

# Inhaltsverzeichnis

Liste der Symbole . . . . .	12
<b>1 Einleitung . . . . .</b>	<b>13</b>
1.1 Das Symmetrieprinzip in der Kristallchemie . . . . .	14
1.2 Einleitende Beispiele . . . . .	16
<b>Teil 1: Kristallographische Grundlagen . . . . .</b>	<b>21</b>
<b>2 Kristallographische Grundbegriffe, 1. Teil . . . . .</b>	<b>22</b>
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>	<b>30</b>
3.1 Abbildungen in der Kristallographie . . . . .	30
3.1.1 Ein Beispiel . . . . .	30
3.1.2 Symmetrieoperationen . . . . .	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>	<b>56</b>
4.1 Beschreibung der Kristallsymmetrie in den International Tables A: Positions . . . . .	56
4.2 Kristallographische Symmetrieoperationen . . . . .	56
4.3 Geometrische Interpretation des Matrix-Spalte-Paares $(W, w)$ einer kristallographischen Symmetrieoperation . . . . .	60
4.4 Bestimmung des Matrix-Spalte-Paares für eine Isometrie . . . . .	62
4.5 Übungsaufgabe . . . . .	63

<b>5</b>	<b>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</b>	<b>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</b>	<b>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 Orthorhombische 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 translationengleich 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>	<b>179</b>
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 Symmetrioperationen . . . . .	186
12.6 Übungsaufgaben . . . . .	187
<b>13 Kristallstrukturen, die sich von dichtesten Kugelpackungen ableiten lassen . .</b>	<b>189</b>
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 $\text{CaF}_2$ -Typs mit verdoppelter Elementarzelle . . . . .	205
13.4 Übungsaufgaben . . . . .	208
<b>14 Kristallstrukturen von Molekülen und Molekülionen . . . . .</b>	<b>210</b>
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>	<b>222</b>
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 Überstruktureffekte, 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