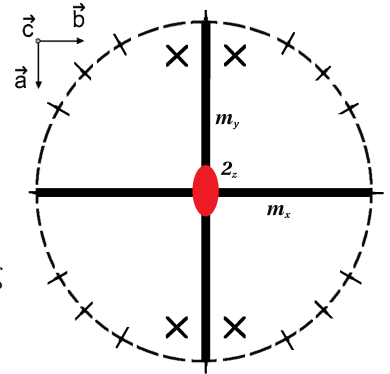


GRUNDZÜGE DER KRISTALLOGRAPHIE

Lösung zur 6. Übung: Kristallklassen III / Punktgruppen III & Symmetrie im Raum

Aufgabe 1:

- Es ergibt sich das nebenstehende Stereogramm:
- Eine zweizählige Achse 2_z in \vec{c} -Richtung.
- Mit den gegebenen Matrizen ergibt sich 2_z aus der Verknüpfung von m_x und m_y :

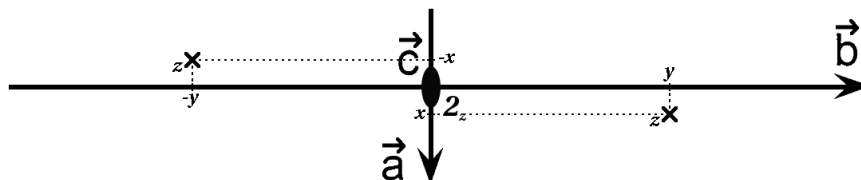


$$m_x \cdot m_y = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = 2_z$$

Man erhält somit die folgende Gruppentafel:

$mm2$	1	m_x	m_y	2_z
1	1	m_x	m_y	2_z
m_x	m_x	1	2_z	m_y
m_y	m_y	2_z	1	m_x
2_z	2_z	m_y	m_x	1

- Man verifiziere anhand der folgenden Skizze, dass der Punkt x, y, z durch 2_z in $-x, -y, z$ überführt wird und leite mit Hilfe der Gleichung (1) die oben angegebene Matrix ab.

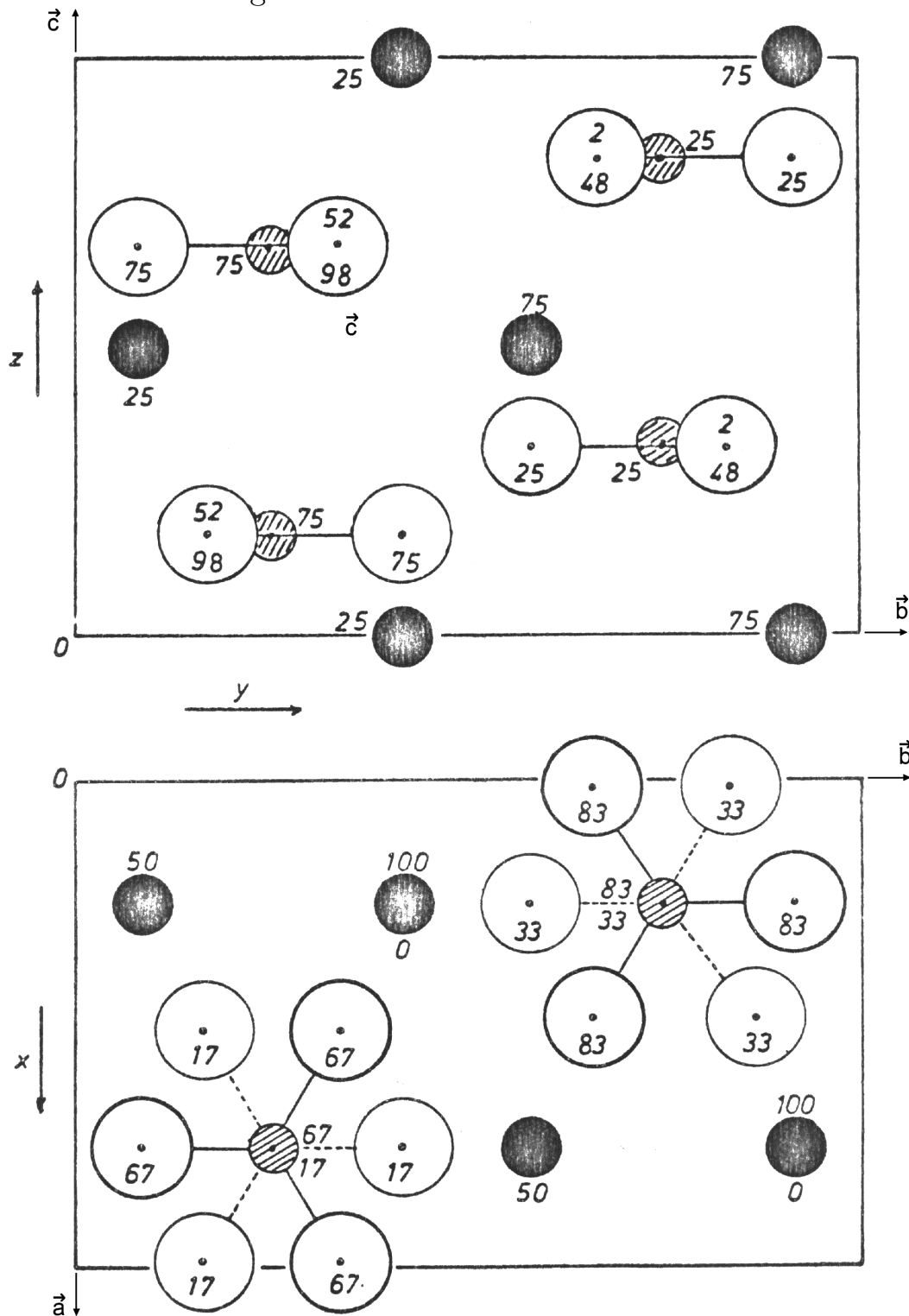


$$\begin{pmatrix} -x \\ -y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (1)$$

- Die zugehörige Punktgruppe heißt $mm2$.

Aufgabe 2:

a) Struktur des Aragonits innerhalb der Elementarzelle:



b) In der Elementarzelle befinden sich 4 Formeleinheiten CaCO_3 .

c) Die Atome Ca, C und O_1 liegen in speziellen Punktlagen (auf m); O_2 befindet sich in allgemeiner Lage. Dementsprechend enthält die Elementarzelle 8 symmetrisch äquivalente Atome O_2 und je 4 Atome Ca, C und O_1 .

Zusatzaufgabe:

