

Untergruppen und Symmetrieverwandtschaften

Symmetriebeziehungen in der Kristallchemie

Caroline Röhr, Universität Freiburg
Ulrich Müller, Marburg



http://ruby.chemie.uni-freiburg.de/Vorlesung/Seminare/gug_kurs_2022.pdf

Dresden, 30. August 2022

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Gruppe-Untergruppe-Beziehungen in der Festkörperchemie

• Strukturzusammenhänge in der Kristallchemie*

- ① Verzerrungen (elektronisch, sterisch, p/T -induziert) ▶ Symmetrieprinzip
 - ▶ Anpassung der Koordinationen an Größenverhältnisse (Perowskite, AMO_2 , ...)
 - ▶ JAHN-TELLER-Verzerrungen ($d^{8,9}$)
 - ▶ PEIERLS-Verzerrungen, Ausbildung von $M-M$ -Wechselwirkungen (d^1)
 - ▶ stereochemische aktive 'Lone-Electron Pairs' (s^2 -Kationen)
 - ▶ Änderungen des Bindungstyps, 'Sekundäre' Wechselwirkungen, ...
- ② Ordnungsvarianten (Überstrukturen, „Kolorierung“) ▶ Strukturchemie
 - ▶ Substitution symmetrieäquivalenter Positionen durch verschiedene Elemente; z.B.: b.c.c. $\rightarrow$ β -Messing/CsCl; Diamant $\rightarrow$ Zinkblende
- ③ „aufgefüllte“ Varianten ▶ Strukturchemie
 - ▶ **Lücken-aufgefüllt**: partielle Besetzung symmetrieäquivalenter Lücken
z.B. Kristallchemie von Salze: f.c.c. $\rightarrow$ $CdCl_2$; h.c.p. $\rightarrow$ CdI_2
 - ▶ **Bindungs-aufgefüllt**: $E-E \longrightarrow E-Q-E$; z.B. Si $\rightarrow$ SiO_2 (Cristobalith)

• **Phasenumwandlungen** $\mapsto$ Holger Kohlmann

• **Zwillinge** $\mapsto$ Oliver Oeckler

* Struktur-Beschreibung, -Verständnis (räumlich, elektronisch), -Lösung, -Vorhersage; physikalische Eigenschaften

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Das Symmetrieprinzip in der Kristallchemie

H. BÄRNIGHAUSEN (1980¹)

- ① Im festen Zustand besteht eine ausgeprägte Tendenz nach möglichst hochsymmetrischen Anordnungen der Atome².
- ② Durch spezielle Eigenschaften von Atomen oder deren Baugruppen kann die höchstmögliche Symmetrie oft nicht erreicht werden; die Abweichungen von der Idealsymmetrie sind aber meist recht klein (*Pseudosymmetrie*)³.
- ③ Bei Phasenumwandlungen und bei Festkörperreaktionen, die zu Produkten mit niedrigerer Symmetrie führen, werden häufig Symmetrieeigenschaften der Ausgangssubstanz indirekt konserviert, und zwar durch eine entsprechende Orientierung von Domänen.⁴

► zur Übersicht



H. Bärnighausen⁵

[1] H. Bärnighausen, *MATCH, Commun. Math. Comput. Chem.* **9**, 139-175 (1980); [2] s.a. F. Laves (1957), G. O. Brunner (1971); [3] s.a. E. Fedorow (1904), P. Niggli (1926); [4] s.a. J. D. Bernal/A. L. Mackay (1965); [5] *ZAAC* **629**, 363 (2003).

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

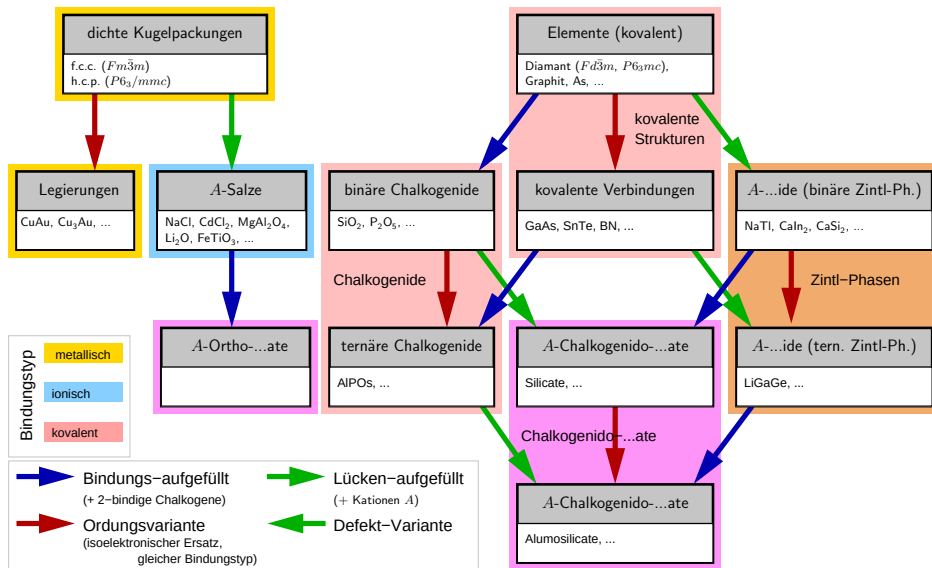
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Gruppe/Untergruppe-Beziehungen in der Kristallchemie



► zur Übersicht

Audio mit Erklärung dazu, auf ruby

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

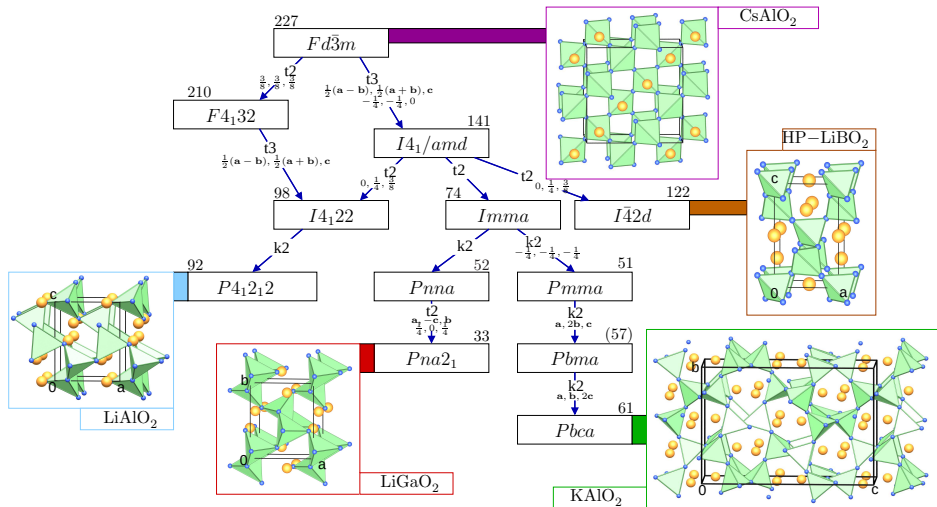
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

„Stammbaum“ der Tetraeder-Raumnetzstrukturen $A^I M^{III}O_2$



► zur Übersicht

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Beschreibung von Kristallstrukturen, Standardisierung

- Beschreibung einer Kristallstruktur:

- ① Gitterparameter a , b , c , α , β und γ
- ② Raumgruppe (HERMANN-MAUGUIN-Symbol, Nummer, ggf. Ursprung („origin choice“))
- ③ Koordinaten je eines Atoms eines Punktorbits

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Beschreibung von Kristallstrukturen, Standardisierung

• Beschreibung einer Kristallstruktur:

- ① Gitterparameter a , b , c , α , β und γ
- ② Raumgruppe (HERMANN-MAUGUIN-Symbol, Nummer, ggf. Ursprung („origin choice“))
- ③ Koordinaten je eines Atoms eines Punktorbits

• Standardisierung (z.B. **STRUCTURE TIDY**¹, in **PLATON** enthalten, **ICSD**)

- ▶ konventionelle Aufstellung der Raumgruppe gemäß **IT A**
 - ▶ Ursprung im Inversionszentrum („origin choice 2“)
 - ▶ kubisch: z.B. $Fd\bar{3}m$
 - ▶ tetragonal: z.B. $I4_1/amd$, $I4_1/acd$,
 - ▶ orthorhombisch: z.B. $Ccce$, $Fddd$
 - ▶ monoklin: ausgezeichnete Achse b („cell choice 1“)
 - ▶ R -Raumgruppen mit hexagonalen Achsen
- ▶ reduzierte Elementarzelle
 - ▶ $a \leq b \leq c$
 - ▶ triklin: α , β , γ alle $60 \dots 90^\circ$ oder alle $90 \dots 120^\circ$
- ▶ Atomkoordinaten
 - ▶ $0 \leq x, y, z < 1$; minimaler Wert für $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ (Γ)
- ▶ Atom-Reihenfolge nach absteigender Wyckoff-Symmetrie gemäß **IT-A**

[1] L. M. Gelato, E. Parthé: STRUCTURE TIDY: A computer program to standardize structure data, *J. Appl. Crystallogr.* **A46**, 467-473 (1990).

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Kristallstruktur

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 (Isometrien, affine Abbildungen, s.u.) sind.
- ▶ Motive können Punkte, Figuren, Pflastersteine, Atome, Moleküle, Ionen usw. aber auch kontinuierliche Funktionen wie z.B. die Elektronendichte sein.

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Definitionen: Translationsvektor, Gitter(vektoren)

Translation

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

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

Gitter(vektoren)

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

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

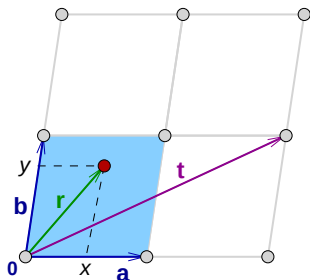
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Analytische Beschreibung



Positionsvektor:

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

Gittervektor:

$$\mathbf{t} = t_1\mathbf{a} + t_2\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{r}'$, 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.

Basis, Elementarzelle

- 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

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

mit ganzzahligen t_i dargestellt werden kann.

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

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

- ▶ 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

- ▶ $(\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_k) = (\mathbf{a}_k \cdot \mathbf{a}_i) = g_{ik} = g_{ki}$
- ▶ (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: $PQ = r_{pq}$: $r_{pq}^2 = \sum_{i,k} g_{ik} (q_i - p_i)(q_k - p_k)$
- ▶ Volumen der Elementarzelle: $V^2 = \det(\mathbf{G})$

- ▶ Die metrischen Tensoren des Gitters $\mathbf{T}$ und des zugehörigen reziproken Gitters $\mathbf{T}^*$ sind zueinander invers.

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Basiswechsel I: Transformation der Basisvektoren

- ▶ **Basis:** $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$
- ▶ Transformation in neue Basis $\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$
 - ▶ Transformationsmatrix bei gleichem Ursprung: $\mathbf{P}$
 - ▶ Verschiebung: $\mathbf{p}$
 - ▶ zusammen: $\begin{pmatrix} \mathbf{a}' & \mathbf{b}' & \mathbf{c}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} \end{pmatrix} \mathbf{P} + \mathbf{p}$
 - ▶ oder mit der geränderten Matrix: $\mathbb{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{p} \\ \mathbf{o} & 1 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}' & \mathbf{b}' & \mathbf{c}' & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} & \mathbf{c} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{11} & P_{21} & P_{13} & p_1 \\ P_{12} & P_{22} & P_{23} & p_2 \\ P_{13} & P_{23} & P_{33} & p_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

(Basis = Vektoren!)

- ▶ Transformation des **metrischen Tensors** $\mathbf{G}$

$$\text{real } \mathbf{G} = \mathbf{P}^T \mathbf{G} \mathbf{P}$$

$$\text{reziprok } \mathbf{G}^* = \mathbf{Q} \mathbf{G}^* \mathbf{Q}^T$$

- ▶ **Volumenänderung** der Basiszelle: $V' = \det(\mathbf{P})V$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Basiswechsel II: Transformation von Punkt(Atom-)koordinaten

► **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 mit der geränderten Matrix: $\mathbb{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q} & \mathbf{q} \\ \mathbf{o} & 1 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{21} & Q_{13} & q_1 \\ Q_{12} & Q_{22} & Q_{23} & q_2 \\ Q_{13} & Q_{23} & Q_{33} & q_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{oder kurz } \chi' = \mathbb{Q}\chi$$

► mit $\mathbb{P} = \mathbb{Q}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{p} \\ \mathbf{o} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{-1} & -\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{q} \\ \mathbf{o} & 1 \end{pmatrix}$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

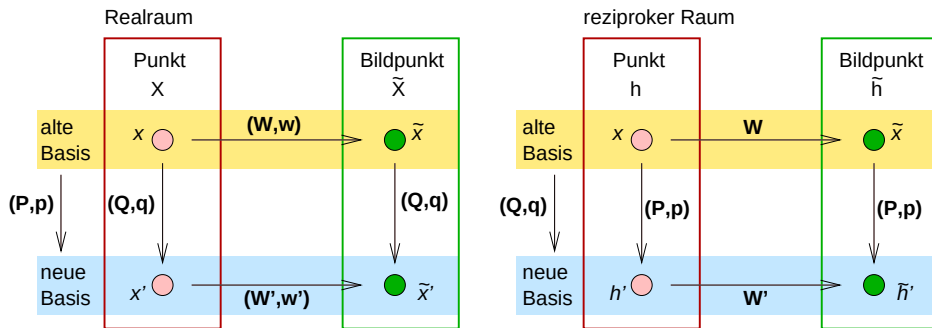
Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Basiswechsel III: Realer/reziproker Raum

- ▶ Größen, die mit der gleichen Matrix transformieren, sind kovariant:
 - ▶ mit $\mathbb{P}$ transformieren:
 - ▶ Vektoren im Realraum (z.B. die Basisvektoren $\mathbf{a}_i$)
 - ▶ 'Punkte' im reziproken Raum (z.B. Millerindizes h, k, l von Reflexen)
 - ▶ mit $\mathbb{Q}$ 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.



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

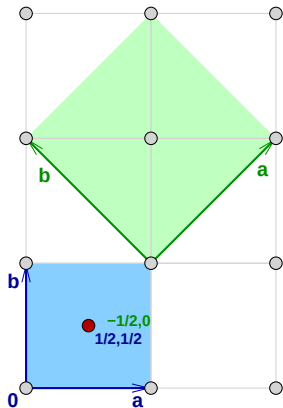
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Basiswechsel: 2-dimensionales Beispiel



- Transformation der Basisvektoren mit der Matrix

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- $\mathbb{P}^{-1} = \mathbb{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

- 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 $\det(\mathbf{P}) = 2$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

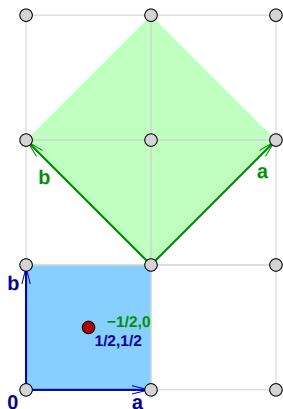
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Basiswechsel: 2-dimensionales Beispiel



- Transformation der Basisvektoren mit der geränderten

$$\text{Matrix } \mathbb{P} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- $\mathbb{P}^{-1} = \mathbb{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

- 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: $|\mathbf{a}'| = |\mathbf{b}'| = \sqrt{18} = 3\sqrt{2} = 4.24$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Abbildungen: Einige Definitionen

Symmetrieoperationen

Eine **Symmetrieoperation** (z.B. kristallographische Symmetrieoperation) 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.

Isometrien

Die Abbildungen (Symmetrieoperationen) 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.

Raumgruppen

Die Menge aller Symmetrieoperationen (Isometrien) einer Kristallstruktur heißt die **Raumgruppe** dieser Kristallstruktur.

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Beschreibung von Abbildungen

- ▶ Jede Symmetrieoperationen ($\mathbf{W}|\mathbf{w}$) (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

$\tilde{\mathbf{x}}$:

$$\begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} & W_{13} \\ W_{12} & W_{22} & W_{23} \\ W_{13} & W_{23} & W_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ \tilde{z} \end{pmatrix} \quad \text{kurz } \tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{W}, \mathbf{w})\mathbf{x}$$

- ▶ 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 maximal 48 Stück)

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Notation in den International Tables A

- ▶ vereinfachte Darstellung dieser Matrizen in den [International Tables Vol. A \(IT-A\)](#):
- ▶ Beispiele:

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

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

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

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:

$$(\mathbf{W}, \mathbf{w}) \mapsto \mathbb{W} = \left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & \mathbf{W} & & \mathbf{w} \\ & & & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \text{ nach: } \begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ \tilde{z} \\ 1 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & \mathbf{W} & & \mathbf{w} \\ & & & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix}$$

► Hintereinanderausführen von Symmetrieoperationen = Matrizenmultiplikation (vgl. Punktgruppen) $\mathbb{U} = \mathbb{V}\mathbb{W}$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & \mathbf{U} & & \mathbf{u} \\ & & & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & \mathbf{V} & & \mathbf{v} \\ & & & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc|c} & & & \\ & \mathbf{W} & & \mathbf{w} \\ & & & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

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 $\chi_q - \chi_p =$

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

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

$$\begin{pmatrix} \tilde{\Delta x} \\ \tilde{\Delta y} \\ \tilde{\Delta z} \\ 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{ccc|c} & & & t_x \\ & & & t_y \\ & & & t_z \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ 0 \end{pmatrix}$$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

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

- ▶ **Isometrien** sind affine Abbildungen, die alle Abstände und Winkel (und damit auch Volumina) aller Gegenstände unverzerrt lassen.
- ▶ Volumenänderungen sind durch die Determinante der Abbildungsmatrix $\mathbf{W}$ bestimmt:

$$\det(\mathbf{W}) = \pm 1$$

(aber: nicht hinreichende Bedingung)

- ▶ 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.
- ▶ Invariante der Abbildung sind unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems (Basiswechsel):
 - ▶ $\det(\mathbf{W})$
 - ▶ $\text{Sp}(\mathbf{W})$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

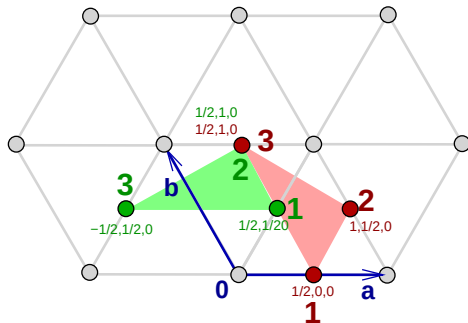
Zusammenfassung,
Literatur

Beispiel: hexagonale Basis

► $a = b \neq c; \gamma = 120^\circ$;

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

► $\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \det(\mathbf{W}) = 1$



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

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

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Typen von Isometrien I

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

- ▶ **Identität** (1; I)

- ▶ $\mathbf{W} = \mathbf{I}$ (Einheitsmatrix) und $\mathbf{w} = 0$ (Nullspalte)
- ▶ $x = \tilde{x}$ für alle Punkte
- ▶ Jeder Punkt ist Fixpunkt.

- ▶ **Translationen** T :

- ▶ $\mathbf{W} = \mathbf{I}$ und $\mathbf{w} \neq 0$
- ▶ Es gibt keinen Fixpunkt.

- ▶ **Drehungen** R und **Schraubungen** R_n : ▶ Exkurs zur Ableitung

- ▶
$$\mathbb{W} = \left(\begin{array}{ccc|c} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & w' \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

- ▶ Der Drehwinkel α ergibt sich aus der Spur der Matrix $\mathbf{W}$: $\cos \alpha = \frac{\text{Sp}(\mathbf{W})-1}{2}$
- ▶ Drehung R : $w' = 0$
- ▶ Schraubung R_n : $w' \neq 0$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Typen von Isometrien II

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

▶ Inversion ($\bar{\mathbf{I}}$; I)

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

▶ Drehinversion

- ▶ Kombination von Drehung R und Inversion $\bar{\mathbf{I}}$

▶ 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: $\mathbf{t} = 0$ (eine Ebene bleibt fest)
- ▶ Gleitspiegelung: $\mathbf{t} \neq 0$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

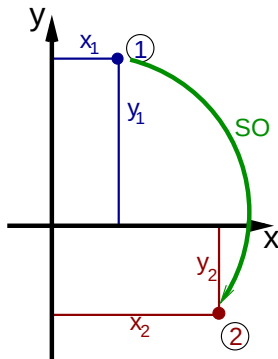
Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Exkurs: Ableitung der Matrizen der Punktsymmetrioperationen

- 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:

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

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

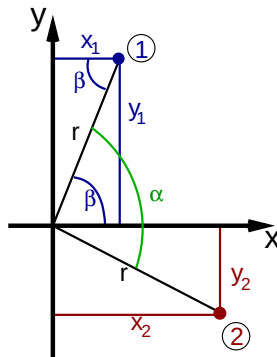
Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Drehung R : 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 $y_2 = -r \sin (\alpha - \beta)$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Drehung R : 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:

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

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Zusammenfassung: Matrizen der Punkt-Symmetrieoperationen

• Basis-Symmetrieoperationen

Drehung R (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)

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

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Zusammenfassung: Matrizen der Punkt-Symmetrieoperationen

• Basis-Symmetrieoperationen

Drehung R (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)

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

• Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

► = Produkte der Basis-Symmetrieoperationen

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)

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

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

**Beschreibung von
Kristallstrukturen II**

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Beschreibung von Kristallstrukturen, Standardisierung (Forts.)

• Beschreibung einer Kristallstruktur:

- ① Gitterparameter a , b , c , α , β und γ
- ② Raumgruppe (HERMANN-MAUGUIN-Symbol, Nummer, ggf. Ursprung („origin choice“))
- ③ Koordinaten je eines Atoms eines Punktorbits

• Standardisierung (z.B. STRUCTURE TIDY¹, in PLATON enthalten, ICSD)

- ▶ konventionelle Aufstellung der Raumgruppe gemäß IT A
 - ▶ Ursprung im Inversionszentrum („origin choice 2“)
 - ▶ kubisch: z.B. $Fd\bar{3}m$
 - ▶ tetragonal: z.B. $I4_1/amd$, $I4_1/acd$,
 - ▶ orthorhombisch: z.B. $Ccce$, $Fddd$
 - ▶ monoklin: ausgezeichnete Achse b („cell choice 1“)
 - ▶ R -Raumgruppen mit hexagonalen Achsen
- ▶ reduzierte Elementarzelle
 - ▶ $a \leq b \leq c$
 - ▶ triklin: α , β , γ alle $60 \dots 90^\circ$ oder alle $90 \dots 120^\circ$
- ▶ Atomkoordinaten
 - ▶ $0 \leq x, y, z < 1$; minimaler Wert für $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ (Γ)
- ▶ Atom-Reihenfolge nach absteigender Wyckoff-Symmetrie gemäß IT-A

[1] L. M. Gelato, E. Parthé: STRUCTURE TIDY: A computer program to standardize structure data, *J. Appl. Crystallogr.* **A46**, 467-473 (1990).

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Beispiel: $\text{KHg}_2 = \text{CeCu}_2$

▶ KHg_2

▶ E. J. Duwell, N. C. Baenzinger, *Acta Crystallogr.* **8**, 705 (1955).

▶ orthorhombisch, *Imma*

▶ $a=810$ pm, $b=516$ pm, $c=877$ pm

▶	K	4e	0	$\frac{1}{4}$	0.703
	Hg	8i	0.198	$\frac{1}{4}$	0.087

▶ KHg_2 : Achstausch $b, a, -c$

▶ für *Imma* $\mapsto$ Verschiebung um $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$

▶ $+ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ (*I*-Zentrierung)

▶ Inversion aller Atomparameter

▶ $\mapsto$ K: 0, $\frac{1}{4}$, 0.548

▶ $\mapsto$ Hg: 0, 0.052, 0.163

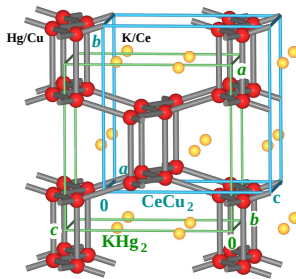
▶ CeCu_2 ¹

▶ A. C. Larson, D. T. Cromer, *Acta Crystallogr.* **14**, 73 (1961).

▶ orthorhombisch, *Imma*

▶ $a=443$ pm, $b=705$ pm, $c=754$ pm

▶	Ce	4e	0	$\frac{1}{4}$	0.538
	Cu	8h	0	0.051	0.165



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

¹ Zitat: „... can be considered as a new type ...“

Isotypie (gleicher Strukturtyp)

Isotypie

Die Kristallstrukturen zweier Elemente/Verbindungen sind isotyp, wenn sie das gleiche Bauprinzip und die gleiche Raumgruppe haben.

- ▶ 1:1-Beziehung zwischen allen Atomlagen
- ▶ ~~gleiche Wyckoff Sequenz~~ (s.o. und s.u.)
- ▶ Absolutwerte der Gitterparameter nicht zu unterschiedlich, quantifizierbar mit*:

$$\Delta(a) = \frac{(\frac{b_1}{a_1})(\frac{c_1}{a_1})}{(\frac{b_2}{a_2})(\frac{c_2}{a_2})}$$

- ▶ nur geringe Abweichungen der Atomkoordinaten, quantifizierbar mit* (!! Σ)

$$\Delta(x) = \frac{\Sigma m \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}}{\Sigma m}$$

- ▶ Abweichung insgesamt (=0 bei kompletter Übereinstimmung, s.a. **)

$$\Delta = [\sqrt{2}\Delta(x) + 1]\Delta(a) - 1$$

• Benennung des Strukturtyps

* 1,2: Strukturen 1 und 2; m : Multiplizität der Punktlage; ** BCS: COMPSTRU

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Abweichungen von den Standardisierungs-„Regeln“

- **Abweichungen** kommen vor und können sinnvoll sein ...
 - ▶ ältere Literatur
 - ▶ Anpassung an Gruppe-Untergruppe-Stammbäume (s.u.)
 - ▶ tetragonal: Zentrierungen, z.B. F statt I
 - ▶ rhomboedrisch: Rhomboeder-Aufstellung (keine R -Zentrierung)
 - ▶ hexagonal: H -Zentrierung ($\pm(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0)$)
 - ▶ orthorhombisch: Achs-Vertauschung (Tab. 3.2. in **IT-A**)
 - ▶ monoklin: bei Zentrierung oder Gleitspiegelebenen (z.B. $P12_1/n1 - P2_1/c$, $C2/c - A2/a$, s. **IT-A**)
 - ▶ $\mapsto$ Basiswechsel
 - ▶ $\mapsto$ Symmetrie (ggf. Winkeländerungen) beachten
 - ▶ Molekül-Strukturen (Koordinaten)
 - ▶ Wahl so, dass komplettes Molekül entsteht
 - ▶ gewohnte, chemisch sinnvolle Nummerierung/Reihenfolge der Atome
 - ▶ ...
- **Nachteile** ...
 - ▶ nicht vollständig tabelliert
 - ▶ von vielen Programmen nicht unterstützt

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Abweichungen von den Standardisierungs-„Regeln“

- **Abweichungen** kommen vor und können sinnvoll sein ...
 - ▶ ältere Literatur
 - ▶ Anpassung an Gruppe-Untergruppe-Stammbäume (s.u.)
 - ▶ tetragonal: Zentrierungen, z.B. F statt I
 - ▶ rhomboedrisch: Rhomboeder-Aufstellung (keine R -Zentrierung)
 - ▶ hexagonal: H -Zentrierung ($\pm(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0)$)
 - ▶ orthorhombisch: Achs-Vertauschung (Tab. 3.2. in **IT-A**)
 - ▶ monoklin: bei Zentrierung oder Gleitspiegelebenen (z.B. $P12_1/n1 - P2_1/c$, $C2/c - A2/a$, s. **IT-A**)
 - ▶ $\mapsto$ Basiswechsel
 - ▶ $\mapsto$ Symmetrie (ggf. Winkeländerungen) beachten
 - ▶ Molekül-Strukturen (Koordinaten)
 - ▶ Wahl so, dass komplettes Molekül entsteht
 - ▶ gewohnte, chemisch sinnvolle Nummerierung/Reihenfolge der Atome
 - ▶ ...
- **Nachteile** ...
 - ▶ nicht vollständig tabelliert
 - ▶ von vielen Programmen nicht unterstützt

$\Rightarrow$ darüber hinaus äquivalente Beschreibungen $\Rightarrow$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Äquivalente Beschreibungen von Kristallstrukturen

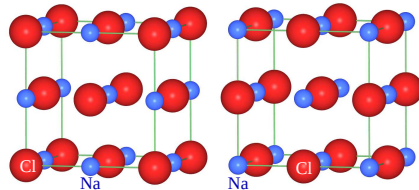
- ▶ für alle Raumgruppen außer $Im\bar{3}m$ und $Ia\bar{3}d \mapsto$ verschiedene Möglichkeiten der Strukturbeschreibung

- ▶ **Beispiele:**

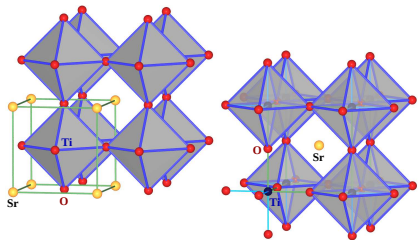
- 1 NaCl-Struktur ($Fm\bar{3}m$:
Cl auf $4a$: $0,0,0$; Na auf $4b$: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
oder $\Leftrightarrow$)
- 2 Perowskit, $SrTiO_3$ ($Pm\bar{3}m$:
Sr auf $1a$: $0,0,0$ oder $1b$: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)
- 3 AlB_2 ($P6/mmm$: Al auf $0,0,0$ oder $0,0,\frac{1}{2}$)

- ▶ ! sehr ! wichtig auch für
Gruppe-Untergruppe-Beziehungen
- ? Zahl äquivalenter Beschreibungen ... und
- ? Transformation zwischen ihnen ...

$\mapsto$ **euklidischer Normalisator** der Raumgruppe
 $\mathcal{G}$



2 $\times$ Kochsalz-Struktur



2 $\times$ Perowskit-Struktur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

* $\mapsto$ Gruppe/Untergruppen (G-I) $\mapsto$ Normalisatoren (G-II) $\mapsto$ weitere, für Gruppe-Untergruppe-Beziehungen wichtige Begriffe (G-III)

Äquivalente Beschreibungen von Kristallstrukturen

- ▶ für alle Raumgruppen außer $Im\bar{3}m$ und $Ia\bar{3}d \mapsto$ verschiedene Möglichkeiten der Strukturbeschreibung

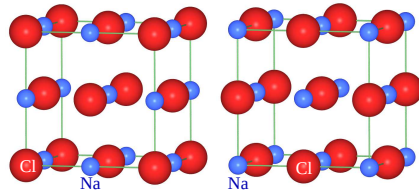
- ▶ Beispiele:

- 1 NaCl-Struktur ($Fm\bar{3}m$:
Cl auf $4a$: $0,0,0$; Na auf $4b$: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
oder $\Leftrightarrow$)
- 2 Perowskit, $SrTiO_3$ ($Pm\bar{3}m$:
Sr auf $1a$: $0,0,0$ oder $1b$: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)
- 3 AlB_2 ($P6/mmm$: Al auf $0,0,0$ oder $0,0,\frac{1}{2}$)

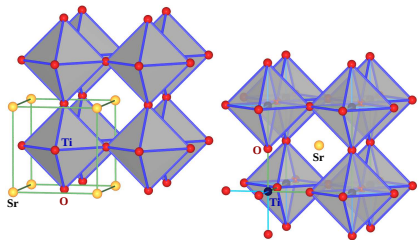
- ▶ ! sehr ! wichtig auch für
Gruppe-Untergruppe-Beziehungen
- ? Zahl äquivalenter Beschreibungen ... und
- ? Transformation zwischen ihnen ...

$\mapsto$ **euklidischer Normalisator** der Raumgruppe
 $\mathcal{G}$

?????!! *



2 $\times$ Kochsalz-Struktur



2 $\times$ Perowskit-Struktur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

* $\mapsto$ Gruppe/Untergruppen (G-I) $\mapsto$ Normalisatoren (G-II) $\mapsto$ weitere, für Gruppe-Untergruppe-Beziehungen wichtige Begriffe (G-III)

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

**Gruppen und
Untergruppen**

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Gruppenaxiome

- 1 Eine Gruppe $\mathcal{G}$ ist eine Menge von Elementen g_i , zwischen denen eine Verknüpfung besteht, so dass jedem geordneten Paar g_i, g_j genau ein Element $g_k \in \mathcal{G}$ zugeordnet ist. (Abgeschlossenheit)

- 2 Die Verknüpfung ist *assoziativ*.

- 3 Es gibt ein Neutralelement e für das gilt:

$$eg_i = g_ie = g_i \text{ für alle } g_i \in \mathcal{G}$$

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

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

- Anzahl der Elemente $|\mathcal{G}|$ der Gruppe $\mathcal{G}$ nennt man die Ordnung der Gruppe.

- z.B. Punktgruppen: endliche Gruppen
- z.B. Raumgruppen: unendliche Gruppen

- Ordnung k eines Elementes: $g^k = e$

- z.B. vierzählige Drehachse: $k = 4$

- Kommutative/ABELsche Gruppen: $g_ig_k = g_kg_i$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Untergruppen: Definitionen

Ober- und Untergruppen

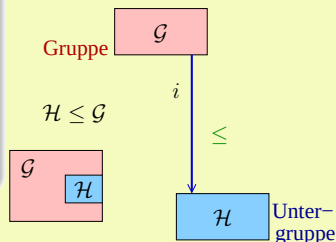
- Beliebige Untermengen $A = \{a_1, a_2, \dots\}$ heißen **Komplexe** aus $\mathcal{G}$.
- Komplexe, die die Gruppenaxiome erfüllen, sind **Untergruppen** von $\mathcal{G}$:

$$\mathcal{H} \leq \mathcal{G}$$

- $\mathcal{H} < \mathcal{G}$ ist **maximale Untergruppe** von $\mathcal{G}$, wenn es keine Gruppe $\mathcal{Z}$ gibt, für die $\mathcal{H} < \mathcal{Z} < \mathcal{G}$ gilt.
- Ist $\mathcal{H}$ eine maximale Untergruppe von $\mathcal{G}$, dann nennt man $\mathcal{G}$ eine **minimale Obergruppe** von $\mathcal{H}$.

Für den **Index** (i) gilt:

- bei endlichen Gruppen: $i = \frac{|\mathcal{G}|}{|\mathcal{H}|}$
- bei unendlichen Gruppen: $i = |\mathcal{G} : \mathcal{H}|$
(z.B. für die Kristallographie: obwohl beide Gruppen unendlich sind, kann man sagen, dass z.B. eine t3-Untergruppe nur $\frac{1}{3}$ der Symmetrien der Obergruppe hat)



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

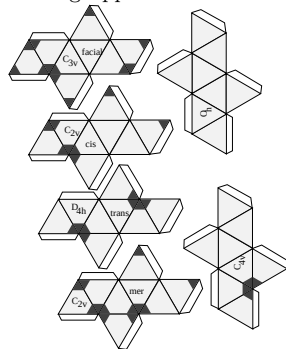
Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

(Unter)Gruppen in der Molekülchemie und Kristallographie (Wdh. ?)

- Die Molekülsymmetrie bildet eine endliche Gruppe, die **Punktgruppe** $\mathcal{P}$ des Moleküls.
 - Die kristallographischen Punktgruppen der Moleküle sind entweder Untergruppen der kubischen PG $\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$ (Ordnung 48) oder der hexagonalen PG $\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (Ordnung 24)*.
- Die Menge aller Symmetrieeoperationen (Isometrien) einer Kristallstruktur heißt die **Raumgruppe** $\mathcal{G}$ dieser Kristallstruktur.
- Die Punktgruppe $\mathcal{P}$ einer Kristallstruktur ist die Symmetriegruppe des Bündels der Flächennormalen.
- Die Menge aller Symmetrieeoperationen einer Punkt/Raum-Gruppe, welche einen Punkt festlassen, heißt die Lagesymmetriegruppe $\mathcal{S}$ (Stabilisator) dieses Punktes.
 - $\mathcal{S}$ ist eine Untergruppe von $\mathcal{P}$ bzw. $\mathcal{G}$.
 - Punkte allgemeiner Lage: $\mathcal{S} = \mathcal{I}$ (nur Identität)

Beispiel Untergruppen von Punktgruppen



Substitutionsmuster oktaedrischer Komplexe

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

* vollständige Diagramme s. IT-A Kap. 10.1.

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

**Klassifizierung maximaler
Untergruppen**

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Klassifizierung maximaler Untergruppen $\mathcal{H}$ der Raumgruppen $\mathcal{G}$

Satz von HERMANN (1929)

Eine maximale Untergruppe $\mathcal{H}$ einer Raumgruppe $\mathcal{G}$ ist entweder translationengleich oder klassengleich.

translationen-gleich (t)

- ▶ Translationengitter unverändert $\mapsto$ gleiche Größe der primitiven (!) Elementarzelle
- ▶ Ausdünnung der Symmetrie innerhalb der EZ ($\mathbf{W}$)
- ▶ $\mathcal{T}_H = \mathcal{T}_G$ und $\mathcal{P}_H < \mathcal{P}_G$

klassen-gleich (k)

- ▶ Fortfall von Translationssymmetrie ($\mathbf{w}$) $\mapsto$ Vergrößerung der primitiven Elementarzelle
- ▶ Gruppe und Untergruppe gehören zur gleichen Kristallklasse
- ▶ $\mathcal{T}_H < \mathcal{T}_G$ und $\mathcal{P}_H = \mathcal{P}_G$
- ▶ Spezialfall: **isomorph (i)**
 - ▶ Gruppe und Untergruppe gehören zum gleichen/enantiomorphen Raumgruppentyp (erlaubte Indizes: Primzahlen p ; tetragonal/hexagonal: auch p^2 ; kubisch: auch p^3)



Carl Hermann
(1898-1961)¹

erlaubte Indizes:

(außer bei isomorph)

- trikl. - tetr.: $i = 2$
- trig./hex.: $i = 2, 3$
- kubisch: $i = 2, 3, 4$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

¹ <http://staff-www.uni-marburg.de/~fischerw/Hermann.htm>; web.archive.org

Untergruppen in IT-A*: Beispiel $\mathcal{G} = Cmce$ (Nr. 64)

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $C222_1$ (1; 2; 3; 4;)+

translationengleich

[2] $C112_1/e$ ($P2_1/c$) (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] $Cmce$ ($\mathbf{a}' = 3\mathbf{a}$); [3] $Cmce$ ($\mathbf{b}' = 3\mathbf{b}$); [3] $Cmce$ ($\mathbf{c}' = 3\mathbf{c}$)

Minimal non-isomorphic supergroups

I none

translationengleich

II [2] $Fmmm$; [2] $Pmcm$ ($\mathbf{a}' = \frac{1}{2}\mathbf{a}$, $\mathbf{b}' = \frac{1}{2}\mathbf{b}$) ($Pmma$); [2] $Cmme$ ($\mathbf{c}' = \frac{1}{2}\mathbf{c}$) klassengleich

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

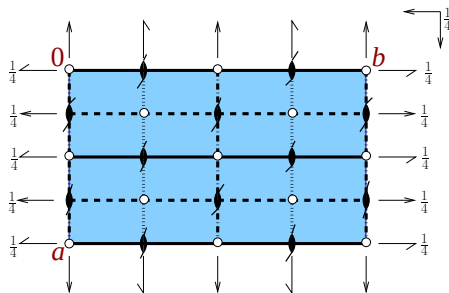
Zusammenfassung,
Literatur

t2-Symmetrieabbau $Cmce \rightarrow C222_1$

$Cmce$

$-\ominus$	0	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	b	$\ominus+$
$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$	$\ominus+$	$\ominus+$
$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$\ominus$
$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$\ominus$
$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$	$\ominus+$	$\ominus+$
$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$	$\ominus+$	$\ominus+$

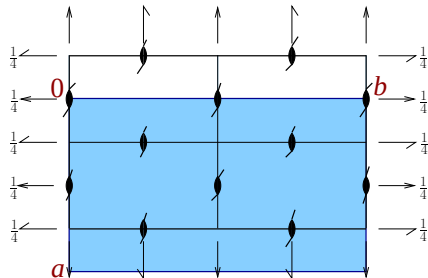
a



$C222_1$

$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$
0	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	b
$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$
$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$
$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$
$-\ominus$	$\ominus+$	$\frac{1}{2}+$	$\ominus$	$\frac{1}{2}-$	$-\ominus$	$\ominus+$

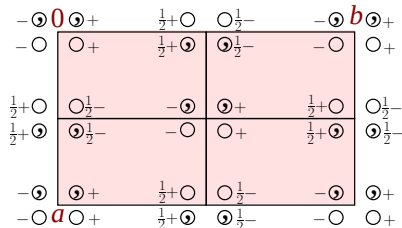
a



Einleitung
... von gestern!
Beschreibung von Kristallstrukturen II
Gruppen und Untergruppen
Gruppentheorie I
Klassifizierung maximaler Untergruppen
Formales zu Stammbäumen
Äquivalente Aufstellungen
Gruppentheorie II: Normalisatoren
Anwendung, Beispiele
Maximale Untergruppen
Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation
Anwendung, Beispiele
t-Untergruppen
i-Untergruppen
k-Untergruppen
Bilanz
Komplexere Symmetriebeziehungen
Zusammenfassung, Literatur

k2-Symmetrieabbau $Cmce \rightarrow Pmcb$

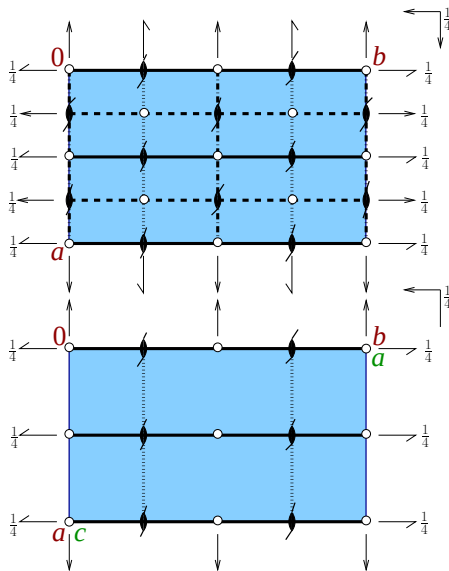
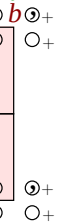
$Cmce$



$Pmcb$

Pbam

a



Einleitung
... von gestern!
Beschreibung von Kristallstrukturen II
Gruppen und Untergruppen
Gruppentheorie I
Klassifizierung maximaler Untergruppen
Formales zu Stammbäumen
Äquivalente Aufstellungen
Gruppentheorie II: Normalisatoren
Anwendung, Beispiele
Maximale Untergruppen
Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation
Anwendung, Beispiele
t-Untergruppen
i-Untergruppen
k-Untergruppen
Bilanz
Komplexere Symmetriebeziehungen
Zusammenfassung, Literatur

Kristallographische Punkt-Orbits

Die Menge aller Punkte, die in einer Raumgruppe symmetrieäquivalent zu einem Punkt sind, nennt man ein **kristallographisches Punkt-Orbit**. Das Orbit kann durch die Koordinaten eines beliebigen seiner Punkte repräsentiert werden.

- ▶ alle Koordinatenwerte durch Symmetrie fixiert $\mapsto$ Orbit = Punktlage (WYCKOFF-Position)
- ▶ bei freien Parametern $\mapsto$ Punktlage umfaßt unendlich viele Punkt-Orbits derselben Lagesymmetrie

Beispiel (Raumgruppe $Cmc2_1$)

- ▶ Punktlage $4b: \frac{1}{2}, 0, 0$, Lagesymmetrie $2/m\ldots$, besteht aus einem Orbit
- ▶ Punktlage $8c: \frac{1}{4}, y, \frac{1}{4}$, Lagesymmetrie $.2.$ hat unendlich viele Orbits

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

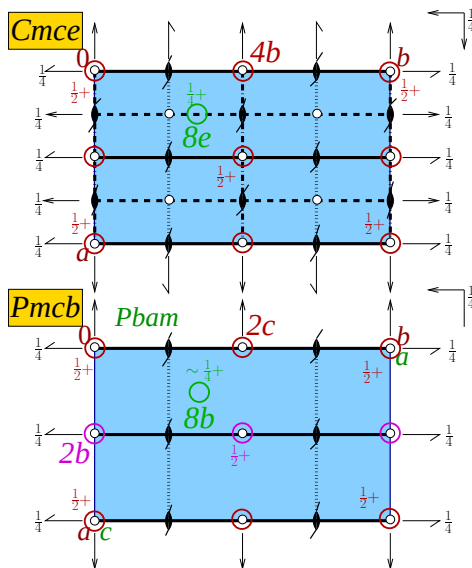
Zusammenfassung,
Literatur

Atompositionen (krist. Punkt-Orbits) beim Symmetrieabstieg

- Gruppe-Untergruppe-Beziehung
 $\mapsto$ eindeutige **Beziehungen zwischen Orbits***:

- Entweder das Orbit spaltet in mehrere Orbits auf ...
 - ▶ z.B. $4b (Cmce) \xrightarrow{k2} 2b (0,0,\frac{1}{2})$ und $2c (0,\frac{1}{2},0) (Pbam)$
 - ▶ alle Orbits mit $2/m$ -Punktsymmetrie
- ... oder seine Lagesymmetrie verringert sich ...
 - ▶ z.B. $8e (Cmce) \xrightarrow{k2} 8b (Pbam)$
 - ▶ .2. $\mapsto 1$ (allgemeine Lage)
- ... oder beides.

(Tabellierung und weitere Beispiele folgen)



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

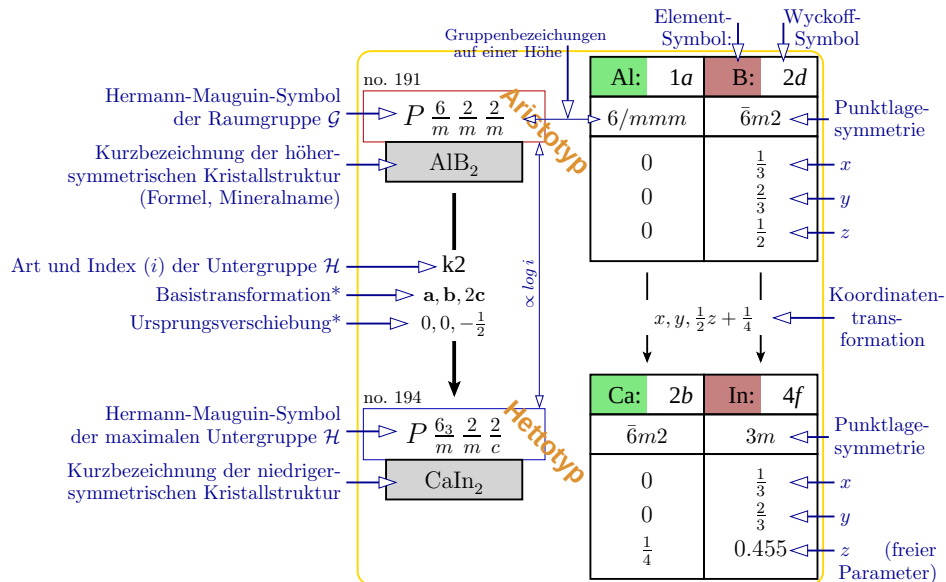
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Merkblatt zur formalen Darstellung von BÄRNIGHAUSEN-Stammbäumen



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Zusammenfassung der Empfehlungen¹

- ▶ Nur Raumgruppen zu nennen, ist ungenügend. Wir vergleichen Kristallstrukturen, nicht Raumgruppen!
- ▶ Die vertikalen Abstände zwischen den Raumgruppensymbolen proportional zu den Logarithmen der Indices wählen.
- ▶ Basistransformationen und Ursprungsverschiebungen immer nennen. (! Die richtigen Ursprungsverschiebungen verwenden !)
- ▶ Alle Daten sollen die Verwandtschaft zwischen den Strukturen deutlich hervortreten lassen, daher:
 - ▶ Für jede Struktur die Atomkoordinaten aller Atome der asymmetrischen Einheit aufführen. Dabei auf strikte Korrespondenz zwischen den Strukturen achten.
 - ▶ Man verfolge, wie sich die Atomlagen von jeder Raumgruppe zu ihren Untergruppen entwickeln. Größere Sprünge bei den Koordinatenwerten sind nicht erlaubt.
 - ▶ Zelltransformationen vermeiden, wenn möglich. Lieber nichtkonventionelle Aufstellungen der Raumgruppen verwenden. Vollständige HERMANN-MAUGUIN-Symbole verwenden.
- ▶ Man leite die Strukturen von einem hochsymmetrischen Aristotyp ab, nicht von einer Struktur mit erniedrigter Symmetrie.



[1] U. Müller

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Äquivalente Beschreibungen von Kristallstrukturen (Kopie)

- ▶ für alle Raumgruppen außer $Im\bar{3}m$ und $Ia\bar{3}d \mapsto$ verschiedene Möglichkeiten der Strukturbeschreibung

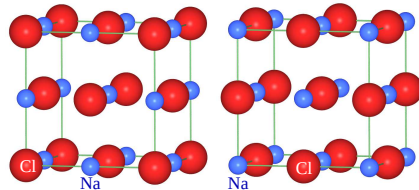
▶ Beispiele:

- 1 NaCl-Struktur ($Fm\bar{3}m$:
Cl auf $4a$: $0,0,0$; Na auf $4b$: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
oder $\Leftrightarrow$)
- 2 Perowskit, $SrTiO_3$ ($Pm\bar{3}m$:
Sr auf $1a$: $0,0,0$ oder $1b$: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)
- 3 AlB_2 ($P6/mmm$: Al auf $0,0,0$ oder $0,0,\frac{1}{2}$)

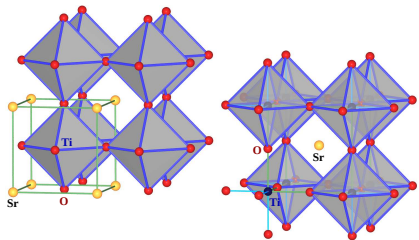
- ▶ ! sehr ! wichtig auch für
Gruppe-Untergruppe-Beziehungen
- ? Zahl äquivalenter Beschreibungen ... und
- ? Transformation zwischen ihnen ...

$\mapsto$ **euklidischer Normalisator** der Raumgruppe
 $\mathcal{G}$

?????!! *



2 $\times$ Kochsalz-Struktur



2 $\times$ Perowskit-Struktur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

* $\mapsto$ Gruppe/Untergruppen (G-I) $\mapsto$ Normalisatoren (G-II) $\mapsto$ weitere, für Gruppe-Untergruppe-Beziehungen wichtige Begriffe (G-III)

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

**Gruppentheorie II:
Normalisatoren**

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

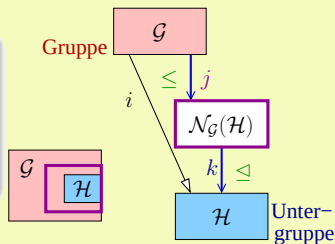
Zusammenfassung,
Literatur

Normalisatoren von Gruppen

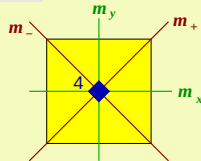
Normalisator

Alle Elemente $g_i \in \mathcal{G}$, die eine Untergruppe $\mathcal{H} < \mathcal{G}$ auf sich selber abbilden ($\mathcal{H} = g_i^{-1} \mathcal{H} g_i$), sind Elemente einer Gruppe $\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})$, die man den **Normalisator** von $\mathcal{H}$ in $\mathcal{G}$ nennt.

- Der Normalisator $\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})$ ist eine „Zwischengruppe“ zwischen $\mathcal{G}$ und $\mathcal{H}$.
- $\mathcal{H}$ ist eine normale/invariante Untergruppe von $\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})$, sie ist Normalteiler in ihrem Normalisator [$\mathcal{H} \trianglelefteq \mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})$].
- Normalisatoren von Raumgruppen ermöglichen es, die Zahl und Art möglicher Zweige eines BÄRNIGHAUSEN-Stammbaums zu ermitteln (s.u.)
- Ein spezieller (HIER nützlicher) Normalisator ist der **Euklidische Normalisator** $\Downarrow$



Beispiel (2D, PG)



- $\mathcal{G} = \{1, 2, 4_+, 4_-, m_x, m_y, m_+, m_-\}$ (PG: $4mm$)
- $\mathcal{H} = \{1, m_+\}$ (PG: m)
- $\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H}) = \{1, 2, m_+, m_-\}$ (PG: $2mm$)

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

**Gruppentheorie II:
Normalisatoren**

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

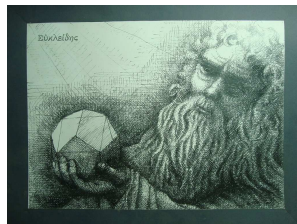
Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

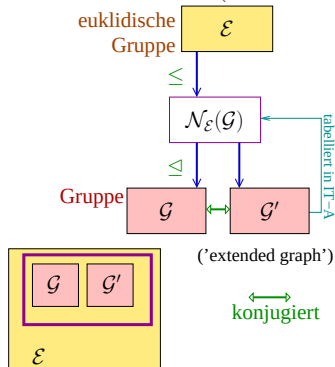
Euklidische Normalisatoren der Raumgruppen

- Die euklidische Gruppe $\mathcal{E}$ umfasst alle Isometrien (beliebige verzerrungsfreie Abbildungen) des 3-dimensionalen Raums.
- Alle Raumgruppen sind Untergruppen von $\mathcal{E}$ ($\mathcal{G} \leq \mathcal{E}$).
- Der euklidische Normalisator $\mathcal{N}_{\mathcal{E}}(\mathcal{G})$ einer Raumgruppe $\mathcal{G}$...
 - ... ist eine höhersymmetrische Gruppe als die Raumgruppe $\mathcal{G}$ selber (kleinere Zelle und/oder mehr Symmetrieelemente).
 - ... beschreibt anschaulich die „Symmetrie der Symmetrie“.
 - ... ist nützlich zur Bestimmung der ...
 - ... äquivalenten Aufstellungen einer Struktur.
 - ... Zweige von BÄRNIGHAUSEN-Stammbäumen.
- $\mathcal{N}_{\mathcal{E}}(\mathcal{G})$ für alle Raumgruppen $\mathcal{G}$ tabelliert:
 - IT-A: Tabellen 15.2.1.3 und 15.2.1.4
 - BCS: **NORMALIZER**



Euklid

griechischer Mathematiker (3 Jhd. v. Chr.)



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

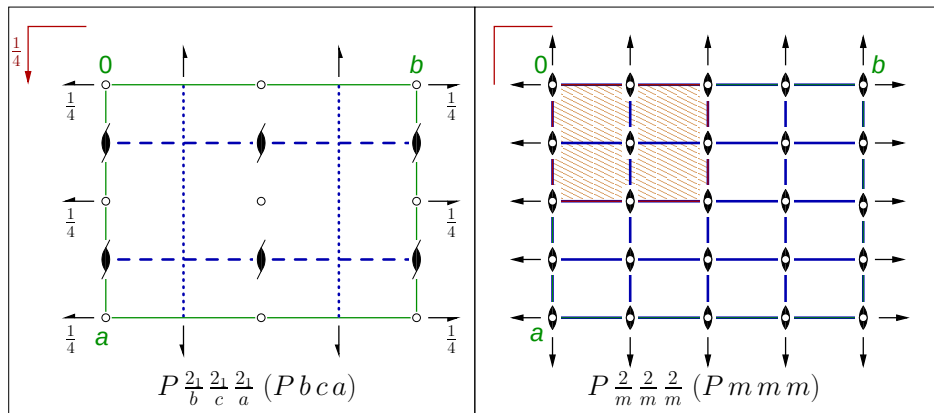
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

„Symmetrie der Symmetrie“: Beispiel: $Pbca$



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Tabellen der EUKLIDischen Normalisatoren

Space group $\mathcal{G}$ (H.-M. symbol)	Euclidean normalizer $\mathcal{N}_e(\mathcal{G})$		Additional generators for $\mathcal{N}_e(\mathcal{G})$			Index of $\mathcal{G}$ in $\mathcal{N}_e(\mathcal{G})$
	H.-M. symbol	Basis vectors	Translations	Inversion through centre at	Further generators	
....						
$P1\ 2_1\ 1$	$Z^1\ 12/m\ 1$	$\frac{1}{2}\mathbf{a}, \epsilon\mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$\frac{1}{2}, 0, 0; 0, s, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$	0,0,0		$(4 \cdot \infty) \cdot 2 \cdot 1$
$P12_1/m\ 1$	$P12/m\ 1$	$\frac{1}{2}\mathbf{a}, \frac{1}{2}\mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$\frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$			$8 \cdot 1 \cdot 1$
$Pbca$	$Pmmm$	$\frac{1}{2}\mathbf{a}, \frac{1}{2}\mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$\frac{1}{2}, 0, 0; 0, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$			$8 \cdot 1 \cdot 1$
$Cmcm$	$Pm2/m\ m$	$\frac{1}{2}\mathbf{a}, \frac{1}{2}\mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$\frac{1}{2}, 0, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$			$4 \cdot 1 \cdot 1$
$P4/mbm$	$P4/mmm$	$\frac{1}{2}(\mathbf{a} - \mathbf{b}), \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b}), \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$			$4 \cdot 1 \cdot 1$
$P6/mmm$	$P6/mmm$	$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$0, 0, \frac{1}{2}$			$2 \cdot 1 \cdot 1$
$Pm\bar{3}m$	$Im\bar{3}m$	$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			$2 \cdot 1 \cdot 1$
$F\bar{4}3m$	$Im\bar{3}m$	$\frac{1}{2}\mathbf{a}, \frac{1}{2}\mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	0, 0, 0		$4 \cdot 2 \cdot 1$
$Fm\bar{3}m$	$Pm\bar{3}m$	$\frac{1}{2}\mathbf{a}, \frac{1}{2}\mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			$2 \cdot 1 \cdot 1$

► $Pbca$: Index von $\mathcal{G}$ in $\mathcal{N}_e(\mathcal{G}) = 8$; 4 Translationen

- 1 NaCl: $Fm\bar{3}m$: Index 2, 2 äquivalente Beschreibungen, s. „Translations“
- 2 Perowskit: $Pm\bar{3}m$: dito
- 3 AlB_2 : $P6/mmm$, Verschiebung um $\frac{1}{2}\mathbf{c}$
- 4 Zinkblende: $F\bar{4}3m$: 4 Beschreibungen („Translations“, „Inversion“)

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Äquivalente Beschreibungen von Kristallstrukturen (Kopie II)

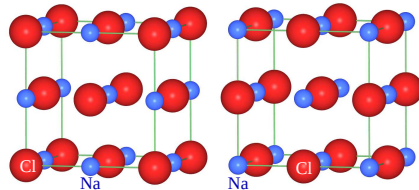
- ▶ für alle Raumgruppen außer $Im\bar{3}m$ und $Ia\bar{3}d \mapsto$ verschiedene Möglichkeiten der Strukturbeschreibung
- ▶ ! sehr ! wichtig für Gruppe-Untergruppe-Beziehungen
- ▶ **Beispiele:**
 - 1 NaCl-Struktur ($Fm\bar{3}m$: Cl auf $4a$: $0,0,0$; Na auf $4b$: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ oder $\Leftrightarrow$)
 - 2 Perowskit, $SrTiO_3$ ($Pm\bar{3}m$: Sr auf $1a$: $0,0,0$ oder $1b$: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$)
 - 3 AlB_2 ($P6/mmm$: Al auf $0,0,0$ oder $0,0,\frac{1}{2}$)

? Zahl äquivalenter Beschreibungen ...

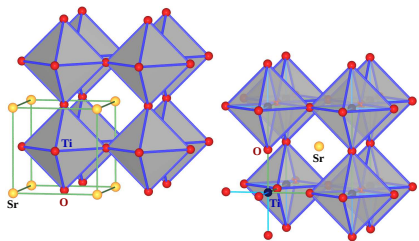
? Transformation zwischen ihnen

$\mapsto$ **euklidischer Normalisator** der Raumgruppe $\mathcal{G}$

!!!!!!? *



2 $\times$ Kochsalz-Struktur



2 $\times$ Perowskit-Struktur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

* $\mapsto$ Gruppe/Untergruppen (G-I) $\mapsto$ Normalisatoren (G-II) $\mapsto$ weitere, für Gruppe-Untergruppe-Beziehungen wichtige Begriffe (G-III)

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

**Maximale
Untergruppen**

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

**Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation**

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Nebenklassenzerlegung; Normalteiler, Faktorgruppen

Nebenklassenzerlegung (coset decomposition)

- ▶ Die Nebenklassenzerlegung separiert die Elemente einer Gruppe $\mathcal{G}$.
 - ▶ Die Untergruppe $\mathcal{H}$ einer Gruppe $\mathcal{G}$ ($\mathcal{H} < \mathcal{G}$) bildet die erste Nebenklasse.
 - ▶ Der Komplex $g_2\mathcal{H}$ mit einem Element g_2 , das nicht in dieser Untergruppe enthalten ist, bildet die zweite (hier linke) Nebenklasse.
 - ▶ Aus einem Element g_3 aus $\mathcal{G}$, das nicht in den obigen Nebenklassen enthalten ist, bildet man den Komplex $g_3\mathcal{H}$, die dritte Nebenklasse.
 - ▶ ... usw., bis alle Elemente aus $\mathcal{G}$ einer Nebenklasse zugeordnet sind.
-
- ▶ Jedes Element gehört genau zu einer Klasse.
 - ▶ Nur die erste Nebenklasse ist eine mathematische Gruppe.

Normalteiler, invariante Untergruppe

- ▶ Liefern rechte und linke Nebenklassenzerlegung die gleichen Nebenklassen, dann nennt man die Untergruppe $\mathcal{H}$ einen **Normalteiler** (invariante, selbstkonjugierte Untergruppe).
-
- ▶ Eine Untergruppe $\mathcal{H}$ ist immer Normalteiler in ihrem Normalisator $\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})$.

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

**Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation**

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Anwendung in der Kristallographie

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

Faktorgruppe

- ▶ Die Nebenklassen einer Gruppe $\mathcal{G}$ nach einem Normalteiler $\mathcal{N}$ ($\mathcal{G}/\mathcal{N}$) bilden selber wieder eine Gruppe, die **Faktorgruppe** $\mathcal{F}$.

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Anwendung in der Kristallographie

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

Faktorgruppe

- ▶ Die Nebenklassen einer Gruppe $\mathcal{G}$ nach einem Normalteiler $\mathcal{N}$ ($\mathcal{G}/\mathcal{N}$) bilden selber wieder eine Gruppe, die **Faktorgruppe** $\mathcal{F}$.

... für Gruppe-Untergruppe-Beziehungen (zusätzlich) wichtig ... (s.u.)

- ▶ Konjugation/konjugierte Untergruppen/Konjugiertenklassen

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Konjugation I: Konjugierte Elemente

konjugierte Elemente

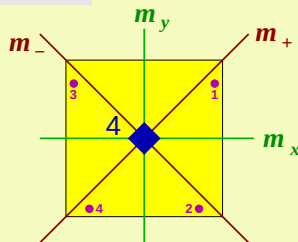
Elemente $g_i, g_j \in \mathcal{G}$ sind konjugiert in $\mathcal{G}$, wenn es ein Element $g_m \in \mathcal{G}$ gibt, für das $g_j = g_m^{-1} g_i g_m$ gilt.

- praktisch/für Symmetriegruppen:

Zwei Symmetrioperationen sind konjugiert, wenn sie mit Hilfe einer anderen Symmetrioperation der Gruppe ineinander überführt werden können.

- Beispiel: Symmetrioperationen des Quadrats $\Rightarrow$

Beispiel (2D, PG)



- $\mathcal{G} = \{1, 2, 4_+, 4_-, m_x, m_y, m_+, m_-\}$ (PG: $4mm$)
- konjugiert z.B. m_+ und m_- , da $m_- = 4_+ m_+ 4_-$
- $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Konjugation II: Konjugierte Untergruppen

- **konjugierte Elemente:** $g_j = g_m^{-1} g_i g_m$
- **konjugierte Untergruppen**

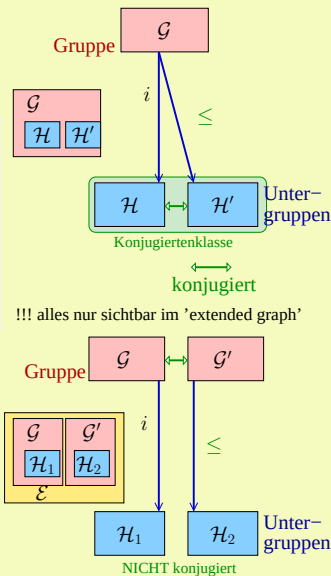
konjugierte Untergruppen

Untergruppen $\mathcal{H}, \mathcal{H}', \dots < \mathcal{G}$ sind **konjugierte Untergruppen** in $\mathcal{G}$, wenn es Elemente $g_m \in \mathcal{G}$ gibt, für die $\mathcal{H}' = g_m^{-1} \mathcal{H} g_m$ gilt.

Der Satz $\mathcal{H}, \mathcal{H}', \mathcal{H}'' \dots$ konjugierter Gruppen von $\mathcal{H}$ (eine Konjugiertenklasse, 'conjugacy class') entsteht, wenn g_m alle Elemente von $\mathcal{G}$ durchläuft.

- ▶ Konjugierte Untergruppen sind isomorph und von gleicher Ordnung.*
- ▶ Wenn es nur eine Untergruppe $\mathcal{H}$ gibt, heisst diese **normale, invariante** oder **selbstkonjugierte** Untergruppe und ist **Normalteiler** in $\mathcal{G}$ ($\mathcal{H} \trianglelefteq \mathcal{G}$, s.o.).

*Sie ergeben keine eigenen Zweige in Symmetrie-Stammbäumen und werden nur bei Darstellung des 'extended graphs' angegeben.



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Konjugation II: Konjugierte Untergruppen

- **konjugierte Elemente:** $g_j = g_m^{-1} g_i g_m$
- **konjugierte Untergruppen**

konjugierte Untergruppen

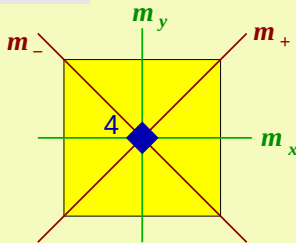
Untergruppen $\mathcal{H}, \mathcal{H}', \dots < \mathcal{G}$ sind **konjugierte Untergruppen** in $\mathcal{G}$, wenn es Elemente $g_m \in \mathcal{G}$ gibt, für die $\mathcal{H}' = g_m^{-1} \mathcal{H} g_m$ gilt.

Der Satz $\mathcal{H}, \mathcal{H}', \mathcal{H}'' \dots$ konjugierter Gruppen von $\mathcal{H}$ (eine Konjugiertenklasse, 'conjugacy class') entsteht, wenn g_m alle Elemente von $\mathcal{G}$ durchläuft.

- ▶ Konjugierte Untergruppen sind isomorph und von gleicher Ordnung.*
- ▶ Wenn es nur eine Untergruppe $\mathcal{H}$ gibt, heisst diese **normale, invariante** oder **selbstkonjugierte** Untergruppe und ist **Normalteiler** in $\mathcal{G}$ ($\mathcal{H} \trianglelefteq \mathcal{G}$, s.o.).

*Sie ergeben keine eigenen Zweige in Symmetrie-Stammbäumen und werden nur bei Darstellung des 'extended graphs' angegeben.

Beispiel (2D, PG)



- ▶ $\mathcal{G} = \{1, 2, 4_+, 4_-, m_x, m_y, m_+, m_-\}$ (PG: $4mm$)
- ▶ $\mathcal{H} = \{1, m_+\}$ (PG: m)
- ▶ $\mathcal{H}' = \{1, m_-\}$ (PG: m)
- ▶ selbstkonjugiert: $\mathcal{H} = \{1, 2, m_+, m_-\}$ (PG $2mm$)

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

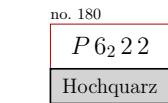
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

t-Untergruppe: Beispiel I: Hoch $\rightarrow$ Tief-Quarz (Verzerrungsvariante)

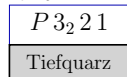


$a=499.7$ pm
 $c=545.7$ pm
 (860 K)

t2

$0, 0, -\frac{1}{3}$

no. 154

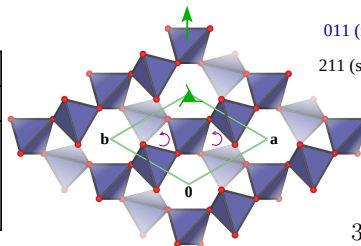
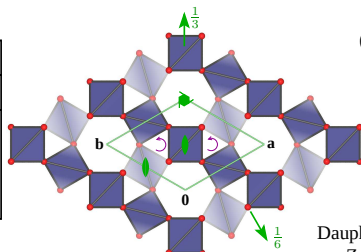


$a=476.5$ pm
 $c=529.6$ pm

Si:	3d	O:	6i
222		..2	
$\frac{1}{2}$		0.416	
0		0.208	
$\frac{1}{2}$		$\frac{2}{3}$	

$x, y, z - \frac{1}{3}$

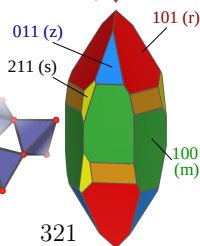
Si:	3b	O:	6c
..2		1	
0.470		0.414	
0		0.268	
$\frac{1}{6}$		0.286	



622



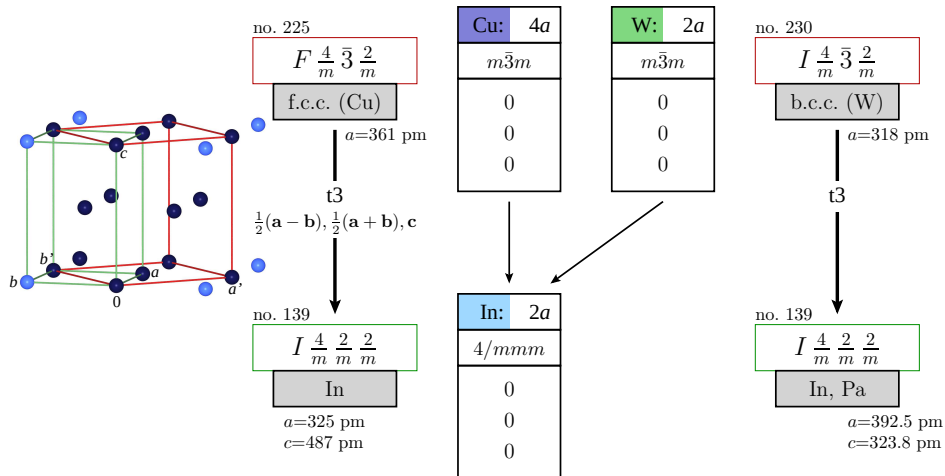
Dauphine
Zwilling



VRML-2 auf ruby und LOKAL

Einleitung
... von gestern!
Beschreibung von Kristallstrukturen II
Gruppen und Untergruppen
Gruppentheorie I
Klassifizierung maximaler Untergruppen
Formales zu Stammbäumen
Äquivalente Aufstellungen
Gruppentheorie II: Normalisatoren
Anwendung, Beispiele
Maximale Untergruppen
Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation
Anwendung, Beispiele
t-Untergruppen
i-Untergruppen
k-Untergruppen
Bilanz
Komplexere Symmetriebeziehungen
Zusammenfassung, Literatur

t-Untergruppe: Beispiel II: f.c.c. (Cu) $\mapsto$ Indium (Verzerrungsvariante)



vgl. Martensit-Umwandlung

VRML-2 auf [ruby](#) und [LOKAL](#)

Erklärvideo auf [ruby](#)

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

t-Untergruppe: f.c.c. (Cu) $\mapsto$ Indium: IT-A, IT-A1 und BCS dazu

• IT-A, Eintrag unter No. 225/ $Fm\bar{3}m$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $F\bar{4}3m$ (216) (1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10; 11; 12; 37; 38; 39; 40; 41; 42; 43; 44; 45; 46; 47; 48) +

...
 $\left\{ \begin{array}{l} [3] F4/m12/m (I4/mmm, 139) (1; 2; 3; 4; 13; 14; 15; 16; 25; 26; 27; 28; 37; 38; 39; 40) + \\ [3] F4/m12/m (I4/mmm, 139) (1; 2; 3; 4; 17; 18; 19; 20; 25; 26; 27; 28; 41; 42; 43; 44) + \\ [3] F4/m12/m (I4/mmm, 139) (1; 2; 3; 4; 21; 22; 23; 24; 25; 26; 27; 28; 45; 46; 47; 48) + \end{array} \right.$

• IT-A1, Eintrag unter No. 225/ $Fm\bar{3}m$

Axes	Coordinates	Wyckoff positions						
		4 <i>a</i>	4 <i>b</i>	8 <i>c</i>	24 <i>d</i>	24 <i>e</i>	32 <i>f</i>	48 <i>g</i>
				48 <i>h</i>	48 <i>i</i>	96 <i>j</i>	96 <i>k</i>	192 <i>l</i>

I Maximal translationengleiche subgroups

...								
[3] $I4/mmm$ $\frac{1}{2}(\mathbf{a}-\mathbf{b}), \frac{1}{2}(\mathbf{a}+\mathbf{b}), \mathbf{c}$ $x-y, x+y, z$ (139)	2a	2b	4d	4c; 8f	4e, 8h	16n	8g, 16k	
conjugate: $\frac{1}{2}(\mathbf{b}-\mathbf{c}), \frac{1}{2}(\mathbf{b}+\mathbf{c}), \mathbf{a}$ $y-z, y+z, x$			8i; 16m	8j; 16m	16l; 2x12m	16n; 32o	3x32o	
conjugate: $\frac{1}{2}(-\mathbf{a}+\mathbf{c}), \frac{1}{2}(\mathbf{a}+\mathbf{c}), \mathbf{b}$ $-x+z, x+z, y$								
...								

• BCS: SUBGROUPGRAPH und WYCKSPLIT $\mapsto$ Gemma de la Flor Martin

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

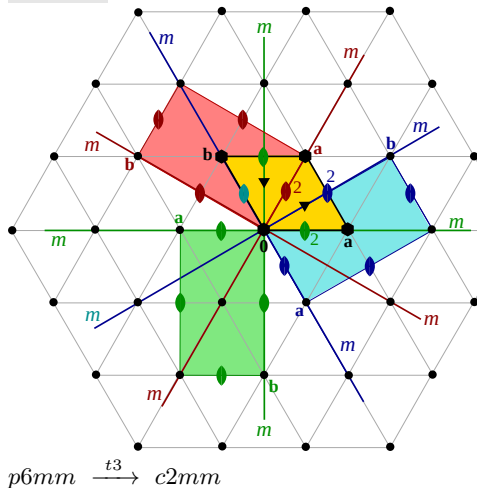
Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

t-Untergruppen $\mapsto$ Orientierungskonjugation (anschaulich)

- ▶ t-Untergruppen $\mapsto$ Orientierungskonjugation
- ▶ Elementarzellen von $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}'$, $\mathcal{H}''$, ... sind unterschiedlich orientiert $\Rightarrow$
- ▶ jede SO gehört genau zu einer der konjugierten Untergruppen
- ▶ wegfallende $SO \in \mathcal{G}$ überführen die konjugierten Untergruppen ineinander
- ▶ Die Untergruppen $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}'$, $\mathcal{H}''$, ...
 - ▶ ... sind in $\mathcal{G}$ konjugiert.
 - ▶ ... bilden gemeinsam eine Konjugiertenklasse ('conjugacy class').
 - ▶ ... müssen nicht alle einzeln betrachtet werden.
 - ▶ ... führen zum gleichen Strukturmodell.

Beispiel (2D, Flächengruppen)



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

i-Untergruppe: Beispiel I: Quarz $\rightarrow$ AlPO_4 (Substitutionsvariante)

no. 154

$P 3_2 2 1$

SiO_2

$i2$

$a, b, 2c$

$0, 0, -\frac{1}{2}$

no. 152

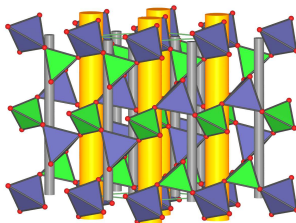
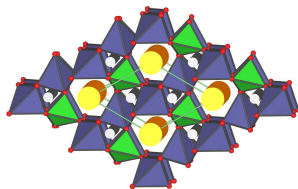
$P 3_1 2 1$

AlPO_4

Si:	3b	O:	6c
.2.		1	
0.470		0.414	
0		0.268	
$\frac{1}{6}$		0.286	

$x, y, \frac{1}{2}z + \frac{1}{4}/\frac{3}{4}$

Al:	3a	P:	3b	O1:	6c	O2:	6c
.2.		.2.		1		1	
0.466		0.467		0.416		0.415	
0		0		0.292		0.257	
$\frac{1}{3}$		$\frac{5}{6}$		0.398		0.884	



VRML auf ruby und LOKAL

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

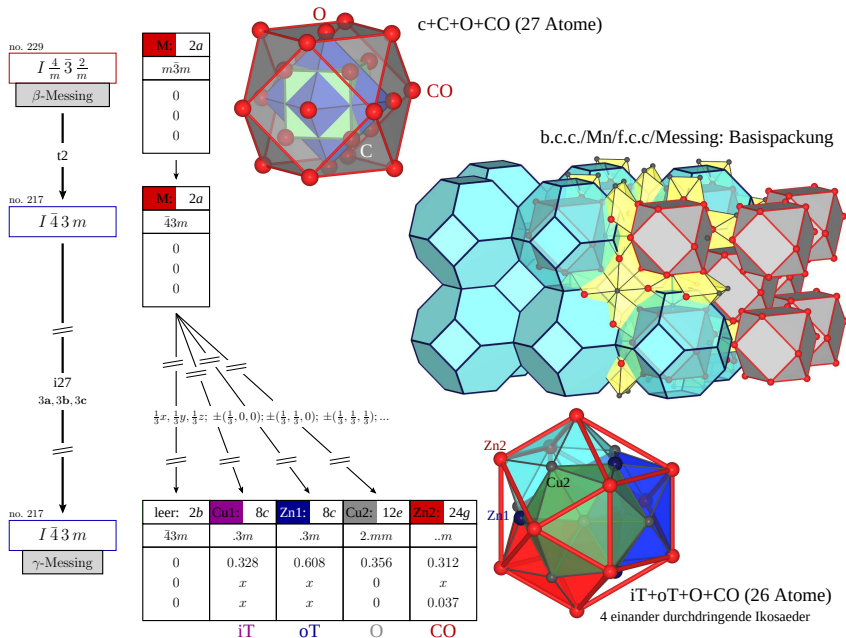
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

i-Untergruppe: Beispiel II: Messing (Verzerrungs/Defekt-Variante)



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

k-Untergruppe: Beispiel I: NaCl $\mapsto$ NbO (Defektvariante)

no. 225

$$F \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$$

NaCl

$a=563.9$ pm

k4

no. 221

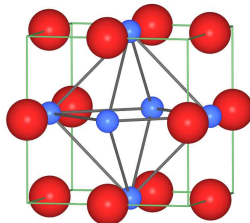
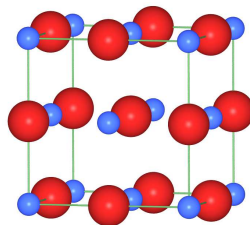
$$P \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$$

NbO

$a=421.2$ pm

Na: 4a	Cl: 4b
$m\bar{3}m$	$m\bar{3}m$
0	0
0	0
0	$\frac{1}{2}$

$\square$: 1a	Nb: 3c	$\square$: 1b	O: 3d
$m\bar{3}m$	$4/mmm$	$m\bar{3}m$	$4/mmm$
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

k-Untergruppe: NaCl $\mapsto$ NbO: IT-A, IT-A1 und BCS dazu

• IT-A, Eintrag unter No. 225/ $Fm\bar{3}m$

Maximal non-isomorphic subgroups

I	[2] $F\bar{4}3m$ (216) (1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10; 11; 12; 37; 38; 39; 40; 41; 42; 43; 44; 45; 46; 47; 48) +
IIA	[4] $Pm\bar{3}m$ (221) 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10; 11; 12; 13; 14; 15; 16; 17; 18; 19; 20; 21; 22; 23; 24; 25; 26; 27; 28; 29; 30; 31; 32; 33; 34; 35; 36; 37; 38; 39; 40; 41; 42; 43; 44; 45; 46; 47; 48
	[4] $Pm\bar{3}m$ (221) 1; 2; 3; 4; 13; 14; 15; 16; 25; 26; 27; 28; 37; 38; 39; 40; (9; 10; 11; 12; 17; 18; 19; 20; 33; 34; 35; 36; 41; 42; 43; 44) + $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$; 5; 6; 7; 8; 21; 22; 23; 24; 29; 30; 31; 32; 45; 46; 47; 48) + $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$
	[4] $Pm\bar{3}m$ (221)
	[4] $Pm\bar{3}m$ (221)

• IT-A1, Eintrag unter No. 225/ $Fm\bar{3}m$

Axes Coordinates	Wyckoff positions						
	4a	4b	8c 48h	24d 48i	24e 96j	32f 96k	48g 192l

II Maximal klassengleiche subgroups

Loss of centring translations

...							
[4] $Pm\bar{3}m$	1a;3c 1b;3d 8g	12i;12j	6e,6f,12h	8g;24m	2×24m		
(221) 4 conjugate subgroups	2×12i;24l 2×12j;24k 2×24k;2×24l 2×24m;48n 4×48n						

• BCS **WYCKSPLIT** $\mapsto$ Gemma de la Flor Martin

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

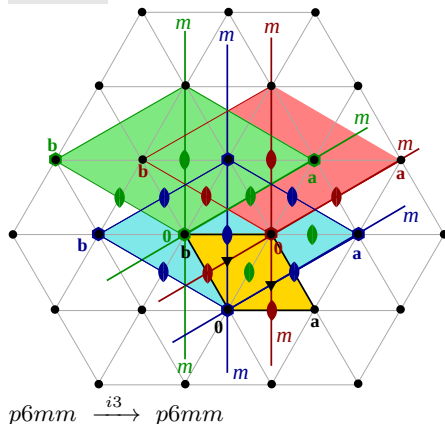
Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

k/i-Untergruppen: Translationskonjugation

- ▶ kN - (und iN -)Untergruppen mit $N \geq 3 \mapsto$ Translationskonjugation
- ▶ Elementarzellen von $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}'$, ... gegeneinander verschoben
- ▶ $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}'$, ... sind in $\mathcal{G}$ konjugierte Untergruppen
- ▶ d.h. wieder wie oben wegen der Konjugation:
 - ▶ jede SO gehört genau zu einer der konjugierten Untergruppen
 - ▶ SO von $\mathcal{G}$ überführen die konjugierten Untergruppen ineinander
 - ▶ $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}'$, ... bilden gemeinsam eine Konjugiertenklasse ('class').
 - ▶ praktisch: müssen nicht einzeln weiter betrachtet werden
- ▶ $\mathcal{H} = \mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H}) = \mathcal{N}_{\epsilon}(\mathcal{H})$
- ▶ damit: $j = 3$

Beispiel (2D, Flächengruppe)



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

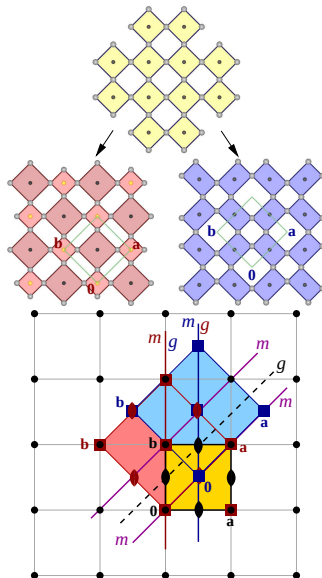
Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

k2-Untergr.: verschiedene Konjugiertenklassen (KEINE Konjugation)

- ▶ häufig bei k2-Untergruppen
- ▶ zwei verschobene Modelle mit gleicher Zelle und Raumgruppentyp (verschiedene Aufstellungen, $\mathcal{G}$, $\mathcal{G}'$, ... s.o.)
- ▶ $\mathcal{H}_1/\mathcal{H}_2$ nicht konjugiert zueinander $\mapsto$ 2 komplett unterschiedliche Strukturmodelle
- ▶ praktisch: Untergruppen müssen beide weiter verfolgt werden = neue Zweige im Stammbaum
- ▶ $\mathcal{G} = \mathcal{N}_\epsilon(\mathcal{H}) = \mathcal{N}_\mathcal{G}(\mathcal{H})$, und damit $j = 1$
- ▶ Beispiele:
 - ▶ 2D, Flächengruppe: $p4mm \xrightarrow{i2} p4mm$
 - ▶ AlB_2 ($P6/mmm$) $\xrightarrow{k2} P6_3/mmc$
 $\mapsto$ Rainer Pöttgen
 - ▶ Perowskit-Stammbaum $P4/mmm \xrightarrow{k2} P4/mbm$
(s. Buch UM)

Beispiel $p4mm \xrightarrow{i2} p4mm$



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Euklidische Normalisatoren der Ebenen-/Raum-gruppen (Auszüge)

• Ebenengruppen

Plane group $\mathcal{G}$ (H.-M. symbol)	Euclidean normalizer $\mathcal{N}_\epsilon(\mathcal{G})$		Additional generators for $\mathcal{N}_\epsilon(\mathcal{G})$			Index of $\mathcal{G}$ in $\mathcal{N}_\epsilon(\mathcal{G})$
	H.-M. symbol	Basis vectors	Translations	Inversion through a centre at	Further generators	
....						
$p4mm$	$p4mm$	$\frac{1}{2}(\mathbf{a} - \mathbf{b}), \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b})$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			$2 \cdot 1 \cdot 1$
$p6mm$	$p6mm$	$\mathbf{a}, \mathbf{b}$				$1 \cdot 1 \cdot 1$

• Raumgruppen

Space group $\mathcal{G}$ (H.-M. symbol)	Euclidean normalizer $\mathcal{N}_\epsilon(\mathcal{G})$		Additional generators for $\mathcal{N}_\epsilon(\mathcal{G})$			Index of $\mathcal{G}$ in $\mathcal{N}_\epsilon(\mathcal{G})$
	H.-M. symbol	Basis vectors	Translations	Inversion through a centre at	Further generators	
....						
$P4/mbm$	$P4/mmm$	$\frac{1}{2}(\mathbf{a} - \mathbf{b}), \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b}), \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$			$4 \cdot 1 \cdot 1$
$P6/mmm$	$P6/mmm$	$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$0, 0, \frac{1}{2}$			$2 \cdot 1 \cdot 1$
$P6_3/mmc$	$P6/mmm$	$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \frac{1}{2}\mathbf{c}$	$0, 0, \frac{1}{2}$			$2 \cdot 1 \cdot 1$
...						

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

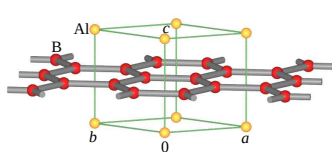
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

k-Untergruppe: Beispiel $P6/mmm \xrightarrow{k2} P6_3/mmc$ (AlB₂-Stammbaum)



Al: 1a	B: 2d
6/mmm	$\bar{6}m2$
0	$\frac{1}{3}$
0	$\frac{2}{3}$
0	$\frac{1}{2}$

no. 191
$P \frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$
AlB ₂

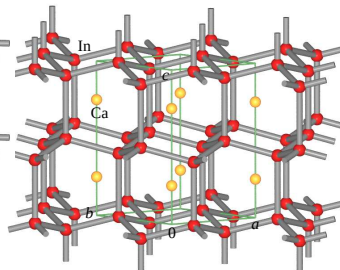
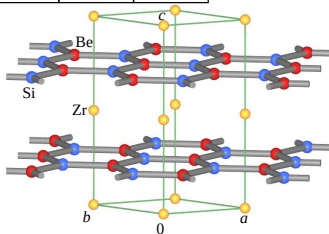
Al: 1a	B: 2d
6/mmm	$\bar{6}m2$
0	$\frac{1}{3}$
0	$\frac{2}{3}$
0	$\frac{1}{2}$

Zr: 2a	Be: 2c	Si: 2d
$\bar{3}m$	$\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$
0	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$
0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$

no. 194
$P \frac{6_3}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{c}$
ZrBeSi

no. 194
$P \frac{6_3}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{c}$
CaIn ₂

Ca: 2b	In: 4f
$\bar{6}m2$	$3m$
0	$\frac{2}{3}$
0	$\frac{1}{3}$
$\frac{1}{4}$	0.455



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

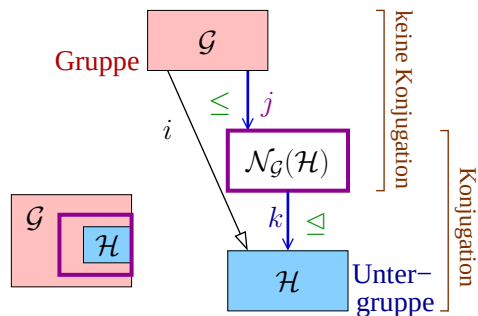
Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einelschritte eines Symmetrieabstiegs

Typ der Untergruppe	Konjugation	Index	Zusammenhang der Gruppen	Untergruppe(n)	Strukturen sind:
$t2^*$	Selbst-K.	$j = 1$	$\mathcal{H} \trianglelefteq \mathcal{G}$	$\mathcal{H}$	–
$t3, t4^{**}$	Orientierungs-K.	$k = 1$	$\mathcal{H} = \mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})$	$\mathcal{H}, \mathcal{H}', \mathcal{H}'', \dots$	gleich
kN, iN	Translations-K.				
	keine	$j = 1$	$\mathcal{G} = \mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})$	$\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots$	verschieden



Einelschritte $\mapsto \mathcal{H} = \text{maximale Untergruppe von } \mathcal{G}, \text{ d.h.}$

- ▶ entweder: keine Konjugation (normale, invariante selbstkonjugierte Untergruppe $\mathcal{H} \trianglelefteq \mathcal{G}$)
- ▶ oder: $i = j$ und $k = 1 \mapsto$ Konjugation, nur ein Strukturmodell
- ▶ oder: $i = k$ und $j = 1 \mapsto$ keine Konjugation, verschiedene Konjugiertenklassen/Strukturmodelle

* auch für ABELSche Punktgruppen; ** auch für Nicht-ABELSche Punktgruppen

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

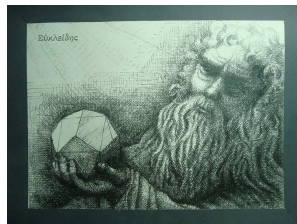
Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

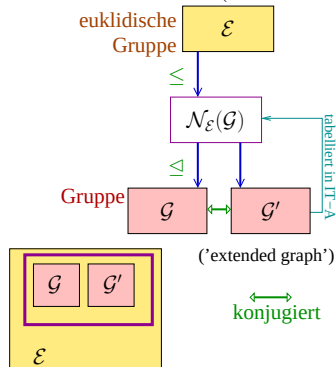
EUKLIDISCHE Normalisatoren der Raumgruppen (Kopie)

- ▶ Die euklidische Gruppe $\mathcal{E}$ umfasst alle Isometrien (beliebige verzerrungsfreie Abbildungen) des 3-dimensionalen Raums.
- ▶ Alle Raumgruppen sind Untergruppen von $\mathcal{E}$ ($\mathcal{G} \leq \mathcal{E}$).
- ▶ Der euklidische Normalisator $\mathcal{N}_{\mathcal{E}}(\mathcal{G})$ einer Raumgruppe $\mathcal{G}$...
 - ▶ ... ist eine höhersymmetrische Gruppe als die Raumgruppe $\mathcal{G}$ selber (kleinere Zelle und/oder mehr Symmetrieelemente).
 - ▶ ... beschreibt anschaulich die „Symmetrie der Symmetrie“
 - ▶ ... ist nützlich zur Bestimmung der ...
 - ▶ ... äquivalenten Aufstellungen einer Struktur.
 - ▶ ... Zweige von BÄRNIGHAUSEN-Stammbäumen
- ▶ $\mathcal{N}_{\mathcal{E}}(\mathcal{G})$ für alle Raumgruppen $\mathcal{G}$ tabelliert:
 - ▶ IT-A: Tabellen 15.2.1.3 und 15.2.1.4
 - ▶ BCS: **NORMALIZER**



Euklid

griechischer Mathematiker (3 Jhd. v. Chr.)



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Anwendung allgemeiner Normalisatoren $\mapsto$ Zahl Konjugiertenklassen

Für ein Gruppe-Untergruppe-Paar $\mathcal{H} < \mathcal{G}$ gilt:

- ▶ $\mathcal{H} \trianglelefteq \mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H}) \leq \mathcal{G} \leq \mathcal{N}_{\mathcal{E}}(\mathcal{G}) \leq \mathcal{E}$
- ▶ $\mathcal{H} \trianglelefteq \mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H}) \leq \mathcal{N}_{\mathcal{E}}(\mathcal{H}) \leq \mathcal{E}$

Der Normalisator $\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})$ besteht damit aus allen Elementen, die sowohl in der Obergruppe $\mathcal{G}$ als auch im EUKLIDISCHEN Normalisator der Untergruppe $\mathcal{N}_{\mathcal{E}}(\mathcal{H})$ enthalten sind:

$$\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H}) = \mathcal{N}_{\mathcal{E}}(\mathcal{H}) \cap \mathcal{G}$$

(i, j, k : Verhältnisse der Gruppenordnungen, z.B.

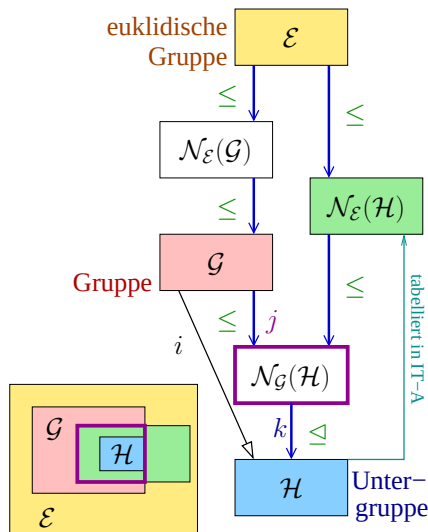
$j = |\mathcal{G} : \mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H})|$ und es gilt: $i = jk$

- für maximale Untergruppen (s.o.) ... $\Rightarrow$
- für eine Kette ... (Gesamtindex i)

i mit Kenntnis von $\mathcal{N}_{\mathcal{G}}(\mathcal{H}) \mapsto j$ und k des Produkts $i = jk$ bekannt $\Downarrow$

j Zahl der Konjugierten von $\mathcal{H}$ in $\mathcal{G}$ = Länge der Konjugiertenklasse(n)

k Zahl der Konjugiertenklassen = Zahl unterschiedlicher Strukturmodelle !!!



- mehrere Ketten... s. ▶ GdFeO₃
(Perowskit)

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

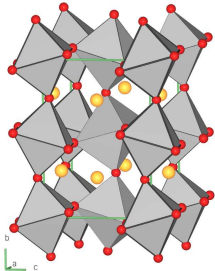
Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Allgemeine Untergruppe: Beispiel GdFeO_3

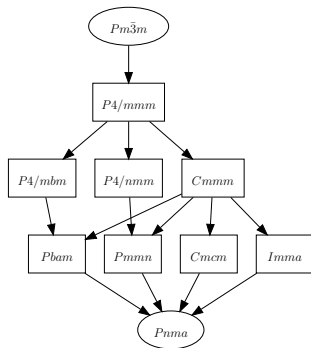
- GdFeO_3 : Kristallstruktur



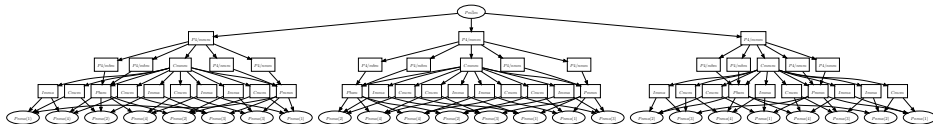
orthorhombisch, RG $Pnma$,
 $a=561.6$, $b=766.8$, $c=534.6$ pm

Gd	4c	0.06	1/4	0.482
Fe	4a	0	0	0
O1	4c	0.470	1/4	0.550
O2	8d	0.275	0.05	0.210

- Contracted graph BCS



- Extended graph $\Downarrow$



VRML auf ruby und LOKAL

- Symmetrieabstieg:

Gesamtordnung: $i = 24$

↪ 4 Konjugiertenklassen der Länge 6

mögliche Lagen-Aufspaltung:

Class	Sr <i>1b</i>	Ti <i>1a</i>	O <i>3d</i>
1	<i>4c</i>	<i>4a</i>	<i>4c, 8d</i>
2	<i>4c</i>	<i>4c</i>	<i>4c, 8d</i>
3	<i>4b</i>	<i>4c</i>	<i>4a, 2 × 4c</i>
4	<i>4c</i>	<i>4c</i>	<i>4a, 4b, 4c</i>

Klassifizierung maximaler Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

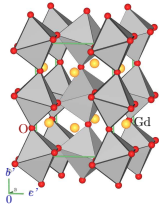
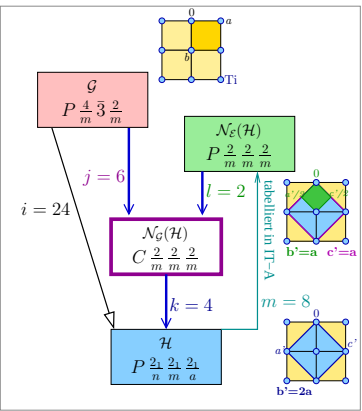
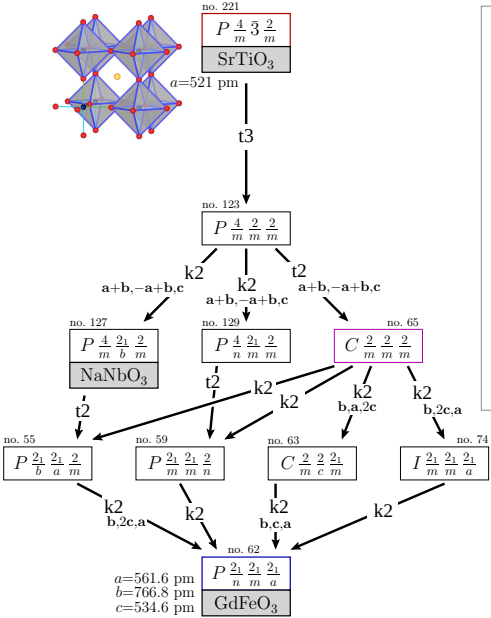
k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Allgemeine Untergruppe: Beispiel GdFeO₃



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

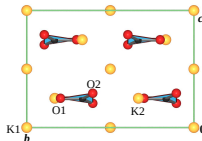
Zusammenfassung,
Literatur

Gemeinsame Obergruppe: Beispiel „Soda-Pottasche“

Na1:	2a	Na2:	2c	C:	2d	O:	6h
3m.		6m2		6m2		mm2	
0	$\frac{1}{3}$		$\frac{1}{3}$		0.204		
0	$\frac{2}{3}$		$\frac{2}{3}$		2x		
0	$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$		

Na1:	4a	Na2:	4c	C:	4c	O1:	8g	O2:	8g
2/m..		m2m		m2m		m2m		..m	
0	0		0		0		0.694		
0	0.333		0.333		0		0.204		0.898
0	$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$

K1:	4a	K2:	4e	C:	4e	O1:	4e	O2:	8f
1		2		2		2			1
0	0		0		0		0.678		
0	0.332		0.333		0		0.895		
0	$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$		0.707		



a=521 pm
c=645 pm
 t_3
a, a + 2b, c



a=568 pm
b=992 pm
c=702 pm
 $\beta=96.8^\circ$

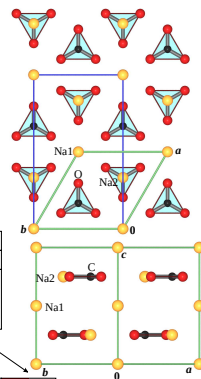
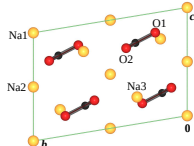


a=525 pm
b=898 pm
c=621 pm
 $\alpha=99.3^\circ$

Na1:	2a	Na2:	2c	C:	2d	O:	6h
3m.		6m2		6m2		mm2	
0	$\frac{1}{3}$		$\frac{1}{3}$		0.204		
0	$\frac{2}{3}$		$\frac{2}{3}$		2x		
0	$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$		

Na1:	4a	Na2:	4c	C:	4c	O1:	8g	O2:	8g
2/m..		m2m		m2m		m2m		..m	
0	0		0		0		0.694		
0	0.333		0.333		0		0.204		0.898
0	$\frac{1}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$		$\frac{3}{4}$

Na1:	2a	Na2:	2c	Na3:	4i	C:	4i	O1:	4i	O2:	4i	O3:	8j
2/m		2/m		m		m		m		m		1	
0	0		0		0		0		0		0.702		
0	0		0		0.326		0.337		0.208		0.897		
0	$\frac{1}{2}$		0.249		0.752		0.817		0.717				



Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Strukturfamilien, ausgehend von einfachen Aristotypen

z.B. gemäß Einleitung

- ▶ ① Verzerrungs-, ② Substitutions- und/oder ③ Auffüllungs-/Defekt-Varianten

Beispiele:

- ▶ Elementstrukturen (①, ②, ③)
 - ▶ Diamant ($Fd\bar{3}m$): klassische Halbleiter, Sn, ...
 - ▶ α -Po ($Pm\bar{3}m$): As, P, Se, Te, ...
- ▶ dichte Kugelpackungen: h.c.p. ($P6_3/mmc$) und f.c.c. ($Fm\bar{3}m$)
 - ▶ ③ $\mapsto$ fast alle Salze¹
 - ▶ ② $\mapsto$ Legierungen [auch für b.c.c. ($Im\bar{3}m$)]
- ▶ Raumnetze (polyanionisch) (① und ②)
 - ▶ Perowskite/ ReO_3 ² ($Pm\bar{3}m$: Oktaederraumnetze)
 - ▶ Cristobalith ($Fd\bar{3}m$: Tetraederraumnetze)
 - ▶ Intermetallische Phasen $\mapsto$ Rainer Pöttgen
 - ▶ BaAl_4 ($I4/mmm$)
 - ▶ AlB_2 ($P6/mmm$)
 - ▶ MgCu_2
 - ▶ ...
- ▶ ... viele weitere Beispiele folgen ...
- ▶ auch in der Übung heute nachmittag, alles dazu auf [dieser Web-Seite](#)

1: UM-1, Kap. 13; 2: O. Bock, U. Müller, *Acta Crystallogr.* **B58**, 594 (2002).

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Einleitung

... von gestern!

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler Untergruppen der Raumgruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II: Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen (Einzelschritte im Stammbaum)

Gruppentheorie III: Nebenklassenzerlegung, Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Zusammenfassung

- ▶ Strukturbeschreibung, Standardisierung
- ▶ äquivalente Beschreibungen (euklidischer Normalisator)
- ▶ Nutzen und Anwendungsbereiche von BÄRNIGHAUSEN-Stammbäumen
- ▶ Untergruppen anschaulich/kristallographisch + mathematisch
- ▶ Bedeutung von Konjugation/Konjugiertenklassen
- ▶ **Merckblatt** zur formalen Aufstellung von Stammbäumen
- ▶ Klassifizierung kristallographischer Untergruppen (t, k oder i)
- ▶ Maximale Untergruppen (Beispiele, Orientierungs/Translation-Konjugation)
- ▶ Kombinationen und Ketten von Symmetrieabstiegen (allgemeiner Normalisator)
- ▶ Strukturfamilien, größere Stammbäume
- ▶ ! IT-A, IT-A1 und BCS helfen !

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

... und immer dran denken ...¹

- ▶ Es ist sinnlos, Gruppe-Untergruppen rein formal, „nur zum Spaß“ aufzustellen, ohne klaren kristallographischen, physikalischen oder chemischen Hintergrund.
- ▶ Experimentelle Daten müssen uns leiten, nicht eine rein formale Anwendung der Gruppentheorie auf dem Papier oder im Computer.
- ▶ Man versuche nicht, Physik und Chemie formalistischen Gedanken unterzuordnen, sondern setze die Gruppentheorie ein, um experimentelle Daten zu interpretieren.

[1] U. Müller

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

► Lehrbücher, Beispiele

- U. Müller: Symmetriebeziehungen zwischen verwandten Kristallstrukturen, Teubner, 2012.
- U. Müller: Symmetry Relationships between Crystal Structures, IUCr Texts on Crystallography 18, Oxford University Press, 2013 (73 €, Softcover von 2016: 35 €).
- IT-A
2006 Kap.8: H. Wondratschek: Introduction to space-group symmetry.
2016 sieben Kapitel verschiedener Autoren
- 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).

► Tabellen/Datenbanken

- IT Bände A (250 €) und A1 (295 €) (<http://it.iucr.org>)
- Bilbao Crystallographic Server www.cryst.ehu.es
 - M. I. Aroyo, J. M. Perez-Mato, C. Capillas, E. Kroumova, S. Ivantchev, G. Madariaga, A. Kirov, H. Wondratschek, ... ⇒ **Gemma de la Flor Martin**

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur

Danke!



http://ruby.chemie.uni-freiburg.de/Vorlesung/Seminare/gug_kurs_2022.pdf

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung, Literatur

Webseite inkl. Übungen



http://ruby.chemie.uni-freiburg.de/Vorlesung/gug_kurs.html

Einleitung

... von gestern!

Beschreibung von
Kristallstrukturen II

Gruppen und
Untergruppen

Gruppentheorie I

Klassifizierung maximaler
Untergruppen

Formales zu Stammbäumen

Äquivalente
Aufstellungen

Gruppentheorie II:
Normalisatoren

Anwendung, Beispiele

Maximale
Untergruppen

Gruppentheorie III:
Nebenklassenzerlegung,
Konjugation

Anwendung, Beispiele

t-Untergruppen

i-Untergruppen

k-Untergruppen

Bilanz

Komplexere
Symmetriebeziehungen

Zusammenfassung,
Literatur