

2. Punktgruppen/Kristallklassen

Symmetrie mit konstantem Punkt



'Grundlagen der Röntgenbeugung', SS 24, Caroline Röhr

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie- Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

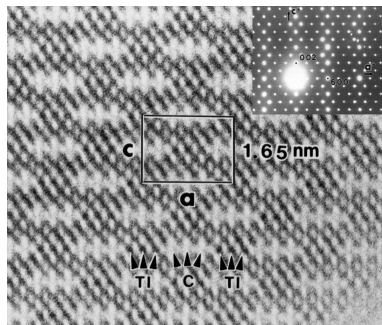
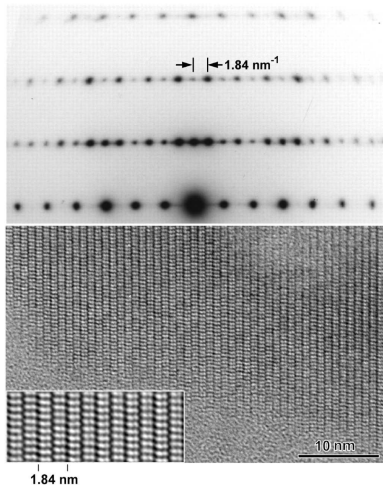
P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

- ▶ fast alle Methoden profitieren von Symmetrie
- ▶ **Spektroskopie**
 - ▶ Punktsymmetrie ermöglicht Koordinatentransformation in Symmetrie-adaptierte Linearkombinationen der Basiskoordinaten
 - ▶ Blockdiagonalisierung des Eigenwertproblems der Energie (Schrödinger-Gleichung)
 - ▶ Gruppentheorie \mapsto Charaktertafeln
- ▶ **Beugung**
 - ▶ Translationssymmetrie ist Basisvoraussetzung der Methode
- ▶ ? für welche Methoden Symmetrie ohne Bedeutung ?
 - ▶ MS, TA/DTA/TG
 - ▶ mit Einschränkungen: NMR, Mößbauer
- ▶ **Bildgebung** (TEM, REM, SPM) z.B. HR-TEM \Downarrow

Symmetrie und Methoden: Bildgebung und Beugung im EM

2. Punktgruppen, Kristallklassen



Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

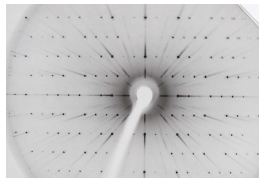
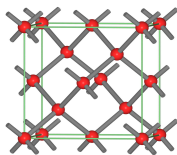
Beispiele

Symmetrie (Kristallographie) und Strukturchemie/Beugung

2. Punktgruppen, Kristall- klassen

Symmetrie ...

- ▶ ... bestimmt häufig die **äußere Form** der Kristalle \mapsto Morphologie, Kristallgeometrie, Goniometrie
- ▶ ... ermöglicht/erleichtert **Beschreibung** des festen Zustands (Translationsymmetrie im realen Raum)
- ▶ ... erlaubt Erkennen von **Strukturzusammenhängen** (Symmetrie als Ordnungsprinzip, Gruppe-Untergruppe-Beziehung)
- ▶ ... erlaubt Erklärung von **Phasenübergängen** (und Verzwilligungen)
- ▶ ... bestimmt die **physikalischen Eigenschaften**
 - ▶ z.B. Piezoelektrizität, Pyroelektrizität, ferroische Eigenschaften
 - ▶ z.B. Beugungsbilder (für Methode Strukturbestimmung)



Einleitung

Symmetrie- Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

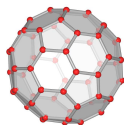
P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

Symmetrie in der Chemie (bekannt?!)

Molekülchemie (OC, AC)

- ▶ OC: Chiralität (R/S)
- ▶ NMR: 'symmetrisch äquivalente H'
- ▶ 'Attraktivität' von Molekülen mit hoher Symmetrie •



elektronische Strukturen, Spektroskopie (PC, AC)

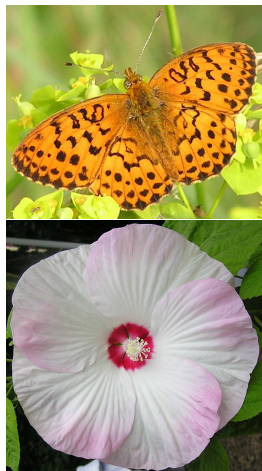
- ▶ Mulliken-Symbole (z.B. MO-Theorie; Bindung in Komplexen: t_{2g})
- ▶ Auswahlregeln (z.B. Paritätsverbot)
- ▶ Symmetriebeziehungen bei chemischen Reaktionen (z.B. Woodward-Hoffmann-Regeln)

Festkörperchemie und -physik (AC)

- ▶ Unterscheidung von Modifikationen (z.B. **monokliner** Schwefel)
- ▶ Symmetrie im reziproken (Impuls-)Raum \mapsto Bandstrukturen

Symmetrie und ...

- ▶ ... **Natur**
 - ▶ Tiere: Spiegelsymmetrie
 - ▶ Pflanzen: vor allem Drehachsen
- ▶ ... **Kunst**
 - ▶ Darstellende Kunst (Malerei)
 - ▶ Architektur
 - ▶ Musik
- ▶ ... **Alltag**
- ▶ **Links dazu**
- ▶ Bedeutung bei vielen Naturgesetzen
- ▶ **ABER:** vieles wieder interessanter/'lebendiger' durch Symmetriebrechung



2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Was ist Symmetrie?

Definitionen

mathematisch

Symmetrie ist die Invarianz eines Systems gegenüber Transformationen.

praktisch

Symmetrie ist die Eigenschaft einer geometrischen Figur/eines Objektes, in verschiedenen Positionen gleich auszusehen.



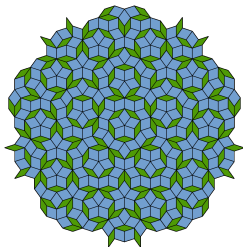
Alexei V. Shubnikov
(1887-1970)



Evgraf S. Fedorov
(1853-1919)

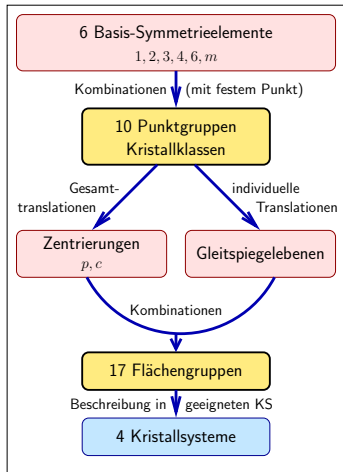
Klassifizierung von Symmetrie

- ▶ **Punkt-Symmetrie** (mindestens ein Punkt bleibt fest)
 - ▶ Drehungen, Spiegelung, Punktspiegelung (Inversion)
 - ▶ Kombinationen davon
- ▶ **Translations-Symmetrie**
 - ▶ kein Punkt bleibt fest
 - ▶ Vektor beschreibt Verschiebung in 1/2/3-Dimensionen
 - ▶ 2D: periodische Muster (z.B. Tapeten, Stoffe, Fliesen usw.)
 - ▶ 3D: kristalline Festkörper
- ▶ Quasikristalle
- ▶ ...

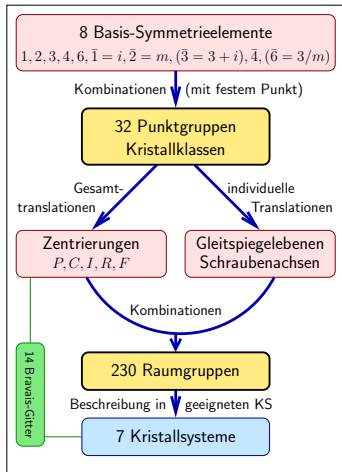


Kristallographische Symmetrien

2. Punktgruppen, Kristallklassen



2-dim. Translation (Flächengruppen)



3-dim. Translation (Raumgruppen)

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

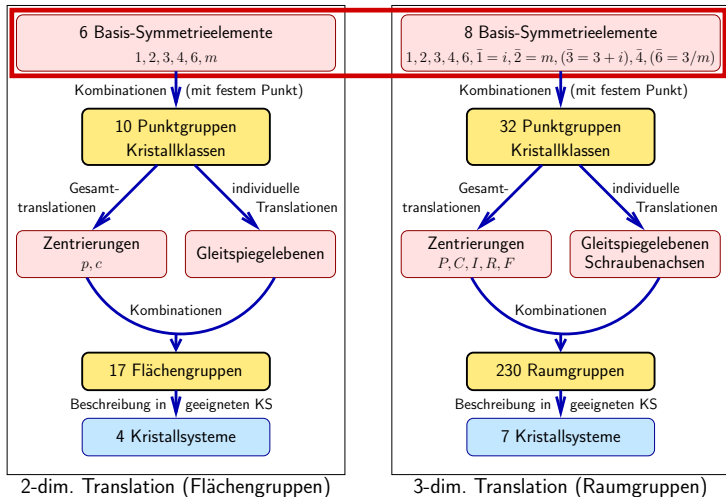
Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Kristallographische Symmetrien

2. Punktgruppen, Kristallklassen



Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

Definitionen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

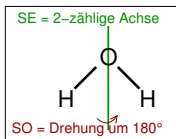
Beispiele

Symmetrie-Operation

Eine **Symmetrie(Deck)-Operation** (SO) ist eine Bewegung eines Körpers im Raum, die ihn in eine von der Ausgangslage ununterscheidbare Position bringt.

Symmetrie-Element

Alle Punkte, die bei dieser Bewegung unverändert bleiben, bilden das zugehörige **Symmetrie-Element** (SE).



Beispiel: H₂O-Molekül

!! ein Symmetrie-Element kann mehrere Symmetrie-Operationen bedingen !!

Beispiel: 3-zählige Drehachse (1 SE) = Drehung um 120° und 240° (2 SO)

Bezeichnungen von Punktsymmetrien (SO und Gruppen)

2. Punktgruppen, Kristallklassen

SCHÖNFLIES (z.B. C_{2v})

- ▶ ältere Bezeichnung
- ▶ in Spektroskopie/Molekülchemie weit verbreitet
- ▶ in Kristallographie (bei Vorliegen von Translationssymmetrie) ungeeignet
- ▶ wenig systematisch



ARTHUR MORITZ SCHÖNFLIES (1853-1928)¹

Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Bezeichnungen von Punktsymmetrien (SO und Gruppen)

SCHÖNFLIES (z.B. C_{2v})

- ▶ ältere Bezeichnung
- ▶ in Spektroskopie/Molekülchemie weit verbreitet
- ▶ in Kristallographie (bei Vorliegen von Translationssymmetrie) ungeeignet
- ▶ wenig systematisch



ARTHUR MORITZ SCHÖNFLIES (1853-1928)¹

HERMANN-MAUGUIN (z.B. $2mm$)

- ▶ in der Kristallographie gebräuchlich
- ▶ einigermaßen systematisch
- ▶ Koordinatensystem (Blickrichtungen) erforderlich



CARL HERMANN
(1898-1961)



CHARLES VICTOR MAUGUIN
(1878-1958)

Klassifizierung von Punkt-Symmetrie-Operationen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

einfache Einteilung

- ▶ Basis-SO:
 - ▶ Drehungen
 - ▶ Spiegelung
 - ▶ Inversion (Punktspiegelung)
- ▶ zusammengesetzte SO: $\underbrace{\text{Drehspiegelung}}_{\text{SCHÖNFLIES}}$ bzw. $\underbrace{\text{Drehinversion}}_{\text{H.-M.}}$

Einteilung nach Chiralität

- ▶ eigentliche SO (1. Art): z.B. Drehungen \mapsto Chiralität bleibt erhalten
 - ▶ uneigentliche SO (2. Art): z.B. Inversion, Spiegelung, Drehinversion/Drehspiegelung \mapsto Chiralität ändert sich
- \mapsto Chiralität = Abwesenheit von Symmetrieelementen 2. Art

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

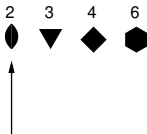
Beschreibung

- ▶ Rotationssymmetrie: Drehung um $\frac{360}{n}^\circ$ um eine Achse
- ▶ SE: n -zählige Drehachse (Gerade)
- ▶ SO: Drehung, Rotation
- ▶ jede n -zählige Drehachse bedingt $n - 1$ SO
z.B. C_3 -Achse = $C_3^1 + C_3^2$
- ▶ $C_n^n = E$ ($n - 1$ SO/SE)
- ▶ eigentliche SO (1. Art): Chiralität bleibt erhalten

Bezeichnungen

- ▶ H.-M.: einfache Zahl (z.B. 3)
- ▶ SCHÖNFLIES: C_n (z.B. C_3)
 C = cyclische Gruppe: alle Elemente sind Potenzen eines Grundelementes
Abelsche Gruppe (Kommutativgesetz gilt: z.B.: $C_3^2 = C_3^1 \circ C_3^1$)

Symbole: Polygone mit n Ecken



Beispiele

► Objekte mit Drehachse alleine, 2D/3D, z.B. C_2 und C_3 ↓

HERMANN- MAUGUIN-	SCHÖN- FLIES-	Zei- chen	Beispiele			
			2-dimensional	3-dimensional		
Symbol				div.	Moleküle	Kristallpolyeder
2	C_2					 $C_{12}H_{22}O_{11}$
3	C_3					 $NaIO_4 \cdot 3H_2O$

► s.a. [Web-Seite](#) oder [Vorlage 2.1](#)

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

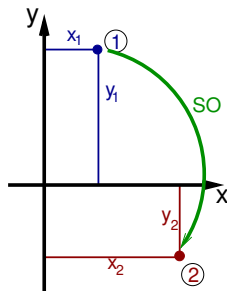
Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Mathematische Beschreibung

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



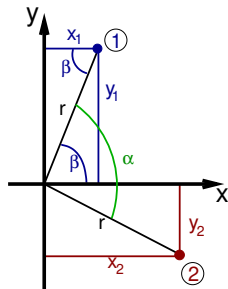
- ▶ Symmetrieoperation = 3×3 -Matrix, die mit (Spalten)-Vektor (x_1, y_1, z_1) multipliziert, die Koordinaten des symmetrieäquivalenten Punktes ergibt:

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

Mathematische Beschreibung von Drehungen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

- ▶ 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

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Mathematische Beschreibung von Drehungen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

► 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 drei Dimensionen (Drehachse = z-Achse):

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

Einleitung

Symmetrie- Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

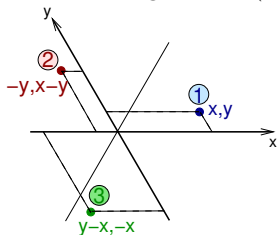
Symmetriengepaßte Koordinatensysteme

symmetriengepaßte Koordinatensysteme (KS) \mapsto einfache Matrizen:

- ▶ 2- oder 4-zählige Achsen: rechtwinkliges KS (3D)

$$\text{z.B. } C_4^1: \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- ▶ 3- oder 6-zählige Achsen (KS mit 120° -Winkel zwischen a und b)



$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ bzw. } \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

Zusammenfassung: Rotationen/Drehachsen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

- ▶ C_n bzw. n

- ▶
$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- ▶ eigentliche Symmetrieelemente, da

$$\det(\mathbf{M}) = \cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha = +1$$

- ▶ mit 2D/3D-Translation vereinbar (kristallographisch) $\mapsto 1, 2, 3, 4, 6$

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

Beschreibung

▶ SO: Spiegelung

▶ SE: Spiegelebene (Fläche)

▶ für $m \perp z$ ($x, y, z \mapsto x, y, -z$) $\mapsto \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

▶ $\det(\mathbf{M}) = -1 \mapsto$ uneigentliche SO = SO 2. Art

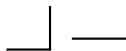
▶ $\sigma^2 = E$ (eine SO/SE)

Bezeichnung



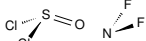

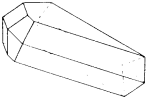
▶ H.-M.: m (Mirror plane) (\perp zur Blickrichtung)

▶ SCHÖNFLIES: σ

Symbol: durchgezogene Linie: senkrecht \Downarrow bzw. \Downarrow in zur/der Papierebene



▶ Objekte mit Spiegelebene alleine

HERMANN- MAUGUIN-	SCHÖN- FLIES-	Zeichen	Beispiele			
			2-dimensional	3-dimensional		
Symbol			div.	Moleküle	Kristallpolyeder	
m	σ	L 			 	 $\text{Ca}_2\text{B}_5\text{O}_9\text{Cl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ (Hilgardit-4M)

- ▶ Hilgardit-4M im Mineralienatlas
- ▶ s.a. Web-Seite oder Vorlage 2.2

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Beschreibung

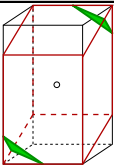
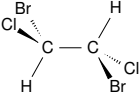
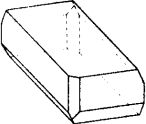
- ▶ SO: Punktspiegelung, Inversion
- ▶ SE: Inversionszentrum (Punkt)
- ▶ Zentrosymmetrie
- ▶ $x, y, z \mapsto -x, -y, -z$ (für i im Ursprung des KS)
- ▶
$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$
- ▶ $\det(\mathbf{M}) = -1 \mapsto$ uneigentliche Symmetrieoperation (2. Art)
- ▶ $i^2 = E$ (eine SO/SE)

Bezeichnung

- ▶ H.-M.: $\bar{1}$ (s.u.)
- ▶ SCHÖNFLIES: i

Symbol: \circ

► Objekte mit Inversionszentrum alleine

HERMANN-MAUGUIN-Symbol	SCHÖN-FLIES-chen	Zei-chen	Beispiele		
			2-dimensional	3-dimensional	
Symbol			div.	Moleküle	Kristallpolyeder
$\bar{1}$	i	\circ			
					MnSiO ₃ (Rhodonit)

s.a.

- Rhodonit im Mineralienatlas
- s.a. Web-Seite oder Vorlage 2.2.

Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

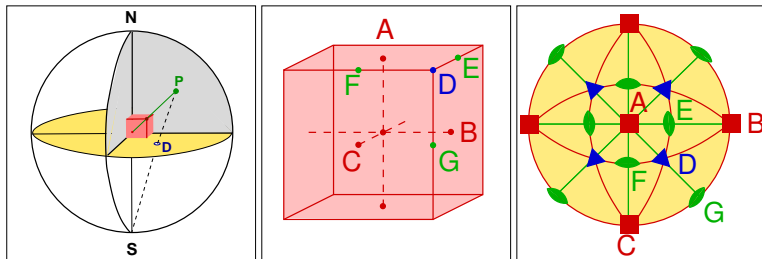
Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

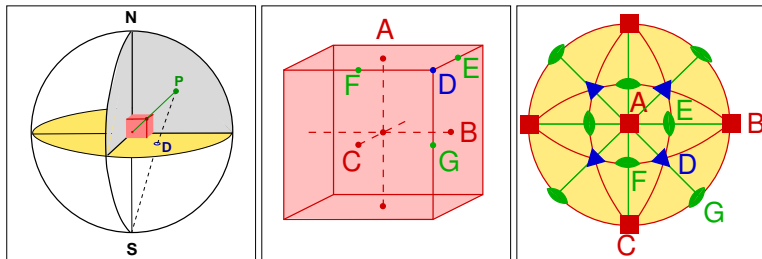
Beispiele

Einschub: Stereographische Projektion (Vorlage 2.3.)



- ▶ Kugel um das Objekt (Molekül, Kristallpolyeder, etc.)
- ▶ Projektion der **Punkte** (Atome, Flächenmittelpunkte, Polyederecken etc.) auf die Kugel­fläche (z.B. Lampe im Kugel-Zentrum \mapsto **Schattenpunkt P**)
- ▶ Verbinden von **P** mit dem Gegenpol (N/S)
- ▶ Durchstoßpunkt **D** durch Äquatorfläche = Markierung (mit Kennung, ob vom N/S-Pol projiziert wurde)

Einschub: Stereographische Projektion (Vorlage 2.3.)



- ▶ Kugel um das Objekt (Molekül, Kristallpolyeder, etc.)
- ▶ Projektion der **Punkte** (Atome, Flächenmittelpunkte, Polyederecken etc.) auf die Kugeloberfläche (z.B. Lampe im Kugel-Zentrum \mapsto **Schattenpunkt P**)
- ▶ Verbinden von **P** mit dem Gegenpol (N/S)
- ▶ Durchstoßpunkt **D** durch Äquatorfläche = Markierung (mit Kennung, ob vom N/S-Pol projiziert wurde)

\Rightarrow einfache Beispiele

einfache Beispiele



2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

Definition zusammengesetzter Symmetrieoperationen

SCHÖNFLIES: Drehspiegelachsen

- ▶ Drehung, gefolgt von Spiegelung an Ebene \perp Drehachse
- ▶ Bezeichnung: S_n

HERMANN-MAUGUIN: Drehinversionsachsen

- ▶ Drehung, gefolgt von Inversion
- ▶ Bezeichnung: \bar{n} (n -quer)
- ▶ kristallographisch: $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$

Vergleich der zusammengesetzten Symmetrieeoperationen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Elemente	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=6$
Drehspiegelachse	S_1 σ	S_2 i	S_3 C_{3h}	S_4	S_6
S_n					
Drehinversionsachse	$\bar{1}$ i	$\bar{2}$ m	$\bar{3}$ $3+i$	$\bar{4}$	$\bar{6}$ $\frac{3}{m}$
\bar{n}					

s. a. Vorlage 2.2.

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Fazit zusammengesetzte Symmetrieoperationen

SCHÖNFLIES: Drehspiegelachsen

- ▶ Drehung, gefolgt von Spiegelung an Ebene \perp Drehachse
- ▶ Bezeichnung: S_n

HERMANN-MAUGUIN: Drehinversionsachsen

- ▶ Drehung, gefolgt von Inversion
- ▶ Bezeichnung: \bar{n} (n -quer)
- ▶ kristallographisch: $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$

Fazit zusammengesetzte Symmetrieoperationen

SCHÖNFLIES: Drehspiegelachsen

- ▶ Drehung, gefolgt von Spiegelung an Ebene \perp Drehachse
- ▶ Bezeichnung: S_n

HERMANN-MAUGUIN: Drehinversionsachsen

- ▶ Drehung, gefolgt von Inversion
- ▶ Bezeichnung: \bar{n} (n -quer)
- ▶ kristallographisch: $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$
- ▶ NEU: $\bar{4}$

Vergleich: SCHÖNFLIES – HERMANN-MAUGUIN

- ▶ $\bar{1} = S_2 = i$
- ▶ $\bar{2} = S_1 = m = \sigma$
- ▶ $\bar{3} = S_6$
- ▶ $\bar{4} = S_4$
- ▶ $\bar{6} = S_3 = \frac{3}{m}$

Fazit zusammengesetzte Symmetrieoperationen

SCHÖNFLIES: Drehspiegelachsen

- ▶ Drehung, gefolgt von Spiegelung an Ebene \perp Drehachse
- ▶ Bezeichnung: S_n

HERMANN-MAUGUIN: Drehinversionsachsen

- ▶ Drehung, gefolgt von Inversion
- ▶ Bezeichnung: \bar{n} (n -quer)
- ▶ kristallographisch: $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$
- ▶ NEU: $\bar{4}$

Vergleich: SCHÖNFLIES – HERMANN-MAUGUIN

- ▶ $\bar{1} = S_2 = i$
- ▶ $\bar{2} = S_1 = m = \sigma$
- ▶ $\bar{3} = S_6$
- ▶ $\bar{4} = S_4$
- ▶ $\bar{6} = S_3 = \frac{3}{m}$

kristallographische Symmetrieoperationen insgesamt

- ▶ 8 Stück: 1, 2, 3, 4, 6, $\bar{1} = i$, $\bar{2} = m$, ($\bar{3} = 3+i$), $\bar{4}$, ($\bar{6} = \frac{3}{m}$)

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

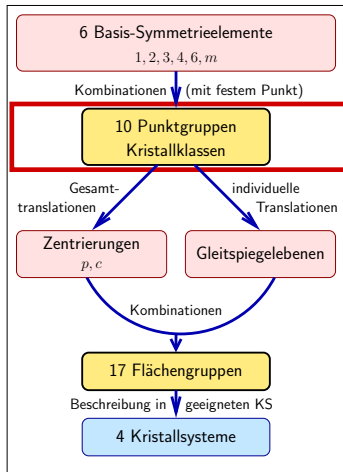
Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

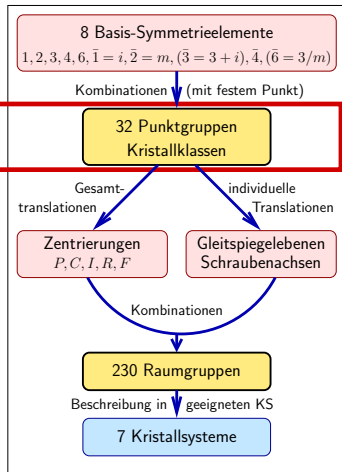
Beispiele

Kristallographische Symmetrien

2. Punktgruppen, Kristallklassen



2-dim. Translation (Flächengruppen)



3-dim. Translation (Raumgruppen)

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

Punktgruppen – Kristallklassen

Punktgruppe = Sammlung von Symmetrie-Operationen eines Objektes
(z.B. eines Moleküls, Kristalls oder Koordinationspolyeders)

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

¹ bzw. Multiplikation der 3×3 -Transformationsmatrizen

Punktgruppen – Kristallklassen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Punktgruppe = Sammlung von Symmetrie-Operationen eines Objektes (z.B. eines Moleküls, Kristalls oder Koordinationspolyeders)

- ▶ **Punkt**: mindestens ein Punkt bleibt fest
- ▶ **Gruppe**: Die Symmetrieoperationen erfüllen bzgl. der Verknüpfung *Hintereinanderausführen* (\circ)¹ die Bedingungen einer mathematischen Gruppe:

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

② Die Verknüpfung ist **assoziativ**, es gilt

$$(g_i \circ g_j) \circ g_k = g_i \circ (g_j \circ g_k)$$

③ Es gibt ein **Neutralement** e für das gilt:

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

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

$$g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$$

Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

¹ bzw. Multiplikation der 3×3 -Transformationsmatrizen

Punktgruppen – Kristallklassen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Punktgruppe = Sammlung von Symmetrie-Operationen eines Objektes (z.B. eines Moleküls, Kristalls oder Koordinationspolyeders)

- ▶ **Punkt**: mindestens ein Punkt bleibt fest
- ▶ **Gruppe**: Die Symmetrieoperationen erfüllen bzgl. der Verknüpfung *Hintereinanderausführen* (\circ)¹ die Bedingungen einer mathematischen Gruppe:

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

② Die Verknüpfung ist **assoziativ**, es gilt

$$(g_i \circ g_j) \circ g_k = g_i \circ (g_j \circ g_k)$$

③ Es gibt ein **Neutralement** e für das gilt:

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

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

$$g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$$

Kristallklassen: kristallographische Punktgruppen (nur Drehachsen 1, 2, 3, 4, 6)

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

¹ bzw. Multiplikation der 3×3 -Transformationsmatrizen

Punktgruppen – Kristallklassen

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Punktgruppe = Sammlung von Symmetrie-Operationen eines Objektes (z.B. eines Moleküls, Kristalls oder Koordinationspolyeders)

- ▶ **Punkt**: mindestens ein Punkt bleibt fest
- ▶ **Gruppe**: Die Symmetrieoperationen erfüllen bzgl. der Verknüpfung *Hintereinanderausführen* (\circ)¹ die Bedingungen einer mathematischen Gruppe:

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

② Die Verknüpfung ist **assoziativ**, es gilt

$$(g_i \circ g_j) \circ g_k = g_i \circ (g_j \circ g_k)$$

③ Es gibt ein **Neutralement** e für das gilt:

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

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

$$g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$$

Kristallklassen: kristallographische Punktgruppen (nur Drehachsen 1, 2, 3, 4, 6)

Laueklassen: Kristallklassen mit Inversionszentrum

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

¹ bzw. Multiplikation der 3×3 -Transformationsmatrizen

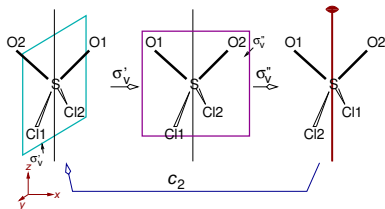
Gruppentheorie: Beispiel einer Gruppentafel

2. Punktgruppen, Kristallklassen

► Gruppentafel von $C_{2v} = mm2$

\circ	E	C_2	σ'_v	σ''_v
E	E	C_2	σ'_v	σ''_v
C_2	C_2	E	σ''_v	σ'_v
σ'_v	σ'_v	σ''_v	E	C_2
σ''_v	σ''_v	σ'_v	C_2	E

► am Beispiel des Moleküls SO_2Cl_2 :



Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

► Matrizen-Multiplikation

$$\underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\sigma'_v} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\sigma''_v} = \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{C_2}$$

Gruppentheorie, angewandt ...

... in der Molekülchemie

Def. Die Molekülsymmetrie bildet eine Gruppe, welche die Punktgruppe \mathfrak{P} des Moleküls genannt wird.

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Gruppentheorie, angewandt ...

... in der Molekülchemie

Def. Die Molekülsymmetrie bildet eine Gruppe, welche die Punktgruppe \mathfrak{P} des Moleküls genannt wird.

... in der Kristallchemie/Kristallographie

Def. Die Punktgruppe \mathfrak{P} einer Kristallstruktur ist die Symmetriegruppe des Bündels der Flächennormalen.

Def. Die Menge aller Symmetrieoperationen (Isometrien) einer Kristallstruktur heißt die Raumgruppe \mathfrak{G} dieser Kristallstruktur. \mathfrak{G} ist eine unendliche Gruppe.

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Gruppentheorie, angewandt ...

... in der Molekülchemie

Def. Die Molekülsymmetrie bildet eine Gruppe, welche die Punktgruppe \mathfrak{P} des Moleküls genannt wird.

... in der Kristallchemie/Kristallographie

Def. Die Punktgruppe \mathfrak{P} einer Kristallstruktur ist die Symmetriegruppe des Bündels der Flächennormalen.

Def. Die Menge aller Symmetrieoperationen (Isometrien) einer Kristallstruktur heißt die Raumgruppe \mathfrak{G} dieser Kristallstruktur. \mathfrak{G} ist eine unendliche Gruppe.

... für beide: 'lokale' Punktsymmetrie

Def. Die Menge aller Symmetrieoperationen einer Punkt/Raum-Gruppe, welche einen Punkt festlassen, heißt die Lagesymmetriegruppe \mathfrak{S} (Stabilisator) dieses Punktes.

- ▶ \mathfrak{S} ist eine Untergruppe von \mathfrak{P} bzw. \mathfrak{G} .
- ▶ Punkte allgemeiner Lage: $\mathfrak{S} = \mathfrak{I}$

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

Nomenklatur I: SCHÖNFLIES (Vorlage 2.4)

- ▶ Bezugssystem mit vertikaler Hauptachse (z -Achse)
- ▶ grosser Buchstabe mit kleinen Zahlen/Buchstaben
- ▶ **große Buchstaben:**
 - C zyklische Gruppe, nur eine Drehachse
 - D Diedergruppe: senkrecht zur Hauptachse weitere 2-zählige Achsen
 - S Drehspiegelachsen alleine
- T, O, I Tetraeder-, Oktaeder- oder Ikosaeder-Symmetrie
- ▶ **kleine Indizes:** Orientierung weiterer Symmetrieelemente
 - h horizontale Spiegelebene
 - v vertikale Spiegelebene
 - d diagonale Spiegelebene
 - i Inversionszentrum alleine
 - s Spiegelebene alleine

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Nomenklatur I: SCHÖNFLIES (Vorlage 2.4)

- ▶ Bezugssystem mit vertikaler Hauptachse (z -Achse)
- ▶ grosser Buchstabe mit kleinen Zahlen/Buchstaben
- ▶ **große Buchstaben:**
 - C zyklische Gruppe, nur eine Drehachse
 - D Diedergruppe: senkrecht zur Hauptachse weitere 2-zählige Achsen
 - S Drehspiegelachsen alleine
- T, O, I Tetraeder-, Oktaeder- oder Ikosaeder-Symmetrie
- ▶ **kleine Indizes:** Orientierung weiterer Symmetrieelemente
 - h horizontale Spiegelebene
 - v vertikale Spiegelebene
 - d diagonale Spiegelebene
 - i Inversionszentrum alleine
 - s Spiegelebene alleine

Beispiel: Rutil-Kristall: ● (und viele andere **hier**)

- ▶ **Rutil im Mineralienatlas**

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Nomenklatur II: HERMANN-MAUGUIN (Vorlage 2.4)

- ▶ Symmetrieelemente, auf bestimmte Richtungen eines KS bezogen (bis zu 3 Bezeichnungs- oder Blickrichtungen)
- ▶ Einzelbezeichnungen (für jede Blickrichtung)
 - n die Richtung enthält eine n -zählige Drehachse
 - \bar{n} die Richtung enthält eine n -zählige Drehinversionsachse
 - m \perp zur Richtung verläuft eine Spiegelebene
 - $\frac{n}{m}$ die Richtung enthält eine n -zählige Drehachse mit senkrechter Spiegelebene

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Nomenklatur II: HERMANN-MAUGUIN (Vorlage 2.4)

- ▶ Symmetrieelemente, auf bestimmte Richtungen eines KS bezogen (bis zu 3 Bezeichnungs- oder Blickrichtungen)
- ▶ Einzelbezeichnungen (für jede Blickrichtung)
 - n die Richtung enthält eine n -zählige Drehachse
 - \bar{n} die Richtung enthält eine n -zählige Drehinversionsachse
 - m \perp zur Richtung verläuft eine Spiegelebene
 - $\frac{n}{m}$ die Richtung enthält eine n -zählige Drehachse mit senkrechter Spiegelebene
- ▶ HERMANN-MAUGUIN-Symbole
 - ▶ H.-M.-Langsymbol: alle SE bzgl. dieser Richtungen werden genannt
 - ▶ H.-M.-Kurzsymbolsymbol: Achsen, die sich aus bereits genannten SE ergeben, bleiben ungenannt
(z.B. $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = \frac{4}{m} mm = 4/mmm$)

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Nomenklatur II: HERMANN-MAUGUIN (Vorlage 2.4)

(bis zu 3) Bezeichnungen/Blick-Richtungen

- ▶ **eine Achse höchster Zähligkeit** (nicht kubisch)

Blickrichtungen:

z Achse höchster Zähligkeit ("Hauptachse", analog SCHÖNFLIES)

$x \perp z$

!! das SE (2 bzw. m) in x kommt noch in weiteren Richtungen x' vor,
weil es durch die höherzählige Achse in z vervielfacht wird

d zwischen x und der nächsten zu ihr symmetrieäquivalenten Richtung x'

Beispiel: Rutil-Kristall: ● (und viele andere [hier](#))

2. Punktgruppen,
Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Nomenklatur II: HERMANN-MAUGUIN (Vorlage 2.4)

2. Punktgruppen, Kristallklassen

(bis zu 3) Bezeichnungen/Blick-Richtungen

- ▶ **eine Achse höchster Zähligkeit** (nicht kubisch)

Blickrichtungen:

z Achse höchster Zähligkeit ("Hauptachse", analog SCHÖNFLIES)

$x \perp z$

!! das SE (2 bzw. m) in x kommt noch in weiteren Richtungen x' vor, weil es durch die höherzählige Achse in z vervielfacht wird

d zwischen x und der nächsten zu ihr symmetrieäquivalenten Richtung x'

Beispiel: Rutil-Kristall: ● (und viele andere [hier](#))

- ▶ **kubische Punktgruppen** (mehrere Achsen höherer Zähligkeit)

vier 3-zählige Achsen (Raumdiagonalen eines Würfels: $x + y + z, ..$)

Blickrichtungen:

z Kanten des Würfels

$x + y + z$ Raumdiagonalen des Würfels

$x + y$ Flächendiagonalen des Würfels

Beispiel: Oktaeder oder Würfel oder Tetraeder ●

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Beispiel für eine Hauptachse: Rutil-Kristall



2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Beispiele für kubische Gruppen: Würfel – Oktaeder, Tetraeder



2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Nomenklatur III: Nomenklatur nach GROTH

- ▶ in den Geowissenschaften eigene Bezeichnungen eingeführt
- ▶ nach PAUL HEINRICH RITTER VON GROTH
- ▶ z.B.
 - ▶ monoklin-domatisch = $1m1 = C_s$
 - ▶ ditrigonal-pyramidal = $3m1 = C_{3v}$
 - ▶ hexakistetraedrisch = $\bar{4}3m = T_d$



PAUL HEINRICH RITTER VON GROTH
(1843-1927)

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

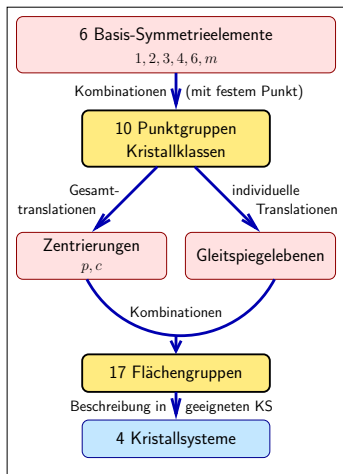
Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

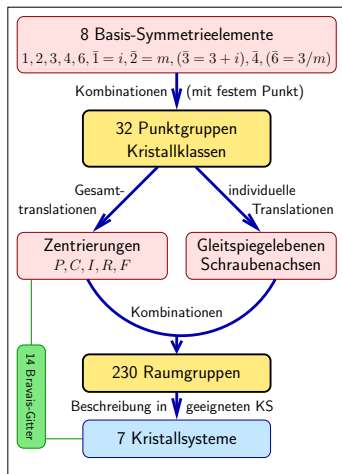
Beispiele

Wdh. der Übersicht zu kristallographischen Symmetrien

2. Punktgruppen, Kristallklassen



2-dim. Translation (Flächengruppen)



3-dim. Translation (Raumgruppen)

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Übersicht 2D-Punktgruppen (Vorlage 2.5)

- ▶ mit Translation vereinbare SE \mapsto 1, 2, 3, 4, 6 und m
- ▶ Hauptachse senkrecht zur Ebene (z ist 3. Dimension)
- ▶ Bezeichnungsrichtungen: z, x, d ($z \perp$ Ebene)
- ▶ Kombination zu 10 Punktgruppen, in 4 Koordinatensystemen, danach geordnet \Downarrow

Nr.	HERMANN- MAUGUIN	SCHÖN- FLIES-	Koordinaten- System	Nr.	HERMANN- MAUGUIN	SCHÖN- FLIES-	Koordinaten- System
	Symbol				Symbol		
1	1	C_1	schiefwinklig	5	411	C_4	quadratisch
2	2	C_2	$(a \neq b;$ γ beliebig)	6	4mm	C_{4v}	$(a = b; \gamma = 90^\circ)$ hexagonal
				7	311	C_3	
3	1m1	C_m	rechtwinklig	8	3m1	C_{3v}	$a = b;$
4	2mm	C_{2v}	$(a \neq b;$ $\gamma = 90^\circ)$	9	611	C_6	$\gamma = 120^\circ$
				10	6mm	C_{6v}	

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Übersicht 3D-Punktgruppen (Vorlage 2.5)

- ▶ mit Translationssymmetrie vereinbare SE: $\mapsto 1, 2, 3, 4, 6, \bar{1}, \bar{2}=m$ und $\bar{4}$
 - !! statt $\frac{3}{m}$ wird i. A. $\bar{6}$ verwendet !! (Bsp: Prismen)
 - !! $\bar{3}$ ist für (3 + Inversion) in Gebrauch !! (Bsp: Antiprismen)
- ▶ Kombination zu 32 Punktgruppen = Kristallklassen
- ▶ in 7 Koordinatensystemen (Kristallsystemen)
- ▶ geordnet nach KS ↓

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Übersicht 3D-Punktgruppen (Vorlage 2.5)

2. Punktgruppen, Kristallklassen

Nr.	HERMANN-MAUGUIN		SCHÖN-FLIES	Koordinatensystem (Kristallsystem)	Nr.	HERMANN-MAUGUIN		SCHÖN-FLIES	Koordinatensystem (Kristallsystem)
	Kurz-	Lang-	symbol			Kurz-	Lang-	symbol	
1	1	1	C_1	triklin	16	3	3	C_3	trigonal
2	$\bar{1}$	$\bar{1}$	C_i	$(a \neq b \neq c;$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma)$	17	$\bar{3}$	$\bar{3}$	S_6	(hexagonale A.)
3	m	$1m1$	C_s	monoklin	18	$3m1$	$3m1$	C_{3v}	$(a = b \neq c;$ $\alpha = \beta = 90^\circ;$
4	2	121	C_2	$(a \neq b \neq c;$ $\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ)$	19	321	321	D_3	$\gamma = 120^\circ)$
5	$\frac{2}{m}$	$1\frac{2}{m}1$	C_{2h}	orthorhombisch	20	$\bar{3}m1$	$\bar{3}\frac{2}{m}1$	D_{3d}	hexagonal
6	$mm2$	$mm2$	C_{2v}	$(a \neq b \neq c;$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ)$	21	6	6	C_6	$(a = b \neq c;$ $\alpha = \beta = 90^\circ;$
7	222	222	D_2		22	$\bar{6}$	$\bar{6}$	C_{3h}	$\gamma = 120^\circ)$
8	mmm	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	D_{2h}	tetragonal	23	$\frac{6}{m}$	$\frac{6}{m}$	C_{6h}	
9	4	4	C_4	$(a = b \neq c;$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ)$	24	$\bar{6}m2$	$\bar{6}m2$	D_{3h}	
10	$\bar{4}$	$\bar{4}$	S_4		25	$6mm$	$6mm$	C_{6v}	
11	$\frac{4}{m}$	$\frac{4}{m}$	C_{4h}		26	622	622	D_6	
12	$4mm$	$4mm$	C_{4v}		27	$\frac{6}{m}mm$	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	D_{6h}	
13	$\bar{4}2m$	$\bar{4}2m$	D_{2d}		28	23	23	T	kubisch
14	422	422	D_4		29	$m\bar{3}$	$\frac{2}{m}\bar{3}$	T_h	$(a = b = c;$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ)$
15	$\frac{4}{m}mm$	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	D_{4h}		30	$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$	T_d	
					31	432	432	O	
					32	$m\bar{3}m$	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	O_h	

Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

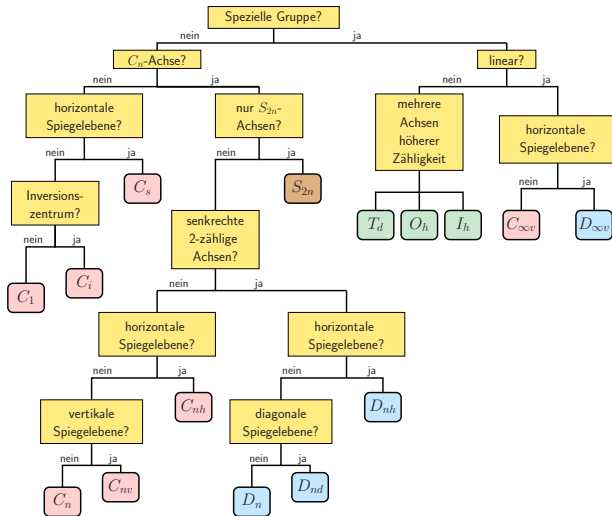
Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Schema zur Punktgruppenbestimmung (Vorlage 2.5)



2. Punktgruppen, Kristallklassen

Einleitung

Symmetrielemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

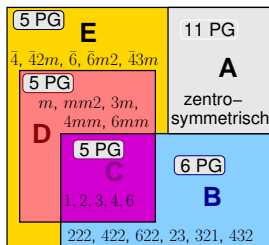
Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

Punktgruppen und Polarisations-Eigenschaften

2. Punktgruppen, Kristallklassen



A: 11 zentrosymmetrische PG (mit $\bar{1}$)

- ▶ für Polarisations-Eigenschaften uninteressant

B+C+D+E: 21 azentrische PG (ohne $\bar{1}$)

- ▶ davon 20 (ohne 432) **piezoelektrisch**

B+C+D: (ohne 432): 15 PG mit polarer Achse

- ▶ kein i oder $m \perp$ zur Drehachse
- ▶ Drehung der Polarisations Ebene des polarisierten Lichts (**optisch aktiv**)

B+C 11 PG ohne SE 2. Art (m oder $\bar{1}$)

- ▶ PG für **enantiomerenreine chirale Moleküle**

C+D 10 PG ohne 222 als Untergruppe

- ▶ **pyroelektrisch**
- ▶ kann **ferroelektrisch** sein (bei Strukturen mit umkehrbarer Polarisation)

Einleitung

Symmetrie-Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele

1 Einleitung

2 Symmetrie-Elemente/Operationen

Definitionen, Nomenklatur, Klassifizierung

I: Rotationen (SO) / Drehachsen (SE)

II: Spiegelung (SO) / Spiegelebene (SE)

III: Inversion (SO) / Inversionszentrum (SE)

Einschub: Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte Symmetrieoperationen

3 Punktgruppen (2D/3D)

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische Punktgruppen (2D/3D)

Punktgruppen und physikalische Eigenschaften (Polarisation)

4 Beispiele: Moleküle, Kristall/Koordinations-Polyeder

Einleitung

Symmetrie-
Elemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische
Projektion

IV: Zusammenge-
setzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristal-
lographische PG

P.G. und
physikalische
Eigenschaften

Beispiele

- ▶ nach SCHÖNFLIES geordnet, s.a. [Web-Seiten](#)
 - ▶ [Vorlage 2.6](#) (Punktgruppen C_{nv})
 - ▶ [Vorlage 2.7](#) (Punktgruppen C_{nh})
 - ▶ [Vorlage 2.8](#) (Punktgruppen D_n)
 - ▶ [Vorlage 2.9](#) (Punktgruppen D_{nh})
 - ▶ [Vorlage 2.10](#) (Punktgruppen D_{nh} und S_n)
 - ▶ [Vorlage 2.11](#) (Tetraeder- und Oktaedergruppen)
- ▶ und jetzt in der Polyeder-Übung

Einleitung

Symmetrieelemente

Klassifizierung

I: Rotationen

II: Spiegelung

III: Inversion

Stereographische Projektion

IV: Zusammengesetzte S.O.

Punktgruppen

Basics

Nomenklatur

Übersicht kristallographische PG

P.G. und physikalische Eigenschaften

Beispiele