

Liste der Symbole	XVII
1 Einleitung	1
1.1 Das Symmetrieprinzip in der Kristallchemie	3
1.2 Einleitende Beispiele	4
Teil 1: Kristallographische Grundlagen	9
2 Kristallographische Grundbegriffe, 1. Teil.....	11
2.1 Vorbemerkung.....	11
2.2 Kristalle und Gitter	11
2.3 Zweckmäßige Koordinatensysteme, Kristallkoordinaten	13
2.4 Geraden, Ebenen und reziprokes Gitter.....	16
2.5 Berechnung von Abständen und Winkeln	18
3 Abbildungen	21
3.1 Abbildungen in der Kristallographie.....	21
3.1.1 Ein Beispiel	21
3.1.2 Symmetrieoperationen	22
3.2 Affine Abbildungen	22
3.3 Affine Abbildungen von Vektoren	27
3.4 Isometrien	28
3.5 Typen von Isometrien	31
3.6 Änderungen des Koordinatensystems	35
3.6.1 Ursprungsverschiebung	36
3.6.2 Basiswechsel	37
3.6.3 Allgemeine Änderung des Koordinatensystems	38
3.6.4 Wirkung von Koordinatentransformationen auf Abbildungen	40
3.6.5 Mehrere aufeinanderfolgende Änderungen des Koordinatensystems	43
3.6.6 Berechnung von Ursprungsverschiebungen aus Koordinatentransformationen	45
3.6.7 Transformation weiterer kristallographischer Kenngrößen	46
3.7 Übungsaufgaben	47

4	Kristallographische Grundbegriffe, 2. Teil.....	49
4.1	Beschreibung der Kristallsymmetrie in den International Tables A: Positions	49
4.2	Kristallographische Symmetrioperationen	50
4.3	Geometrische Interpretation des Matrix-Spalte-Paares (W, w) einer kristallographischen Symmetrioperation	54
4.4	Bestimmung des Matrix-Spalte-Paares für eine Isometrie	55
4.5	Übungsaufgabe.....	56
5	Aus der Gruppentheorie	57
5.1	Zwei Beispiele von Gruppen	57
5.2	Grundbegriffe der Gruppentheorie	60
5.3	Nebenklassenzerlegung einer Gruppe	63
5.4	Konjugation	65
5.5	Faktorgruppe und Homomorphismen	67
5.6	Operation einer Gruppe auf einer Menge	69
5.7	Übungsaufgaben	71
6	Kristallographische Grundbegriffe, 3. Teil.....	73
6.1	Raumgruppen und Punktgruppen	73
6.1.1	Molekülsymmetrie	73
6.1.2	Die Raumgruppe und ihre Punktgruppe	76
6.1.3	Klassifikation der Raumgruppen	78
6.2	Das Gitter einer Raumgruppe	80
6.3	Raumgruppen-Symbole.....	82
6.3.1	Hermann-Mauguin-Symbole	82
6.3.2	Schoenflies-Symbole.....	86
6.4	Beschreibung der Raumgruppen-Symmetrie in den International Tables A	87
6.4.1	Diagramme der Symmetrieelemente	88
6.4.2	Liste der Punktlagen	91
6.4.3	Symmetrie-Operationen zur allgemeinen Punktlage	92
6.4.4	Diagramme der allgemeinen Punktlage	93
6.5	Allgemeine und spezielle Punktlagen der Raumgruppen	93
6.5.1	Die allgemeine Punktlage einer Raumgruppe	95
6.5.2	Die speziellen Punktlagen einer Raumgruppe	95
6.6	Der Unterschied zwischen Raumgruppe und Raumgruppentyp	97
6.7	Übungsaufgaben	98

7 Unter- und Obergruppen der Punkt- und Raumgruppen	99
7.1 Untergruppen der Punktgruppen der Moleküle	99
7.2 Untergruppen der Raumgruppen	101
7.2.1 Maximale translationengleiche Untergruppen	104
7.2.2 Maximale nicht-isomorphe klassengleiche Untergruppen	106
7.2.3 Maximale isomorphe Untergruppen	108
7.3 Minimale Obergruppen der Raumgruppen	108
7.4 Schichtgruppen und Balkengruppen	110
7.4.1 Querende Schicht- und Balkengruppen	114
7.5 Übungsaufgaben	115
8 Konjugierte Untergruppen und Normalisatoren	117
8.1 Konjugierte Untergruppen von Raumgruppen	117
8.2 Normalisatoren von Raumgruppen	120
8.3 Die Anzahl der konjugierten Untergruppen. Pare Untergruppen	124
8.4 Übungsaufgaben	128
9 Äquivalente Beschreibungen von Kristallstrukturen und Chiralität	129
9.1 Standardisierte Beschreibung von Kristallstrukturen	129
9.2 Äquivalente Beschreibungen von Kristallstrukturen	130
9.3 Chiralität	132
9.4 Falsch zugeordnete Raumgruppen	136
9.5 Isotypie und Strukturtypen	138
9.6 Übungsaufgaben	142
10 Hinweise zum Umgang mit Raumgruppen	145
10.1 Punktlagen der Raumgruppen	145
10.2 Beziehungen zwischen den Punktlagen bei Gruppe-Untergruppe- Beziehungen	146
10.3 Nichtkonventionelle Aufstellungen von Raumgruppen	148
10.3.1 Orthorhombische Raumgruppen	148
10.3.2 Monokline Raumgruppen	150
10.3.3 Tetragonale Raumgruppen	153
10.3.4 Rhomboedrische Raumgruppen	155
10.3.5 Hexagonale Raumgruppen	155
10.4 Übungsaufgaben	156

Teil 2: Symmetriebeziehungen zwischen den Raumgruppen als Hilfsmittel zur Darstellung von Zusammenhängen zwischen Kristallstrukturen	157
11 Allgemeine Darstellungsform für Symmetriebeziehungen zwischen den Raumgruppen	159
12 Symmetriebeziehungen zwischen verwandten Kristallstrukturen	165
12.1 Die Raumgruppe einer Struktur ist translationengleiche maximale Untergruppe der Raumgruppe einer anderen Struktur	165
12.2 Die maximale Untergruppe ist klassengleich	169
12.3 Die maximale Untergruppe ist isomorph	174
12.4 Die Untergruppe ist weder translationengleich noch klassengleich	177
12.5 Die Raumgruppen von zwei Kristallstrukturen haben eine gemeinsame Obergruppe	178
12.6 Größere Strukturfamilien	182
12.7 Übungsaufgaben	186
13 Fallen und Stolpersteine beim Aufsuchen von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen	189
13.1 Ursprungsverschiebungen	190
13.2 Pare Untergruppen	193
13.3 Falsche Zelltransformationen	193
13.4 Falsche Aufstellungen von Raumgruppen	195
13.5 Verschiedene Wege des Symmetrieabbaus	196
13.6 Unerlaubtes Hinzufügen von Symmetrieoperationen	198
13.7 Übungsaufgaben	200
14 Kristallstrukturen, die sich von dichtesten Kugelpackungen ableiten lassen	201
14.1 Besetzung von Lücken in dichtesten Kugelpackungen	201
14.2 Besetzung von Oktaederlücken in der hexagonal-dichtesten Kugelpackung	203
14.2.1 Rhomboedrische Hettotypen	203
14.2.2 Hexagonale und trigonale Hettotypen der hexagonal-dichtesten Kugelpackung	210
14.3 Besetzung von Oktaeder- und Tetraederlücken in der kubisch-dichtesten ... Kugelpackung	214
14.3.1 Hettotypen des NaCl-Typs mit verdoppelter Elementarzelle	214
14.3.2 Rhomboedrische Hettotypen des NaCl-Typs	217
14.3.3 Hettotypen des CaF_2 -Typs mit verdoppelter Elementarzelle	219
14.4 Übungsaufgaben	223

15 Kristallstrukturen von Molekülen und Molekülionen	225
15.1 Symmetrieabbau durch verringerte Punktsymmetrie von Bausteinen	227
15.2 Molekülpackungen nach dem Muster der Kugelpackungen	228
15.3 Die Packung in Tetraphenylphosphonium-Salzen	231
15.4 Übungsaufgaben	236
16 Symmetriebeziehungen bei Phasenumwandlungen	237
16.1 Phasenumwandlungen im festen Zustand	237
16.1.1 Phasenumwandlungen erster und zweiter Ordnung	238
16.1.2 Strukturelle Einteilung von Phasenumwandlungen	240
16.2 Zur Theorie der Phasenumwandlungen	241
16.2.1 Schwingungsmoden	241
16.2.2 Die Landau-Theorie der kontinuierlichen Phasenumwandlungen ...	243
16.3 Domänen und Zwillingskristalle	248
16.4 Sind rekonstruktive Phasenumwandlungen über eine gemeinsame Untergruppe möglich?	249
16.5 Wachstums- und Umwandlungszwillinge	252
16.6 Antiphasendomänen	256
16.7 Die Rolle von nicht realisierbaren Zwischengruppen in einem Bärnighausen-Stammbaum	258
16.8 Übungsaufgaben	261
17 Topotaktische Reaktionen	263
17.1 Symmetriebeziehungen bei topotaktischen Reaktionen	264
17.2 Topotaktische Reaktionen bei Lanthanoidhalogeniden	266
17.3 Übungsaufgabe	272
18 Gruppe-Untergruppe-Beziehungen als Hilfsmittel bei der Struktur- aufklärung	275
18.1 Welche ist die richtige Raumgruppe?	276
18.2 Lösung des Phasenproblems bei Proteinstrukturen	276
18.3 Überstruktureffekte, verdächtige Strukturmerkmale	277
18.4 Aufspüren von Zwillingskristallen	281
18.5 Übungsaufgaben	284
19 Vorhersage möglicher Strukturtypen	287
19.1 Herleitung hypothetischer Strukturtypen mit Hilfe von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen	287
19.2 Berechnung der Anzahl möglicher Strukturtypen	291
19.2.1 Die Gesamtzahl der Strukturmöglichkeiten	291
19.2.2 Die Anzahl der Strukturmöglichkeiten je nach Symmetrie	295

19.3 Kombinatorische Berechnung der Verteilungsmöglichkeiten von Atomen auf gegebene Positionen	300
19.4 Herleitung möglicher Kristallstrukturtypen bei gegebener Molekülstruktur	304
19.5 Übungsaufgaben	308
20 Historische Anmerkungen	309
Teil 3: Erweiternde Exkurse zu speziellen Themen	313
21 Isomorphe Untergruppen	315
21.1 Übungsaufgaben	322
22 Zur Theorie der Phasenumwandlungen	325
22.1 Thermodynamische Aspekte bei Phasenumwandlungen	325
22.2 Zur Landau-Theorie	328
22.3 Renormierungstheorie	331
22.4 Diskontinuierliche Phasenumwandlungen	333
23 Symmetrierassen	337
24 Unterstützende Rechenprogramme	339
24.1 Information zu den Raumgruppentypen	340
24.1.1 Untergruppen einer Raumgruppe	342
24.2 Programme zu kristallographischen Umrechnungen	344
24.3 Isotype Kristallstrukturen	346
Anhang	347
Lösungen zu den Übungsaufgaben	349
Literaturverzeichnis	383
Glossar	407
Sachverzeichnis	413
Verzeichnis der Strukturtypen und Kristallstrukturen	419