

Festkörper- und Materialchemie

Jun.-Prof. Dr. Markus Suta
Anorganische Photoaktive Materialien
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

20.11.2025



www.photoaktivematerialien.hhu.de



markus.suta@hhu.de



[@markussuta.bsky.social](https://www.bsky.social/markussuta)

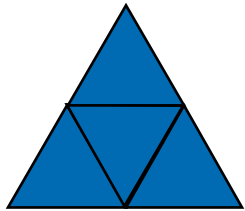
Lernziele für heute:

- Wyckoff-Symbolik und Lagesymmetrien
 - Einführung Gruppe-Untergruppe-Beziehungen & Überstrukturen
-
- Nächste Woche:
 - Weiterführung Gruppe-Untergruppe-Beziehungen & Überstrukturen

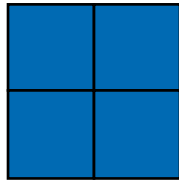
Bei Betrachtung der höchsten Punktsymmetrien der Kristallsysteme fällt auf:

Es kommen immer nur **(1-,) 2-, 3-, 4-, oder 6-zählige Punktsymmetrien** in Kristallen vor!

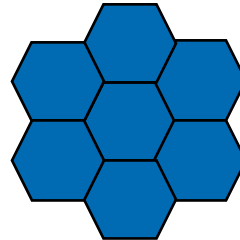
Das rührt daher, dass nur in diesen Symmetrien eine lückenlose Packung von Mustern funktioniert.



3-zählige Symmetrie

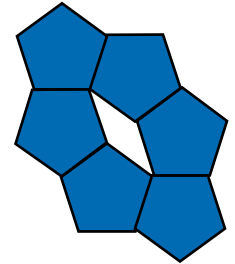


4-zählige Symmetrie



6-zählige Symmetrie

Aber:



5-zählige Symmetrie

Konsequenz: Es gibt „nur“ **32** kristallographisch relevante Punktgruppen! Diese heißen dann auch **Kristallklassen**.

Wiederholung: Die sieben Kristallsysteme im 3D

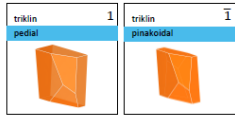
In jedem Kristallsystem gibt es Restriktionen an die Metrik:

Kristallsystem	Restriktionen bzgl. der		maximale Symmetrie
	Achsenlängen	Winkel der Zelle	Holoedrie
triklin	keine*	keine*	$\bar{1}$
monoklin	keine*	$\alpha = \gamma = 90^\circ$	$2/m$
orthorhombisch	keine*	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	mmm
tetragonal	$a = b$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$4/mmm$
trigonal	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$\bar{3}/m$
hexagonal	$a = b$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$6/mmm$
kubisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$m\bar{3}m$

*d.h. die entsprechenden Parameter können *beliebige* Werte annehmen.

Wiederholung: Übersicht über die 32 Kristallklassen

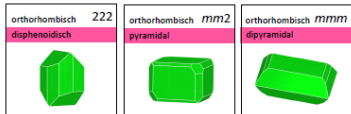
Kristallklassen



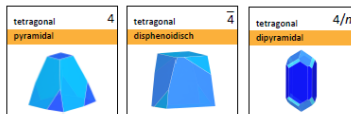
trigonal



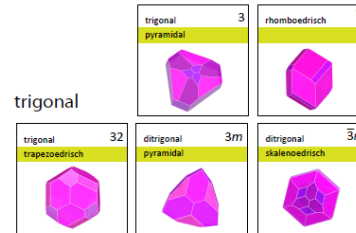
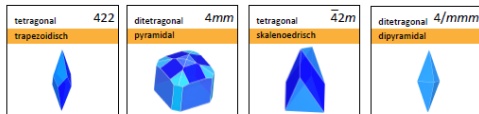
monoklin



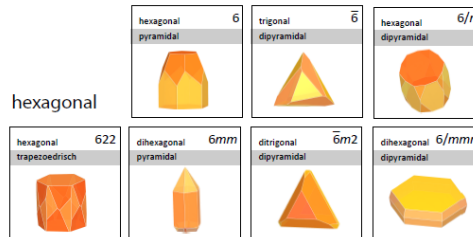
orthorhombisch



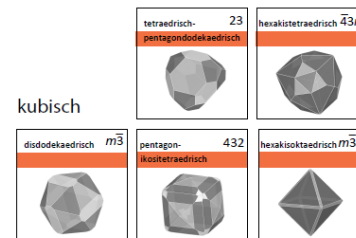
tetragonal



trigonal



hexagonal



Link zur pdf ebenfalls auf ILIAS!

Nun haben wir alle Rüstwerkzeuge zusammen, um die Symmetrie von Kristallen vollständig zu beschreiben!

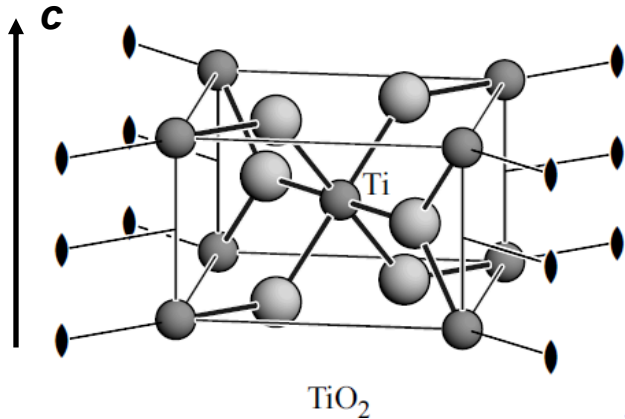
Raumgruppentyp: Enthält alle Punkt- und Translationssymmetrieelemente, mit denen man Strukturen im 3D aufbauen könnte.

Theoretisch gibt es unendlich viele, weil es ja auch unendlich viele Möglichkeiten für Punktgitter gibt. Allerdings erreichen wir bei 32 Kristallklassen und 14 Bravais-Gittern insgesamt:

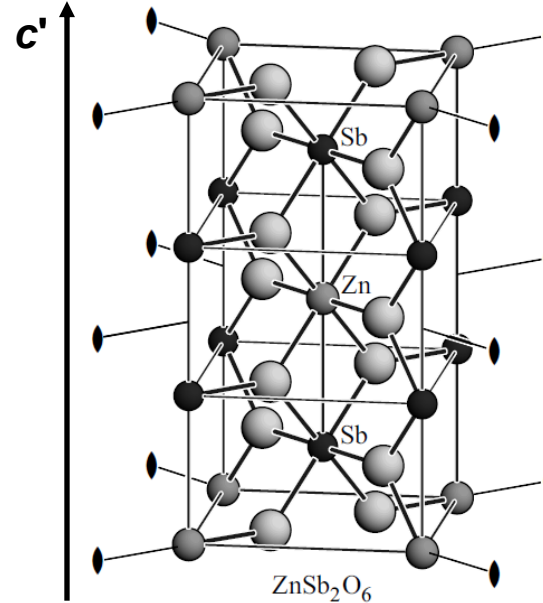
230 Raumgruppentypen

Wichtig: Sprechen wir nur von einer Gruppe mit charakteristischen Symmetrieelementen, ist es ein Raumgruppentyp. Eine Raumgruppe setzt voraus, dass auch Gitterparameter einer Struktur bekannt sind!

Wiederholung: Unterschied zwischen Raumgruppe und Raumgruppentyp



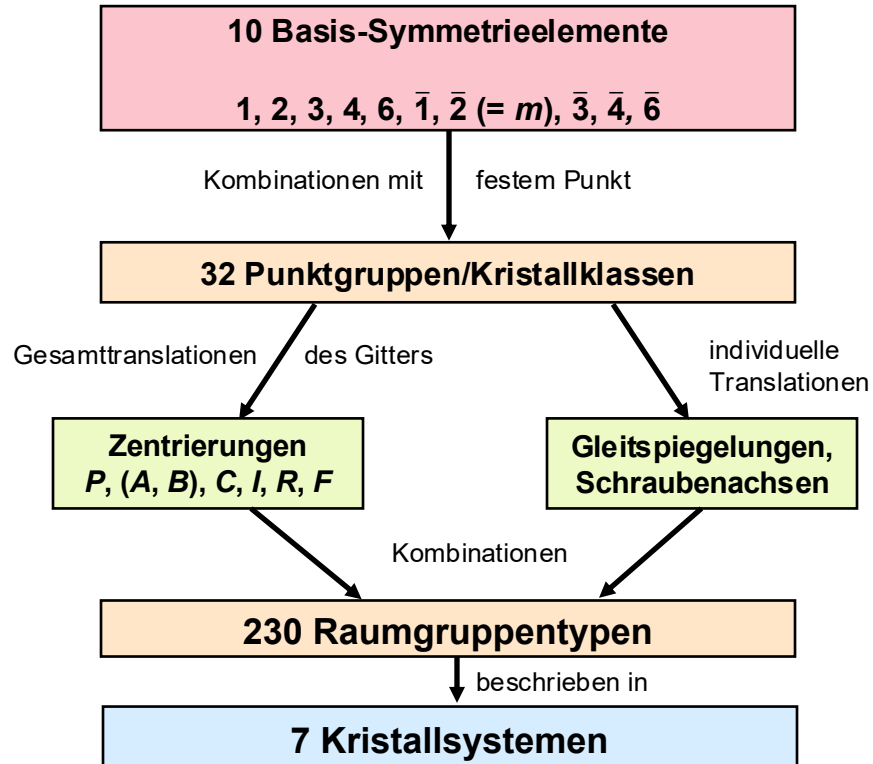
Rutil: $P4_2/mnm$ (Nr. 136)



Trirutil: $P4_2/mnm$ (Nr. 136)

Beide Strukturen gehören demselben allgemeinen Raumgruppentyp $P4_2/mnm$ (Nr. 136) an. Die Symmetrie jeder der individuellen Strukturen **mit ihren Gitterparametern** wird jedoch durch eine **Raumgruppe** beschrieben. Raumgruppen immer mit Gitterparametern/expLICITer Struktur verknüpft!!

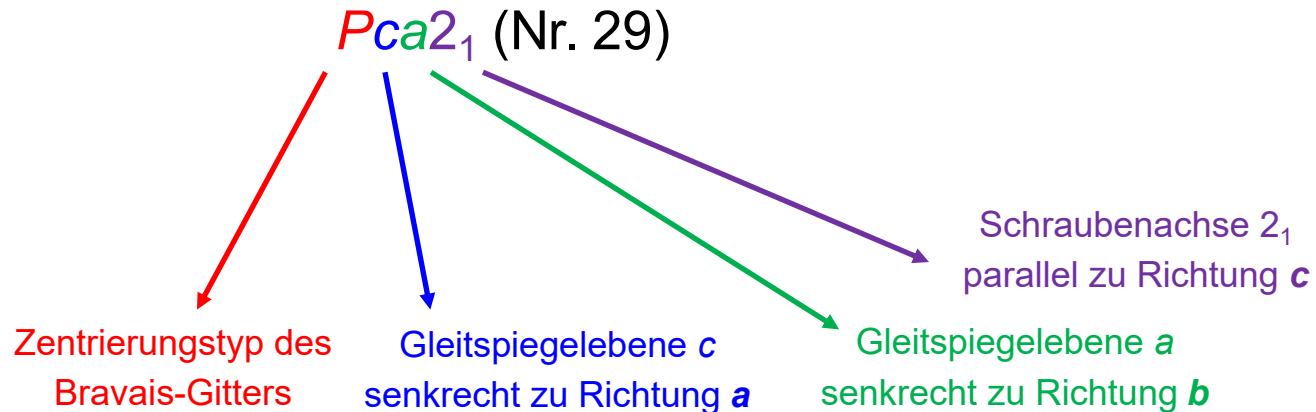
Wiederholung: Was haben wir bis jetzt über Strukturbeschreibung gelernt?



Wiederholung: Ein Beispiel für die Raumgruppensymbolik

Betrachten wir folgenden Raumgruppentyp:

Grundsatz in der Setzung: Alle Buchstaben kursiv, alle Zahlen aufrecht!



In allen Raumgruppensymbolen folgt **erst** die **Zentrierung** und **dann drei** charakteristische **Symmetrieelemente** im Bezug zu drei festgelegten kristallographischen Achsenrichtungen!

Wiederholung: Ein Beispiel für die Raumgruppensymbolik

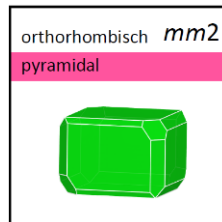
Betrachten wir folgenden Raumgruppentyp:

$Pca2_1$ (Nr. 29)

Die entsprechende Kristallklasse erhält man, wenn man sich Translationen wegdenkt:

Gleitspiegelungen werden zu **Spiegelungen**, Schraubenachsen zu **Drehachsen**!

Also: $mm2$ oder C_{2v}



Zwei Spiegelebenen und eine zweizählige Drehachse sind nur mit einem **orthorhombischen Kristallsystem** vereinbar!

Zusatz: Zusammenhang zwischen Kristallklasse und Kristallsystem

Kristallsystem (Kürzel)	Kristallklassen	Metrik der Elementarzelle
triklin (<i>a</i>)	1; $\bar{1}$	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
monoklin (<i>m</i>)	2; <i>m</i> ; 2/ <i>m</i>	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ (oder $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$)
orthorhombisch (<i>o</i>)	2 2 2; <i>m m m</i> ; 2 2 2	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonal (<i>t</i>)	4; $\bar{4}$; 4/ <i>m</i> ; 4 2 2; 4 <i>m m</i> ; $\bar{4}$ 2 <i>m</i> ; 4/ <i>m m m</i>	$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
trigonal (<i>h</i>)	3; $\bar{3}$; 3 2; 3 <i>m</i> ; $\bar{3}$ <i>m</i>	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
hexagonal (<i>h</i>)	6; $\bar{6}$; 6/ <i>m</i> ; 6 2 2; 6 <i>m m</i> ; $\bar{6}$ 2 <i>m</i> ; 6/ <i>m m m</i>	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
kubisch (<i>c</i>)	2 3; $m \bar{3}$; 4 3 2; $\bar{4}$ 3 <i>m</i> ; $m \bar{3}$ <i>m</i>	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Wiederholung: Festlegung der drei Blickrichtungen für die sieben Metriken

Tab. 5.2 Übersicht über die festgelegten Blickrichtungen für die sieben Kristallsysteme

	Blickrichtungen		
triklin	keine		
monoklin	b (c)*		
orthorhombisch	a	b	c
tetragonal	c	a	$[110]**$
trigonal	c	a	$[210]**$
hexagonal	c	a	$[210]**$
kubisch	c	$[111]**$	$[110]**$

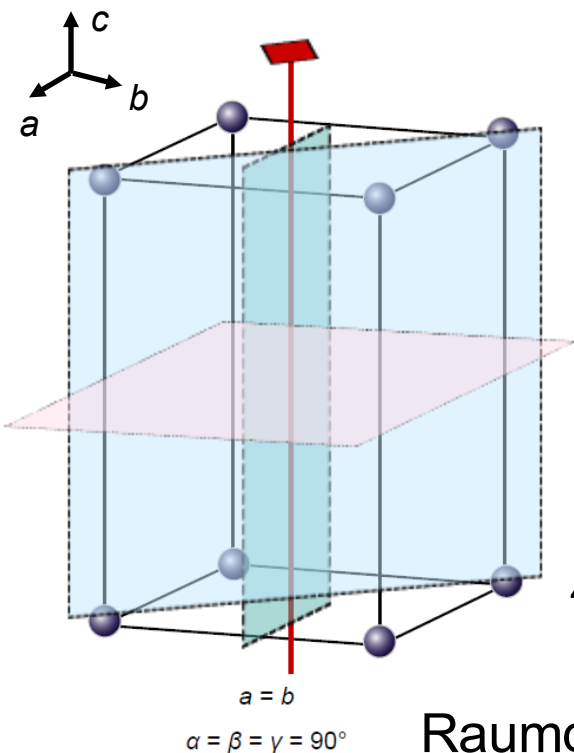
*Im monoklinen Kristallsystem können Symmetrieelemente nur in einer Richtung auftauchen; diese wurde per Konvention als b -Richtung festgelegt; in einigen Ländern, insbesondere in Osteuropa, wird abweichend die c -Richtung verwendet.

**Die Richtungen sind hier in Form von Gittervektoren angegeben, die vom Ursprung ausgehen und einen Gitterpunkt treffen, der durch das entsprechende Koordinatentripel $[xyz]$ angegeben ist. Siehe auch ► Abschn. 3.2.2.

$[uvw]$ ist kurz für eine Richtung

$$\mathbf{g} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

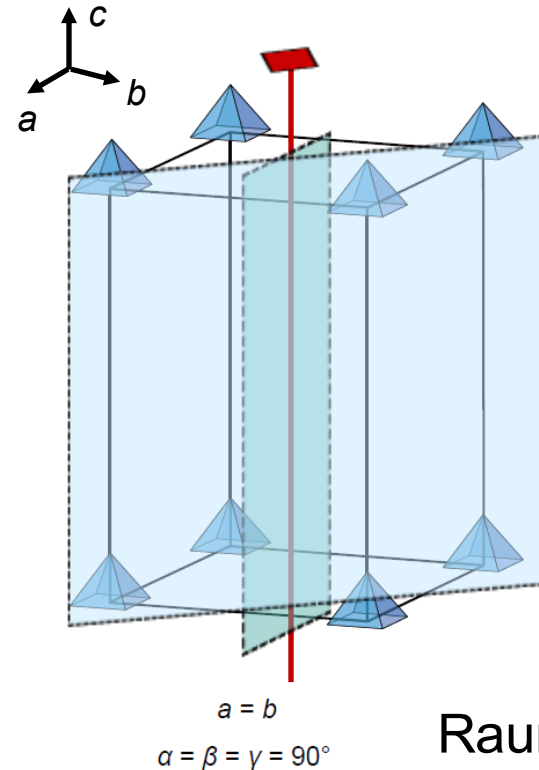
Nicht auswendiglernen, ist einfach eine Konvention je nach Kristallsystem. Es soll Sie nur nicht wundern, dass die Festlegung nicht immer a , b , c ist...



Welcher Raumgruppe gehört ein Kristall an, dessen Elementarzelle so aussieht und die angegebene Metrik aufweist?

1. Nur Atome an den Eckpunkten (je $1/8$ Gewichtung): $8 \times 1/8 = 1 \rightarrow$ **primitive Zelle (P-Typ)**
2. Entlang c -Richtung liegt bei den Gitterparametern eine **vierzählige Achse** vor \rightarrow sollte erwartungsgemäß **tetragonales Kristallsystem** sein
3. Entlang a -Richtung und der $[110]$ -Blickrichtung sind auch Spiegelebenen m zu finden (*wichtig: erstmal schauen, welche Ebenen die Richtung enthalten*)
4. Hieraus ergibt sich nun noch eine Spiegelebene senkrecht zur vierzähligen Hauptdrehachse \rightarrow **$4/m$** (sprich: „vier über m“)

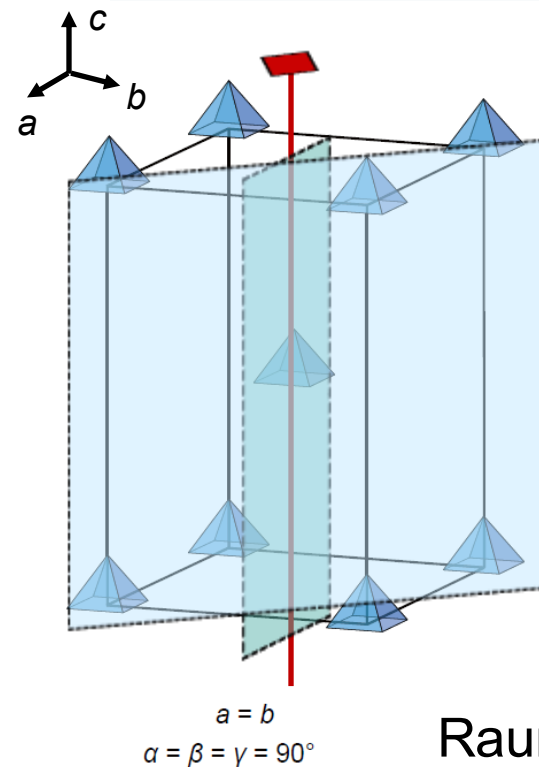
Raumgruppe muss **$P4/mmm$** (Nr. 123) sein!



Welcher Raumgruppe gehört ein Kristall an, dessen Elementarzelle so aussieht, die angegebene Metrik und diese Eckenmotive aufweist?

1. Nur Baueinheiten an den Eckpunkten (je $1/8$ Gewichtung): $8 \times 1/8 = 1 \rightarrow$ **primitive Zelle (P-Typ)**
2. Entlang c -Richtung liegt bei den Gitterparametern eine **vierzählige Achse** vor \rightarrow sollte erwartungsgemäß **tetragonales Kristallsystem** sein
3. Entlang a -Richtung und der $[110]$ -Blickrichtung sind auch Spiegelebenen m zu finden (*wichtig: erstmal schauen, welche Ebenen die Richtung enthalten*)
4. Aber: Spiegelebene senkrecht zur vierzähligen Achse fällt nun weg (die unteren Pyramiden müssten dafür umgedreht sein...)

Raumgruppe muss ***P4mm*** (Nr. 99) sein!



Welcher Raumgruppe gehört ein Kristall an, dessen Elementarzelle so aussieht, die angegebene Metrik und diese Motive (Ecken und Mitte) aufweist?

1. Baueinheiten an den Eckpunkten (je $1/8$ Gewichtung): $8 \times 1/8 = 1$ und in der Mitte: $1 \times 1 \rightarrow$ **innenzentrierte Zelle (I-Typ)** mit $Z = 2$ Atomen pro Zelle
2. Entlang c -Richtung liegt bei den Gitterparametern eine **vierzählige Achse** vor \rightarrow sollte erwartungsgemäß **tetragonales Kristallsystem** sein
3. Entlang a -Richtung und der $[110]$ -Blickrichtung sind auch Spiegelebenen m zu finden (*wichtig: erstmal schauen, welche Ebenen die Richtung enthalten*)
4. Aber: Spiegelebene senkrecht zur vierzähligen Achse fällt hier auch weg (Pyramide in der Mitte zerstört schon diese Symmetrie!)

Raumgruppe muss ***I4mm*** (Nr. 107) sein!

3b. Raumgruppentypen und Wyckoff-Lagen

Lehrbuchempfehlungen:



Springer Verlag, Kapitel 6



Vieweg & Teubner Verlag,
Kapitel 3

Alle auch als e-Book
aus der ULB erhältlich
(evtl. ältere Auflage)

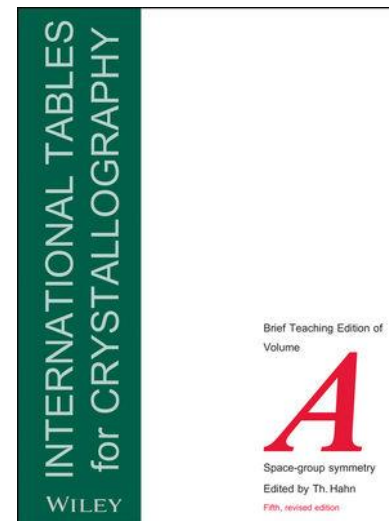


Springer Verlag, Kapitel 6

Ein erster Blick in die International Tables A

Sie können online auf die International Tables A für jeden der 230 Raumgruppentypen über folgenden QR-Code zugreifen:

Link auch auf ILIAS zugänglich!



Beispiel für den Raumgruppentyp $Pmm2$ (Nr. 25)

Betrachten wir mal den ersten Auszug der International Tables für den Raumgruppentyp $Pmm2$ (Nr. 25):

$Pmm2$
No. 25

Hier steht das Raumgruppensymbol (in Langschreibweise) und seine Nummer

C_{2v}^1

$Pmm2$

Hier steht die Kurzschreibweise des Raumgruppentyps (hier zufällig mal gleich, ist allgemein aber nicht so!)

$mm2$

Hier stehen die Schönflies- und Hermann-Mauguin-Symbole für die zugehörige Kristall**klasse**

Orthorhombic

Patterson symmetry $Pmmm$

Hier steht das zugehörige Kristall**system**

Das ist die sogenannte Laue/Patterson-Symmetrie – wird bei Röntgenstrukturanalyse wichtig

Beispiele für Lang- bzw. Kurzschreibweisen

Kurzsymbol:

$Pnma$

vollständiges Symbol:

$P 2_1/n 2_1/m 2_1/a$

Bedeutung:

primitives
Gitter

zweizählige Schraubenachse
in Richtung **a**, Gleitspiegel-
ebene senkrecht zu **a** mit
diagonaler Gleitrichtung

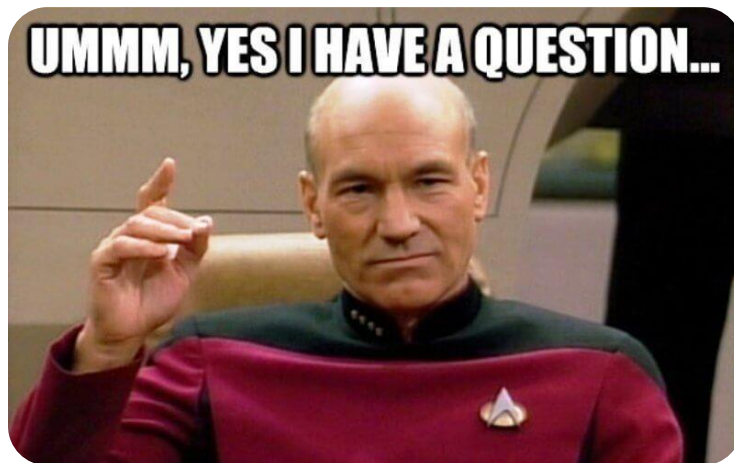
2_1 -Achse

in Richtung **c**, Gleitspiegelebene
senkrecht zu **c** mit Gleitrichtung **a**

2_1 -Achse in Richtung **b**,
Spiegelebene senkrecht zu **b**

Beispiele für Lang- bzw. Kurzschreibweisen

Kurzsymbol:	$I4/mcm$
vollständiges Symbol:	$I\ 4/m\ 2/c\ 2/m$
Bedeutung:	<div><div>innen- zentriertes Gitter</div><div><div><div>vierzählige Drehachse in Richtung c, Spiegelebene senkrecht dazu</div><div>zweizählige Drehachse in Richtung d = a + b, Spiegelebene senkrecht dazu</div></div><div>zweizählige Drehachse in Richtung a, Gleitspiegel- ebene mit Gleitrichtung c senkrecht zu a</div></div></div>



Fragen?

In jeder Elementarzelle mit vorgegebener Raumgruppensymmetrie existiert ein gegebener Satz möglicher **Lagen** mit bestimmter Punktsymmetrie!

Diese werden in den International Tables für jede Raumgruppe tabelliert und nach Wyckoff mit einer Zahl und kleinen Buchstaben gekennzeichnet, z.B. 4a



Ralph W. G. Wyckoff
(1897 – 1994)

System der Wyckoff-Bezeichnungen:

- Zahl gibt die **Multiplizität** an (wie oft die Lage durch Symmetrioperationen pro Zelle generiert werden kann)
- Buchstaben richten sich nach **Symmetrie** der Lage: Ist die Lage besonders symmetrisch, wird sie *a* genannt, ist sie eher unsymmetrisch (minimale Symmetrie 1), dann ein eher späterer Buchstabe (z.B. *h* oder *i*)

Beispiel: $Pmm2$ (Nr. 25)

Ordnung h der Gruppe $mm2 = 4$

Allgemeine Lage: Die Lagesymmetrie ist 1 (E)!

Die Multiplizität einer allgemeinen Lage ist die Ordnung der übergeordneten Kristallklasse (hier: $mm2$ (C_{2v}), also 4).

Hinweis: Die Ordnung ist die Zahl aller Symmetrieelemente in einer Punktgruppe.

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

4	i	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) x, \bar{y}, z	(4) \bar{x}, y, z
2	h	$m \dots$	$\frac{1}{2}, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$		
2	g	$m \dots$	$0, y, z$	$0, \bar{y}, z$		
2	f	$\dots m \dots$	$x, \frac{1}{2}, z$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$		
2	e	$\dots m \dots$	$x, 0, z$	$\bar{x}, 0, z$		
1	d	$m m 2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$			
1	c	$m m 2$	$\frac{1}{2}, 0, z$			
1	b	$m m 2$	$0, \frac{1}{2}, z$			
1	a	$m m 2$	$0, 0, z$			

Wyckoff-Lagen, allgemeine und spezielle Lagen

Beispiel: $Pmm2$ (Nr. 25)

Ordnung h der Gruppe $mm2 = 4$

Spezielle Lagen: Die Lagesymmetrie ist höher als 1 (E)!

1) Die Lagesymmetrien können immer nur **Untergruppen** (hier 2, m , oder 1) oder **maximal** die **Kristallklasse** (hier $mm2$) sein!

2) Die Multiplizität dieser Lagen ist die Zahl der symmetrieäquivalenten Punkte. Diese Punkte bilden das **Orbit** der Punktlage.

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

4	i	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) x, \bar{y}, z	(4) \bar{x}, y, z
---	-----	---	---------------	---------------------------	---------------------	---------------------

2	h	$m..$	$\frac{1}{2}, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$
2	g	$m..$	$0, y, z$	$0, \bar{y}, z$
2	f	$.m.$	$x, \frac{1}{2}, z$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$
2	e	$.m.$	$x, 0, z$	$\bar{x}, 0, z$
1	d	$mm2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$	
1	c	$mm2$	$\frac{1}{2}, 0, z$	
1	b	$mm2$	$0, \frac{1}{2}, z$	
1	a	$mm2$	$0, 0, z$	

Wyckoff-Lagen, allgemeine und spezielle Lagen

Beispiel: $Pmm2$ (Nr. 25)

Ordnung h der Gruppe $mm2 = 4$

Spezielle Lagen: Die Lagesymmetrie ist höher als 1 (E)!

3) Im Allgemeinen sind die Lagen nach aufsteigender Lagesymmetrie geordnet, d.h. a steht ganz unten

Es gilt stets:

Multiplizität \times Ordnung der Lagesymmetrie
= Ordnung der Kristallklasse

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

4 i 1 (1) x, y, z (2) \bar{x}, \bar{y}, z (3) x, \bar{y}, z (4) \bar{x}, y, z

2	h	$m..$	$\frac{1}{2}, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$
2	g	$m..$	$0, y, z$	$0, \bar{y}, z$
2	f	$.m.$	$x, \frac{1}{2}, z$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$
2	e	$.m.$	$x, 0, z$	$\bar{x}, 0, z$
1	d	$mm2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$	
1	c	$mm2$	$\frac{1}{2}, 0, z$	
1	b	$mm2$	$0, \frac{1}{2}, z$	
1	a	$mm2$	$0, 0, z$	

z. B. $2 \times 2 = 4$

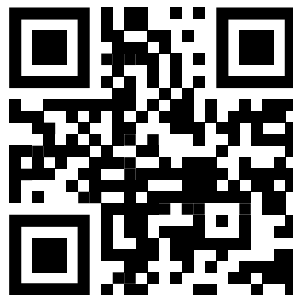
z. B. $1 \times 4 = 4$

Der „Bilbao Crystallographic Server“

Für jeden der 230 Raumgruppentypen können Sie sich die Wyckoff-Lagen ganz einfach anzeigen lassen:



bilbao crystallographic server



Dann auf Reiter „Space-group symmetry“ und WYCKPOS klicken.

4. Gruppe-Untergruppe-Beziehungen

Lehrbuchempfehlungen:



Vieweg & Teubner Verlag,
Kapitel 18



Springer Verlag, Kapitel 12

Warum Gruppe-Untergruppe-Beziehungen?

Tatsächlich sind viele Strukturen miteinander verwandt und lassen sich in Beziehung zueinander setzen, auch wenn es vielleicht erst nicht den Anschein hat...

Die Gruppentheorie liefert dazu das mathematische Gerüst, um solche Verwandtschaften **exakt** zu beschreiben!

→ **Symmetrieabbau und Gruppe-Untergruppe-Beziehungen**

Wichtig für z.B.:

- **Strukturfamilien und Überstrukturen bestimmter Typen**
- Phasenumwandlungen
- Verzwillingung/-drillingung usw. von Kristallen



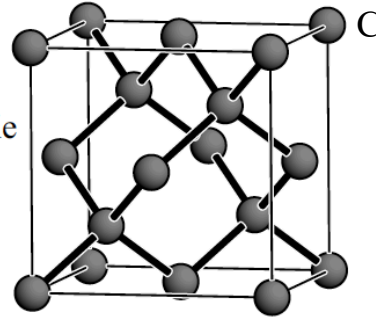
Hartmut Bärnighausen
(*1933)



Hans Wondratschek
(1925 – 2014)

Ein einführendes Beispiel – Diamant vs. Zinkblende

$Fd\bar{3}m$	Element	
$F 4_1/d\bar{3} 2/m$		
Diamant		
	C: 8a	← Wyckoff-Symbol
	$\bar{4}3m$	← Punktlagensymmetrie
	0	← x
	0	← y
	0	← z



Zwischenfrage 1: Ist die Lage 8a allgemein oder speziell?

Zwischenfrage 2: Wo ist die Gleitspiegelebene d ?

Zwischenfrage 3: Wie viele Formeleinheiten Z enthält die Zelle?

Ein einführendes Beispiel – Diamant vs. Zinkblende

Aristotyp

$Fd\bar{3}m$
 $F 4_1/d\bar{3} 2/m$

Diamant

translationen-
gleiche Unter-
gruppe vom
Index 2

t_2

$F\bar{4}3m$

Hettotyp

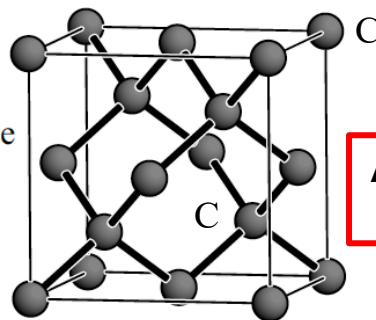
Zinkblende

Element

C: 8a	← Wyckoff-Symbol
$\bar{4}3m$	← Punktlagensymmetrie
0	← x
0	← y
0	← z

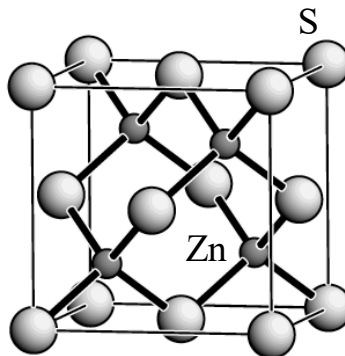
Aufspaltung der Lagen

S: 4a	Zn: 4c
$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$
0	$\frac{1}{4}$
0	$\frac{1}{4}$
0	$\frac{1}{4}$



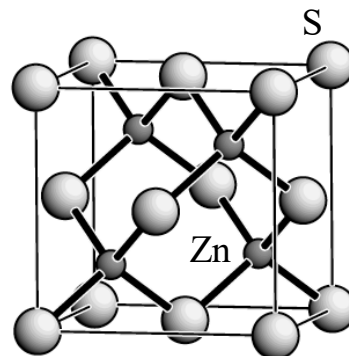
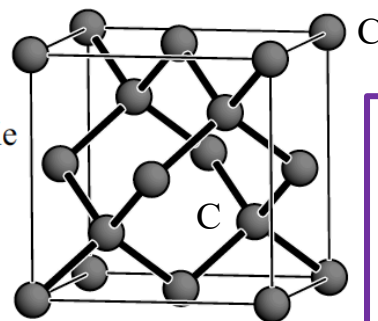
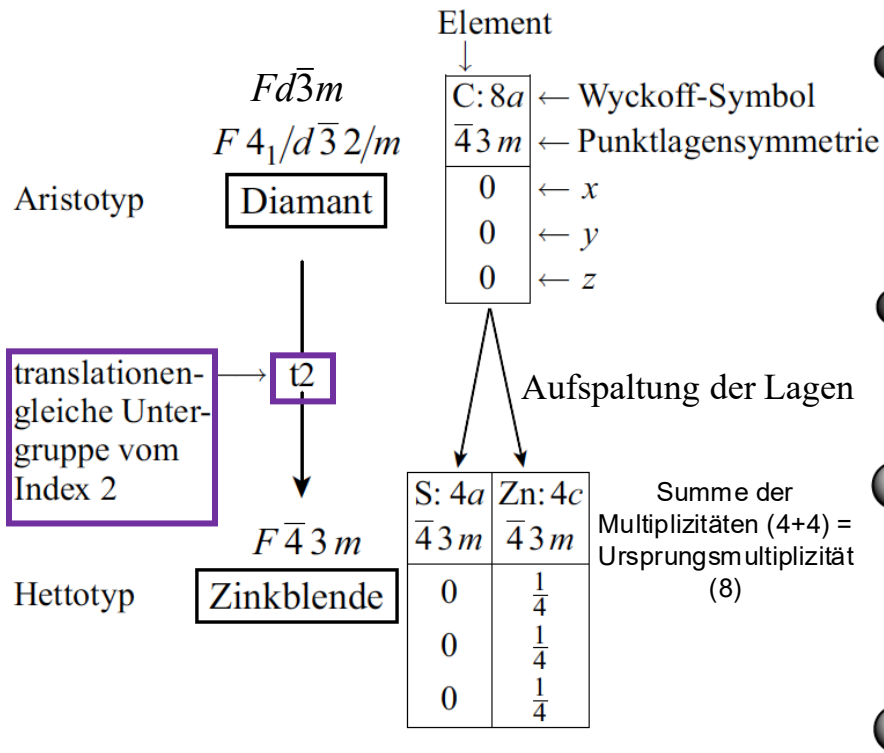
Aristotyp: Stamm-Strukturtyp, aus dem sich andere Typen ableiten lassen

hier: Variation im Atommuster



Hettotyp: Aus Aristotyp abgeleiteter Strukturtyp

Ein einführendes Beispiel – Diamant vs. Zinkblende



Translationengleicher Übergang:

Das Bravais-Gitter (hier kubisch **Flächenzentriert**) wird erhalten, lediglich Symmetrieelemente werden reduziert (Elementarzelle bleibt erhalten)

Index 2: Es fällt die **Hälfte aller Symmetrieelemente** weg (*hier:* Gleitspiegelungen oder Schraubungen)

Der sog. **Satz von Hermann** gewährleistet, dass Symmetrie nur **translationengleich** oder **klassengleich** abgebaut wird!

Translationengleicher Übergang t: Bravais-Gitter und Elementarzelle bleiben prinzipiell erstmal **erhalten**, lediglich die Ordnung der Kristallklasse wird abgebaut, Klasse ändert sich!

Klassengleicher Übergang k: Kristallklasse bleibt **erhalten**, aber Translationsgitter wird abgebaut

(Spezialfall) Isomorpher Übergang i: Spezialfall eines klassengleichen Übergangs, bei dem jedoch auch das Translationsgitter prinzipiell erhalten (jedoch durchaus vergrößert) bleibt: Raumgruppentyp des Aristotyps und Hettotyps sind hierbei gleich!!

Ein klassengleicher Übergang: NaCl vs. NbO

$Fm\bar{3}m$
 $F4/m\bar{3}2/m$

NaCl

k4

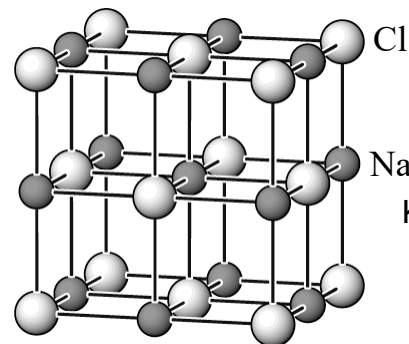
$P4/m\bar{3}2/m$

NbO

$Pm\bar{3}m$

Na: 4a	Cl: 4b
$m\bar{3}m$	$m\bar{3}m$
0	0
0	0
0	$\frac{1}{2}$

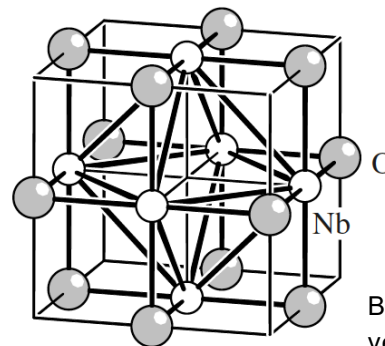
$\square: 1a$	Nb: 3c	$\square: 1b$	O: 3d
$m\bar{3}m$	4/mmm	$m\bar{3}m$	4/mmm
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$



Kubisch flächenzentriertes Gitter:

Z = 4

x 1/4



Kubisch primitives Gitter:

Z = 1

Beachten Sie: Ursprungsverschiebung und vergrößerte Zelldarstellung!!

Ein isomorpher Übergang: TiO_2 vs. CoSb_2O_6

$P4_2/m 2_1/n 2/m$

TiO_2 (Rutil)

Isomorph, da beide Verbindungen im gleichen Raumgruppentyp kristallisieren
Index 3, da sich die c-Achse verdreifacht

$i3$
 $a, b, 3c$

$P4_2/m 2_1/n 2/m$

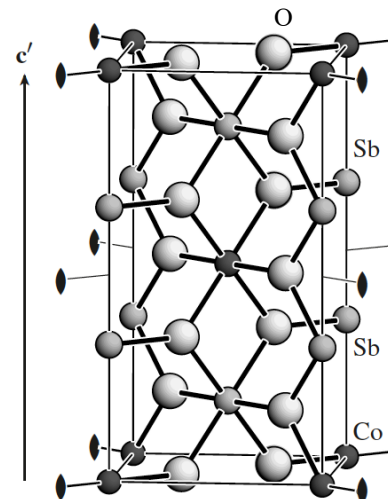
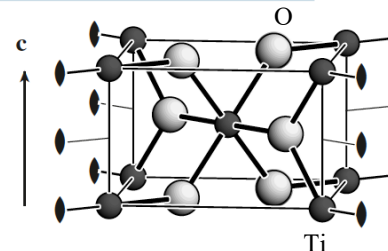
CoSb_2O_6 (Trirutil)

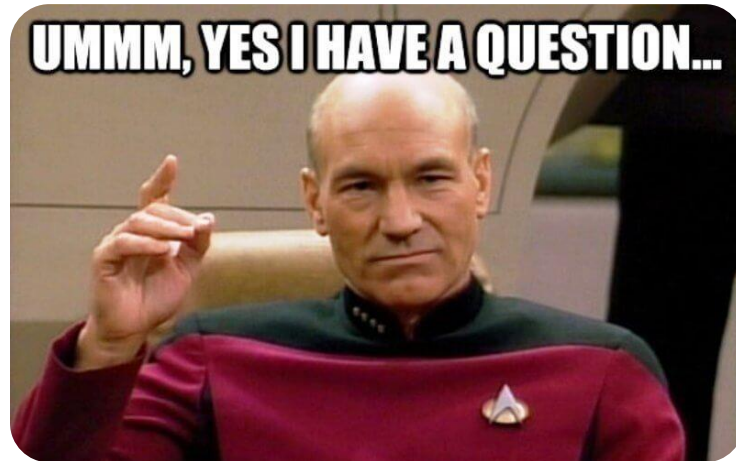
Ti: 2a	O: 4f
mmm	$m2m$
0	0,305
0	x
0	0

$x, y, \frac{1}{3}z; \pm(0, 0, \frac{1}{3})$

Co: 2a	Sb: 4e	O: 4f	O: 8j
mmm	$m2m$	$m2m$	$..m$
0	0	0,308	0,303
0	0	x	x
0	0,336	0	0,326

Multiplizitäten: $3 \times 2 = 2 + 4$ Multiplizitäten: $3 \times 4 = 4 + 8$





Fragen?