

„Raum“symmetrie

- Schraubenachsen, Gleitspiegelebenen
- Kombinationen: Raumgruppen

„Raum“symmetrie

- Schraubenachsen, Gleitspiegelebenen
- Kombinationen: Raumgruppen

Symmetrieoperation, -element

- $\vec{R}' = \bar{\Omega} \cdot \vec{R} + \vec{t}$
mit $\vec{R}', \vec{R}, \vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- $\vec{t} \neq 0$: Invarianz des Raumes

→ Raumgruppen

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad \begin{pmatrix} \vec{R}' \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \bar{\Omega} & \vec{t} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} & \Omega_{13} & t_1 \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} & \Omega_{23} & t_2 \\ \Omega_{31} & \Omega_{32} & \Omega_{33} & t_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Symmetrieoperation, -element

- $\vec{R}' = \bar{\Omega} \cdot \vec{R} + \vec{t}$
mit $\vec{R}', \vec{R}, \vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- $\vec{t} \neq 0$: Invarianz des Raumes

→ Raumgruppen

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad \begin{pmatrix} \vec{R}' \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \bar{\Omega} & \vec{t} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} & \Omega_{13} & t_1 \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} & \Omega_{23} & t_2 \\ \Omega_{31} & \Omega_{32} & \Omega_{33} & t_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Symmetrieoperation, -element

- $\vec{R}' = \bar{\Omega} \cdot \vec{R} + \vec{t}$
mit $\vec{R}', \vec{R}, \vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$
- $\vec{t} \neq 0$: Invarianz des Raumes

→ Raumgruppen

$$\bullet \begin{pmatrix} \vec{R}' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\Omega} & \vec{t} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} & \Omega_{13} & t_1 \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} & \Omega_{23} & t_2 \\ \Omega_{31} & \Omega_{32} & \Omega_{33} & t_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Kopplung Drehachse und Translation

- $\tau \parallel \vec{R}, \tau \parallel \vec{e}_D$
- wegen $2 \cos \phi + 1 = G: \vec{\tau} = \vec{R}_D / n \cdot \lambda$
- Invarianz von $\vec{R}_D \Rightarrow$ Schraubenachsen

SE	n	λ	τ	SE
1	1	0	0	Identität
◊	2	0	0	◊
●	2	1	1/2	2 ₁
	2	1	1	2
▲	3	0	0	3
	3	1	1/3	3 ₁
	3	2	2/3	3 ₂
		3	1	3

Kopplung Drehachse und Translation

- $\tau \parallel \vec{R}, \tau \parallel \vec{e}_D$
- wegen $2 \cos \phi + 1 = G: \vec{\tau} = \vec{R}_D / n \cdot \lambda$
- Invarianz von $\vec{R}_D \Rightarrow$ Schraubenachsen

SE	n	λ	τ	SE
1	1	0	0	Identität
◊	2	0	0	◊
●	2	1	1/2	2 ₁
	2	2	1	2
▲	3	0	0	3
	3	1	1/3	3 ₁
		2	2/3	3 ₂
		3	1	3

Kopplung Drehachse und Translation

- $\tau \parallel \vec{R}, \tau \parallel \vec{e}_D$
- wegen $2 \cos \phi + 1 = G: \vec{\tau} = \vec{R}_D / n \cdot \lambda$
- Invarianz von $\vec{R}_D \Rightarrow$ Schraubenachsen

SE	n	λ	τ	SE
1	1	0	0	Identität
◊	2	0	0	◊
●	2	1	1/2	2 ₁
	2	2	1	2
▲	3	0	0	3
	3	1	1/3	3 ₁
		2	2/3	3 ₂
		3	1	3

Kopplung Drehachse und Translation

- $\tau \parallel \vec{R}, \tau \parallel \vec{e}_D$
- wegen $2 \cos \phi + 1 = G: \vec{\tau} = \vec{R}_D / n \cdot \lambda$
- Invarianz von $\vec{R}_D \Rightarrow$ Schraubenachsen

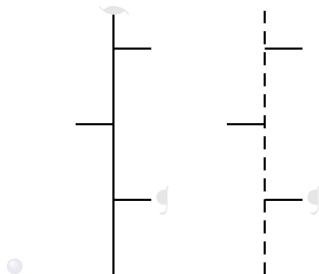
SE	n	λ	τ	SE	
1	1	0	0	Identität	
•	2	0	0	•	
•	2	1	1/2	• ₁	
	2	2	1	•	
▲	3	0	0	▲	
	3	1	1/3	▲ ₁	
		2	2/3	3 ₂	▲
		3	1	3	▲

Kopplung Drehachse und Translation

SE	n	λ	τ	SE	
◆	4	0	0	4	◆
		1	1/4	4 ₁	◆
		2	1/2	4 ₂	◆ ∈ ◯
		3	3/4	4 ₃	◆
		4	1	4	◆
●	6	0	0	6	●
		1	1/6	6 ₁	●
		2	1/3	6 ₂	● ∈ ▲, ◯
		3	1/2	6 ₃	● ∈ ◯, ▲
		4	2/3	6 ₄	● ∈ ▲, ◯
		5	5/6	6 ₅	●
		6	1	6	●

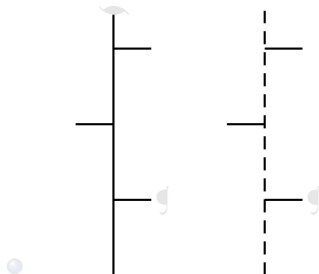
Kopplung Spiegelebene und Translation

- $\lambda = 1, \tau = \vec{R}/2$
- Invarianz von $\vec{H}_m \Rightarrow$ Gleitspiegelebene



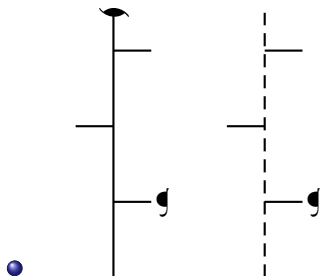
Kopplung Spiegelebene und Translation

- $\lambda = 1, \tau = \vec{R}/2$
- Invarianz von $\vec{H}_m \Rightarrow$ Gleitspiegelebene



Kopplung Spiegelebene und Translation

- $\lambda = 1, \tau = \vec{R}/2$
- Invarianz von $\vec{H}_m \Rightarrow$ Gleitspiegelebene



Gleitspiegelebenen

SE	\vec{r}	Orientierung
a	$\vec{a}/2$	$(0kl) \quad h, k, l = 1, 0, 1$
b	$\vec{b}/2$	$(h0l)$
c	$\vec{c}/2$	$(hk0)$
n	$\frac{\vec{a} + \vec{b}}{2}$	$\parallel \vec{c}$
	$\frac{\vec{b} + \vec{c}}{2}$	$\parallel \vec{a}$
	$\frac{\vec{c} + \vec{a}}{2}$	$\parallel \vec{b}$
	$\frac{\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}}{2}$	Sonderfall im Tetragonalen und Kubischen

Gleitspiegelebenen

SE	\vec{r}	Orientierung
d	$\frac{\vec{a} + \vec{b}}{4}$	$\parallel \vec{c}$
	$\frac{\vec{b} + \vec{c}}{4}$	$\parallel \vec{a}$
	$\frac{\vec{c} + \vec{a}}{4}$	$\parallel \vec{b}$
	$\frac{\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}}{4}$	Sonderfall im Tetragonalen und Kubischen

Lage von Schraubenachsen und Gleitspiegelebenen im Raum

4₁: Analytische Darstellung

- $$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- $x, y, z; y, \bar{x}, z + \frac{1}{4}; \bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}; \bar{y}, x, z + \frac{3}{4}$

4₁: Analytische Darstellung

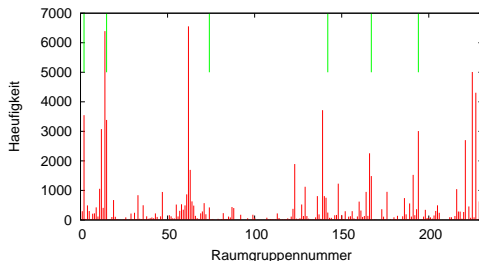
- $$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- $x, y, z; y, \bar{x}, z + \frac{1}{4}; \bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}; \bar{y}, x, z + \frac{3}{4}$

Kombinationen

- Drehachsen, Drehinversion, Schraubenachsen, Gleitspiegeleben und
- Translation (primitive und zentrierte Gitter: 14 Bravais-Gitter)
- 230 Raumgruppen

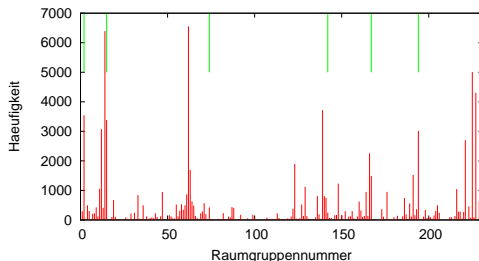
triklin	2
monoklin	13
rhombisch	59
tetragonal	68
trigonal	25
hexagonal	27
kubisch	36



Kombinationen

- Drehachsen, Drehinversion, Schraubenachsen, Gleitspiegeleben und
- Translation (primitive und zentrierte Gitter: 14 Bravais-Gitter)
- 230 Raumgruppen

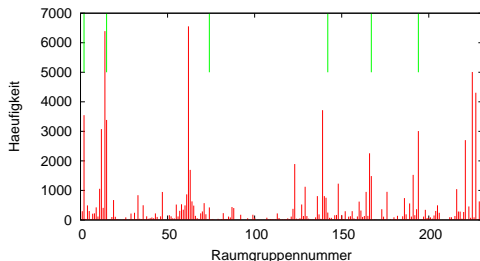
triklin	2
monoklin	13
rhombisch	59
tetragonal	68
trigonal	25
hexagonal	27
kubisch	36



Kombinationen

- Drehachsen, Drehinversion, Schraubenachsen, Gleitspiegeleben und
- Translation (primitive und zentrierte Gitter: 14 Bravais-Gitter)
- 230 Raumgruppen

triklin	2
monoklin	13
rhombisch	59
tetragonal	68
trigonal	25
hexagonal	27
kubisch	36



Elementarzelle

- möglichst rechtwinkliges Kristallsystem (auch Zentrierung)
- möglichst kleine Elementarzelle
- Wahl des Ursprungs

Elementarzelle

- möglichst rechtwinkliges Kristallsystem (auch Zentrierung)
- möglichst kleine Elementarzelle
- Wahl des Ursprungs

- Ursprung im Symmetriezentrum

- Ursprung in einem Eck der Elementarzelle

- Ursprung in einem Eck der Elementarzelle

Elementarzelle

- möglichst rechtwinkliges Kristallsystem (auch Zentrierung)
- möglichst kleine Elementarzelle
- Wahl des Ursprungs
 - Ursprung im Symmetriezentrum $P2_1c$
 - Ursprung im Schnittpunkt von Symmetrieelementen $P222_1$
 - Ursprung im singulären Element $P2_12_12$

Elementarzelle

- möglichst rechtwinkliges Kristallsystem (auch Zentrierung)
- möglichst kleine Elementarzelle
- Wahl des Ursprungs

- Ursprung im Symmetriezentrum $P2_1c$
- Ursprung im Schnittpunkt von Symmetrieelementen $P222_1$
- Ursprung im singulären Element $P2_12_12$

Elementarzelle

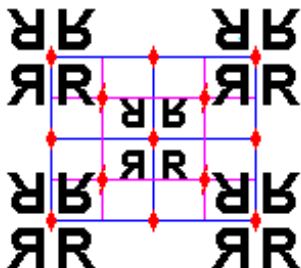
- möglichst rechtwinkliges Kristallsystem (auch Zentrierung)
- möglichst kleine Elementarzelle
- Wahl des Ursprungs
 - Ursprung im Symmetriezentrum $P2_1c$
 - Ursprung im Schnittpunkt von Symmetrieelementen $P222_1$
 - Ursprung im singulären Element $P2_12_12$

Elementarzelle

- möglichst rechtwinkliges Kristallsystem (auch Zentrierung)
- möglichst kleine Elementarzelle
- Wahl des Ursprungs
 - Ursprung im Symmetriezentrum $P2_1c$
 - Ursprung im Schnittpunkt von Symmetrieelementen $P222_1$
 - Ursprung im singulären Element $P2_12_12$

Beispiel / $Im\bar{m}2$

$Im\bar{m}2$



Allgemeine Lage:

$x, y, z; \bar{x}, \bar{y}, z; \bar{x}, y, z; x, \bar{y}, z;$

Ursprung:

$0, 0, 0$ oder $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Beispiel P_{cc2}

Anzahl der Punkte	Wykoff- Bezeichnung	Punkt- symmetrie	Lage
4	e	1	$x, y, z; x, \bar{y}, \frac{1}{2} + z;$ $\bar{x}, y, \frac{1}{2} + z; \bar{x}, \bar{y}, z$
2	d	2	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z$
2	c	2	$\frac{1}{2}, 0, z; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} + z$
2	b	2	$0, \frac{1}{2}, z; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z$
2	a	2	$0, 0, z; 0, 0, \frac{1}{2} + z$