

# Inhaltsverzeichnis

<b>Liste der Symbole</b> . . . . .	12
<b>1 Einleitung</b> . . . . .	13
1.1 Das Symmetrieprinzip in der Kristallchemie . . . . .	14
1.2 Einleitende Beispiele . . . . .	16
<b>Teil 1: Kristallographische Grundlagen</b> . . . . .	21
<b>2 Kristallographische Grundbegriffe, 1. Teil</b> . . . . .	22
2.1 Vorbemerkung . . . . .	22
2.2 Kristalle und Gitter . . . . .	22
2.3 Zweckmäßige Koordinatensysteme, Kristallkoordinaten . . . . .	24
2.4 Geraden, Ebenen und reziprokes Gitter . . . . .	27
2.5 Berechnung von Abständen und Winkeln . . . . .	28
<b>3 Abbildungen</b> . . . . .	30
3.1 Abbildungen in der Kristallographie . . . . .	30
3.1.1 Ein Beispiel . . . . .	30
3.1.2 Symmetrieeoperationen . . . . .	30
3.2 Affine Abbildungen . . . . .	31
3.3 Verwendung von $(n+1) \times (n+1)$ -Matrizen . . . . .	34
3.4 Affine Abbildungen von Vektoren . . . . .	35
3.5 Isometrien . . . . .	36
3.6 Typen von Isometrien . . . . .	39
3.7 Änderungen des Koordinatensystems . . . . .	43
3.7.1 Ursprungsverschiebung . . . . .	43
3.7.2 Basiswechsel . . . . .	45
3.7.3 Allgemeine Änderung des Koordinatensystems . . . . .	46
3.7.4 Wirkung von Koordinatentransformationen auf Abbildungen . . . . .	47
3.7.5 Mehrere aufeinanderfolgende Änderungen des Koordinatensystems . . . . .	50
3.7.6 Berechnung von Ursprungsverschiebungen aus Koordinatentransformationen . . . . .	52
3.7.7 Transformation weiterer kristallographischer Kenngrößen . . . . .	54
3.8 Übungsaufgaben . . . . .	54
<b>4 Kristallographische Grundbegriffe, 2. Teil</b> . . . . .	56
4.1 Beschreibung der Kristallsymmetrie in den International Tables A: Positions . . . . .	56
4.2 Kristallographische Symmetrieeoperationen . . . . .	56
4.3 Geometrische Interpretation des Matrix-Spalte-Paars $(W, w)$ einer kristallographischen Symmetrieeoperation . . . . .	60
4.4 Bestimmung des Matrix-Spalte-Paars für eine Isometrie . . . . .	62
4.5 Übungsaufgabe . . . . .	63

<b>5 Aus der Gruppentheorie . . . . .</b>	64
5.1 Zwei Beispiele von Gruppen . . . . .	64
5.2 Grundbegriffe der Gruppentheorie . . . . .	67
5.3 Nebenklassenzerlegung einer Gruppe . . . . .	69
5.4 Konjugation . . . . .	72
5.5 Faktorgruppe und Homomorphismen . . . . .	73
5.6 Operation einer Gruppe auf einer Menge . . . . .	75
5.7 Übungsaufgaben . . . . .	77
<b>6 Kristallographische Grundbegriffe, 3. Teil . . . . .</b>	79
6.1 Raumgruppen und Punktgruppen . . . . .	79
6.1.1 Molekülsymmetrie . . . . .	79
6.1.2 Die Raumgruppe und ihre Punktgruppe . . . . .	82
6.1.3 Klassifikation der Raumgruppen . . . . .	84
6.2 Das Gitter einer Raumgruppe . . . . .	85
6.3 Raumgruppen-Symbole . . . . .	86
6.3.1 Hermann-Mauguin-Symbole . . . . .	87
6.3.2 Schoenflies-Symbole . . . . .	91
6.4 Beschreibung der Raumgruppen-Symmetrie in den International Tables A . .	92
6.4.1 Diagramme der Symmetrieelemente . . . . .	93
6.4.2 Liste der Punktlagen . . . . .	96
6.4.3 Symmetrie-Operationen zur allgemeinen Punktlage . . . . .	97
6.4.4 Diagramme der allgemeinen Punktlage . . . . .	98
6.5 Allgemeine und spezielle Punktlagen der Raumgruppen . . . . .	98
6.5.1 Die allgemeine Punktlage einer Raumgruppe . . . . .	100
6.5.2 Die speziellen Punktlagen einer Raumgruppe . . . . .	100
6.6 Übungsaufgaben . . . . .	101
<b>7 Untergruppen der Punkt- und Raumgruppen . . . . .</b>	102
7.1 Untergruppen der Punktgruppen der Moleküle . . . . .	102
7.2 Untergruppen der Raumgruppen . . . . .	104
7.2.1 Maximale translationengleiche Untergruppen . . . . .	107
7.2.2 Maximale nicht-isomorphe klassengleiche Untergruppen . . . . .	107
7.2.3 Maximale isomorphe Untergruppen . . . . .	110
7.3 Der Unterschied zwischen Raumgruppe und Raumgruppentyp . . . . .	110
7.4 Minimale Obergruppen der Raumgruppen . . . . .	111
7.5 Schichtgruppen und Balkengruppen . . . . .	112
7.6 Übungsaufgaben . . . . .	115

<b>8 Konjugierte Untergruppen, Normalisatoren und äquivalente Beschreibungen von Kristallstrukturen</b> . . . . .	116
8.1 Konjugierte Untergruppen von Raumgruppen . . . . .	116
8.2 Normalisatoren von Raumgruppen . . . . .	119
8.3 Die Anzahl der konjugierten Untergruppen. Pare Untergruppen . . . . .	123
8.4 Standardisierte Beschreibung von Kristallstrukturen . . . . .	126
8.5 Äquivalente Beschreibungen von Kristallstrukturen . . . . .	127
8.6 Chiralität . . . . .	130
8.7 Falsch zugeordnete Raumgruppen . . . . .	133
8.8 Isotypie . . . . .	134
8.9 Übungsaufgaben . . . . .	137
<b>9 Hinweise zum Umgang mit Raumgruppen</b> . . . . .	139
9.1 Punktlagen der Raumgruppen . . . . .	139
9.2 Beziehungen zwischen den Punktlagen bei Gruppe-Untergruppe-Beziehungen	140
9.3 Nichtkonventionelle Aufstellungen von Raumgruppen . . . . .	141
9.3.1 Orthorombische Raumgruppen . . . . .	141
9.3.2 Monokline Raumgruppen . . . . .	144
9.3.3 Tetragonale Raumgruppen . . . . .	146
9.3.4 Rhomboedrische Raumgruppen . . . . .	148
9.3.5 Hexagonale Raumgruppen . . . . .	148
9.4 Übungsaufgaben . . . . .	149
<b>Teil 2: Symmetriebeziehungen zwischen den Raumgruppen als Hilfsmittel zur Darstellung von Zusammenhängen zwischen Kristallstrukturen</b> . . . . .	151
<b>10 Allgemeine Darstellungsform für Symmetriebeziehungen zwischen den Raumgruppen</b> . . . . .	152
<b>11 Symmetriebeziehungen zwischen verwandten Kristallstrukturen</b> . . . . .	156
11.1 Die Raumgruppe der einen Struktur ist translationengleiche maximale Untergruppe der Raumgruppe einer anderen Struktur . . . . .	156
11.2 Die maximale Untergruppe ist klassengleich . . . . .	160
11.3 Die maximale Untergruppe ist isomorph . . . . .	163
11.4 Die Untergruppe ist weder translationengleich noch klassengleich . . . . .	167
11.5 Die Raumgruppen von zwei Kristallstrukturen haben eine gemeinsame Obergruppe . . . . .	169
11.6 Größere Strukturfamilien . . . . .	172
11.7 Übungsaufgaben . . . . .	175

<b>12 Fallen und Stolpersteine beim Aufsuchen von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen</b> . . . . .	179
12.1 Ursprungsverschiebungen . . . . .	180
12.2 Pare Untergruppen . . . . .	182
12.3 Falsche Zelltransformationen . . . . .	183
12.4 Verschiedene Wege des Symmetrieabbaus . . . . .	184
12.5 Unerlaubtes Hinzufügen von Symmetrieroberationen . . . . .	186
12.6 Übungsaufgaben . . . . .	187
<b>13 Kristallstrukturen, die sich von dichtesten Kugelpackungen ableiten lassen</b> . . . . .	189
13.1 Besetzung von Lücken in dichtesten Kugelpackungen . . . . .	189
13.2 Besetzung von Oktaederlücken in der hexagonal-dichtesten Kugelpackung . . . . .	190
13.2.1 Rhomboedrische Hettotypen . . . . .	190
13.2.2 Hexagonale und trigonale Hettotypen der hexagonal-dichtesten Kugelpackung . . . . .	197
13.3 Besetzung von Oktaeder- und Tetraederlücken in der kubisch-dichtesten Kugelpackung . . . . .	202
13.3.1 Hettotypen des NaCl-Typs mit verdoppelter Elementarzelle . . . . .	202
13.3.2 Hettotypen des CaF <sub>2</sub> -Typs mit verdoppelter Elementarzelle . . . . .	205
13.4 Übungsaufgaben . . . . .	208
<b>14 Kristallstrukturen von Molekülen und Molekülionen</b> . . . . .	210
14.1 Symmetrieabbau durch Verringerung der Punktsymmetrie von Bausteinen . . . . .	211
14.2 Molekülpackungen nach dem Muster der Kugelpackungen . . . . .	212
14.3 Die Packung in Tetraphenylphosphonium-Salzen . . . . .	217
14.4 Übungsaufgaben . . . . .	221
<b>15 Symmetriebeziehungen bei Phasenumwandlungen</b> . . . . .	222
15.1 Phasenumwandlungen im festen Zustand . . . . .	222
15.1.1 Phasenumwandlungen erster und zweiter Ordnung . . . . .	222
15.1.2 Strukturelle Einteilung von Phasenumwandlungen . . . . .	224
15.2 Zur Theorie der Phasenumwandlungen . . . . .	225
15.2.1 Gitterschwingungen . . . . .	225
15.2.2 Die Landau-Theorie der kontinuierlichen Phasenumwandlungen . . . . .	228
15.3 Domänen und Zwillingskristalle . . . . .	232
15.4 Sind rekonstruktive Phasenumwandlungen über eine gemeinsame Untergruppe möglich? . . . . .	234
15.5 Wachstums- und Umwandlungszwillinge . . . . .	236
15.6 Antiphasendomänen . . . . .	240
15.7 Übungsaufgaben . . . . .	242

<b>16 Topotaktische Reaktionen</b> . . . . .	244
16.1 Symmetriebeziehungen bei topotaktischen Reaktionen . . . . .	245
16.2 Topotaktische Reaktionen bei Lanthanoidhalogeniden . . . . .	247
16.3 Übungsaufgabe . . . . .	252
<b>17 Gruppe-Untergruppe-Beziehungen als Hilfsmittel bei der Strukturaufklärung</b> . . . . .	254
17.1 Welche Raumgruppe soll man wählen? . . . . .	254
17.2 Lösung des Phasenproblems bei Proteinstrukturen . . . . .	255
17.3 Überstrukturenreflexe, verdächtige Strukturmerkmale . . . . .	256
17.4 Aufspüren von Zwillingskristallen . . . . .	258
17.5 Übungsaufgaben . . . . .	260
<b>18 Vorhersage möglicher Strukturtypen</b> . . . . .	262
18.1 Herleitung hypothetischer Strukturtypen mit Hilfe von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen . . . . .	262
18.2 Berechnung der Anzahl möglicher Strukturtypen . . . . .	266
18.2.1 Die Gesamtzahl der Strukturmöglichkeiten . . . . .	266
18.2.2 Die Anzahl der Strukturmöglichkeiten je nach Symmetrie . . . . .	269
18.3 Kombinatorische Berechnung der Verteilungsmöglichkeiten von Atomen auf gegebene Positionen . . . . .	274
18.4 Herleitung möglicher Kristallstrukturtypen bei gegebener Molekülstruktur . . . . .	278
18.5 Übungsaufgaben . . . . .	282
<b>19 Historische Anmerkungen</b> . . . . .	283
<b>Anhang 1: Isomorphe Untergruppen</b> . . . . .	287
<b>Anhang 2: Zur Theorie der Phasenumwandlungen</b> . . . . .	295
A2.1 Thermodynamische Aspekte bei Phasenumwandlungen . . . . .	295
A2.2 Zur Landau-Theorie . . . . .	298
A2.3 Renormierungstheorie . . . . .	301
A2.4 Diskontinuierliche Phasenumwandlungen . . . . .	303
<b>Anhang 3: Symmetrierassen</b> . . . . .	305
<b>Lösungen zu den Übungsaufgaben</b> . . . . .	307
<b>Literatur</b> . . . . .	340
<b>Glossar</b> . . . . .	358
<b>Sachverzeichnis</b> . . . . .	362