

A large, faint silhouette of a person's head and shoulders, facing right, with a flame-like shape above it, is positioned on the left side of the slide.

# Festkörper- und Materialchemie

20.11.2025

Jun.-Prof. Dr. Markus Suta

*Anorganische Photoaktive Materialien*  
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf



[www.photoaktivematerialien.hhu.de](http://www.photoaktivematerialien.hhu.de)



[markus.suta@hhu.de](mailto:markus.suta@hhu.de)



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

# Heutiger Ablaufplan

---

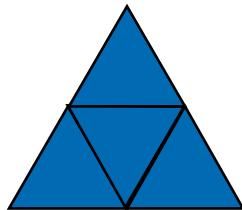
Lernziele für heute:

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

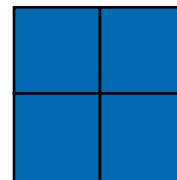
Bei Betrachtung der höchsten Punktsymmetrien der Kristallsysteme fällt auf:

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

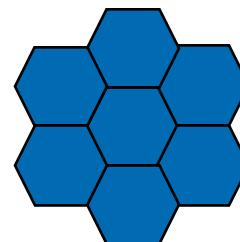
Das röhrt daher, dass nur in diesen Symmetrien eine lückenlose Packung von Mustern funktioniert.



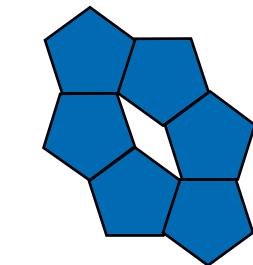
3-zählige Symmetrie



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

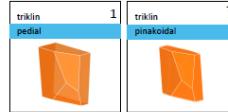
In jedem Kristallsystem gibt es Restriktionen an die Metrik:

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

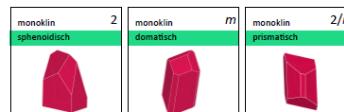
\*d.h. die entsprechenden Parameter können *beliebige* Werte annehmen.

# Wiederholung: Übersicht über die 32 Kristallklassen

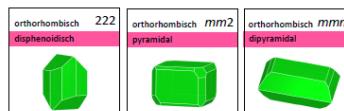
## Kristallklassen



triklin



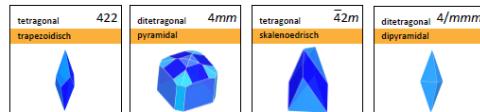
monoklin



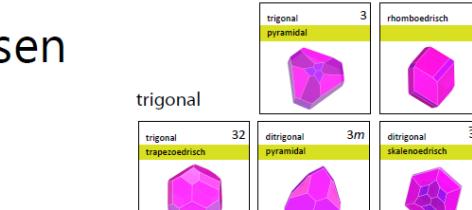
orthorhombisch



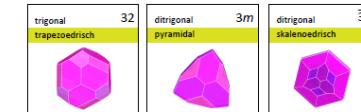
tetragonal



tetragonal



trigonal



hexagonal



Link zur pdf ebenfalls auf ILIAS!



kubisch



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

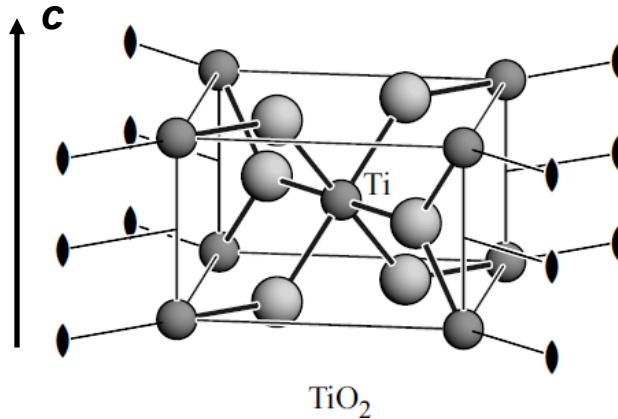
**Raumgruppentyp:** Enthält alle Punkt- und Translationssymmetrieelemente, mit denen man Strukturen im 3D aufbauen könnte.

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:

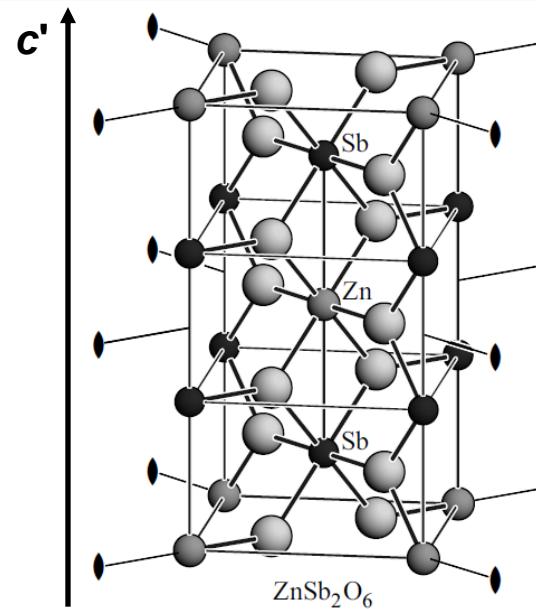
**230 Raumgruppentypen**

**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



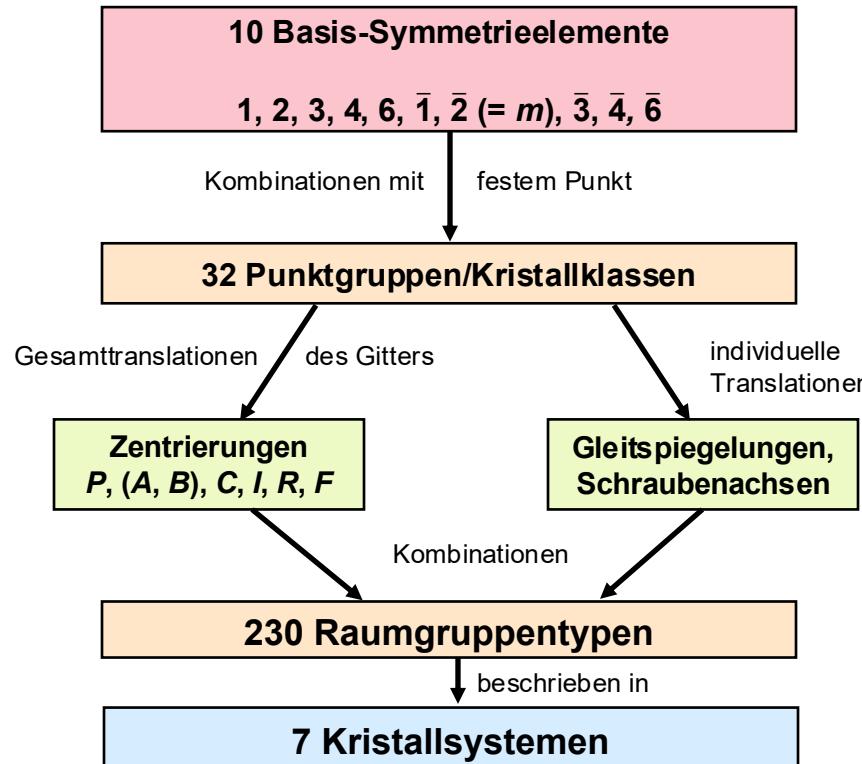
Rutil:  $P4_2/mnm$  (Nr. 136)



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

Beide Strukturen gehören demselben allgemeinen Raumgruppentyp  $P4_2/mnm$  (Nr. 136) an.

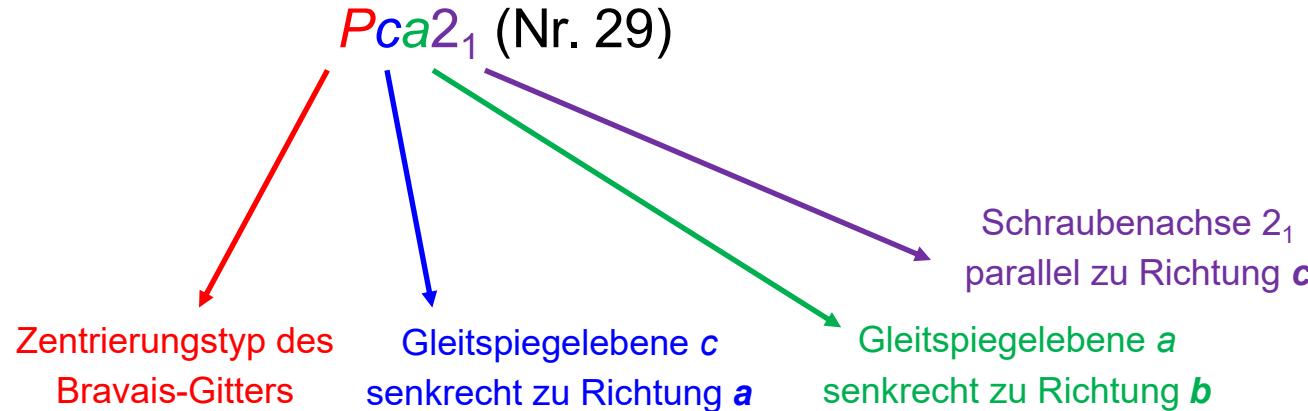
Die Symmetrie jeder der individuellen Strukturen **mit ihren Gitterparametern** wird jedoch durch eine **Raumgruppe** beschrieben. Raumgruppen immer mit Gitterparametern/expliziter Struktur verknüpft!!



# 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

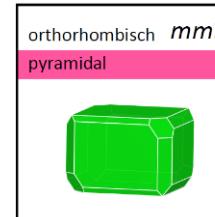
Betrachten wir folgenden Raumgruppentyp:

*Pca2<sub>1</sub>* (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> )	$2; m; 2/m$	$a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ (oder $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$ )
orthorhombisch ( <i>o</i> )	$2\bar{2}2; mm2; mmm$	$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonal ( <i>t</i> )	$4; \bar{4}; 4/m; 422; 4mm;$ $\bar{4}2m; 4/mmm$	$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
trigonal ( <i>h</i> )	$3; \bar{3}; 32; 3m; \bar{3}m$	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
hexagonal ( <i>h</i> )	$6; \bar{6}; 6/m; 622; 6mm;$ $\bar{6}2m; 6/mmm$	$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
kubisch ( <i>c</i> )	$23; m\bar{3}; 432; \bar{4}3m; m\bar{3}m$	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

# Wiederholung: Festlegung der drei Blickrichtungen für die sieben Metriken

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

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

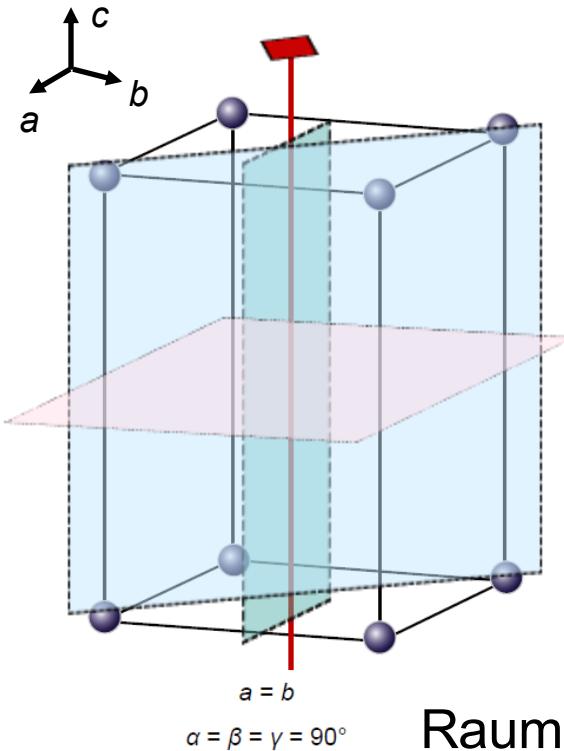
\*Im monoklinen Kristallsystem können Symmetrieelemente nur in einer Richtung auftauchen; diese wurde per Konvention als *b*-Richtung festgelegt; in einigen Ländern, insbesondere in Osteuropa, wird abweichend die *c*-Richtung verwendet.

\*\*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

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

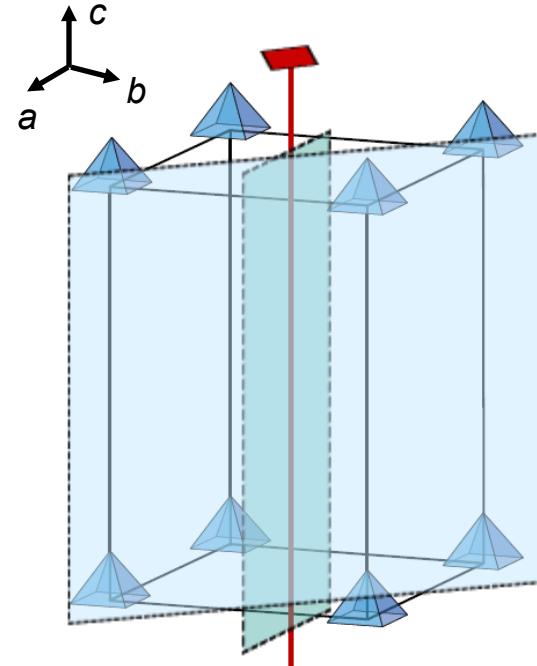
Nicht auswendiglernen, ist einfach eine Konvention je nach Kristallsystem. Es soll Sie nur nicht wundern, dass die Festlegung nicht immer *a*, *b*, *c* ist...



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  
→ 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 → **4/m** (sprich: „vier über m“)

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



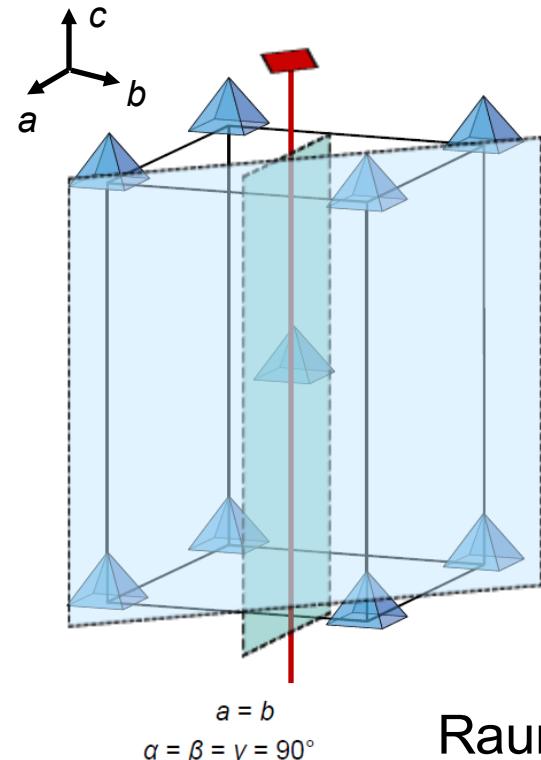
$$\begin{aligned}a &= b \\ \alpha &= \beta = \gamma = 90^\circ\end{aligned}$$

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  
→ 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!

# Und eine Stufe weiter!



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  
→ 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)



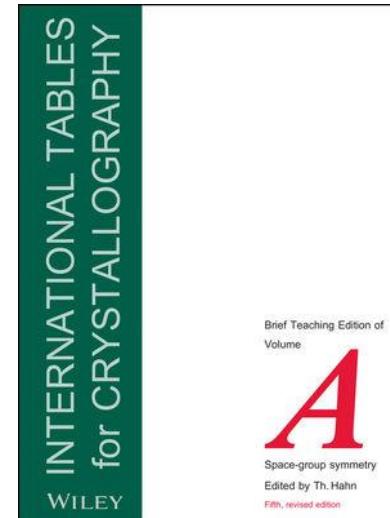
Springer Verlag, Kapitel 6

# 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

$C_{2v}^1$   
 $Pmm\ 2$

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

$m\ m2$

Hier stehen die Schönflies- und Hermann-Mauguin-Symbole für die zugehörige Kristallklasse

Orthorhombic

Patterson symmetry  $Pmmm$

Hier steht das zugehörige Kristallsystem

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:

$I\bar{4}/mcm$

vollständiges Symbol:

$I\bar{4}/m \quad 2/c \quad 2/m$

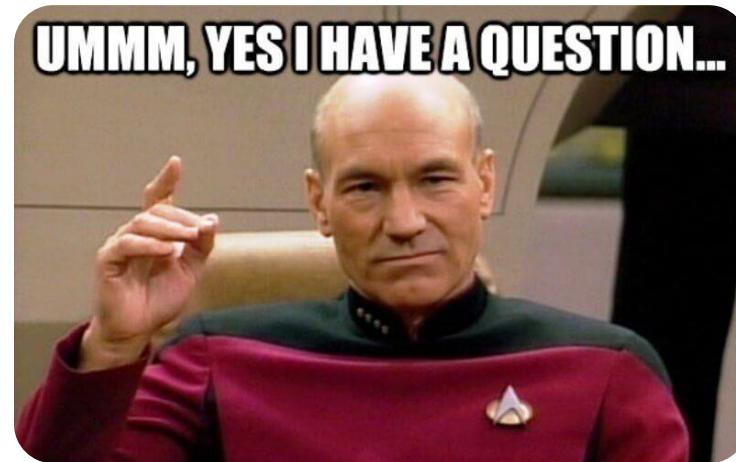
Bedeutung:

innen-  
zentriertes  
Gitter

vierzählige Drehachse in  
Richtung **c**, Spiegelebene  
senkrecht dazu

zweizählige  
Drehachse  
in Richtung  
**d** = **a** + **b**, Spiegelebene senkrecht dazu

zweizählige Drehachse in Richtung **a**, Gleitspiegel-  
ebene mit Gleitrichtung **c** senkrecht zu **a**



Fragen?

# Punktlagen, allgemeine und spezielle Lagen

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

System der Wyckoff-Bezeichnungen:

- Zahl gibt die **Multiplizität** an (wie oft die Lage durch Symmetrieeoperationen 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*)



Ralph W. G. Wyckoff  
(1897 – 1994)

## 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>i</i>	1	(1) $x, y, z$	(2) $\bar{x}, \bar{y}, z$	(3) $x, \bar{y}, z$	(4) $\bar{x}, y, z$
---	----------	---	---------------	---------------------------	---------------------	---------------------

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

# 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 symmetrieequivalenten 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>i</i>	1	(1) $x, y, z$	(2) $\bar{x}, \bar{y}, z$	(3) $x, \bar{y}, z$	(4) $\bar{x}, y, z$
---	----------	---	---------------	---------------------------	---------------------	---------------------

2	<i>h</i>	$m..$	$\frac{1}{2}, y, z$	$\frac{1}{2}, \bar{y}, z$
---	----------	-------	---------------------	---------------------------

2	<i>g</i>	$m..$	$0, y, z$	$0, \bar{y}, z$
---	----------	-------	-----------	-----------------

2	<i>f</i>	$.m.$	$x, \frac{1}{2}, z$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$
---	----------	-------	---------------------	---------------------------

2	<i>e</i>	$.m.$	$x, 0, z$	$\bar{x}, 0, z$
---	----------	-------	-----------	-----------------

1	<i>d</i>	$mm2$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$
---	----------	-------	-------------------------------

1	<i>c</i>	$mm2$	$\frac{1}{2}, 0, z$
---	----------	-------	---------------------

1	<i>b</i>	$mm2$	$0, \frac{1}{2}, z$
---	----------	-------	---------------------

1	<i>a</i>	$mm2$	$0, 0, z$
---	----------	-------	-----------

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

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

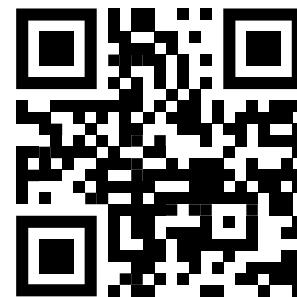
# Der „Bilbao Crystallographic Server“

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



FCT/ZTF

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!

## → Symmetriebau und Gruppe-Untergruppe-Beziehungen

Wichtig für z.B.:

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



Hartmut Bärnighausen  
(\*1933)

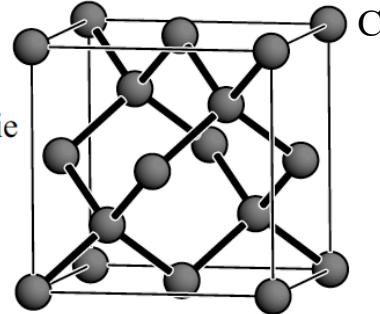


Hans Wondratschek  
(1925 – 2014)

# Ein einführendes Beispiel – Diamant vs. Zinkblende

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

Element	↓
C: 8a	← Wyckoff-Symbol
$\bar{4}\bar{3}\ m$	← 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

$t_2$

$F\bar{4}3m$

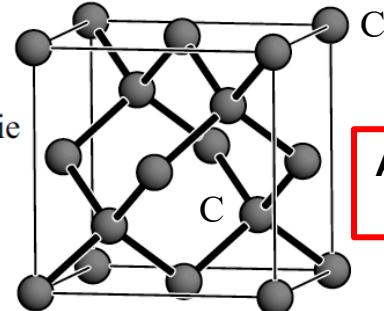
Hettotyp

Zinkblende

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

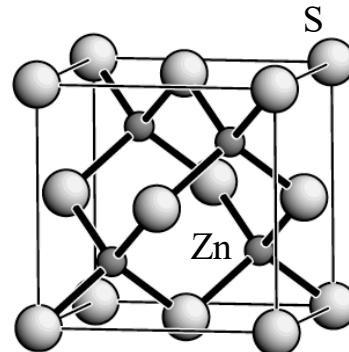
S: 4a	Zn: 4c
$\bar{4}3m$	$\bar{4}3m$
0	$\frac{1}{4}$
0	$\frac{1}{4}$
0	$\frac{1}{4}$

Aufspaltung der Lagen



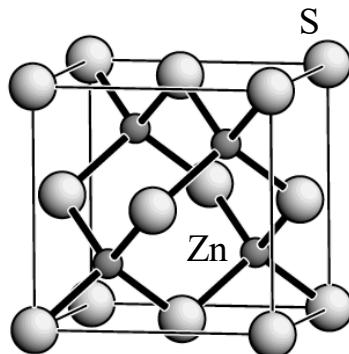
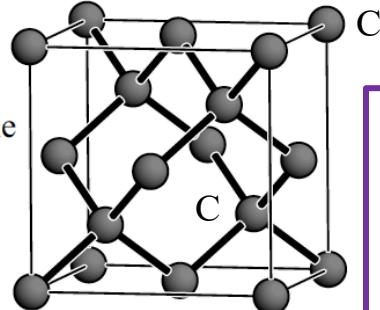
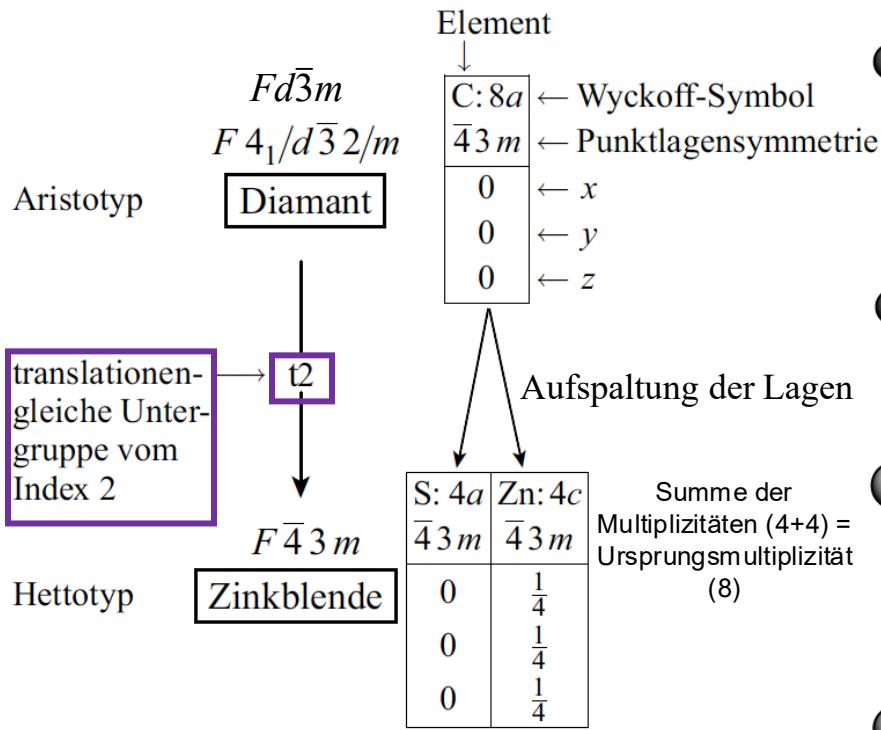
**Aristotyp:** Stamm-Strukturtyp, aus dem sich andere Typen ableiten lassen

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)

# Translationengleiche und klassengleiche Übergänge

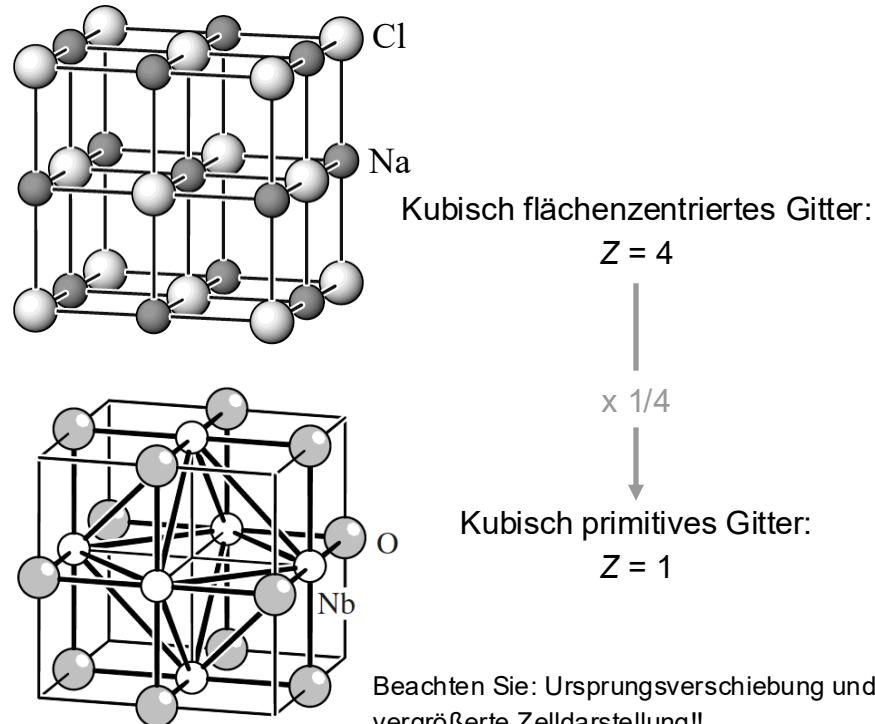
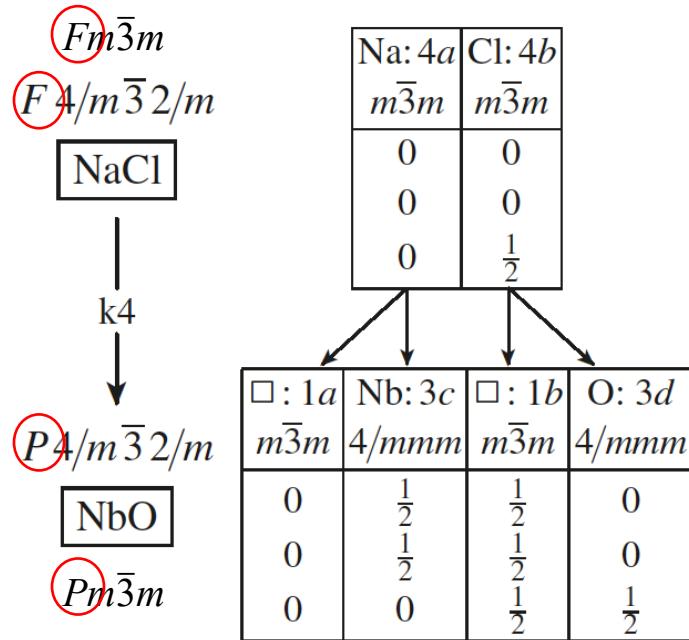
Der sog. **Satz von Hermann** gewährleistet, dass Symmetrie nur translationengleich oder klassengleich abgebaut wird!

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

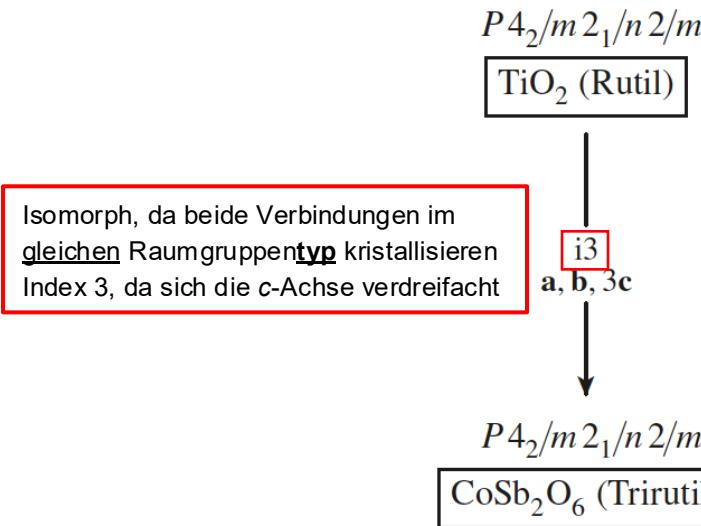
**Klassengleicher Übergang k:** Kristallklasse bleibt **erhalten**, aber Translationsgitter wird abgebaut

**(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



# Ein isomorpher Übergang: $\text{TiO}_2$ vs. $\text{CoSb}_2\text{O}_6$

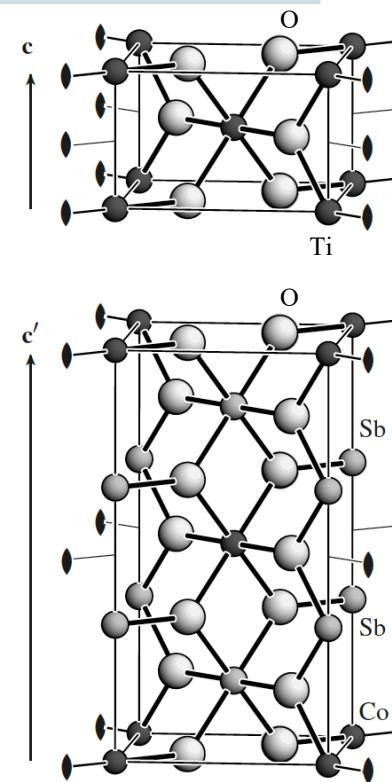


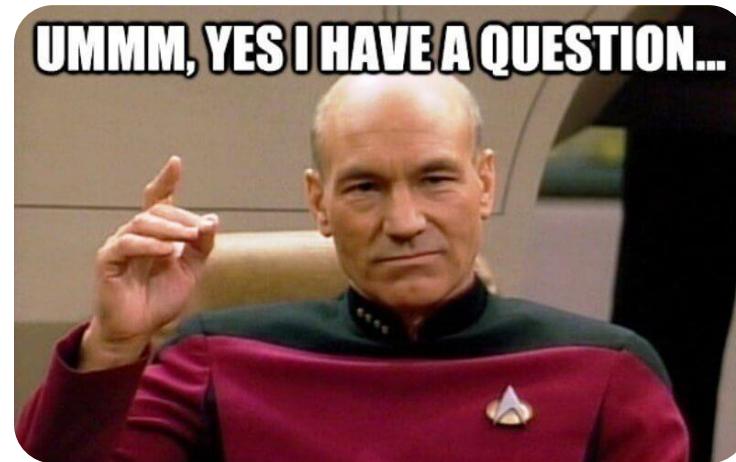
Ti: 2a	O: 4f
mmm	$m2m$
0	0,305
0	$x$
0	0

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





Fragen?