Technische Universität Braunschweig

Seminar: Symmetrie und Kristallographie

1. Allgemeines, Einführung und Isometrien

Dr. Christian Kleeberg

Allgemeines

- PD Dr. Christian Kleeberg

  Raum 149

  E-Mail: ch.kleeberg@tu-bs.de

  Tel: 0531 – 391 5312

  https://www.tu-braunschweig.de/iaac/personal/kleeberg/lehre/symkrist

- Termin:

  Freitag, 15:00 – 16:30 Uhr, HR 30.1

Literatur

- Gruppentheorie und Molekülsymmetrie
  I.-P. Lorenz, Attempto Verlag, **1992**

- Symmetriebeziehungen zwischen verwandten Kristallstrukturen
  U. Müller, 1. Aufl., Vieweg + Teubner Verlag, **2012**

- Anorganische Strukturchemie
  U. Müller, 6. Aufl., Vieweg + Teubner Verlag, **2008** (2020)

- Faszination Kristalle und Symmetrie
  F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

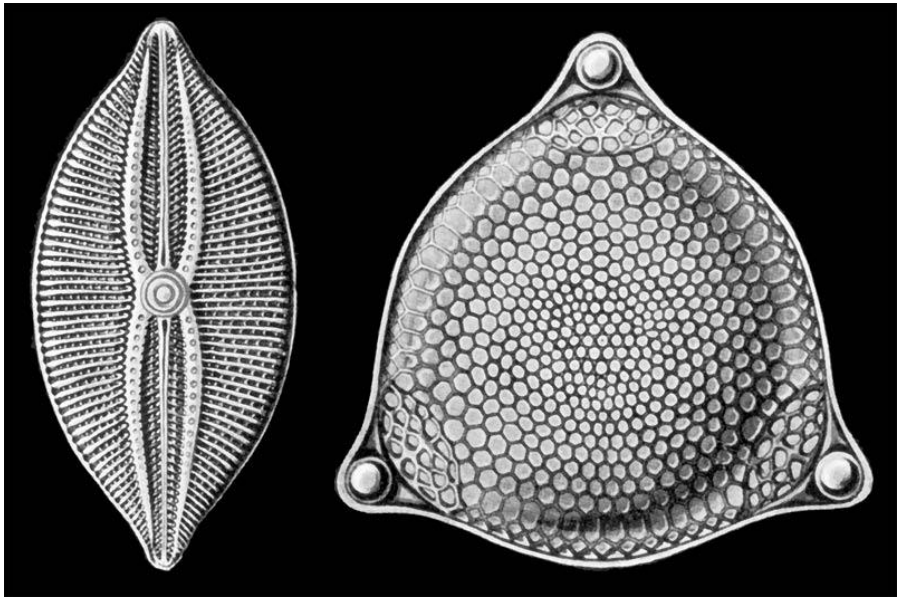
- Kristallstrukturbestimmung
  W. Massa, 8. Aufl., Springer, **2015**

- Physikalische Chemie
  P. Atkins, 5. Aufl., Wiley-VCH, **2010**

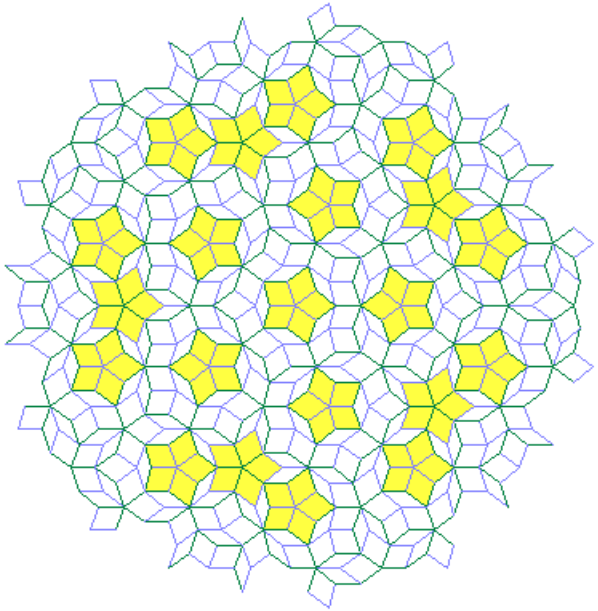
- Physikalische Chemie
  W. J. Moore, D. O. Hummel, 4. Aufl., de Gruyter, **1973**

- Mercury - Crystal Structure Visualisation, Exploration and Analysis Made Easy
  https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/mercury/

Symmetrie

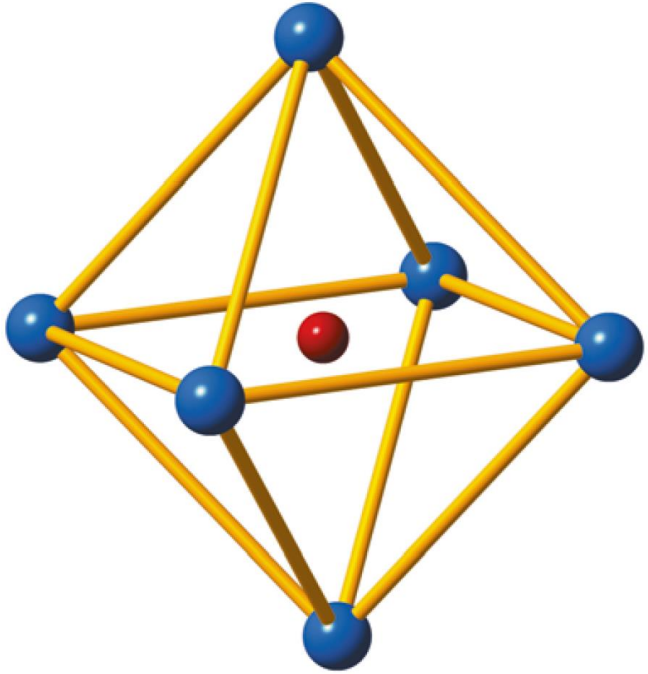


E. H. P. A. Haeckel, *Kunstformen der Natur.,* **1904**, Leipzig.



R. Penrose, *Math. Intel.,* **1979**, *2*, 1.

Symmetrie



Grüner Fluorit-Kristall mit einer Größe von ca. 2 cm, Fundort: Namibia. (CC BY-SA 3.0 CarlesMillan)

Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

Symmetrie

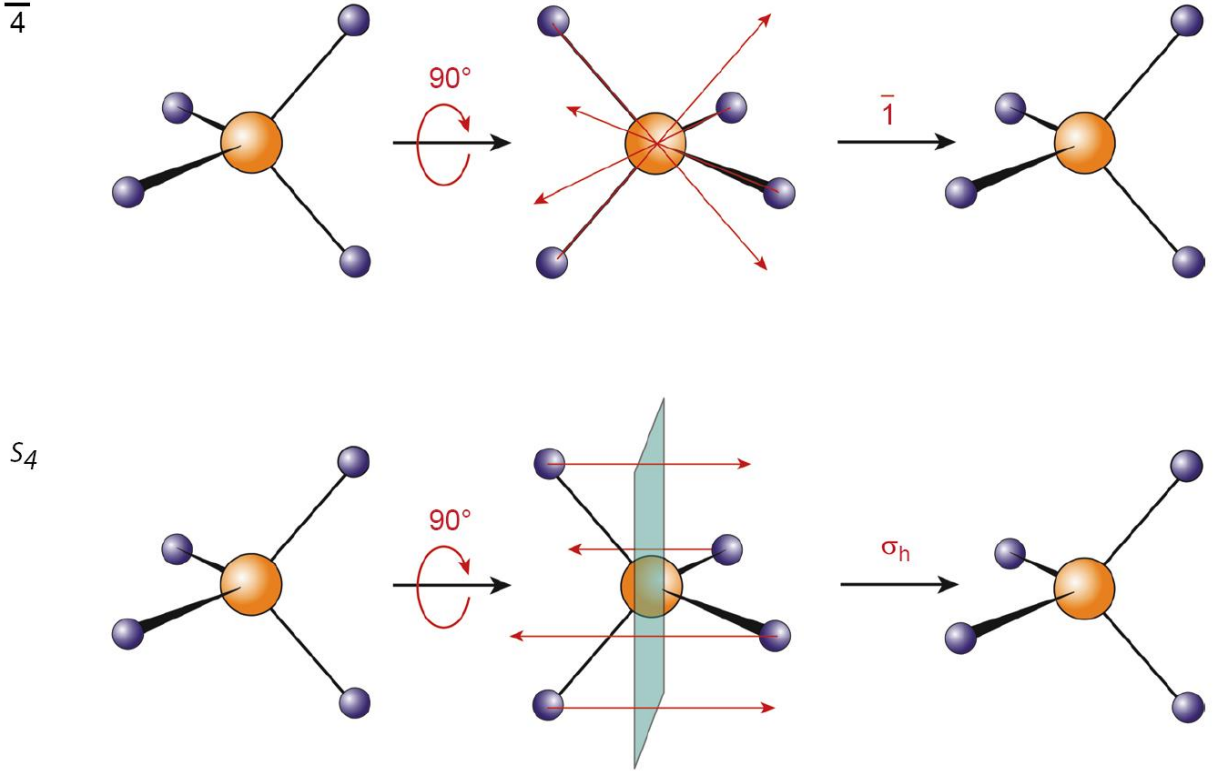
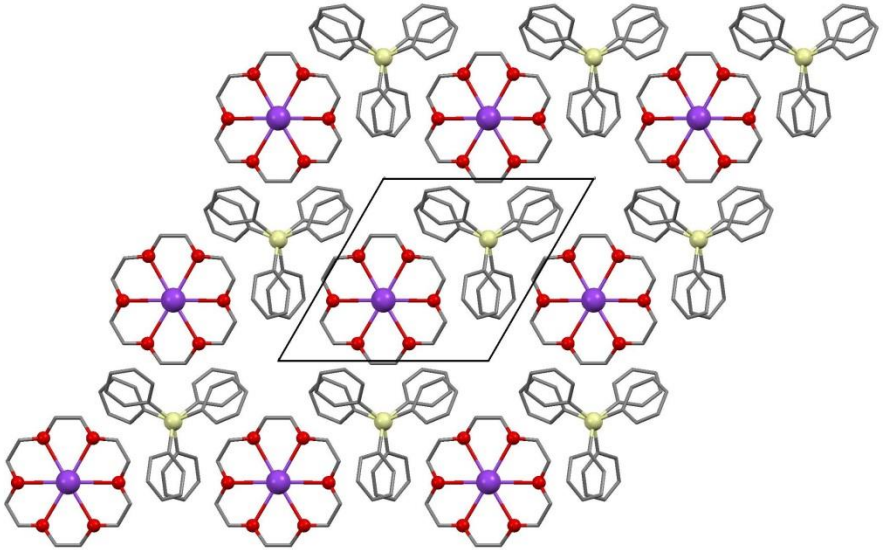
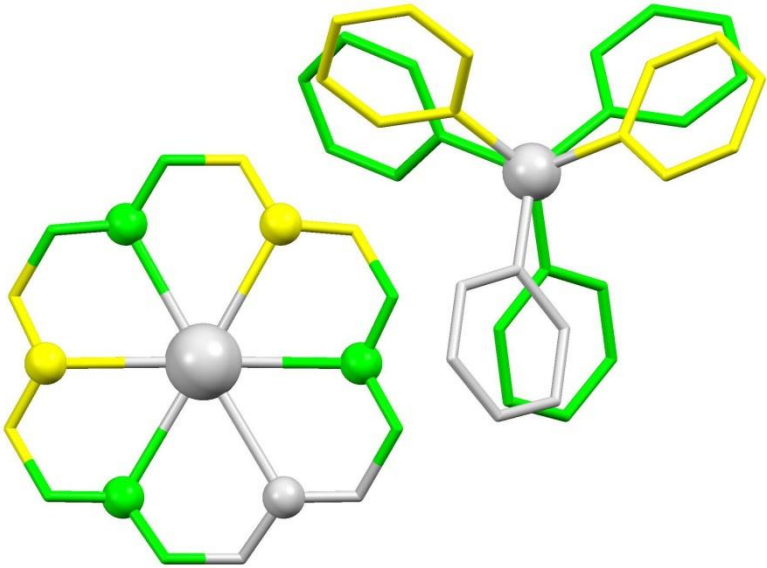


Abb. 3.17 Vierzählige Drehinversion und vierzählige Drehspiegelung im Vergleich

Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

Symmetrie





Ph3Si-Cu-SiPh3.mryx

J. Plotzitzka und C. Kleeberg, *Inorg. Chem.* **2017**, *56*, 6671–6680

Symmetrieoperationen

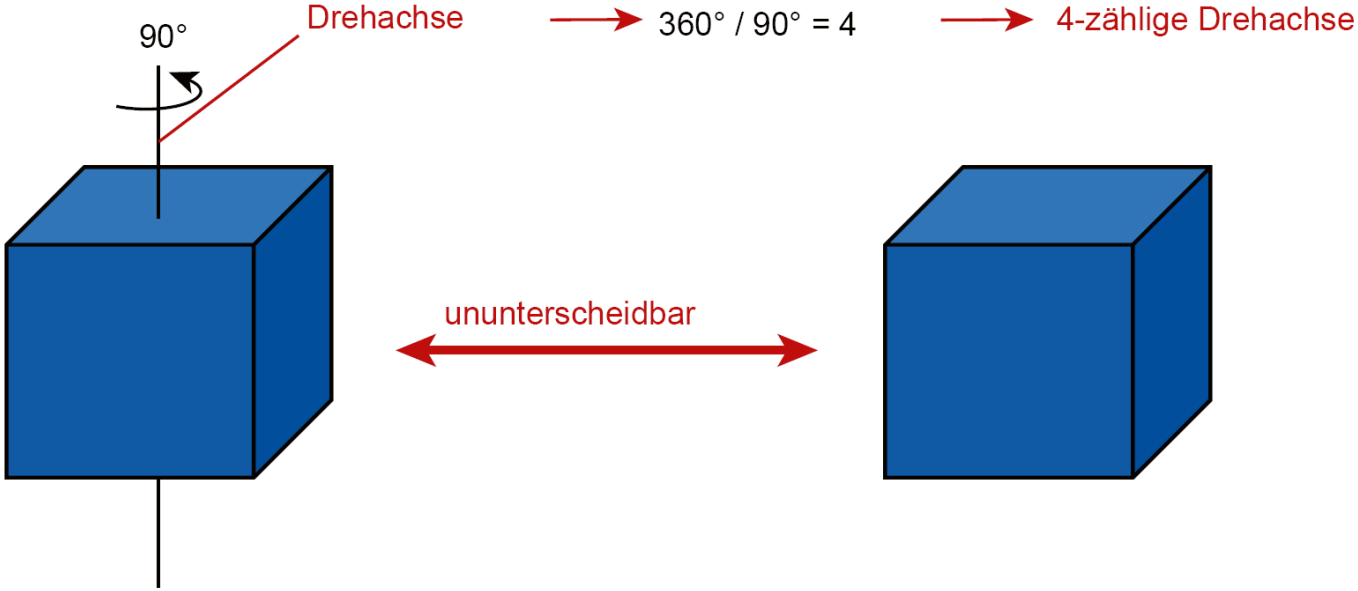


Abb. 3.2 Die Symmetrieoperation besteht in einer Rotation um die eingezeichnete Achse um 90°, das Symmetrieelement ist die Achse, das geometrische Objekt, an dem die Operation ausgeführt wird

Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

Symmetrieoperation: Identität

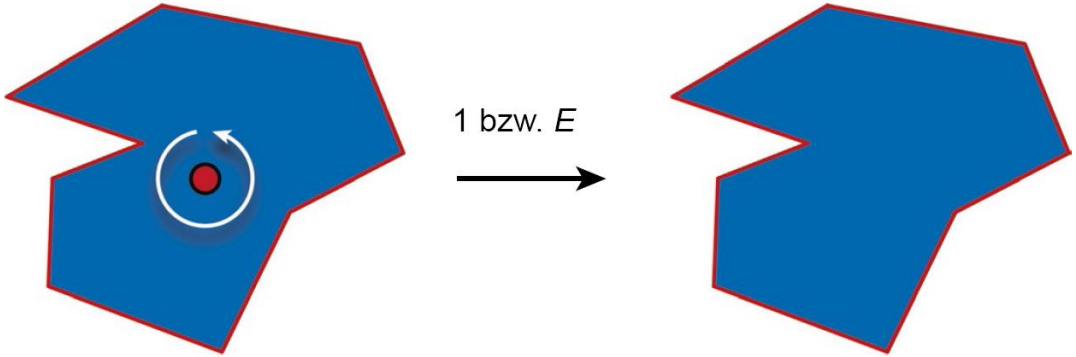


Abb. 3.3 Das Symmetrieelement der Identität kann auch als einzählige Drehachse aufgefasst werden, die entsprechende Symmetrieoperation ist eine Rotation um 360°

Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

Schönflies:	C_1
Hermann-Mauguin:	E / 1 / (I)
SE:	Punkt

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{I}$$

$$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{W}) = 3$$
$$\det(\boldsymbol{W}) = 1$$

Symmetrieoperation: Identität

Determinante (*det(W)*):

$$\det A = \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

Änderung des Volumens der durch die Matrix beschriebenen linearen Abbildung.

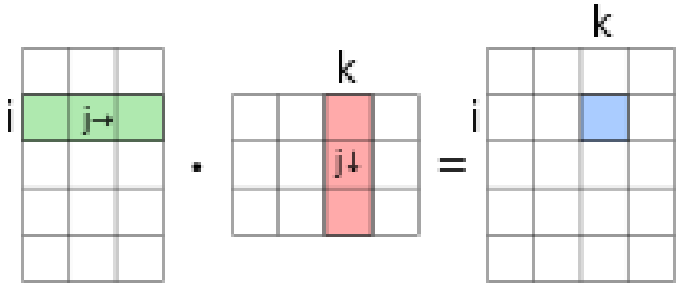
$$= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32}.$$

Spur (*Sp(W)*):

Summe der Diagonalelemente einer Matrix.

Matrizenmultiplikation:

$$c_{ik} = \sum_{j=1}^{m} a_{ij} \cdot b_{jk}$$



www.wikipedia.org

Symmetrieoperation: Translation

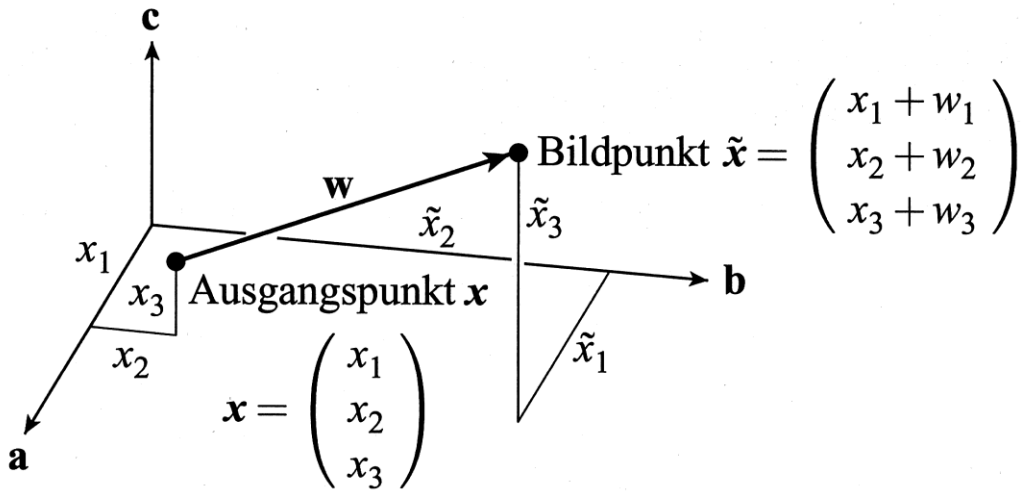


Abb. 3.1: Eine Translation

Symmetriebez. zw. verw. Kristallst., U. Müller, 1. Aufl., Vieweg + Teubner Verlag, **2012**

Schönflies: –

Hermann-Mauguin: –

SE: keines

$$\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix}$$

Symmetrieoperationen: Spiegelung und Gleitspiegelung

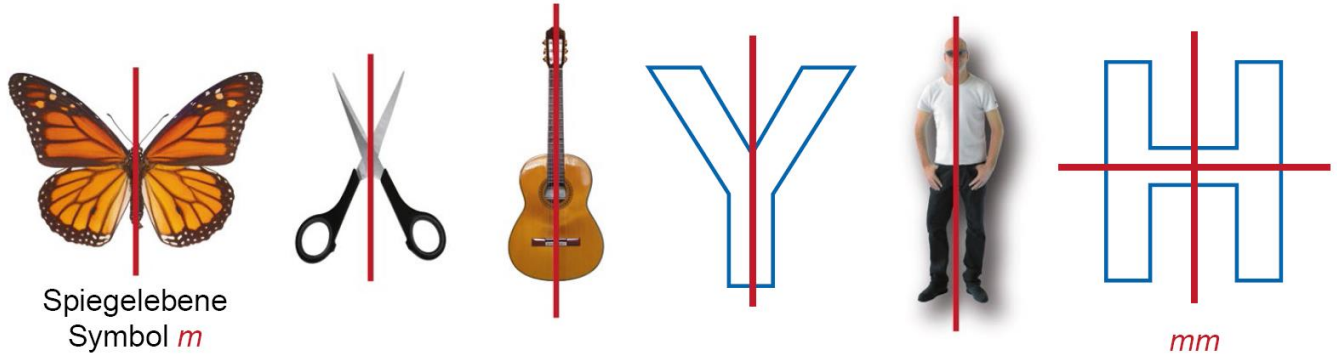


Abb. 3.4 All diese Objekte zeigen (mehr oder minder perfekte) Spiegelsymmetrie, die rechte und linke Hälfte ist jeweils identisch, aber gespiegelt. Der Buchstabe H weist simultan zwei Spiegelsymmetrien auf. Die Spiegelsymmetrie ist, insbesondere bei natürlichen Objekten, häufig nicht zu 100 % erfüllt. (Monarchfalter: Didier Descouens, CC BY-SA 3.0, Gitarre: Martin Möller, CC BY-SA de)

Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

	Spiegelung	**Gleitspiegelung**
Schönflies:	σ; σ_v, σ_h, σ_d	
Hermann-Mauguin:	*m*	*a*, *b*, *c*, *n*, *e*
SE:	Ebene	

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

oder Perturbation,
aber immer:
$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{W}) = 1$
$\det(\boldsymbol{W}) = -1$

Symmetrieoperationen: Spiegelung und Gleitspiegelung

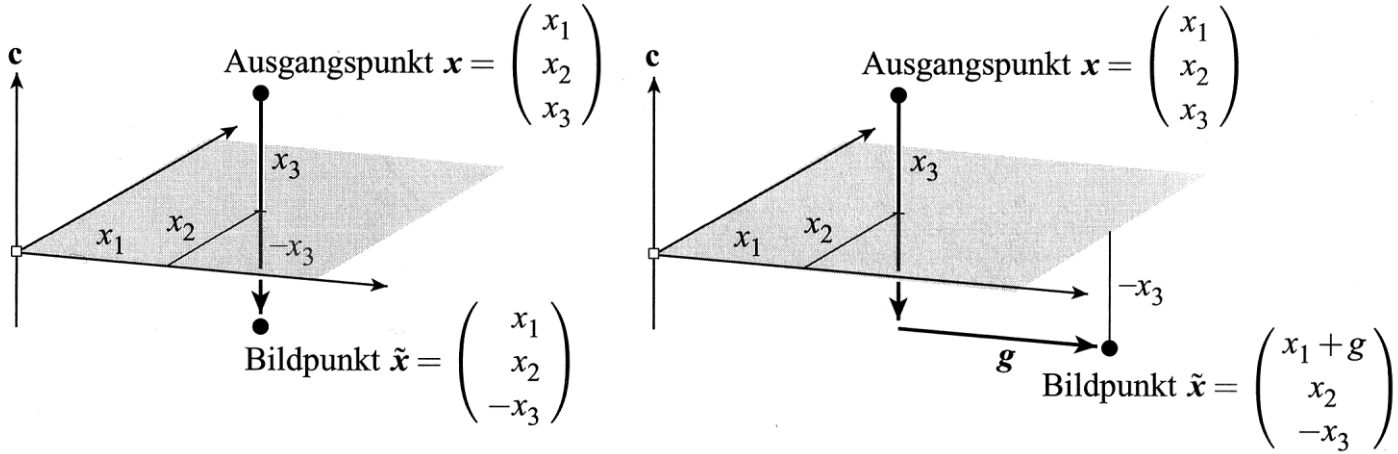


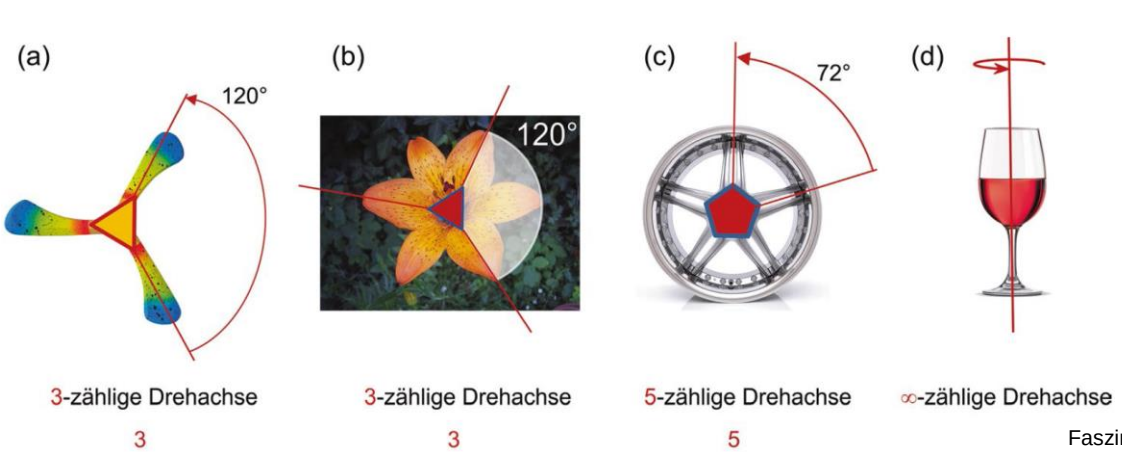
Abb. 3.4: Eine Spiegelung und eine Gleitspiegelung mit Spiegelebene bzw. Gleitspiegelebene senkrecht **c** durch den Koordinatenursprung □ Symmetriebez. zw. verw. Kristallst., U. Müller, 1. Aufl., Vieweg + Teubner Verlag, **2012**

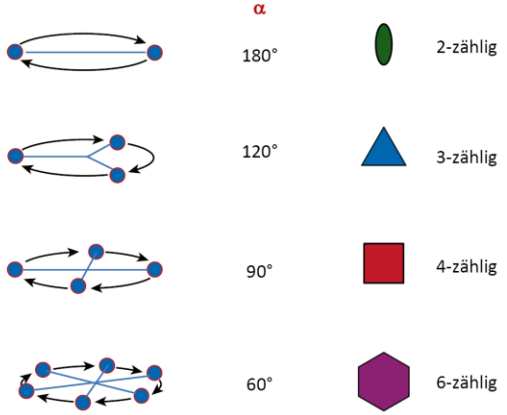
	Spiegelung	**Gleitspiegelung**
Schönflies:	σ, σ_v, σ_h, σ_d	
Hermann-Mauguin:	*m*	*a*, *b*, *c*, *n*, *d*, *e*
SE:	Ebene	

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

oder Perturbation,
aber immer:
$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{W}) = 1$
$\det(\boldsymbol{W}) = -1$

Symmetrieoperationen: Drehung und Schraubung





Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

	Drehung	**Schraubung**
Schönflies:	C_n (n = 360/φ)	
Hermann-Mauguin:	n (n = 360/φ)	n_m
SE:	Drehachse	Schraubenachse

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

oder Perturbation,

aber immer:

$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{W}) = 1 + 2\cos\varphi$

$\det(\boldsymbol{W}) = 1$

Symmetrieoperationen: Drehung und Schraubung

Abb. 5.14 Beispiele für Objekte mit helicaler Symmetrie: Wendeltreppe, Federbein (Klaus Nahr, Flickr, CC BY-SA 2.0), Nudeln, Kühlschlange eines Laborkühlgerätes

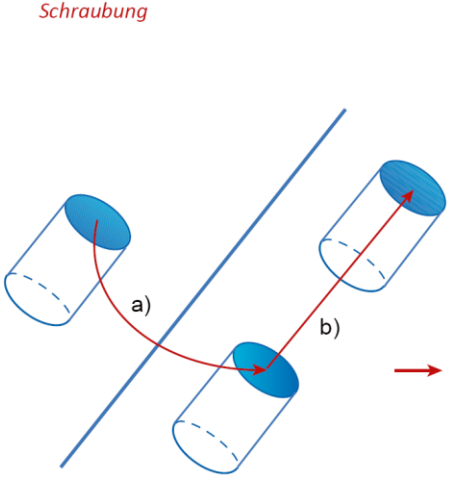


Abb. 5.19 Das Symmetrieelement Schraubenachse und die dazugehörige Symmetrieoperation, die aus zwei Teiloperationen besteht, die stets zusammen ausgeführt werden müssen

Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

	Drehung	**Schraubung**
Schönflies:	C_n (n = 360/φ)	
Hermann-Mauguin:	n (n = 360/φ)	n_m
SE:	Drehachse	Schraubenachse

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

oder Perturbation,

aber immer:

$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{W}) = 1 + 2\cos\varphi$

$\det(\boldsymbol{W}) = 1$

Symmetrieoperationen: Drehung und Schraubung

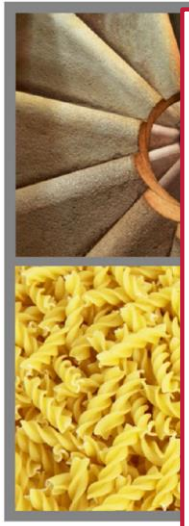
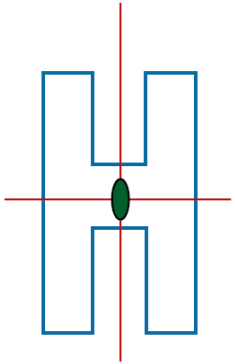


Abb. 5.14 Beispiele
SA 2.0), Nudeln, Kühlsch

Abhängigkeit von Symmetrieoperationen: Drehung und Spiegelung

- Jedes Paar von zwei senkrecht aufeinander stehenden Spiegelebenen erzeugt automatisch entlang ihrer Schnittkanten eine zweizählige Drehachse.



lang: 2*mm*
kurz: *mm*

Abb. 3.10 Die beiden senkrecht aufeinander stehenden Spiegelebenen erzeugen automatisch entlang ihrer Schnittkante eine zweizählige Drehachse, die als grüne Ellipse eingezeichnet ist

Schönfli
Herman
SE:

nse
ur Achse
ation, die aus zwei
Springer, **2016**
urbation,
er:
+ 2 cos φ
1

Symmetrieoperationen: Drehung und Schraubung

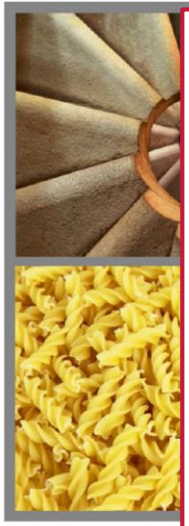
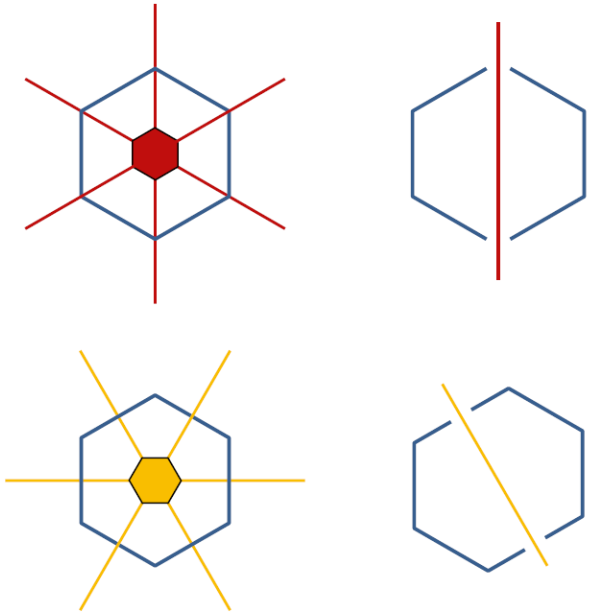


Abb. 5.14 Beispiele
SA 2.0), Nudeln, Kühlsch

Abhängigkeit von Symmetrieoperationen: Drehung und Spiegelung



6mm

Abb. 3.9 Ein reguläres Sechseck hat eine sechszählige Drehachse und *zwei* unverwechselbare Spiegelebenen, von denen eine durch zwei gegenüberliegende Ecken, die andere durch zwei gegenüberliegende Kantenmitten verläuft

Schönfli
Herman
SE:

nse
ur Achse
ation, die aus zwei
Springer, **2016**
urbation,
er:
$+ 2\cos\varphi$
1

Symmetrieoperationen: Inversion

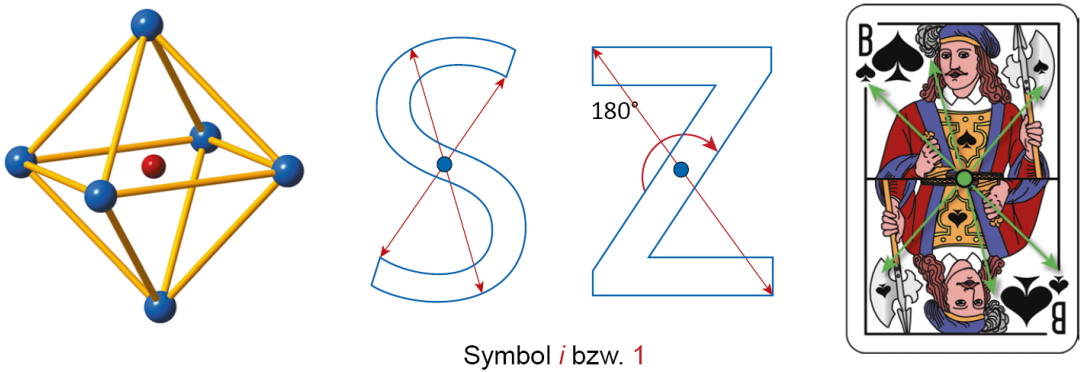


Abb. 3.12 Objekte mit einem Inversionszentrum. Bei zweidimensionalen Objekten ist eine Inversion identisch mit einer Drehung um 180° Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

Schönflies: i

Hermann-Mauguin: $\bar{1}$

SE: Punkt

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{W}) = -3$$

$$\det(\boldsymbol{W}) = -1$$

Symmetrieoperationen: Drehinversion

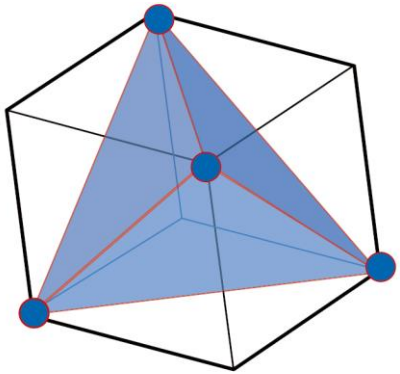


Abb. 3.13 Ableitung eines Tetraeders von einem Würfel, bei dem nur jede zweite Ecke besetzt ist

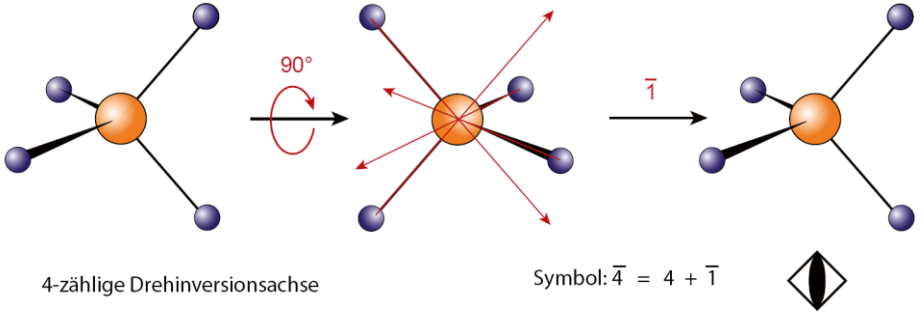


Abb. 3.14 An einem Tetraeder ausgeführte vierzählige Drehinversion, die eine gekoppelte Symmetrieoperation aus einer Drehung um 90° und anschließender Punktspiegelung darstellt

Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

Schönflies: S'_n (nicht verwendet!)

Hermann-Mauguin: $\bar{n}$ (n = 360/φ)

SE: Drehinversionsachse

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} -\cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & -\cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{W}) = -(1 + 2\cos\varphi)$$

$$\det(\boldsymbol{W}) = -1$$

Abhängigkeit von Symmetrieoperationen: Drehinversion

1. Drehinversionen gerader Zähligkeit enthalten automatisch eine einfache Drehachse der halben Zähligkeit: die vierzählige Drehinversionsachse enthält eine zweizählige Drehachse, und die sechszählige Drehinversionsachse enthält automatisch eine dreizählige Drehachse.
2. Wenn die Zähligkeit der Drehinversion gerade, aber nicht durch 4 teilbar ist, dann existiert automatisch eine Spiegelebene senkrecht zur Drehinversionsachse. Für die kristallographisch relevanten Drehinversionen sind das die zwei und sechszählige Drehinversionsachse.

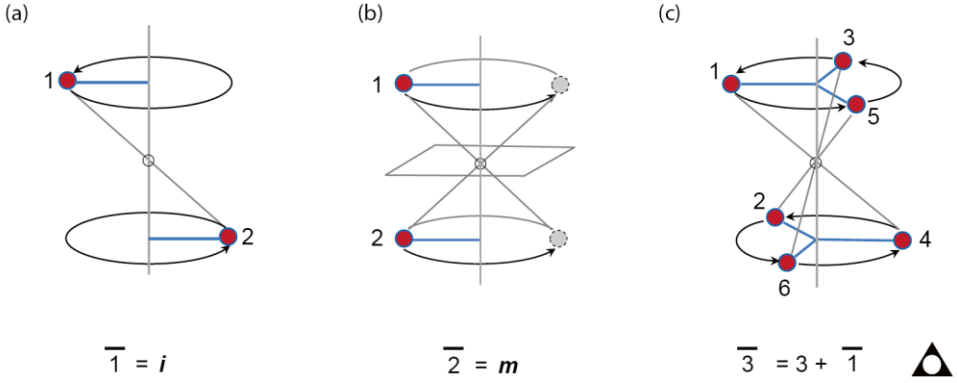


Abb. 3.15 Punktmuster (betrachten Sie jeweils die roten Kugeln), die eine Drehinversionsachse der Zähligkeit 1, 2 und 3 zeigen

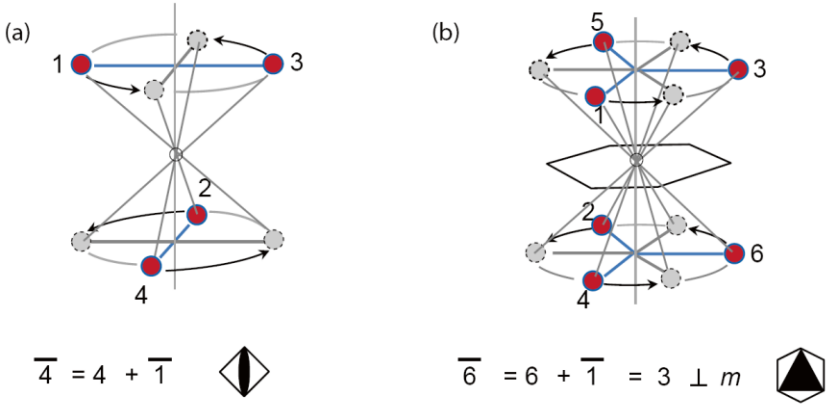
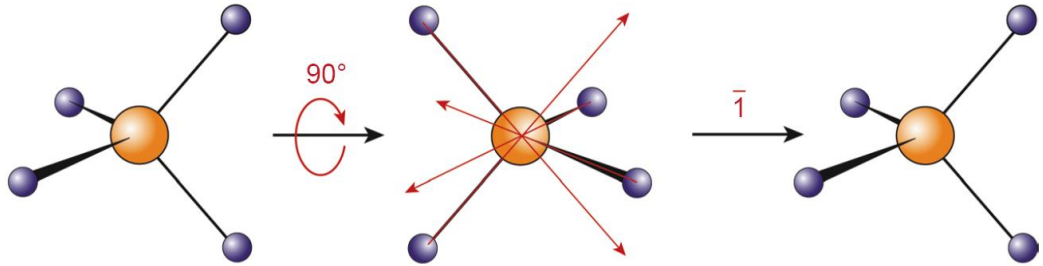


Abb. 3.16 Die Drehinversionen der Zähligkeit 4 und 6, anhand von Punktmustern illustriert. Eine sechszählige Drehinversionsachse beinhaltet automatisch eine Spiegelebene senkrecht zur Drehinversionsachse

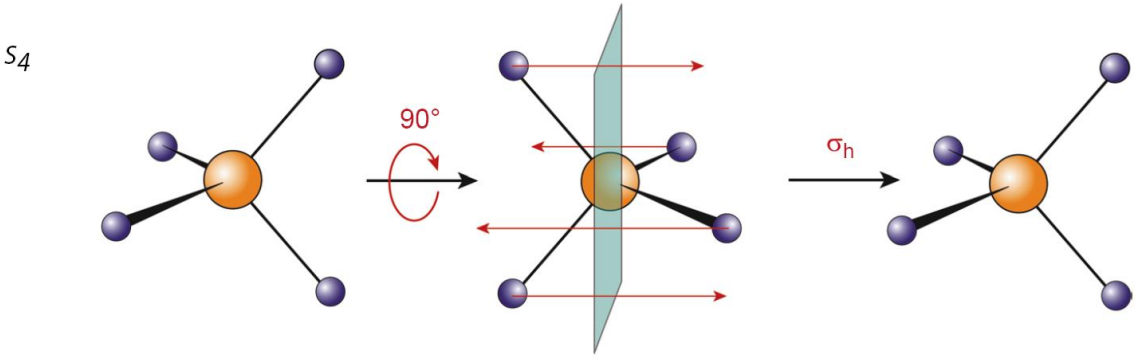
Symmetrieoperationen: Drehspiegelung



Schönflies: S_n

Hermann-Mauguin: nicht verwendet!

SE: Drehspiegelachse



$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{Sp}(\boldsymbol{W}) = -1 + 2\cos\varphi$$

$$\det(\boldsymbol{W}) = -1$$

Abb. 3.17 Vierzählige Drehinversion und vierzählige Drehspiegelung im Vergleich

Symmetrieoperationen: Übersicht

Tab. 3.1 Gegenüberstellung der fünf Punktsymmetrieelemente nach Schoenflies und Hermann-Maugin

Schoenflies	Hermann-Maugin (Internationales System)
Identität E	Identität 1
Spiegelebene σ	Spiegelebene m
Drehachse C_n ($n = 1, 2, 3, \ldots \infty$)	Drehachse n ($n = 1, 2, 3, 4, 6$)
Inversionszentrum i	Inversionszentrum $\bar{1}$
Drehspiegelachse S_n	Drehinversionsachse $\bar{n}$ ($n = 1, 2, 3, 4, 6$)

Faszination Kristalle und Symmetrie, F. Hoffmann, 1. Aufl., Springer, **2016**

$\det(\boldsymbol{W}) = 1$: SE erster Art

Translation, Drehung, Schraubung

$\det(\boldsymbol{W}) = -1$: SE zweiter Art

Inversion, Drehinversion, Spiegelung, Gleitspiegelung