvw \rangle$.

11.4 Flächenlagen und Flächensymmetrie

- Die Menge der Symmetrioperationen der Punktgruppe \mathbf{P} , die eine Fläche fest lassen, nennt man die *Flächensymmetrie* oder auch *Lagesymmetrie* dieser Fläche.
- Die Flächensymmetrie ist immer eine Untergruppe $\mathbf{S} \leq \mathbf{P}$ der Punktgruppe \mathbf{P} .
- Die Ordnung der Untergruppe \mathbf{S} ist ein Teiler der Ordnung von \mathbf{P} . Die *Flächenhäufigkeit* (Anzahl äquivalenter Flächen der Form $\{hkl\}$) ist gleich dem Index $i = |\mathbf{P}| / |\mathbf{S}|$.
- Enthält die Untergruppe \mathbf{S} nur das Einselement, $\mathbf{S} = \{e\}$, dann spricht man von einer Fläche *allgemeiner Lage*, andernfalls von einer Fläche *spezieller Lage*.
- Eine Menge äquivalenter Kristallflächen der Flächensymmetrie 1 nennt man eine *allgemeine Form*.
- Eine Menge äquivalenter Kristallflächen mit Flächensymmetrie größer als 1 nennt man eine *spezielle Form*. Die Flächennormalen solcher Flächen liegen auf wenigstens einem Symmetrieelement (Dreh- oder Drehinversionsachse; $m \equiv \bar{2}!$).
- Die Gesamtheit der an einem Kristall auftretenden Formen nennt man seine *Tracht*.

Die allgemeine Form enthält die maximal mögliche Flächenzahl $|\mathbf{P}|$ mit der Flächensymmetrie 1. Spezielle Formen haben weniger als $|\mathbf{P}|$ Flächen mit einer Symmetrie größer als 1.

In der kubischen Punktgruppe $m\bar{3}m$ ist beispielsweise die allgemeine Form $\{hkl\}$ ein Hexakisoktaeder mit 48 Flächen; spezielle Formen sind der Würfel $\{100\}$ mit 6 quadratischen Flächen, der Oktaeder $\{111\}$ mit 8 Dreiecksflächen und der Rhombendodekaeder $\{110\}$ mit 12 Rautenflächen.

11.5 IT Vol.A, Section 10

In den *International Tables A* findet man in *Section 10* hierzu folgende Angaben:

1. Zähligkeit (Multiplizität, Flächenhäufigkeit).
2. Wyckoff-Symbol (a für die höchstsymmetrische Lage).
3. Orientiertes Hermann-Mauguin Symbol der Lagesymmetrie.
4. Name des Polyeders zur Form $\{hkl\}$.
5. Millersche Indizes symmetrisch äquivalenter Flächen.

Die Millerschen Indizes (hkl) dieser Tabellen sind auf eine konventionelle Basis bezogen. Sie können – außer für trigonale und hexagonale Symmetrien – durch Koordinatentripel x, y, z ersetzt werden.

