

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Kristalle – Strukturen – Größenskalen	2
1.2	Fachtermini – kristallographische Lyrik	5
1.3	Der Begriff Kristall und seine Definition	6
1.4	Anisotropie	9
1.5	Robert Hooke und das Korrespondenzprinzip I	10
1.6	Die hexagonale Symmetrie von Schneeflocken	14
1.7	Das Prinzip der Elementarzelle	18
1.7.1	Charakterisierung der Elementarzelle	22
1.8	Die sieben Kristallsysteme	24
1.9	Gitter und Basis/Motiv	28
	Literatur	32
2	Kristallformen und Bravais-Gitter	33
2.1	Phänomenologie äußerer Kristallformen	35
2.1.1	Tracht und Habitus	40
2.2	Miller-Indices	42
2.2.1	Negative Miller-Indices	47
2.2.2	Netzebenenscharen und Miller-Indices in 3D	48
2.2.3	Miller-Indices, Weiss'sche Parameter, Kristallflächen und das Korrespondenzprinzip II	50
2.3	Die Wahl von Elementarzellen und Bravais-Gitter (Zentrierungen)	52
2.3.1	Primitive Elementarzellen/Gitter	52
2.3.2	Zentrierte Elementarzellen	56
2.3.3	Die 14 Bravais-Gitter	61
2.4	Atompositionen – fraktionale Koordinaten	64
2.4.1	Fraktionale Koordinaten kleiner null oder größer eins	66
2.5	Austausch von kristallographischen Informationen (CIF-Dateien)	66
2.6	Visualisierung von Kristallstrukturen mit VESTA	69
2.6.1	Download und Installation	69
2.6.2	Erstellen der Elementarzelle	70
2.6.3	Spezifizieren der Atomstruktur	73
2.6.4	Atombindungen generieren	75
2.6.5	Ansichtsmodi, Begrenzungen und das Erstellen von Bildern und CIFs	76
2.7	Vier Aspekte des Hexagonalen (Kristallsystems)	76
2.8	Trigonal – rhomboedrisch – hexagonal-R	85
	Literatur	91
3	Symmetrie (ist überall)	93
3.1	Symmetrioperation und Symmetrieelement	94
3.2	Die fünf Punktsymmetrie-Elemente	95
3.2.1	Identität	96
3.2.2	Spiegel- und Rotationssymmetrie	96
3.2.3	Inversionssymmetrie	103

3.2.4	Drehinversionen	104
3.3	Symmetrie äußerer Kristallformen – Kristallklassen.	108
3.3.1	Erste Beispiele.	109
3.3.2	Systematisches Vorgehen – kristallographische Blickrichtungen.	113
3.3.3	Beziehung zwischen Kristallsystem und Kristallklasse.	118
3.3.4	Kristallklassenposter, Kristallformen zum Basteln und interaktive Kristallklassendarstellungen	122
3.3.5	Kristallformen mit VESTA.	124
	Literatur.	127
4	Symmetrie in der Ebene – über Tapetenmuster, islamische Mosaiken, Bilder von Escher und heterogene Katalysatoren	129
4.1	Gleitspiegelebenen	130
4.1.1	Was ist eine Gleitspiegelebene?	133
4.2	Die fünf Bravais-Gitter der Ebene, die 17 Ebenengruppen und ihre Bedeutung für Kultur und Technik.	135
4.2.1	Notation der Ebenengruppen	137
4.2.2	Algorithmus zur Identifikation der Ebenengruppe.	138
4.2.3	Ebenensymmetrie in kulturellen Zusammenhängen.	141
4.2.4	Ebenensymmetrie in der Technik und Beziehungen zwischen 3D- und 2D-Bravais-Gittern	146
4.3	Werden Sie kreativ – entwerfen Sie Ihre eigenen 2D-Muster!	152
4.4	Zwischenfazit und Übergang zur Symmetrie im Raum.	152
	Literatur.	154
5	Translationsbehaftete Symmetrieelemente in Kristallen und Raumgruppen I	155
5.1	Gleitspiegelebenen in Kristallen.	156
5.1.1	Die drei einfachen Gleitspiegelebenen a , b und c	157
5.1.2	Die drei komplizierteren Gleitspiegelebenen n , d und e	161
5.2	Schraubenachsen – helicale Symmetrie	167
5.2.1	Charakteristika von Helices	169
5.2.2	Das Symmetrieelement Schraubenachse	170
5.2.3	Schraubenachsen in Kristallstrukturen.	171
5.2.4	Systematische Übersicht über kristallographische Schraubenachsen	174
5.3	Raumgruppen.	177
5.3.1	Definition und Symbolik von Raumgruppen	179
5.3.2	Zusammenhang Raumgruppe – Punktgruppe – Kristallsystem	181
	Literatur.	189
6	Raumgruppen II – Internationale Tabellen	191
6.1	Die Raumgruppe <i>Pmm</i>2 im Detail	193
6.1.1	Kopfabschnitt einer Raumgruppe	193
6.1.2	Diagrammbereich / Symmetrieelement-Diagramm.	195
6.1.3	Das Allgemeine-Lagen-Diagramm.	197
6.1.4	Asymmetrische Einheit	201
6.1.5	Lagen/Positionen und Koordinaten.	203
6.1.6	Ursprung und Ursprungswahl.	207

6.2	Die Raumgruppe $P2_1/c$ im Detail	208
6.2.1	Aufstellungen	210
6.2.2	Symmetriegerüst und Allgemeine-Lagen-Diagramm	213
6.2.3	Erzeugendensystem und Symmetrioperationen	215
6.2.4	Lagen/Positionen und Koordinaten	216
6.3	Übersicht über die grafischen Symbole der Symmetrieelemente in den Internationalen Tabellen	217
6.4	Zum Gruppenbegriff	218
6.5	Der SpaceGroupVisualizer	219
6.6	Tabellarische Raumgruppen-Übersicht	220
	Literatur	230
7	Einige reale Kristallstrukturen – von der Theorie zur Praxis	231
7.1	Ethen und die Visualisierung von Symmetrieelementen mit der Software Mercury	232
7.1.1	Inversionszentren und die asymmetrische Einheit	234
7.1.2	Weitere Symmetrieelemente	238
7.2	Benzol und das Phänomen der Polymorphie	240
7.2.1	Das Phasendiagramm von Benzol	243
7.2.2	Kristallstrukturvorhersage – so gut oder schlecht wie die Wettervorhersage?	244
7.2.3	Das Phänomen der „verschwundenen“ Polymorphe	245
7.3	Kochsalz – eine einfach-komplizierte Struktur und das „Wunder“ der 192-fachen Lage	246
7.4	Graphit und Diamant	253
7.4.1	Graphit	253
7.4.2	Diamant	255
7.5	Ferroelektrika – Isolatoren der besonderen Art und moderne Speicherbausteine	257
7.5.1	Verschiebungs- und Orientierungspolarisation	257
7.5.2	BaTiO ₃ und die spontane Polarisation	259
7.5.3	Ferroelektrizität – permanente Polarisation ohne Feld und Umkehrung der Polarisationsrichtung	261
7.5.4	Anwendungsgebiete – Kondensatoren und Speicherbausteine	263
7.5.5	Abschließende Strukturbetrachtung von BaTiO ₃ – polare Achsen – Pyro-Piezo-Ferro	263
	Literatur	265
8	„Verbotene“ Symmetrie	267
8.1	Unmögliche Gitter	268
8.2	Mögliche und unmögliche Parkettierungen	269
8.3	Mögliche und unmögliche Morphologien	271
8.4	Entdeckung der Quasikristalle – ein lehrreiches Stück der Wissenschaftsgeschichte	271
8.4.1	Natürliche Quasikristalle?!	276
8.4.2	Kristalle – eine Neudefinition	277
8.5	Penrose-Parkettierungen	277
8.6	Kristallographie in höheren Dimensionen	279
	Literatur	284

9	Poröse Kristalle, Kristallstrukturen als Netze und ein Einblick in die kristallographische Topologie	287
9.1	Zeolithe und metall-organische Gerüstverbindungen	289
9.1.1	Zeolithe	289
9.1.2	Metall-organische Gerüstverbindungen	291
9.2	Einleitende Bemerkungen zu Netzwerken, Graphen und zu ihrer Topologie und Symmetrie	294
9.2.1	Topologie	296
9.2.2	Zusammenspiel von lokaler Geometrie und globaler Topologie	298
9.3	Deskriptoren und Nomenklatur von Netzen	299
9.3.1	Das RCSR-Symbol und die RCSR-Deskriptoren	299
9.4	Das Prinzip minimaler Transitivität	310
	Literatur	311
	Serviceteil	313
A	Anhang	314
A.1	Lösungen zu den Aufgaben	314
A.1.1	Lösung zu Kap. 3	314
A.1.2	Lösung zu Kap. 5	314
A.1.3	Lösung zu Kap. 6	314
A.2	Liste der Minerale/Verbindungen	316
A.3	Weitere Begleitmaterialien	317
	Stichwortverzeichnis	318