

GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

7. Übung: Raumgruppen

Aufgabe 1:

Gegeben ist ein Diagramm einer Elementarzelle einer primitiven Raumgruppe. Die Position eines Moleküls ist durch einen schraffierten Kreis gekennzeichnet. Einige andere Positionen sind zu Ihrer Unterstützung mit A bis S benannt.

- a) Zu welchem Kristallsystem gehört die abgebildete Raumgruppe?

Bemerkung: Beachten Sie das gegebene Koordinatensystem.

- b) Schlagen Sie ein Raumgruppensymbol vor.

- c) Welche der Positionen A bis S sind die anderen, symmetrieäquivalenten Positionen zum gegebenen Molekül (schraffierter Kreis)?

Bemerkung: Wenn eine Symmetrieoperation eine Position außerhalb der gegebenen Elementarzelle erzeugt, bedenken Sie, dass Sie diese stets durch ein ganzzahliges Vielfaches eines oder mehrerer Basisvektoren in die Elementarzelle zurücktransferieren können.

- d) Was sind die Höhen der anderen Moleküle in der Elementarzelle, wenn sich das gegebene Molekül auf der Höhe “+z” (mit $0 \leq z < 1/2$) befindet?

Abbildung einer primitiven Raumgruppe in einer Projektion entlang $[001]$.

