

2. Symmetrie mit konstantem Punkt

Symmetrieoperationen (mathematische Beschreibung)

3. Translationssymmetrie

Translation als Symmetrieoperation

Abbildungen I

Basiswechsel

Abbildungen II

Gruppentheorie

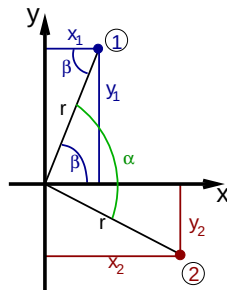
Untergruppen

Reziproker Raum

Faktorgruppen

Drehung D: Mathematische Beschreibung

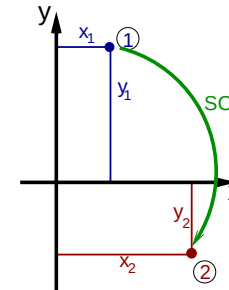
- kartesische Koordinaten
- 2-dimensionaler Fall: Drehachse $\perp$ Blickrichtung



- Koordinaten der beiden Punkte
 1. $x_1 = r \cos \beta$ und $y_1 = r \sin \beta$
 2. $x_2 = r \cos(\alpha - \beta)$ und $y_2 = -r \sin(\alpha - \beta)$

Mathematische Beschreibung von Punktsymmetrieoperationen

- Lagekoordinaten $x_1, y_1, z_1 \mapsto$ symmetrieäquivalente Koordinaten x_2, y_2, z_2



- Symmetrieoperation = 3×3 -Matrix, die mit (Spalten)-Vektor (x_1, y_1, z_1) multipliziert, die Koordinaten des symmetrieäquivalenten Punktes ergibt:

$$\begin{pmatrix} ? & ? & ? \\ ? & ? & ? \\ ? & ? & ? \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

Drehung D: Mathematische Beschreibung

- Koordinaten der beiden Punkte
 1. $x_1 = r \cos \beta$ und $y_1 = r \sin \beta$
 2. $x_2 = r \cos(\alpha - \beta)$ und $y_2 = -r \sin(\alpha - \beta)$
- mit (s. Bronstein)
 - $\cos(\alpha - \beta) = \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta$
 - $\sin(\alpha - \beta) = \sin \alpha \cos \beta - \cos \alpha \sin \beta$
- folgt für die Koordinaten des transformierten Punktes 2:
 - $x_2 = r \cos \alpha \cos \beta + r \sin \alpha \sin \beta = x_1 \cos \alpha + y_1 \sin \alpha$
 - $y_2 = -r \sin \alpha \cos \beta + r \cos \alpha \sin \beta = -x_1 \sin \alpha + y_1 \cos \alpha$
- und damit für die Matrix im zweidimensionalen Fall:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}$$
- und entsprechend in 3 Dimensionen:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Matrizen der Basis-Symmetrioperationen

Drehung D (Drehwinkel α)

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Spiegelung ($m \perp z$)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Inversion I

(Punktspiegelung)

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Matrizen zusammengesetzter Symmetrioperationen

► Produkte der Basis-Symmetrioperationen

Drehungsspiegelung S_n (Drehwinkel α)

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Drehinversion $\bar{n}$ (Drehwinkel α)

$$\begin{pmatrix} -\cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & -\cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Kristallstruktur, Motiv, Periodizität

Def.: Eine Kristallstruktur ist eine 3-fach periodische Anordnung von Bausteinen (Motiven) im 3-dimensionalen Raum. Die Periodizitätslängen dieser Anordnung dürfen nicht beliebig klein sein.

- Wegen der Periodizität gibt es Parallelverschiebungen in bestimmte Richtungen und mit bestimmten Längen, die Deckoperationen sind.
- Motive können Punkte, Figuren, Pflastersteine, Atome, Moleküle, Ionen usw. aber auch kontinuierliche Funktionen wie z.B. die Elektronendichte sein.

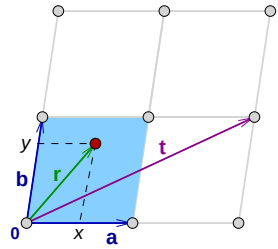
Gitter, Translationsvektor

Def.: Eine Verschiebung, welche die Kristallstruktur mit sich selbst zur Deckung bringt, nennt man *Symmetrie-Translation* dieser Kristallstruktur. Der zugehörige Verschiebungsvektor heißt *Translationsvektor* ($\mathbf{t}$).

- Wegen der Periodizität sind mit einem Translationsvektor alle seine ganzzahligen Vielfachen ebenfalls Translationsvektoren.

Def.: Die unendliche Menge aller Translationsvektoren einer Kristallstruktur nennt man das zur Kristallstruktur gehörende *Vektorgitter* oder *Gitter*. Die Translationsvektoren nennt man *Gittervektoren*.

Analytische Beschreibung



Positionsvektor:

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} = (\mathbf{a} \quad \mathbf{b}) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Gittervektor:

$$\mathbf{t} = t_1\mathbf{a} + t_2\mathbf{b} = (\mathbf{a} \quad \mathbf{b}) \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{r}'$, x' : nach Basistransformation
 $\tilde{\mathbf{r}}$, $\tilde{x}$: nach Abbildung

- Koordinatensystem aus einer Basis $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ (allgemein $\mathbf{a}_i$) von drei linear unabhängigen Basisvektoren und einem Ursprung.

Def.: Eine kristallographische Basis $\mathbf{a}_i$ ($\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$) eines Gitters heißt *primitive Basis*, wenn ihre Basisvektoren $\mathbf{a}_i$ Gittervektoren sind und jeder Gittervektor $\mathbf{t}$ als Linearkombination

$$\mathbf{t} = t_1\mathbf{a}_1 + t_2\mathbf{a}_2 + t_3\mathbf{a}_3 = (\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3) \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix}$$

mit ganzzahligen t_i dargestellt werden kann.

Def.: Das Parallelepiped, dessen Punkte die Koordinaten $0 \leq x, y, z \leq 1$ besitzen, nennt man eine *Elementarzelle* der Kristallstruktur.

Abbildungen: Symmetrioperationen = Isometrien

Def.: Eine Symmetrioperation (z.B. kristallographische Symmetrioperation) eines Gegenstandes (z.B. Kristallstruktur) ist eine *Abbildung* des Raumes auf sich, bei der

- der Gegenstand in sich überführt wird und
- alle Abstände invariant bleiben.
- Diese Abbildungen (Symmetrioperationen) sind *Isometrien*, eine spezielle Form *affiner Abbildungen*.
 - *Affine Abbildungen* sind Abbildungen des Punktraumes auf sich, bei denen parallele Geraden stets als parallele Geraden abgebildet werden. (Verzerrung sind möglich!)
 - *Isometrien* sind affine Abbildungen, die alle Abstände und Winkel unverändert lassen, sie lassen also alle Gegenstände bei der Abbildung unverzerrt.
- Die Menge aller Symmetrioperationen (Isometrien) einer Kristallstruktur heißt die *Raumgruppe* dieser Kristallstruktur.

Metrischer Tensor

- Der *metrische Tensor* (auch *Fundamentalmatrix*)

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix}$$

mit den Skalarprodukten

- $(\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_k) = (\mathbf{a}_k, \mathbf{a}_i) = g_{ik} = g_{ki}$
- (allg: $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}) = |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \cos(\mathbf{a}, \mathbf{b})$)
- jeweils in $[pm^2]$

erleichtert die Berechnung von Abständen, Winkeln und Volumina der Kristallstruktur sowie die Bestimmung von Abbildungseigenschaften (s.u.).

- Abstand: $PQ = r_{pq} \cdot r_{pq}^2 = \sum_{i,k} g_{ik} (q_i - p_i)(q_k - p_k)$
- Volumen der Zelle: $V^2 = \det(\mathbf{G})$
- Die metrischen Tensoren des Gitters $\mathbf{T}$ und des zugehörigen reziproken Gitters $\mathbf{T}^*$ sind zueinander invers.

Beschreibung von Abbildungen

- Jede Symmetrioperationen ($\mathbf{W}|\mathbf{w}$) (Seitz-Symbol) besteht aus einem
 - Matrixanteil $\mathbf{W}$ (3×3 -Matrix, vgl. Punktgruppen)
 - Spaltenanteil $\mathbf{w}$ (Vektor für die Translation)
- Die Matrix ($\mathbf{W}, \mathbf{w}$) beschreibt die Transformation des Punktes $\mathbf{x}$ in den Bildpunkt $\tilde{\mathbf{x}}$:

$$\begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & W_{22} & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & W_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ \tilde{z} \end{pmatrix} \text{ kurz } \tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{W}, \mathbf{w})\mathbf{x}$$
- Jede affine Abbildung ($\mathbf{W}, \mathbf{w}$) läßt sich durch Nacheinanderausführen einer Abbildung ($\mathbf{W}, \mathbf{o}$) und einer Translation ($\mathbf{I}, \mathbf{w}$) entstanden denken:

$$(\mathbf{W}, \mathbf{w}) = (\mathbf{I}, \mathbf{w})(\mathbf{W}, \mathbf{o})$$
- für die Kristallographie:
 - unendlich viele Translationen ($\mathbf{I}, \mathbf{w}$) (mit ganzzahligen Tripeln $\mathbf{w}$)
 - endlich viele Matrix-Teile $\mathbf{W}$ (im 3-dimensionalen 48 Stück)

Notation in den International Tables A

- ▶ vereinfachte Darstellung dieser Matrizen in den International Tables Vol. A:
- ▶ Beispiele:

1. $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ bedeutet $\mathbf{W} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ und $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$
2. $\bar{y}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{4}$ bedeutet $\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ und $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}$

Abbildung von Vektoren

- ▶ Transformation von Punktkoordinaten: $\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{W}, \mathbf{w})\mathbf{x}$
- ▶ Vektoren $\mathbf{r}$ spüren nur den Matrixanteil $\mathbf{W}$:
 $\tilde{\mathbf{r}} = (\mathbf{W}, \mathbf{w})\mathbf{r} = \mathbf{W}\mathbf{r}$

denn:

- ▶ $\chi_p = \begin{pmatrix} x_p \\ y_p \\ z_p \\ 1 \end{pmatrix}$ und $\chi_q = \begin{pmatrix} x_q \\ y_q \\ z_q \\ 1 \end{pmatrix}$ und damit für den Vektor PQ $\chi_q - \chi_p =$

$$\chi_p = \begin{pmatrix} x_q - x_p \\ y_q - y_p \\ z_q - z_p \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ 0 \end{pmatrix}$$

- ▶ Für jede reine Translation $(\mathbf{I}, \mathbf{t})$ gilt dann:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\Delta x} \\ \tilde{\Delta y} \\ \tilde{\Delta z} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{t} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ 0 \end{pmatrix}$$

Beschreibung durch $(n+1) \times (n+1)$ -Matrizen

- ▶ Erweiterung der Punktvektoren $\mathbf{x}$ zu 4er-Spalten χ : $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix}$

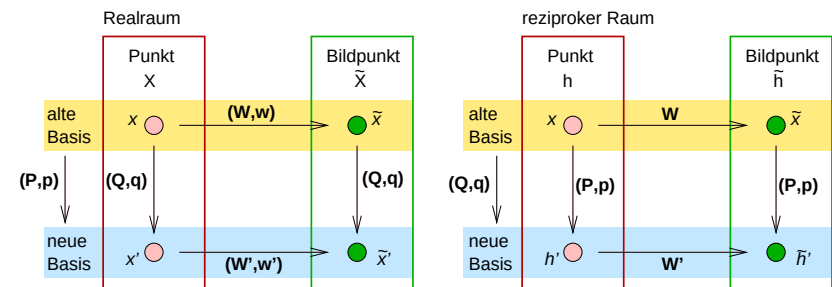
- ▶ Beschreibung der Abbildung durch (erweiterte, geränderte, augmented) 4×4 -Matrizen:

$$(\mathbf{W}, \mathbf{w}) \mapsto \mathcal{W} = \left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & & & \\ & & & \\ \hline & & & 1 \end{array} \right) \text{ nach: } \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ \tilde{z} \\ 1 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & & & \\ & & & \\ \hline & & & 1 \end{array} \right) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix}$$

- ▶ 'Hintereinanderausführen' von Symmetrieoperationen =
 Matrizenmultiplikation (vgl. Punktgruppen) $\mathcal{U} = \mathcal{V}\mathcal{W}$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & & & \\ & & & \\ \hline & & & 1 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & & & \\ & & & \\ \hline & & & 1 \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & & & \\ & & & \\ \hline & & & 1 \end{array} \right)$$

Übersicht: Transformationen, Abbildungen, Basiswechsel



Basiswechsel I: Transformation der Basisvektoren

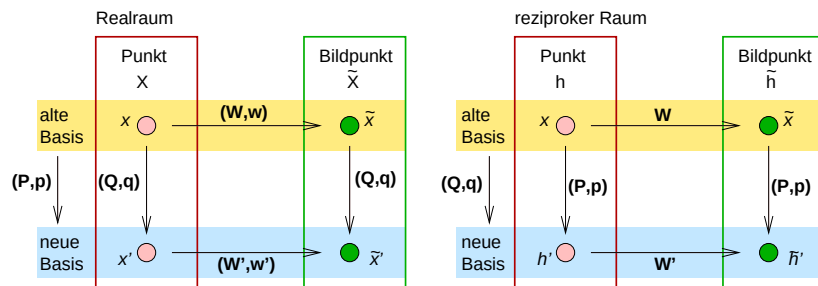
- Basis **a, b, c**
- Transformation in neue Basis **a', b', c'**
 - gleicher Ursprung: **P**
 - Verschiebung: **p**
 - zusammen: $(\mathbf{a}' \ \mathbf{b}' \ \mathbf{c}') = (\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}) \mathbf{P} + \mathbf{p}$
 - oder in der geränderten Matrix: $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{p} \\ \mathbf{o} & 1 \end{pmatrix}$
- $$(\mathbf{a}' \ \mathbf{b}' \ \mathbf{c}' \ 0) = (\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c} \ 0) \begin{pmatrix} P_{11} & P_{21} & P_{13} & p_1 \\ P_{12} & P_{22} & P_{23} & p_2 \\ P_{13} & P_{23} & P_{33} & p_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
- (Basis = Vektoren!)
- Transformation des metrischen Tensors
 - real: $\mathbf{G} = \mathbf{P}^t \mathbf{G} \mathbf{P}$
 - reziprok: $\mathbf{G}^* = \mathbf{Q} \mathbf{G}^* \mathbf{Q}^t$
- Volumenänderung der Basiszelle: $V' = \det(\mathbf{P})V$

Basiswechsel II: Transformation der Punktkoordinaten

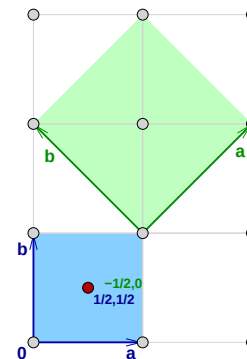
- Positionsvektor: $\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c} = \begin{pmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$
- Transformation der Koeffizienten des Positionsvektors:
 - $\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \mathbf{q}$
 - oder in der geränderten Matrix: $\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q} & \mathbf{q} \\ \mathbf{o} & 1 \end{pmatrix}$
- $$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{21} & Q_{13} & q_1 \\ Q_{12} & Q_{22} & Q_{23} & q_2 \\ Q_{13} & Q_{23} & Q_{33} & q_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} \text{ oder kurz } \chi' = \mathcal{Q}\chi$$
- mit $\mathcal{P} = \mathcal{Q}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{p} \\ \mathbf{o} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{-1} & -\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{q} \\ \mathbf{o} & 1 \end{pmatrix}$

Basiswechsel III: Realer/reziproker Raum

- kovariante Größen transformieren mit der gleichen Matrix
 - mit $\mathcal{P}$ transformieren:
 - Vektoren im Realraum (z.B. die Basisvektoren $\mathbf{a}_i$)
 - Punkte im reziproken Raum (z.B. Millerindizes h, k, l)
 - mit $\mathcal{Q}$ transformieren:
 - Vektoren im reziproken Raum (z.B. die reziproke Basisvektoren $\mathbf{a}_i^*$)
 - Punkte im realen Raum (z.B. Punktkoordinaten x, y, z)
- Im Bezug auf die reale Basis kovariante Größen sind in Bezug auf die reziproke Basis contravariant.

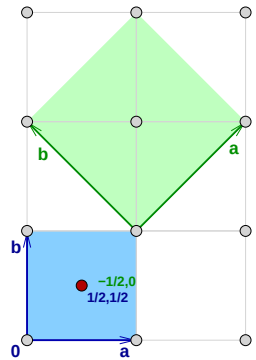


Basiswechsel: 2-dimensionales Beispiel



- Transformation der Basisvektoren mit der Matrix $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
- $\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
- transformiert die Punktkoordinaten: $\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
- Volumenänderung: $V' = \det(\mathbf{P})V$ hier $\det(\mathbf{P}) = 2$

Basiswechsel: 2-dimensionales Beispiel

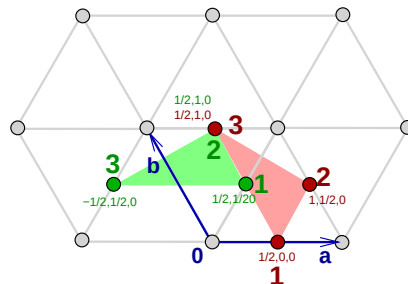


- Transformation der Basisvektoren mit der geränderten Matrix $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
- $\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
- Metrischer Tensor (z.B. für $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| = 3$)

$$\mathbf{G}' = \mathbf{P}^t \mathbf{G} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9 & -9 \\ 9 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 & 0 \\ 0 & 18 \end{pmatrix}$$
- Zellparameter: $|\mathbf{a}'| = |\mathbf{b}'| = \sqrt{18} = 3\sqrt{2} = 4.24$

Beispiel: hexagonale Basis

- $a = b \neq c; \gamma = 120^\circ;$
- $\mathbf{G} = \begin{pmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}$
- $\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \det(\mathbf{W}) = 1$



$$\mathbf{G} = \mathbf{W}^T \mathbf{G} \mathbf{W} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{a^2}{2} & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ \frac{a^2}{2} & \frac{a^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}$$

Isometrien ($\mathbf{W}, \mathbf{w}$)

- Isometrien sind affine Abbildungen, die alle Abstände und Winkel (und damit auch Volumina) aller Gegenstände unverzerrt lassen.
- Bedingungen:
 - Volumenänderungen sind durch die Determinante der Abbildungsmatrix $\mathbf{W}$ bestimmt:
 $\det(\mathbf{W}) = \pm 1$
 (aber: nicht hinreichende Bedingung)
 - hinreichend: Der metrische Tensor bleibt unverändert:
 $\tilde{\mathbf{G}} = \mathbf{W}^T \mathbf{G} \mathbf{W}$
 (Eine Isometrie darf die Gitterkonstanten nicht verändern).
- Alle reinen Translationen ($\mathbf{I}, \mathbf{t}$) sind Isometrien.
- Invarianten der Abbildung sind unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems (Basiswechsel):
 - $\det(\mathbf{W})$
 - $\text{Sp}(\mathbf{W})$

Typen von Isometrien I

I. eigentliche Symmetrieeoperationen (1. Art) $\mapsto \det(\mathbf{W}) = +1$

- Identität** ($\mathbf{I}; \mathbf{I}$)
 - $\mathbf{W} = \mathbf{I}$ (Einheitsmatrix) und $\mathbf{w} = \mathbf{0}$ (Nullspalte)
 - $\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}}$ für alle Punkte
 - Jeder Punkt ist Fixpunkt.
- Translationen** T :
 - $\mathbf{W} = \mathbf{I}$ und $\mathbf{w} \neq \mathbf{0}$
 - Es gibt keinen Fixpunkt.
- Drehungen** D und **Schraubungen** D_n :
 - $\mathcal{W} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & w' \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
 - Der Drehwinkel α ergibt sich aus der Spur der Matrix $\mathbf{W}$:
 $1 + 2 \cos \alpha = \text{Sp}(\mathbf{W})$
 - Drehung D : $w' = 0$
 - Schraubung D_n : $w' \neq 0$

Typen von Isometrien II

II. uneigentliche Symmetrieoperationen (2. Art) $\mapsto \det(\mathbf{W}) = -1$

► **Inversion** ($\bar{I}$; $\bar{T}$)

- $\mathbf{W} = -\mathbf{I}$, $\mathbf{w}$ beliebig
- Spiegelung des Raumes am Punkt $\frac{\mathbf{w}}{2}$
- $\det(-\mathbf{I}) = (-1)^3 = -1$

► **Drehinversion**

- Kombination von Drehung D und Inversion $\bar{T}$

► **Spiegelung und Gleitspiegelung**

- Spiegelung (in einem geeigneten Koordinatensystem):

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

- d.h. $\det(\mathbf{W}) = -1$, $Sp(\mathbf{W}) = 1$, $\mathbf{W}^2 = \mathbf{I}$
- $(\mathbf{W}|\mathbf{w})^2 = (\mathbf{W}^2|\mathbf{W}\mathbf{w} + \mathbf{w}) = (\mathbf{I}|\mathbf{t})$
- Spiegelung: $\mathbf{t} = \mathbf{0}$ (eine Ebene bleibt fest)
- Gleitspiegelung: $\mathbf{t} \neq \mathbf{0}$

Gruppentheorie: ... angewandt (und bekannt ?)

- Def.** Die Molekülsymmetrie bildet eine endliche Gruppe, welche die Punktgruppe $\mathfrak{P}$ des Moleküls genannt wird.
- Def.** Die Menge aller Symmetrieoperationen (Isometrien) einer Kristallstruktur heißt die *Raumgruppe* $\mathfrak{G}$ dieser Kristallstruktur.
- Def.** Die Punktgruppe $\mathfrak{P}$ einer Kristallstruktur ist die Symmetriegruppe des Bündels der Flächennormalen.
- Def.** Die Menge aller Symmetrieoperationen einer Punkt/Raum-Gruppe, welche einen Punkt festlassen, heißt die Lagesymmetriegruppe $\mathfrak{G}$ (Stabilisator) dieses Punktes.
- $\mathfrak{G}$ ist eine Untergruppe von $\mathfrak{P}$ bzw. $\mathfrak{G}$.
 - Punkte allgemeiner Lage: $\mathfrak{G} = \mathcal{I}$ (nur Identität)

Wiederholung: Gruppenaxiome

1. Eine Gruppe ist eine Menge $\mathfrak{G}$ von Elementen g_i , zwischen denen eine Verknüpfung besteht, so dass jedem geordneten Paar g_i, g_j genau ein Element $g_k \in \mathfrak{G}$ zugeordnet ist. (Abgeschlossenheit)
2. Die Verknüpfung ist *assoziativ*.
3. Es gibt ein Neutralelement e für das gilt:

$$eg_i = g_i e = g_i \text{ für alle } g_i \in \mathfrak{G}$$

4. Für alle Elemente g gibt es ein inverses Element g^{-1} für das gilt:

$$gg^{-1} = g^{-1}g = e$$

-
- Anzahl der Elemente $|\mathfrak{G}|$ der Gruppe $\mathfrak{G}$: Ordnung der Gruppe.
 - Punktgruppen: endliche Gruppen
 - Raumgruppen: unendliche Gruppen
 - Ordnung k eines Elementes: $g^k = e$
 - z.B. vierzählige Drehachse: $k = 4$
 - Kommutative/Abelsche Gruppen: $g_i g_k = g_k g_i$

Gruppentheorie: ... angewandt (und unbekannt)

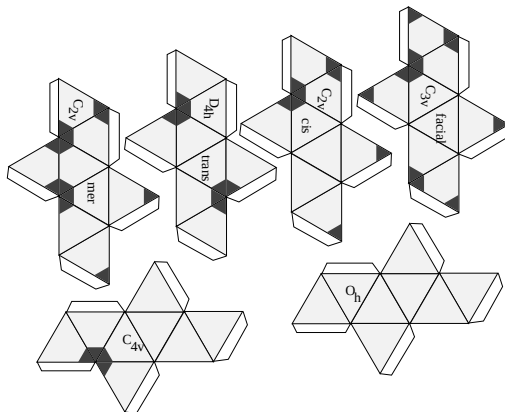
- Die Menge aller Translationen einer Raumgruppe $\mathfrak{G}$ nennt man die Translationengruppe $\mathfrak{T}$.
- $\mathfrak{T}$ ist eine Untergruppe der Raumgruppe.
- $\mathfrak{T}$ ist Normalteiler $\mathfrak{T} \triangleleft \mathfrak{G}$.
- Bei der Nebenklassenzerlegung (Coset decomposition) von $\mathfrak{G}$ nach $\mathfrak{T}$ stehen in jeder Nebenklasse genau die Elemente, die den gleichen Matrixteil besitzen. Jede Matrix $\mathbf{W}$ ist für ihre Nebenklasse charakteristisch.
- Die Faktorgruppe $\mathfrak{G}/\mathfrak{T}$ ist isomorph zur Punktgruppe $\mathfrak{P}$.
- ...

Untergruppen

- ▶ Komplex aus $\mathcal{G}$: beliebige Untermenge $A = \{a_1, a_2, \dots\}$
- ▶ Komplexe, die die Gruppenaxiome erfüllen, sind Untergruppen von $\mathcal{G}$:
 $\mathcal{H} \leq \mathcal{G}$
- ▶ $\mathcal{H} < \mathcal{G}$ ist maximale Untergruppe von $\mathcal{G}$, wenn es keine Gruppe $\mathcal{L}$ gibt, für die $\mathcal{H} < \mathcal{L} < \mathcal{G}$ gilt.
- ▶ Ist $\mathcal{H}$ eine maximale Untergruppe von $\mathcal{G}$, dann nennt man $\mathcal{G}$ eine minimale Obergruppe von $\mathcal{H}$.

Bedeutung von Untergruppen in der Molekülchemie

- ▶ Die kristallographischen Punktgruppen der Moleküle sind entweder Untergruppen der kubischen Punktgruppe $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ der Ordnung 48 oder der hexagonalen Punktgruppe $\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ der Ordnung 24.
- ▶ Beispiel: Substitutionsmuster oktaedrischer Komplexe:



Bedeutung von Untergruppen in der (Kristall)-Chemie

... zur Beschreibung von

- **statischen Molekül/Kristallstrukturen** (Strukturzusammenhänge)
 1. Überstrukturen/Ordnungsvarianten
 - ▶ Substitution symmetrieäquivalenter Positionen durch verschiedene Elemente
 - ▶ b.c.c. $\rightarrow$ CsCl; Diamant $\rightarrow$ Zinkblende
 - ▶ partielle Besetzung symmetrieäquivalenter Lücken
 - ▶ f.c.c. $\rightarrow$ CdCl₂; h.c.p. $\rightarrow$ CdI₂
 2. Verzerrungen (elektronisch, p/T-induziert)
 - ▶ Jahn-Teller-Effekt/Peierls-Verzerrungen
 - ▶ stereochemische aktive 'Lone-Pairs'
 - ▶ Änderungen des Bindungstyps, z.B. Ausbildung kovalenter Bindungen
 - ▶ ...
- **dynamischen Effekten** (Phasenumwandlungen, Zwillingsbildung)
 1. Ordnungs/Unordnungs-Übergänge (rekonstruktiv) (z.B. $\beta \rightarrow \beta'$ -Messing)
 2. displazive Phasenumwandlungen (Bsp: Tief/Hoch-Quarz)

Klassifizierung von Untergruppen $\mathcal{H}$ der Raumgruppen

translationen-gleich (t)

- ▶ Ausdünnung der Symmetrie innerhalb der Elementarzelle (**W** !)
- ▶ Translationengitter unverändert
- ▶ $\mathfrak{T}_H = \mathfrak{T}_G$ und $\mathfrak{P}_H < \mathfrak{P}_G$
- ▶ d.h. gleiche Größe der primitiven Elementarzelle

klassen-gleich (k)

- ▶ Fortfall von Translationssymmetrie (**w**)
- ▶ d.h. Vergrößerung der primitiven Elementarzelle
- ▶ Gruppe und Untergruppe gehören zur gleichen Kristallklasse
- ▶ $\mathfrak{T}_H < \mathfrak{T}_G$ und $\mathfrak{P}_H = \mathfrak{P}_G$
- ▶ Spezialfall: **isomorph (i)**
 - ▶ Gruppe und Untergruppe gehören zum gleichen/enantiomorphen Raumgruppentyp

Maximale Untergruppen

Satz von Hermann (1929):

- Eine maximale Untergruppe einer Raumgruppe ist entweder translationengleich oder klassengleich.

Kodierung der Untergruppen in den International Tables: Bsp. $\mathcal{G} = Cmca$

Maximal non-isomorphic subgroups

- I [2] $C222_1$ (1;2;3;4;)+ *translationengleich*
 [2] $C112_1/a$ ($P2_1/c$) (1;2;5;6)+
 ...
 IIa [2] $Pmcb$ ($Pbam$) 1;2;3;4;5;6;7;8 *klassengleich*
 [2] $Pbna$ ($Pbcn$) 1;2;3;4;(5;6;7;8)+($\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$) (*gleiche konventionelle Zelle*)
 ...
 IIb none *klassengleich*
 (*vergrößerte konventionelle Zelle*)

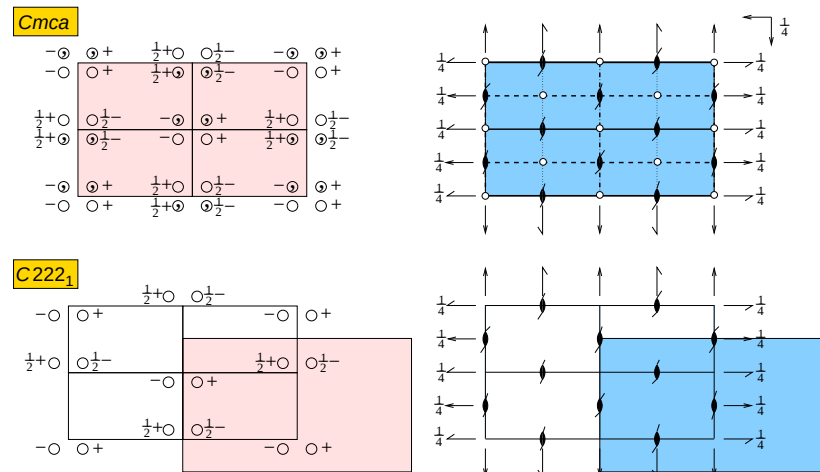
Maximal isomorphic subgroups of lowest index

- IIc [3] $Cmca$ ($a' = 3a$); [3] $Cmca$ ($b' = 3b$); [3] $Cmca$ ($c' = 3c$)

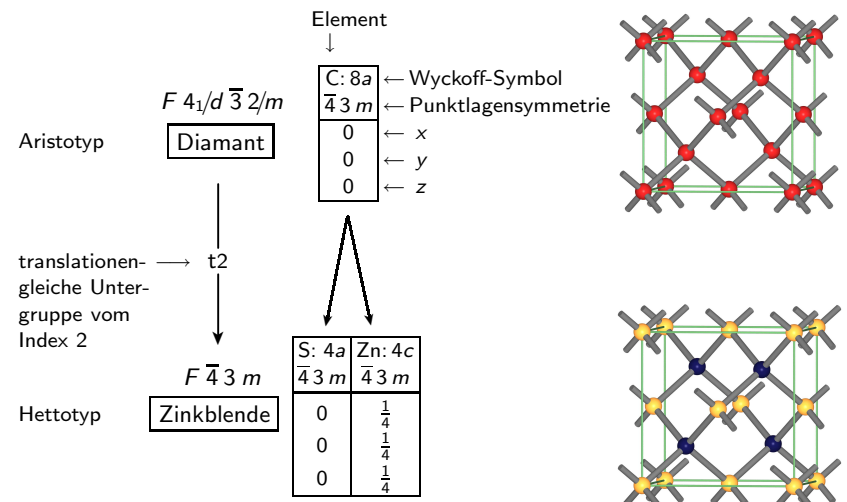
Minimal non-isomorphic supergroups

- I none *translationengleich*
 II [2] $Fmmm$; [2] $2a = a, 2b = b$ ($Pmma$); [2] $Cmma$ ($2c = c$) *klassengleich*

t2-Symmetrieabbau $Cmca \rightarrow C222_1$



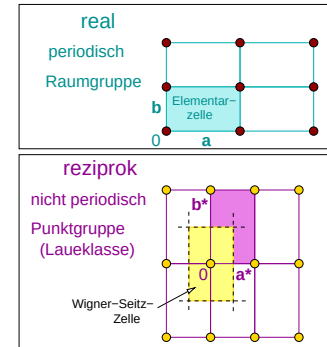
Beispiel I: Symmetriestammbaum Diamant $\rightarrow$ Zinkblende



Literatur zu Gruppe-Untergruppe-Beziehungen

- Erklärung und viele einfache Beispiele
 - ▶ U. Müller: Anorganische Strukturchemie, Kap. 18
- Referenzen für die Regeln nach Bärnighausen
 - ▶ H. Bärnighausen, Group-Subgroup Relations between Space Groups: a Useful Tool in Crystal Chemistry. *MATCH, Communications in Mathematical Chemistry* **9**, 139 (1980).
 - ▶ U. Müller: Kristallographische Gruppe-Untergruppe-Beziehungen und ihre Anwendung in der Kristallchemie. *Z. Anorg. Allg. Chem.* **630**, 1519 (2004).
- im WWW
 - ▶ E. Kroumova, J. M. Perez-Mato, M. I. Aroyo, S. Ivantchev, G. Madariaga, H. Wondratschek: *The Bilbao Crystallographic Server: A web site with crystallographic tools using the International Tables for Crystallography* <http://www.cryst.ehu.es>

Reziprokes Gitter I



- ▶ Definition des reziproken Gitters:
 - ▶ $\mathbf{a}\mathbf{a}^* = 1$ usw. und $\mathbf{a}\mathbf{b}^* = 0$ usw.
 - ▶ d.h. $\mathbf{a}^* \perp \mathbf{b}, \mathbf{c}$ usw.

- ▶ Wegen

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c} = \begin{pmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

- ▶ und

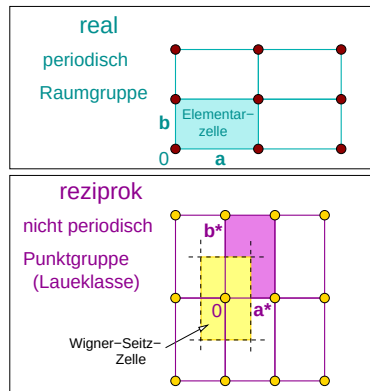
$$\mathbf{r}^* = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* = \begin{pmatrix} h & k & l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{pmatrix}$$

- ▶ beschreibt das Skalarprodukt:

$$\mathbf{r}\mathbf{r}^* = hx + ky + lz = h\mathbf{x}$$

- ▶ den Abstand des Punktes $\mathbf{x}$ von der Netzebenenschar $\mathbf{h}$ (Phasendifferenz).

Reziprokes Gitter II: Elementarzelle und Symmetrie

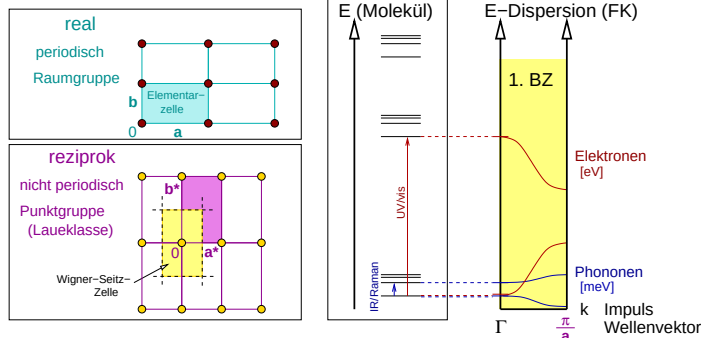


- ▶ Punktsymmetrie (Laueklasse)
- ▶ Ursprung im Zentrum des reziproken Gitters
- ▶ Elementarzelle: Wigner-Seitz-Zelle (Polyeder mit den Mittelsenkrechten zwischen dem Ursprung und allen benachbarten Gitterpunkten als Flächen).
- ▶ enthält genau einen reziproken Gitterpunkt
- ▶ $\equiv 1$. Brillouin-Zone

Reziprokes Gitter III ($\mathbf{r}\mathbf{r}^*$ als Phase!)

- Beugung Photonen (Röntgen); e^- (E: [keV]); n
 - ▶ positive Interferenz (Reflex) $\mapsto$ Streuvektor $\mathbf{s}$ = reziproker Gittervektor $\mathbf{r}^*$
 - ▶ M: Intensitätsgewichtetes reziprokes Gitter
 - ▶ $F_{\mathbf{h}} = \sum_{j=1}^N f_j e^{2\pi i(\mathbf{h}\mathbf{x}_j)} = \int \rho_{\mathbf{x}} e^{2\pi i\mathbf{h}\mathbf{x}} dV$
- Elektronische Strukturen e^- (E: [eV])
 - ▶ LCAO (Blochsummen): $\psi = \sum_j \phi_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}_a}$
 - ▶ mit: $\mathbf{k} = \frac{\pi}{a}$
 - ▶ $\mathbf{k} = 0$: MO-Schema (M: ΔE : UV/vis-Spektroskopie)
 - ▶ $\mathbf{k}$ beliebig: Bandstruktur $E(\mathbf{k})$
- Gitterdynamik Phononen (E: [meV])
 - ▶ Elemente der dynamischen Matrix: $D_{kk'} = \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_{l'} V_{kl, k'l'} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{l-l'}}$
 - ▶ mit: $\mathbf{q}$: Wellenvektor
 - ▶ $\mathbf{q} = 0$: Schwingungsenergien (M: ΔE : IR/Raman-Spektroskopie)
 - ▶ $\mathbf{q}$ beliebig: Phononendispersion $E(\mathbf{q})$ (M: inelastische n-Streuung)

Reziprokes Gitter IV



• Darstellungstheorie

- ▶ 'Lösung' des E-Eigenwertproblems (Blockdiagonalisierung von $\mathbf{H}$ bzw. der dynamischen Matrix $\mathbf{D}$)
- ▶ Faktorgruppenanalyse: Übergang vom translationssymmetrischen Fall (Kristall, mit Dispersion) zum nichttranslationssymmetrischen Fall (Elementarzelle, Molekül, $\mathbf{k} = 0$)

Nebenklassenzerlegung; Faktorgruppen: Mathematisch

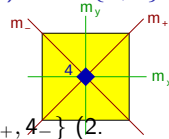
- **Nebenklassenzerlegung** (coset decomposition)
 - ▶ Die Untergruppe $\mathfrak{H}$ einer Gruppe $\mathfrak{G}$ ($\mathfrak{H} < \mathfrak{G}$) bildet die erste Nebenklasse.
 - ▶ Der Komplex $g_2\mathfrak{H}$ mit einem Element g_2 , das nicht in dieser Untergruppe enthalten ist, bildet die zweite (hier linke) Nebenklasse.
 - ▶ Aus einem Element g_3 aus $\mathfrak{G}$, das nicht in den obigen Nebenklassen enthalten ist, bildet man den Komplex $g_3\mathfrak{H}$, die dritte Nebenklasse.
 - ▶ ... usw., bis alle Elemente aus $\mathfrak{G}$ einer Nebenklasse zugeordnet sind
- **Normalteiler** (invariant subgroup)
 - ▶ Für einen Normalteiler $\mathfrak{N}$ liefern die rechte und die linke Nebenklassenzerlegung die gleichen Nebenklassen.
- **Faktorgruppe**
 - ▶ Die Nebenklassen einer Gruppe nach einem Normalteiler $\mathfrak{N}$ bilden eine Gruppe, die Faktorgruppe $\mathfrak{F}$ ('Symmetrie der Symmetrie').

Beispiel: Nebenklassenzerlegung der PG des Quadrates ($\mathfrak{G}$) nach $\{1, 2\}$ ($\mathfrak{N}$)

- ▶ $\mathfrak{G} = \{1, 2, 4_+, 4_-, m_x, m_y, m_+, m_-\}$ (PG: 4mm)
- ▶ $\mathfrak{N} = \{1, 2\}$ (1. Nebenklasse) und Normalteiler
- ▶ aus 4_+ (nicht in $\mathfrak{N}$) durch Multiplikation mit $\{1, 2\} \mapsto \{4_+, 4_-\}$ (2. Nebenklasse)
- ▶ aus m_x durch Multiplikation mit $\{1, 2\} \mapsto \{m_x, m_y\}$ (3. Nebenklasse)
- ▶ aus m_+ $\mapsto \{m_+, m_-\}$ (4. Nebenklasse)
- ▶ Gruppentafel der Nebenklassen:

	$\{1, 2\}$	$\{4_+, 4_-\}$	$\{m_x, m_y\}$	$\{m_+, m_-\}$
$\{1, 2\}$	$\{1, 2\}$	$\{4_+, 4_-\}$	$\{m_x, m_y\}$	$\{m_+, m_-\}$
$\{4_+, 4_-\}$	$\{4_+, 4_-\}$	$\{1, 2\}$	$\{m_+, m_-\}$	$\{m_x, m_y\}$
$\{m_x, m_y\}$	$\{m_x, m_y\}$	$\{m_+, m_-\}$	$\{1, 2\}$	$\{4_+, 4_-\}$
$\{m_+, m_-\}$	$\{m_+, m_-\}$	$\{m_x, m_y\}$	$\{4_+, 4_-\}$	$\{1, 2\}$

- ▶ = Gruppentafel des Rechtecks (PG: 2mm); mit $\{1, 2\} = \mathfrak{N}$ als Neutralelement
- ▶ Die Faktorgruppe, d.h. die Gruppe der Nebenklassen von 4mm/2 ist isomorph zur Symmetriegruppe des Rechtecks (2mm).



Faktorgruppe einer Raumgruppe im Normalteiler $\mathfrak{T}$

- **kristallographisch**
 - ▶ Die Translationengruppe $\mathfrak{T}$ (Elemente: $(\mathbf{I}, \mathbf{t})$) ist Normalteiler jeder Raumgruppe $\mathfrak{G}$.
 - ▶ Bei der Nebenklassenzerlegung von $\mathfrak{G}$ nach $\mathfrak{T}$ stehen in jeder Nebenklasse genau die Elemente $(\mathbf{W}|\mathbf{t}')$, die den gleichen Matrixteil $\mathbf{W}$ besitzen.
 - ▶ Diese Nebenklassen bilden die Elemente der Faktorgruppe $\mathfrak{F}$.
 - ▶ Die Faktorgruppe hat die gleiche Multiplikationstafel wie die Matrixteile $\mathbf{W}$ der Elemente jeder Nebenklasse. Die Faktorgruppe $\mathfrak{F}$ ist damit isomorph zur Punktgruppe $\mathfrak{P}$.
 - ▶ Die Translationengruppe $\mathfrak{T}$ ist Neutralelement der Faktorgruppe!
- **anschaulich**
 - ▶ 'Projektion' der Kristallsymmetrie in die Symmetrie der Elementarzelle

Faktorgruppenzerlegung: Anwendung

- Die irreduziblen Darstellungen (IR) von $(\mathbf{I}|\mathbf{t})$ sind eindimensional und von der Form $e^{i\mathbf{k}\mathbf{t}}$

230 Raumgruppen		
73 symmorphe Raumgruppen (ohne Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen) ↓ $(\mathbf{W} \mathbf{0})$ (Gruppe)	$\mathcal{G}/\mathcal{T}$ ↓	157 nicht-symorphe Raum- gruppen (mit Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen) ↓ $(\mathbf{W} \mathbf{w})$ (!! keine Gruppe)
Da $\mathcal{T}$ Normalteiler ist, sind die Matrixanteile $\mathbf{W}$ der Nebenklassen Darstellungen der Faktorgruppe und der Punktgruppe (isomorph).		
Beim Einwirken von $(\mathbf{W} \mathbf{w})$ auf translationssymmetrische Objekte entstehen für beide Raumgruppentypen Matrizen, die reduzible Darstellungen der Faktorgruppe und der Punktgruppe sind.		

Darstellungstheorie: Anwendung (Forts.)

• Punktgruppen/Faktorgruppen von Kristallen

- 'Lösung' der Eigenwertprobleme bei Kristallen analog der der Punktgruppen, insbesondere bei geringem Impulsübertrag (z.B. Untersuchung der Schwingungszustände mittels IR/Raman-Spektroskopie).
- Analyse der Transformationsmatrizen nur der Elementarzelle
 - nur 'unveränderte' Atome tragen zur Spur der Matrix bei
 - Zahl ω_R 'unveränderter' Atome ergibt sich aus der Ordnung von Punktgruppe/Faktorgruppe (g/h) und der Ordnung der Symmetrieelemente R nach:

$$\omega_R = \frac{g}{h} \frac{h_R}{g_R}$$

- alle Matrizen dieser Atome (auf der Hauptdiagonalen) sind vom Typ

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$$

- für ω unveränderte Atome ist die Spur der Symmetrieeoperation R :
 $\chi(R) = \omega_R(\pm 1 + 2 \cos \alpha)$

Darstellungstheorie: Anwendung

• Punktgruppen von Molekülen (Wdh.)

- Die Sammlung der Matrizen, die die Symmetrien eines Moleküls (Transformation von Abständen, Verschiebungsvektoren) beschreiben, bilden eine reduzible 3N-dimensionale Darstellung der Punktgruppe.
- Die Sammlung der Spuren dieser Matrizen bilden eine reduzible 1-dimensionale Darstellung.
- Ausreduktion nach

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_R \chi(R) \chi_i(R)$$

mit

R Symmetrieeoperation

a_i Häufigkeit der i-ten Darstellung

h Gruppenordnung

$\chi(R)$ Charakter der reduziblen Darstellung bei R

$\chi_i(R)$ Charakter der irreduziblen Darstellung i bei R

- $\mapsto$ irreduzible Darstellungen (Symmetrie der Normalkoordinaten).

Beispiel: Perowskit

O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$		
Sr: 1(a)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$\Leftarrow m3m$	(h=48)
Ti: 1(b)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$\Leftarrow m3m$	(h=48)
O: 3(d)	E	-	$2C_2''$	$2C_4$	$2C_2'/C_2$	i	$2S_4$	-	$\sigma_h/2\sigma_v$	$2\sigma_d$	$\Leftarrow 4/mmm$	(h=16)
	3	0	1	1	2/1	3	1	0	1/2	1	mit $\omega_R = \frac{g}{h} \frac{h_R}{g_R} = 3 \frac{h_R}{g_R}$	
ω_R	5	2	3	3	5	5	3	2	5	3		
Γ	15	0	-3	3	-5	-15	-3	0	5	3	mit $\chi(R) = \omega_R(\pm 1 + 2 \cos \alpha)$	
A_{1g}	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	(R_x, R_y, R_z)	$x^2 + y^2 + z^2$
A_{2g}	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	+1	+1	-1		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
E_g	+2	-1	0	0	+2	+2	0	-1	+2	0		
T_{1g}	+3	0	-1	+1	-1	+3	+1	0	-1	-1		
T_{2g}	+3	0	+1	-1	-1	+3	-1	0	-1	+1	(x, y, z)	
A_{1u}	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2u}	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1	+1		
E_u	+2	-1	0	0	+2	-2	0	+1	-2	0		
T_{1u}	+3	0	-1	+1	-1	-3	-1	0	+1	+1		
T_{2u}	+3	0	+1	-1	-1	-3	+1	0	+1	-1		

Ausreduzieren: $\Gamma = 4 T_{1u}$ (IR-aktiv) + T_{2u}