Symmetrie in der Ebene

Skript zur Einführung in die Kristallographie

INHALT ▲

1 Gitter, Elementarzelle und Basis

1.1 Periodische Muster

1.2 Gitter und Gittervektoren

1.3 Die Elementarzelle

1.4 Bruchkoordinaten

1.5 Gitter und Basis

1.6 Wenn die Basis das Gitter ändert

2 Symmetrie des Gitters

2.1 Drehpunkte und Spiegellinien

2.2 Nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählig

2.3 Die vier Kristallsysteme

2.4 Das zentrierte Gitter

2.5 Die konventionelle Zelle

3 Gitter und Motiv

3.1 Die zehn Punktgruppen der Ebene

3.2 Die Symmetrie des Musters

3.3 Die Orientierung des Motivs

3.4 Wenn sich die Zelle ändert

4 Gleitspiegelung und Verknüpfung

4.1 Die Gleitspiegelung

4.2 Symmetrieoperationen in Koordinaten

4.3 So listen die International Tables

4.4 Operationen verknüpfen

4.5 Mehr Elemente, als das Symbol nennt

5 Die 17 Ebenengruppen

5.1 Wie man auf 17 kommt

5.2 Das Symbol lesen

5.3 Die Diagramme der International Tables

5.4 Von der Ebenengruppe zur Punktgruppe

6 Punktlagen

6.1 Allgemeine und spezielle Lage

6.2 Wyckoff-Lagen

6.3 Die asymmetrische Einheit

6.4 Eine Seite der International Tables lesen

6.5 Eine Kristallstruktur beschreiben

7 Tapeten, Ornamente und Kunst

7.1 Tapetengruppen

7.2 Mauerwerk und Pflaster

7.3 Fliesen und die Alhambra (Vertiefung) VERTIEFUNG

7.4 Escher und die Kachel (Vertiefung) VERTIEFUNG

7.5 Ausblick: Farbe als Symmetrie (Vertiefung) VERTIEFUNG

8 Ebenengruppen bestimmen

8.1 Vorgehen

8.2 Die fünf Leitfragen

8.3 Das Flussdiagramm

8.4 Beispiele

8.5 Typische Fehler

8.6 Vom Ergebnis zur Zelle

VERTIEFUNG

9 Die Signatur nach Conway

9.1 Vier Merkmale und die Signatur

9.2 Preis und Magic Theorem

9.3 Genau 17 Signaturen

Begriffe nach Borchardt-Ott & Sowa, *Kristallographie* (2018).

SO IST DAS SKRIPT AUFGEBAUT

Skript und App sind aus der Vorlesung Kristallographie an der ETH Zürich entstanden. Sie richten sich an alle, die eine Einführung in die Kristallographie hören oder einen vergleichbaren Hintergrund haben.

Der Text ohne Kennzeichnung behandelt den Grundstoff. Vertiefungen zeigen, wie diese Inhalte weitergehen; beim ersten Lesen kann man sie überspringen.

Vertiefung	Kasten oder Abschnitt, der über den Grundstoff hinausführt. Der erste Satz sagt, woran er anknüpft und wozu man ihn braucht; bei ganzen Kapiteln steht das im Kasten „Voraussetzungen“.
Grundlagen	Kurz zusammengefasstes Grundwissen, auf dem der Text aufbaut, etwa zu Vektoren oder Gruppen. Es gehört zum Haupttext.
In der App	Hinweis zur Bedienung der App.

1 Gitter, Elementarzelle und Basis

Ein Kristall ist aus gleichen Bausteinen aufgebaut, die sich periodisch wiederholen. In der Ebene zerlegt man ein solches Muster in ein Gitter, das angibt, wie es sich wiederholt, und eine Basis, die angibt, was sich wiederholt.

LERNZIELE

- in einem periodischen Muster Gittervektoren und eine Elementarzelle angeben
- primitive und nichtprimitive Elementarzellen unterscheiden und die Gitterpunkte je Zelle abzählen
- Punkte in Bruchkoordinaten (x, y) angeben und erkennen, welche Punkte durch eine Gittertranslation auseinander hervorgehen
- eine Kristallstruktur als Gitter und Basis beschreiben und begründen, warum die Atome des Graphens kein Gitter bilden
- erkennen, wann eine Änderung der Basis neue Translationen und damit eine kleinere Elementarzelle erzeugt

ZUR VERTIEFUNG

- Abstände aus Bruchkoordinaten berechnen

1.1 Periodische Muster

Tapeten, Fliesenböden, Stoffe und Mauerwerk zeigen Muster, die sich in zwei Richtungen wiederholen. Denkt man sich ein solches Muster unendlich ausgedehnt, kann man es um bestimmte Strecken verschieben, und es sieht danach genauso aus wie vorher. Eine solche Verschiebung heisst **Translation**. Sie ist eine Symmetrieoperation: Sie bringt das Muster mit sich selbst zur Deckung. Anders als eine Drehung oder Spiegelung lässt sie aber keinen Punkt an seinem Ort; sie ist keine Punktsymmetrieoperation (zum Begriff siehe Skript „Stereographische Projektion“, Abschnitt 3.1).

Die Muster in Abb. 1.1 bestehen aus Fähnchen. Ein Fähnchen hat keine eigene Symmetrie; das Muster wiederholt sich nur durch Translationen. Führt man zwei Translationen nacheinander aus, erhält man wieder eine: Wer zuerst um a und dann um b verschiebt, verschiebt insgesamt um $a + b$. Ein periodisches Muster hat deshalb unendlich viele Translationen.

Dass die Muster unendlich sind, ist eine Idealisierung. Ein Kristall ist zwar endlich, aber im Vergleich zum Abstand seiner Atome so gross, dass man seinen Rand für die Symmetrie ausser Acht lassen kann.

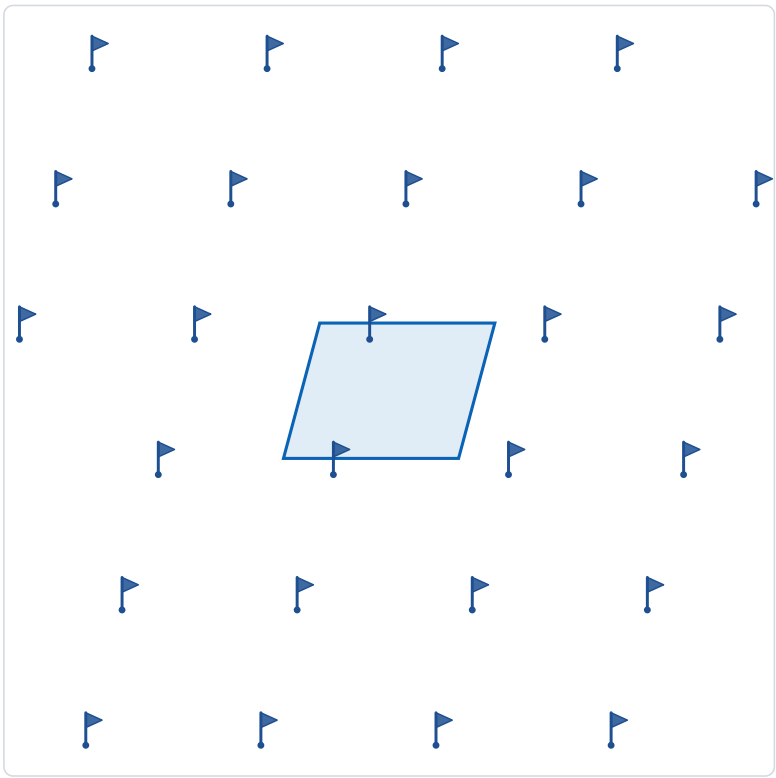


Abb. 1.1 Ein Muster, das sich nur durch Translationen wiederholt. Hervorgehoben ist eine Elementarzelle (Abschnitt 1.3 „Die Elementarzelle“). **In der App öffnen →**

MERKE

Ein periodisches Muster geht durch Translationen in sich über. Eine Translation ist eine Symmetrieoperation ohne festen Punkt; zwei Translationen nacheinander ergeben wieder eine.

1.2 Gitter und Gittervektoren

Man wählt im Muster einen beliebigen Punkt, zum Beispiel die Spitze eines Fähnchens, und markiert alle Punkte, in die ihn die Translationen des Musters bringen. Diese Punkte bilden das **Gitter** des Musters; die einzelnen Punkte heissen **Gitterpunkte**. In einem Gitter hat jeder Punkt dieselbe Umgebung, gleich ausgerichtet. Ein Gitter ist deshalb unendlich ausgedehnt: Ein Punkt am Rand hätte eine andere Umgebung als einer im Innern. Welchen Punkt man als Ausgangspunkt wählt, spielt keine Rolle. Ein anderer ergibt dasselbe Gitter, nur parallel verschoben.

Das Gitter ist eine gedachte, mathematische Konstruktion. Es gibt an, wie sich das Muster wiederholt, nicht woraus es besteht. Ein Gitter in der Ebene heisst auch **Netzebene** oder Gitterebene; im räumlichen Gitter eines Kristalls ist es eine der Ebenen, in denen Gitterpunkte liegen.

Zwei Translationen genügen, um alle anderen zu beschreiben. Man wählt zwei Vektoren a und b, die von einem Gitterpunkt zu zwei anderen führen und nicht auf einer Geraden liegen, und zwar so, dass jede Translation des Gitters die Form

$$t = u\,a + v\,b \quad \text{mit ganzen Zahlen } u,\ v$$

hat (Abb. 1.2). *a* und *b* heissen **Gittervektoren**, genauer primitive Gittervektoren; manchmal wählt man auch längere (Abschnitt 1.3 „Die Elementarzelle“). Ihre Längen *a* und *b* sind die **Gitterkonstanten**, der Winkel γ zwischen ihnen ist der **Gitterwinkel**. Zusammen heissen diese drei Zahlen die **Gitterparameter** oder die Metrik des Gitters.

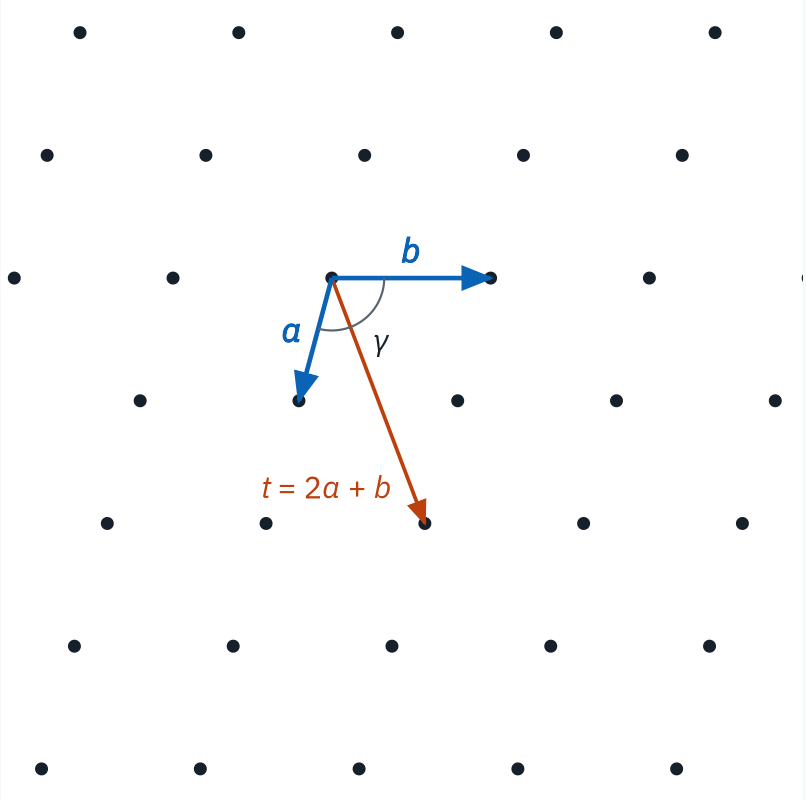


Abb. 1.2 Ein Gitter mit den Gittervektoren *a* und *b* und dem Gitterwinkel γ. Jede Translation des Gitters ist eine ganzzahlige Kombination von *a* und *b*, hier $t = 2a + b$.

Für die Lage der Achsen gibt es eine Konvention. Die International Tables for Crystallography (ITA), das Standardwerk zur Symmetrie von Kristallen, zeichnen *a* nach unten und *b* nach rechts. Der Ursprung liegt oben links. App und Skript folgen dieser Konvention. Sie passt zur Aufstellung räumlicher Kristalle: Dort zeigt *a* nach vorn, *b* nach rechts und *c* nach oben; von oben gesehen zeigt *a* dann nach unten.

MERKE

Das Gitter ist die Menge aller Punkte, die durch Translationen aus einem Punkt hervorgehen; alle Gitterpunkte haben dieselbe Umgebung. Mit primitiven Gittervektoren ist jede Translation $t = u\,a + v\,b$ mit ganzen *u*, *v*. Gitterparameter: *a*, *b*, γ. Konvention nach ITA: *a* nach unten, *b* nach rechts.

1.3 Die Elementarzelle

Die Gittervektoren *a* und *b* spannen ein Parallelogramm auf, die **Elementarzelle** (auch Elementarmasche). Verschiebt man sie um alle Translationen $u\,a + v\,b$, überdecken ihre Kopien die Ebene lückenlos und ohne Überlappung. Die Elementarzelle enthält damit alles, was man über das Muster wissen muss. Ihre Fläche ist die eines Parallelogramms:

$$F = a \cdot b \cdot \sin\gamma.$$

Die Wahl der Elementarzelle ist nicht eindeutig. In Abb. 1.3 sind vier mögliche Zellen desselben Gitters eingezeichnet. Um zu sehen, wie viele Gitterpunkte eine Zelle enthält, zählt man anteilig. Ein Gitterpunkt im Innern gehört ganz zur Zelle. Einer auf einer Kante gehört zu den beiden Zellen, die dort aneinanderstossen, und zählt zur Hälfte. Ein Gitterpunkt an einer Ecke gehört zu allen vier Zellen, die sich dort treffen; jede erhält einen Anteil. Die Anteile der vier Ecken einer Zelle ergänzen sich zu einem ganzen Gitterpunkt. Gleich gross, je ¼, sind sie nur in einer rechtwinkligen Zelle; in einer schiefwinkligen erhält eine Ecke mit spitzem Winkel weniger, eine mit stumpfem mehr, nämlich den Anteil ihres Winkels an 360° (in einer Raute mit 60° und 120° also ⅙ und ⅓). Die Zellen I, II und III enthalten so je einen Gitterpunkt. Eine Zelle mit nur einem Gitterpunkt heisst **primitiv**; sie wird von primitiven Gittervektoren aufgespannt. Alle primitiven Zellen eines Gitters haben dieselbe Fläche, gleich welche Gittervektoren man wählt: Ihre Kopien überdecken die Ebene, und auf jede Kopie kommt genau ein Gitterpunkt. Die Fläche je Gitterpunkt ist aber eine Eigenschaft des Gitters.

Ein Hinweis zum Zählen: Verschiebt man die Zelle in Gedanken ein wenig, bis kein Gitterpunkt mehr auf ihrem Rand liegt, muss man nur die Punkte im Innern zählen. Das Ergebnis ist dasselbe.

Zelle IV enthält dagegen zusätzlich einen Gitterpunkt in der Mitte, also 1 + 1 = 2 Gitterpunkte, und hat die doppelte Fläche. Eine solche Zelle heisst **nichtprimitiv**. Aus demselben Grund ist die Fläche einer nichtprimitiven Zelle ein ganzzahliges Vielfaches der Fläche einer primitiven, so viele Male, wie sie Gitterpunkte enthält. Ihre Kopien überdecken die Ebene, wenn man sie um ganzzahlige Vielfache ihrer eigenen Kantenvektoren verschiebt; das Gitter hat aber weitere Translationen, etwa die zum Punkt in der Mitte von Zelle IV.

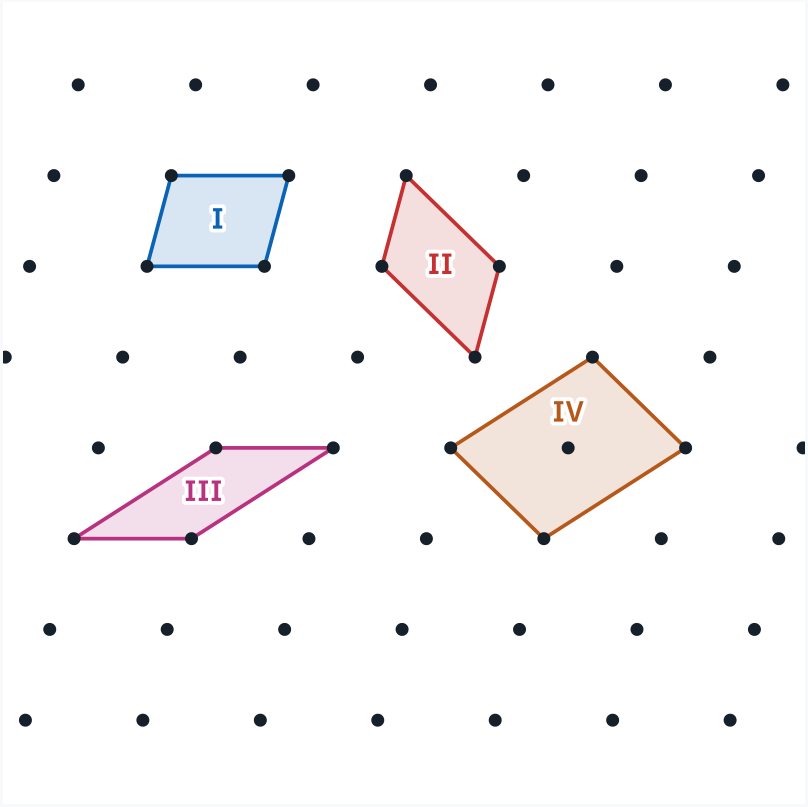


Abb. 1.3 Vier Elementarzellen desselben Gitters. I, II und III sind primitiv und haben dieselbe Fläche; IV ist nichtprimitiv, enthält zwei Gitterpunkte und hat die doppelte Fläche.

Weil alle primitiven Zellen gleich gut sind, braucht man Regeln für die Wahl: Die Gittervektoren sollen möglichst kurz sein und die Symmetrie des Gitters zeigen, also parallel oder senkrecht zu seinen Spiegellinien liegen (Kapitel 2) und möglichst einen Winkel von 90° oder 120° einschliessen. Manchmal

widersprechen sich diese Regeln. Dann wählt man eine nichtprimitive Zelle, die die Symmetrie besser wiedergibt (Kapitel 2).

> MERKE
>
> **Die Elementarzelle ist das von a und b aufgespannte Parallelogramm, Fläche $F = a\,b \sin\gamma$. Gitterpunkte zählen anteilig: im Innern ganz, auf einer Kante zur Hälfte; die Anteile der vier Ecken ergänzen sich zu einem Gitterpunkt. Eine primitive Zelle enthält einen Gitterpunkt. Alle primitiven Zellen eines Gitters haben dieselbe Fläche; nichtprimitive ein ganzzahliges Vielfaches davon.**

1.4 Bruchkoordinaten

Die Gittervektoren bilden zugleich ein Koordinatensystem. Jeder Punkt der Ebene lässt sich schreiben als

$$r = x\,a + y\,b.$$

Die Zahlen (x, y) heissen **Bruchkoordinaten** (auch relative oder fraktionale Koordinaten): Sie messen in Bruchteilen der Gittervektoren, nicht in Ångström (1 Å = 0,1 nm, die übliche Einheit für Atomabstände). Der Punkt P in Abb. 1.4 liegt bei (¾, ⅓): Man geht ¾ von a nach unten und dann ⅓ von b nach rechts.

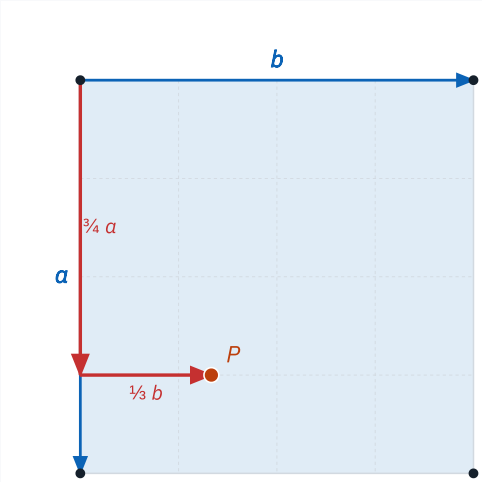
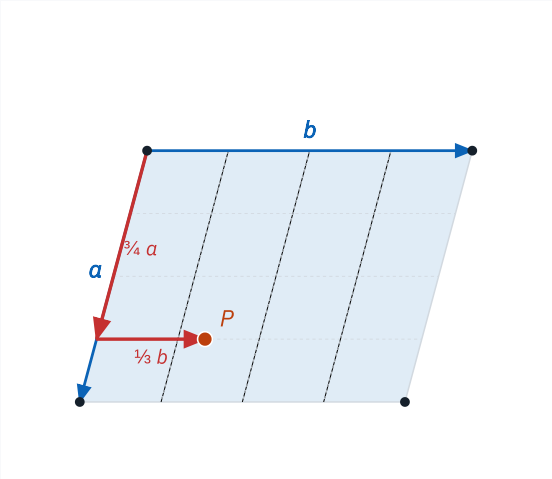


Abb. 1.4a Quadratische Zelle: P = ¾ a + ⅓ b.



b Schiefwinklige Zelle: derselbe Punkt P = ¾ a + ⅓ b.

Abb. 1.4 Bruchkoordinaten sind unabhängig von der Metrik. In beiden Zellen liegt P bei (¾, ⅓), obwohl sein Abstand vom Ursprung verschieden ist.

Weil Bruchkoordinaten in Einheiten der Gittervektoren messen, hängen sie nicht von der Metrik ab. Ändern sich die Gitterkonstanten oder der Gitterwinkel, behält ein Punkt seine Koordinaten; nur sein Ort in Ångström ändert sich (Abb. 1.4). Man kann sich die Zelle als Gummituch vorstellen, auf das die Koordinaten gezeichnet sind: Zieht man daran, wandern die Punkte mit. Dasselbe Bild verwendet das Skript „Stereographische Projektion“ für die Miller'schen Indizes (Abschnitt 1.2).

Drei Regeln braucht man ständig:

- **Gitterpunkte** haben ganzzahlige Koordinaten (u, v). Die Ecken der Zelle sind (0, 0), (1, 0), (0, 1) und (1, 1).

- **Punkte in der Zelle** haben Koordinaten $0 \le x < 1$ und $0 \le y < 1$. Die Mitte der Zelle ist (½, ½), die Mitten der Kanten sind (½, 0) und (0, ½).
- **Gleichwertige Punkte:** Unterscheiden sich zwei Punkte nur um ganze Zahlen, geht der eine durch eine Gittertranslation in den anderen über. In einem periodischen Muster sieht es an beiden Stellen gleich aus.

Ein Beispiel zur dritten Regel: (¼, ⅔) und (1¼, −⅓) unterscheiden sich um (1, −1); die Translation $t = a - b$ führt den einen Punkt in den anderen über. Man darf deshalb ganze Zahlen addieren oder abziehen, bis $0 \le x < 1$ und $0 \le y < 1$ gilt. Die Regeln gelten für eine primitive Zelle. In einer nichtprimitiven Zelle liegen weitere Gitterpunkte bei nicht ganzzahligen Koordinaten, etwa bei (½, ½); auch die Verschiebung zu ihnen ist dann eine Translation (Abschnitt 1.6 „Wenn die Basis das Gitter ändert“).

Die International Tables schreiben ein Minuszeichen als Strich über dem Buchstaben: $\bar{x}$ steht für $-x$. Diese Schreibweise kommt bei den Symmetrieoperationen wieder vor (Kapitel 4).

MERKE

Bruchkoordinaten (x, y) beschreiben einen Punkt als $x\,a + y\,b$. Sie hängen nicht von der Metrik ab. In einer primitiven Zelle haben Gitterpunkte ganzzahlige Koordinaten; Punkte, die sich um ganze Zahlen unterscheiden, gehen durch eine Gittertranslation auseinander hervor.

IN DER APP

Im Modus „Ebenengruppen“ stellen die Regler unter „Objekt“ die Bruchkoordinaten x und y des Fähnchens ein. Im Modus „Gitter und Basis“ nennen die Kenndaten die Lage jedes Motivs in Bruchkoordinaten.

VERTIEFUNG · **Abstände aus Bruchkoordinaten**

Bruchkoordinaten sagen, wo ein Atom liegt, aber nicht direkt, wie weit es von einem anderen entfernt ist. Für Bindungslängen braucht man die Metrik. Liegen zwei Punkte um Δx und Δy auseinander, ist ihr Abstand nach dem Kosinussatz

$$d^2 = (\Delta x)^2\, a^2 + (\Delta y)^2\, b^2 + 2\,\Delta x\,\Delta y\, a\, b \cos\gamma .$$

Im rechtwinkligen Gitter fällt der letzte Term weg. Im hexagonalen Gitter ($a = b$, $\gamma = 120°$, $\cos\gamma = -½$) wird daraus $d^2 = ((\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 - \Delta x\,\Delta y)\,a^2$. Beispiel Graphen (Abschnitt 1.5 „Gitter und Basis“): Zwei benachbarte Kohlenstoffatome liegen bei (⅓, ⅔) und (⅔, ⅓), also $\Delta x = ⅓$, $\Delta y = -⅓$. Das ergibt $d^2 = (1/9 + 1/9 + 1/9)\,a^2 = a^2/3$ und $d = a/\sqrt{3}$. Mit der Gitterkonstante des Graphits, $a = 2{,}46$ Å, ist der Abstand 1,42 Å.

1.5 Gitter und Basis

Ein Gitter allein ist noch kein Kristall. Erst wenn man jedem Gitterpunkt dieselbe Gruppe von Bausteinen zuordnet, entsteht eine Kristallstruktur. Die Anordnung der Bausteine in der Elementarzelle heisst **Basis**; man gibt sie durch die Bruchkoordinaten der Bausteine an. Kurz:

Gitter + Basis = Kristallstruktur

Die Gittertranslationen wirken auf jeden Baustein gleich. Jeder Baustein der Basis bildet deshalb mit seinen Kopien ein Gitter, und diese Gitter sind gleich, nur gegeneinander verschoben. Wo man den Ursprung relativ zur Basis legt, ist frei: Ein anderer Ursprung verschiebt alle Koordinaten um denselben

Betrag und ändert an der Struktur nichts.

In manchen Büchern heisst die Basis auch **Motiv**. In der App ist ein Motiv ein einzelner Baustein der Basis, etwa ein Atom oder eine Form mit eigener Symmetrie; die Basis besteht aus einem oder mehreren Motiven. Das ist eine Festlegung der App.

Ein Beispiel zeigt, warum man Gitter und Basis auseinanderhalten muss. In einer Graphenschicht liegen die Kohlenstoffatome auf den Ecken von Sechsecken wie in einer Bienenwabe (Abb. 1.5). Jedes Atom hat drei Nachbarn im Winkel von 120°. Trotzdem bilden die Atome kein Gitter. Bei der Hälfte der Atome zeigen die drei Bindungen in bestimmte Richtungen, bei der anderen Hälfte genau in die Gegenrichtungen; die beiden Umgebungen gehen erst durch eine Drehung (etwa um 180°) oder eine Spiegelung ineinander über. Die Umgebung ist also gleich, aber nicht gleich ausgerichtet, und keine Translation bringt ein Atom der einen Hälfte auf eines der anderen.

Das Gitter des Graphens ist hexagonal ($a = b$, $\gamma = 120°$). Die Basis besteht aus zwei Kohlenstoffatomen, bei (⅓, ⅔) und (⅔, ⅓). Mit dieser Wahl des Ursprungs liegen die Gitterpunkte in den Mitten der Sechsecke; legt man den Ursprung auf ein Atom, lauten die Koordinaten (0, 0) und (⅔, ⅓).

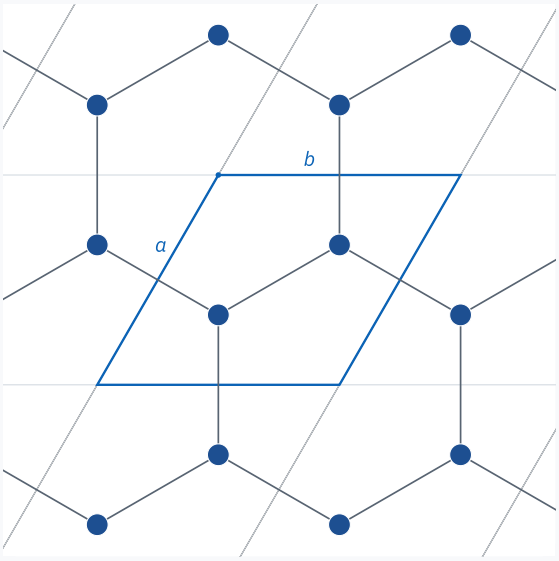
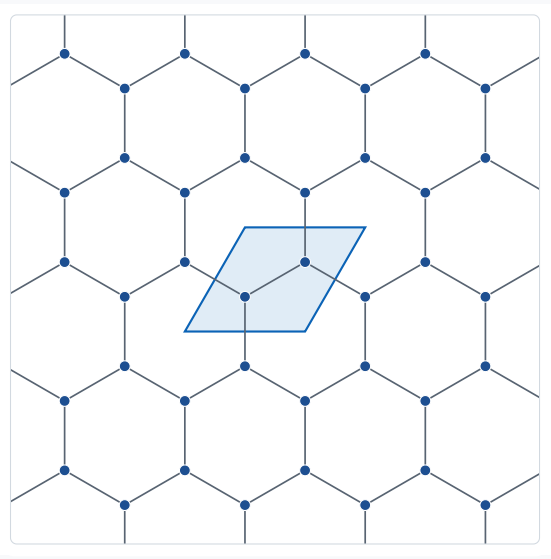


Abb. 1.5a Elementarzelle des Graphens mit der Basis aus zwei Atomen; Linien: Bindungen. In der App öffnen →



b Ausschnitt der Schicht mit der Elementarzelle. In der App öffnen →

Abb. 1.5 Graphen: Gitter hexagonal, Basis zwei Atome. Die Atome selbst bilden kein Gitter (nach Hoffmann Abb. 2.72–2.75).

MERKE

Kristallstruktur = Gitter + Basis. Das Gitter sagt, wie sich die Struktur wiederholt, die Basis, was sich wiederholt. Gleich aussehende Atome bilden nur dann ein Gitter, wenn auch ihre Umgebung gleich ausgerichtet ist.

IN DER APP

Der Modus „Gitter und Basis“ baut eine Struktur aus einem Gitter (b/a und γ unter „Gitter“) und einer Basis aus Motiven auf. „Vorgabe“ lädt fertige Strukturen, darunter Graphen. Mit „Hinzufügen“ setzt man weitere Motive, mit „Wählen und ziehen“ verschiebt man sie; unter „Basis“ lassen sie sich drehen und, wo es einen Unterschied macht (Fähnchen, Ornamente, Windräder), spiegeln. „Bindungen (nächste Nachbarn)“ verbindet Atome im kleinsten Abstand.

1.6 Wenn die Basis das Gitter ändert

Wer eine Struktur aufbaut, beginnt oft mit einer Zelle und setzt die Basis hinein. In der App heisst diese Zelle die **gegebene Zelle**. Ihre Translationen gehören immer zur Struktur, denn die Basis wird ja mit ihnen wiederholt. Es kann aber weitere Translationen geben, die man nicht hineingesteckt hat. Dann hat das Gitter der Struktur mehr Gitterpunkte als das der gegebenen Zelle, und die gegebene Zelle ist nichtprimitiv.

Abb. 1.6 zeigt das an zwei Dreiecken in einer rechteckigen Zelle, eines bei (0, 0), eines bei (½, ½). In Abb. 1.6a hat das Dreieck in der Mitte eine andere Farbe; es steht für eine andere Atomsorte. Verschiebt man die Struktur um ½a + ½b, kommt ein blaues Dreieck auf ein oranges. Das ist keine Symmetrieoperation. Die einzigen Translationen sind die der gegebenen Zelle, und sie ist primitiv.

In Abb. 1.6b sind beide Dreiecke gleich. Jetzt bringt die Verschiebung um ½a + ½b jedes Dreieck auf ein gleiches: Sie ist eine neue Translation. Die gegebene Zelle enthält damit zwei Gitterpunkte, bei (0, 0) und bei (½, ½), und ist nichtprimitiv. Eine primitive Zelle hat die halbe Fläche, etwa die von a und ½(a + b) aufgespannte. Warum man trotzdem meist die rechteckige Zelle verwendet, zeigt Kapitel 2.

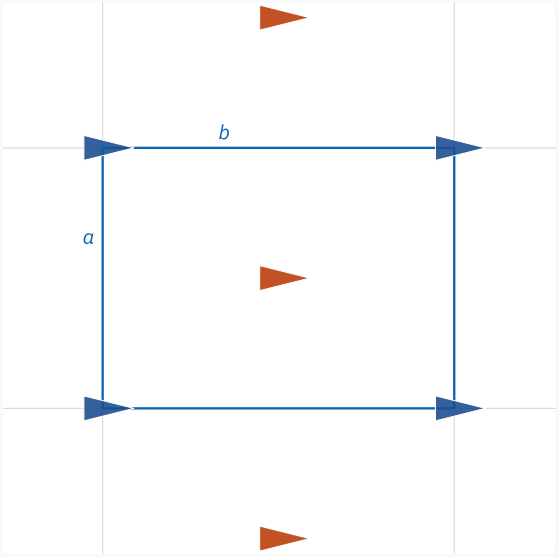
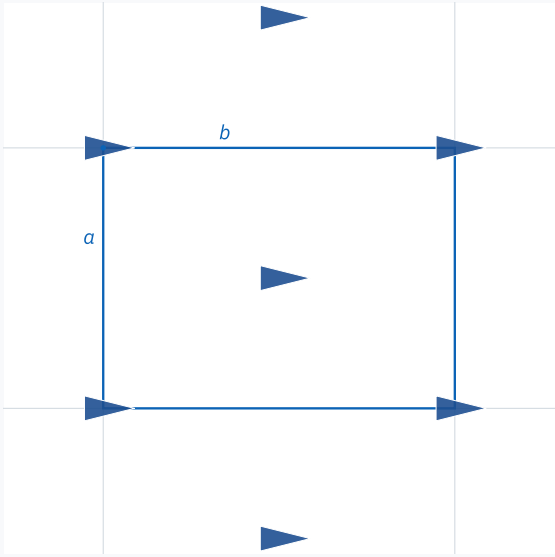


Abb. 1.6a Verschiedene Dreiecke: Die gegebene Zelle ist primitiv. In der App öffnen →



b Gleiche Dreiecke: Die Verschiebung um ½a + ½b ist eine Translation; die Zelle enthält zwei Gitterpunkte. In der App öffnen →

Abb. 1.6 Dieselbe gegebene Zelle, verschiedene Basis. Ob sie primitiv ist, entscheidet die Basis, nicht die Zelle.

Neue Translationen können die Elementarzelle auch drehen. Abb. 1.7a zeigt eine quadratische Zelle mit einem blauen Atom an der Ecke und zwei orangen Atomen auf den Kantenmitten. Entfernt man das blaue Atom, bleiben die orangen bei (½, 0) und (0, ½) übrig (Abb. 1.7b). Die Verschiebung um ½a + ½b bringt

das eine auf das andere; sie ist eine neue Translation. Die neue primitive Zelle ist um 45° gedreht und hat die halbe Fläche. Ihre Gittervektoren sind $a' = ½(a - b)$ und $b' = ½(a + b)$.

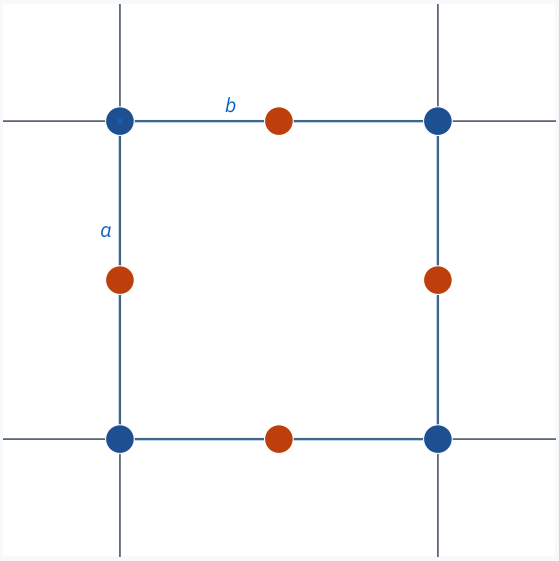
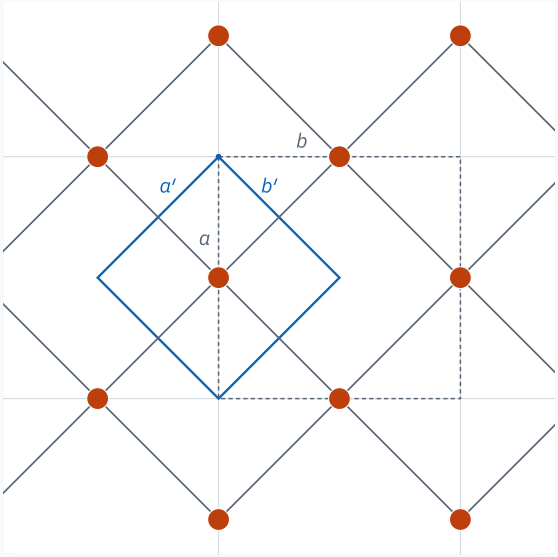


Abb. 1.7a Zwei Atomsorten: Die gegebene Zelle ist primitiv. In der App öffnen →



b Ohne das blaue Atom: Die App zeichnet die kleinere Zelle a', b' ein; die gegebene Zelle ist gestrichelt. In der App öffnen →

Abb. 1.7 Ein Atom entfernt, doppelt so viele Gitterpunkte: Die neue Elementarzelle ist kleiner und um 45° gedreht.

Für die Beschreibung der Struktur heisst das: Die Struktur bleibt dieselbe, gleich in welcher Zelle man sie beschreibt. Was sich mit der Zelle ändert, sind die Gittervektoren, die Koordinaten der Atome und die Zahl der Atome je Zelle. Wie man unter den möglichen Zellen die richtige wählt, hängt von der Symmetrie ab. Die App wählt die Zelle nach den Regeln der International Tables und nennt sie die konventionelle Zelle; sie ist Thema von Kapitel 2.

MERKE

Das Gitter gehört zur Struktur, nicht zur Zelle, mit der man sie aufgebaut hat. Werden zwei Bausteine der Basis durch eine Verschiebung aufeinander abgebildet, die mit allen anderen Bausteinen ebenfalls passt, ist diese Verschiebung eine neue Translation: Das Gitter erhält zusätzliche Gitterpunkte, und die gegebene Zelle ist nichtprimitiv.

IN DER APP

Im Modus „Gitter und Basis“ prüft die App nach jeder Änderung, welche Translationen die Struktur hat. Enthält die gegebene Zelle mehr als einen Gitterpunkt, sagen es die Kenndaten unter „Konventionelle Zelle nach ITA“. Die gegebene Zelle ist gestrichelt, wenn die App eine andere Zelle wählt. Zum Ausprobieren: In der Vorgabe „Lieb-Gitter“ das blaue Atom wählen und „Gewähltes Motiv entfernen“ (× im gestrichelten Rahmen über der Struktur).

ZUSAMMENFASSUNG

- Ein periodisches Muster geht durch Translationen in sich über. Alle Punkte, die aus einem Punkt durch Translationen hervorgehen, bilden das Gitter; jeder Gitterpunkt hat dieselbe, gleich ausgerichtete Umgebung.
- Mit primitiven Gittervektoren ist jede Translation $u\,a + v\,b$ mit ganzen u, v. Die Gittervektoren spannen die Elementarzelle auf; Gitterparameter a, b, γ; Fläche $a\,b \sin\gamma$. a zeigt nach unten, b nach rechts (ITA).
- Eine primitive Zelle enthält einen Gitterpunkt; alle primitiven Zellen haben dieselbe Fläche. Nichtprimitive Zellen enthalten mehrere Gitterpunkte.
- Bruchkoordinaten (x, y) messen in Bruchteilen der Gittervektoren und hängen nicht von der Metrik ab. Punkte, die sich um ganze Zahlen unterscheiden, sind durch eine Gittertranslation verbunden.
- Kristallstruktur = Gitter + Basis. Ändert man die Basis, können neue Translationen entstehen; das Gitter erhält zusätzliche Gitterpunkte, und die primitive Zelle wird kleiner und unter Umständen gedreht.

ZUR VERTIEFUNG

- Abstände folgen aus Bruchkoordinaten und Metrik: $d^2 = (\Delta x)^2 a^2 + (\Delta y)^2 b^2 + 2\,\Delta x\,\Delta y\,a\,b\cos\gamma$.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 3.2 (Gitterebene oder Netzebene, Elementarmasche, S. 12), 3.3 (Gitter unendlich, Aufstellung a nach vorn, b nach rechts, c nach oben; Elementarzelle; primitiv, ein Gitterpunkt an einer Ecke gehört zu allen dort zusammenstossenden Zellen, S. 12–13), 3.4.1 (Gitterpunkt uvw, S. 13–14), Kap. 4 (Basis; Gitter + Basis = Kristallstruktur; Koordinaten x, y, z mit $0 \le x, y, z < 1$; gleiche Bausteine auf kongruenten Gittern, Abb. 4.1–4.3, S. 25–27), Abschn. 6.2 (zentrierte Elementarmasche, Abb. 6.10, S. 73–74), Aufgabe 12.7 (Graphit, a = 2,46 Å; Atome einer Schicht bei 0, 0 und ⅔, ⅓, also mit dem Ursprung auf einem Atom; S. 323), Abschn. 15.3 (Atomabstände, Tab. 15.3, S. 357).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 1.9 (Gitter: alle Punkte mit derselben Umgebung, unendlich ausgedehnt; Gitter und Basis/Motiv; kongruente Gitter, Abb. 1.33–1.37, S. 28–31), 2.3.1 (primitive Elementarzellen; Regeln zur Wahl der Elementarzelle, Abb. 2.27–2.29, S. 52–56), 2.4 (fraktionale Koordinaten, S. 64–65), 2.7 (Bienenwabenmuster und Translationsgitter, Abb. 2.72–2.75, S. 82–84), Kap. 4 (Muster in Alltag und Kunst, S. 130).
- International Tables for Crystallography, Vol. A, 5. Aufl., hrsg. von Th. Hahn, Springer, Dordrecht (2006), Abschn. 2.2.6.1 (Diagramme der Ebenengruppen: a nach unten, b nach rechts, S. 20), 2.2.6.4 (übliche Orientierung der Diagramme, Ursprung oben links, S. 22), Part 6 (Querstrich für das Minuszeichen in den Koordinaten, z. B. Ebenengruppe $p2$, S. 93).

2 Symmetrie des Gitters

Ein Gitter hat neben seinen Translationen auch Drehpunkte und oft Spiegellinien. Diese Symmetrie legt fest, welche Gitter es gibt und wie man ihre Elementarzelle wählt.

LERNZIELE

- Drehpunkte und Spiegellinien in ein Gitter einzeichnen und ihre Symbole angeben
- begründen, warum es in einem Gitter nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehpunkte gibt
- die vier Kristallsysteme der Ebene mit ihren Bedingungen an die Metrik nennen
- erklären, wann man eine zentrierte Elementarzelle wählt, und die fünf Bravais-Gitter der Ebene angeben
- gegebene und konventionelle Zelle unterscheiden

ZUR VERTIEFUNG

- die Netzebenen einiger Flächen kubischer Kristalle einem Bravais-Gitter der Ebene zuordnen
- begründen, warum es kein zentriertes quadratisches Gitter gibt

2.1 Drehpunkte und Spiegellinien

In der Ebene gibt es neben der Translation zwei Arten von Punktsymmetrieoperationen: die Drehung um einen Punkt und die Spiegelung an einer Geraden. Das Symmetrieelement einer Drehung um 360°/*n* ist ein ***n*-zähliger Drehpunkt**; im Raum entspricht ihm eine Drehachse senkrecht zur Ebene. Das Symmetrieelement einer Spiegelung ist eine **Spiegellinie** (Symbol *m*), im Raum eine Spiegelebene senkrecht zur Ebene. Eine Inversion braucht man in der Ebene nicht: Eine Punktspiegelung an einem Punkt der Ebene ist dasselbe wie eine Drehung um 180° um diesen Punkt.

Die International Tables zeichnen die Drehpunkte als gefüllte Vielecke: eine Linse für 2, ein Dreieck für 3, ein Quadrat für 4 und ein Sechseck für 6. Spiegellinien sind kräftige Linien. App und Skript verwenden dieselben Symbole.

Jedes Gitter hat 2-zählige Drehpunkte, und zwar auf allen Gitterpunkten: Dreht man das Gitter um 180° um einen Gitterpunkt, kommt jeder Gitterpunkt wieder auf einen Gitterpunkt. Dazu kommen 2-zählige Drehpunkte auf den Mitten der Kanten und in der Mitte der Zelle (Abb. 2.1). Das sind vier Arten von Drehpunkten, bei (0, 0), (½, 0), (0, ½) und (½, ½). Keine Translation führt einen von ihnen in einen der anderen über. Zwei Symmetrieelemente heissen **gleichwertig**, wenn eine Symmetrieoperation das eine in das andere überführt; im schiefwinkligen Gitter tut das keine, die vier Drehpunkte sind nicht gleichwertig. In Gittern höherer Symmetrie kann es anders sein: Im quadratischen Gitter führt der 4-zählige Drehpunkt (½, 0) in (0, ½) über. Warum die Drehpunkte auf den Kantenmitten zwangsläufig entstehen, zeigt Kapitel 4.

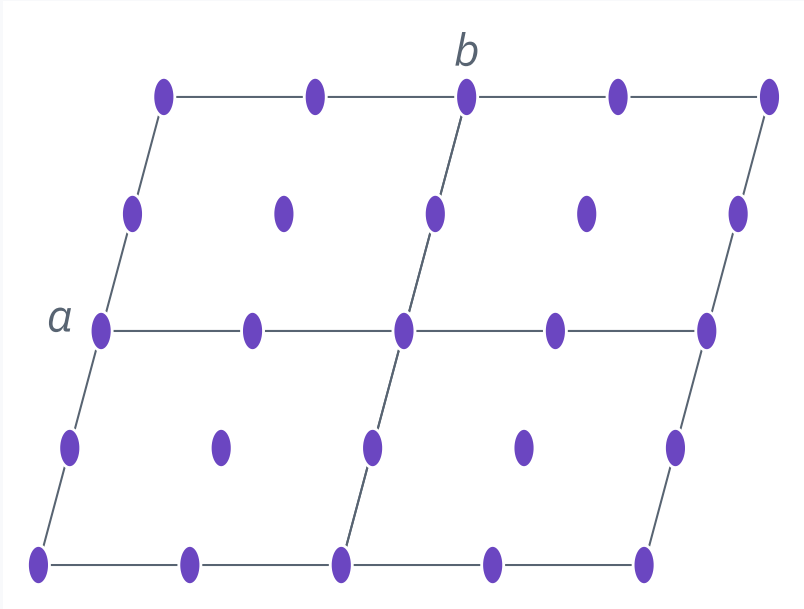


Abb. 2.1 Vier Zellen eines schiefwinkligen Gitters mit allen 2-zähligen Drehpunkten: auf den Gitterpunkten, den Kantenmitten und in den Zellmitten. In der App öffnen →

Abb. 2.1 zeigt auch, was die Periodizität bewirkt: Jedes Symmetrieelement wiederholt sich mit allen Translationen. Ein Gitter hat deshalb unendlich viele Drehpunkte gleicher Art, und hat es eine Spiegellinie, dann auch unendlich viele parallele. Für die Punktgruppe, also die Symmetrie, die man an der äusseren Form eines Kristalls sieht, zählt nur ihre Orientierung, nicht ihre Lage.

MERKE

In der Ebene gibt es Drehpunkte (Symbol nach Zähligkeit) und Spiegellinien (m); die Inversion ist eine Drehung um 180°. Jedes Gitter hat 2-zählige Drehpunkte auf den Gitterpunkten, den Kantenmitten und den Zellmitten. Die Translationen wiederholen jedes Symmetrieelement.

2.2 Nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehpunkte

Ein Gitter kann nicht jede Drehsymmetrie haben. Angenommen, auf einem Gitterpunkt sitzt ein n-zähliger Drehpunkt. Die Drehungen bringen einen benachbarten Gitterpunkt an n Stellen auf einem Kreis, und alle diese Stellen müssen wieder Gitterpunkte sein. Bei $n = 4$ ergänzen sich diese Punkte zu einem quadratischen Gitter, bei $n = 3$ und 6 zu einem hexagonalen.

Bei $n = 5$ bilden sie ein regelmässiges Fünfeck (Abb. 2.2). Die Punkte II und V liegen auf einer Geraden parallel zu der durch III und IV. In einem Gitter haben parallele Gittergeraden dieselbe Translationsperiode; beide Strecken müssten deshalb ganzzahlige Vielfache dieser Periode sein, und ihr Verhältnis wäre ein Bruch. Die Strecke II–V ist aber 1,618…-mal so lang wie III–IV, und dieses Verhältnis (der goldene Schnitt) ist kein Bruch: Kein Gitter enthält beide Strecken. Ein 5-zähliger Drehpunkt ist in einem Gitter also unmöglich, und dasselbe Argument schliesst alle Zähligkeiten über 6 aus.

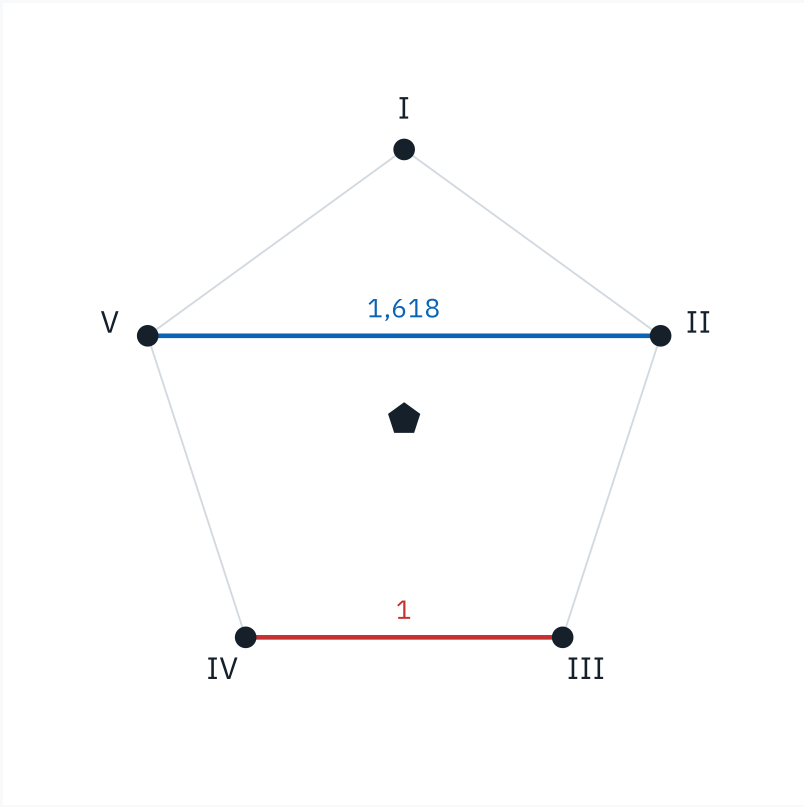


Abb. 2.2 Ein 5-zähliger Drehpunkt erzeugt aus einem Punkt ein regelmässiges Fünfeck. Die parallelen Strecken II–V und III–IV stehen im Verhältnis 1,618… : 1. In einem Gitter müsste es ein Bruch sein (nach Borchardt-Ott & Sowa Abb. 6.8a).

Allgemein gilt für den Drehwinkel ε einer Drehung, die ein Gitter auf sich abbildet, $\cos \varepsilon = m/2$ mit einer ganzen Zahl m. Weil der Kosinus zwischen −1 und 1 liegt, bleiben nur $m = -2, -1, 0, 1, 2$:

m	cos ε	ε	Zähligkeit
2	1	0° (360°)	1
1	½	60°	6
0	0	90°	4
−1	−½	120°	3
−2	−1	180°	2

Anschaulich zeigt sich dasselbe beim Parkettieren: Mit gleichseitigen Dreiecken, Quadraten oder regelmässigen Sechsecken lässt sich die Ebene lückenlos auslegen, mit regelmässigen Fünf-, Sieben- oder Achtecken nicht. Ein Motiv mit 5-zähliger Symmetrie kann dagegen sehr wohl auf den Punkten eines Gitters sitzen; das Muster als Ganzes hat dann aber keinen 5-zähligen Drehpunkt.

> **Merke**
>
> **Ein Gitter kann nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehpunkte haben ($\cos \varepsilon = m/2$). 5-zählige und mehr als 6-zählige Drehpunkte sind mit der Periodizität unvereinbar.**

2.3 Symmetrie und Metrik: die vier Kristallsysteme

Die Symmetrie eines Gitters hängt an seiner Metrik. Ein 4-zähliger Drehpunkt dreht a in b; das geht nur, wenn beide gleich lang sind und einen rechten Winkel bilden. Ein 3- oder 6-zähliger Drehpunkt verlangt $a = b$ und $\gamma = 120°$. Eine Spiegellinie verlangt weniger: Hat ein Gitter eine Spiegellinie, kann man immer Gittervektoren parallel und senkrecht zu ihr legen. Hat das Gitter Spiegellinien, aber keinen 3-, 4- oder 6-zähligen Drehpunkt, wählt man deshalb eine rechtwinklige Zelle entlang der Spiegellinien; ob sie primitiv oder zentriert ist, zeigt Abschnitt 2.4 „Wahl der Elementarzelle und das zentrierte Gitter“. Quadratische und hexagonale Gitter haben ebenfalls Spiegellinien, hier aber richtet sich die Zelle nach dem Drehpunkt höchster Zähligkeit: $\gamma = 90°$ bzw. $120°$. Auch in diesen Zellen liegen Spiegellinien entlang der Kanten, dazu weitere in anderen Richtungen (Abb. 2.3d, e). Eine rechtwinklige Zelle liesse sich auch hier finden, sie würde die Symmetrie aber schlechter zeigen. Nach ihrer Symmetrie teilt man die Gitter der Ebene in vier **Kristallsysteme** ein. Die Bedingungen an die Metrik gelten für die Zelle, die man nach diesen Regeln wählt (Abschnitt 2.5 „Die konventionelle Zelle“):

KRISTALLSYSTEM	METRIK	PUNKTGRUPPE DES GITTERS	BRAVAIS-GITTER
schiefwinklig	keine Bedingung	2	*mp*
rechteckig	$\gamma = 90°$	2*mm*	*op*, *oc*
quadratisch	$a = b$, $\gamma = 90°$	4*mm*	*tp*
hexagonal	$a = b$, $\gamma = 120°$	6*mm*	*hp*

Die fünf Gittertypen der letzten Spalte heissen **Bravais-Gitter**. Ihre Bezeichnungen folgen den International Tables: Der erste Buchstabe steht für das System (*m*, *o*, *t*, *h* nach den räumlichen Gegenstücken monoklin, orthorhombisch, tetragonal, hexagonal), der zweite für primitiv (*p*) oder zentriert (*c*). Das rechteckige System hat zwei Bravais-Gitter; warum, zeigt Abschnitt 2.4 „Wahl der Elementarzelle und das zentrierte Gitter“. Die Punktgruppe nennt die Symmetrie um einen Gitterpunkt: 2*mm* etwa heisst ein 2-zähliger Drehpunkt mit zwei Spiegellinien durch ihn (Kapitel 3). Bei Borchardt-Ott heisst das rechteckige System „rechtwinklig“.

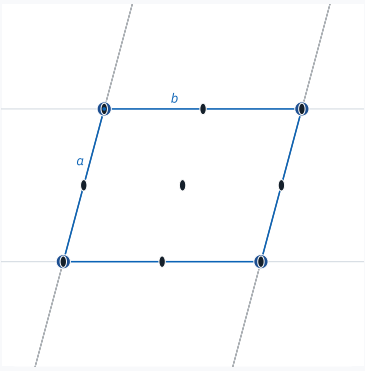
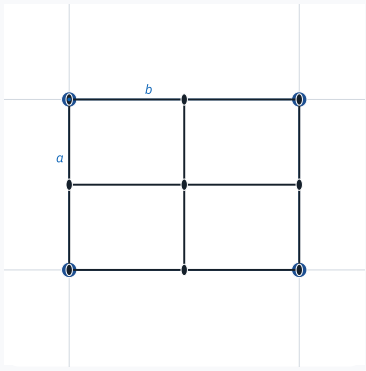
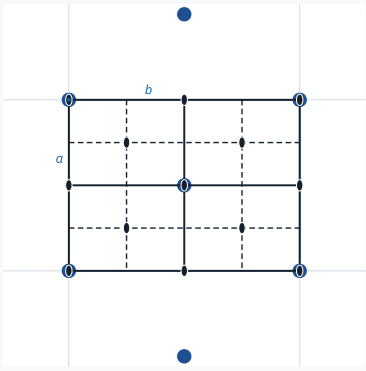


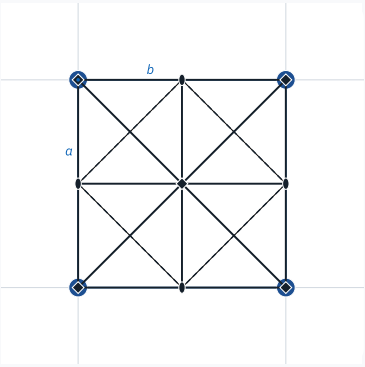
Abb. 2.3a schiefwinklig, *mp* App →



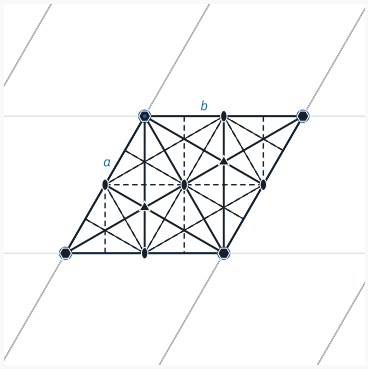
b rechteckig, *op* App →



c rechteckig zentriert, *oc* App →



d quadratisch, *tp* App →



e hexagonal, *hp* App →

Abb. 2.3 Die fünf Bravais-Gitter der Ebene mit allen Symmetrieelementen in einer Elementarzelle. Die gestrichelten Linien in c, d und e sind Gleitspiegellinien: Eine Spiegelung, die mit einer Verschiebung entlang der Linie gekoppelt ist. Sie entstehen zwangsläufig aus Spiegellinien und Translationen (Kapitel 4).

Ein Gitter mit $a = b$ und $\gamma = 90°$ ist immer quadratisch. Für eine Kristallstruktur gilt das nicht: Ihr Kristallsystem richtet sich nach der Symmetrie der ganzen Struktur, also von Gitter und Basis zusammen (Kapitel 3). Eine Struktur mit quadratischer Metrik kann deshalb zum rechteckigen oder sogar zum schiefwinkligen System gehören, wenn ihre Basis eine geringere Symmetrie hat als das Gitter.

MERKE

Vier Kristallsysteme der Ebene: schiefwinklig (keine Bedingung, 2), rechteckig ($\gamma = 90°$, 2*mm*), quadratisch ($a = b$, $\gamma = 90°$, 4*mm*), hexagonal ($a = b$, $\gamma = 120°$, 6*mm*). Die Symmetrie erzwingt die Metrik.

IN DER APP

Im Modus „Ebenengruppen“ lassen sich unter „Gitter“ nur die Parameter verändern, die das Kristallsystem frei lässt. Die gewählte Gruppe bleibt dabei erhalten; bei besonderen Werten (etwa $b = a$ im rechteckigen System) hat die Metrik zufällig mehr Symmetrie als die Gruppe verlangt. Wie sich die Symmetrie ändert, wenn man das Gitter ohne die Bindung an ein Kristallsystem verändert, zeigt der Modus „Gitter und Basis“.

VERTIEFUNG · **Netzebenen von Kristallflächen**

Die Atome einer Kristallfläche liegen auf einer Netzebene des räumlichen Gitters. Welches Bravais-Gitter der Ebene sie bilden, hängt vom Gitter und von der Fläche ab; das ist zum Beispiel für die Katalyse an Metalloberflächen wichtig. In einem kubisch primitiven Gitter ist die Netzebene (100)

quadratisch, (110) rechteckig mit dem Seitenverhältnis 1 : √2 und (111) hexagonal. In einem kubisch innenzentrierten Gitter ist (110) dagegen rechteckig zentriert. Die Indizes und die Lage dieser Flächen beschreibt das Skript „Stereographische Projektion“, Kapitel 1.

2.4 Wahl der Elementarzelle und das zentrierte Gitter

Abschnitt 1.3 „Die Elementarzelle“ hat gezeigt, dass jedes Gitter viele primitive Zellen hat. Man wählt die Zelle nach drei Regeln:

1. Die Gittervektoren sollen möglichst kurz sein.
2. Die Zelle soll die Symmetrie des Gitters zeigen: Die Gittervektoren liegen parallel oder senkrecht zu den Spiegellinien.
3. Die Gittervektoren sollen möglichst einen Winkel von 90° oder 120° einschliessen.

Meist erfüllt eine primitive Zelle alle drei Regeln. Eine Ausnahme ist das Gitter in Abb. 2.4. Seine kürzesten Gittervektoren sind gleich lang und schliessen 70° ein; die primitive Zelle ist ein Rhombus. Das Gitter hat Spiegellinien, und zwar entlang der beiden Diagonalen des Rhombus. Keine primitive Zelle hat aber beide Kanten parallel oder senkrecht zu diesen Spiegellinien. Wählt man stattdessen die Zelle mit den Kanten $a' = a + b$ und $b' = -a + b$, ist sie rechteckig und liegt entlang der Spiegellinien. Sie enthält zwei Gitterpunkte, einen an den Ecken (die vier Anteile ergeben zusammen einen) und einen in der Mitte, bei (½, ½). Eine solche Zelle heisst **zentriert**.

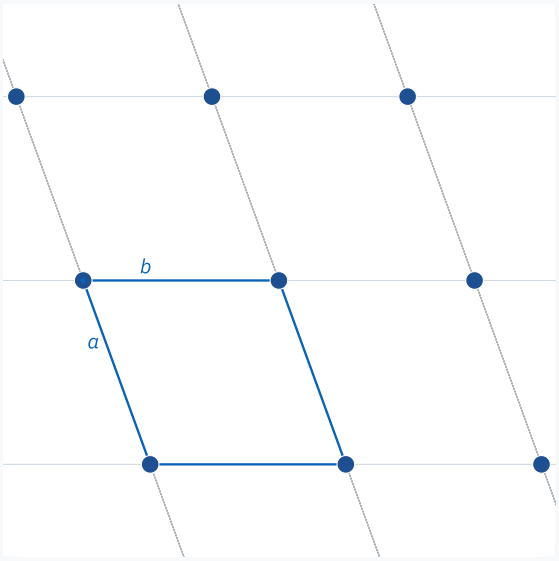
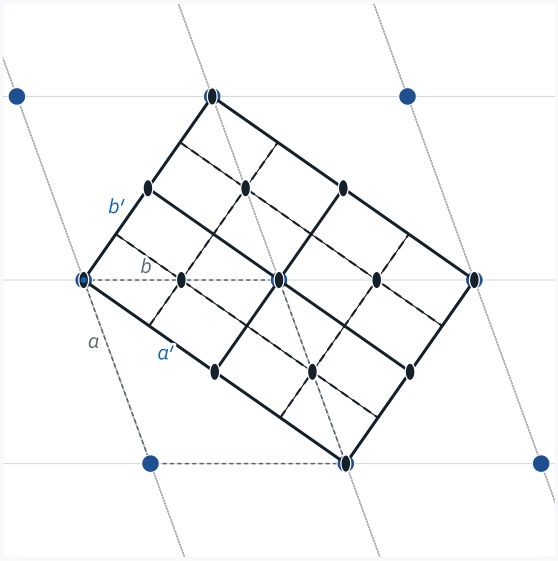


Abb. 2.4a Primitive Zelle: ein Rhombus mit $a = b$, $\gamma = 70°$. In der App öffnen →



b Dasselbe Gitter mit der zentrierten Zelle a', b' und den Symmetrieelementen; der Rhombus ist gestrichelt. In der App öffnen →

Abb. 2.4 Das rechteckig zentrierte Gitter. Die zentrierte Zelle hat die doppelte Fläche, liegt aber entlang der Spiegellinien und ist rechtwinklig (nach Hoffmann Abb. 2.32–2.33).

Wichtig ist: Die Wahl der Zelle ändert die Symmetrie des Gitters nicht. Rhombus und Rechteck beschreiben dasselbe Gitter mit denselben Spiegellinien; in der zentrierten Zelle sieht man sie nur besser. Weil die zentrierte Zelle zwei Gitterpunkte enthält, hat das Gitter neben a' und b' eine weitere Translation, um $\frac{1}{2}a' + \frac{1}{2}b'$, die **Zentrierungstranslation**.

Damit gibt es in der Ebene fünf **Bravais-Gitter**: vier primitive (*mp*, *op*, *tp*, *hp*) und ein zentriertes (*oc*), wie in der Tabelle in Abschnitt 2.3 „Symmetrie und Metrik: die vier Kristallsysteme“. Das zentrierte Gitter aus Abschnitt 1.6 „Wenn die Basis das Gitter ändert“ (Abb. 1.6b) ist genau dieses: Die rechteckige Zelle mit den Dreiecken bei (0, 0) und (½, ½) ist eine zentrierte Zelle.

MERKE

Die Elementarzelle soll kurze Gittervektoren haben, entlang der Spiegellinien liegen und möglichst rechtwinklig sein. Erfüllt keine primitive Zelle das, wählt man eine zentrierte mit einem zweiten Gitterpunkt bei (½, ½). Die Wahl der Zelle ändert die Symmetrie nicht. Es gibt fünf Bravais-Gitter der Ebene: *mp*, *op*, *oc*, *tp*, *hp*.

VERTIEFUNG · **Warum es kein zentriertes quadratisches Gitter gibt**

Nach dem rechteckig zentrierten Gitter liegt die Frage nahe, warum es kein quadratisch zentriertes gibt. Man kann in ein quadratisches Gitter durchaus eine Zelle legen, die ein Quadrat mit einem Gitterpunkt in der Mitte ist. Sie verletzt aber die erste Regel: Sind a und b die Kanten dieser zentrierten Zelle, dann ist das um 45° gedrehte Quadrat mit den Kanten $a' = ½(a - b)$ und $b' = ½(a + b)$ eine primitive Zelle mit kürzeren Gittervektoren, und es zeigt die Symmetrie ebenso gut. Das „zentrierte quadratische“ Gitter ist also ein gewöhnliches quadratisches Gitter mit unnötig grosser Zelle. Auf genau diesen Fall stösst man im Lieb-Gitter ohne das Eckatom (Abb. 1.7b).

2.5 Die konventionelle Zelle

Die International Tables legen fest, wie die Zelle zu wählen ist: Die Gittervektoren sollen die Symmetrie am besten zeigen, und unter den Zellen, die das tun, nimmt man die kleinste. Im schiefwinkligen und im rechteckigen System braucht es dazu noch Regeln für die Längen und die Benennung der Achsen. Diese Zelle heisst **konventionelle Zelle**. Sie ist primitiv oder zentriert. Zur konventionellen Zelle gehört auch ein festgelegter Ursprung, meist ein Punkt hoher Symmetrie; darum geht es in Kapitel 3.

Die App unterscheidet deshalb zwei Zellen. Die **gegebene Zelle** ist die, in der man die Struktur aufgebaut hat (Abschnitt 1.6 „Wenn die Basis das Gitter ändert“). Die **konventionelle Zelle** mit den Gittervektoren a' und b' bestimmt die App aus der Symmetrie der Struktur. Oft sind beide gleich. Sie unterscheiden sich, wenn

- die gegebene Zelle primitiv, die konventionelle aber zentriert ist, wie in Abb. 2.4;
- die Basis neue Translationen erzeugt und die konventionelle Zelle deshalb kleiner ist, wie in Abb. 1.7b;
- die Symmetrie verlangt, dass a' und b' anders liegen als a und b, oder der Ursprung an einer anderen Stelle liegen muss (Kapitel 3).

Die Struktur bleibt in allen Fällen dieselbe. Mit der Zelle ändern sich nur ihre Beschreibung: die Gittervektoren, die Koordinaten der Atome und die Zahl der Atome je Zelle.

MERKE

Die konventionelle Zelle ist die kleinste Zelle, die die Symmetrie am besten zeigt; sie ist primitiv oder zentriert und hat einen festgelegten Ursprung. Die gegebene Zelle ist die, in der man die Struktur aufgebaut hat. Beide beschreiben dieselbe Struktur.

IN DER APP

Im Modus „Gitter und Basis“ zeichnet die App die konventionelle Zelle mit a' und b' ein; die gegebene Zelle ist dann gestrichelt. Die Kenndaten nennen unter „Konventionelle Zelle nach ITA“ die Gittervektoren a', b' in a und b und unter „Bravais-Gitter“ das Kürzel, etwa *oc*. Zum Ausprobieren: Vorgabe „Quadratisch“ wählen und unter „Gitter“ den Winkel γ verändern; bei $b/a = 1$ und einem Winkel, der weder 90° noch 60° oder 120° ist, wird das Gitter rechteckig zentriert.

ZUSAMMENFASSUNG

- Symmetrieelemente der Ebene sind Drehpunkte und Spiegellinien; jede Translation wiederholt sie. Jedes Gitter hat 2-zählige Drehpunkte auf den Gitterpunkten, Kantenmitten und Zellmitten.
- Ein Gitter kann nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehpunkte haben.
- Die Symmetrie eines Gitters erzwingt seine Metrik: vier Kristallsysteme, schiefwinklig, rechteckig, quadratisch, hexagonal.
- Die Elementarzelle soll kurz sein, die Symmetrie zeigen und möglichst rechtwinklig sein. Dafür wählt man im rechteckigen System manchmal eine zentrierte Zelle. Fünf Bravais-Gitter: *mp*, *op*, *oc*, *tp*, *hp*.
- Die konventionelle Zelle nach ITA ist die kleinste, die die Symmetrie am besten zeigt. Sie kann von der gegebenen Zelle abweichen, die Struktur bleibt dieselbe.

ZUR VERTIEFUNG

- Die Netzebenen von Kristallflächen bilden je nach Gitter und Fläche verschiedene Bravais-Gitter der Ebene.
- Ein „zentriertes quadratisches“ Gitter ist ein quadratisches Gitter mit unnötig grosser Zelle.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Kap. 6 (Symmetrieoperation und Symmetrieelement, S. 67–69), Abschn. 6.1 (2-zählige Drehachsen der allgemeinen Netzebene auf Gitterpunkten, Kantenmitten und Zellmitte, nicht gleichwertig, Abb. 6.5, S. 69–70; im Gitter unendlich viele parallele Elemente, S. 70; 3-, 4-, 6-zählige Drehachsen, Abb. 6.7, S. 71; 5-zählige und mehr als 6-zählige unmöglich, cos ε = *m*/2, Abb. 6.8, Tab. 6.1, S. 71–73), Abschn. 6.2 (zentrierte Elementarmasche, Abb. 6.10, S. 73–74), Kap. 7 (allgemeine und spezielle Netzebenen, Abb. 7.1–7.6, S. 83–86), Abschn. 10.2 (fünf Netzebenen in vier Achsensystemen, Symbole *p* und *c*, Symmetrie der Netzebenen; Motive niedrigerer Symmetrie senken die Symmetrie des Musters, Tab. 10.1, Abb. 10.9, S. 205–208).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 2.3 (Regeln zur Wahl der Elementarzelle, S. 56; zentrierte Zelle, Symmetrie unabhängig von der Wahl der Zelle, Abb. 2.30–2.34, S. 56–59), 3.2.3 (Inversion bei zweidimensionalen Objekten, Abb. 3.12, S. 103), 4.2 (die fünf Bravais-Gitter der Ebene, Abb. 4.12, S. 135–136), 4.2.4 (Netzebenen von Flächen kubischer Gitter, Bedeutung für die Katalyse, S. 146–148; zentriert-rechteckige Zelle mit $a = b$ unnötig gross, um 45° gedrehtes primitiv-quadratisches Gitter vorzuziehen, Abb. 4.25–4.26, S. 149–150), 4.4 (Inversion in der Ebene gleich Drehung um 180°, S. 153), 8.1–8.2 (Gitter mit 5-zähliger Symmetrie unmöglich, Parkettierungen, Abb. 8.1–8.3, S. 268–269).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Abschn. 1.4.1 und 1.4.5 (Symbole der Spiegellinien und Drehpunkte in zwei Dimensionen, S. 7–9), Abschn. 2.1.3 und Tab. 2.1.2.1 (Kristallsysteme und Bravais-Gitter der Ebene, Bedingungen an die Metrik; konventionelle Zelle; zusätzliche Konventionen im schiefwinkligen und rechteckigen System, S. 14–15), Tab. 1.2.1 (Zentrierungstypen der Ebene: *p* mit einem, *c* mit zwei Gitterpunkten bei 0, 0 und ½, ½, S. 4).

3 Gitter und Motiv

Das Gitter legt fest, welche Symmetrie eine Struktur höchstens haben kann. Das Motiv entscheidet, wie viel davon übrig bleibt. Mit der Symmetrie können sich auch die konventionelle Zelle und ihr Ursprung ändern.

LERNZIELE

- die zehn Punktgruppen der Ebene nennen und ihre Symbole lesen
- das Symbol einer Ebenengruppe in groben Zügen lesen
- die Symmetrie eines Musters aus Gitter und Motiv bestimmen und begründen, warum das Motiv die Symmetrie des Gitters nur erniedrigen kann
- erklären, warum es auf die Orientierung des Motivs ankommt
- beim Ändern der Basis erkennen, ob sich die Ebenengruppe, die Grösse der Zelle, ihre Achsen oder ihr Ursprung ändern

ZUR VERTIEFUNG

- die Punktgruppen der Ebene den polaren Punktgruppen des Raums zuordnen

3.1 Die zehn Punktgruppen der Ebene

Auch ein einzelnes Motiv kann symmetrisch sein. Seine Symmetrieoperationen lassen alle einen Punkt fest, die Mitte des Motivs; sie bilden eine **Punktgruppe**. Ein Motiv kann jede Symmetrie haben, auch eine 5-zählige wie ein Fünfeck. Ein rundes Atom hat einen ∞-zähligen Drehpunkt, denn jede Drehung um seine Mitte bringt es zur Deckung, und unendlich viele Spiegellinien durch seine Mitte; die App schreibt dafür ∞*m*, wie im Raum die Symmetrie eines Kegels. Ein periodisches Muster dagegen hat immer eine von zehn Punktgruppen, den zehn **kristallographischen Punktgruppen** der Ebene, weil nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehungen mit einem Gitter vereinbar sind (Abschnitt 2.2 „Nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehpunkte“).

GRUNDLAGEN · **Gruppe, Ordnung, Untergruppe**

Die Symmetrieoperationen eines Objekts bilden eine **Gruppe**. Das heisst: Führt man zwei Symmetrieoperationen nacheinander aus, ist das Ergebnis wieder eine Symmetrieoperation des Objekts. Zu jeder gibt es eine, die sie rückgängig macht. Und die **Identität**, die nichts verändert, gehört immer dazu; man kann sie als Drehung um 360° auffassen, sie ist die 1 in den Symbolen. Die Zahl der Operationen heisst **Ordnung** der Gruppe. Bilden einige Operationen einer Gruppe für sich allein schon eine Gruppe, heisst diese **Untergruppe**. Die vier Drehungen eines Quadrats (um 90°, 180°, 270°, 360°) bilden zum Beispiel die Untergruppe 4 seiner Punktgruppe 4*mm*. Ausführlicher, mit den vier Gruppenaxiomen: Skript „Stereographische Projektion“, Abschnitt 3.3.

Die Tabelle nennt die zehn Punktgruppen mit ihren Symmetrieelementen, ihrer Ordnung und dem Kristallsystem, zu dem sie gehören:

PUNKTGRUPPE	SYMMETRIEELEMENTE	ORDNUNG	KRISTALLSYSTEM	SCHOENFLIES
1	keine	1	schiefwinklig	C_1
2	2-zähliger Drehpunkt	2		C_2
m	eine Spiegellinie	2	rechteckig	C_s
2*mm*	2-zähliger Drehpunkt, zwei Spiegellinien	4		C_{2v}
4	4-zähliger Drehpunkt	4	quadratisch	C_4
4*mm*	4-zähliger Drehpunkt, vier Spiegellinien	8		C_{4v}
3	3-zähliger Drehpunkt	3	hexagonal	C_3
3*m*	3-zähliger Drehpunkt, drei Spiegellinien	6		C_{3v}
6	6-zähliger Drehpunkt	6		C_6
6*mm*	6-zähliger Drehpunkt, sechs Spiegellinien	12		C_{6v}

Die letzte Spalte nennt das Symbol nach Schoenflies, das in Chemie und Physik verbreitet ist; die App gibt es in den Kenndaten neben der Punktgruppe an. Erklärt ist es im Skript „Stereographische Projektion“, Abschnitt 3.4, Vertiefung „Drehspiegelachsen und Schoenflies-Symbole“. Dieses Skript verwendet die internationalen Symbole nach Hermann und Mauguin. Das Symbol nennt zuerst die höchste Zähligkeit eines Drehpunkts und dann die Spiegellinien; ohne Drehpunkt (*m*) lässt man die 1 weg. In 2*mm*, 4*mm* und 6*mm* stehen zwei *m*, weil es zwei Arten von Spiegellinien gibt, die keine Drehung ineinander überführt; bei 4*mm* etwa die Spiegellinien entlang der Kanten eines Quadrats und die entlang seiner Diagonalen. In 3*m* dagegen führt die Drehung um 120° die drei Spiegellinien ineinander über; es gibt nur eine Art, deshalb steht nur ein *m*. Innerhalb eines Kristallsystems sind alle Punktgruppen Untergruppen der letzten in der Tabelle, der Punktgruppe des Gitters.

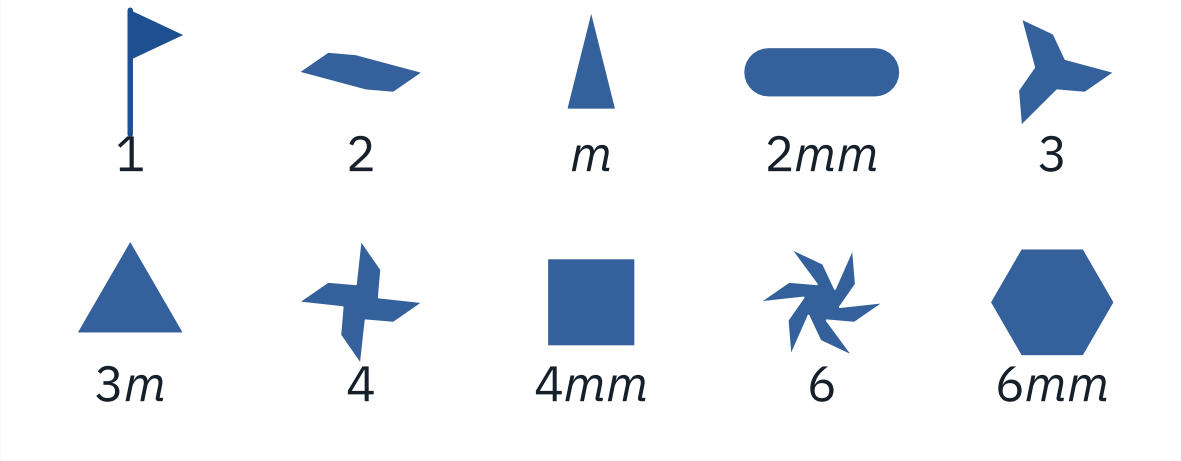


Abb. 3.1 Die Motive der App mit ihrer eigenen Symmetrie: Fähnchen 1, Windrad 2, gleichschenkliges Dreieck *m*, längliche Insel 2*mm*; Windrad 3, gleichseitiges Dreieck 3*m*; Windrad 4, Quadrat 4*mm*; Windrad 6, Sechseck 6*mm*. Nicht abgebildet ist das Atom, ein Kreis mit der Symmetrie ∞*m*.

MERKE

Ein periodisches Muster hat eine der zehn Punktgruppen der Ebene: 1, 2, *m*, 2*mm*, 4, 4*mm*, 3, 3*m*, 6, 6*mm*. Das Symbol nennt die höchste Zähligkeit und die Arten von Spiegellinien.

VERTIEFUNG · **Punktgruppen der Ebene und polare Punktgruppen**

Diese Vertiefung knüpft an die 32 Punktgruppen des Raums an (Skript „Stereographische Projektion“, Abschnitte 3.3–3.4) und zeigt, welche von ihnen ein ebenes Muster haben kann. Liegt das Muster in einer Ebene, darf eine Symmetrieoperation oben und unten nicht vertauschen; sie muss die Normale der Ebene festlassen. Das tun nur Drehungen um die Normale und Spiegelungen an Ebenen, die die Normale enthalten. Ein Drehpunkt der Ebene ist also eine Drehachse senkrecht zu ihr, eine Spiegellinie eine Spiegelebene durch diese Achse. Spiegelebenen parallel zur Ebene, Inversionszentren, 2-zählige Drehachsen in der Ebene und Drehinversionsachsen kommen nicht vor. Übrig bleiben genau die zehn polaren Punktgruppen 1, 2, 3, 4, 6, *m*, *mm*2, 3*m*, 4*mm*, 6*mm*, in denen ein Kristall ein elektrisches Dipolmoment haben kann (ebenda, Abschnitt 5.5); 2*mm* der Ebene heisst im Raum *mm*2. In der App „Stereographische Projektion“ zeigt ein Pedion mit Flächenmuster diese Symmetrie (für 1 und *m* das Symmetriegerüst); die Kenndaten der Ebenengruppen verlinken dorthin.

3.2 Gitter + Motiv: die Symmetrie des Musters

Setzt man auf jeden Gitterpunkt dasselbe Motiv, hat das Muster nur die Symmetrie, die Gitter und Motiv gemeinsam haben. Der Grund: Eine Symmetrieoperation des Musters muss das Gitter auf sich abbilden und zugleich jedes Motiv auf ein Motiv in gleicher Ausrichtung. Sie muss also eine Symmetrieoperation des Gitters und des Motivs sein. Abb. 3.2 zeigt das am quadratischen Gitter, dessen Punktgruppe 4*mm* ist. Ein Quadrat (4*mm*), dessen Kanten parallel zu denen der Zelle liegen, lässt alle Symmetrie bestehen. Ein Windrad mit vier Flügeln (4) behält die 4-zähligen Drehpunkte, aber keine Spiegellinien. Eine längliche Insel (2*mm*) behält die Spiegellinien entlang der Kanten, aber nur 2-zählige Drehpunkte. Ein Windrad mit zwei Flügeln (2) lässt nur die 2-zähligen Drehpunkte übrig. Umgekehrt verrät ein Motiv mit hoher eigener Symmetrie wenig: Einem runden Atom sieht man nicht an, ob es gedreht oder gespiegelt wurde. Deshalb zeigt die App die Operationen an einem Fähnchen, das keine eigene Symmetrie hat (Abb. 1.1).

Für die Symmetrie eines ganzen Musters braucht man einen eigenen Begriff. Alle Symmetrieoperationen eines periodischen Musters zusammen, also Translationen, Drehungen, Spiegelungen und die Gleitspiegelungen aus Kapitel 4, bilden seine **Ebenengruppe**. Es gibt genau 17 Ebenengruppen; Kapitel 5 behandelt sie ausführlich. Für dieses Kapitel genügt es, ihre Symbole grob zu lesen. Ein kleiner Buchstabe nennt die konventionelle Zelle, *p* für primitiv und *c* für zentriert. Dann folgen wie bei einer Punktgruppe die höchste Zähligkeit und die Spiegellinien; an der Stelle eines *m* kann auch ein *g* für eine Gleitspiegellinie stehen, das man für die Punktgruppe wie ein *m* liest. *p*4*mm* ist also ein Muster mit primitiver Zelle und der Punktgruppe 4*mm*, *c*2*mm* eines mit zentrierter Zelle und der Punktgruppe 2*mm*. Eine 1 hält eine Stelle frei, an der kein Symmetrieelement steht: *pm* heisst ausführlich *p*1*m*1, und in *p*3*m*1 liegen die Spiegellinien in einer anderen Richtung als in *p*31*m* (Kapitel 5). Die App nennt die Ebenengruppe jeder Struktur in den Kenndaten.

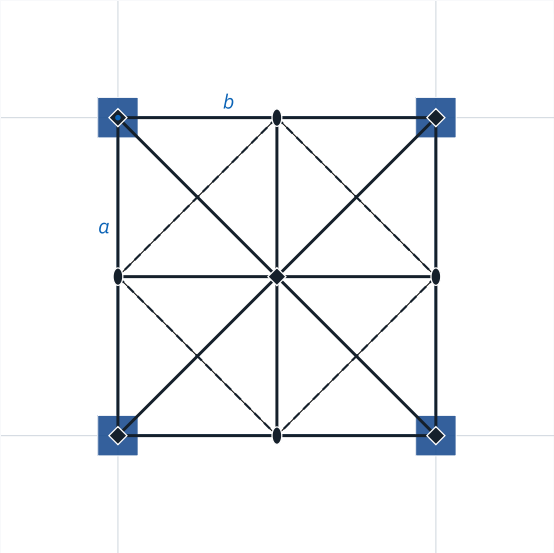
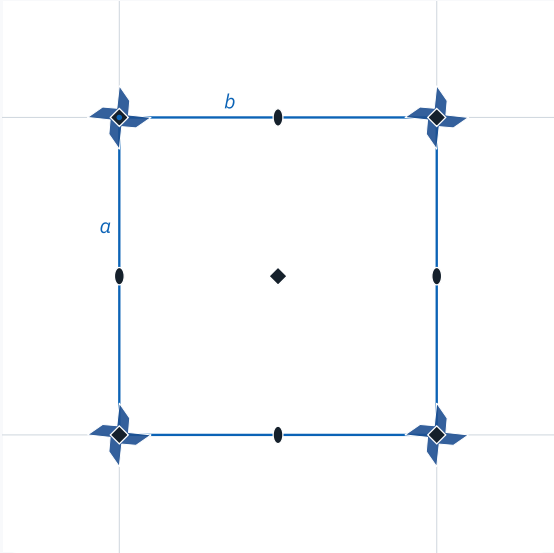
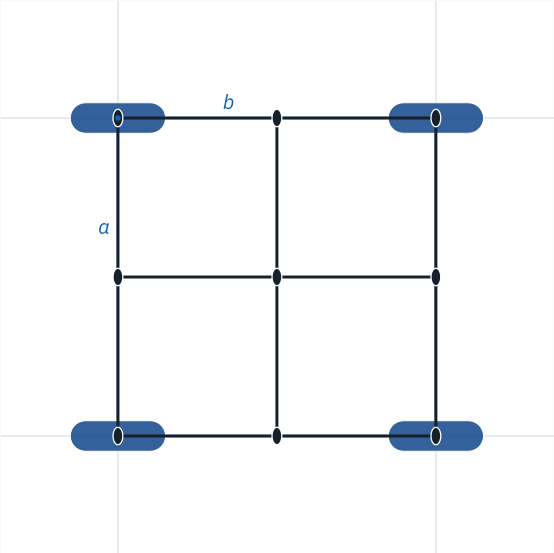


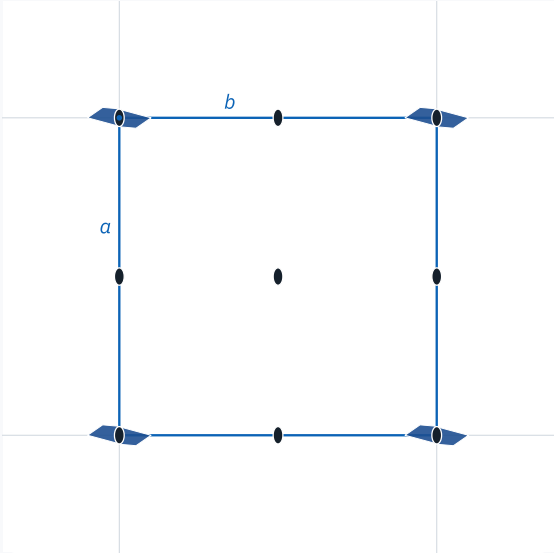
Abb. 3.2a Motiv 4*mm*: Das Muster hat die volle Symmetrie des Gitters, *p*4*mm*.
In der App öffnen →



b Motiv 4: keine Spiegellinien mehr, *p*4.
In der App öffnen →



c Motiv 2*mm*: keine 4-zähligen Drehpunkte mehr, *p*2*mm*. In der App öffnen →



d Motiv 2: nur noch 2-zählige Drehpunkte, *p*2.
In der App öffnen →

Abb. 3.2 Quadratisches Gitter mit Motiven verschiedener Symmetrie auf den Gitterpunkten (nach Borchardt-Ott & Sowa Abb. 10.9). Schwarz gestrichelte Linien sind hier und in den folgenden Abbildungen Gleitspiegellinien (Abb. 2.3, Kapitel 4).

Daraus folgen drei Regeln.

Das Gitter begrenzt die Symmetrie. Ein Motiv kann sie nur erniedrigen, nie erhöhen. Ein Sechseck (6*mm*) auf einem quadratischen Gitter ergibt kein 6-zähliges Muster, sondern höchstens 2*mm*. Mit „Gitter“ ist dabei das Gitter der Struktur gemeint, also alle Translationen, die die ganze Struktur auf sich abbilden. Das ist nicht immer das Gitter der gegebenen Zelle. Abb. 3.3a zeigt ein rechteckiges Gitter mit $b = \sqrt{3}\,a$ und einem Atom je Zelle; es hat die Symmetrie *p*2*mm*. Setzt man ein zweites, gleiches Atom in die Zellmitte bei (½, ½), entsteht eine neue Translation um ½(*a* + *b*) (Abschnitt 1.6 „Wenn die Basis das Gitter ändert“). Jedes Atom hat jetzt sechs nächste Nachbarn im gleichen Abstand *a*: Die Atome bilden ein hexagonales Gitter, und die Struktur hat die Symmetrie *p*6*mm*, mit der kleineren Zelle $a' = ½(a - b)$, $b' = ½(a + b)$ und γ′

= 120° (Abb. 3.3b). Die Symmetrie ist nicht durch das Motiv gestiegen, beide Atome sind rund. Sie ist gestiegen, weil die Struktur ein anderes, symmetrischeres Gitter hat als die gegebene Zelle. Dass es hexagonal wird, liegt an der Metrik $b = \sqrt{3}\,a$; mit $b = 1{,}6\,a$ entsteht ein rechteckig zentriertes Gitter wie in Abb. 1.6b, mit runden Atomen *c*2*mm*.

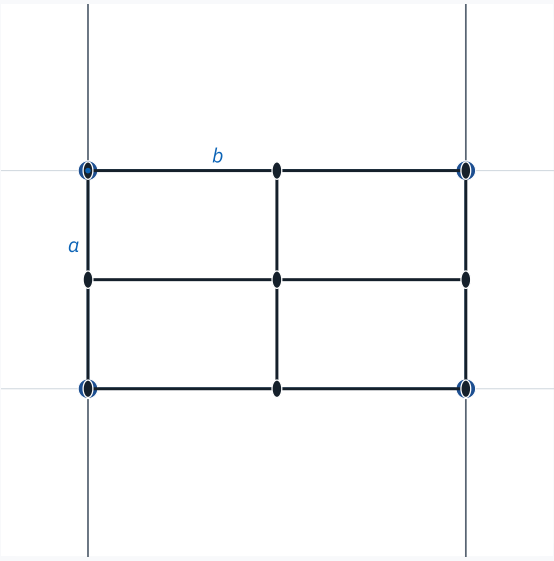
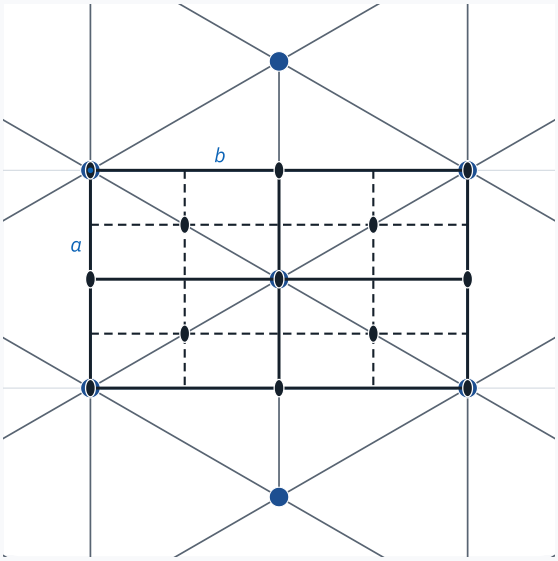


Abb. 3.3a Ein Atom je Zelle, $b = \sqrt{3}\,a$: *p*2*mm*. Die Linien verbinden nächste Nachbarn.
In der App öffnen →



b Zweites Atom bei (½, ½): Die Atome bilden ein hexagonales Gitter, *p*6*mm*, mit der Zelle *a*′, *b*′; die gegebene Zelle ist grau gestrichelt.
In der App öffnen →

Abb. 3.3 Die Basis ändert das Gitter: Mit dem zweiten Atom hat die Struktur ein hexagonales Gitter, obwohl die gegebene Zelle rechteckig ist.

Das Kristallsystem folgt der Symmetrie, nicht der Metrik. Das Muster in Abb. 3.2c hat ein quadratisches Gitter, gehört aber zum rechteckigen System; das in Abb. 3.2d zum schiefwinkligen (Abschnitt 2.3 „Symmetrie und Metrik: die vier Kristallsysteme“).

Die Symmetrie bleibt nur, wenn jedes Motiv zu seinem Platz passt. Besteht die Basis aus mehreren Motiven, sitzen nicht alle auf den Ecken der Zelle, sondern an verschiedenen Stellen in ihr. Jede solche Stelle hat, durch das Gitter und die übrigen Motive, eine bestimmte Symmetrie. In Abb. 3.4 sitzen Quadrate auf den Ecken eines quadratischen Gitters. Die Zellmitte bei (½, ½) ist dann ein 4-zähliger Drehpunkt mit vier Spiegellinien, hat also die Symmetrie 4*mm*. Ein Atom dort hat sogar mehr Symmetrie (∞*m*) und lässt sie bestehen, das Muster bleibt *p*4*mm* (Abb. 3.4a). Die eigene Symmetrie eines Atoms erniedrigt nie die Symmetrie eines Musters. Eine längliche Insel dort hat nur 2*mm*: Die 4-zähligen Drehpunkte, auch die an den Ecken, und die diagonalen Spiegellinien fallen weg, das Muster ist *p*2*mm* (Abb. 3.4b). Allgemein gilt: Ein Drehpunkt oder eine Spiegellinie, die durch die Mitte eines Motivs geht, bleibt nur erhalten, wenn das Motiv mindestens diese Symmetrie hat und passend ausgerichtet ist. Die Symmetrie, die ein Platz in der fertigen Struktur hat, heisst **Lagesymmetrie**; für die Zellmitte ist sie in Abb. 3.4a 4*mm*, in Abb. 3.4b nur 2*mm*. Sie ist das Thema von Kapitel 6.

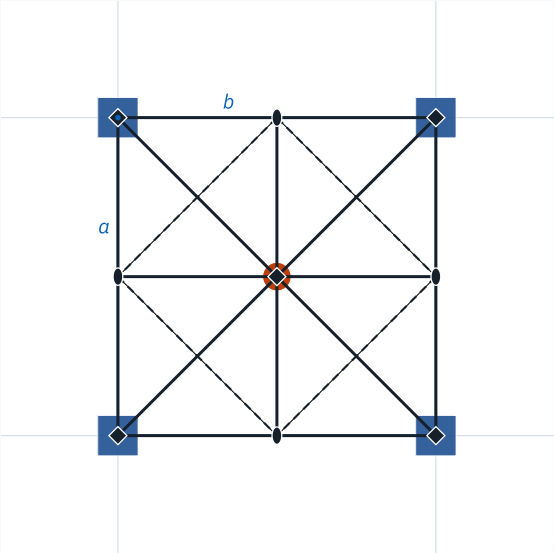
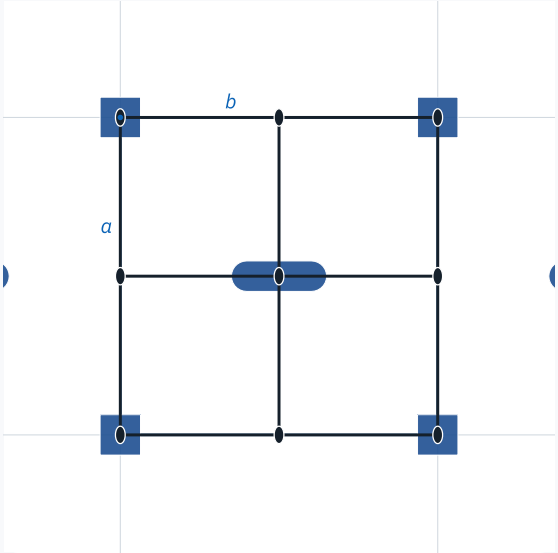


Abb. 3.4a Quadrate auf den Ecken, ein Atom (andere Farbe) in der Zellmitte: *p*4*mm*. In der App öffnen →



b Statt des Atoms eine längliche Insel (2*mm*): *p*2*mm*. In der App öffnen →

Abb. 3.4 Mit Quadraten auf den Ecken hat die Zellmitte die Symmetrie 4*mm*. Ein Motiv dort mit geringerer Symmetrie erniedrigt die Symmetrie des ganzen Musters.

MERKE

Gitter und Motiv bestimmen zusammen die Symmetrie: Das Gitter der Struktur begrenzt sie, das Motiv kann sie nur erniedrigen. Das Kristallsystem einer Struktur folgt ihrer Symmetrie, nicht der Metrik. Ein Symmetrieelement durch die Mitte eines Motivs bleibt nur, wenn das Motiv mindestens diese Symmetrie hat und passend ausgerichtet ist.

3.3 Die Orientierung des Motivs

Es kommt nicht nur auf die Symmetrie des Motivs an, sondern auch darauf, wie es liegt. Dreht man die Quadrate aus Abb. 3.2a um 20°, liegen ihre Spiegellinien nicht mehr auf denen des Gitters. Gemeinsam bleiben nur die Drehungen: Das Muster hat nur noch die Symmetrie 4 (Abb. 3.5a).

Dreht man dagegen die länglichen Inseln aus Abb. 3.2c um 45°, liegen ihre Spiegellinien auf den Diagonalen des Quadrats, und diese sind ebenfalls Spiegellinien des Gitters. Das Muster behält die Symmetrie 2*mm*, aber mit Spiegellinien entlang der Diagonalen. Es hat keine 4-zähligen Drehpunkte und gehört deshalb zum rechteckigen System. Dort soll die Zelle entlang der Spiegellinien liegen (Abschnitt 2.4 „Wahl der Elementarzelle und das zentrierte Gitter“). Die konventionelle Zelle ist deshalb um 45° gedreht und zentriert, mit $a' = a + b$ und $b' = -a + b$ (Abb. 3.5b). Dasselbe Gitter, nur mit gedrehten Motiven, wird also in einer ganz anderen Zelle beschrieben. Diese Zelle ist ein Quadrat mit einem Gitterpunkt in der Mitte. Für das Gitter allein wäre sie unnötig gross (Vertiefung in Abschnitt 2.4 „Wahl der Elementarzelle und das zentrierte Gitter“); für dieses Muster ist sie die richtige.

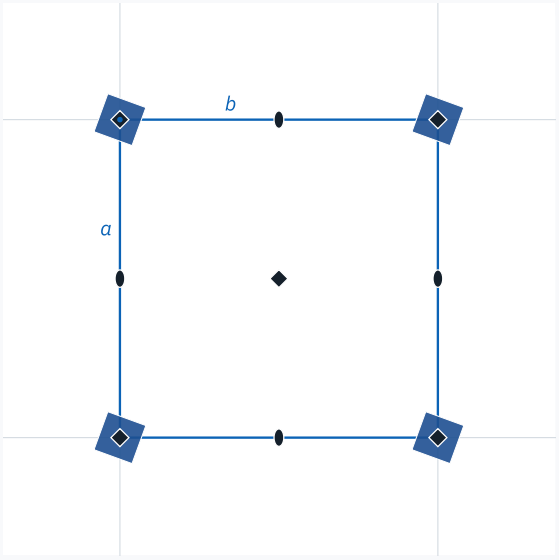
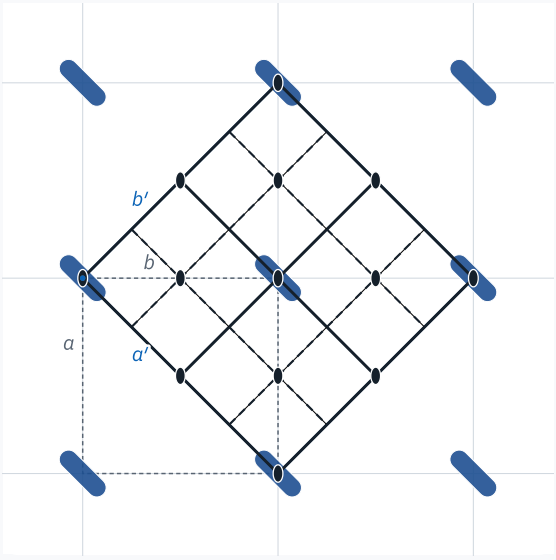


Abb. 3.5a Quadrate um 20° gedreht: *p*4.
In der App öffnen →



b Inseln um 45° gedreht: *c*2*mm* mit zentrierter Zelle *a*′, *b*′. In der App öffnen →

Abb. 3.5 Die Orientierung des Motivs entscheidet, welche Symmetrieelemente Gitter und Motiv gemeinsam haben. Die grau gestrichelte Linie in b ist die gegebene Zelle.

MERKE

Eine Spiegellinie des Motivs bleibt nur erhalten, wenn sie auf einer Spiegellinie des Gitters liegt. Mit der Orientierung des Motivs kann sich auch die konventionelle Zelle ändern.

3.4 Wenn sich die konventionelle Zelle ändert

Abb. 3.5b zeigt, was beim Ändern einer Basis leicht verwirrt: Eine kleine Änderung der Struktur kann ihre Beschreibung stark ändern. Das liegt daran, dass die konventionelle Zelle nach festen Regeln aus der Symmetrie folgt (Abschnitt 2.5 „Die konventionelle Zelle“). Oft ändert sich nur die Ebenengruppe, und die Zelle bleibt, wie in Abb. 3.2 und 3.5a; es fallen nur Symmetrieelemente weg. Die Zelle selbst kann sich auf drei Arten ändern.

Die Zelle wird grösser oder kleiner. Neue Translationen verkleinern die primitive Zelle (Abschnitt 1.6 „Wenn die Basis das Gitter ändert“, Abb. 3.3b). Braucht die Symmetrie eine zentrierte Zelle, wird die konventionelle Zelle doppelt so gross wie die primitive (Abb. 2.4, 3.5b).

Die Achsen werden vertauscht oder gedreht. Die International Tables legen für jede Ebenengruppe fest, wie die Symmetrieelemente zu den Achsen liegen. In *pm* etwa liegt die Spiegellinie parallel zu b, also senkrecht zu a. Zeigen die Spitzen gleichschenkliger Dreiecke entlang a, liegt die Spiegellinie parallel zu a. Die App wählt dann $a' = b$ und $b' = -a$: Die Zelle bleibt dieselbe, nur ihre Achsen sind umbenannt und um 90° gedreht (Abb. 3.6).

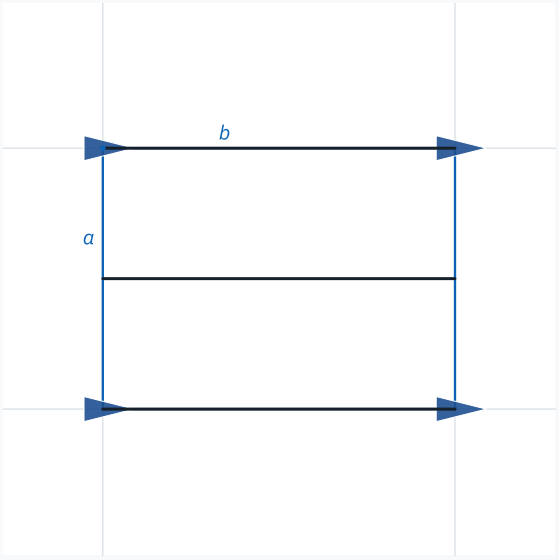
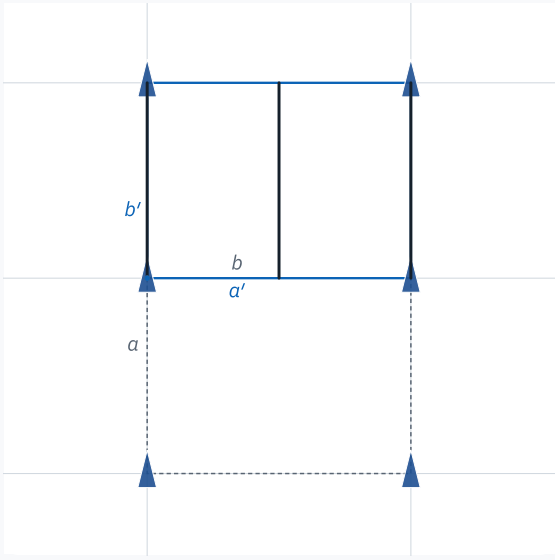


Abb. 3.6a Spitzen entlang *b*: Die Spiegellinie liegt wie in den International Tables, $a' = a$, $b' = b$. In der App öffnen →



b Spitzen entlang *a*: Die App wählt $a' = b$, $b' = -a$, damit die Spiegellinie wieder parallel zu b' liegt. In der App öffnen →

Abb. 3.6 Dieselbe Symmetrie *pm* in zwei Lagen. Die konventionelle Zelle folgt der Spiegellinie.

Der Ursprung wandert. Auch den Ursprung legen die International Tables fest: auf einen Punkt hoher Symmetrie, für jede Ebenengruppe ausdrücklich angegeben, etwa „Ursprung auf 2*mm*“ bei *p*2*mm*. Liegt der Ursprung der gegebenen Zelle nicht auf einem solchen Punkt, verschiebt ihn die App. Abb. 3.7 zeigt ein rechteckiges Gitter mit einer Basis aus zwei gleichen Atomen bei (0, 0) und (0,3; 0), einem Molekül aus zwei Atomen. Das Muster hat die Symmetrie *p*2*mm*, aber die Atome liegen nur auf Spiegellinien. Die Punkte mit der Symmetrie 2*mm* liegen zwischen den Atomen, etwa in der Mitte des Moleküls bei (0,15; 0). Dorthin legt die App den Ursprung der konventionellen Zelle. Die Zelle hat dieselbe Grösse und dieselben Achsen, aber alle Koordinaten verschieben sich um denselben Betrag: Die Atome liegen jetzt bei (−0,15; 0) und (0,15; 0), gleichwertig (0,85; 0) und (0,15; 0).

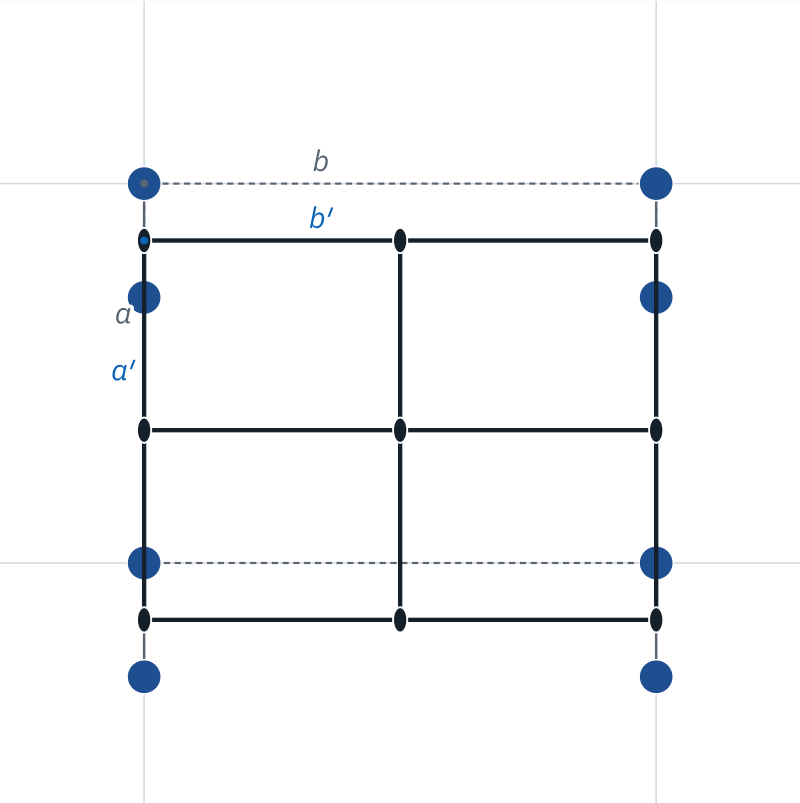


Abb. 3.7 Molekül aus zwei Atomen auf einem rechteckigen Gitter, *p*2*mm*. Der Ursprung der konventionellen Zelle liegt in der Mitte des Moleküls, nicht auf einem Atom; die gegebene Zelle ist grau gestrichelt. **In der App öffnen →**

Oft gibt es mehrere Punkte, auf die der Ursprung gelegt werden darf; in *p*2*mm* etwa vier verschiedene Arten von Punkten 2*mm* je Zelle. Alle sind gleich gut. Die App nimmt den, der dem Ursprung der gegebenen Zelle am nächsten liegt, damit er nicht ohne Not wandert. Ein Beispiel ist hexagonales Bornitrid (Vorgabe „h-BN (B und N)“): eine Bienenwabe wie Graphen, aber abwechselnd aus Bor- und Stickstoffatomen. Die Sechseckmitte bei (0, 0) und die beiden Atome haben dieselbe Symmetrie 3*m*. Weil die Sechseckmitte selbst ein erlaubter Ursprung ist, bleibt er dort (Abb. 3.8b). Abb. 3.8 zeigt nebenbei, wie verschiedene Atomsorten die Symmetrie erniedrigen: Eine Symmetrieoperation muss jedes Atom auf ein gleiches abbilden (Abschnitt 1.6, 3.2). In Graphen sind beide Atome gleich, die Struktur hat die Symmetrie *p*6*mm*. In h-BN fallen die 6-zähligen Drehpunkte in den Sechseckmitten weg, weil eine Drehung um 60° ein Bor- auf ein Stickstoffatom abbilden würde; ebenso die 2-zähligen Drehpunkte und die Spiegellinien senkrecht zu den Bindungen, die Bor und Stickstoff vertauschen würden. Es bleiben die 3-zähligen Drehpunkte und die Spiegellinien entlang der Bindungen, durch die Atome: *p*3*m*1.

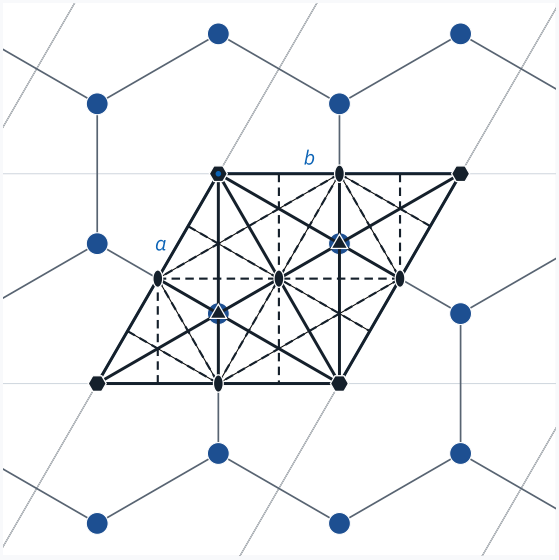
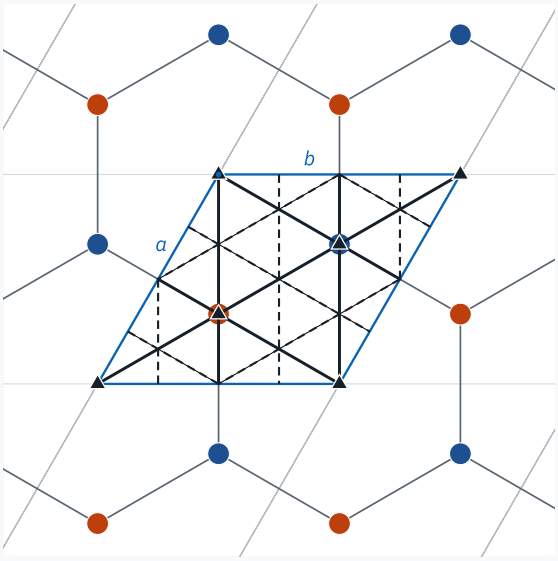


Abb. 3.8a Graphen, zwei gleiche Atome je Zelle: *p6mm*. In der App öffnen →



b h-BN, Bor und Stickstoff: *p3m1*.
In der App öffnen →

Abb. 3.8 Graphen und hexagonales Bornitrid in derselben gegebenen Zelle. In beiden liegt der Ursprung in der Sechseckmitte.

Beim Lesen der App hilft eine feste Reihenfolge: Welche Ebenengruppe hat die Struktur jetzt? Wie viele Gitterpunkte hat die konventionelle Zelle (primitiv oder zentriert)? Wie liegen a' und b' zu a und b? Wo liegt der Ursprung? Die Antworten stehen in den Kenndaten. Gegebene und konventionelle Zelle beschreiben dabei immer dieselbe Struktur.

MERKE

Ändert sich die Symmetrie, kann sich die konventionelle Zelle ändern: ihre Grösse (primitiv, zentriert, neue Translationen), die Lage ihrer Achsen (vertauscht, gedreht) und ihr Ursprung. Gegebene und konventionelle Zelle beschreiben dieselbe Struktur.

IN DER APP

Nach jeder Änderung im Modus „Gitter und Basis“ nennen die Kenndaten unter „Geändert“ die alte und die neue Ebenengruppe, unter „Konventionelle Zelle nach ITA“ die neuen Achsen und unter „Ursprung nach ITA“ den neuen Ursprung. Die Tabelle „Basis“ gibt die Lage jedes Motivs in beiden Zellen an. Zum Ausprobieren: Vorgabe „Quadratisch“, das Atom antippen, unter „Basis“ das Motiv „Insel (länglich)“ wählen und die Drehung langsam von 0° auf 45° stellen. Dazwischen ist das Muster *p2*; „Geändert“ nennt immer nur den letzten Schritt, am Ende also *p2* → *c2mm*.

ZUSAMMENFASSUNG

- Ein periodisches Muster hat eine der zehn Punktgruppen der Ebene: 1, 2, *m*, 2*mm*, 4, 4*mm*, 3, 3*m*, 6, 6*mm*.
- Die Symmetrie eines ganzen periodischen Musters ist seine Ebenengruppe, etwa *p*4*mm*: Zelle (*p* oder *c*), dann Zähligkeit und Spiegellinien.
- Gitter und Motiv bestimmen zusammen die Symmetrie eines Musters. Das Gitter der Struktur begrenzt sie, das Motiv kann sie nur erniedrigen; das Kristallsystem folgt der Symmetrie, nicht der Metrik. Jedes Motiv muss mindestens die Symmetrie seines Platzes haben, passend ausgerichtet; sonst sinkt die Symmetrie.
- Auch die Orientierung des Motivs zählt: Seine Spiegellinien bleiben nur, wenn sie auf Spiegellinien des Gitters liegen.
- Mit der Symmetrie kann sich die konventionelle Zelle ändern: Grösse, Achsen, Ursprung. Oft ändert sich nur die Ebenengruppe, und die Zelle bleibt.

ZUR VERTIEFUNG

- Die zehn Punktgruppen der Ebene sind die zehn polaren Punktgruppen des Raums.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Tab. 9.3 (Schönflies-Symbole der Punktgruppen, S. 132), Abschn. 9.6.3 (die zehn Punktgruppen mit Dipolmoment: 1, 2, 3, 4, 6, *m*, *mm*2, 3*m*, 4*mm*, 6*mm*, S. 171), Abschn. 9.7 (Punktgruppe ∞*m* des Kegels, S. 172), Abschn. 10.2 (die 17 Ebenengruppen, die zehn Punktgruppen der Ebene; die höchstzählige Drehung zuerst, zwei nicht äquivalente Sätze von Spiegellinien; Punktgitter mit der höchstmöglichen Symmetrie; Motive niedrigerer Symmetrie erniedrigen die Symmetrie des Musters, quadratisches Gitter mit Motiven 4*mm*, 4, 2*mm*, 2, Abb. 10.9, S. 206–208), Abschn. 11.2 (Gruppenaxiome, Einselement, Untergruppe, S. 263–264).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 1.8 (nicht die Metrik bestimmt die Symmetrie, sondern umgekehrt, S. 26), 5.3.2 (räumliche Beispiele zu Gitter und Motiv: Motiv erniedrigt die Symmetrie, Orientierung des Motivs entscheidet, ob eine Drehachse erhalten bleibt, S. 182–186; das Gitter zeigt immer die höchste Symmetrie, über das Kristallsystem entscheidet das Motiv, S. 188).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Tab. 2.1.2.1 (Punktgruppen der Ebene nach Kristallsystem, S. 15), Abschn. 2.1.3 (konventionelle Zelle und Ursprung auf einem Punkt hoher Symmetrie, S. 14), Abschn. 2.2.7 (Angabe des Ursprungs, S. 24), Part 6 (Ebenengruppe *pm*, volles Symbol *p*1*m*1: Spiegellinie 0, *y*, Ursprung auf *m*, S. 94; *p*2*mm*: Ursprung auf 2*mm*, vier Lagen 2*mm*, S. 97).

4 Gleitspiegelung und Verknüpfung

Periodische Muster haben eine Symmetrieoperation, die ein einzelnes Objekt nicht haben kann: die Gleitspiegelung. Und weil jede Symmetrieoperation mit den Translationen zusammenwirkt, folgen aus wenigen Symmetrieelementen zwangsläufig viele weitere: Gleitspiegellinien und Drehpunkte zwischen den Gitterpunkten, die das Symbol einer Ebenengruppe oft gar nicht nennt. Erst mit ihnen ist die Symmetrie einer zweidimensionalen Kristallstruktur vollständig beschrieben.

LERNZIELE

- eine Gleitspiegelung beschreiben und Gleitspiegellinien in einem Muster erkennen
- eine Symmetrieoperation in der Schreibweise der International Tables lesen, etwa $\bar{x} + ½, y$
- die Gruppentafel einer Punktgruppe lesen und aufstellen
- zwei Operationen in Koordinaten nacheinander ausführen und bestimmen, welche Operation sich ergibt
- begründen, warum ein Muster mehr Symmetrieelemente hat, als sein Symbol nennt

ZUR VERTIEFUNG

- zu einer Operation die Matrix und die Verschiebung angeben
- erklären, warum es nur sieben Arten von Friesen gibt, und drei davon an Fussspuren erkennen

4.1 Die Gleitspiegelung

Spuren im Sand zeigen, worum es geht (Abb. 4.1). Wer auf einem Bein hüpft, hinterlässt eine Reihe gleicher Fussabdrücke; die Spur hat nur Translationen. Wer mit beiden Beinen springt, setzt den linken und den rechten Fuss nebeneinander. Die beiden Abdrücke sind Spiegelbilder, und eine Spiegellinie entlang der Laufrichtung bringt die Spur mit sich zur Deckung.

Wer geht, setzt die Füsse abwechselnd. Linker und rechter Abdruck sind wieder Spiegelbilder, aber gegeneinander versetzt: Jeder rechte Abdruck liegt mitten zwischen zwei linken. Die Spur wiederholt sich erst nach zwei Schritten, einem Doppelschritt; das ist ihre Translation t. Jetzt hilft weder eine Spiegelung allein noch eine Verschiebung allein: Gespiegelt landet ein linker Fuss zwischen zwei rechten, verschoben auf der falschen Seite. Erst beides zusammen, spiegeln an der Mittellinie und um einen Schritt, also $t/2$, verschieben, bringt die Spur mit sich zur Deckung.

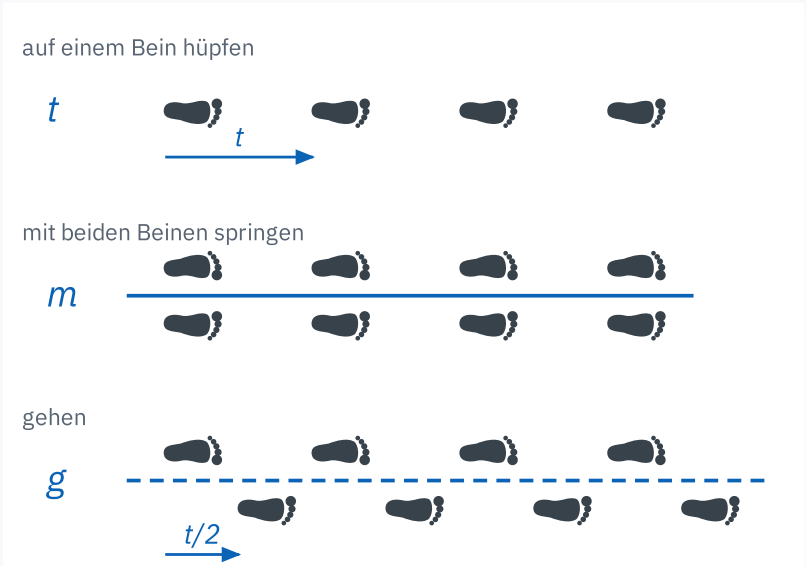


Abb. 4.1 Fussspuren in Laufrichtung nach rechts. Hüpfen: nur die Translation *t*. Springen: eine Spiegellinie *m* entlang der Laufrichtung. Gehen: eine Gleitspiegellinie *g*, gestrichelt; die Gleitspiegelung spiegelt an ihr und verschiebt um *t*/2 (nach Hoffmann Abb. 4.7–4.9).

Diese Operation heisst **Gleitspiegelung**: eine Spiegelung an einer Linie, gekoppelt mit einer Verschiebung parallel zu dieser Linie. Gekoppelt heisst, dass nur beide zusammen eine Symmetrieoperation sind, die Spiegelung allein und die Verschiebung allein nicht (Skript „Stereographische Projektion“, Abschnitt 3.2). Das Symmetrieelement ist die **Gleitspiegellinie**; man zeichnet sie gestrichelt und schreibt *g*. Die Verschiebung heisst **Gleitkomponente** (bei Borchardt-Ott Gleitvektor).

Führt man eine Gleitspiegelung zweimal aus, heben sich die beiden Spiegelungen auf, und es bleibt eine Verschiebung um die doppelte Gleitkomponente. Diese muss eine Translation des Gitters sein. Die Gleitkomponente ist deshalb die **halbe Gitterperiode** entlang der Linie, die Hälfte der kürzesten Gittertranslation in dieser Richtung, beim Gehen ein Schritt, ein halber Doppelschritt. Eine zusätzliche ganze Gittertranslation entlang der Linie ergibt dieselbe Gleitspiegellinie; die Hälfte einer doppelt so langen Translation wäre eine ganze und ergäbe nur eine Spiegelung, gefolgt von einer Translation. Weil eine Gleitspiegelung eine Spiegelung enthält, gibt es Gleitspiegellinien nur in Richtungen, in denen auch Spiegellinien möglich sind, also nicht im schiefwinkligen System.

Abb. 4.2 zeigt ein ebenes Muster mit Gleitspiegellinien. Das Fähnchen aus der Zelle wird an der gestrichelten Linie gespiegelt und um *b*/2 verschoben. Die App zeichnet Spiegelbilder orange; Fähnchen, die nur durch Drehen und Verschieben aus dem ersten hervorgehen, bleiben blau. So sieht man auf einen Blick, welche Bilder durch eine Spiegelung entstanden sind. In den Strukturbildern von Kapitel 3 unterscheiden die Farben dagegen Atomsorten. Eine Spiegellinie hat dieses Muster nicht. Seine Ebenengruppe heisst *pg*: primitive Zelle, eine Gleitspiegellinie (Abschnitt 3.2 „Gitter + Motiv: die Symmetrie des Musters“).

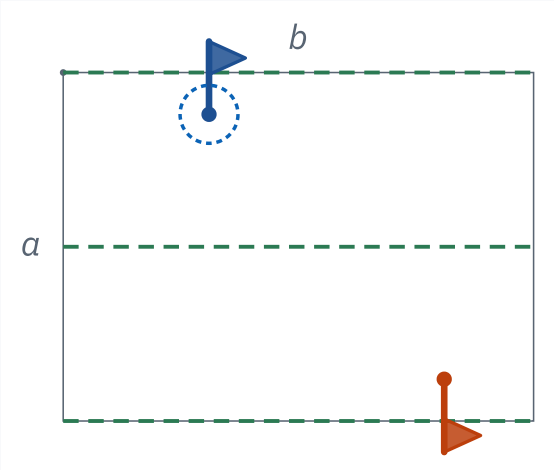
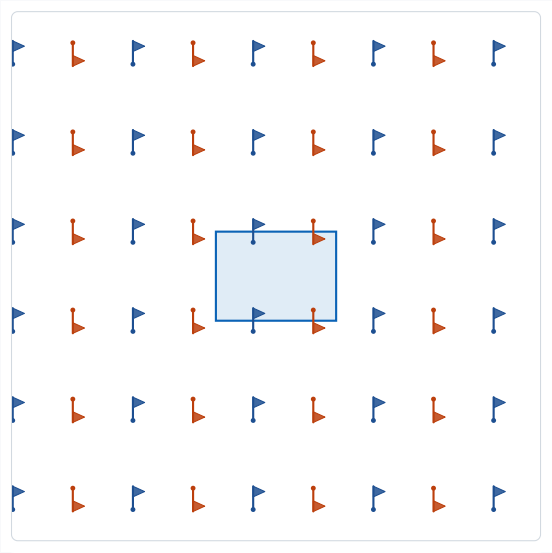


Abb. 4.2a Eine Zelle von *pg*: das Fähnchen (gestrichelter Kreis) und sein Bild unter der Gleitspiegelung. In der App öffnen →



b Das Muster: Spiegelbilder abwechselnd, um eine halbe Zelle versetzt. In der App öffnen →

Abb. 4.2 Die Ebenengruppe *pg*. Die Gleitspiegellinien liegen bei $x = 0$ und $x = ½$, entlang b; die Gleitkomponente ist $b/2$.

MERKE

Eine Gleitspiegelung ist eine Spiegelung an einer Linie, gekoppelt mit einer Verschiebung um die halbe Gitterperiode entlang der Linie (die Hälfte der kürzesten Gittertranslation in dieser Richtung). Zweimal ausgeführt ergibt sie eine Gittertranslation. Gleitspiegellinien zeichnet man gestrichelt und schreibt *g*.

VERTIEFUNG · **Friesgruppen**

Diese Vertiefung knüpft an die Fussspuren in Abb. 4.1 an und zeigt, wie man Muster einteilt, die sich nur in einer Richtung wiederholen. Solche Muster heissen Friese oder Bandornamente, man findet sie an Bordüren, Geländern und Gesimsen. Ihre Symmetriegruppen, die **Friesgruppen**, sind einfacher als die Ebenengruppen: Jede Symmetrieoperation muss die Mittellinie des Frieses auf sich abbilden; die Laufrichtung darf sich dabei umkehren. Drehpunkte können deshalb nur 2-zählig sein, Spiegellinien nur längs oder quer zur Laufrichtung liegen, Gleitspiegellinien nur längs. Es gibt sieben Friesgruppen. Drei davon zeigt Abb. 4.1: nur Translationen (hüpfen), eine Spiegellinie längs (springen), eine Gleitspiegellinie längs (gehen). Die anderen vier haben Spiegellinien quer zur Laufrichtung; 2-zählige Drehpunkte; Spiegellinien quer und eine Gleitspiegellinie längs; oder Spiegellinien längs und quer. In den beiden letzten entstehen die 2-zähligen Drehpunkte von selbst, nach den Regeln aus Abschnitt 4.4 „Operationen verknüpfen“.

4.2 Symmetrieoperationen in Koordinaten

Eine Symmetrieoperation bringt jeden Punkt (x, y) an eine neue Stelle. Die International Tables beschreiben sie durch die Koordinaten dieser neuen Stelle, ausgedrückt durch x und y. Dabei steht $\bar{x}$ für $-x$ (Abschnitt 1.4 „Bruchkoordinaten“). Einige Beispiele in einer rechteckigen Zelle:

KOORDINATEN	OPERATION
x, y	Identität: Jeder Punkt bleibt, wo er ist.
$x + 1, y$	Translation um a
$\bar{x}, \bar{y}$	Drehung um 180° um den Ursprung (0, 0)
$\bar{x}, y$	Spiegelung an der Linie $x = 0$, also an der Gittergeraden entlang b durch den Ursprung
$\bar{x} + ½, y$	Spiegelung an der Linie $x = ¼$
$x + ½, \bar{y}$	Gleitspiegelung an der Linie $y = 0$ mit der Gleitkomponente $a/2$

Lesen kann man das, indem man einen Punkt einsetzt, etwa (0,12; 0,31). Die Drehung $\bar{x}, \bar{y}$ bringt ihn nach (−0,12; −0,31), die Spiegelung $\bar{x} + ½, y$ nach (0,38; 0,31) und die Gleitspiegelung $x + ½, \bar{y}$ nach (0,62; −0,31).

Wo das Symmetrieelement liegt, findet man mit der Frage, welche Punkte an ihrem Ort bleiben. Bei der Spiegelung $\bar{x} + ½, y$ sind es die Punkte mit $-x + ½ = x$, also $x = ¼$: Dort liegt die Spiegellinie. Bei der Drehung $\bar{x}, \bar{y}$ bleibt nur (0, 0). Die Gleitspiegelung $x + ½, \bar{y}$ lässt keinen Punkt an seinem Ort. Die Punkte mit $y = 0$ bleiben aber auf ihrer Linie und werden entlang dieser um $a/2$ verschoben: Das ist die Gleitspiegellinie, und $a/2$ ist die Gleitkomponente.

VERTIEFUNG · **Matrix und Verschiebung**

Diese Vertiefung verbindet die Koordinaten-Schreibweise mit den Matrizen der Punktsymmetrieoperationen; mit ihnen lassen sich Operationen auch rechnerisch verknüpfen. Hinter den Koordinaten stehen eine Matrix W und eine Verschiebung w. Für $\bar{x} + ½, y$ etwa gilt

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} ½ \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} ½ \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x + ½ \\ y \end{pmatrix}$$

Die Matrix W bestimmt die Art der Operation; es sind die Matrizen der Punktsymmetrieoperationen. Die Verschiebung w bestimmt zusammen mit W, wo das Symmetrieelement liegt und ob es eine Gleitkomponente hat. Einige Matrizen:

OPERATION	KOORDINATEN OHNE VERSCHIEBUNG	W
Identität 1	x, y	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
Drehung um 180°	$\bar{x}, \bar{y}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
Spiegelung, Linie entlang b	$\bar{x}, y$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
Spiegelung, Linie entlang a	$x, \bar{y}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
Drehung um 90° (quadratisch)	$\bar{y}, x$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
Spiegelung an der Diagonalen (quadratisch)	y, x	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Lässt man bei allen Operationen einer Ebenengruppe die Verschiebung weg, bleiben die Matrizen. Sie bilden die Punktgruppe der Ebenengruppe; eine Gleitspiegelung wird dabei zur Spiegelung. Deshalb liest man g für die Punktgruppe wie m (Abschnitt 3.2 „Gitter + Motiv: die Symmetrie des Musters“).

MERKE

Eine Symmetrieoperation schreibt man als Koordinaten des Bildpunkts, etwa $\bar{x} + ½, y$. Den Ort des Symmetrieelements findet man, indem man fragt, welche Punkte an ihrem Ort bleiben. Spiegelt die Operation und bleibt dennoch kein Punkt an seinem Ort, ist es eine Gleitspiegelung; ihre Linie wird in sich verschoben. Eine Translation lässt ebenfalls keinen Punkt an seinem Ort, spiegelt aber nicht.

4.3 So listen die International Tables die Operationen

Die International Tables geben für jede Ebenengruppe die Operationen in einer festen Reihenfolge an, mit Nummern. Zu jeder Operation nennen sie die Koordinaten und ein Symbol aus Art und Lage des Symmetrieelements. Für die Ebenengruppe *p2mg* sind es vier:

NR.	KOORDINATEN	SYMBOL	BEDEUTUNG
(1)	x, y	1	Identität
(2)	$\bar{x}, \bar{y}$	2 0, 0	2-zähliger Drehpunkt bei (0, 0)
(3)	$\bar{x} + ½, y$	m ¼, y	Spiegellinie durch alle Punkte (¼, y)
(4)	$x + ½, \bar{y}$	a x, 0	Gleitspiegellinie durch alle Punkte (x, 0), Gleitkomponente $a/2$

Die Lage einer Linie gibt man an wie eine Menge von Punkten: ¼, y sind alle Punkte mit $x = ¼$ und beliebigem y. Bei Gleitspiegellinien steht statt m die Richtung der Gleitkomponente: a für $a/2$, b für $b/2$. Abb. 4.3 zeigt die Operationen (2) bis (4), angewandt auf das Fähnchen bei (0,12; 0,31) aus Abschnitt 4.2 „Symmetrieoperationen in Koordinaten“.

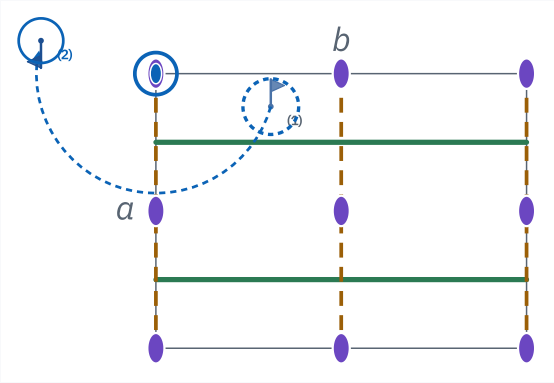
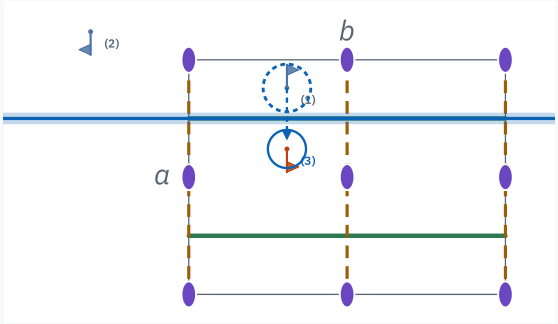
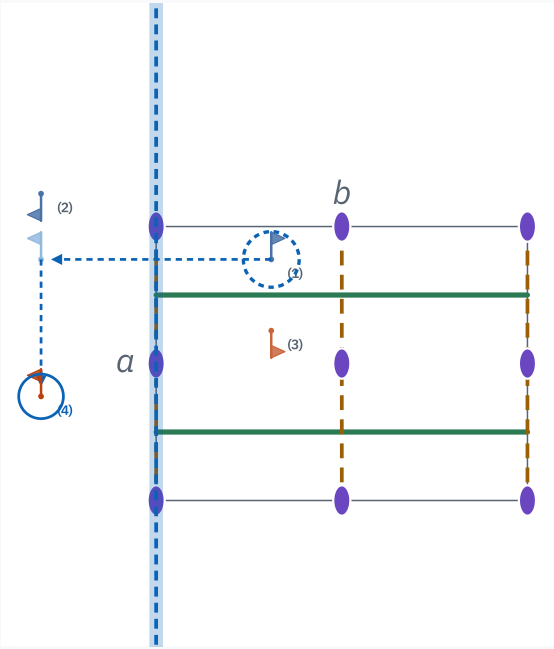


Abb. 4.3a (2) Drehung um 180° um (0, 0). In der App öffnen →



b (3) Spiegelung an *m* ¼, *y*. In der App öffnen →



c (4) Gleitspiegelung an *a* *x*, 0: spiegeln (blasses Zwischenbild), dann um *a*/2 verschieben. In der App öffnen →

Abb. 4.3 Die Operationen (2) bis (4) von *p2mg*, jeweils angewandt auf das Fähnchen (1) bei (0,12; 0,31). Die Zahlen an den Fähnchen sind die Nummern der Operationen in den International Tables; das Ausgangsfähnchen ist (1). *a* zeigt nach unten, *b* nach rechts.

IN DER APP

Im Modus „Ebenengruppen“ über dem Symmetriegerüst „Schritt für Schritt“ wählen; die Leiste unter der Zeichnung schaltet die Schritte durch. Die App wendet die Operationen in der Reihenfolge der International Tables auf das Fähnchen an und markiert in den Kenndaten die zugehörige Zeile.

4.4 Operationen verknüpfen

Führt man zwei Symmetrieoperationen nacheinander aus, ergibt sich wieder eine Symmetrieoperation des Musters. Man schreibt $A \circ B$ und liest von rechts nach links: zuerst B, dann A. In Koordinaten setzt man das Ergebnis von B in A ein.

Für eine Gruppe mit endlich vielen Operationen kann man alle Verknüpfungen in einer Tabelle zusammenstellen, der **Gruppentafel**. Ein Beispiel ist die Punktgruppe 3*m* des gleichseitigen Dreiecks (Abb. 4.4). Sie hat sechs Operationen: die Identität 1, die Drehungen +3 und −3 um 120° gegen bzw. im Uhrzeigersinn und die Spiegelungen m_1, m_2, m_3 an den Linien durch die Stellen 1, 2 und 3. Die Spiegellinien und die Stellen bleiben fest; die Nummern an den Ecken wandern mit dem Dreieck.

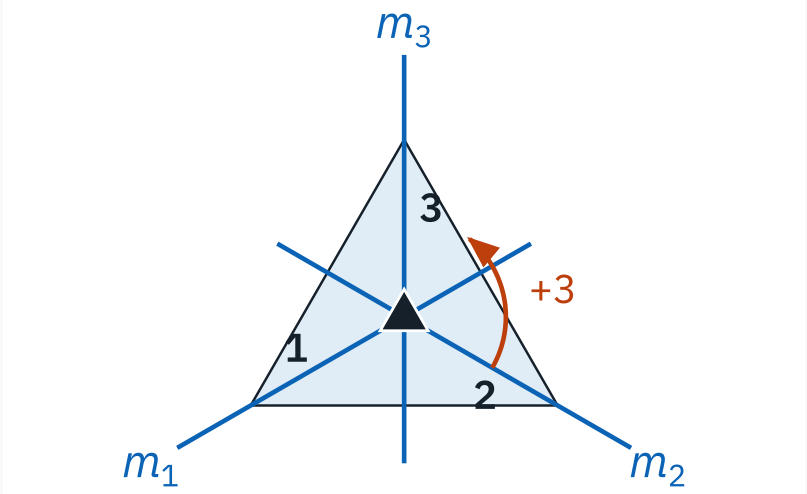


Abb. 4.4 Die Punktgruppe 3*m*: Stellen 1 (links unten), 2 (rechts unten) und 3 (oben), die Spiegellinien m_1, m_2, m_3 durch diese Stellen und die Drehung +3 um 120° gegen den Uhrzeigersinn.

Was ergibt $m_2 \circ m_1$? Zuerst m_1: Die Ecke an Stelle 1 bleibt, die Ecken an den Stellen 2 und 3 tauschen. Dann m_2: Jetzt bleibt die Ecke an Stelle 2, die an den Stellen 1 und 3 tauschen. Am Ende ist jede Ecke eine Stelle im Uhrzeigersinn weitergerückt, die Ecke 1 etwa von links unten nach oben: $m_2 \circ m_1 = -3$. In umgekehrter Reihenfolge ergibt sich $m_1 \circ m_2 = +3$. So erhält man alle 36 Verknüpfungen:

$A \circ B$	**1**	**+3**	**−3**	m_1	m_2	m_3
1	1	+3	−3	m_1	m_2	m_3
+3	+3	−3	1	m_3	m_1	m_2
−3	−3	1	+3	m_2	m_3	m_1
m_1	m_1	m_2	m_3	1	+3	−3
m_2	m_2	m_3	m_1	−3	1	+3
m_3	m_3	m_1	m_2	+3	−3	1

Man liest die Tafel so: Zeile *A*, Spalte *B*, im Feld steht $A \circ B$, also zuerst die Operation über der Spalte, dann die links neben der Zeile. Drei Eigenschaften fallen auf. Jede Operation kommt in jeder Zeile und jeder Spalte genau einmal vor. Die Tafel ist nicht symmetrisch zur Diagonalen, weil es auf die Reihenfolge ankommt. Gruppen, in denen es nie auf die Reihenfolge ankommt, heissen **abelsch** (kommutativ); ihre

Tafel ist symmetrisch zur Diagonalen. 3*m* ist also nicht abelsch. Und der Block links oben enthält nur 1, +3 und −3: Die Drehungen allein bilden die Untergruppe 3 (Abschnitt 3.1 „Die zehn Punktgruppen der Ebene“).

Dieselbe Schreibweise gilt für alle Punktgruppen der Ebene. Die Drehungen heissen 1 (Identität), 2 (Drehung um 180°) und +*n* bzw. −*n* für die Drehungen um 360°/*n* gegen bzw. im Uhrzeigersinn (*n* = 3, 4, 6); die Punktgruppe 6 hat also die Operationen 1, 2, +3, −3, +6 und −6. Die Spiegelungen erhalten als Index eine Gitterrichtung (Abb. 4.5). In 2*mm* und 4*mm* ist es die Richtung, die senkrecht auf der Spiegellinie steht: In 2*mm* spiegelt m_a an der Linie senkrecht zu *a*, m_b an der Linie senkrecht zu *b*. In 4*mm* kommen die Diagonalen hinzu: m_{a+b} und m_{a-b}. In 6*mm* gibt es drei gleichwertige Achsen $a_1 = a$, $a_2 = b$ und $a_3 = -(a + b)$, und zu jeder Achse gehören zwei Spiegellinien, die senkrecht aufeinander stehen. Ein Zeichen am *m* sagt, wie die Linie zur Achse liegt: $m_{a1}{}^{\perp}$ spiegelt an der Linie senkrecht zu a_1, $m_{a1}{}^{\parallel}$ an der Linie parallel zu a_1; ebenso für a_2 und a_3. Die hexagonalen Ebenengruppen *p*3*m*1 und *p*31*m* enthalten je eine dieser beiden Dreiergruppen: *p*3*m*1 die Spiegelungen $m_{ai}{}^{\perp}$, *p*31*m* die Spiegelungen $m_{ai}{}^{\parallel}$. In der Punktgruppe 3*m* für sich gehen die Spiegellinien wie in Abb. 4.4 durch die Stellen 1, 2 und 3. Damit lässt sich für jede Punktgruppe die Gruppentafel aufstellen und prüfen, welche Teilmengen Untergruppen sind. In 4*mm* ist $\{1, 2, m_a, m_b\}$ eine Untergruppe, die Punktgruppe 2*mm*; $\{1, 2, m_a, m_{a+b}\}$ dagegen nicht, denn $m_{a+b} \circ m_a = +4$ liegt nicht darin. Abelsch sind von den Punktgruppen mit mehr als zwei Operationen 2*mm*, 3, 4 und 6: Drehungen um denselben Punkt sind vertauschbar, und in 2*mm* ist jede Operation zu sich selbst invers. In 3*m*, 4*mm* und 6*mm* kommt es dagegen auf die Reihenfolge an: In 4*mm* ist $m_{a+b} \circ m_a = +4$, aber $m_a \circ m_{a+b} = -4$.

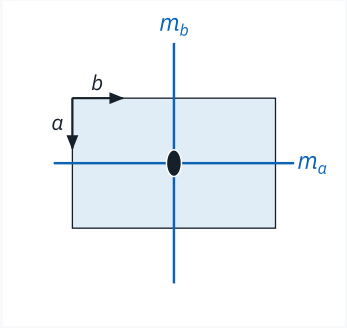
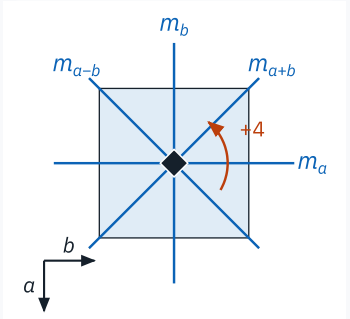
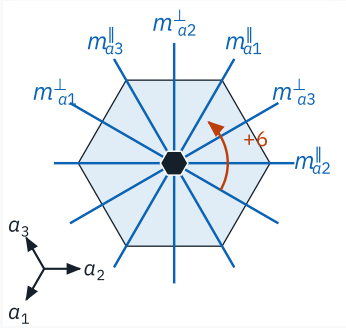


Abb. 4.5a 2*mm*: m_a senkrecht zu *a*, m_b senkrecht zu *b*.



b 4*mm*: m_a, m_b, m_{a+b}, m_{a-b}; +4 dreht um 90° gegen den Uhrzeigersinn.



c 6*mm*: $m_{ai}{}^{\perp}$ senkrecht zu a_i, $m_{ai}{}^{\parallel}$ parallel zu a_i; +6 dreht um 60° gegen den Uhrzeigersinn.

Abb. 4.5 Bezeichnungen der Operationen in den Punktgruppen 2*mm*, 4*mm* und 6*mm*, mit den Achsen wie in der App. In 2*mm* und 4*mm* ist der Index einer Spiegelung die Richtung senkrecht zu ihrer Linie; in 6*mm* sagen ⊥ und ∥, ob die Linie senkrecht oder parallel zur Achse a_i im Index liegt. Die Untergruppen 2, 4, 6 und *m* erhalten dieselben Namen.

In einem periodischen Muster kommen die Translationen hinzu. Ein Beispiel: *B* sei die Drehung um 180° um den Ursprung, $\bar{x}$, $\bar{y}$, und *A* die Translation um *a*, *x* + 1, *y*. Zuerst *B*, dann *A* ergibt

$$(x, y) \to (-x, -y) \to (-x + 1, -y).$$

Welche Operation ist $\bar{x} + 1$, $\bar{y}$? Beide Vorzeichen wechseln, also eine Drehung um 180°. An ihrem Ort bleibt der Punkt mit $-x + 1 = x$ und $-y = y$, also (½, 0). Die Translation hat den Drehpunkt um die halbe Translation verschoben. Genau so entstehen die 2-zähligen Drehpunkte auf den Kantenmitten und in der

Zellmitte, die Abschnitt 2.1 „Drehpunkte und Spiegellinien“ in jedem Gitter gezeigt hat: aus dem Drehpunkt im Ursprung und den Translationen a, b und $a + b$.

Verknüpft man Translationen mit Drehungen und Spiegelungen, findet man auf dieselbe Weise vier Regeln. Abb. 4.6 zeigt zu jeder ein Beispiel, wie es die App mit „Herkunft der Elemente“ erklärt. Die Fähnchen sind hier anders nummeriert als in Abb. 4.3: Das Fähnchen 0 geht durch B nach 1 und durch A nach 2; die Operation $C = A \circ B$ bringt es direkt von 0 nach 2.

1. **Drehung + Translation = Drehung um denselben Winkel um einen anderen Punkt.** Bei einer Drehung um 180° liegt der neue Drehpunkt in der Mitte der Translation (Abb. 4.6a).
2. **Spiegelung + Translation senkrecht zur Linie = Spiegelung an einer parallelen Linie, um die halbe Translation verschoben.** Aus $\bar{x}$, y und der Translation um a wird $\bar{x} + 1$, y: die Spiegellinie bei $x = ½$ (Abb. 4.6b). Deshalb liegen parallele Spiegellinien im Abstand einer halben Gittertranslation.
3. **Spiegelung + Translation schräg zur Linie = Gleitspiegelung.** Den Anteil der Translation senkrecht zur Linie behandelt man wie in Regel 2: Die Linie verschiebt sich um die Hälfte davon. Der Anteil parallel zur Linie wird zur Gleitkomponente. Aus $\bar{x}$, y und der Translation um $(a + b)/2$ wird $\bar{x} + ½$, $y + ½$: eine Gleitspiegellinie bei $x = ¼$ mit der Gleitkomponente $b/2$ (Abb. 4.6c). Ist der Anteil parallel zur Linie selbst eine Gittertranslation, entsteht keine neue Gleitspiegellinie, sondern wieder eine Spiegellinie: $\bar{x}$, y und die Translation um $a + b$ ergeben $\bar{x} + 1$, $y + 1$, die Spiegellinie bei $x = ½$, gefolgt von der Translation um b.
4. **Zwei Spiegelungen an Linien, die sich im Winkel α schneiden, ergeben eine Drehung um 2α um den Schnittpunkt.** Zwei senkrechte Spiegellinien, $\bar{x}$, y und x, $\bar{y}$, ergeben $\bar{x}$, $\bar{y}$, die Drehung um 180°; das ist der Symmetriesatz II (Skript „Stereographische Projektion“, Abschnitt 4.3). Umgekehrt ergeben eine Drehung und eine Spiegelung eine Spiegelung oder Gleitspiegelung an einer Linie, die um den halben Drehwinkel gedreht ist (Abb. 4.6d).

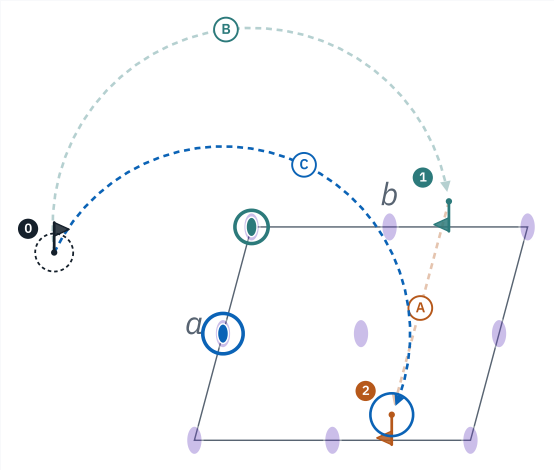
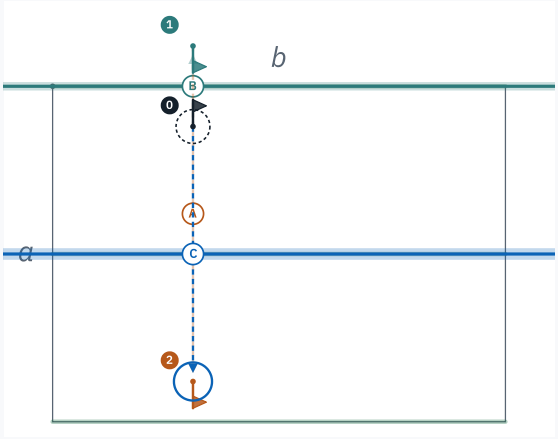
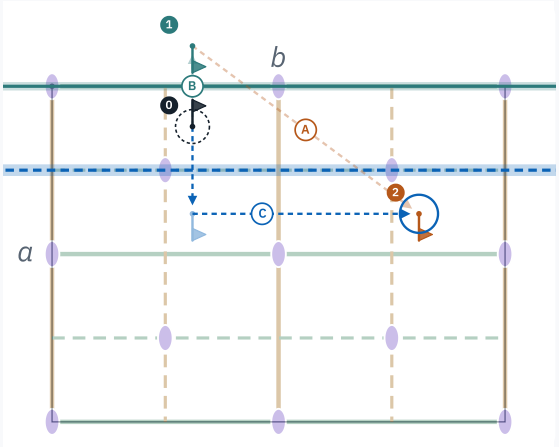


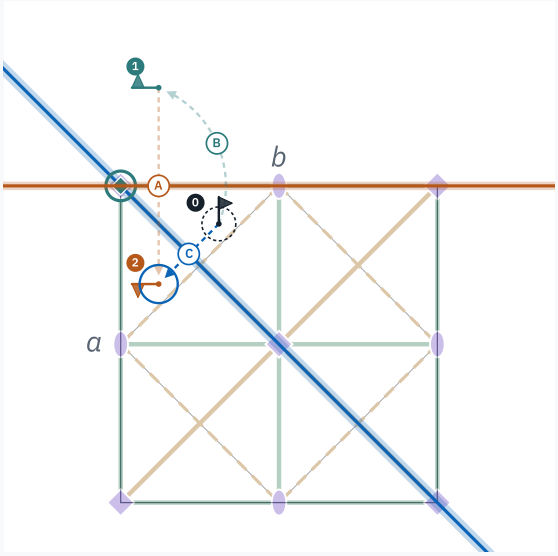
Abb. 4.6a *p2*: *B* Drehung um (0, 0), *A* Translation um *a*, *C* Drehung um (½, 0).
In der App öffnen →



b *pm*: *B* Spiegelung an *m* 0, *y*, *A* Translation um *a*, *C* Spiegelung an *m* ½, *y*. In der App öffnen →



c *c2mm*: *B* Spiegelung an *m* 0, *y*, *A* Translation um (*a* + *b*)/2, *C* Gleitspiegelung an *b* ¼, *y*.
In der App öffnen →



d *p4mm*: *B* Drehung um 90° gegen den Uhrzeigersinn um (0, 0), 4^+ 0, 0, *A* Spiegelung an *m* 0, *y*, *C* Spiegelung an der Diagonalen *m* *x*, *x*.
In der App öffnen →

Abb. 4.6 Die vier Regeln an Beispielen der App. Hervorgehoben sind die beteiligten Symmetrieelemente; die Wege des Fähnchens tragen die Buchstaben der Operationen.

Regel 4 steht auch in der Gruppentafel: Die Linien von m_1 und m_2 schneiden sich unter 60°, und $m_2 \circ m_1$ ist eine Drehung um 120°. Neu ist im periodischen Muster nur, dass die Translationen hinzukommen. Sie machen aus jedem Symmetrieelement unendlich viele, und nach den Regeln 1 bis 3 liegen diese nicht nur auf den Gitterpunkten, sondern auch dazwischen.

MERKE

$A \circ B$: zuerst B, dann A. Drehung + Translation = Drehung um einen anderen Punkt; Spiegelung + Translation senkrecht = parallele Spiegellinie, um die halbe Translation verschoben; Spiegelung + Translation schräg = Gleitspiegelung, wenn der Anteil entlang der Linie die halbe Gitterperiode ist (bis auf ganze Gittertranslationen); zwei Spiegelungen im Winkel α = Drehung um 2α.

IN DER APP

Über dem Symmetriegerüst „Herkunft der Elemente“ wählen und im Gerüst ein Symmetrieelement anklicken oder antippen. Die App zeigt, aus welchen zwei Operationen es folgt, die Wege des Fähnchens und die passende Regel; „Abspielen“ führt die Schritte nacheinander vor. Mit „Aufbau aus Erzeugenden“ daneben entsteht das ganze Symmetriegerüst Schritt für Schritt aus den Erzeugenden der International Tables.

4.5 Mehr Symmetrieelemente, als das Symbol nennt

Die Regeln erklären, warum ein Symmetriegerüst oft mehr Elemente zeigt, als das Symbol der Ebenengruppe vermuten lässt.

***p4mm*.** Das Symbol nennt den 4-zähligen Drehpunkt und Spiegellinien. Im Symmetriegerüst liegen aber auch diagonale Gleitspiegellinien zwischen den diagonalen Spiegellinien (Abb. 4.7a). Sie folgen aus Regel 3: Die Spiegelung an der Diagonalen, y, x, und die Translation um a ergeben $y + 1, x$. Die Translation a liegt schräg zur Diagonalen. Ihr Anteil senkrecht zur Linie ist $(a - b)/2$; die Linie verschiebt sich um die Hälfte davon und geht dann durch (¼, −¼) und (½, 0). Ihr Anteil parallel zur Linie, $(a + b)/2$, wird zur Gleitkomponente. Die International Tables schreiben eine solche Gleitspiegelung mit schräger Gleitkomponente als $g(½, ½)$; die Probe: $y + 1, x$ bringt (½, 0) nach (1, ½), also um (½, ½) entlang der Linie (Abb. 4.7b).

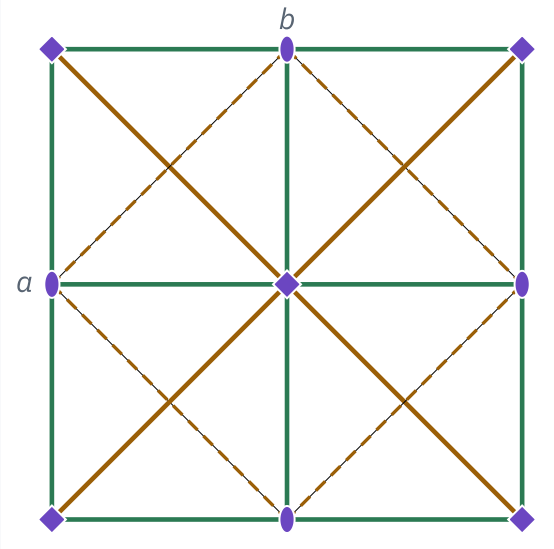
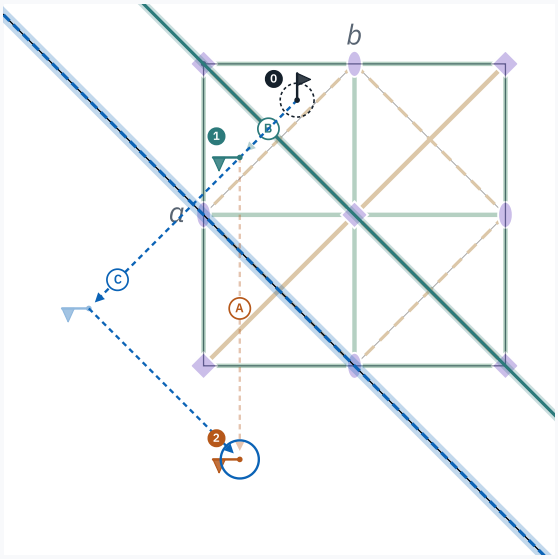


Abb. 4.7a Symmetriegerüst von *p4mm*. Gestrichelt: Gleitspiegellinien.
In der App öffnen →



b *B* Spiegelung an *m* x, x, *A* Translation um a, *C* Gleitspiegelung an der Linie durch (½, 0) parallel zur Diagonalen. In der App öffnen →

Abb. 4.7 Die diagonalen Gleitspiegellinien von *p4mm* stehen nicht im Symbol, folgen aber aus Spiegelung und Translation.

c2mm. Hier ist die Zentrierungstranslation um $(a + b)/2$ schräg zu allen Spiegellinien. Nach Regel 3 liegt deshalb zwischen je zwei parallelen Spiegellinien eine Gleitspiegellinie, bei $x = ¼$ und bei $y = ¼$ (Abb. 4.6c). Dasselbe geschieht in Abb. 1.6b, Ebenengruppe *cm*: Die Spiegellinien durch die Dreiecke erzeugen mit der Zentrierung Gleitspiegellinien bei $x = ¼$ und ¾; in der App sieht man sie mit „Symmetrieelemente“. Auch in *p*3*m*1, *p*31*m* und *p*6*mm* liegen Translationen schräg zu den Spiegellinien; deshalb verläuft dort zwischen je zwei parallelen Spiegellinien eine Gleitspiegellinie. Die Symbole *cm*, *c*2*mm*, *p*4*mm*, *p*3*m*1, *p*31*m* und *p*6*mm* nennen diese Gleitspiegellinien nicht; welche Elemente ein Symbol nennt, zeigt Kapitel 5.

Das Dreiecksbeispiel. Dreht man in Abb. 1.6b das Dreieck in der Zellmitte um, sodass seine Spitze entlang $-b$ zeigt, ist die Verschiebung um $(a + b)/2$ keine Symmetrieoperation mehr. Man könnte erwarten, dass nur die Spiegellinien durch die Dreiecke bleiben. Die App findet aber die Ebenengruppe *p*2*mg*, mit 2-zähligen Drehpunkten und Gleitspiegellinien, die niemand hineingesteckt hat (Abb. 4.8).

Die Drehung um 180° um (¼, ¼) bringt das Dreieck bei (0, 0) nach (½, ½) und kehrt dabei seine Spitze um: genau das umgedrehte Dreieck in der Zellmitte. In Koordinaten ist das $\bar{x} + ½, \bar{y} + ½$. Mit der Spiegelung an der Linie durch die Dreiecke, $\bar{x}$, y, ergibt sie nach Regel 4 eine Operation an einer dazu senkrechten Linie: zuerst die Spiegelung, dann die Drehung, ergibt $x + ½, \bar{y} + ½$. Das ist eine Gleitspiegelung an der Linie $y = ¼$ mit der Gleitkomponente $a/2$. Auch sie bringt das eine Dreieck auf das andere.

Die konventionelle Zelle hat ihren Ursprung deshalb auf dem Drehpunkt bei (¼, ¼), wie es die International Tables für *p*2*mg* verlangen („Ursprung auf 2 1 *g*“; Abschnitt 3.4 „Wenn sich die konventionelle Zelle ändert“).

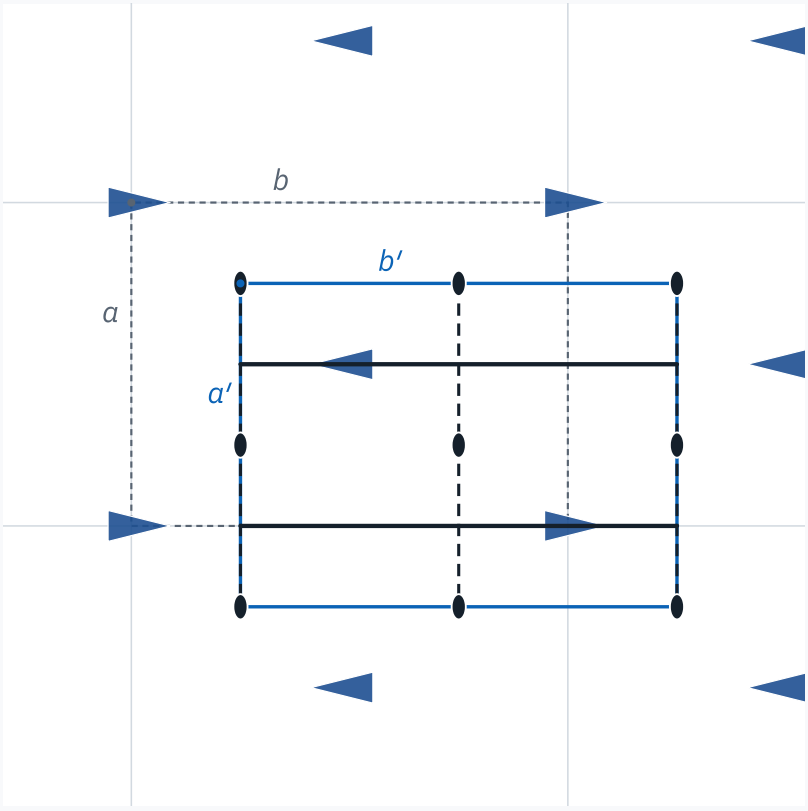


Abb. 4.8 Dreiecke bei (0, 0) mit Spitze entlang b und bei (½, ½) mit Spitze entlang $-b$: *p*2*mg*. Die konventionelle Zelle a', b' hat ihren Ursprung auf dem 2-zähligen Drehpunkt bei (¼, ¼) der gegebenen Zelle (grau gestrichelt). In der App öffnen →

MERKE

Aus wenigen Symmetrieelementen und den Translationen folgen nach festen Regeln weitere: Drehpunkte zwischen den Gitterpunkten, parallele Spiegellinien im halben Abstand, Gleitspiegellinien. Das Symbol einer Ebenengruppe nennt nur einen Teil davon.

IN DER APP

Im Modus „Gitter und Basis“ unter „Vorgabe“ (Gruppe „Dreiecksbeispiel“) „Stufe 3: Spitze im Zentrum umgekehrt“ wählen; die Kenndaten zeigen *p2mg*. Der Knopf „im Modus ‚Ebenengruppen‘ ansehen“ öffnet die Gruppe, und „Herkunft der Elemente“ erklärt jedes ihrer Elemente.

ZUSAMMENFASSUNG

- Eine Gleitspiegelung koppelt eine Spiegelung mit einer Verschiebung um die halbe Gitterperiode entlang der Linie. Gleitspiegellinien sind gestrichelt und heissen *g*, in den International Tables nach der Gleitrichtung *a*, *b* oder *g*(…).
- Eine Symmetrieoperation schreibt man als Koordinaten des Bildpunkts, etwa $\bar{x} + ½, y$. Der Ort des Elements sind die Punkte, die an ihrem Ort bleiben, bei einer Gleitspiegelung die Linie, die in sich verschoben wird.
- $A \circ B$ heisst: zuerst *B*, dann *A*; die Reihenfolge kann das Ergebnis ändern. Die Gruppentafel listet alle Verknüpfungen einer Gruppe. Vier Regeln beschreiben, was aus Drehungen, Spiegelungen und Translationen entsteht.
- Deshalb hat ein Muster mehr Symmetrieelemente, als sein Symbol nennt, etwa die Gleitspiegellinien in *p4mm* und *c2mm* oder die Drehpunkte im Dreiecksbeispiel.

ZUR VERTIEFUNG

- Hinter jeder Operation stehen eine Matrix und eine Verschiebung; die Matrizen allein bilden die Punktgruppe.
- Muster, die sich nur in einer Richtung wiederholen, haben eine der sieben Friesgruppen.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 6.4 (Koppelung und Kombination von Symmetrieoperationen, Tab. 6.2, S. 75–76), Abschn. 6.1 (2-zählige Drehachsen auch auf den Kantenmitten und in der Zellmitte, S. 69), Abschn. 7.2 (Symmetriesatz II, S. 102), Abschn. 10.1.1 (Gleitspiegelebene: Koppelung von Spiegelung und Translation parallel zur Ebene, Gleitvektor die Hälfte einer Gittertranslation, zweimal ausgeführt eine Gittertranslation, nur in Orientierungen, in denen Spiegelebenen vorkommen, S. 198), Abschn. 10.2 (zusätzliche Gleitspiegellinien in *c2mm*, *p4mm*, *p6mm*, nicht im Symbol, S. 206), Abschn. 11.1 (Symmetrieoperationen als Matrix und Vektor; beim Nacheinanderausführen steht die zuerst ausgeführte Operation rechts, S. 258–260), Abschn. 11.2 (das Kommutativgesetz gilt nur in manchen Gruppen, S. 264), Abschn. 11.4 (Gruppentafeln; jedes Element genau einmal in jeder Zeile und Spalte; Gruppentafel von 3*m* nicht symmetrisch; zuerst die Operation der obersten Zeile, dann die der linken Spalte, Abb. 11.5, S. 268–270).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 4.1.1 (Gleitspiegelung an Fussabdrücken: hüpfen, wie ein Känguru springen, gehen; Abb. 4.7–4.9, S. 133–134).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Abschn. 2.2.9 (Koordinaten der allgemeinen Lage als Kurzschreibweise der Symmetrieoperationen; Symbole der Operationen mit Gleitanteil *a*, *b* bzw. *g*(…)

und Lage des Elements, S. 26–27), Part 6 (*pg*: *b* 0, *y*, S. 95; *p*2*mg*: Operationen (1)–(4), „Origin at 2 1 g“, S. 98; *c*2*mm*: *b* ¼, *y* und *a x*, ¼, S. 100; *p*4*mm*: *m x*, *x*, S. 102; *p*4*gm*: *g*(½, ½) *x*, *x*, S. 103), Abschn. 8.1.1 (Friesgruppen werden in Vol. E behandelt, S. 720).

- International Tables for Crystallography, Vol. E, hrsg. von V. Kopský und D. B. Litvin, 2. Online-Ausgabe (2010): die sieben Friesgruppen.

5 Die 17 Ebenengruppen

Jedes periodische Muster in der Ebene hat eine von genau 17 Ebenengruppen. Ihr Symbol fasst zusammen, was die vorigen Kapitel einzeln behandelt haben: die Zelle, die Drehpunkte, die Spiegel- und Gleitspiegellinien. Mit dem Symbol beginnt jede Seite der International Tables.

LERNZIELE

- erklären, wie aus 5 Bravais-Gittern und 10 Punktgruppen 17 Ebenengruppen entstehen
- das Symbol einer Ebenengruppe lesen und die Symmetrieelemente den Blickrichtungen zuordnen
- die beiden Diagramme einer Ebenengruppe in den International Tables lesen
- zu einer Ebenengruppe die Punktgruppe und das Kristallsystem angeben

ZUR VERTIEFUNG

- symmorphe und nichtsymmorphe Ebenengruppen unterscheiden
- die Punktgruppe als Faktorgruppe der Ebenengruppe verstehen

5.1 Wie man auf 17 kommt

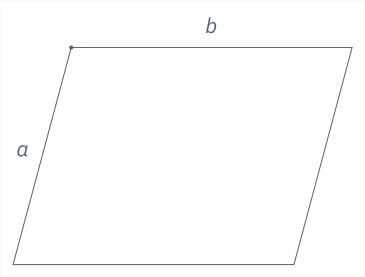
Eine Ebenengruppe ist die vollständige Symmetrie eines periodischen Musters: alle Translationen, Drehungen, Spiegelungen und Gleitspiegelungen zusammen (Abschnitt 3.2 „Gitter + Motiv: die Symmetrie des Musters“). Die vorigen Kapitel liefern die Bausteine: 4 Kristallsysteme, 5 Bravais-Gitter und 10 Punktgruppen (Kapitel 2 und 3). Daraus entstehen die Ebenengruppen in zwei Schritten.

Punktgruppe und Gitter kombinieren. Zu jeder Punktgruppe gehören die Gitter ihres Kristallsystems. Die Punktgruppen *m* und 2*mm* des rechteckigen Systems passen zum primitiven und zum zentrierten Gitter; das ergibt *pm*, *cm*, *p*2*mm* und *c*2*mm*. Die Punktgruppe 3*m* passt auf zwei Arten in das hexagonale Gitter: mit den Spiegellinien senkrecht zu den Zellkanten oder entlang der Zellkanten; das ergibt *p*3*m*1 und *p*31*m*. Alle anderen Punktgruppen geben je eine Ebenengruppe. Zusammen sind das 13.

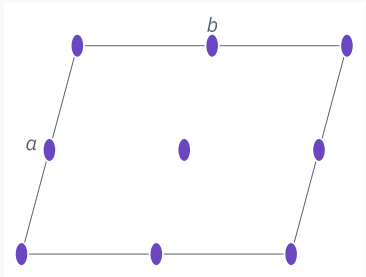
Einige oder alle Spiegellinien durch Gleitspiegellinien ersetzen. Wo es das Gitter erlaubt, kann an die Stelle einer Spiegellinie eine Gleitspiegellinie treten. So entstehen aus *pm*, *p*2*mm* und *p*4*mm* die Ebenengruppen *pg*, *p*2*mg*, *p*2*gg* und *p*4*gm*. In *p*2*mg* und *p*4*gm* bleiben Spiegellinien, in *pg* und *p*2*gg* werden alle ersetzt. In zentrierten Zellen und im hexagonalen System entsteht dabei nichts Neues: Dort gibt es in derselben Richtung neben den Spiegellinien schon Gleitspiegellinien (Abschnitt 4.5 „Mehr Symmetrieelemente, als das Symbol nennt“). Mit diesen vier sind es 17.

Nr.	Symbol	Punktgruppe	Kristallsystem	Bravais-Gitter	Symmorph
1	*p*1	1	schiefwinklig	*mp*	ja
2	*p*2	2	schiefwinklig	*mp*	ja
3	*pm*	*m*	rechteckig	*op*	ja
4	*pg*	*m*	rechteckig	*op*	nein
5	*cm*	*m*	rechteckig	*oc*	ja
6	*p*2*mm*	2*mm*	rechteckig	*op*	ja
7	*p*2*mg*	2*mm*	rechteckig	*op*	nein
8	*p*2*gg*	2*mm*	rechteckig	*op*	nein
9	*c*2*mm*	2*mm*	rechteckig	*oc*	ja
10	*p*4	4	quadratisch	*tp*	ja
11	*p*4*mm*	4*mm*	quadratisch	*tp*	ja
12	*p*4*gm*	4*mm*	quadratisch	*tp*	nein
13	*p*3	3	hexagonal	*hp*	ja
14	*p*3*m*1	3*m*	hexagonal	*hp*	ja
15	*p*31*m*	3*m*	hexagonal	*hp*	ja
16	*p*6	6	hexagonal	*hp*	ja
17	*p*6*mm*	6*mm*	hexagonal	*hp*	ja

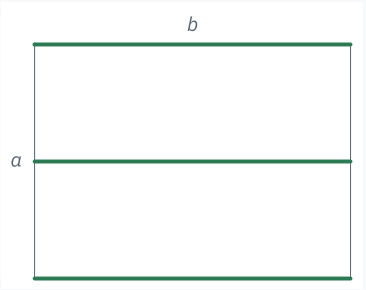
Die Nummern und Symbole sind die der International Tables. Die Spalte „symmorph“ erklärt die Vertiefung am Ende dieses Abschnitts. Abb. 5.1 zeigt die Symmetriegerüste aller 17 Gruppen.



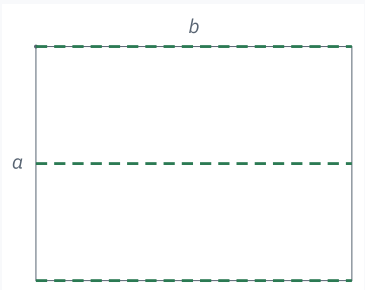
1 *p1* App →



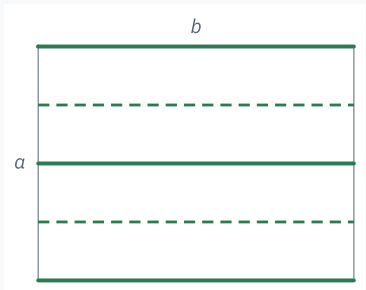
2 *p2* App →



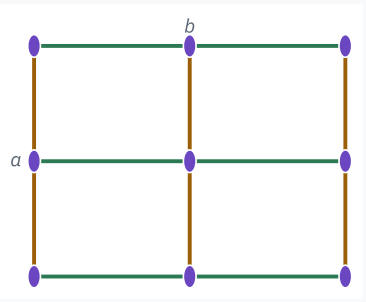
3 *pm* App →



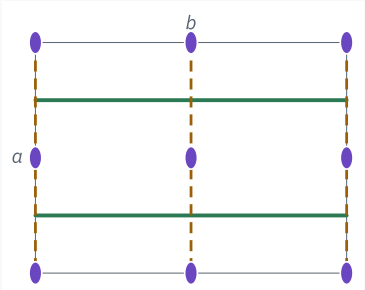
4 *pg* App →



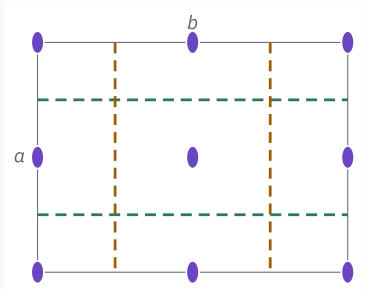
5 *cm* App →



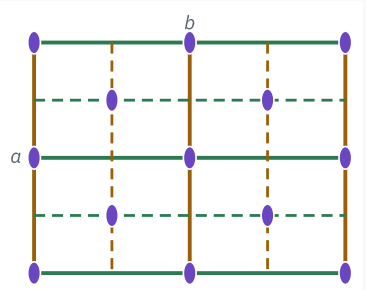
6 *p2mm* App →



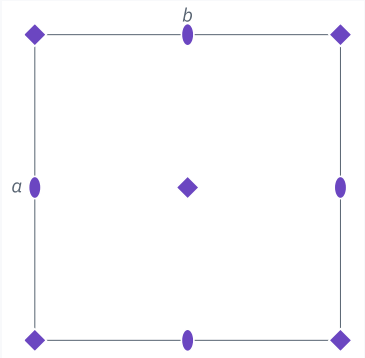
7 *p2mg* App →



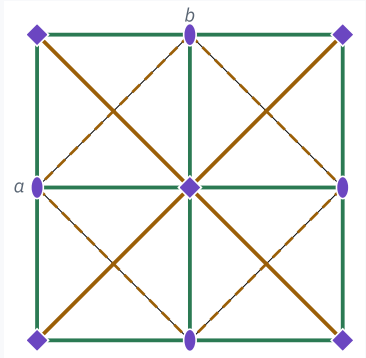
8 *p2gg* App →



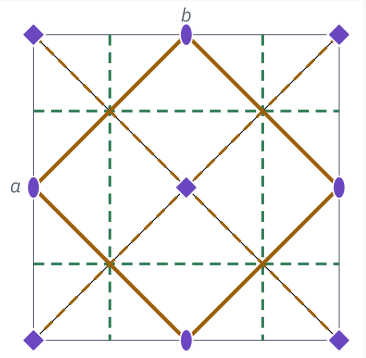
9 *c2mm* App →



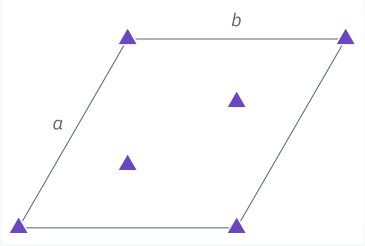
10 *p4* App →



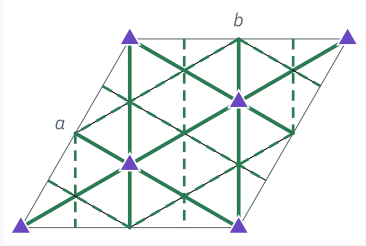
11 *p4mm* App →



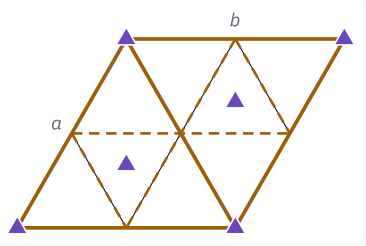
12 *p4gm* App →



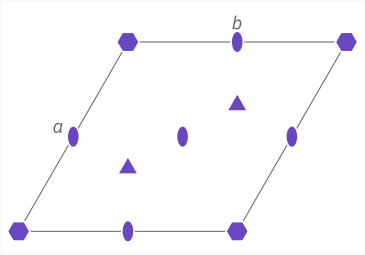
13 *p3* App →



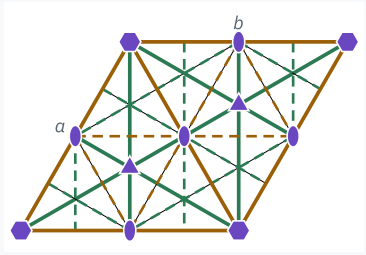
14 *p3m1* App →



15 *p31m* App →



16 *p6* App →



17 *p6mm* App →

Abb. 5.1 Die Symmetriegerüste der 17 Ebenengruppen, je eine Elementarzelle, nach Kristallsystem geordnet. Drehpunkte violett; Spiegellinien durchgezogen, Gleitspiegellinien gestrichelt, grün oder ocker nach der Blickrichtung, auf die sich ihre Stelle im Symbol bezieht (Abschnitt 5.2 „Das Symbol lesen“).

MERKE

4 Kristallsysteme, 5 Bravais-Gitter, 10 Punktgruppen, 17 Ebenengruppen. 13 Ebenengruppen entstehen, indem man Punktgruppen und Gitter kombiniert; 4 weitere, indem man einige oder alle Spiegellinien durch Gleitspiegellinien ersetzt.

VERTIEFUNG · **Symmorph und nichtsymmorph**

Diese Vertiefung gibt den 13 Ebenengruppen des ersten Schritts einen Namen, den man bei den Raumgruppen wieder braucht. Sie heissen **symmorph**: Es gibt einen Punkt, dessen Lagesymmetrie (Abschnitt 3.2 „Gitter + Motiv: die Symmetrie des Musters“) die ganze Punktgruppe ist; in *p*2*mm* etwa den Ursprung mit der Lagesymmetrie 2*mm*. Die vier Ebenengruppen des zweiten Schritts, *pg*, *p*2*mg*, *p*2*gg* und *p*4*gm*, heissen **nichtsymmorph**. In *p*2*mg* etwa hat kein Punkt die Lagesymmetrie 2*mm*: Kein Drehpunkt liegt auf einer Spiegellinie (Abb. 5.4). Man erkennt die nichtsymmorphen Gruppen am *g* im Symbol; Gleitspiegellinien haben dagegen auch symmorphe Gruppen wie *c*2*mm*. Im Raum ist es genauso, mit Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen: *P*2 und *Cm* sind symmorph, $P2_1$ und *Pc* nicht. Die International Tables definieren: Eine Gruppe ist symmorph, wenn sich ihre Operationen, abgesehen von den Translationen, so wählen lassen, dass sie alle einen gemeinsamen Punkt festlassen.

5.2 Das Symbol lesen

Das Symbol beschreibt die Symmetrie entlang einiger ausgezeichneter Richtungen, der **Blickrichtungen**. Das sind die Richtungen, entlang derer Symmetrieelemente liegen können: senkrecht zur Ebene die Drehachse, in der Ebene die Gitterrichtungen, zu denen Spiegellinien senkrecht stehen können, etwa *a* und *b* im rechteckigen System. Gleichwertige Richtungen, die eine Drehung ineinander überführt, zählen als eine Blickrichtung. Die Zählung ist dieselbe wie bei den Punktgruppen des Raums (Skript „Stereographische Projektion“, Abschnitt 5.1): Die 1. Blickrichtung steht senkrecht zur Ebene, die 2. und 3. liegen in ihr. Bei Hoffmann heissen die 2. und 3. Blickrichtung Haupt- und Nebenrichtung.

KRISTALLSYSTEM	2. BLICKRICHTUNG (HAUPTRICHTUNG)	3. BLICKRICHTUNG (NEBENRICHTUNG)
schiefwinklig	–	–
rechteckig	*a*	*b*
quadratisch	*a*, *b*	Diagonalen $a - b$, $a + b$
hexagonal	*a*, *b*, $a + b$	$a - b$, $a + 2b$, $2a + b$

Das Symbol hat dann bis zu vier Stellen:

1. einen kleinen Buchstaben für die konventionelle Zelle: *p* primitiv, *c* zentriert;
2. die 1. Blickrichtung: die höchste Zähligkeit eines Drehpunkts, 1, 2, 3, 4 oder 6 (1: kein Drehpunkt);
3. die 2. Blickrichtung: *m* oder *g*, wenn senkrecht zu ihr Spiegel- oder Gleitspiegellinien liegen, sonst 1;
4. die 3. Blickrichtung: ebenso.

Eine Spiegellinie wird durch die Richtung angegeben, zu der sie senkrecht steht, wie eine Spiegelebene im Raum durch ihre Normale. In Abb. 5.4a etwa verlaufen die grünen Spiegellinien entlang *b*; sie stehen senkrecht zu *a* und gehören deshalb an die dritte Stelle des Symbols, zur 2. Blickrichtung. Gibt es senkrecht zu einer Blickrichtung Spiegel- und Gleitspiegellinien, steht *m*. Stehen an der 2. und 3. Blickrichtung nur Einsen, lässt man beide weg: *p*6 statt *p*611, *p*1 statt *p*111. Steht nur an einer der beiden Stellen eine 1, bleibt sie stehen, wie in *p*3*m*1 und *p*31*m*; die einzigen Ausnahmen sind *pm*, *pg* und *cm* (siehe unten).

Beispiele:

- *p*2*mg*: primitive Zelle, 2-zählige Drehpunkte, Spiegellinien senkrecht zu *a*, Gleitspiegellinien senkrecht zu *b* (Abb. 5.4a).
- *pm*, ausführlich *p*1*m*1: kein Drehpunkt, Spiegellinien senkrecht zu *a*, senkrecht zu *b* nichts. Bei *pm*, *pg* und *cm* verwenden die International Tables die Kurzform; bei allen anderen ist das Symbol vollständig.
- *p*4*gm*: primitive Zelle, 4-zählige Drehpunkte, Gleitspiegellinien senkrecht zu *a* und *b*, Spiegellinien senkrecht zu den Diagonalen.
- *c*2*mm*: zentrierte Zelle, 2-zählige Drehpunkte, Spiegellinien senkrecht zu *a* und zu *b*. Senkrecht zu *a* und *b* gibt es auch Gleitspiegellinien; das Symbol nennt nur *m*.

Das letzte Beispiel zeigt: Das Symbol nennt für jede Blickrichtung nur ein Zeichen, nicht alle Symmetrieelemente. Das genügt, um die Gruppe festzulegen; alle weiteren Elemente folgen nach den Regeln aus Abschnitt 4.4 „Operationen verknüpfen“.

Wie viel ein einzelnes Zeichen ausmacht, zeigt Abb. 5.2. *p*4*mm* und *p*4*gm* haben dasselbe quadratische Gitter und dieselbe Punktgruppe 4*mm*; die Symbole unterscheiden sich nur an der 2. Blickrichtung. In *p*4*mm* liegen alle 4-zähligen Drehpunkte auf Schnittpunkten von Spiegellinien. Liegt ein Fähnchen nahe bei einem solchen Punkt, entstehen um ihn acht Fähnchen, vier und ihre Spiegelbilder; die Gruppe ist für sich spiegelsymmetrisch. In *p*4*gm* liegt kein 4-zähliger Drehpunkt auf einer Spiegellinie. Um einen Drehpunkt entstehen nur vier Fähnchen, alle mit demselben Drehsinn, wie bei einem Windrad. Die Spiegel- und Gleitspiegellinien bilden jedes Windrad auf die benachbarten ab, und zwar spiegelbildlich: Im Muster wechseln sich Windräder mit entgegengesetztem Drehsinn ab.

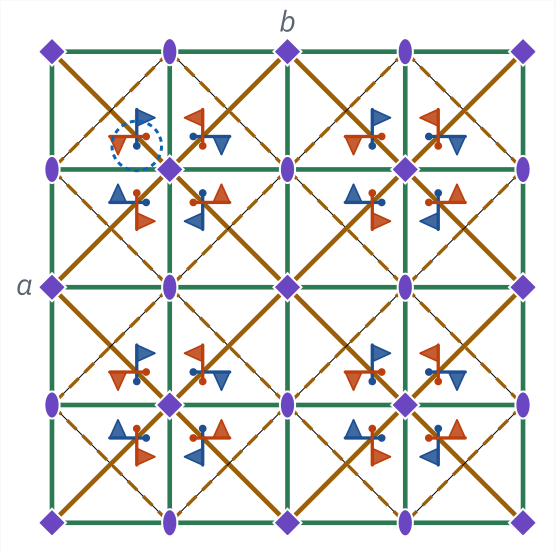
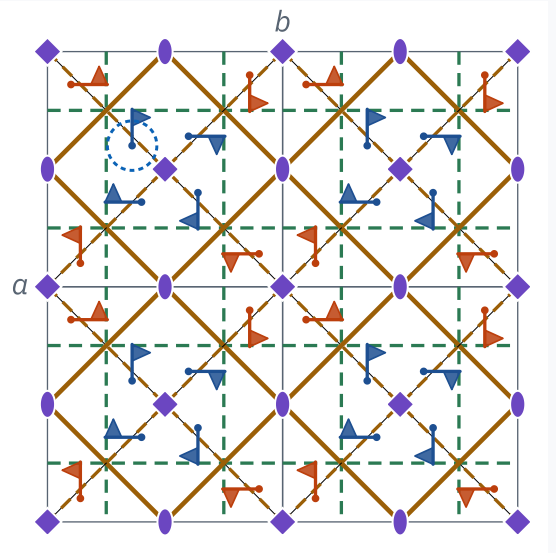


Abb. 5.2a *p4mm*: acht Fähnchen um den 4-zähligen Drehpunkt in der Zellmitte, vier und ihre Spiegelbilder. In der App öffnen →



b *p4gm*: Windräder mit abwechselndem Drehsinn. In der App öffnen →

Abb. 5.2 Zwei Ebenengruppen mit derselben Punktgruppe 4*mm*, die sich im Symbol nur durch *m* oder *g* unterscheiden; je 2 × 2 Zellen. Spiegelbilder sind orange (Abschnitt 4.1 „Die Gleitspiegelung“). Die Farbe der Symmetrieelemente zeigt die Blickrichtung: violett die 1., grün die 2., ocker die 3.

Den Unterschied zwischen *p*3*m*1 und *p*31*m* sieht man in Abb. 5.3. In *p*3*m*1 stehen die Spiegellinien senkrecht zu *a*, *b* und *a* + *b* (2. Blickrichtung): zwei senkrecht zu den Zellkanten, die dritte senkrecht zur kurzen Diagonalen, also entlang der langen. Alle 3-zähligen Drehpunkte liegen auf Spiegellinien. In *p*31*m* verlaufen die Spiegellinien entlang *a*, *b* und *a* + *b*, also entlang der Zellkanten und der kurzen Diagonalen; sie stehen senkrecht zu den Richtungen der 3. Blickrichtung. Dort liegen die Drehpunkte in den Ecken der Zelle auf Spiegellinien, die beiden im Innern der Zelle nicht.

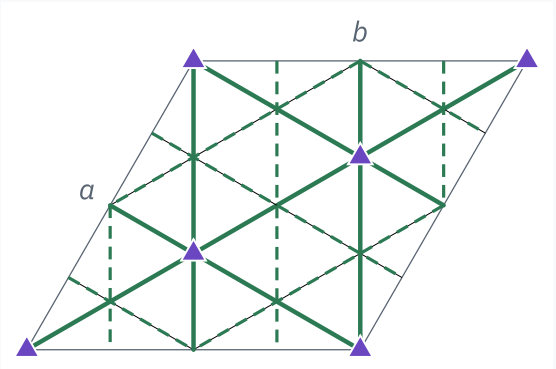
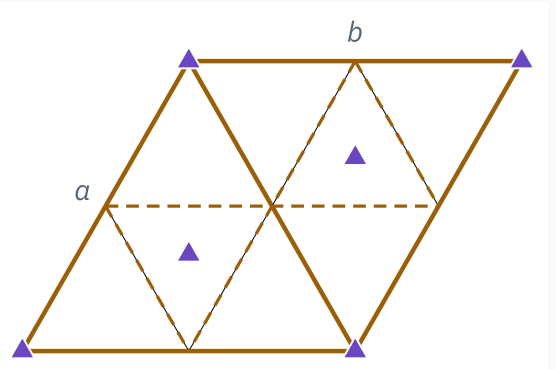


Abb. 5.3a *p*3*m*1: Spiegellinien (grün) senkrecht zu *a*, *b* und *a* + *b*. In der App öffnen →



b *p*31*m*: Spiegellinien (ocker) entlang *a*, *b* und *a* + *b*. In der App öffnen →

Abb. 5.3 Zwei Ebenengruppen mit derselben Punktgruppe 3*m*. Die Farbe zeigt, auf welche Blickrichtung sich eine Spiegellinie bezieht: grün die 2., ocker die 3.

MERKE

Symbol = Zelle (p, c) + höchste Zähligkeit + Element senkrecht zur 2. Blickrichtung (Hauptrichtung) + Element senkrecht zur 3. Blickrichtung (Nebenrichtung). Eine 1 hält eine Stelle frei; m geht vor g. Das Symbol nennt je Blickrichtung ein Zeichen, nicht alle Elemente.

IN DER APP

Im Modus „Ebenengruppen“ stehen die 17 Gruppen in der Seitenleiste unter „Ebenengruppe“, nach Kristallsystem geordnet. Unter „Darstellung“ färbt „Nach Blickrichtung färben“ die Symmetrieelemente nach ihrer Blickrichtung: Drehpunkte (1.) violett, die 2. grün, die 3. ocker. Die Kenndaten nennen das vollständige Symbol, Nummer, Kristallsystem, Bravais-Gitter und Punktgruppe.

5.3 Die Diagramme der International Tables

Für jede Ebenengruppe gibt es in den International Tables eine Seite. Ihr Kopf nennt Symbol, Punktgruppe, Kristallsystem und Nummer; darunter stehen zwei Diagramme (Abb. 5.4). Beide zeigen eine Elementarzelle mit a nach unten, b nach rechts und dem Ursprung oben links, wie die App.

- Das linke Diagramm zeigt die **Symmetrieelemente** mit den Symbolen aus Abschnitt 2.1 „Drehpunkte und Spiegellinien“: Linsen, Dreiecke, Quadrate und Sechsecke für Drehpunkte, durchgezogene Linien für Spiegellinien, gestrichelte für Gleitspiegellinien.
- Das rechte Diagramm zeigt die **allgemeine Lage**: einen Punkt in beliebiger Lage und alle seine Bilder. Jeder Punkt ist ein Kreis. Ein Kreis mit Komma ist ein Spiegelbild eines Kreises ohne Komma, so wie das Fähnchen in der App seine Fahne nach der anderen Seite trägt.

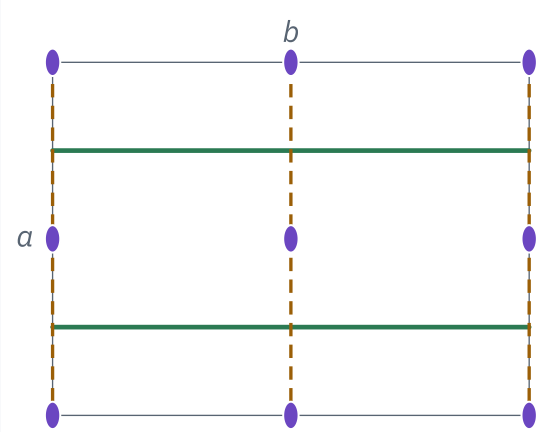
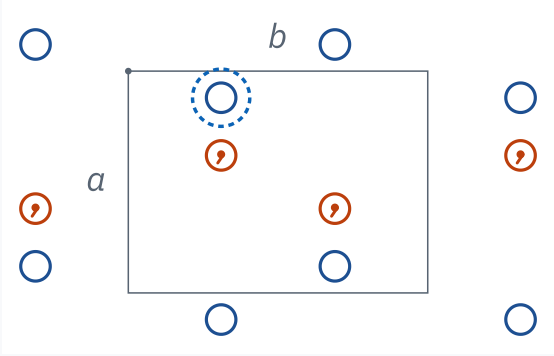


Abb. 5.4a *p2mg*, Symmetrieelemente.
In der App öffnen →



b Allgemeine Lage: der Punkt (gestrichelter Ring) und seine Bilder, auch knapp ausserhalb der Zelle. In der App öffnen →

Abb. 5.4 Die beiden Diagramme von *p2mg*, wie sie die App zeichnet (nach den International Tables, S. 98). Kein Drehpunkt liegt auf einer Spiegellinie.

Unter den Diagrammen folgen der Ursprung, die asymmetrische Einheit, die Liste der Operationen (Abschnitt 4.3 „So listen die International Tables die Operationen“), die Erzeugenden und die Lagen (Kapitel 6). Die App zeigt alle diese Angaben in den Kenndaten.

IN DER APP

Unter „Weitere Optionen“ zeichnet „Kreis mit Komma“ das Objekt wie die International Tables, und „Bilder rund um die Zelle (wie ITA)“ zeigt auch die Bilder knapp ausserhalb der Zelle. Schaltet man „Symmetrieelemente“ aus und „Objekt in allgemeiner Lage“ ein (voreingestellt), erhält man das zweite Diagramm. Die Farben der Kreise unterscheiden Bild und Spiegelbild, wie das Komma.

5.4 Von der Ebenengruppe zur Punktgruppe

Die Punktgruppe einer Ebenengruppe enthält alle ihre Symmetrieelemente, aber ohne die Gittertranslationen und ohne die Verschiebung der Gleitspiegelungen. Aus dem Symbol erhält man sie so: den Buchstaben für die Zelle weglassen, jedes *g* durch *m* ersetzen und die Einsen weglassen, ausser bei *p*1. Aus *p*2*mg* und *p*2*gg* wird so 2*mm*, aus *p*4*gm* 4*mm*, aus *p*31*m* 3*m*.

Die Punktgruppe kann dabei Operationen enthalten, die im Muster gar nicht vorkommen: *pg* hat keine Spiegellinie, seine Punktgruppe ist trotzdem *m*. Das ist kein Widerspruch. Die Punktgruppe ist die Symmetrie, die man an der äusseren Form eines Kristalls sieht. Für sie zählt nur die Richtung der Symmetrieelemente, nicht ihre Lage (Abschnitt 2.1 „Drehpunkte und Spiegellinien“), und eine Gleitspiegellinie hat dieselbe Richtung wie eine Spiegellinie (Vertiefung in Abschnitt 4.2 „Symmetrieoperationen in Koordinaten“). Aus der Punktgruppe folgt das Kristallsystem (Abschnitt 3.1 „Die zehn Punktgruppen der Ebene“).

Umgekehrt gehören zu einer Punktgruppe oft mehrere Ebenengruppen: zu 2*mm* vier, zu *m* drei, zu 4*mm* und 3*m* je zwei (Tabelle in Abschnitt 5.1 „Wie man auf 17 kommt“). Die Punktgruppe allein legt die Ebenengruppe also nicht fest.

MERKE

Ebenengruppe → Punktgruppe: Zellbuchstaben weglassen, *g* durch *m* ersetzen, Einsen weglassen (ausser bei *p*1). Punktgruppe → Kristallsystem. Mehrere Ebenengruppen können dieselbe Punktgruppe haben.

VERTIEFUNG · **Die Punktgruppe als Faktorgruppe**

Diese Vertiefung knüpft an die Matrizen (Abschnitt 4.2 „Symmetrieoperationen in Koordinaten“) und die Liste der Operationen (Abschnitt 4.3 „So listen die International Tables die Operationen“) an und zeigt, warum man die Punktgruppe erhält, wenn man die Verschiebungen weglässt. Die Translationen einer Ebenengruppe *E* bilden eine Untergruppe *T*. Fasst man jeweils die Operationen, die sich nur um eine Gittertranslation unterscheiden, zusammen, entstehen die **Nebenklassen** nach *T* (nicht zu verwechseln mit den Konjugiertenklassen der Gruppentheorie), und zwar so viele, wie die Punktgruppe Operationen hat; in *p*2*mg* sind es vier, wie die vier Zeilen der Liste in Abschnitt 4.3 „So listen die International Tables die Operationen“. Mit diesen Nebenklassen kann man rechnen wie mit den Operationen selbst: Sie bilden die **Faktorgruppe** *E*/*T*, und diese hat dieselbe Gruppentafel wie die Punktgruppe *P*. Man schreibt $P \cong E/T$. Deshalb listen die International Tables für jede Ebenengruppe genau so viele Operationen, wie die Punktgruppe hat (in zentrierten Gruppen je Zentrierung).

ZUSAMMENFASSUNG

- Es gibt 17 Ebenengruppen: 13 aus Punktgruppen und Gittern, 4 weitere mit *g* im Symbol.
- Das Symbol nennt Zelle, höchste Zähligkeit und die Elemente senkrecht zur 2. und 3. Blickrichtung (Haupt- und Nebenrichtung); eine 1 hält eine Stelle frei. Es nennt nicht alle Elemente.
- Die International Tables zeigen je Gruppe ein Diagramm der Symmetrieelemente und eines der allgemeinen Lage (Kreise, Kreise mit Komma).
- Punktgruppe: Zellbuchstaben weglassen, *g* durch *m* ersetzen, Einsen weglassen (ausser bei *p*1); sie bestimmt das Kristallsystem.

ZUR VERTIEFUNG

- 13 Ebenengruppen sind symmorph, die 4 mit *g* im Symbol nichtsymmorph.
- Die Punktgruppe ist die Faktorgruppe der Ebenengruppe nach ihren Translationen.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 10.2 (die 17 Ebenengruppen; Symbole, höchstzählige Drehung zuerst; zusätzliche Gleitspiegellinien nicht im Symbol; Tab. 10.1, S. 205–207).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 4.2 (Ebenengruppe als vollständige Beschreibung der Symmetrie eines periodischen Musters, S. 136–137), 4.2.1 (Notation: Zentrierung, höchste Zähligkeit, Spiegel- oder Gleitspiegellinie bezüglich der Haupt- und Nebenrichtung, 1 als Platzhalter; Lang- und Kurzform, Tab. 4.1; Blickrichtungen, Tab. 4.2, S. 137–138), 6.1.3 (Kreis mit Komma als Spiegelbild im Diagramm der allgemeinen Lage, Abb. 6.11, S. 199–200).
- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Abschn. 2.2.4 (Hermann-Mauguin-Symbole; „Blickrichtungen“ nach Heesch, Symmetrierichtungen der Gitter, Tab. 2.2.4.1, Einsen am Ende fallen weg, S. 18; Kurz- und vollständiges Symbol unterscheiden sich in zwei Dimensionen nur in der Punktgruppe *m*; Definition „symmorph“, S. 19), Abschn. 2.2.6.1 (zwei Diagramme je Ebenengruppe, Symmetrieelemente links, allgemeine Lage rechts, *a* nach unten, *b* nach rechts, S. 20), Abschn. 2.2.6.4 (Ursprung oben links, S. 22), Abschn. 4.1.2.3 (Vorrang von *m* vor Gleitspiegelungen im Symbol, S. 59), Abschn. 8.1.6 (die Translationen bilden einen Normalteiler, ihre Nebenklassen entsprechen der Punktgruppe; die Punktgruppe kann Operationen enthalten, die in der Gruppe nicht vorkommen; Definition symmorph; *P*2, *Cm* symmorph, $P2_1$, *Pc* nicht, S. 724–725), Part 6 (die 17 Ebenengruppen, S. 92–109; *p*2*mg*, S. 98; *p*3*m*1, S. 105; *p*31*m*, S. 106).
- D. Schwarzenbach, *Kristallographie*, Springer, Berlin (2001), Abschn. 2.4 (Nebenklassen nach der Gruppe der Translationen, Punktgruppe isomorph zur Faktorgruppe, eine Ebenengruppe als Beispiel, S. 45–46), 2.5.1 (Nebenklassen nicht mit Konjugiertenklassen verwechseln, S. 46).

6 Punktlagen

Wohin man ein Atom in die Zelle setzt, entscheidet, wie oft es sich je Zelle wiederholt und welche Symmetrie es um sich hat. Liegt es auf einem Drehpunkt oder einer Spiegellinie, fallen Kopien zusammen. Die International Tables ordnen alle Lagen einer Ebenengruppe in der Tabelle der Wyckoff-Lagen. Mit ihnen und der asymmetrischen Einheit lässt sich eine Kristallstruktur vollständig und knapp beschreiben.

LERNZIELE

- allgemeine und spezielle Lagen unterscheiden und für eine Lage Zähligkeit, Lagesymmetrie und Freiheitsgrade angeben
- die Tabelle der Wyckoff-Lagen einer Ebenengruppe lesen
- die asymmetrische Einheit im Bild finden und ihre Ungleichungen in ein Bild übersetzen
- eine Seite der International Tables von oben bis unten lesen
- eine zweidimensionale Kristallstruktur mit Ebenengruppe, Gitter und Wyckoff-Lagen beschreiben

ZUR VERTIEFUNG

- erklären, wohin die International Tables den Ursprung legen

6.1 Allgemeine und spezielle Lage

Setzt man ein Fähnchen in eine Zelle der Ebenengruppe *p*2*mm* und wendet alle Operationen an, entstehen je Zelle vier Fähnchen (Abb. 6.1a), eines für jede der vier Operationen (wie in Abschnitt 4.3 „So listen die International Tables die Operationen“; die Koordinaten für *p*2*mm* stehen in der Tabelle in Abschnitt 6.2 „Wyckoff-Lagen“). Die Zahl gleichwertiger Punkte in der Elementarzelle heisst **Zähligkeit** der Lage; die International Tables sagen *multiplicity*, Hoffmann Multiplizität. (Das Wort Zähligkeit hat damit zwei Bedeutungen: Bei einem Drehpunkt ist es die Zahl der Drehungen bis zur vollen Umdrehung, bei einer Lage die Zahl der Punkte je Zelle.) Das Fähnchen lässt sich in der Zelle frei verschieben, in zwei Richtungen; die Zahl der Fähnchen bleibt dabei vier. Die Operationen, die einen Punkt an seinem Ort lassen, bilden seine **Lagesymmetrie**, eine Punktgruppe der Ebene (Abschnitt 3.1 „Die zehn Punktgruppen der Ebene“). Ihre Ordnung ist die Zahl dieser Operationen: 1 für die Lagesymmetrie 1, 2 für *m*, 4 für 2*mm*. Hält ausser der Identität keine Operation das Fähnchen fest, ist seine Lagesymmetrie 1, und die Lage heisst **allgemeine Lage**. Es hat dann zwei **Freiheitsgrade**, *x* und *y*.

Schiebt man das Fähnchen auf die Spiegellinie bei $x = ½$, wandert sein Spiegelbild ihm entgegen; auf der Linie fallen beide zusammen (Abb. 6.1b). Je zwei der vier Fähnchen liegen jetzt übereinander, und es bleiben zwei Stellen je Zelle: $(½, y)$ und $(½, \bar{y})$. Die Lage ist 2-zählig, ihre Lagesymmetrie ist *m*, und sie hat nur noch einen Freiheitsgrad: Das Fähnchen darf sich nur entlang der Linie bewegen, sonst trennen sich die Kopien wieder. Auf dem Schnittpunkt zweier Spiegellinien bei $(½, ½)$ fallen alle vier zusammen (Abb. 6.1c): Zähligkeit 1, Lagesymmetrie 2*mm*, kein Freiheitsgrad. Lagen mit einer Lagesymmetrie höher als 1 heissen **spezielle Lagen**.

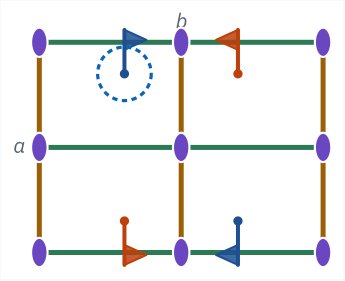
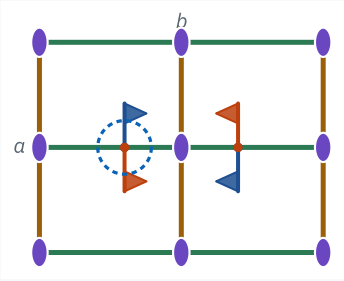
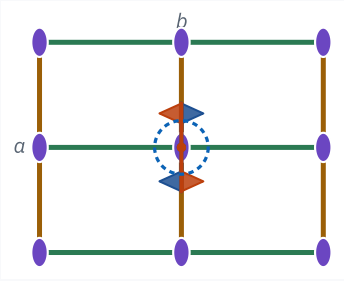


Abb. 6.1a Allgemeine Lage bei (0,15; 0,3): vier Fähnchen.
In der App öffnen →



b Auf der Spiegellinie bei (½; 0,3): je zwei fallen zusammen, zwei Stellen.
In der App öffnen →



c Auf dem Schnittpunkt bei (½, ½): alle vier fallen zusammen.
In der App öffnen →

Abb. 6.1 Ein Fähnchen in der Ebenengruppe *p*2*mm*, von der allgemeinen Lage auf eine Spiegellinie und auf den Schnittpunkt zweier Spiegellinien geschoben. Je höher die Lagesymmetrie, desto kleiner die Zähligkeit.

Zähligkeit und Lagesymmetrie hängen fest zusammen. Die Gruppe hat je Zelle so viele Operationen, wie die allgemeine Lage Punkte hat, in *p*2*mm* vier. Halten *k* davon einen Punkt fest, fallen auf jedes Bild genau *k* Kopien. Also gilt:

Zähligkeit der Lage × Ordnung der Lagesymmetrie = Zähligkeit der allgemeinen Lage.

In *p*2*mm*: 2 × 2 = 1 × 4 = 4. Die Zähligkeit einer speziellen Lage ist deshalb immer ein Teiler der Zähligkeit der allgemeinen Lage.

Das Fähnchen in Abb. 6.1b und c überlagert sich mit seinem Spiegelbild, weil es selbst keine Spiegelsymmetrie hat. Ein echtes Objekt auf einer speziellen Lage, etwa ein Atom oder ein Molekül, muss selbst mindestens die Lagesymmetrie haben und passend ausgerichtet sein, sonst stimmt die Symmetrie des Musters nicht mehr (Abschnitt 3.2 „Gitter + Motiv: die Symmetrie des Musters“, Abb. 3.4). Ein Atom hat die Symmetrie ∞*m* und kann auf jeder Lage sitzen.

Auf einer Gleitspiegellinie wird eine Lage nicht speziell. Die Gleitspiegelung bringt einen Punkt auf der Linie immer an eine andere Stelle, um die Gleitkomponente verschoben; er wird also nicht festgehalten. In *pg* bleiben deshalb auch auf der Gleitspiegellinie zwei Fähnchen je Zelle (Abb. 6.2). *pg* hat gar keine spezielle Lage, ebenso *p*1.

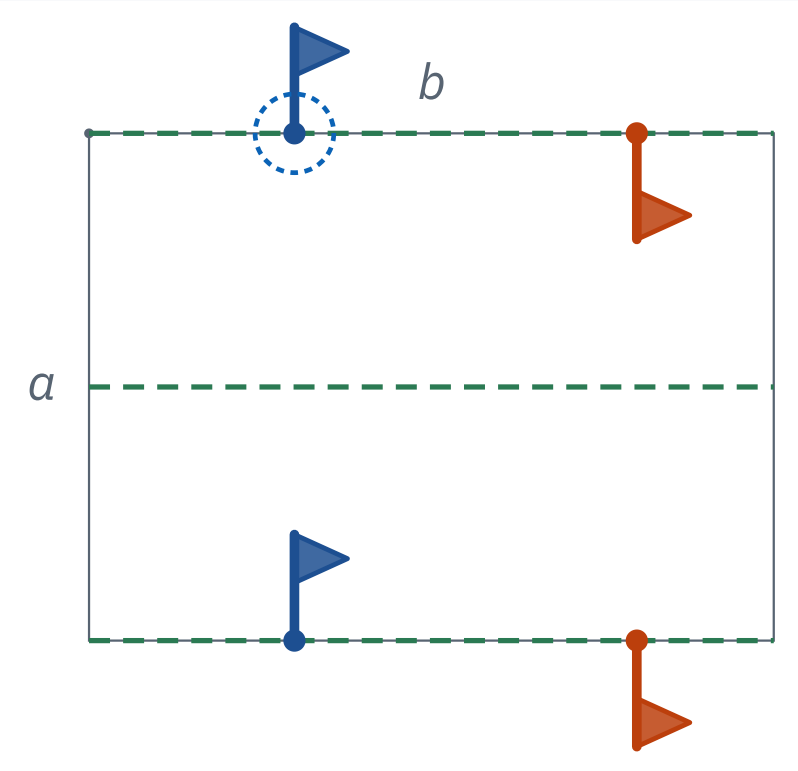


Abb. 6.2 *pg*, Fähnchen auf der Gleitspiegellinie bei (0; 0,3). Sein Bild liegt bei (0; 0,8), um *b*/2 verschoben: Es fällt nichts zusammen, die Lage bleibt 2-zählig. In der App öffnen →

MERKE

Allgemeine Lage: Lagesymmetrie 1, grösste Zähligkeit, zwei Freiheitsgrade. Spezielle Lage: auf einem Drehpunkt oder einer Spiegellinie, höhere Lagesymmetrie, kleinere Zähligkeit, weniger Freiheitsgrade. Zähligkeit × Ordnung der Lagesymmetrie = Zähligkeit der allgemeinen Lage. Gleitspiegellinien machen eine Lage nicht speziell.

IN DER APP

Im Modus „Ebenengruppen“ mit „Objekt in allgemeiner Lage“ das Fähnchen im Symmetriegerüst ziehen. Mit „Einrasten“ (Magnet über dem Symmetriegerüst) springt es auf nahe Drehpunkte und Spiegellinien. Ein Kasten in den Kenndaten nennt Lage, Zähligkeit und Lagesymmetrie, bei einer speziellen Lage auch die Freiheitsgrade, und rechnet die Zähligkeit vor.

6.2 Wyckoff-Lagen

Eine **Punktlage** ist eine Menge symmetrisch gleichwertiger Punkte, etwa die vier Fähnchen in Abb. 6.1a. Verschiebt man das Fähnchen auf der Spiegellinie, erhält man andere Punktlagen mit denselben Eigenschaften. Die International Tables fassen solche Punktlagen zu einer **Wyckoff-Lage** zusammen (Borchardt-Ott & Sowa sagen auch dafür Punktlage), benannt nach Ralph Wyckoff, der sie 1922 als Erster für alle Raumgruppen aufgestellt hat. Für *p2mm* sieht ihre Tabelle so aus:

ZÄHLIGKEIT	WYCKOFF-BUCHSTABE	LAGESYMMETRIE	KOORDINATEN
4	*i*	1	x, y $\bar{x}, \bar{y}$ $\bar{x}, y$ $x, \bar{y}$
2	*h*	.*m*.	½, y ½, $\bar{y}$
2	*g*	.*m*.	0, y 0, $\bar{y}$
2	*f*	..*m*	x, ½ $\bar{x}$, ½
2	*e*	..*m*	x, 0 $\bar{x}$, 0
1	*d*	2*mm*	½, ½
1	*c*	2*mm*	½, 0
1	*b*	2*mm*	0, ½
1	*a*	2*mm*	0, 0

Die Spalten von links nach rechts:

- **Zähligkeit:** Punkte je Zelle, wie in Abschnitt 6.1 „Allgemeine und spezielle Lage“.
- **Wyckoff-Buchstabe:** ein Name, von unten nach oben vergeben. *a* steht unten, bei einer Lage höchster Lagesymmetrie; die allgemeine Lage steht oben und hat den letzten Buchstaben. Zähligkeit und Buchstabe zusammen benennen eine Lage: 2*h*, 1*a*.
- **Lagesymmetrie** als orientiertes Symbol: Die Stellen stehen für die Blickrichtungen wie im Symbol der Ebenengruppe (Abschnitt 5.2 „Das Symbol lesen“), nur ohne den Zellbuchstaben: 1. Stelle Drehpunkt, 2. Stelle 2. Blickrichtung, 3. Stelle 3. Blickrichtung. Ein Punkt steht für eine Blickrichtung ohne Element. .*m*. heisst: Spiegellinie senkrecht zur 2. Blickrichtung, also senkrecht zu *a*; die Linie $x = ½$ verläuft entlang *b* und ist in der App grün. ..*m*: senkrecht zur 3. Blickrichtung, also zu *b*. So unterscheidet das Symbol die Lagen 2*h* und 2*f*, die beide die Lagesymmetrie *m* haben, aber auf verschieden gerichteten Spiegellinien liegen.
- **Koordinaten** aller Punkte der Lage in einer Zelle. Ein Querstrich bedeutet ein Minus (Abschnitt 4.2 „Symmetrieoperationen in Koordinaten“). Liegt ein Punkt ausserhalb der Zelle, addiert man eine Gittertranslation: ½, $\bar{y}$ mit $y = 0{,}3$ ist (½; −0,3), in der Zelle also (½; 0,7). Die Zahl der freien Parameter x, y ist die Zahl der Freiheitsgrade.

Eine Wyckoff-Lage umfasst alle Punktlagen, die zu derselben Koordinatenformel gehören, mit Ausnahme der Werte, bei denen der Punkt auf eine Lage noch höherer Symmetrie fällt. 2*h* sind alle Paare (½, y) und (½, $\bar{y}$), ausser $y = 0$ und $y = ½$; das sind die Lagen 1*c* und 1*d*.

Auffällig sind die vier Lagen 1*a* bis 1*d* mit derselben Lagesymmetrie 2*mm*. Es sind trotzdem vier verschiedene Wyckoff-Lagen: Keine Operation von *p*2*mm* bringt den Punkt (0, 0) nach (½, 0). Dazu bräuchte man etwa eine Verschiebung um *a*/2 oder eine Spiegellinie bei $x = ¼$; beides hat *p*2*mm* nicht. In einer Struktur können auf 1*a* und 1*c* deshalb verschiedene Atome sitzen. Dasselbe gilt für 2*g* und 2*h* und für 2*e* und 2*f*. Welchen Buchstaben ein Atom erhält, hängt auch davon ab, welchen der erlaubten Ursprünge man wählt (Abschnitt 3.4 „Wenn sich die konventionelle Zelle ändert“): Ein Atom auf 1*a* steht nach einer Verschiebung des Ursprungs um *b*/2 auf 1*b*, und beide Beschreibungen sind gleich gut.

Bei zentrierten Gruppen zählt die Zentrierung mit. In *c*2*mm* erzeugen die vier Operationen aus dem Fähnchen vier Punkte, die Zentrierung (½, ½) verdoppelt sie: Die allgemeine Lage ist 8-zählig. Die Tabelle nennt deshalb nur die Koordinaten für den Satz (0, 0)+ und schreibt darüber (0, 0)+ (½, ½)+: Zu jedem Punkt gehört auch der um (½, ½) verschobene. Die Regel aus Abschnitt 6.1 „Allgemeine und spezielle Lage“ gilt dann mit 8: Die Lage auf den Spiegellinien ist 4-zählig, 4 × 2 = 8 (Abb. 6.3).

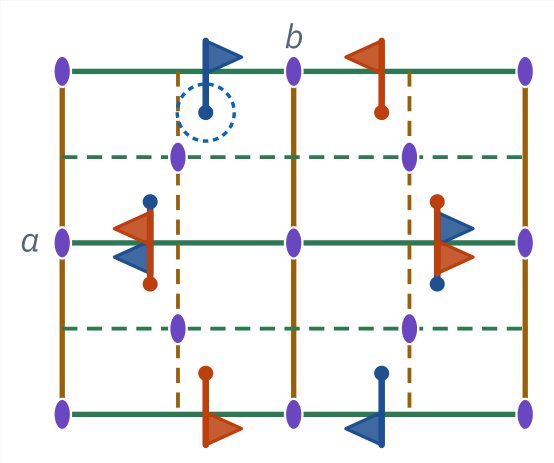
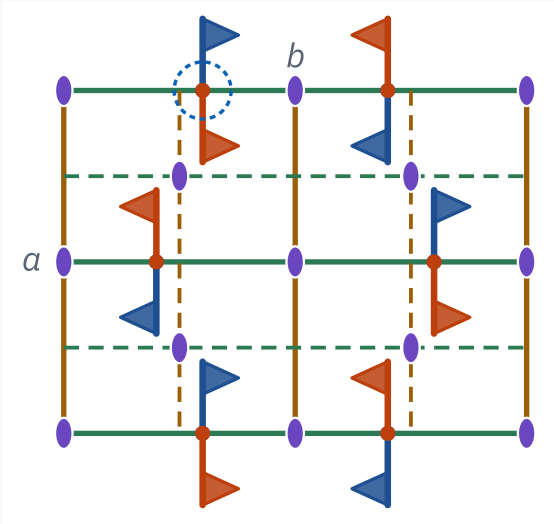


Abb. 6.3a *c*2*mm*, allgemeine Lage bei (0,12; 0,31): acht Fähnchen. Zu jedem gehört ein gleiches, um (½, ½) verschoben, etwa bei (0,62; 0,81). In der App öffnen →



b Auf der Spiegellinie bei (0; 0,3), Lage 4*e*: je zwei Fähnchen fallen zusammen, vier Stellen. In der App öffnen →

Abb. 6.3 In der zentrierten Gruppe *c*2*mm* verdoppelt die Zentrierung jede Lage: allgemeine Lage 8-zählig statt 4-zählig wie in *p*2*mm*, Lage auf der Spiegellinie 4-zählig statt 2-zählig.

IN DER APP

Die Kenndaten im Modus „Ebenengruppen“ enthalten die Tabelle der Wyckoff-Lagen wie in den International Tables. „setzen“ legt das Fähnchen auf die Lage der Zeile, die Zeile der aktuellen Lage ist hervorgehoben.

MERKE

Eine Wyckoff-Lage wird mit Zähligkeit und Buchstabe benannt (2*h*). Die Buchstaben laufen von unten (*a*, höchste Lagesymmetrie) nach oben (allgemeine Lage). Das orientierte Symbol der Lagesymmetrie zeigt mit Punkten die Blickrichtungen ohne Element. Lagen mit gleicher Lagesymmetrie können verschiedene Wyckoff-Lagen sein.

6.3 Die asymmetrische Einheit

In Abb. 6.1a bestimmt ein einziges Fähnchen die anderen drei. Es genügt also, ein Viertel der Zelle zu kennen; den Rest erzeugen die Operationen. Ein kleinster zusammenhängender Teil der Zelle, der, mit allen Operationen der Gruppe abgebildet, die Ebene lückenlos und ohne Überlappung füllt, heisst **asymmetrische Einheit**, in der Mathematik Fundamentalbereich. In ihrem Innern sind keine zwei Punkte gleichwertig. Ihre Fläche ist deshalb

Fläche der asymmetrischen Einheit = Fläche der Zelle / Zähligkeit der allgemeinen Lage.

Für *p*2*mm* ist das ein Viertel der Zelle, für *p*4*mm* ein Achtel, für *p*6*mm* ein Zwölftel. Bei *c*2*mm* zählt die Zentrierung mit: ein Achtel.

Die International Tables geben die asymmetrische Einheit als Ungleichungen in x und y an. Für *p*2*mm* heisst es $0 \le x \le ½$; $0 \le y \le ½$. Jede Ungleichung schneidet die Zelle entlang einer Linie ab: $x \le ½$ behält die obere Hälfte (*a* zeigt nach unten), $y \le ½$ die linke. Übrig bleibt das Viertel oben links (Abb. 6.4). Seine

Ränder sind Spiegellinien, seine Ecken Schnittpunkte von Spiegellinien. Das ist kein Zufall: Die beiden Seiten einer Spiegellinie sind Spiegelbilder voneinander. Ginge die Linie durch die asymmetrische Einheit, enthielte diese gleichwertige Punkte; die Spiegellinie muss deshalb am Rand liegen. Ebenso liegen Drehpunkte immer am Rand, in einer Ecke oder, wenn sie 2-zählig sind, auch in der Mitte einer Kante. Gleitspiegellinien dagegen dürfen durch die asymmetrische Einheit hindurchgehen.

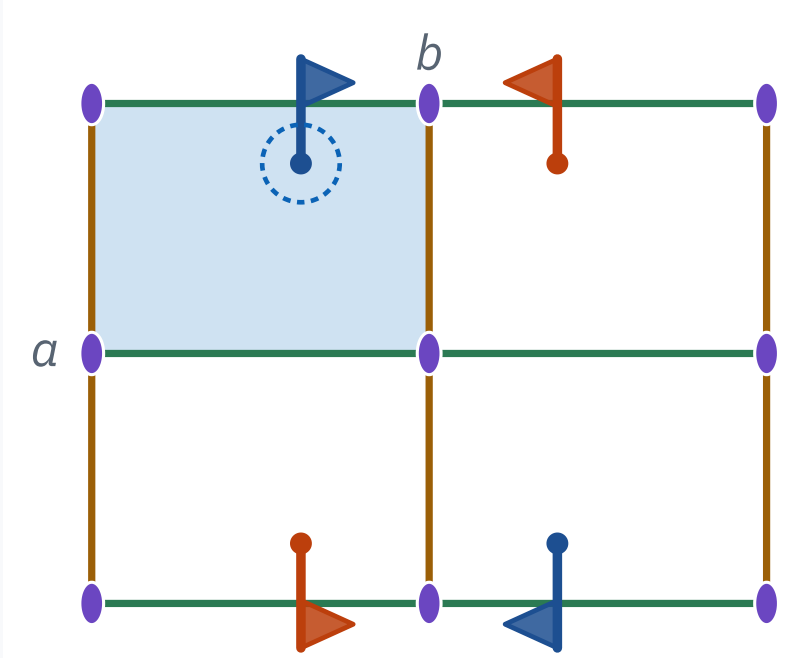


Abb. 6.4 *p2mm*: Die asymmetrische Einheit $0 \le x \le ½$; $0 \le y \le ½$ (blau) ist das Viertel oben links. Das Fähnchen in ihr erzeugt die drei anderen. In der App öffnen →

Bei *p4mm* kommt eine dritte Ungleichung hinzu: $0 \le x \le ½$; $0 \le y \le ½$; $x \le y$. Die ersten beiden ergeben wieder das Viertel oben links. $x \le y$ schneidet es entlang der Diagonale $x = y$, einer Spiegellinie, und behält die Hälfte rechts davon (Abb. 6.5a). Es bleibt ein Dreieck mit einem Achtel der Zellfläche. Seine Ecken sind die Drehpunkte bei (0, 0) und (½, ½), Lagesymmetrie 4*mm*, und bei (0, ½), Lagesymmetrie 2*mm*; seine Kanten sind Spiegellinien. Füllt man das Dreieck und wendet alle Operationen an, entsteht ein lückenloses Muster aus acht Kopien je Zelle (Abb. 6.5b).

Umgekehrt liest man die Ungleichungen aus dem Bild ab: Für jede Kante der asymmetrischen Einheit schreibt man die Gleichung ihrer Linie auf und ersetzt das Gleichheitszeichen durch ≤ oder ≥, je nachdem, auf welcher Seite die Einheit liegt. Welche Seite das ist, prüft man mit einem Punkt im Innern. Ein Beispiel ist *p4gm*: Dort ist die asymmetrische Einheit das Dreieck mit den Ecken (0, 0), (½, 0) und (0, ½). Seine schräge Kante läuft von (½, 0) nach (0, ½); auf ihr gilt $x + y = ½$, also $y = ½ - x$. Der Punkt (0,1; 0,1) im Innern erfüllt $0{,}1 \le 0{,}4$, die Bedingung lautet also $y \le ½ - x$, so wie in den International Tables (S. 103). Im hexagonalen System werden die Ungleichungen unübersichtlich; die International Tables nennen dort zusätzlich die Ecken (*Vertices*).

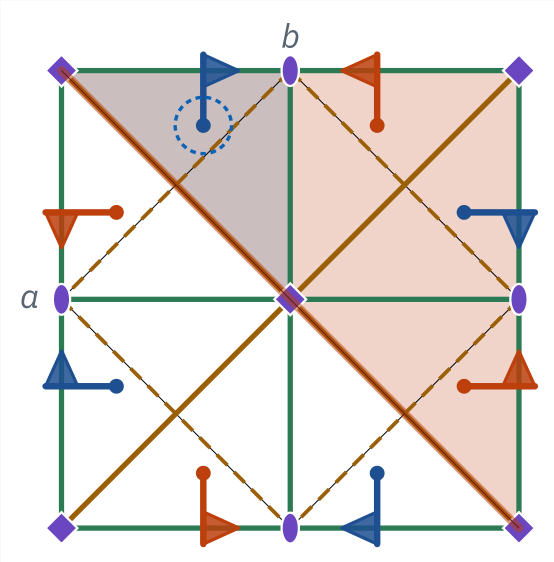
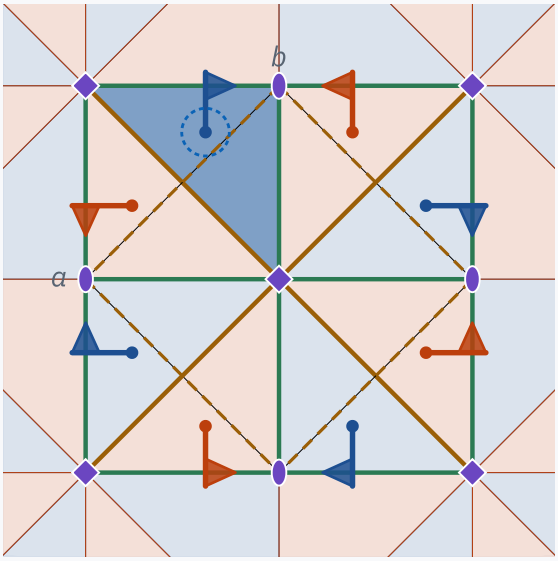


Abb. 6.5a *p4mm*: Blau die asymmetrische Einheit, orange der Bereich $x \le y$. Seine Grenze, die Diagonale, ist eine Spiegellinie.
In der App öffnen →



b Die gefüllte asymmetrische Einheit (dunkel) und ihre Kopien füllen die Zelle lückenlos.
In der App öffnen →

Abb. 6.5 Die asymmetrische Einheit von *p4mm*, ein Achtel der Zelle. In b unterscheiden Blau und Orange wie bei den Fähnchen Kopien und Spiegelbilder (Abschnitt 4.1 „Die Gleitspiegelung“).

Die asymmetrische Einheit ist nicht eindeutig. In Abb. 6.4 wäre jedes der vier Viertel ebenso gut, und bei Gruppen ohne Spiegellinien gibt es noch mehr Möglichkeiten. Die International Tables wählen eine, mit der sich gut rechnen lässt: ein Vieleck mit einer Ecke im Ursprung, im schiefwinkligen und rechteckigen System ein Parallelogramm bzw. Rechteck. Für eine Kristallstruktur bedeutet sie: Kennt man den Inhalt der asymmetrischen Einheit, kennt man die ganze Struktur.

MERKE

Die asymmetrische Einheit ist ein kleinster Teil der Zelle, aus dem die Operationen das ganze Muster erzeugen. Fläche = Zellfläche / Zähligkeit der allgemeinen Lage. Spiegellinien und Drehpunkte liegen auf ihrem Rand, Gleitspiegellinien dürfen sie durchqueren. Jede Ungleichung der International Tables ist eine Linie, die die Zelle abschneidet.

IN DER APP

Den Schalter „Asymmetrische Einheit“ einschalten. Tippt man in den Kenndaten eine ihrer Bedingungen an, zeigt das Symmetriegerüst den Bereich, in dem sie erfüllt ist. Unter „Darstellung“ färbt „Asymmetrische Einheit füllen“ sie ein und zeigt ihre Kopien. Im Modus „Muster entwerfen“ lässt sich auch in ihr zeichnen: Mit dem Werkzeug „Zeichnen“ gezogene Striche erscheinen mit allen Operationen der Gruppe, und man sieht das Muster entstehen.

6.4 Eine Seite der International Tables lesen

Mit den Begriffen dieses Kapitels und der vorigen lässt sich jetzt eine ganze Seite der International Tables lesen. Als Beispiel dient *p2mg* (S. 98), dessen Diagramme Abschnitt 5.3 „Die Diagramme der International Tables“ zeigt und dessen Operationen Abschnitt 4.3 „So listen die International Tables die Operationen“ erklärt. Die Seite enthält von oben nach unten:

- **Kopf:** Kristallsystem (*Rectangular*), Punktgruppe 2*mm*, Symbol *p*2*mg* und Nummer 7 (Abschnitt 5.3 „Die Diagramme der International Tables“), dazu das vollständige Symbol und die „Patterson symmetry“, die zur Strukturbestimmung gehört und hier nicht gebraucht wird.
- **Diagramme** der Symmetrieelemente und der allgemeinen Lage (Abb. 5.4).
- **Origin at 2 1 *g*:** Der Ursprung liegt auf einem 2-zähligen Drehpunkt. Das Symbol nennt die Elemente, die durch den Ursprung gehen, nach Blickrichtungen geordnet: der Drehpunkt, senkrecht zu *a* nichts, senkrecht zu *b* eine Gleitspiegellinie.
- **Asymmetric unit** $0 \le x \le ¼$; $0 \le y \le 1$: ein Streifen von einem Viertel der Zelle, oben begrenzt durch die Linie $x = 0$, unten durch die Spiegellinie bei $x = ¼$ (Abschnitt 6.3 „Die asymmetrische Einheit“). Die Drehpunkte (0, 0) und (0, ½) liegen auf seinem Rand, (0, ½) in der Mitte einer Kante. Die Gleitspiegellinie bei $y = ½$ geht mitten durch den Streifen; das ist erlaubt.
- **Symmetry operations** (1) bis (4) mit Art und Lage der Elemente (Abschnitt 4.3 „So listen die International Tables die Operationen“).
- **Generators selected** (1); *t*(1, 0); *t*(0, 1); (2); (3): Identität, die beiden Gittertranslationen, die Drehung (2) und die Spiegelung (3) erzeugen alle Operationen der Gruppe. Die Gleitspiegelung (4) folgt aus ihnen (Abschnitt 4.4 „Operationen verknüpfen“).
- **Positions:** die Wyckoff-Lagen (Tabelle unten). In der rechten Spalte stehen die *Reflection conditions*: welche Beugungsreflexe fehlen. Sie gehören zur Beugung; die App zeigt sie nicht, und das Skript behandelt sie nicht.
- **Maximal non-isomorphic subgroups, minimal non-isomorphic supergroups:** verwandte Ebenengruppen mit weniger bzw. mehr Symmetrie. Sie gehen über diese Einführung hinaus.

ZÄHLIGKEIT	WYCKOFF-BUCHSTABE	LAGESYMMETRIE	KOORDINATEN
4	*d*	1	x, y $\bar{x}, \bar{y}$ $\bar{x} + ½, y$ $x + ½, \bar{y}$
2	*c*	.*m*.	$¼, y$ $¾, \bar{y}$
2	*b*	2..	$0, ½$ $½, ½$
2	*a*	2..	$0, 0$ $½, 0$

Neu gegenüber *p*2*mm*: Die Drehpunkte sind 2-zählige Lagen, nicht 1-zählige. Die Lage 2*c* liegt auf den Spiegellinien bei $x = ¼$ und ¾ (Abb. 6.6a). Der Drehpunkt bei (0, 0) liegt auf keiner Spiegellinie, seine Lagesymmetrie ist nur 2 (2..: Drehpunkt, in den anderen Blickrichtungen nichts). Die Gleitspiegellinie durch (0, 0) zählt für die Lagesymmetrie nicht (Abschnitt 6.1 „Allgemeine und spezielle Lage“); deshalb 2.. und nicht 2.*g*. Die Spiegelung an *m* ¼, *y* bringt den Drehpunkt nach (½, 0), auf einen zweiten Drehpunkt in derselben Zelle; beide bilden zusammen die Lage 2*a* (Abb. 6.6b). Nach der Regel aus Abschnitt 6.1 „Allgemeine und spezielle Lage“: 2 × 2 = 4. Auf der Gleitspiegellinie gibt es keine eigene Lage.

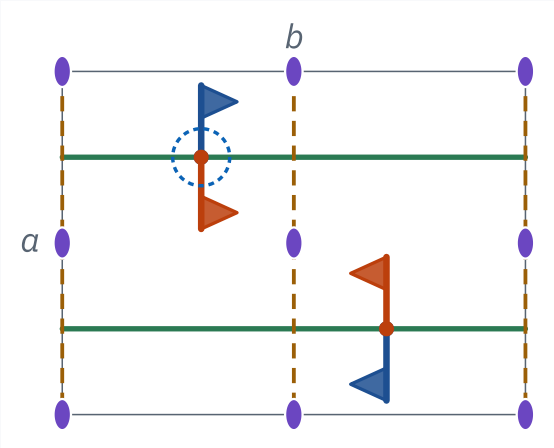
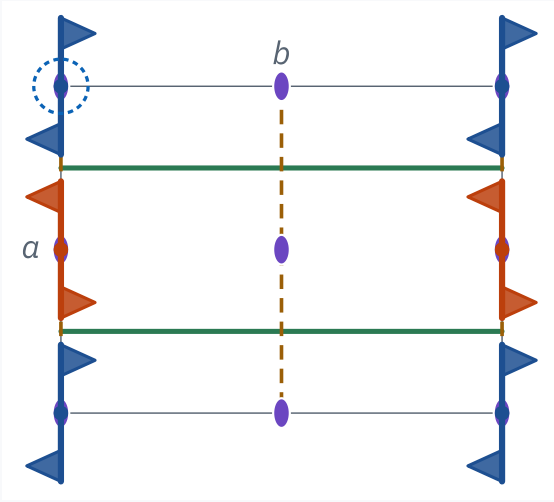


Abb. 6.6a Lage 2*c*: Fähnchen bei (¼; 0,3) und (¾; 0,7). In der App öffnen →



b Lage 2*a*: Fähnchen auf den Drehpunkten bei (0, 0) und (½, 0). In der App öffnen →

Abb. 6.6 Zwei spezielle Lagen von *p*2*mg*. Die Drehpunkte liegen nicht auf Spiegellinien und sind deshalb 2-zählige Lagen.

VERTIEFUNG · **Wohin der Ursprung kommt**

Für die Raumgruppen legen die International Tables den Ursprung auf ein Inversionszentrum, wenn es eines gibt, sonst auf einen Punkt höchster Lagesymmetrie, und nur wenn es keinen solchen gibt, auf eine Gleitspiegelebene oder Schraubenachse (Abschn. 2.2.7). In der Ebene spielt der 2-zählige Drehpunkt die Rolle des Inversionszentrums: Die Drehung um 180° bringt (x, y) nach $(\bar{x}, \bar{y})$, wie die Inversion im Raum (x, y, z) nach $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$. Die 17 Seiten der Ebenengruppen folgen einer einfachen Regel: Gibt es Drehpunkte, liegt der Ursprung auf einem Drehpunkt höchster Zähligkeit, und unter diesen auf einem mit möglichst hoher Lagesymmetrie (in *c*2*mm* auf 2*mm*, nicht auf 2..). Ohne Drehpunkte liegt er auf einer Spiegellinie (*pm*, *cm*), sonst auf einer Gleitspiegellinie (*pg*); in *p*1 ist er beliebig. Deshalb liegt er in *p*2*mg* auf dem Drehpunkt und nicht auf der Spiegellinie, obwohl beide Lagen die Lagesymmetrie der Ordnung 2 haben.

IN DER APP

Die Kenndaten im Modus „Ebenengruppen“ sind wie eine Seite der International Tables aufgebaut: Symbol, Punktgruppe, Ursprung, asymmetrische Einheit, Operationen, Erzeugende und Wyckoff-Lagen. Die Kenndaten nennen auch die Seitenzahl in den International Tables.

6.5 Eine Kristallstruktur beschreiben

Mit den Wyckoff-Lagen lässt sich eine Kristallstruktur knapp und vollständig angeben: die Ebenengruppe, die Gitterparameter und für jedes symmetrisch unabhängige Atom seine Wyckoff-Lage mit den Werten der freien Parameter, bezogen auf Zelle und Ursprung der International Tables. Eine Atomsorte kann mehrere Lagen besetzen. Alles Weitere folgt aus der Tabelle der International Tables.

Ein Beispiel ist das Lieb-Gitter, die Anordnung der Atome in einer CuO_2-Ebene (Abb. 6.7a, dieselbe Struktur wie Abb. 1.7a). Trotz des Namens ist es kein Gitter im Sinne von Abschnitt 1.2 „Gitter und Gittervektoren“, sondern ein quadratisches Gitter mit einer Basis aus drei Atomen: Ebenengruppe *p*4*mm*, Gitterkonstante *a*; Cu auf 1*a* (0, 0), Lagesymmetrie 4*mm*; O auf 2*c* (½, 0) und (0, ½), Lagesymmetrie 2*mm* (orientiert 2*mm*.: Drehpunkt und Spiegellinien senkrecht zu *a* und *b*, senkrecht zu den Diagonalen keine).

Keine Lage hat einen freien Parameter. Die Probe mit der Regel aus Abschnitt 6.1 „Allgemeine und spezielle Lage“ stimmt: 1 × 8 = 2 × 4 = 8. Die Zähligkeiten ergeben die Zahl der Atome je Zelle: ein Cu und zwei O, also die Formel CuO_2. Bei Graphen (Abb. 6.7b, wie Abb. 3.8a) ist es *p6mm* mit C auf 2*b* (⅓, ⅔) und (⅔, ⅓), Lagesymmetrie 3*m* (orientiert 3*m*.): zwei Kohlenstoffatome je Zelle.

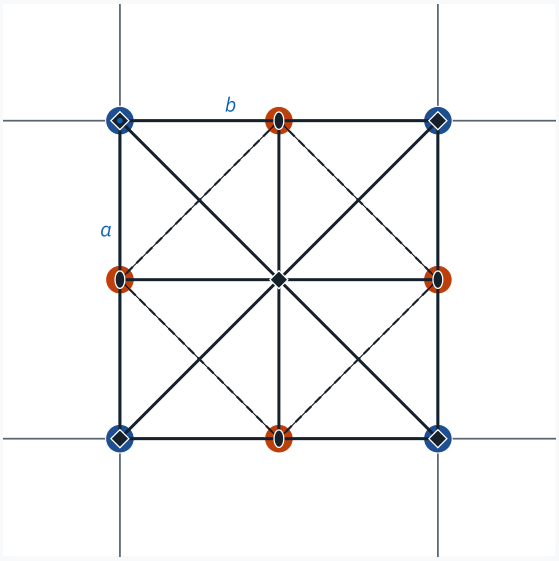
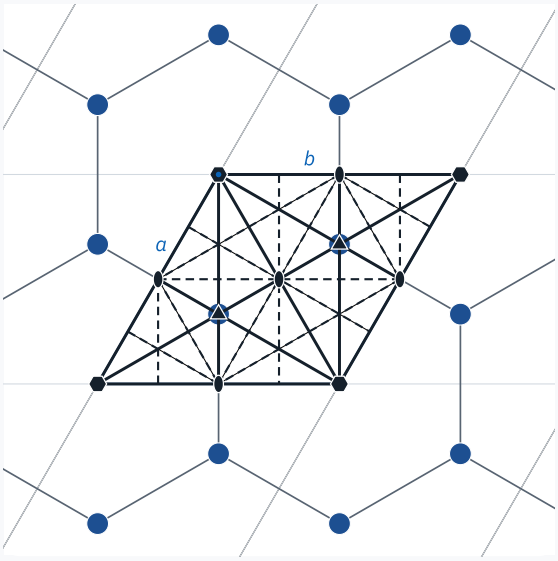


Abb. 6.7a Lieb-Gitter (CuO_2-Ebene), *p4mm*: Cu (blau) auf 1*a*, O (orange) auf 2*c*.
In der App öffnen →



b Graphen, *p6mm*: C auf 2*b*.
In der App öffnen →

Abb. 6.7 Zwei Strukturen im Modus „Gitter und Basis“. Die Kenndaten der App nennen für jedes Atom Wyckoff-Lage und Lagesymmetrie.

Umgekehrt zeigt die Lagesymmetrie, welche Motive wohin passen. Die Dreiecke des Dreiecksbeispiels (Abb. 1.6 und Abb. 4.8) haben eine Spiegellinie; sie dürfen auf Lagen mit der Lagesymmetrie *m* sitzen, wenn ihre Spiegellinie auf der Spiegellinie der Lage liegt, aber nicht auf einem Drehpunkt. In *p2mg* (Abb. 4.8) liegen sie auf 2*c*, auf den Spiegellinien. Sitzt ein Motiv auf einer Lage, deren Lagesymmetrie es nicht hat, verliert das Muster Symmetrie (Abschnitt 3.2 „Gitter + Motiv: die Symmetrie des Musters“).

Für die Aufgabe, eine Struktur zu beschreiben, heisst das: Ebenengruppe, konventionelle Zelle und Ursprung nach den International Tables bestimmen (Abschnitte 2.5 und 3.4, Kapitel 5), für jedes Atom die Lage aufsuchen, Zähligkeit und Lagesymmetrie ablesen und die asymmetrische Einheit einzeichnen. Symmetrisch gleichwertige Atome gehören zur selben Punktlage und werden nur einmal gezählt; die Summe der Zähligkeiten der besetzten Punktlagen muss dann die Zahl der Atome je Zelle ergeben. Das ist eine gute Probe: Bei Graphen gehören beide Atome der Zelle zu einer Punktlage 2*b*, also zwei Atome, nicht vier.

MERKE

Eine Kristallstruktur ist bestimmt durch Ebenengruppe, Gitterparameter und die besetzten Wyckoff-Lagen mit ihren freien Parametern. Die Summe der Zähligkeiten der besetzten Punktlagen, jede einmal gezählt, ist die Zahl der Atome je Zelle. Ein Motiv auf einer speziellen Lage muss mindestens deren Lagesymmetrie haben und passend ausgerichtet sein.

IN DER APP

Im Modus „Gitter und Basis“ nennen die Kenndaten für jedes Motiv seine Lage in der gegebenen und in der konventionellen Zelle, die Wyckoff-Lage und die Lagesymmetrie. Verschiebt man ein Atom von einer speziellen Lage weg, sieht man, wie sich Lage und Ebenengruppe ändern.

Umgekehrt baut man im Modus „Muster entwerfen“ eine Struktur in einer gegebenen Ebenengruppe auf, so wie man Kristallstrukturen beschreibt: Man setzt je Punktlage ein Motiv, die App ergänzt die übrigen Bilder (in der App heisst die Punktlage eines Motivs seine Bahn). Zieht man ein Motiv auf einen Drehpunkt oder eine Spiegellinie, fallen Bilder zusammen wie in Abb. 6.1; dort erscheint ein Motiv nur einmal, wenn es die Lagesymmetrie hat, sonst liegen mehrere Bilder übereinander, und die Kenndaten nennen es. Die App bestimmt hier die Symmetrie nicht: Gruppe und Zelle bleiben die gewählten. Was ein Muster tatsächlich für eine Symmetrie hat, zeigt „Gitter und Basis“, und dort sagen die Kenndaten auch, wenn sie zufällig höher ist, etwa bei einem Atom in $p2mm$ mit $b = a$ (dann $p4mm$).

ZUSAMMENFASSUNG

- Allgemeine Lage: Lagesymmetrie 1, grösste Zähligkeit, zwei Freiheitsgrade. Spezielle Lage: auf Drehpunkt oder Spiegellinie, höhere Lagesymmetrie, kleinere Zähligkeit.
- Zähligkeit × Ordnung der Lagesymmetrie = Zähligkeit der allgemeinen Lage. Gleitspiegellinien machen eine Lage nicht speziell.
- Die International Tables listen die Wyckoff-Lagen mit Zähligkeit, Buchstabe (von a unten), orientierter Lagesymmetrie und Koordinaten.
- Die asymmetrische Einheit hat die Fläche Zellfläche / Zähligkeit der allgemeinen Lage. Spiegellinien und Drehpunkte liegen auf ihrem Rand. Ihre Ungleichungen sind Linien, die die Zelle abschneiden.
- Eine Seite der International Tables enthält Kopf, Diagramme, Ursprung, asymmetrische Einheit, Operationen, Erzeugende, Wyckoff-Lagen, Auslöschungen und verwandte Gruppen.
- Eine Struktur ist durch Ebenengruppe, Gitterparameter und besetzte Wyckoff-Lagen bestimmt; die Zähligkeiten der besetzten Punktlagen ergeben zusammen die Atome je Zelle.

ZUR VERTIEFUNG

- Der Ursprung liegt auf einem Drehpunkt höchster Zähligkeit, ohne Drehpunkte auf einer Spiegel- oder Gleitspiegellinie.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Borchardt-Ott & Sowa (2018), Abschn. 10.4 (Zähligkeit, allgemeine und spezielle Punktlage, Lagesymmetrie, Freiheitsgrade am Beispiel Pmm2, Tab. 10.4; Zähligkeit einer speziellen Lage als Bruchteil der allgemeinen; Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen verringern die Zähligkeit nicht, Abb. 10.13; asymmetrische Einheit, Gl. 10.3: Volumen der Zelle durch Zähligkeit der allgemeinen Punktlage, keine zwei Punkte gleichwertig, S. 214–218).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 6.1.4 (asymmetrische Einheit, Definition, Fundamentalbereich, Begrenzung durch Spiegelebenen und Drehachsen, Wahl nicht eindeutig, S. 201–202), 6.1.5 (Lagen und Koordinaten: Multiplizität, Wyckoff-Buchstaben von a an, Wyckoff 1922, Lagensymmetrie mit Punkten als Platzhalter, Koordinaten ausserhalb der Zelle, S. 203–206).

- International Tables for Crystallography, Vol. A (2006), Abschn. 2.2.7 (Wahl des Ursprungs: Inversionszentrum, sonst Punkt höchster Lagesymmetrie, sonst Gleitspiegelebene oder Schraubenachse; Angabe der Elemente durch den Ursprung, S. 24; die Regel für die Ebene ist an den Angaben „Origin“ der 17 Seiten in Part 6 abgelesen), 2.2.8 (asymmetrische Einheit: Spiegel und Drehachsen am Rand, Fundamentalbereich, Wahl für bequeme Rechnung, S. 25–26), 2.2.10 (Erzeugende, S. 27), 2.2.11 (Positions: Zähligkeit, auch mit Zentrierung, Wyckoff-Buchstabe von unten, Koordinaten; allgemeine und spezielle Lage; Objekt auf spezieller Lage mit mindestens der Lagesymmetrie; Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen erhöhen die Lagesymmetrie nicht; „Position“ als Menge gleichwertiger Punkte, deutsch Punktlage, S. 27–28), 2.2.12 (orientierte Lagesymmetrie, Punkt für Richtungen ohne Element, S. 28), Part 6 (*pg*, S. 95; *p*2*mm*, S. 97; *p*2*mg*, S. 98; *c*2*mm*, S. 100; *p*4*mm*, S. 102; *p*6*mm*, S. 108–109).
- Ausführlicher zu Lage, orientiertem Symbol und Multiplizität bei Flächen eines Kristalls: Skript „Stereographische Projektion“, Kapitel 10.

7 Tapeten, Ornamente und Kunst

Periodische Muster gibt es nicht nur in Kristallen. Tapeten, Stoffe, Fliesen, Mauerwerk und Pflaster wiederholen ein Motiv in zwei Richtungen, und für sie gelten dieselben 17 Ebenengruppen. Dieses Kapitel zeigt solche Muster, alle mit dem Code der App gezeichnet, und wie Handwerker und Künstler mit Symmetrie gearbeitet haben. Die Vertiefungen am Ende führen weiter: zu Parkettierungen aus regelmässigen Vielecken und den Mosaiken der Alhambra, zu den Kacheln von Escher und zu Farbe als Symmetrie.

LERNZIELE

- erklären, warum die Ebenengruppe eines Musters von der Anordnung der Motive abhängt und bei Motiven ohne eigene Symmetrie nicht von ihrer Gestalt
- an Mauerwerk und Pflaster zeigen, wie der Versatz der Reihen die Symmetrie ändert, und die Ebenengruppen der Beispiele im Bild nachvollziehen

ZUR VERTIEFUNG

- Parkettierungen aus regelmässigen Vielecken beschreiben und ihre Symmetrie angeben
- die Namen archimedischer Parkettierungen lesen und erklären, was eine chirale Parkettierung ist
- erklären, wie man Kacheln im Stil von Escher konstruiert
- am Schachbrett erklären, was eine Operation mit Farbwechsel ist

7.1 Tapetengruppen

Zweidimensional periodischen Mustern begegnet man im Alltag ständig: Mauerwerk aus Ziegeln, Pflaster auf Gehwegen, Parkett, Fliesen in Bad und Küche, Tapeten, Geschenkpapier, Stoffe. Im Englischen heissen die Ebenengruppen deshalb oft *wallpaper groups*, Tapetengruppen; nach Hoffmann ist dieser Name dort sogar verbreiteter als der formellere *plane symmetry groups*.

Eine Tapete entsteht wie jedes Muster in diesem Skript: Ein Motiv wird mit den Operationen einer Ebenengruppe vervielfacht. Für die Gruppe zählt dabei nur, wie die Kopien zueinander liegen, nicht, wie das Motiv aussieht. Das Fähnchen der App ist das einfachste Motiv ohne eigene Symmetrie. Ersetzt man es durch ein Ornament, ändert sich das Bild, die Gruppe aber nicht (Abb. 7.1). Liegt das Ornament nahe an einer Spiegellinie, rückt es nahe an sein Spiegelbild, und beide wirken zusammen wie eine einzige, spiegelsymmetrische Figur, in Abb. 7.1b etwa wie ein Schmetterling. So entstehen in Ornamenten symmetrische Figuren, ohne dass das Motiv selbst symmetrisch ist.

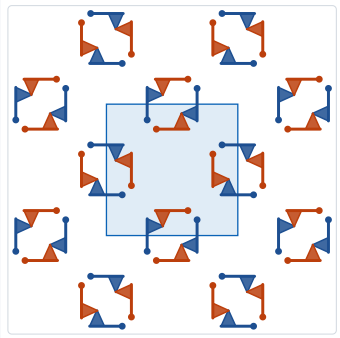
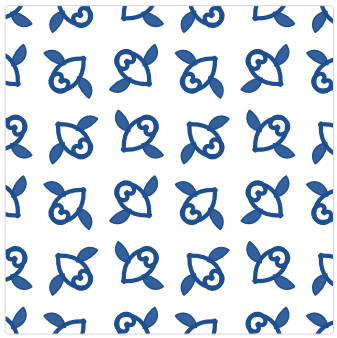


Abb. 7.1a *p4gm* mit Fähnchen und Zelle; orange die Spiegelbilder.
In der App öffnen →



b Dieselbe Gruppe als Tapete, Motiv Blatt.
In der App öffnen →



c Motiv Ranke.
In der App öffnen →

Abb. 7.1 Dreimal die Ebenengruppe *p4gm* im selben Massstab, jedes Mal mit einem Motiv ohne eigene Symmetrie in allgemeiner Lage (in a das Fähnchen mit dem Fuss, in b und c Blatt und Ranke mit der Mitte auf der Lage). Als Tapete zeichnet die App das Muster ohne Zelle und Symmetrieelemente; in b und c ist alles in einer Farbe.

Abb. 7.2 zeigt Tapeten anderer Ebenengruppen. In *p6* gibt es nur Drehungen; die Ranken drehen sich alle im selben Sinn wie in einem Wirbel. In *p31m* und *p2gg* kommen Spiegelbilder vor, in *p2gg* aber nur durch Gleitspiegelungen: Jeder Tropfen ist gegen sein Spiegelbild zugleich verschoben.

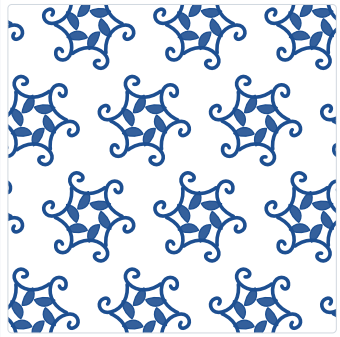
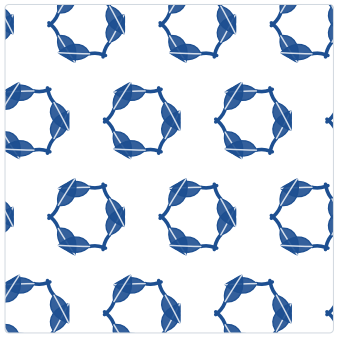
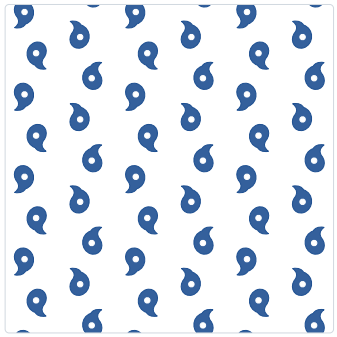


Abb. 7.2a *p6*, Ranke.
In der App öffnen →



b *p31m*, Blatt.
In der App öffnen →



c *p2gg*, Tropfen.
In der App öffnen →

Abb. 7.2 Tapeten dreier weiterer Ebenengruppen.

MERKE

Die Ebenengruppe eines Musters hängt davon ab, wie die Kopien eines Motivs zueinander liegen. Solange das Motiv selbst keine Symmetrie hat, ändert seine Gestalt die Gruppe nicht. Ein solches Motiv in allgemeiner Lage zeigt alle Operationen der Gruppe.

IN DER APP

Im Modus „Muster entwerfen“ wählt man die Ebenengruppe und setzt ein Ornament (Blatt, Tropfen oder Ranke) als Motiv; unter „Darstellung“ gibt es das „Muster als Tapete“. Der Zoom über dem Muster (Mausrad, zwei Finger oder + und –) und die „Grösse“ des Motivs (Basis) stellen den Ausschnitt ein; die Links unter den Abbildungen öffnen genau diese Ansicht. Mit dem Werkzeug „Zeichnen“ lassen sich statt eines Motivs auch Striche ziehen, die die Gruppe mit allen Operationen vervielfältigt; „Radieren“, „Rückgängig“ und „Alle Striche löschen“ korrigieren sie. Mit „Export“ über jeder Tafel lässt sich das Bild kopieren oder als SVG oder PNG speichern.

7.2 Mauerwerk und Pflaster

Wie man Ziegel zu einer Mauer setzt, entscheidet nicht nur über das Aussehen, sondern auch über die Festigkeit. Setzt man die Reihen genau übereinander, laufen die Fugen senkrecht durch die ganze Mauer, und dort bricht sie leicht. Deshalb wird jede zweite Reihe um eine halbe Steinlänge versetzt; nach Hoffmann entsteht damit schon „ein Gleitspiegelmotiv im Mauerwerk“. Steine, die längs in der Wand liegen, heissen Läufer, solche, die quer liegen und nur ihre Stirnseite zeigen, Binder. Je nachdem, wie man sie mischt und versetzt, ergeben sich die vielen Verbände des Maurerhandwerks, vom einfachen Läuferverband bis zu Zierverbänden wie dem Märkischen, Flämischen oder Gotischen Verband.

Abb. 7.3 zeigt fünf Verbände aus gleichen Steinen, wie man sie von Pflaster und Parkett kennt. In der App sind die Steine samt Fuge doppelt so lang wie breit. Ohne Versatz (Abb. 7.3a) liegen die Steine in Reihen und Spalten; Spiegellinien laufen durch die Steinmitten und entlang der Fugen, in beiden Richtungen: *p*2*mm*, wie bei der länglichen Insel in Abb. 3.2c. Versetzt man jede zweite Reihe um eine halbe Steinlänge, entsteht der Läuferverband (Abb. 7.3b), mit der Ebenengruppe *c*2*mm*. Die senkrechten Spiegellinien laufen durch die Steinmitten und durch die senkrechten Fugen, die waagrechten durch die Mitten der Reihen. Die waagrechten Fugen sind keine Spiegellinien, denn die Reihen darüber und darunter sind gegeneinander versetzt; spiegelt man an einer solchen Fuge und verschiebt um eine halbe Steinlänge, kommt das Muster aber zur Deckung. Das ist das Gleitspiegelmotiv, von dem Hoffmann spricht (Abb. 7.4a). Versetzt man jede Reihe gegen die vorige um ein Drittel der Steinlänge, immer in dieselbe Richtung, bleiben keine Spiegellinien, nur 2-zählige Drehpunkte: *p*2 (Abb. 7.3c).

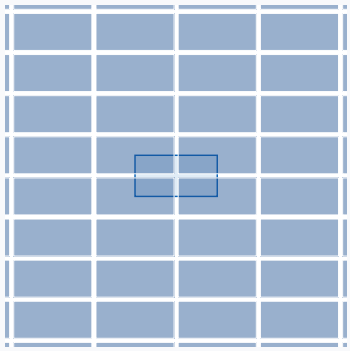
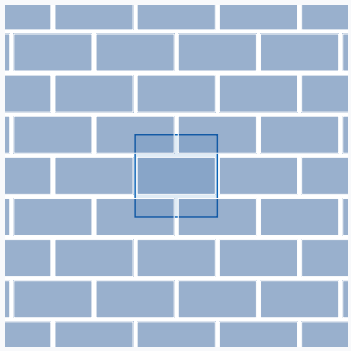
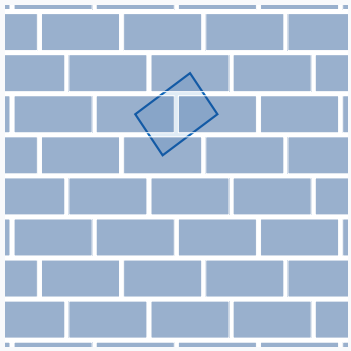


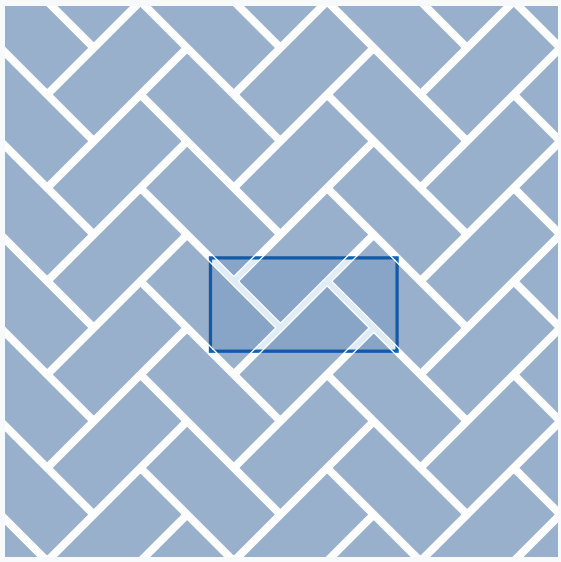
Abb. 7.3a Ohne Versatz: *p2mm*. In der App öffnen →



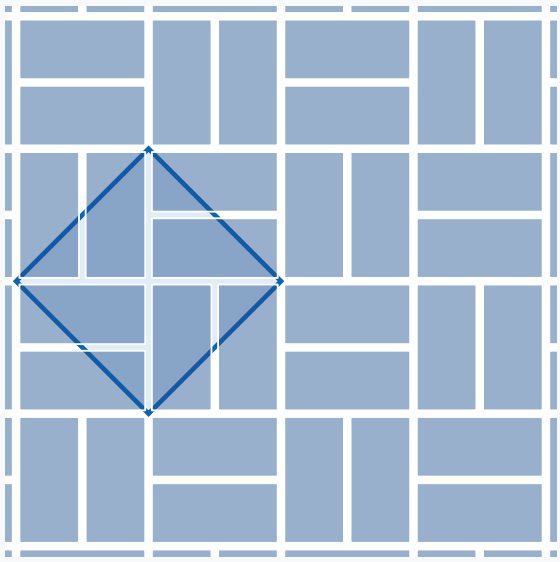
b Läuferverband, halb versetzt: *c2mm*.
In der App öffnen →



c Um ein Drittel versetzt: *p2*. Die Zelle sieht fast rechteckig aus, ist es aber nicht.
In der App öffnen →



d Fischgrätverband: *p2gg*. In der App öffnen →



e Flechtverband: *p4gm*. In der App öffnen →

Abb. 7.3 Fünf Verbände aus gleichen Steinen (Vorgaben „Mauerwerk und Pflaster“ im Modus „Gitter und Basis“). Hervorgehoben ist die konventionelle Zelle, die die App bestimmt.

Im Fischgrätverband (Abb. 7.3d) liegen die Steine im Zickzack, abwechselnd um 90° gedreht. Er hat keine einzige Spiegellinie, aber Gleitspiegellinien in zwei Richtungen und 2-zählige Drehpunkte: *p2gg* (Abb. 7.4b). Im Flechtverband (Abb. 7.3e) bilden je zwei Steine ein Quadrat, abwechselnd waagrecht und senkrecht, wie bei einem Geflecht. Wo vier Quadrate zusammenstossen, liegt ein 4-zähliger Drehpunkt, aber auf keiner Spiegellinie; die Spiegellinien laufen durch die Mitten der Quadrate: *p4gm*.

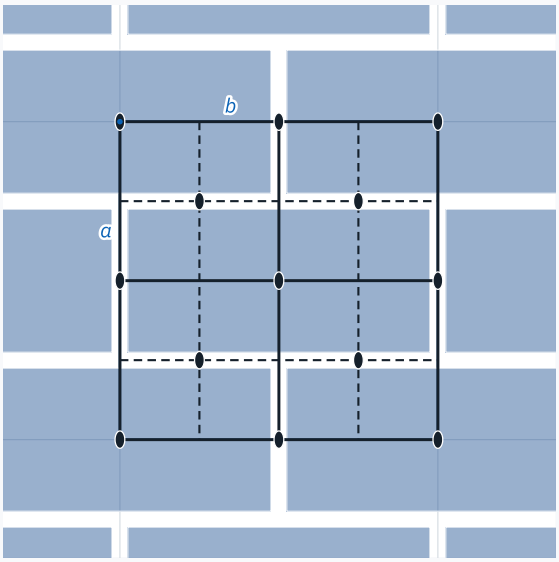
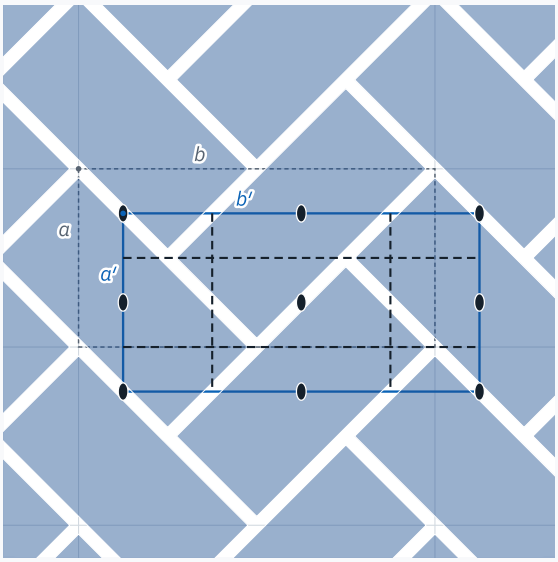


Abb. 7.4a Läuferverband, *c2mm*: Gleitspiegellinien (gestrichelt) entlang der waagrechten Fugen und senkrecht durch die Viertel der Steine. In der App öffnen →



b Fischgrätverband, *p2gg*: nur Gleitspiegellinien und 2-zählige Drehpunkte. In der App öffnen →

Abb. 7.4 Konventionelle Zelle und Symmetrieelemente zweier Verbände, wie die App sie bestimmt. Die App legt *a* immer nach unten; im Fischgrätverband liegen die Steine deshalb schräg zur Zelle.

Der Läuferverband zeigt noch etwas aus Kapitel 3. Die kürzesten Translationen führen von einem Stein schräg zu den beiden versetzten Steinen der nächsten Reihe. Sie sind immer gleich lang; weil die Steine samt Fuge doppelt so lang wie breit sind, stehen sie zudem senkrecht aufeinander: Das Gitter ist quadratisch. Die Steine liegen aber diagonal zu dieser Zelle, ihre Spiegellinien sind deren Diagonalen. Wie bei den gedrehten Inseln in Abb. 3.5b lässt das Motiv *2mm* von *4mm* nur *2mm* übrig. Die konventionelle Zelle wird entlang der Spiegellinien gelegt und ist dann zentriert, ein Quadrat mit einem Punkt in der Mitte. Für das Gitter allein wäre diese Zelle unnötig gross (Vertiefung in Abschnitt 2.4 „Wahl der Elementarzelle und das zentrierte Gitter“), für das Muster ist sie die richtige (Abschnitt 3.3 „Die Orientierung des Motivs“).

IN DER APP

Im Modus „Gitter und Basis“ stehen die fünf Verbände unter den Vorgaben „Mauerwerk und Pflaster“. Verschiebt man einen Stein oder ändert man das Gitter, zeigt die App, wie sich die Ebenengruppe ändert. Das Motiv „Ziegel“ steht auch für eigene Verbände zur Verfügung.

7.3 Fliesen und die Alhambra VERTIEFUNG

Ein Fliesenboden ist eine **Parkettierung**: Fliesen bedecken die Ebene lückenlos und ohne Überlappung. Die einfachsten Parkettierungen bestehen aus regelmässigen Vielecken. Mit gleichen regelmässigen Vielecken allein geht es nur mit drei Sorten: mit gleichseitigen Dreiecken, Quadraten oder Sechsecken (Abschnitt 2.2 „Nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehpunkte“). Legt man sie Kante an Kante, ergeben Quadrate *p4mm*, Dreiecke und Sechsecke *p6mm*. Mischt man verschiedene regelmässige Vielecke, Kante an Kante und so, dass jede Ecke gleich aussieht, mit denselben Vielecken in derselben Reihenfolge, erhält man die **archimedischen Parkettierungen**.

Der Name einer archimedischen Parkettierung zählt die Vielecke auf, die an einer Ecke zusammentreffen, in der Reihenfolge rundherum: 4.8.8 heisst ein Quadrat und zwei Achtecke, 3.4.6.4 ein Dreieck, ein Quadrat, ein Sechseck und wieder ein Quadrat. Weil jede Ecke gleich aussieht, beschreibt dieser Name die ganze Parkettierung. Abb. 7.5 zeigt vier davon mit ihren Ebenengruppen. Die Ecken der Parkettierung sind dort Atome, die Kanten Bindungen.

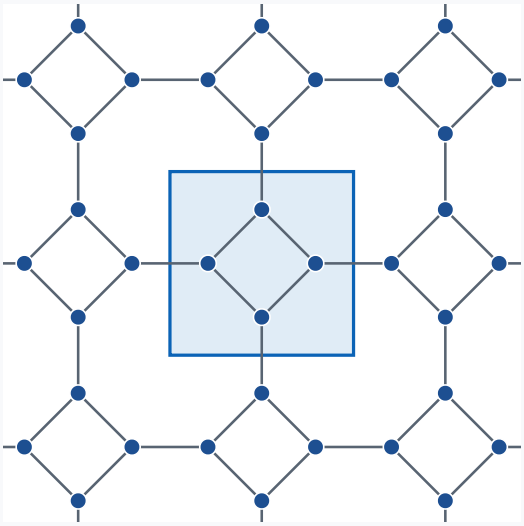
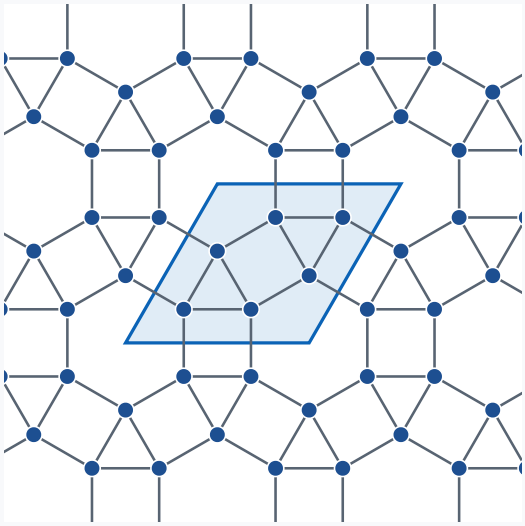
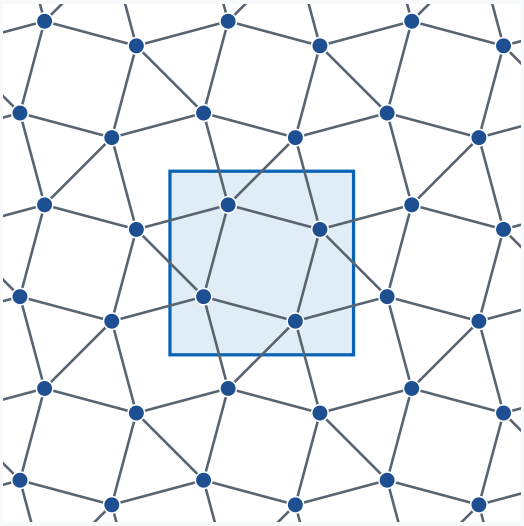


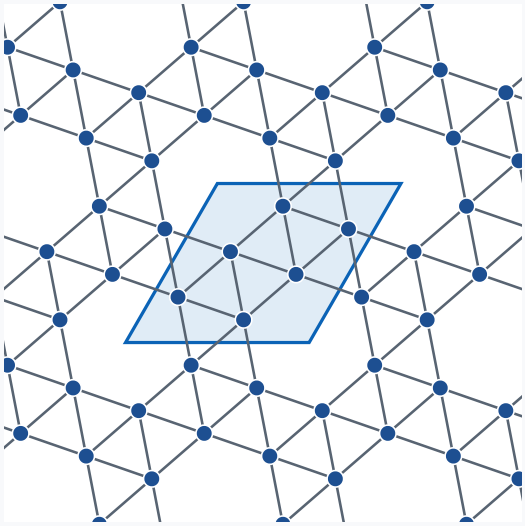
Abb. 7.5a 4.8.8: *p4mm*. In der App öffnen →



b 3.4.6.4: *p6mm*. In der App öffnen →



c 3.3.4.3.4: *p4gm*. In der App öffnen →



d 3.3.3.3.6: *p6*, chiral. In der App öffnen →

Abb. 7.5 Vier archimedische Parkettierungen (Vorgaben im Modus „Gitter und Basis“).

In 3.3.4.3.4 sind die Quadrate gekippt. Dadurch liegt der 4-zählige Drehpunkt in der Mitte jedes Quadrats auf keiner Spiegellinie mehr; Spiegellinien laufen nur noch durch die Ecken der Parkettierung, zwischen den Quadraten hindurch, und die Gruppe ist *p4gm* wie beim Flechtverband. 3.3.3.3.6 hat gar keine Spiegellinie, nur Drehpunkte, und die Ebenengruppe *p6*.

Weil 3.3.3.3.6 weder Spiegel- noch Gleitspiegellinien hat, ist ihr Spiegelbild eine zweite, ebenso gültige Form, die sich durch Drehen und Verschieben nicht mit der ersten zur Deckung bringen lässt, wie eine linke und eine rechte Hand; man nennt die Parkettierung **chiral**. Beide Formen haben die Ebenengruppe *p6*.

Archimedische Parkettierungen sind streng geregelt: nur regelmässige Vielecke, jede Ecke gleich. Fliesenkunst kennt diese Beschränkung nicht. Zu besonderer Meisterschaft hat es die islamische Kunst mit flächenfüllenden Mustern gebracht. Ein berühmtes Beispiel ist die Alhambra in Granada, eine palastartige Festungsanlage, die seit 1984 zum Weltkulturerbe der UNESCO gehört und für ihre Kachelungen und Mosaiken berühmt ist. Auch diese Mosaiken sind Parkettierungen, aber aus Fliesen vieler verschiedener Formen, zu weit verwickelteren Mustern zusammengesetzt; Hoffmann zeigt eine Auswahl (Abb. 4.20 dort). Ihre Ebenengruppe bestimmt man wie bei jedem Muster: aus den Operationen, die das ganze Mosaik mit allen Fliesen und Farben in sich überführen. Das ist bei so reichen Mustern nicht leicht. Seit Jahrzehnten wird gestritten, ob dort alle 17 Ebenengruppen vorkommen oder nicht. Hoffmann sieht darin auch ein Zeichen dafür, wie schwierig es sein kann, die Ebenengruppe eines Musters eindeutig zu bestimmen. Für die Handwerker, die die Mosaiken schufen, war die Frage ohne Bedeutung: Die 17 Ebenengruppen hat erst Fedorov 1891 abgeleitet, rund fünf Jahrhunderte später.

7.4 Escher und die Kachel VERTIEFUNG

Der niederländische Künstler M. C. Escher besuchte die Alhambra 1922 zum ersten Mal. Ihn faszinierten die Mosaiken, und es wunderte ihn, dass in ihnen nach Hoffmann keine Menschen, Tiere oder auch nur pflanzenähnliche Formen vorkommen. In den folgenden Jahren suchte er nach Figuren von Lebewesen, die gleich gross und gleich gestaltet sind und die Ebene lückenlos füllen. 1926 gelang ihm das zum ersten Mal mit einer löwenartigen Figur. Im Mai 1936 besuchte er die Alhambra ein zweites Mal, mit seiner Frau Jetta; drei Tage lang skizzierten beide die Muster. Danach empfahl ihm sein Halbbruder, ein Professor der Geologie, Artikel aus kristallographischen Zeitschriften über die Symmetrie der Ebene. Die meisten waren ihm zu theoretisch, einige aber anschaulich genug, um seine Arbeit voranzubringen. In den folgenden Jahren entstanden viele periodische Muster aus Vögeln, Fischen, Reptilien und anderen Figuren, manche nur mit Drehungen, andere auch mit Gleitspiegelungen. Eschers Werke sind urheberrechtlich geschützt; eine Auswahl seiner Symmetriezeichnungen zeigt die Galerie der M. C. Escher Company, ausführlich das Buch von Schattschneider (Quellen).

Wie entsteht eine solche Kachel? Man beginnt mit einer Elementarzelle und verformt ihre Kanten. Damit die Kacheln lückenlos bleiben, muss jede Verformung an einer Partnerkante wiederkehren. In $p1$ ist der Partner der linken Kante die rechte: Sie geht aus ihr durch die Translation b hervor. Ebenso gehen die obere und die untere Kante durch a auseinander hervor (Abb. 7.6a). Was an einer Kante herausgeschnitten wird, wächst an der Partnerkante an. Die Kachel hat deshalb immer dieselbe Fläche wie die Zelle, und die verformten Kacheln füllen die Ebene wie vorher die Zellen (Abb. 7.6b).

Eine Kante kann auch ihr eigener Partner sein. Ist sie punktsymmetrisch zu ihrer Mitte, passt die Kachel, um 180° um die Kantenmitte gedreht, genau an sie an. Sind alle vier Kanten so geformt, sind alle Kantenmitten 2-zählige Drehpunkte, und das Muster hat die Ebenengruppe $p2$ (Abb. 7.6c). Verschoben wiederholt sich jetzt erst jede zweite Kachel; die Elementarzelle des Musters ist doppelt so gross wie die Kachel, und die Kachel ist eine asymmetrische Einheit (Abschnitt 6.3 „Die asymmetrische Einheit“). Mit Gleitspiegelungen oder Drehungen um 90° als Partnerregeln kommt man zu Kacheln anderer Ebenengruppen.

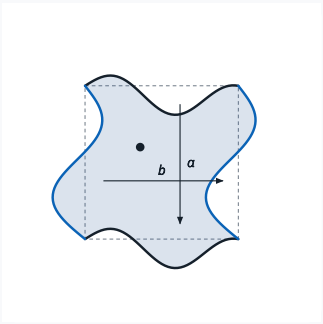
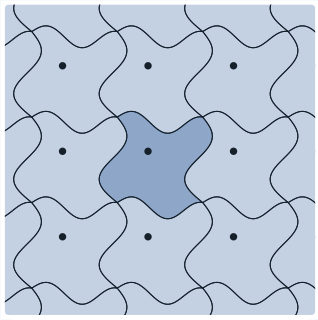
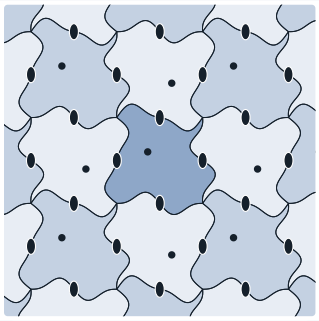


Abb. 7.6a Die Kanten der Zelle (gestrichelt) verformt; gleiche Farbe: Partnerkanten, verschoben um a bzw. b.



b Die Kacheln füllen die Ebene: $p1$.



c Kanten punktsymmetrisch zu ihrer Mitte: $p2$, heller die gedrehten Kacheln.

Abb. 7.6 Kacheln im Stil von Escher. Der Punkt in jeder Kachel zeigt, wie sie liegt. Keine Kachel ist ein Spiegelbild einer anderen, deshalb sind alle blau (Abschnitt 4.1 „Die Gleitspiegelung“).

7.5 Ausblick: Farbe als Symmetrie VERTIEFUNG

Ein Schachbrett hat die Ebenengruppe $p4mm$. Welche Zelle dazugehört, hängt aber davon ab, ob man die Farben beachtet. Ohne Farben ist jedes Feld gleich, und die Zelle ist ein einzelnes Feld (Abb. 7.7a). Mit Farben führt erst die Translation zum nächsten Feld gleicher Farbe das Muster in sich über, schräg über die Ecke; die Zelle ist um 45° gedreht und doppelt so gross (Abb. 7.7b).

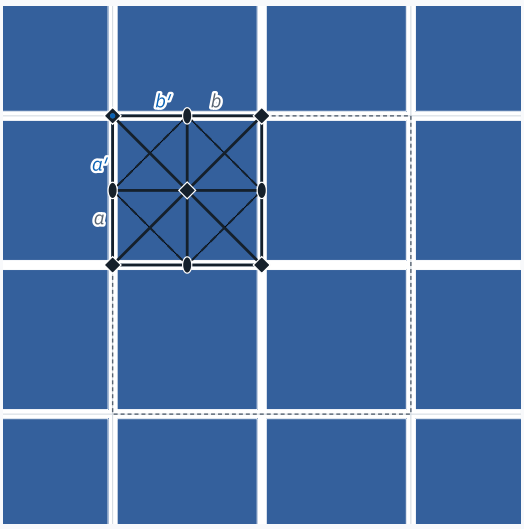
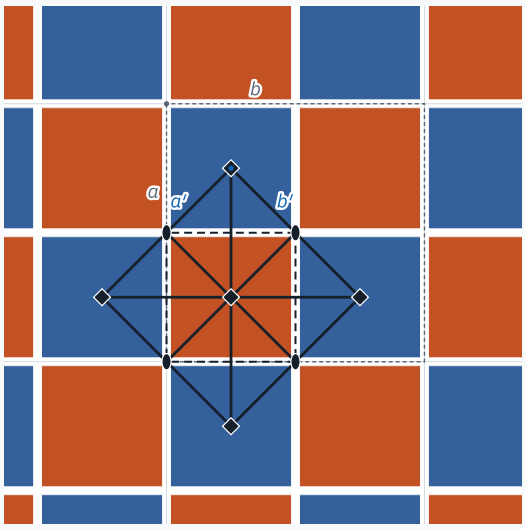


Abb. 7.7a Ohne Farben: $p4mm$, die Zelle ist ein Feld. In der App öffnen →



b Mit zwei Farben: wieder $p4mm$, die Zelle gedreht und doppelt so gross.
In der App öffnen →

Abb. 7.7 Ein Schachbrett im Modus „Gitter und Basis“. Die gestrichelte Zelle ist die gegebene, die durchgezogene die konventionelle. Hier unterscheiden die Farben zwei Sorten von Feldern wie zwei Atomsorten.

Die Verschiebung um ein Feld bringt das Muster also nicht in sich über, aber fast: Jedes Feld kommt auf ein Feld gleicher Form, nur mit der anderen Farbe. Nimmt man solche Operationen mit Farbwechsel hinzu, erhält man die Schwarz-Weiss-Gruppen, auch Antisymmetriegruppen genannt. In der Ebene gibt es 46 von ihnen.

Insgesamt unterscheidet man drei Arten von Gruppen, je nachdem, welche Rolle der Farbwechsel spielt. In den 17 gewöhnlichen Ebenengruppen ändert keine Operation eine Farbe. In den 46 Schwarz-Weiss-Gruppen wechselt ein Teil der Operationen die Farben, wie die Verschiebung um ein Feld auf dem Schachbrett, die übrigen behalten sie. In den 17 **grauen Gruppen** schliesslich ist schon der Farbwechsel allein eine Symmetrieoperation, ohne jede Bewegung: Vertauscht man überall Schwarz und Weiss, sieht das Muster genau gleich aus. Das geht nur, wenn kein Feld eine bestimmte Farbe hat. Anschaulich ist jedes Feld zugleich schwarz und weiss, also grau; ein graues Schachbrett hat keine Farben mehr, die man vertauschen könnte. Zu jeder gewöhnlichen Gruppe gehört so genau eine graue, mit denselben Bewegungen, jede einmal ohne und einmal mit Farbwechsel. Zusammen sind es 17 + 46 + 17 = 80 Gruppen.

Mit derselben Idee beschreibt man magnetische Strukturen: Dort spielt die Umkehr der magnetischen Momente, die Zeitumkehr, die Rolle des Farbwechsels. Ein Paramagnet, dessen Momente im Mittel verschwinden, hat eine graue Gruppe. Bringt in einem Antiferromagneten wie beim Schachbrett eine Verschiebung jedes Moment auf ein entgegengesetztes, hat er eine Schwarz-Weiss-Gruppe mit einer solchen Translation mit Farbwechsel. Ein Ferromagnet kann eine solche Gruppe nie haben, denn diese Operation kehrte sein Gesamtmoment um. Seine Gruppe ist eine gewöhnliche oder eine Schwarz-Weiss-Gruppe, in der keine reine Translation die Farbe wechselt.

ZUSAMMENFASSUNG

- Tapeten, Stoffe, Fliesen, Mauerwerk und Pflaster sind periodische Muster mit denselben 17 Ebenengruppen; englisch heissen sie *wallpaper groups*.
- Die Ebenengruppe hängt von der Anordnung der Motive ab; bei Motiven ohne eigene Symmetrie nicht von ihrer Gestalt.
- Der Versatz der Reihen bestimmt die Symmetrie eines Verbands: ohne Versatz *p*2*mm*, halb versetzt *c*2*mm* mit Gleitspiegellinien entlang der Fugen, um ein Drittel versetzt *p*2. Fischgrät- und Flechtverband haben *p*2*gg* und *p*4*gm*.

ZUR VERTIEFUNG

- Regelmässige Vielecke parkettieren die Ebene allein nur als Dreiecke, Quadrate oder Sechsecke; gemischt ergeben sie die archimedischen Parkettierungen. Ihr Name zählt die Vielecke um eine Ecke auf; 3.3.3.3.6 ist chiral, mit *p*6.
- Kacheln im Stil von Escher entstehen, indem man die Kanten einer Zelle paarweise gleich verformt; eine Kante, die punktsymmetrisch zu ihrer Mitte ist, ergibt 2-zählige Drehpunkte.
- Operationen mit Farbwechsel führen auf die Schwarz-Weiss-Gruppen, 46 in der Ebene. In den 17 grauen Gruppen ist schon der Farbwechsel allein eine Operation; anschaulich ist jedes Feld zugleich schwarz und weiss.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2** · **Stufe 3**

QUELLEN

- Die Ebenengruppen aller Muster dieses Kapitels (Verbände, Parkettierungen, Schachbrett) hat die App mit ihrer Symmetriebestimmung berechnet (Vorgaben im Modus „Gitter und Basis“).
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 4.2 (Fedorov leitet 1891 die 17 Ebenengruppen ab, S. 136), 4.2.3 (Ebenensymmetrie im Alltag; *wallpaper group* im Englischen verbreiteter als *plane symmetry group*, S. 141; Mauerwerksverbände: versetzte Reihen gegen Sollbruchstellen, „Gleitspiegelmotiv“, Läufer und Binder, Zierverbände, Abb. 4.19, S. 142–143; islamische Kunst und Alhambra, Weltkulturerbe seit 1984, Streit um die 17 Gruppen, S. 143–144; Escher: erster Besuch der Alhambra 1922, löwenartige Figur 1926, zweiter Besuch im Mai 1936, Artikel aus kristallographischen Zeitschriften auf Empfehlung des Halbbruders, S. 144–146), 6.1.4 (Schachbrett, Abb. 6.13, S. 202–203; Lösung *p4mm*, Anhang, S. 314–315), 8.2 (Parkettierungen nur mit Vielecken der Zähligkeit 1 bis 4 und 6, Abb. 8.3, S. 269).
- B. Grünbaum, What symmetry groups are present in the Alhambra?, *Notices of the American Mathematical Society* 53, 670–673 (2006); E. A. Müller, Dissertation, Universität Zürich (1944); beide nach Hoffmann, Literatur zu Kap. 4.
- D. Schattschneider, *M. C. Escher: Visions of Symmetry*, 2. Aufl., Harry N. Abrams, New York (2004). Bilder: mcescher.com, Galerie „Symmetry“.
- Lexikon der Geowissenschaften, Stichwort „Antisymmetriegruppen“, Spektrum Akademischer Verlag (2000), spektrum.de (46 Antisymmetriegruppen aus den 17 Ebenengruppen; mit einfarbigen und grauen Gruppen 80; Graugruppen; Anwendung auf antiferromagnetische Strukturen).

8 Ebenengruppen bestimmen

Die Kapitel 1–7 haben gezeigt, wie aus Gitter und Motiv eine Ebenengruppe entsteht. Dieses Kapitel geht den umgekehrten Weg: Gegeben ist ein Muster, gesucht ist seine Ebenengruppe. Dafür gibt es ein einfaches Verfahren, ein Flussdiagramm aus wenigen Fragen, die man mit Ja oder Nein beantwortet. Es nimmt einem die Arbeit nicht ab, die Symmetrieelemente im Muster zu finden, sagt aber, welche man suchen muss und in welcher Reihenfolge.

LERNZIELE

- die Ebenengruppe eines periodischen Musters mit den Leitfragen des Flussdiagramms bestimmen
- erklären, welche Symmetrieelemente und welche Lagen der Drehpunkte die Gruppen mit gleicher höchster Zähligkeit unterscheiden
- typische Fehler beim Bestimmen erkennen, etwa einen übersehenen Drehpunkt oder eine übersehene Farbe
- zur bestimmten Gruppe die konventionelle Zelle und die Lage der Symmetrieelemente im Muster angeben

8.1 Vorgehen

Die Ebenengruppe eines Musters zu bestimmen heisst, seine Symmetrieelemente zu finden: Drehpunkte, Spiegellinien und Gleitspiegellinien. Das Symbol ergibt sich dann aus wenigen Merkmalen. Welche das sind, zeigt ein Flussdiagramm, das der Mathematiker Brian Sanderson als Algorithmus zum Erkennen von Mustern entworfen hat. Es kennt fünf Leitfragen (Abschnitt 8.2 „Die fünf Leitfragen“) und führt nach höchstens vier Antworten zu einer der 17 Gruppen (Abschnitt 8.3 „Das Flussdiagramm“).

Die Fragen beantwortet man am Muster selbst; das Diagramm sagt nur, welche Elemente man suchen muss und in welcher Reihenfolge. Drei Hilfen machen das Suchen leichter: die Fragen zuerst an einem kleinen Teilstück des Musters beantworten, für den Anfang von der Farbe absehen, um Kandidaten zu finden, und das Muster so drehen, dass seine auffälligen Linien waagrecht oder senkrecht laufen. Ob ein Kandidat wirklich ein Symmetrieelement ist, entscheidet aber das ganze Muster, mit seinen Farben (Abschnitt 8.5 „Typische Fehler“). Eine Operation gehört nur dann zum Muster, wenn sie jedes Motiv auf ein gleiches Motiv abbildet, an jeder Stelle des Musters.

Zuletzt legt man die Zelle fest und zeichnet die Symmetrieelemente an ihren richtigen Stellen ein (Abschnitt 8.6 „Vom Ergebnis zur Zelle“). Erst damit ist die Bestimmung vollständig.

8.2 Die fünf Leitfragen

1. **Welche Zähligkeit hat der Drehpunkt höchster Zähligkeit?** Möglich sind nur 1, 2, 3, 4 und 6 (Abschnitt 2.2 „Nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehpunkte“); 1 heisst, es gibt keinen Drehpunkt. Kandidaten sind die Mitten von Motiven mit Drehsymmetrie und die Stellen zwischen zwei gleichen Motiven, die um 180° gegeneinander gedreht sind. Ein 6-zähliger Drehpunkt ist zugleich 3- und 2-zählig, ein 4-zähliger zugleich 2-zählig; gezählt wird die höchste Zähligkeit.
2. **Gibt es eine Spiegellinie?** Eine Spiegellinie bildet jedes Motiv auf sein Spiegelbild ab, und dieses Spiegelbild ist selbst ein Motiv des Musters (Abschnitt 2.1 „Drehpunkte und Spiegellinien“).

3. **Gibt es eine Gleitspiegellinie?** Eine Gleitspiegellinie bildet das Muster erst dann auf sich ab, wenn man spiegelt und um die halbe Gitterperiode entlang der Linie verschiebt (Abschnitt 4.1 „Die Gleitspiegelung“).
4. **Gibt es einen Drehpunkt, der auf keiner Spiegellinie liegt?** Diese Frage stellt das Diagramm nur bei Gruppen mit Spiegellinien und höchster Zähligkeit 3 oder 4. Gefragt ist nach irgendeinem Drehpunkt, nicht nur nach dem höchster Zähligkeit.
5. **Gibt es einen Drehpunkt, der auf einer Spiegellinie liegt?** Diese Frage stellt das Diagramm nur bei höchster Zähligkeit 2, wenn es Spiegellinien und Gleitspiegellinien gibt.

Die Fragen 4 und 5 unterscheiden Gruppen, die dieselben Arten von Symmetrieelementen haben und sich nur darin unterscheiden, wie diese zueinander liegen. Das ist genau das, was im Symbol die Reihenfolge der Buchstaben ausdrückt (Abschnitt 5.2 „Das Symbol lesen“): *p*3*m*1 und *p*31*m* haben beide 3-zählige Drehpunkte und Spiegellinien, aber in *p*31*m* liegen einige der 3-zähligen Drehpunkte auf keiner Spiegellinie.

> MERKE
>
> **Die fünf Leitfragen: höchste Zähligkeit eines Drehpunkts; Spiegellinie; Gleitspiegellinie; Drehpunkt, der auf keiner Spiegellinie liegt; Drehpunkt auf einer Spiegellinie.**

8.3 Das Flussdiagramm

Abb. 8.1 zeigt das Flussdiagramm. Man beginnt links mit der höchsten Zähligkeit und folgt dann den Antworten nach rechts. Nicht jede Frage wird in jedem Zweig gestellt: Bei 6-zähligen Drehpunkten genügt die Frage nach Spiegellinien, und bei höchster Zähligkeit 3 oder 4 ist die Frage nach Gleitspiegellinien unnötig. Gruppen mit Spiegellinien haben dort immer auch Gleitspiegellinien, etwa *p*4*mm* diagonal zwischen den diagonalen Spiegellinien (Abschnitt 4.5 „Mehr Symmetrieelemente, als das Symbol nennt“).

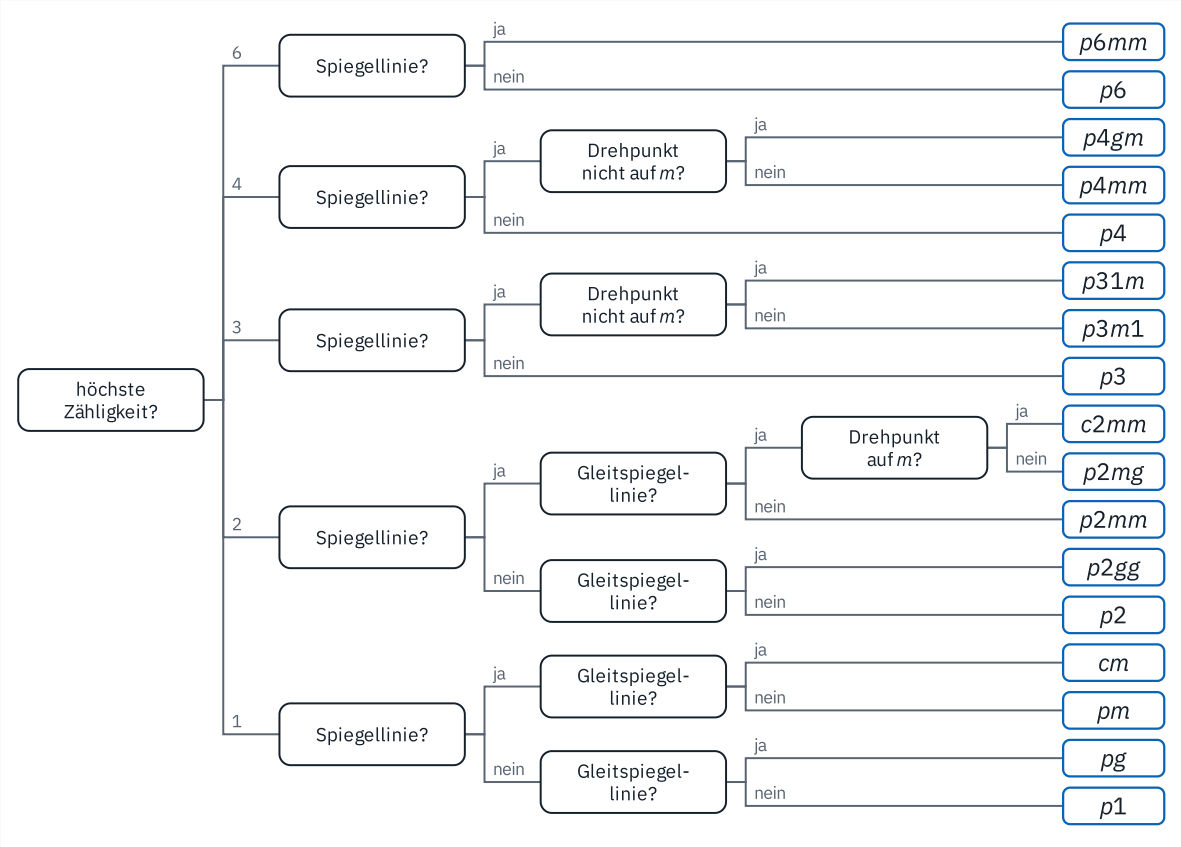


Abb. 8.1 Flussdiagramm zur Bestimmung der Ebenengruppe, nach dem Algorithmus von Brian Sanderson, neu gezeichnet. *m* steht für Spiegellinie.

Mit 2-zähligen Drehpunkten, Spiegellinien und Gleitspiegellinien bleiben zwei Gruppen. In *c2mm* liegen einige 2-zählige Drehpunkte auf den Schnittpunkten der Spiegellinien und andere zwischen ihnen; in *p2mg* liegt keiner auf einer Spiegellinie. In *p2mm* liegen dagegen alle Drehpunkte auf Schnittpunkten von Spiegellinien, und es gibt keine Gleitspiegellinien. Ebenso trennt das Diagramm *p4mm* von *p4gm*: In *p4mm* liegen alle Drehpunkte auf Spiegellinien, in *p4gm* liegt der 4-zählige Drehpunkt auf keiner.

IN DER APP

Im Modus „Ebenengruppen“ zeigt die App für jede der 17 Gruppen alle Symmetrieelemente. Damit lässt sich jeder Weg des Diagramms nachprüfen. Dass jede Gruppe mit ihren eigenen Elementen genau bei sich ankommt, prüft ein Test der App für alle 17.

8.4 Beispiele

Abb. 8.2 zeigt sechs Muster: fünf aus den Vorgaben der App im Modus „Gitter und Basis“ und eine Tapete aus Abschnitt 7.1 „Tapetengruppen“. Bevor man weiterliest, lohnt es sich, jedes selbst mit dem Flussdiagramm zu bestimmen. Abb. 8.3 zeigt danach die Symmetrieelemente, die man dabei findet, noch ohne Zelle; die Zelle kommt erst im letzten Schritt dazu (Abschnitt 8.6 „Vom Ergebnis zur Zelle“, Abb. 8.4).

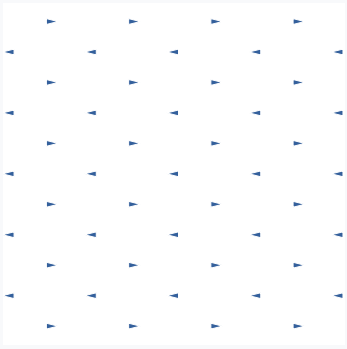
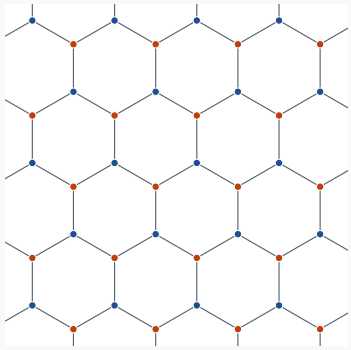
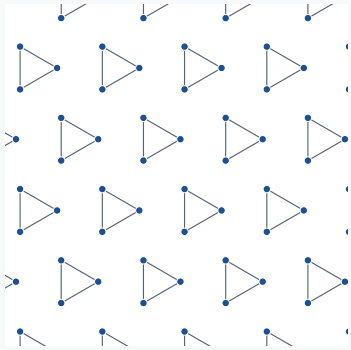


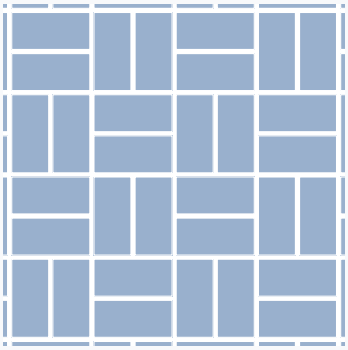
Abb. 8.2a Dreiecke, die Spitzen abwechselnd umgekehrt.
In der App öffnen →



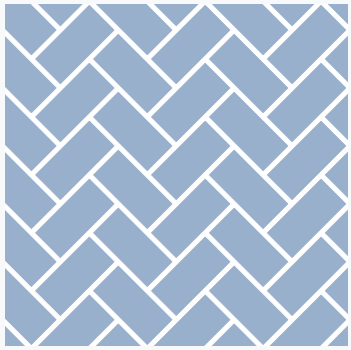
b Bienenwabe aus zwei Sorten Atomen (h-BN).
In der App öffnen →



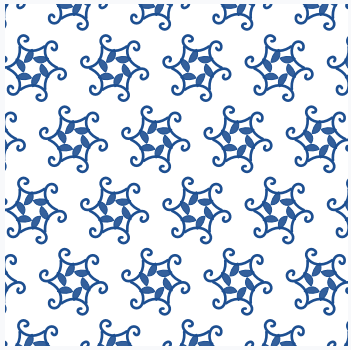
c Dreiergruppen.
In der App öffnen →



d Flechtverband.
In der App öffnen →



e Fischgrätverband.
In der App öffnen →



f Ranken.
In der App öffnen →

Abb. 8.2 Sechs Muster zum Bestimmen, ohne Zelle und ohne Symmetrieelemente: alle Vorgaben im Modus „Gitter und Basis“; f zeigt dieselben Ranken wie Abb. 7.2a.

Dreiecke (Abb. 8.2a). Gedreht um 60°, 90° oder 120° kommt das Muster nicht zur Deckung, wohl aber um 180° um einen Punkt zwischen zwei entgegengesetzt weisenden Dreiecken: höchste Zähligkeit 2. Jedes Dreieck ist spiegelsymmetrisch zu seiner Achse, und die Linie entlang der Achsen ist eine Spiegellinie des ganzen Musters. Senkrecht zu den Spiegellinien liegen Gleitspiegellinien, auf halbem Weg zwischen einem Dreieck und dem umgekehrten der Nachbarreihe: Spiegeln und um eine halbe Periode quer zu den Reihen verschieben bringt ein Dreieck auf eines der Nachbarreihe, mit umgekehrter Spitze. Die 2-zähligen Drehpunkte liegen auf keiner Spiegellinie. Der Weg 2 → ja → ja → nein führt zu *p*2*mg* (Abb. 8.3a), derselben Gruppe wie bei den Dreiecken in Abschnitt 4.5 „Mehr Symmetrieelemente, als das Symbol nennt“.

Bienenwabe aus zwei Sorten Atomen (Abb. 8.2b). Die Mitte jedes Sechsecks ist ein 3-zähliger Drehpunkt, ebenso jedes Atom; 6-zählig ist die Mitte nicht, weil eine Drehung um 60° die beiden Sorten vertauscht. Durch jedes Atom laufen Spiegellinien. Auf die Frage, ob ein Drehpunkt auf keiner Spiegellinie liegt, lautet die Antwort Nein: Alle drei Sorten von 3-zähligen Drehpunkten, Atome beider Sorten und Sechseckmitten, liegen auf Schnittpunkten von Spiegellinien. Das ergibt *p*3*m*1 (Abb. 8.3b). Hier entscheidet die Farbe: Sähe man nur Atome einer Sorte, wäre das Muster die Bienenwabe von Graphen, mit 6-zähligen Drehpunkten in den Sechseckmitten und der Gruppe *p6mm*.

Dreiergruppen (Abb. 8.2c). Die Mitte jeder Dreiergruppe ist ein 3-zähliger Drehpunkt mit drei Spiegellinien, je eine durch ein Atom der Gruppe. Es gibt aber noch eine zweite Sorte 3-zähliger Drehpunkte: in den Lücken zwischen den Dreiergruppen. Durch sie geht keine Spiegellinie. Also: 3 → ja →

ja, *p*31*m* (Abb. 8.3c). Die Gruppen der Muster b und c unterscheiden sich nur in der Lage der Spiegellinien zu den Drehpunkten; genau das prüft Leitfrage 4.

Flechtverband (Abb. 8.2d). Wo vier Steinquadrate zusammenstossen, liegt ein 4-zähliger Drehpunkt. Spiegellinien laufen durch die Mitten der Quadrate, aber nicht durch den 4-zähligen Drehpunkt: 4 → ja → ja, *p*4*gm* (Abb. 8.3d), wie in Abschnitt 7.2 „Mauerwerk und Pflaster“.

Fischgrätverband (Abb. 8.2e). Hier gibt es keine einzige Spiegellinie, aber Gleitspiegellinien in zwei Richtungen und 2-zählige Drehpunkte (Abschnitt 7.2 „Mauerwerk und Pflaster“): 2 → nein → ja, *p*2*gg* (Abb. 8.3e).

Ranken (Abb. 8.2f). Um die Mitte jeder Rosette aus sechs Ranken dreht sich das Muster um 60° in sich über: ein 6-zähliger Drehpunkt. Eine Spiegellinie gibt es nicht, denn alle Ranken drehen sich im selben Sinn; ein Spiegelbild käme im Muster nicht vor. Das Diagramm braucht nur zwei Antworten: 6 → nein, *p*6 (Abb. 8.3f). Zwischen den Rosetten liegen dazu 3- und 2-zählige Drehpunkte, nach denen keine Leitfrage fragt; sie gehören aber zum Ergebnis (Abschnitt 8.6 „Vom Ergebnis zur Zelle“).

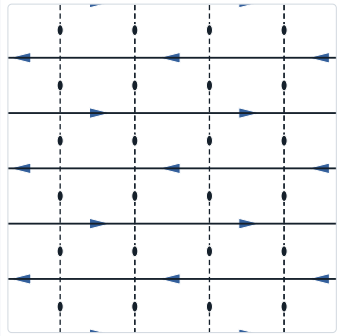
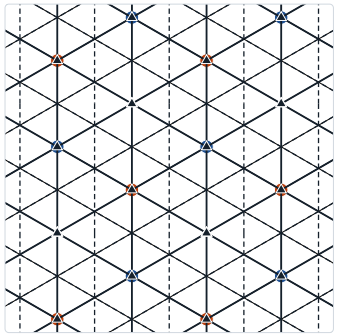
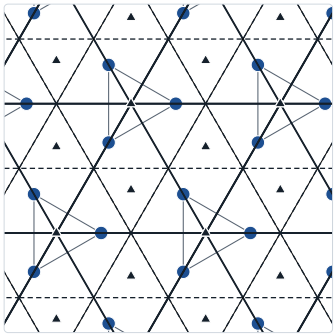


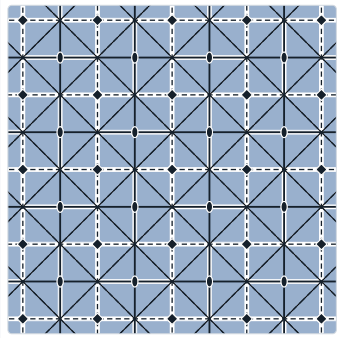
Abb. 8.3a Dreiecke: *p*2*mg*.
In der App öffnen →



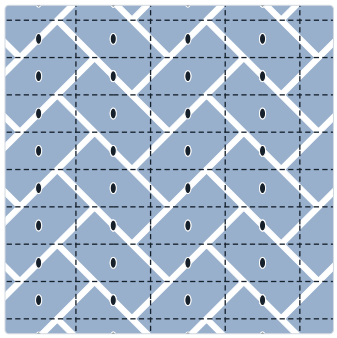
b h-BN: *p*3*m*1.
In der App öffnen →



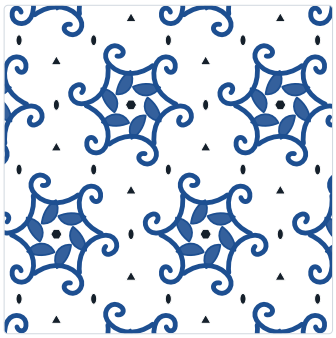
c Dreiergruppen: *p*31*m*.
In der App öffnen →



d Flechtverband: *p*4*gm*.
In der App öffnen →



e Fischgrätverband: *p*2*gg*.
In der App öffnen →



f Ranken: *p*6.
In der App öffnen →

Abb. 8.3 Die Muster aus Abb. 8.2 mit den Symmetrieelementen, die das Diagramm finden lässt, noch ohne Zelle.

IN DER APP

Jede Abbildung öffnet die Vorgabe in der App. Schaltet man dort „Symmetrieelemente“ aus, sieht man das Muster ohne Hilfe; eingeschaltet zeigt die App, was das Diagramm hätte finden sollen. Verschiebt man ein Motiv, zeigt sie, wie sich die Gruppe ändert.

8.5 Typische Fehler

Weil das Diagramm jede Antwort ernst nimmt, führt ein übersehenes oder ein falsch erkanntes Element zu einer falschen Gruppe. Drei Fehler liegen nahe.

- **Ein Drehpunkt wird übersehen.** Übersieht man im Fischgrätverband die 2-zähligen Drehpunkte, beginnt man mit der Zähligkeit 1 und kommt über „keine Spiegellinie, aber Gleitspiegellinie“ zu *pg* statt zu *p*2*gg*. Bei Leitfrage 4 hilft es, alle Sorten von Drehpunkten durchzugehen: In *p*4*gm* liegen die 2-zähligen Drehpunkte auf Spiegellinien, der 4-zählige aber nicht.
- **Eine Gleitspiegellinie wird mit einer Spiegellinie verwechselt.** Wer eine Gleitspiegellinie für eine Spiegellinie hält, landet etwa bei *pm* statt bei *pg*. Eine Spiegellinie prüft man an einem einzelnen Motiv: Sein Spiegelbild muss genau gegenüber liegen, ohne Verschiebung.
- **Die Farbe wird übersehen.** Farben gehören zum Muster. Die Bienenwabe aus zwei Sorten Atomen (Abb. 8.2b) zeigt, was sonst passiert: Wer die beiden Sorten nicht unterscheidet, findet 6-zählige Drehpunkte in den Sechseckmitten und kommt zu *p*6*mm* statt *p*3*m*1. Von der Farbe abzusehen hilft also, Kandidaten zu finden, darf aber nicht das Ergebnis bestimmen.

Ein vierter Fehler betrifft nicht die Gruppe, sondern die Zelle: In *cm* und *c*2*mm* ist die konventionelle Zelle zentriert, obwohl es eine halb so grosse primitive Zelle gibt (Abschnitt 2.4 „Wahl der Elementarzelle und das zentrierte Gitter“). Am Symbol ändert das nichts, das Diagramm führt auf *cm* bzw. *c*2*mm*; die Zelle legt man danach nach den Regeln aus Abschnitt 2.5 „Die konventionelle Zelle“ fest.

8.6 Vom Ergebnis zur Zelle

Mit der Gruppe steht fest, welche Symmetrieelemente das Muster hat, aber noch nicht, wo sie liegen. Als letzten Schritt legt man deshalb die Zelle fest und zeichnet die Elemente ein (Abb. 8.4). Für ein primitives Gitter sucht man die kleinste Einheit, die, nur aneinandergefügt, das ganze Muster ergibt. Die konventionelle Zelle legt man dann so, wie es die Regeln aus Abschnitt 2.5 „Die konventionelle Zelle“ verlangen: ihre Kanten entlang der Spiegellinien oder, bei 3-, 4- und 6-zähligen Drehpunkten, mit dem Winkel 120° bzw. 90°. Den Ursprung legt man wie die International Tables, für *p*2*mg* etwa auf einen 2-zähligen Drehpunkt (Abschnitt 4.5 „Mehr Symmetrieelemente, als das Symbol nennt“).

Zum Schluss vergleicht man das Bild mit dem Diagramm der Gruppe in den International Tables (Abschnitt 5.3 „Die Diagramme der International Tables“). Jedes Element des Diagramms muss im Muster an der entsprechenden Stelle liegen, auch die, nach denen keine Leitfrage gefragt hat, etwa die Gleitspiegellinien in *p*4*mm*. Fehlt eines, ist entweder die Zelle falsch gelegt oder eine Antwort falsch gewesen.

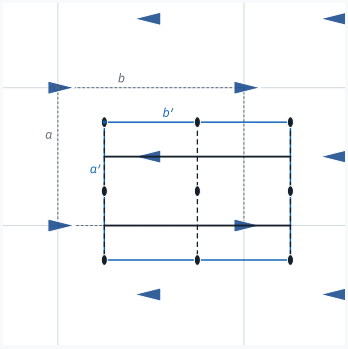
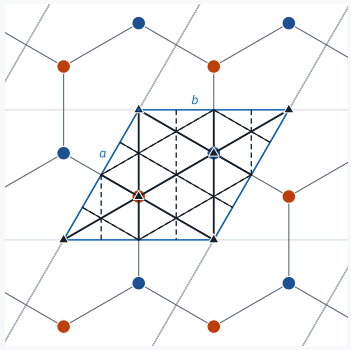
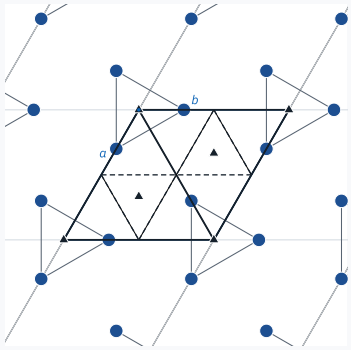


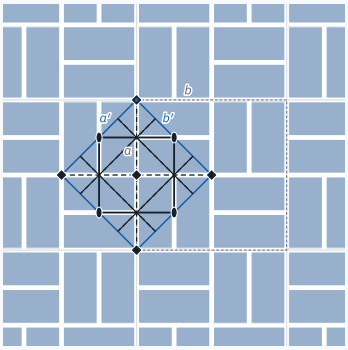
Abb. 8.4a *p2mg*.
In der App öffnen →



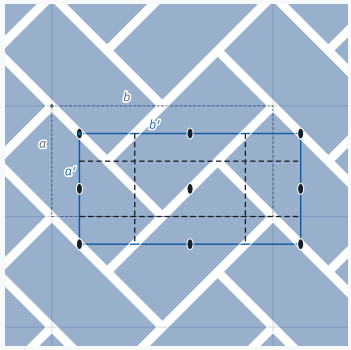
b *p3m1*. In der App öffnen →



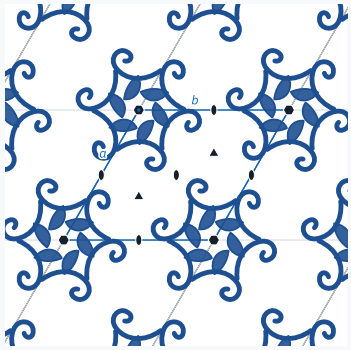
c *p31m*. In der App öffnen →



d *p4gm*. In der App öffnen →



e *p2gg*. In der App öffnen →



f *p6*. In der App öffnen →

Abb. 8.4 Die Muster aus Abb. 8.2 mit konventioneller Zelle und Symmetrieelementen, wie die App sie bestimmt: alle im Modus „Gitter und Basis“.

IN DER APP

Im Modus „Gitter und Basis“ bestimmt die App zu jedem Muster die konventionelle Zelle nach ITA und zeichnet die Symmetrieelemente ein; „im Modus ‚Ebenengruppen‘ ansehen“ öffnet die Gruppe mit ihrem Diagramm. So lässt sich eine eigene Bestimmung Schritt für Schritt prüfen.

Das Flussdiagramm ist nicht der einzige Weg zur Ebenengruppe. John Conway geht ebenfalls vom Bild aus, folgt aber keinem Diagramm, sondern zählt auf, was das Muster enthält: vier Arten von Merkmalen, etwa Spiegellinien und Drehpunkte, die auf keiner Spiegellinie liegen. Zusammen ergeben sie die Signatur der Gruppe. Diesen zweiten Weg zu denselben 17 Gruppen beschreibt Kapitel 9 (Vertiefung).

ZUSAMMENFASSUNG

- Das Flussdiagramm nach Sanderson bestimmt die Ebenengruppe eines Musters mit fünf Leitfragen: höchste Zähligkeit, Spiegellinie, Gleitspiegellinie, Drehpunkt nicht auf einer Spiegellinie, Drehpunkt auf einer Spiegellinie.
- Gruppen mit gleichen Arten von Elementen unterscheiden sich darin, ob Drehpunkte auf Spiegellinien liegen: *p3m1* und *p31m*, *p4mm* und *p4gm*, *c2mm* und *p2mg*.
- Typische Fehler sind ein übersehener Drehpunkt, eine Gleitspiegellinie, die man für eine Spiegellinie hält, und eine übersehene Farbe.
- Zur vollständigen Bestimmung gehören die konventionelle Zelle und die Lage aller Elemente, im Vergleich mit dem Diagramm der International Tables.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 1** · **Stufe 2**

QUELLEN

- B. J. Sanderson, *Pattern Recognition Algorithm* (Flussdiagramm mit den Leitfragen nach höchster Zähligkeit, Spiegelung, Gleitspiegelung und der Lage der Drehpunkte zu den Spiegelungen), in der überarbeiteten Fassung von D. Bar-Natan, Image Gallery, University of Toronto. Abb. 8.1 ist neu gezeichnet.
- F. Hoffmann, *Faszination Kristalle und Symmetrie*, Springer Fachmedien, Wiesbaden (2016), Abschn. 4.2, S. 139–141 (das Flussdiagramm nach Sanderson mit einem durchgerechneten Beispiel, Abb. 4.14–4.18; Hilfen zum Suchen der Elemente).
- Dass jede der 17 Gruppen mit ihren eigenen Symmetrieelementen zu sich selbst führt und die Ebenengruppen aller Muster dieses Kapitels hat die App berechnet (Elemente aus den Operationen der International Tables, Vol. A, Part 6; Symmetriebestimmung im Modus „Gitter und Basis“).
- J. H. Conway, H. Burgiel, C. Goodman-Strauss, *The Symmetries of Things*, A K Peters/CRC Press (2016), Kap. 2–3 (die Signatur als zweiter Weg zu den 17 Gruppen; Einzelheiten in den Quellen zu Kapitel 9).

Vertiefung

Kapitel 9 geht über den Grundstoff hinaus. Es baut auf den Kapiteln 5 und 6 auf; der Kasten „Voraussetzungen“ am Anfang nennt die Anknüpfungspunkte. Die Randlinie links markiert den ganzen Teil.

9 Die Signatur nach Conway VERTIEFUNG

Die Symbole nach Hermann-Mauguin beschreiben eine Ebenengruppe durch ihre Zelle und ihre Blickrichtungen. John Conway hat einen zweiten, sehr anschaulichen Blick auf die 17 Gruppen beschrieben, der ohne Koordinaten und Tabellen auskommt und vom Bild ausgeht: Man zählt, was man im Muster sieht, und schreibt es als Signatur. Ein Preis für jedes Zeichen erklärt dann, warum es genau 17 Gruppen gibt.

VORAUSSETZUNGEN

Das Kapitel knüpft an die 17 Ebenengruppen (Kapitel 5) und die Punktlagen (Kapitel 6) an: Jede Ziffer der Signatur gehört zu einer Wyckoff-Lage. Es ist ein zweiter Weg zu denselben 17 Gruppen, neben der Bestimmung mit dem Flussdiagramm in Kapitel 8. Für den Rest des Skripts braucht man es nicht.

LERNZIELE

- die Signatur einer Ebenengruppe nach Conway lesen und ihren Preis berechnen
- erklären, warum die Bedingung „Preis 2“ auf genau 17 Ebenengruppen führt

9.1 Vier Merkmale und die Signatur

Der Mathematiker John H. Conway hat mit Heidi Burgiel und Chaim Goodman-Strauss beschrieben, wie man jede Ebenengruppe mit vier Merkmalen festlegt, die man im Muster sieht. Die Merkmale werden zu einer **Signatur** zusammengesetzt, auch Orbifold-Symbol genannt, und zwar in fester Reihenfolge: zuerst o, dann die Drehpunkte, dann jedes Kaleidoskop mit seinen Ecken, zuletzt ×.

- **Kaleidoskop**, Zeichen *: Spiegellinien, die ein Gebiet begrenzen wie die Spiegel eines Kaleidoskops, oder eine einzelne Spiegellinie, die keine andere schneidet. Hinter dem * folgen die Ecken des Kaleidoskops, die Schnittpunkte von Spiegellinien, jeweils mit der Zahl der Spiegellinien durch den Punkt.
- **Drehpunkte, die auf keiner Spiegellinie liegen** (englisch *gyrations*), mit ihrer Zähligkeit, vor dem *.
- **Wunder** (*miracle*, von *mirrorless crossing*), Zeichen ×: Man kommt von einem Motiv zu seinem Spiegelbild, ohne eine Spiegellinie zu überqueren. Das leisten Gleitspiegelungen, die nicht aus Spiegellinien folgen.
- **Wanderung** (*wonder*, von *wonderful wandering*), Zeichen o: Kopien ohne Spiegelung, die weder durch Drehpunkte noch durch Spiegellinien oder Wunder erklärt sind. Das kommt nur in $p1$ vor.

Gleichartige Merkmale zählt man nur einmal, wobei zwei Punkte oder Linien gleichartig sind, wenn eine Symmetrieoperation des Musters das eine in das andere überführt. In *pm* gibt es zwei Sorten paralleler Spiegellinien, die keine Operation ineinander überführt; jede ist ein Kaleidoskop für sich, daher **. Das ist genau der Begriff der Punktlage aus Kapitel 6. Jede Ziffer der Signatur steht deshalb für eine Wyckoff-Lage, deren Lagesymmetrie eine Drehung enthält: vor dem * eine mit der Lagesymmetrie *n*, hinter dem * eine mit *n* Spiegellinien und einem *n*-zähligen Drehpunkt. Ein Beispiel ist das Paar aus Abb. 5.2. In *p4mm* liegen alle Drehpunkte auf Schnittpunkten von Spiegellinien: zwei Sorten 4-zähliger Punkte (1*a* und 1*b*) und eine Sorte 2-zähliger (2*c*); die Signatur ist *442. In *p4gm* liegt der 4-zählige Punkt auf keiner Spiegellinie, nur der 2-zählige auf einem Schnittpunkt: 4*2. Conway färbt die Merkmale ohne Spiegelung (Drehpunkte, Wanderung) blau, die spiegelnden (Kaleidoskope, Wunder) rot, ähnlich wie die App: blau, was durch Drehen und Verschieben entsteht, orange die Spiegelbilder.

Abb. 9.1 zeigt alle vier Merkmale an drei Mustern. Durchgezogene Linien sind Spiegellinien, gestrichelte Gleitspiegellinien; die Motive sind alle blau gezeichnet. Die Merkmale sind deshalb alle in einer Farbe markiert, nicht in Conways Blau und Rot.

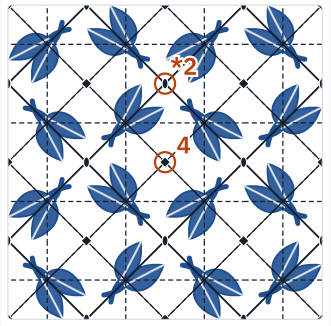
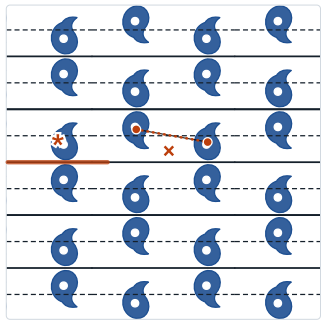
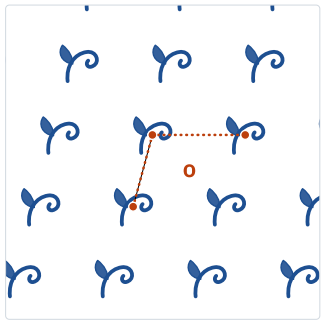


Abb. 9.1a *p4gm*, 4*2: Durch den 4-zähligen Drehpunkt (4) läuft keine Spiegellinie, nur Gleitspiegellinien. Die Spiegellinien bilden ein Kaleidoskop mit einer Sorte Ecke, an der sich zwei Spiegellinien kreuzen (*2).
In der App öffnen →



b *cm*, *×: Alle Spiegellinien sind gleichartig, ein Kaleidoskop ohne Ecken (*), anders als in *pm* (**). Der gepunktete Weg führt von einem Motiv zu einem Spiegelbild und überquert dabei keine der beiden benachbarten Spiegellinien, nur eine Gleitspiegellinie: ein Wunder (×).
In der App öffnen →



c *p1*, o: Weder Spiegellinien noch Drehpunkte noch Gleitspiegellinien; die Kopien sind nur durch Verschiebungen verbunden. Die beiden gepunkteten Wege, zwei unabhängige Verschiebungen, stehen zusammen für eine Wanderung (o).
In der App öffnen →

9.2 Preis und Magic Theorem

Nun bekommt jedes Zeichen einen Preis: o kostet 2, * und × je 1, eine Ziffer *n* vor dem * kostet $(n-1)/n$, eine Ziffer *n* hinter dem * die Hälfte davon, $(n-1)/(2n)$. Conways **Magic Theorem** sagt: Die Signaturen der periodischen Muster der Ebene sind genau die mit dem Gesamtpreis 2. Für *p4gm* ist das $\frac{3}{4} + 1 + \frac{1}{4} = 2$, für *p6mm* (*632) $1 + \frac{5}{12} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} = 2$.

9.3 Genau 17 Signaturen

Aus dem Magic Theorem folgt mit wenig Rechnung, dass es genau 17 Gruppen gibt. Nur blaue Zeichen: Jede Ziffer kostet weniger als 1, also braucht man mindestens drei. Mit drei Ziffern geht es nur als 632, 442 oder 333, mit vier nur als 2222, mehr Ziffern sind zu teuer; dazu kommt o allein. Nur Kaleidoskope (ein * mit Ziffern dahinter): Es kostet genau die Hälfte der entsprechenden blauen Signatur plus 1, also *632, *442, *333, *2222 und, als Gegenstück zu o, **. Die gemischten Signaturen entstehen aus diesen, indem man zwei gleiche Ziffern hinter dem * durch eine davor ersetzt (*nn → n*) oder ein letztes * durch × (der Preis bleibt gleich): 4*2, 3*3, 2*22, 22*, *×, 22× und ××. Umgekehrt wird jede gemischte Signatur zu einer reinen, wenn man n* durch *nn und × durch * ersetzt, ohne dass sich der Preis ändert; deshalb gibt es keine weiteren. Das sind 5 + 5 + 7 = 17 Signaturen, und zu jeder gehört genau eine Ebenengruppe.

Signatur nach Conway und Symbol nach Hermann-Mauguin

*632 · *p*6*mm*	*442 · *p*4*mm*	*333 · *p*3*m*1	*2222 · *p*2*mm*	** · *pm*
	4*2 · *p*4*gm*	3*3 · *p*31*m*	2*22 · *c*2*mm* 22* · *p*2*mg*	*× · *cm* ×× · *pg*
			22× · *p*2*gg*	
632 · *p*6	442 · *p*4	333 · *p*3	2222 · *p*2	o · *p*1

Die Tabelle ist wie bei Conway angeordnet: oben die rein spiegelnden Gruppen, unten die ohne Spiegelung, dazwischen die gemischten. In jeder Spalte haben die Gruppen dieselbe höchste Drehzähligkeit; unten steht jeweils die Gruppe aus ihren Drehungen und Translationen ohne Spiegelungen. Kapitel 5 kam auf 17, indem es Punktgruppen und Gitter kombinierte und einige oder alle Spiegellinien durch Gleitspiegellinien ersetzte; Conway kommt auf dieselbe Zahl, indem er Preise addiert.

MERKE · VERTIEFUNG

Die Signatur nach Conway nennt Drehpunkte ohne Spiegellinie (vor dem *), Kaleidoskope mit ihren Ecken (* und Ziffern danach), Wunder (×) und Wanderungen (o). Eine Signatur gehört genau dann zu einer Ebenengruppe, wenn ihr Preis 2 beträgt; das ergibt die 17 Gruppen.

IN DER APP

Die Kenndaten im Modus „Ebenengruppen“ nennen neben dem Symbol die Signatur nach Conway; der Hinweis beim Darüberfahren erklärt die Zeichen. Mit den Wyckoff-Lagen in denselben Kenndaten lässt sich jede Ziffer einer Punktlage zuordnen.

ZUSAMMENFASSUNG

- Conways Signatur nennt Drehpunkte ohne Spiegellinie, Kaleidoskope, Wunder und Wanderungen; der Preis jeder Signatur ist 2, und genau 17 Signaturen erfüllen das.

Lernziele prüfen im Quiz: **Stufe 3**

QUELLEN

- J. H. Conway, H. Burgiel, C. Goodman-Strauss, *The Symmetries of Things*, A K Peters/CRC Press (2016), Kap. 2 (Spiegellinien und Kaleidoskope, S. 15–18; gleichartige Merkmale, S. 18; Drehpunkte, S. 19–22; zwei Kaleidoskope, S. 23; Wunder, S. 24–25; Wanderung, S. 26; die vier Merkmale, Tab. 2.1, Farben blau und rot, S. 27), Kap. 3 (Preise, Tab. 3.1, S. 29; Magic Theorem, Satz 3.1, S. 30; Signatur bestimmen, S. 30–31; genau 17 Typen, S. 33–40, Tab. 3.2, S. 40).

Skript zur App „Symmetrie in der Ebene“, Version 1.8.1. Abbildungen mit dem Code der App erzeugt. Zur App · Quellcode