

GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

Symmetrieelemente (Matrizen- und graphische Darstellung)
& GruppentafelMatrizendarstellung von Symmetrieelementen:

Die Matrizen stellen Symmetrieeoperationen dar. Multipliziert man eine solche Matrix mit der Spaltenmatrix der Atomkoordinaten $x \ y \ z$ eines Ausgangsatoms, so erhält man die Lage eines symmetrisch äquivalenten Atoms $x' \ y' \ z'$, z.B. für eine Spiegelung in $0 \ y \ z$:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (1)$$

Matrizenmultiplikation:

Das Hintereinander-Ausführen zweier Symmetrieeoperationen g_1 und g_2 ist gleichbedeutend mit der Multiplikation der zu g_1 und g_2 gehörenden Matrizen (a_{ij}) und (b_{jk}) . Für das Produkt (c_{ik}) zweier (3×3) -Matrizen (a_{ij}) und (b_{jk}) gilt:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$c_{ik} = \sum_{j=1}^3 a_{ij} \cdot b_{jk} \quad (3)$$

$$\text{z.B. ist: } c_{21} = a_{21} \cdot b_{11} + a_{22} \cdot b_{21} + a_{23} \cdot b_{31}$$

Die Multiplikation von Matrizen ist im allgemeinen nicht kommutativ, d.h.

$$(a_{ij}) \cdot (b_{jk}) \neq (b_{jk}) \cdot (a_{ij})$$





Gruppentafel:

Eine Gruppentafel ist ein quadratisches Schema, in das alle möglichen Produkte $g_i \cdot g_j$ zweier Elemente g_i und g_j der Gruppe eingetragen werden. Die Gruppentafel wird aufgestellt, indem man die Elemente g_1, g_2, \dots, g_n der Gruppe der Reihe nach in die „Kopfzeile“ und „Kopfspalte“ einer Tabelle schreibt und die Produkte $g_i \cdot g_j$ unter Beachtung der Reihenfolge der Faktoren einträgt (da i. a. $g_i \cdot g_j \neq g_j \cdot g_i$):












	g_1	g_2	g_3	\dots	g_n
g_1	$g_1 g_1$	$g_1 g_2$	$g_1 g_3$	\dots	$g_1 g_n$
g_2	$g_2 g_1$	$g_2 g_2$	$g_2 g_3$	\dots	$g_2 g_n$
g_3	$g_3 g_1$	$g_3 g_2$	$g_3 g_3$	\dots	$g_3 g_n$
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	\dots
g_n	$g_n g_1$	$g_n g_2$	$g_n g_3$	\dots	$g_n g_n$

Zeichenerklärung einiger Symmetrieelemente im 3-Dimensionalen:

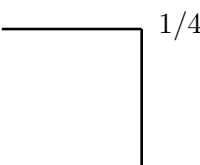
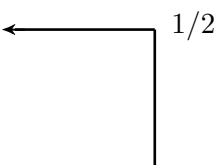
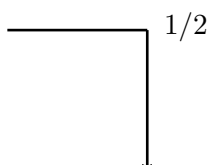
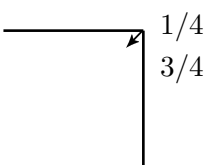
Spiegel- und Gleitspiegelebenen senkrecht zur Zeichenebene:

			
normale Spiegelebene	Gleitspiegelebene mit Gleitkomponen- te Zeichenebene	Gleitspiegelebene mit Gleitkomponen- te \perp Zeichenebene	Gleitspiegelebene mit Gleit- komponente schräg zur Zei- chenebene (Diagonalgleitung)

Schraubenachsen senkrecht zur Zeichenebene:

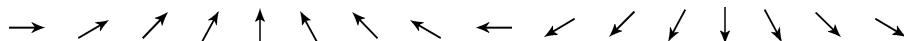
	2_1 -Schraubenachse				
	3_1 -Schraubenachse		3_2 -Schraubenachse		
	4_1 -Schraubenachse		4_2 -Schraubenachse		4_3 -Schraubenachse
	6_1 -Schraubenachse		6_2 -Schraubenachse		6_3 -Schraubenachse
	6_4 -Schraubenachse		6_5 -Schraubenachse		

Spiegel- und Gleitspiegelebenen parallel zur Zeichenebene: (mit Höhenangaben)

			
Spiegelebene	Gleitspiegelebene mit Gleitrichtung in der Zeichenebene horizontal bzw. vertikal		Gleitspiegelebene mit Gleit- richtung diagonal

Zweizählige Drehachsen parallel zur Zeichenebene:

Die Pfeilrichtung kennzeichnet die Richtung der Achse parallel zur Zeichenebene, die Höhenangabe erfolgt wie bei den zur Zeichenebene parallelen Spiegel- und Gleitspiegelebenen.



2_1 -Schraubenachsen parallel zur Zeichenebene:

Die Pfeilrichtung kennzeichnet die Richtung der Achse parallel zur Zeichenebene, die Höhenangabe erfolgt wie bei den zur Zeichenebene parallelen Spiegel- und Gleitspiegelebenen.

