

Festkörper- und Materialchemie

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

13.11.2025



www.photoaktivematerialien.hhu.de



markus.suta@hhu.de



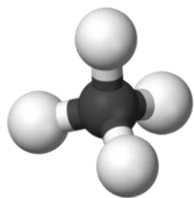
[@markussuta.bsky.social](https://www.bsky.social/@markussuta)

Lernziele für heute:

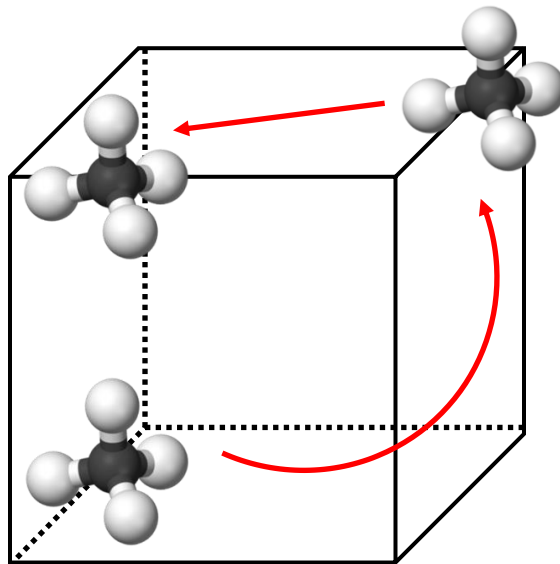
- Raumgruppen(-typen), International Tables for Crystallography A
- Beziehung zwischen Symmetrie und Metrik
- Nächste Woche:
 - Wyckoff-Lagen & Gruppe-Untergruppe-Beziehungen

Wiederholung: Von Punktgruppen zu Raumgruppen

Bisher betrachteten wir nur **Punktsymmetrien**: Ein Punkt bleibt bei den Symmetrieeoperationen stets fix!



CH₄: T_d – **Punktsymmetrie**

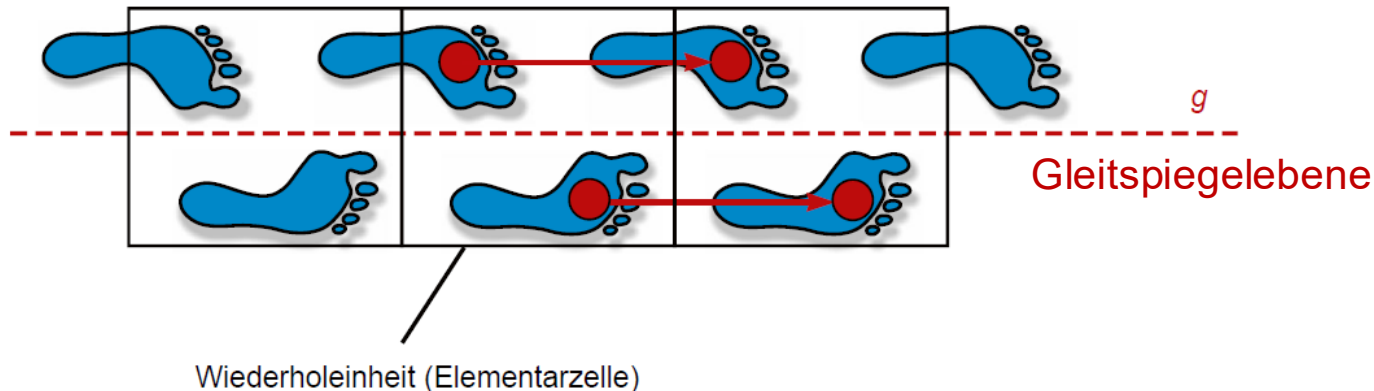


Kristalliner Festkörper – Das Grundmotiv kann sich ebenfalls in bestimmten Mustern wiederholen. Das wollen wir nun auch beschreiben!

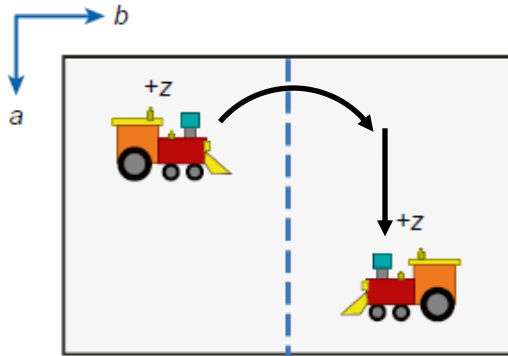
Bisher betrachteten wir nur **Punktsymmetrien**: Ein Punkt bleibt bei den Symmetrieoperationen stets fix!

Es gibt jedoch noch die Möglichkeit, dass sich Muster mit Versatz (in 3D) wiederholen:

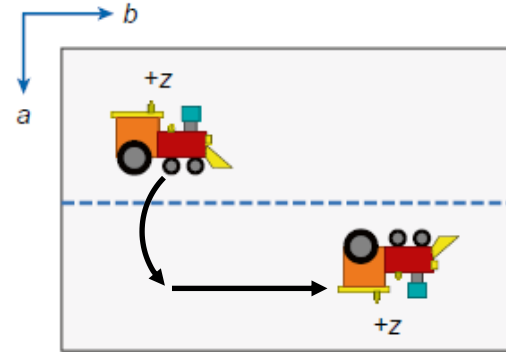
Translationssymmetrie



Gleitspiegelebene a



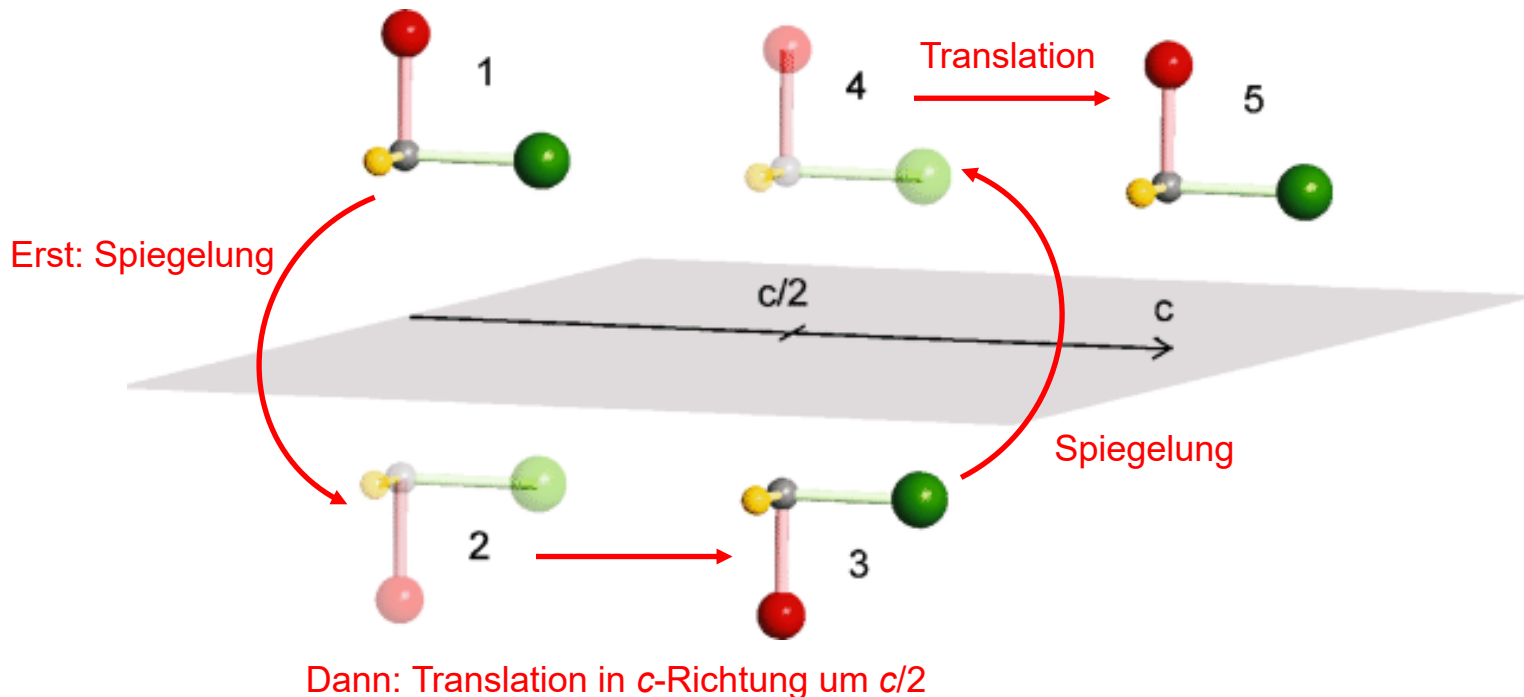
Gleitspiegelebene b



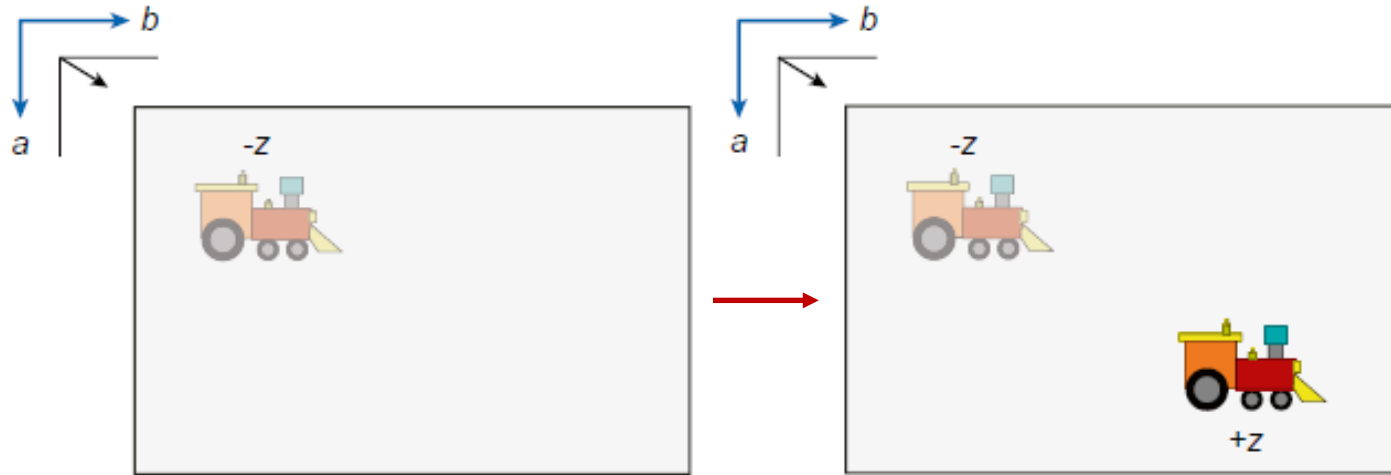
Die Translationseinheit beträgt bei Gleitspiegelebenen grundsätzlich die **Hälfte der Bezugsraumrichtung** (wir lernen gleich jedoch auch eine Ausnahme kennen...)

Wiederholung: Gleitspiegelebenen

Gleitspiegelebene c aus einer anderen Perspektive



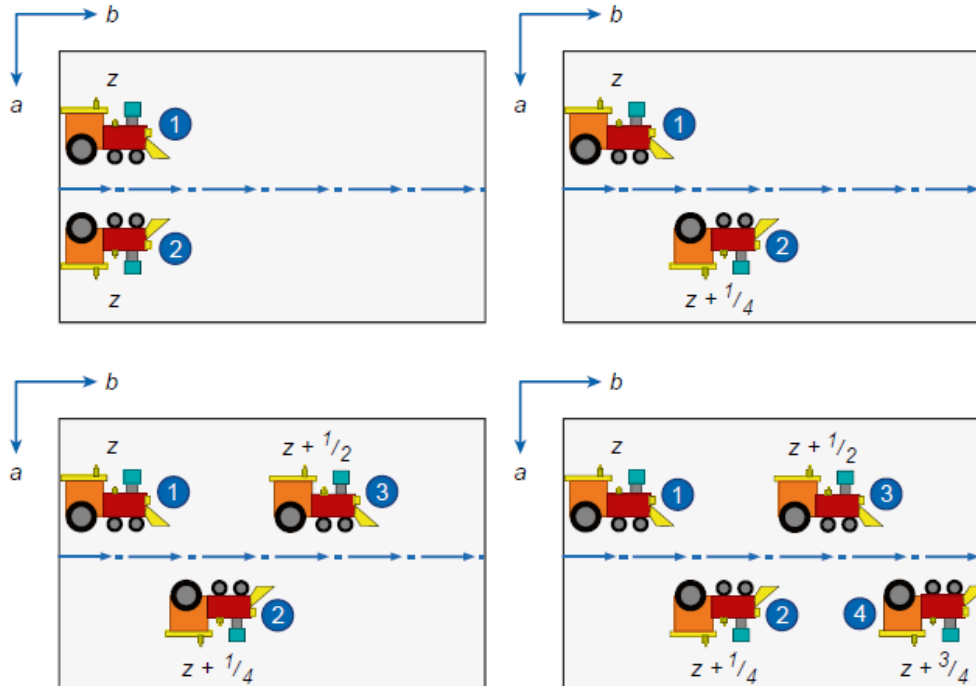
Gleitspiegelebene n



n kennzeichnet bloß, dass die Translationsrichtung „schräg“ ist ($\frac{1}{2}\mathbf{a} + \frac{1}{2}\mathbf{b}$). Die Spiegelebene kann irgendwie liegen!

Wiederholung: Gleitspiegelebenen

Gleitspiegelebene d

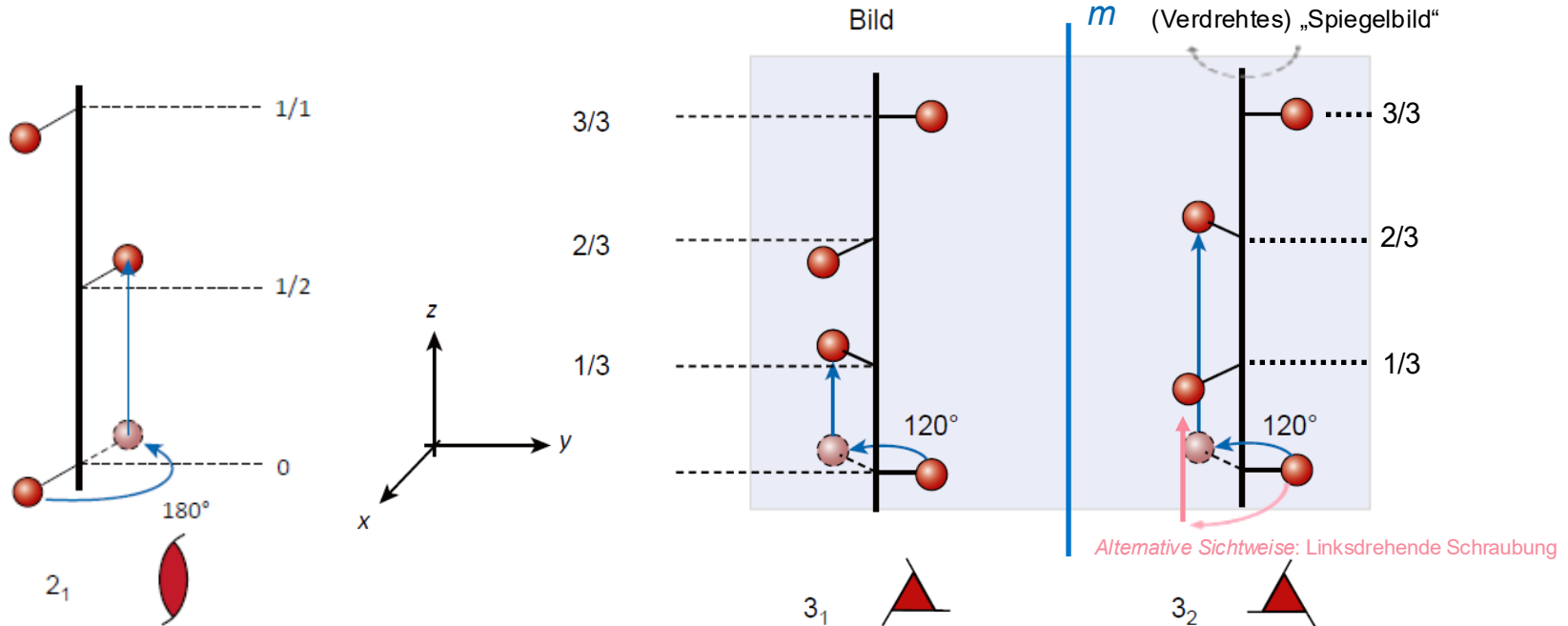


Achtung:

Bei der Gleitspiegelebene d beträgt die Translationseinheit nur $\frac{1}{4}$ statt $\frac{1}{2}$!

Wiederholung: Schraubenachsen n_m

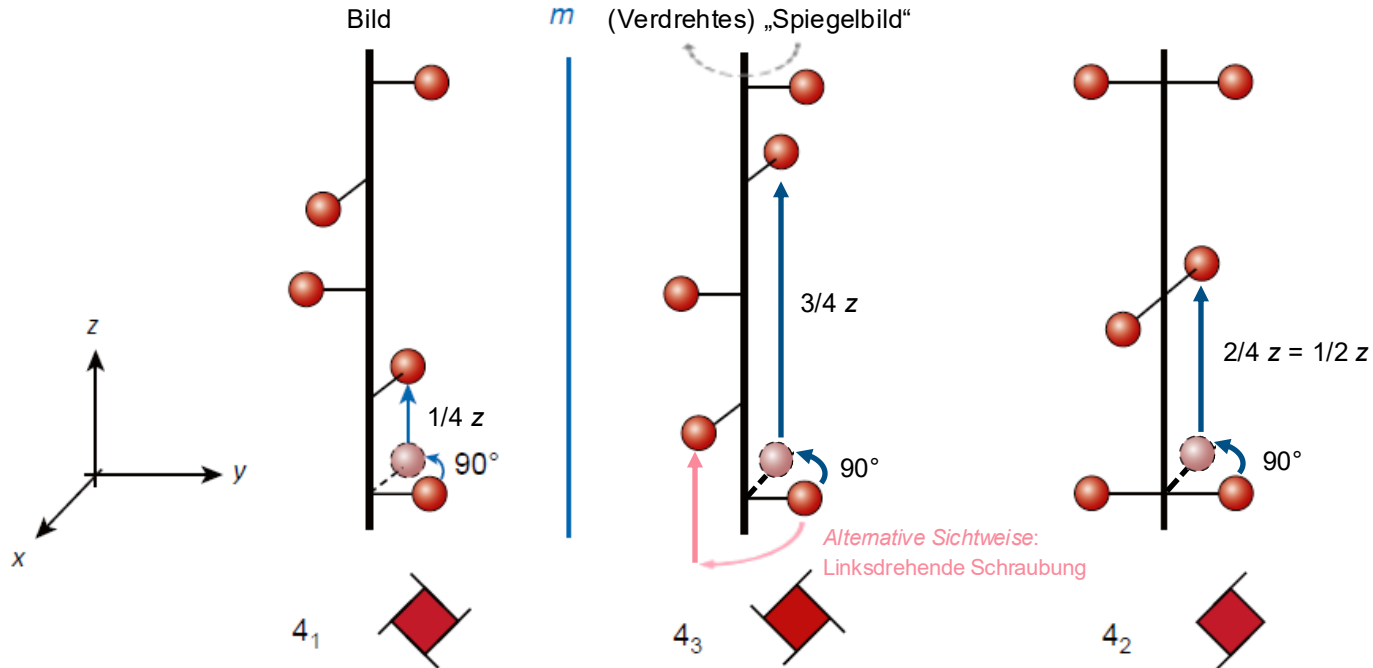
Drehung um $360^\circ/n$, Translation um m/n entlang einer der drei Raumrichtungen



Vorsicht: Die 3₂-Schraubenachse wurde noch zusätzlich um 180° verdreht, damit gleicher Startpunkt vorliegt...

Wiederholung: Schraubenachsen n_m

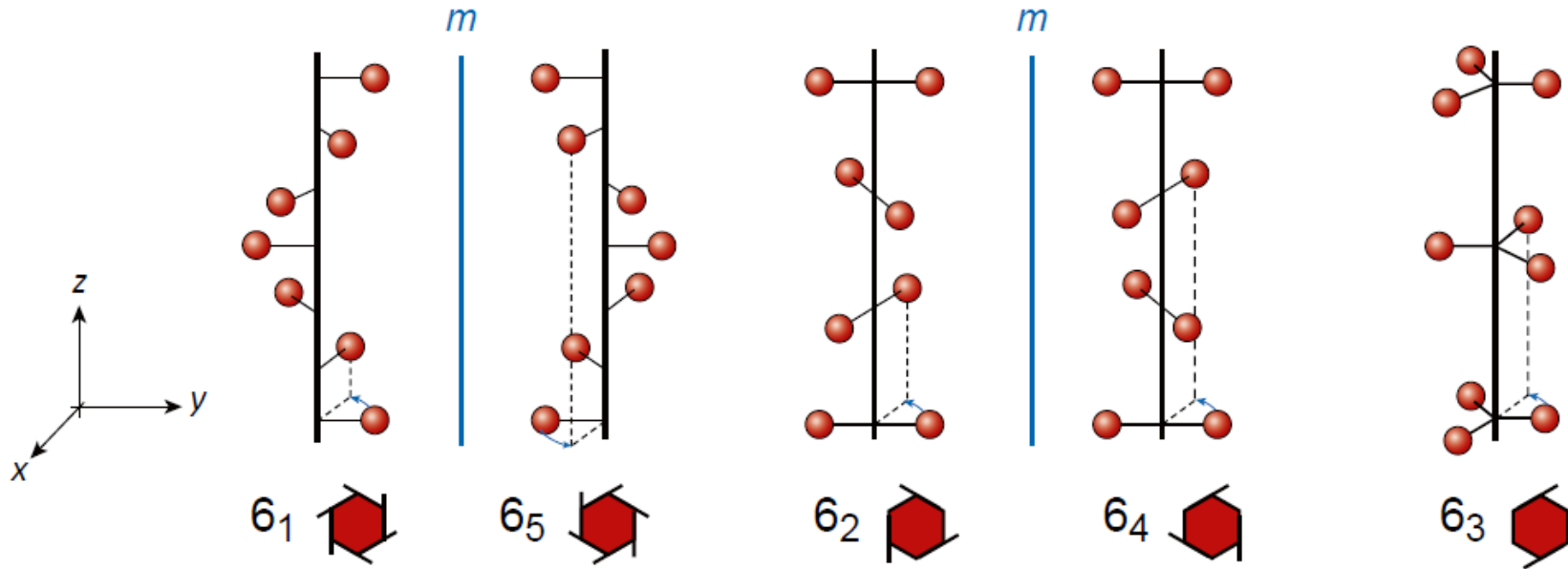
Drehung um $360^\circ/n$, Translation um m/n entlang einer der drei Raumrichtungen



Vorsicht: Die 4_3 -Schraubenachse wurde noch zusätzlich um 180° verdreht, damit gleicher Startpunkt vorliegt...

Wiederholung: Schraubenachsen n_m

Drehung um $360^\circ/n$, Translation um m/n entlang einer der drei Raumrichtungen



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)



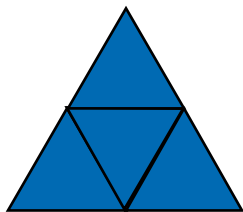
Springer Verlag, Kapitel 6

Nur bestimmte Symmetrien in natürlichen Kristallen

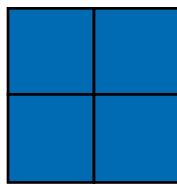
Bei Betrachtung der höchsten Punktsymmetrien der Kristallsysteme fällt auf:

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

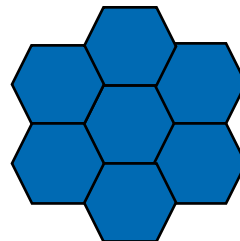
Das rührt daher, dass nur in diesen Symmetrien eine lückenlose Packung von Mustern funktioniert.



3-zählige Symmetrie

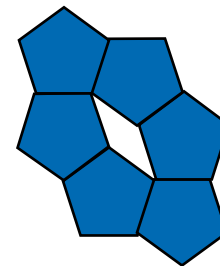


4-zählige Symmetrie



6-zählige Symmetrie

Aber:



5-zählige Symmetrie

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

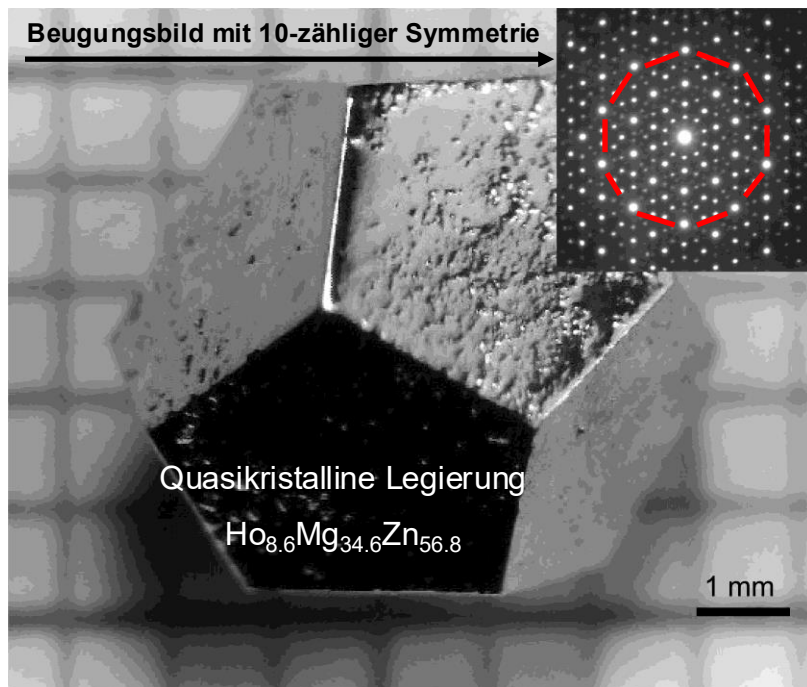
Die sieben Kristallsysteme im 3D

In jedem Kristallsystem gibt es Restriktionen an die Metrik:

Kristallsystem	Restriktionen bzgl. der		maximale Symmetrie
	Achsenlängen	Winkel der Zelle	Holoedrie
triklin	<i>keine*</i>	<i>keine*</i>	$\bar{1}$
monoklin	<i>keine*</i>	$\alpha = \gamma = 90^\circ$	$2/m$
orthorhombisch	<i>keine*</i>	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	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.

Ausnahme: (Synthetische) Quasikristalle



Courtesy from © Paul Canfield, Ames Lab, Iowa, US



Dan Shechtman
(*1941)
Nobelpreis in Chemie 2011

<https://www.thefamouspeople.com/profiles/images/dan-shechtman> (Zugriff: 20.04.2022)

2009 wurden Quasikristalle dann auch aus der Natur bestätigt – $(\text{Cu}, \text{Zn})\text{Al}_2$ im Mineral *Khatyrkit* aus dem Koryak-Gebirge, Russland:

L. Bindi *et al.* *Science* **2009**, 324, 1306-1309, doi:10.1126/science.1170827

Besuchen Sie folgende Seite (Link ebenfalls auf ILIAS):



UAB
Universitat Autònoma de Barcelona

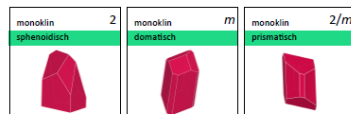
Auf dieser Website der Universität Barcelona kann man sich für jede der 32 Kristallklassen interaktiv ansehen, welche Symmetrieelemente enthalten sind und welche Polyeder dafür typisch sind.

Übersicht über die 32 Kristallklassen

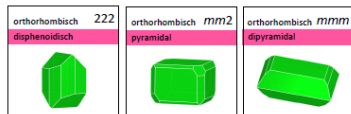
Kristallklassen



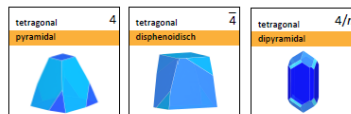
trigonal



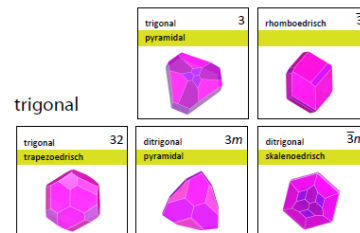
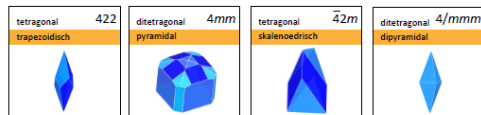
monoklin



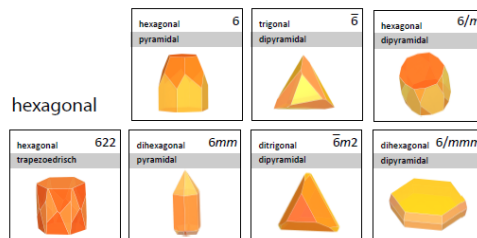
orthorhombisch



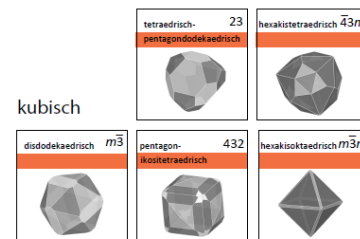
tetragonal



trigonal



hexagonal



kubisch



Dann nach „**Kristallklassenposter**“
suchen!

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

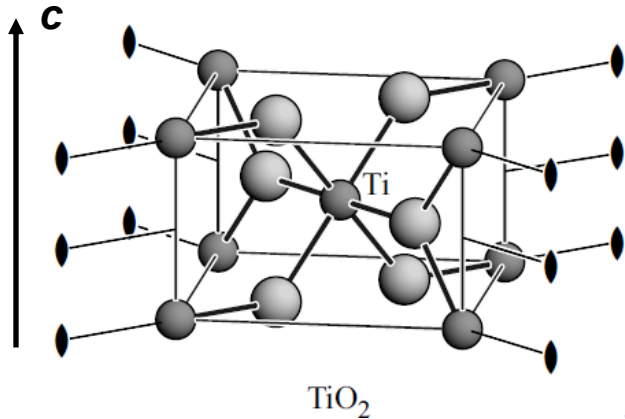
Raumgruppentyp: Enthält alle Punkt- und Translationssymmetrieelemente, mit denen man Strukturen im 3D aufbauen könnte.

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:

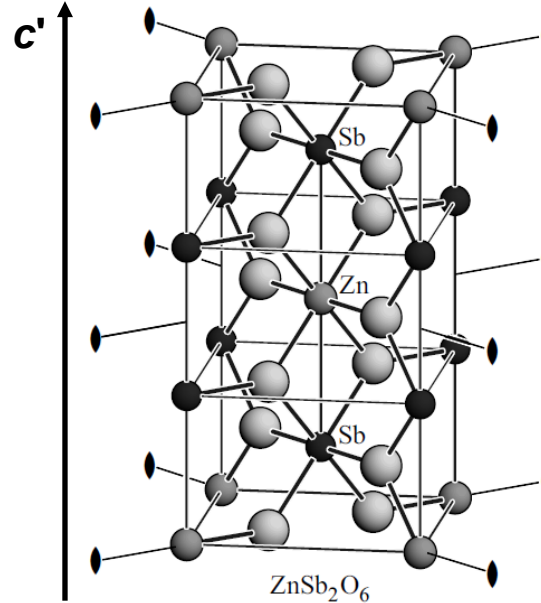
230 Raumgruppentypen

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!

Unterschied zwischen Raumgruppe und Raumgruppentyp



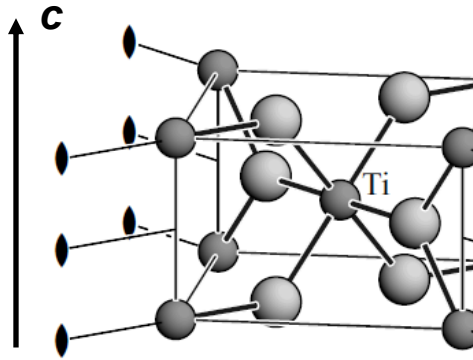
Rutil: $P4_2/mnm$ (Nr. 136)



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

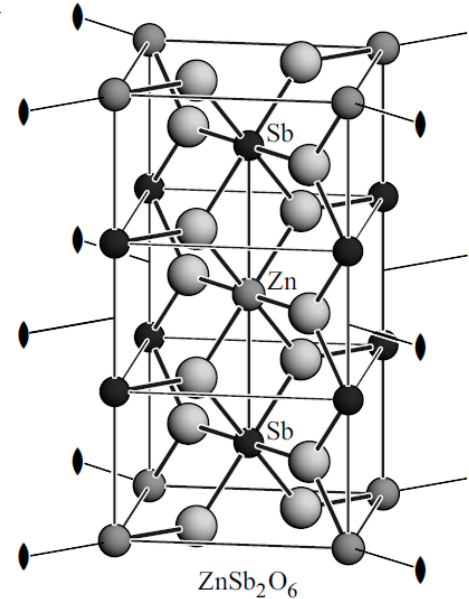
Beide Strukturen gehören demselben allgemeinen Raumgruppentyp $P4_2/mnm$ (Nr. 136) an.
Die Symmetrie jeder der individuellen Strukturen **mit ihren Gitterparametern** wird jedoch durch eine **Raumgruppe** beschrieben. Raumgruppen immer mit Gitterparametern/expLICITer Struktur verknüpft!!

Unterschied zwischen Gitterparameter und Raumgruppentyp



TiO₂

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



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

Beide Strukturen gehören demselben Raumgruppentyp $P4_2/mnm$ (Nr. 136) an. Die Symmetrie jeder der individuellen Gitterparameter wird jedoch durch eine Raumgruppe beschrieben. Raumgruppen immer mit Gitterstruktur verknüpft!!

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

Die Symmetrie jeder der individuellen Gitterparameter wird jedoch durch eine Raumgruppe beschrieben. Raumgruppen immer mit Gitterstruktur verknüpft!!

Wollen Sie mal Beispiele für alle 230 Raumgruppentypen sehen?

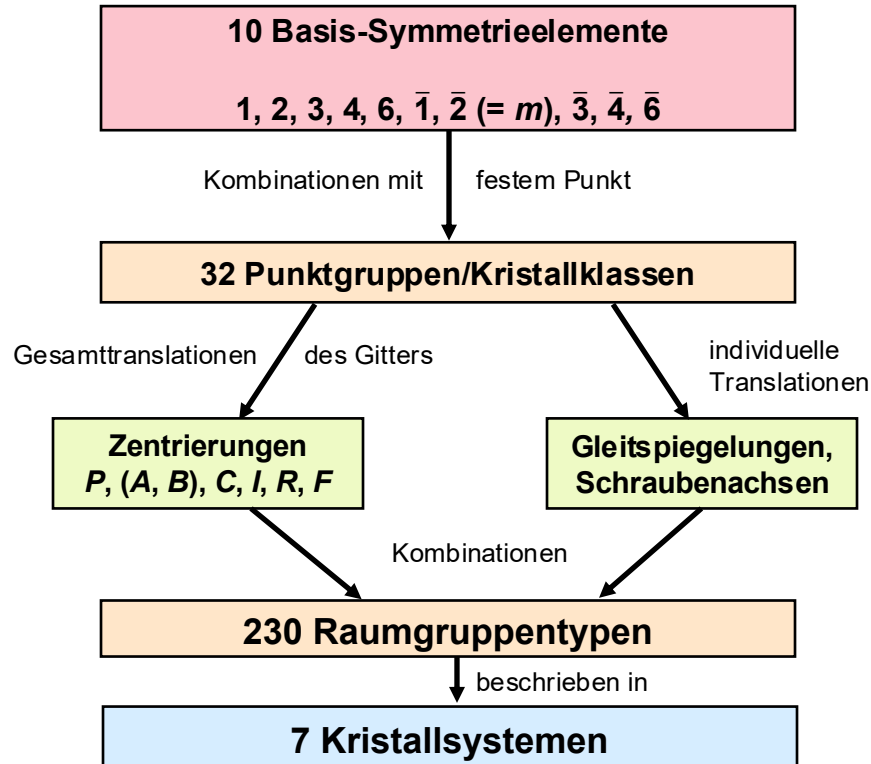
Frank Hoffmann hat hier ein DIN-A0-Poster mit allen 230 Raumgruppen und Beispielmineralien zusammengestellt (sonst auch auf ILIAS)!

Scannen Sie diesen QR-Code:



Dr. Frank Hoffmann

Was haben wir bis jetzt über Strukturbeschreibung gelernt?



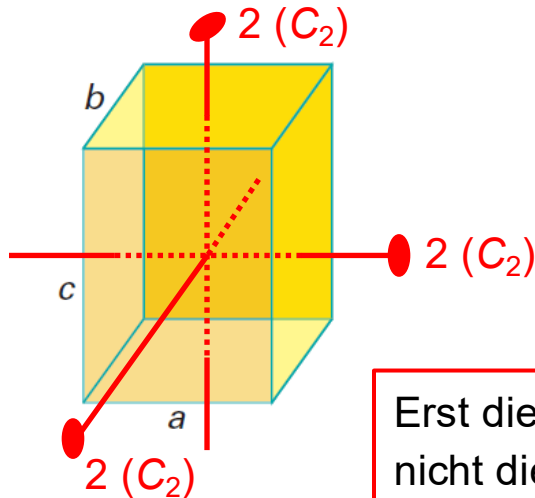
Was ist eigentlich wichtiger? Symmetrie oder Metrik?



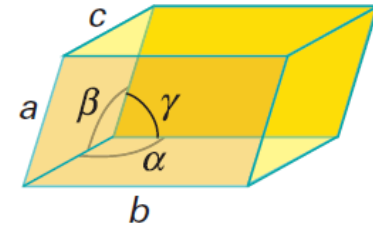
Die Symmetrie erzwingt das Kristallsystem – nicht die Metrik!

Aufpassen: Nur weil eine Struktur bestimmte besondere Metrik hat, muss sie nicht automatisch einem bestimmten Kristallsystem angehören!

Beispiel: Alle drei Winkel etwa 90° . Das heißt **nicht automatisch**, dass das Kristallsystem orthorhombisch ist!



Es könnte auch z.B. ein triklines Kristallsystem sein, in dem zufällig mal alle Winkel 90° betragen.

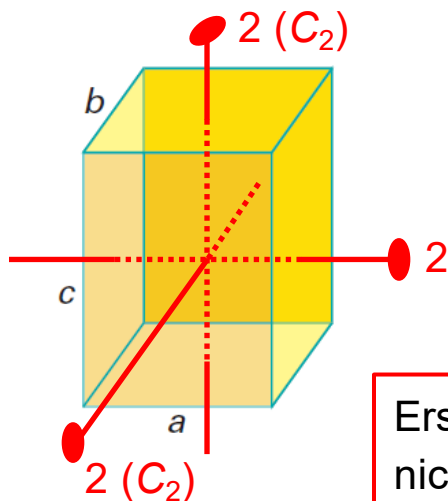


Erst die Symmetrieelemente legen das Kristallsystem endgültig fest, nicht die Metrik selbst. Die Metrik kann nur einen Hinweis liefern!

Die Symmetrie erz

Aufpassen: Nur weil e
automatisch einem bes

Beispiel: Alle drei Wink
orthorhombisch ist!



Ers
nic

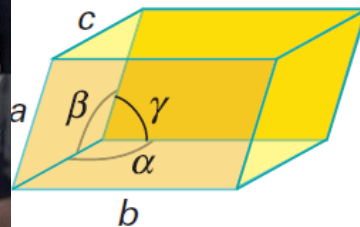


Metrik!

at, muss sie nicht

dass das Kristallsystem

system sein, in dem zufällig mal

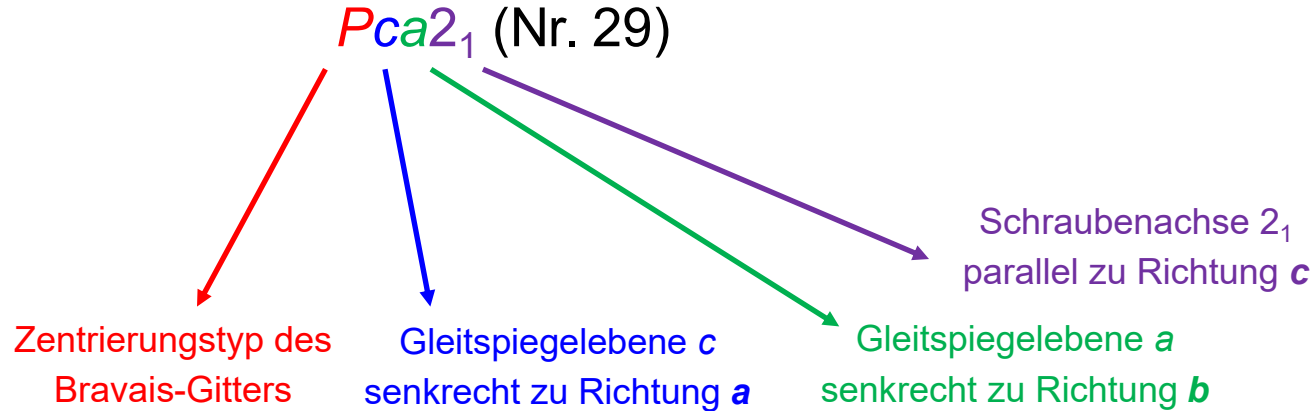


system endgültig fest,
en Hinweis liefern!

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!

Ein Beispiel für die Raumgruppensymbolik

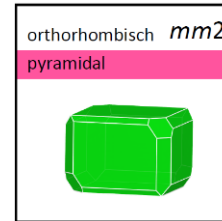
Betrachten wir folgenden Raumgruppentyp:

$Pca2_1$ (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!

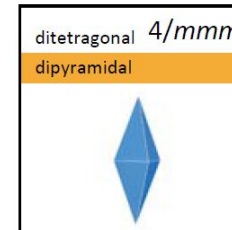
Betrachten wir nunmehr folgenden Raumgruppentyp:

$$I4_1/acd \text{ (Nr. 142)}$$

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

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

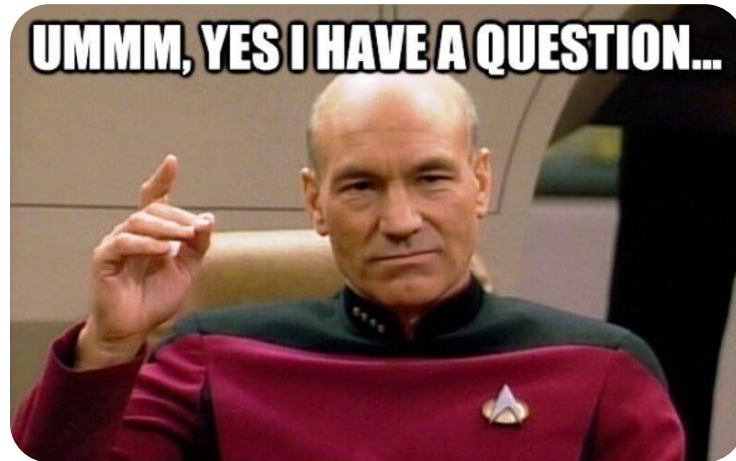
Also: $4/mmm$ oder D_{4h}



Mind. eine vierzählige Achse, eine dazu senkrechte Spiegelebene, sowie zwei weitere Spiegelebenen (senkrecht zur ersten) können nur in einer **tetragonalen Metrik** auftreten!

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>	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



Fragen?

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.

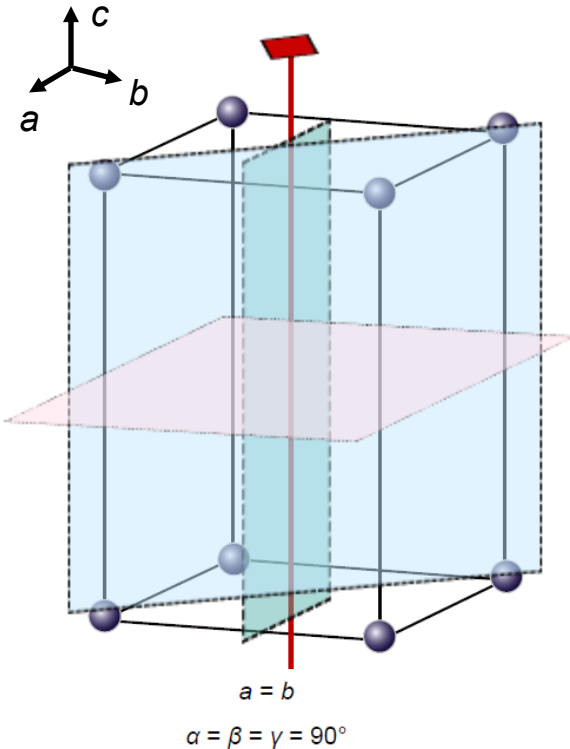
**Die Richtungen sind hier in Form von Gittervektoren angegeben, die vom Ursprung ausgehen und einen Gitterpunkt treffen, der durch das entsprechende Koordinatentripel [xyz] angegeben ist. Siehe auch ► Abschn. 3.2.2.

[uvw] ist kurz für eine Richtung

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

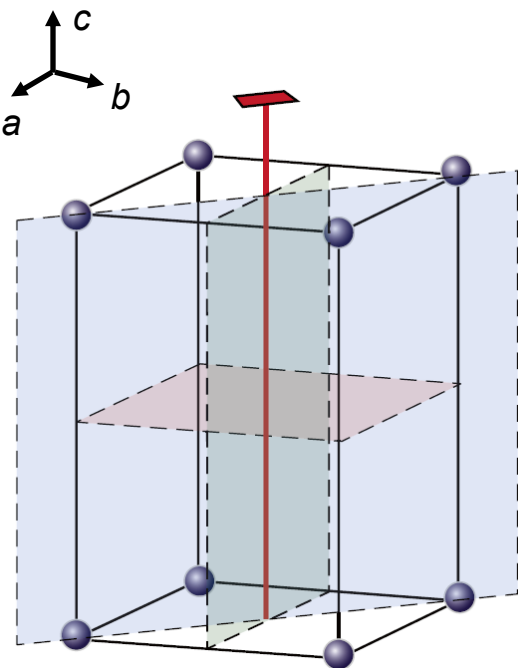
Nicht auswendig lernen, ist einfach eine Konvention je nach Kristallsystem. Es soll Sie nur nicht wundern, dass die Festlegung nicht immer *a*, *b*, *c* ist...

Raumgruppe aus einer Zelle ermitteln



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

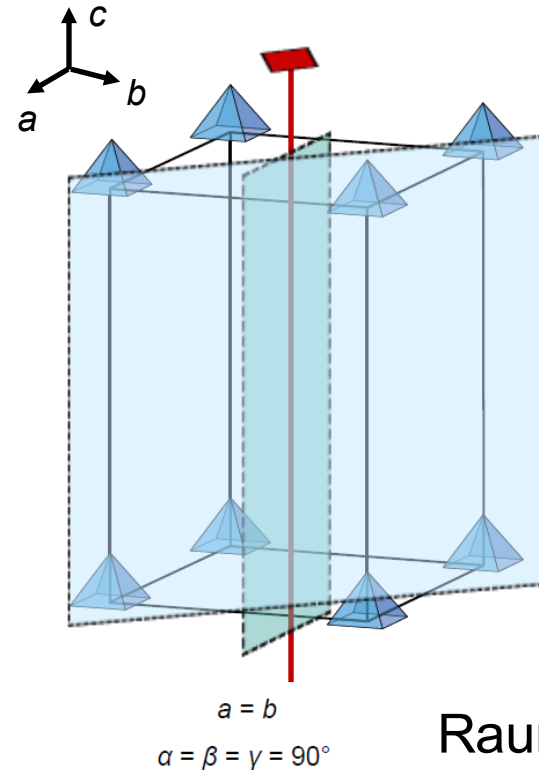
1. Nur Atome an den Eckpunkten (je $1/8$ Gewichtung): $8 \times 1/8 = 1 \rightarrow$ **primitive Zelle (P-Typ)**
2. Entlang c -Richtung liegt bei den Gitterparametern eine **vierzählige Achse** vor \rightarrow sollte erwartungsgemäß **tetragonales Kristallsystem** sein
3. Entlang a -Richtung und der $[110]$ -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“*)



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 Achse

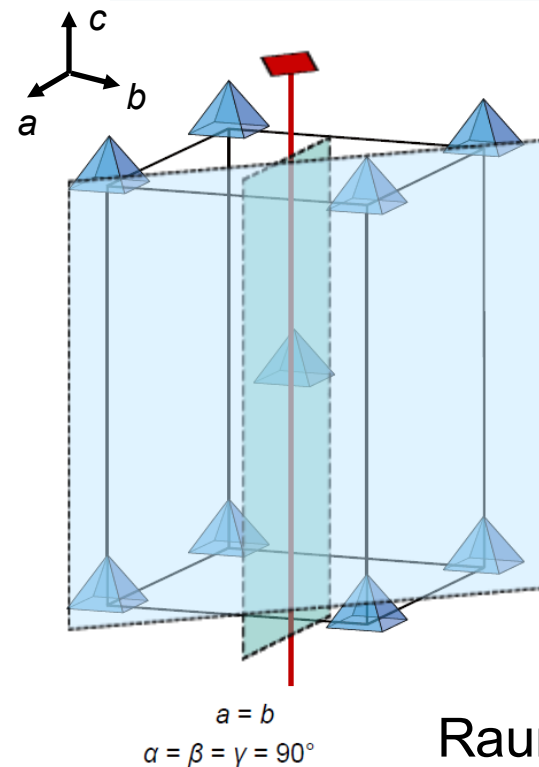
Raumgruppe muss **$P4/mmm$** (Nr. 123) sein!



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?

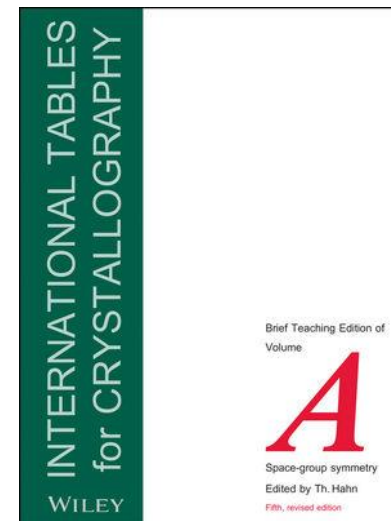
1. Baueinheiten an den Eckpunkten (je $1/8$ Gewichtung): $8 \times 1/8 = 1$ und in der Mitte: $1 \times 1 \rightarrow$ **innenzentrierte Zelle (I-Typ)** mit $Z = 2$ Atomen pro Zelle
2. Entlang c -Richtung liegt bei den Gitterparametern eine **vierzählige Achse** vor \rightarrow sollte erwartungsgemäß **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!

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

C_{2v}^1

$Pmm2$

$mm2$

Orthorhombic

Patterson symmetry $Pmmm$

Hier steht das Raumgruppensymbol (in Langschreibweise) und seine Nummer

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

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

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

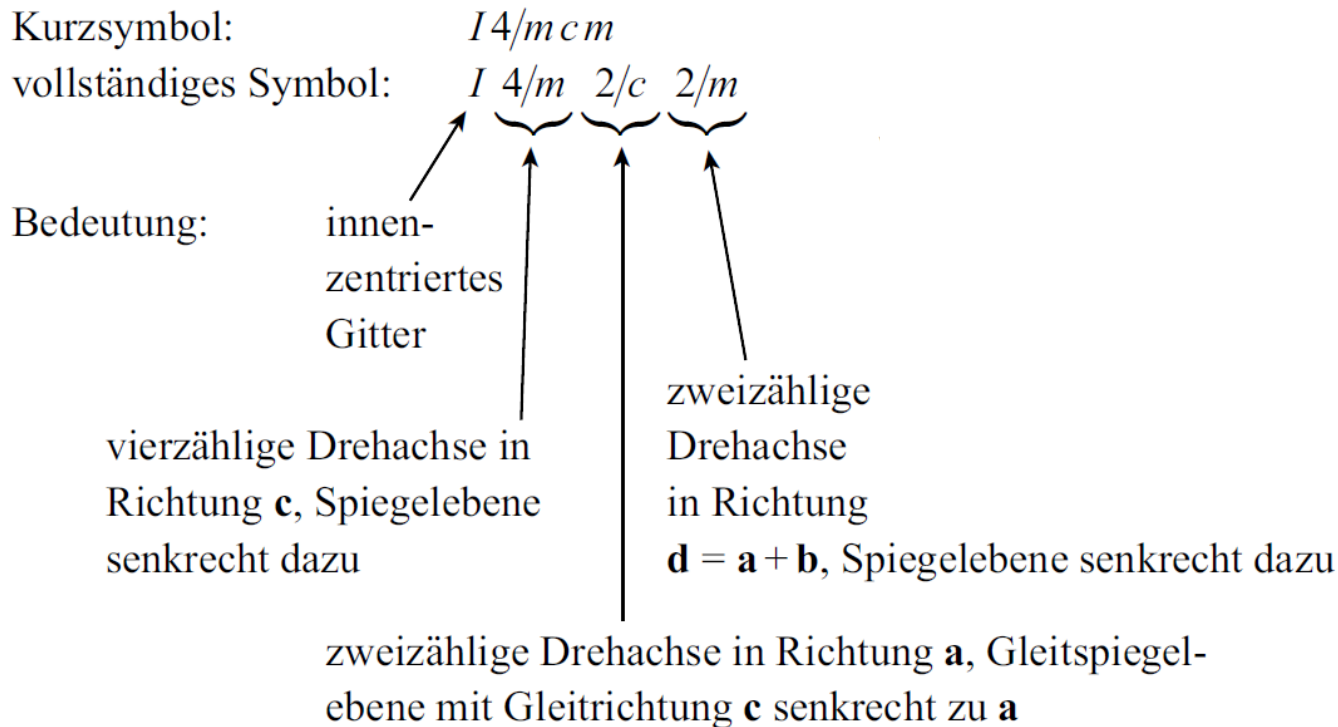
zweizählige Schraubenachse
in Richtung **a**, Gleitspiegel-
ebene senkrecht zu **a** mit
diagonaler Gleitrichtung

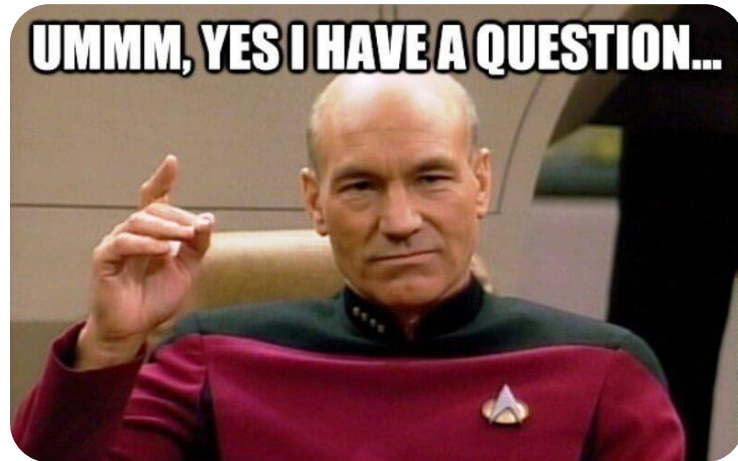
2_1 -Achse

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





Fragen?