

## 13 Raumgruppen

### 13.1 Definitionen

#### 13.1.1 Reelle affine Gruppen

Die "reelle affine Gruppe"  $A$  besteht aus allen Translationen und orthogonalen Transformationen des Raums

Gruppeneigenschaften:

i)

ii)

ii)

#### 13.1.2 Definition von Raumgruppen

Als "Raumgruppe" (RG) eines Kristalls bezeichnen wir die Untergruppe von  $A$ , die den Kristall invariant lässt.

#### 13.1.3 Translationsgruppen und Punktgruppen

i) Die (abelsche) UG der reinen Translationen

einer RG  $G$  heißt "Translationsgruppe von  $G$ ". Ihre Elemente heißen "primitive Translationen" und definieren das Bravais-Gitter

des Kristalls.

ii) ist Normalteiler von . Alle Elemente einer Nebenklasse von  $T$  haben den gleichen Drehanteil .

- iii) Die Menge aller Drehanteile in  $\Gamma$  definiert die "Punktgruppe von  $\Gamma$ ".
- iv) Die Elemente von  $\Gamma$  lassen das durch  $T$  definierte Bravais-Gitter invariant.

Beweise:

- i) klar
- ii) –Normalteiler:  
Sei  $N$ . Dann ist

a) Beh. (iv):

b)  $T$  ist Vereinigung vollständiger Klassen

$T$  ist Normalteiler

(Elemente einer Klasse sind alle  $g \in \Gamma$  mit  $g \cdot x = x$  für irgendein  $x \in T$ )

– Nebenklassen: seien  $N_1, N_2$  und  $N_3$  in gleicher NK bzgl.  $T$ . Dann gilt

ii) alle  $g$  in einer NK sind gleich

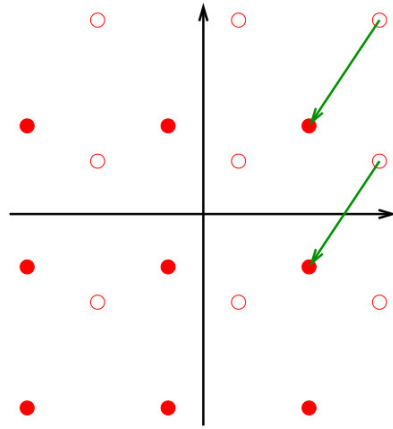
iii) Noch zu zeigen:  $\Gamma/T$  ist eine Gruppe:

– Seien  $g_1T, g_2T$ , dann gibt es  $gT$  mit

Bemerkungen:

Die Definition der Punktgruppe eines Kristalls verallgemeinert unsere frühere Definition, denn

- i) Bisher waren PG definiert bzgl. eines gewissen Ursprungs. Dies ist nun nicht mehr Zahl, z.B. in 2 Dimensionen:



Die Gruppe ist also unabhängig von der Wahl des Ursprungs, denn: Sei ein RG eines Kristalls mit den Elementen  
Dann vermittelt die Verschiebung des Ursprungs  
eines Isomorphismus :

- ii) Angenommen:

(d.h. mit ) mit (wie in i))

dann ist die Frage: Gibt es immer eine Ursprungsverschiebung, so dass und damit

Antwort: Dies gelingt nicht immer, d.h. es gibt Kristalle mit Elementen von , die nur zusammen mit einer Translation eine Symmetrietransformation darstellen ("nicht-symmorphe Kristalle"):

## 13.2 Symmorphe und nicht-symmorphe Raumgruppen

### 13.2.1 Nicht-primitive Translationen

Jedes Element der RG  $G$  eines Kristalls lässt sich schreiben als  
mit  $t$  und einem Vektor  $\mathbf{v}$  (den sogenannten  
"nicht-primitiven Translationen". Damit können wir schreiben

wobei  $t$  offenbar jeweils ein Element einer Nebenklasse  
von  $T$  ist. Jede RG ist also eindeutig charakterisiert durch

Angabe von: i)  $T$

ii)

iii) Vektoren

Beweis: Wenn  $t$  und  $\mathbf{v}$ , dann auch

### 13.2.2 Symmorphe und nicht-symmorphe Raumgruppen

Wie in (\*) gezeigt, führt eine Verschiebung des Ursprungs  
nur zu einer Verschiebung der nicht-primitiven Translationen,

Existiert ein  $t$ , bei dem  $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ , so nennt man die  
RG "symmorph", sonst "nicht-symmorph".

Bemerkungen:

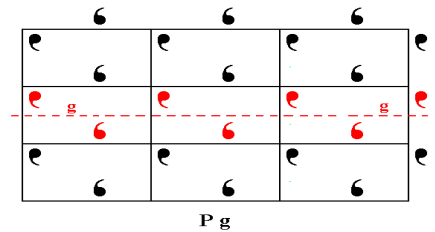
i) Ist  $G$  symmorph, so ist  $G$  offenbar isomorph zu einer UG von  
von  $G$ , denn wählt man den Ursprung so, dass alle  $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ ,  
dann ist

In diesem Fall lässt sich jedes Element der RG schreiben als

ii) Es existieren zwei Arten von Symmetrietransformationen, die eine RG nicht-symmorph machen können:

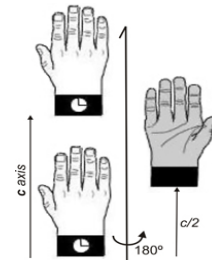
a) Gleitspiegelungen

(Spiegelung an Ebenen+Translation)



b) Schraubungen

(-Drehung+Translation)



### 13.3 Inäquivalente Raumgruppen

#### Vorbemerkung:

Bei der PG hatten wir realisiert, dass es zu der Klassifikation nicht hilfreich ist, nur die Isomorphie zu betrachten. Stattdessen hatten wir darauf geschaut, wieviele inäquivalente reelle dreidimensionale Matrixgruppen es gibt. Dies waren in Festkörpern 32. Ähnlich werden wir nun bei den RG verfahren:

#### 13.3.2 Matrix-Raumgruppen

Zu jeder RG  $G$  mit Elementen definieren wir eine hierzu isomorphe 4-dimensionale und reelle "Matrix-RG (MRG)" über

Isomorphie:

#### 13.2.2 Anzahl inäquivalenter MRG

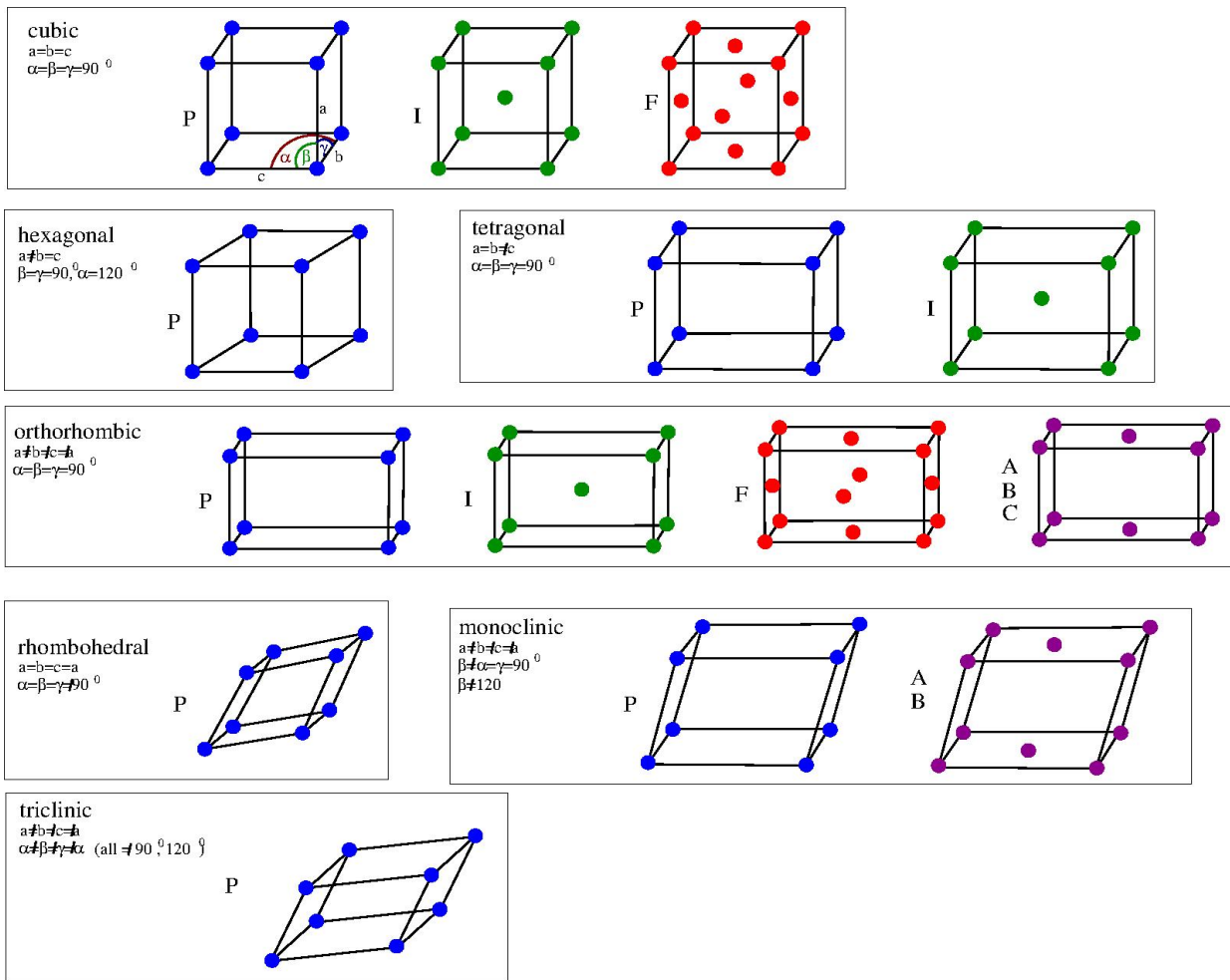
Es gibt 230 inäquivalente MRG. Von diesen sind 73 symmorph.  
(ohne Beweis)

### 13.3.3 Die (14) inäquivalenten Bravais-Gitter

Erinnerung: In Kap. 3 hatten wir die Bravais-Gitter bereits nach den möglichen PG-Symmetrien in 7 Kristallsystemen unterteilt.

Nun können wir fragen, wie viele inäquivalente RG in Bravais-Gittern lassen sich genau 14 inäquivalente RG (genauer MRG)

realisieren. Da diese RG symmorph sind, sind die eindeutig charakterisiert durch Angabe von  $\mathcal{L}_0$  ( $\rightarrow$  7 Kristallsysteme) und  $T$ .



#### Bemerkungen:

i) Dies sind tatsächlich Bravais-Gitter, d.h. es gibt in allen 14 primitive Basisvektoren, die das ganze Gitter aufspannen.

Zum Beispiel bei den 3 kubischen Gittern:

a) einfach kubisch: (Gitterkonstante )

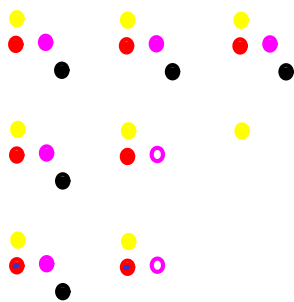
b) kubisch raumzentriert:

c) kubisch flächenzentriert:

- ii) Alle Translationsgruppen  $T$  mit Elementen  
sind äquivalent (und damit auch isomorph) zueinander, da  
jede Basistrafo eine Ähnlichkeitstransformation  
für die MRG darstellt

#### 13.3.4 Klassifikation der RG

Zur Klassifikation einer RG reicht die Angabe von  $\Gamma$  und des Bravais-Gitters (+ nicht-triviale Translationen in nicht-symmetrischen RG). Bei Kristallen ist die Wahl des BG (und seine Kristallklasse) aber im allgemeinen nicht eindeutig, d.h. es gibt äquivalente RG mit verschiedenen BG. Zum Beispiel in 2-dim



Punktgruppen

mögliches Bravais-Gitter: kubisch

Die RG ließe sich also charakterisieren durch

, BG=einfach kubisch (bzw. quadratisch in 2-dim)

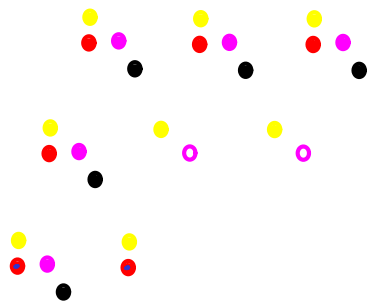
Eine solche Charakterisierung wird aber vermieden, da

- i) sie etwas irreführend ist, denn die vermeintlich hohe  
Symmetrie des kubischen Gitters ist durch die Basis vollständig  
falsch

ii) eine solche Struktur in der Natur ohnehin nicht vorkäme, da die gebrochene Rotationssymmetrie sich auf das Gitter übertragen würde.

Lösung: Äquivalent zur RG des obigen Gitters ist z.B. die RG

von:



mit

(wie oben) und BG mit

(Grund: Bemerkung ii) in 13.3.3)

Konvention zur Charakterisierung der RG:

Wähle unter allen äquivalenten RG, diejenigen mit einem BG der niedrigst-möglichen Symmetrieklasse. So ergibt sich für die 73 symmorphe RG:

Table 9.1. The 73 symmorphic space groups

crystal system	Bravais lattice	space group
triclinic	$P$	$P1, P\bar{1}$
monoclinic	$P$	$P2, Pm, P2/m$
	$B$ or $A$	$B2, Bm, B2/m$
orthorhombic	$P$	$P222, Pmm2, Pmmm$
	$C, A,$ or $B$	$C222, Cmm2, Amm2^a, Cmmm$
	$I$	$I222, Imm2, Immm$
	$F$	$F222, Fmm2, Fmmm$
tetragonal	$P$	$P4, P\bar{4}, P4/m, P422, P4mm$
		$P42m, P\bar{4}m2^a, P4/mmm$
	$I$	$I4, I\bar{4}, I4/m, I422, I4mm$
		$I\bar{4}2m, I\bar{4}m2^a, I4/mmm$
cubic	$P$	$P23, Pm\bar{3}, P432, P\bar{4}3m, Pm\bar{3}m$
	$I$	$I23, Im\bar{3}, I432, I\bar{4}3m, Im\bar{3}m$
	$F$	$F23, Fm\bar{3}, F432, F\bar{4}3m, Fm\bar{3}m$
trigonal	$P^b$	$P3, P\bar{3}, P312, P321^a, P3m1$
		$P31m^a, P\bar{3}1m, P\bar{3}m1^a$
(rhombohedral)	$R$	$R3, R\bar{3}, R32, R3m, R\bar{3}m$
hexagonal	$P^b$	$P6, P\bar{6}, P6/m, P622, P6mm$
		$P\bar{6}m2, P6m2^a, P6/mmm$

[ $P, I, F$  ( $A, B$  or  $C$ ) and  $R$ , respectively, denote primitive, body centered, face centered, base centered (along the  $a, b$  or  $c$  crystallographic axis) and rhombohedral Bravais lattices (see Fig. 9.3)]