

# Die Symmetrie von Kristallen

## Darstellung der Symmetrie in Matrizenform

Prof. Dr. R.B. Neder  
Insitut für Mineralogie  
Am Hubland  
97074 Würzburg  
[reinhard.neder@mail.uni-wuerzburg.de](mailto:reinhard.neder@mail.uni-wuerzburg.de)

### Einführung

In dem begleitenden Artikel in „Der Mathematik-Unterricht“ (Neder, 2006) sind die Abbildungen, die der Symmetrie eines Kristalls entsprechen lediglich graphisch dargestellt. In diesem ergänzenden Internet-Artikel sollen nun die entsprechenden Abbildungen in rechnerischer Darstellung beschrieben werden. In einem Kristall entsteht die Symmetrie als Folge der Energieminimierung beim Erstarren eines Kristalls aus der Schmelze. Je nach Art der interatomaren Kräfte und der beteiligten Atomsorten entsteht so die spezielle Kristallstruktur. Bei einer rein atomaren Struktur, wie sie bei Metallen vorliegen, sind die Kräfte zwischen den Atomen ungerichtet. Als Folge entsteht eine Kristallstruktur, bei der jedes Atom möglichst gleichmäßig von vielen weiteren Atomen umgeben ist und damit eine sehr hohe kubische Symmetrie. Liegen kovalente Bindungen vor, so sind die Bindungen gerichtet und es entstehen weniger symmetrische Kristallstrukturen. In diesem Artikel soll nicht die Bildung der Kristallstruktur beschrieben werden sondern ihre Symmetrie. Die Abbildung eines Atomes auf ein anderes, welche beim Vorliegen von Symmetrie erfüllt ist, ist somit nicht eine tatsächliche Bewegung des Atoms sondern eine Abbildung der Atomkoordinaten.

Symmetrie ist ein Spezialfall der affinen Abbildungen, bei der alle Abstände und Winkel unverändert bleiben. Scherungen und/oder Projektionen werden hier nicht betrachtet.

### Darstellung der Symmetrieabbildungen in Matrizenform

Zur Vereinfachung ist in diesem Artikel die Abbildung auf einen 2-dimensionalen Raum beschränkt. Dies erlaubt einen einfacheren Vergleich mit den Abbildungen des Artikels, und macht die Handhabung übersichtlicher. Die Verallgemeinerung auf den 3-dimensionalen Raum folgt durch das Hinzufügen einer weiteren Dimension.

Sei als erstes die Abbildung eines Atomes durch eine Drehachse dargestellt. Die Drehachsen der 2-dimensionalen ebenen Gruppen stehen alle senkrecht zur Ebene und schneiden die Ebenen zumeist im Ursprung. Die Abbildung von Punkten mit dieser Drehachse erfolgt rechnerisch in einem kartesischen Koordinatensystem bei Drehung im Gegenuhrzeigersinn um den Winkel  $\alpha$  als:

$$\begin{aligned}x' &= \cos(\alpha)x - \sin(\alpha)y \\y' &= \sin(\alpha)x + \cos(\alpha)y\end{aligned}$$

Es ist allgemein üblich die Koordinaten der Atome als 2x1 Spaltenvektor zu schreiben. Entsprechend wird die Abbildung dieses Spaltenvektors durch die Multiplikation von links mit einer 2x2 Matrix beschrieben:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Bei Verwendung der an die Symmetrie angepassten Koordinatensysteme (Neder, 2006) vereinfachen sich die Symmetriematrizen für die Drehachsen auf die folgende Liste:

$$1: \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad 2: \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad 3: \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad 4: \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad 6: \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Für die 1-, 2- und 4-zählige Drehung ergeben sich diese Symmetriematrizen lediglich durch Einsetzen des entsprechenden Drehwinkels in die allgemeine Matrixform. Da beim hexagonalen Gitter, welches für 3- und 6-zählige Symmetrie geeignet ist, die Basisvektoren  $a$  und  $b$  nicht senkrecht aufeinander stehen ergibt sich hier eine andere Situation. Anhand der ebenen Gruppen  $p3$  und  $p6$  in Abb. 8 des Artikels bzw der Abbildung rechts kann man sich ableiten, dass bei einer 3 bzw. 6 die Punkte  $(1,0)$  und  $(0,1)$  folgendermaßen abgebildet werden:

$$3: \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$6: \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

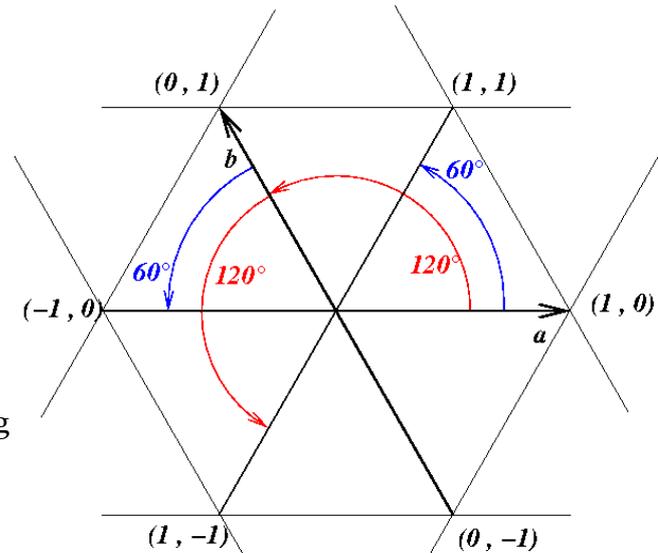


Abbildung 1: Rotation der Achsen im hexagonalen Koordinatensystem

Wie auch bei allen anderen Abbildungen bilden die Abbilder dieser beiden Vektoren jeweils die erste und zweite Spalte der Drehmatrix. Wie im kartesischen System gilt, dass die Determinante all dieser Drehmatrizen gleich +1 ist, unabhängig von dem verwendeten Koordinatensystem.

Während die Drehmatrizen der 1, 2 und 4 orthogonal sind, gilt dies für die Drehmatrizen der 3 und 6 bei Verwendung des hexagonalen Koordinatensystems nicht mehr. Die Spur i.e. die Summe der Diagonalelemente der Matrix

$\mathbf{M}$ :  $\sum M_{ii}$  ist ebenfalls unabhängig von der Wahl des speziellen Koordinatensystems. Für die Drehmatrix im kartesischen Koordinatensystem ist die Spur  $2\cos(\alpha)$  und man erkennt sofort, dass der entsprechende Wert für die Drehwinkel der 1, 2, 3, 4 und 6-zähligen Achsen mit der Spur der oben aufgeführten Drehmatrizen übereinstimmt.

Sei als Beispiel die 4-zählige Achse gewählt. Diese bildet ein Atom mit den Koordinaten  $(0,1, 0,66)$  folgendermaßen ab:

$$\begin{pmatrix} -0,66 \\ 0,1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,1 \\ 0,66 \end{pmatrix}$$

In Lehrbüchern der Kristallographie findet sich diese Abbildung in der allgemeinen Form:

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

oder in kurzer Form als  $(x, y) \rightarrow (-y, x)$ . Anfängern bereitet diese Beschreibung erfahrungsgemäß oft Probleme, da sie im Abbild den Wert von „-y“ missverstehen. Dieser Wert bedeutet lediglich, dass ein Atom, welches entlang der b-Achse die Koordinate „y“ hatte, nun auf ein Atom abgebildet wird, welches entlang der a-Achse die Koordinate „-y“ hat. Entsprechendes gilt für die Buchstaben „x“.

## Spiegelung in Matrizendarstellung

Die Spiegelung in den rechtwinkligen Kristallsystemen wird durch die folgenden Matrixoperation beschreiben. Hier bezeichnen die tiefgestellten Indizes die Koordinaten der Linie, entlang der die Spiegellinie verläuft.  $m_{x,0}$  bedeutet also eine Spiegellinie parallel der a Achse,  $m_{x,x}$  eine Spiegellinie parallel der Diagonalen.

$$m_{x,0} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad m_{0,y} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$m_{x,x} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad m_{x,-x} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

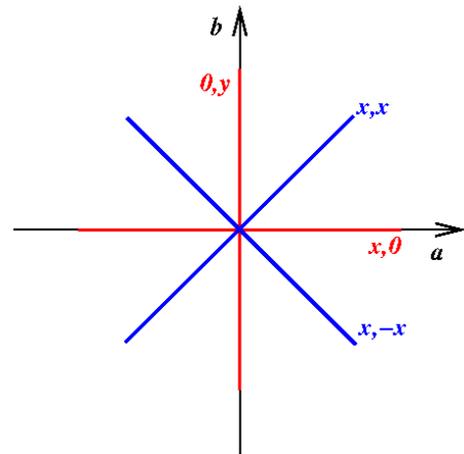


Abbildung 2: Lage der Spiegelebenen in rechtwinkligen Kristallsystemen

Das hexagonale Koordinatensystem zeichnet sich von den anderen Koordinatensystemen dadurch aus, dass Spiegellinien vorliegen können, obwohl die a und b Achse nicht senkrecht aufeinander stehen und dass die a+b Richtung symmetrisch völlig äquivalent zur a bzw. b Richtung ist. Daher müssen hier die Matrizen der Spiegelungen eine etwas andere Form erhalten. Im hexagonalen können diese Spiegellinien entlang folgender Richtungen verlaufen:

parallel a	$m_{x,0}$	
parallel b	$m_{0,y}$	
parallel a+b	$m_{x,x}$	
parallel 2a+b	$m_{2x,x}$	(steht senkrecht zu b)
parallel a+2b	$m_{x,2x}$	(steht senkrecht zu a)
parallel a-b	$m_{x,-x}$	(steht senkrecht zu a+b)

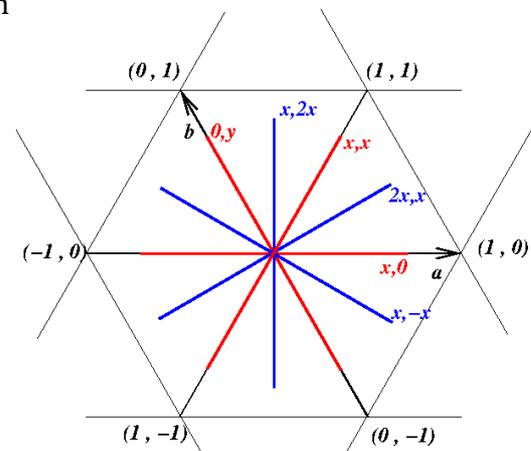


Abbildung 3: Lage der Spiegelebenen im hexagonalen Koordinatensystem

Damit ergeben sich im hexagonalen die folgenden Spiegelmatrizen:

$$m_{x,0} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad m_{0,y} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad m_{x,x} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad m_{2x,x} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad m_{x,2x} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad m_{x,-x} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Im hexagonalen bildet also die Spiegellinie parallel der a-Achse  $m_{x,0}$  einen Punkt mit Koordinaten (x,y) in den Punkt (x-y,-y) ab. Diese Abbildung ist im Gegensatz zu den rechtwinkligen Systemen intuitiv nicht sofort verständlich und macht das hexagonale System zu einem etwas schwerer zu verstehenden System.

Für alle Spiegelmatrizen gilt, dass die Determinante gleich -1 ist.

## Kombination von Symmetrioperationen

Für die Anwendung der Symmetriematrizen gelten unabhängig vom verwendeten Koordinatensystem die Standardrechenregeln für Matrizenrechnungen, die sich in Standardbüchern der Mathematik finden. Speziell auf die Matrizendarstellung der Symmetrie von Kristallen gehen ein Borchadt-Ott, Hahn, Sands, Prince und Boisen & Gibbs. Die letzten beiden Bücher gehen dabei

besonders auf die Gruppeneigenschaften ein, während die anderen Bücher eher die praktischen Anwendungen betonen. Werden zwei Symmetrieeoperationen nacheinander ausgeführt, entspricht dies dem Produkt der beiden Symmetriematrizen. Beispielsweise sei dies an der Spiegelung an der a+b Richtung  $m_{x,x}$  und anschließender Spiegelung an der b-Achse  $m_{0,y}$  gezeigt:

$$4 = m_{0,y} \cdot m_{x,x} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Die Menge aller Symmetrieeoperationen, die in einer der ebenen Gruppen vorliegt bildet eine Gruppe im mathematischen Sinne mit all den entsprechenden Eigenschaften. Für die ebene Gruppe  $p4mm$  sind dies die Symmetrieeoperationen:

$$1: \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; 2: \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; 4^p: \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; 4^m: \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$m_{0,y}: \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; m_{x,0}: \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; m_{x,x}: \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; m_{x,-x}: \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Hier ist die Drehung um  $90^\circ$ , i.e. die 4-zählige Drehung in der ersten Zeile separat geschrieben für die einzelnen Teildrehungen, um  $0^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $+90^\circ$  und  $-90^\circ=270^\circ$ . Diese Gruppe ist nicht kommutativ. Folgt man dieser hier vorgegebenen Reihenfolge welche sich an den Internationalen Tabellen der Kristallographie (Hahn) orientiert, so bilden diese Symmetrieeoperationen nacheinander ein Atom mit den Koordinaten (x,y) auf die Atome mit Koordinaten: (x,y); (-x,-y); (-y,x); (y,-x); (-x,y); (x,-y); (y,x); (-y,-x) ab.

### Invariante Punkte der Symmetrieeoperationen

Für alle diese bisherigen Symmetrieeoperationen gibt es mindestens einen Punkt, welcher durch die Symmetrieeoperation auf sich selber abgebildet wird, der also die Gleichung:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}' = \mathbf{M} \mathbf{x}$$

$$\mathbf{0} = (\mathbf{M} - \mathbf{I}) \mathbf{x}$$

erfüllt. Hier ist  $\mathbf{M}$  die Symmetriematrix und  $\mathbf{I}$  die Einheitsmatrix. Für die Identitätsoperation „1“ sind alle Elemente von  $(\mathbf{M}-\mathbf{I})$  gleich Null, die Bedingung ist also für alle Vektoren  $\mathbf{x}$  erfüllt. Für alle anderen Drehmatrizen existiert die inverse Matrix zu  $(\mathbf{M}-\mathbf{I})$ , sodass als Bedingung verbleibt:  $\mathbf{0} = \mathbf{x}$ . Es wird nur der Punkt der im Ursprung und damit auf der Drehachse liegt auf sich selber abgebildet. Für die Spiegelebenen existiert die inverse Matrix zu  $(\mathbf{M}-\mathbf{I})$  nicht. Nach Auflösung des Gleichungssystems für jede der Komponenten des Vektors  $\mathbf{x}$  ergeben sich als Lösungsmenge die Punkte auf der Spiegelebene.

### Gleitspiegelebenen / Gleitspiegellinien

In zweidimensionalen Symmetriegruppen gibt es noch eine weitere Symmetrieeoperation, die es in den zweidimensionalen Punktgruppen nicht gibt. Das Muster in Abb. 10 des Artikels kann man erzeugen, indem jeder Punkt an der gestrichelten Linie gespiegelt wird und gleichzeitig parallel zur Linie verschoben wird. Eine derartige Symmetrieeoperation nennt man Gleitspiegellinie bzw. Gleitspiegelebene im dreidimensionalen. Das Muster ist nur dann nach dieser Symmetrieeoperation exakt mit sich selbst wieder identisch, wenn es unendlich lang ist. Jeder Kristall ist dagegen natürlich endlich groß. Bei der Beschreibung der Kristallsymmetrie ist diese Endlichkeit zu vernachlässigen. Nach einer zweiten Symmetrieeoperation landet man wieder bei einem Punkt, den man auch aus dem ersten durch reine Verschiebung des ganzen Musters erhalten kann. Bei einer

Gleitspiegellinie ist der Verschiebungsbetrag stets die Hälfte des zur Gleitspiegellinie parallelen Translationsvektors. Um beim Vorliegen einer Gleitspiegellinie ein zweidimensionales Gitter zu erzeugen, muss der zweite Basisvektor entweder senkrecht zur Gleitspiegellinie stehen, oder seine Komponente parallel der Gleitspiegellinie muss gleich dem Gleitbetrag der Gleitspiegellinie sein. In diesem letzteren Fall entsteht ein c-zentriertes Gitter. In Matrixform folgt die Abbildung nun durch die Kombination der Spiegelung und der Verschiebung. Sei die Gleitspiegellinie parallel der b-Achse gewählt, dann erhält man:

$$g_{0,y} : \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0.5 \end{pmatrix}$$

Entsprechend ist eine Gleitspiegellinie parallel der a-Achse:

$$g_{x,0} : \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die einfachste Kombination der Gleitspiegellinie mit einem zweidimensionalen Gitter ist in Abb. 7 des Artikels als ebene Gruppe pg dargestellt. Parallel zur Gleitspiegellinie und senkrecht zu ihr verlaufen die Basisvektoren des Gitters, welche ein beliebiges Achsenverhältnis haben können.

### Symmetrieoperationen in allgemeiner Lage

In einigen der ebenen Gruppen verlaufen Spiegellinien bzw. Gleitspiegellinien nicht durch den Ursprung sondern durch einen Punkt P. Um hier das Abbild eines Punktes auszurechnen, muss man zunächst den Punkt um den entgegengesetzten Vektor  $-\mathbf{p}$  verschieben, dann den resultierenden Zwischenpunkt mit der üblichen, durch den Ursprung verlaufenden Symmetrieoperation abbilden und zum Schluss wieder den Vektor  $\mathbf{p}$  hinzuaddieren:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}' &= \mathbf{M}(\mathbf{x} - \mathbf{p}) + \mathbf{p} \\ \mathbf{x}' &= \mathbf{M}\mathbf{x} + (\mathbf{I} - \mathbf{M})\mathbf{p} \end{aligned}$$

Hier ist  $\mathbf{M}$  die Spiegelmatrix,  $\mathbf{p}$  der Vektor vom Ursprung zur Spiegellinie und  $\mathbf{I}$  die Einheitsmatrix. Ein eventueller additiver Term  $\mathbf{t}$  einer Gleitspiegellinie ist von diesen Transformationen nicht betroffen und wird unabhängig von der Lage der Symmetrieoperation hinzuaddiert.

Analog zu der Diskussion der Invarianz einzelner Punkte bezüglich der Abbildung bei einer Symmetrieoperation, welche durch den Ursprung lief, muss man nun formulieren:

$$\begin{aligned} \mathbf{I}\mathbf{x} &= \mathbf{M}\mathbf{x} + (\mathbf{I} - \mathbf{M})\mathbf{p} \\ (\mathbf{I} - \mathbf{M})\mathbf{x} &= (\mathbf{I} - \mathbf{M})\mathbf{p} \end{aligned}$$

Für die Drehachsen 2,3,4 und 6 existiert die inverse Matrix zu  $(\mathbf{I} - \mathbf{M})$ , sodass als Bedingung für die Invarianz folgt  $\mathbf{x}=\mathbf{p}$ , ein Punkt also dann wieder auf sich selber abgebildet wird, wenn er genau auf der Drehachse liegt. Für die Spiegelebenen ergeben die Lösungen für die einzelnen Komponenten Geradengleichungen durch den Punkt P. In der ebenen Gruppe P2mg verläuft z.B. die Spiegelebene senkrecht zur a-Achse durch den Punkt  $(\frac{1}{4}, 0)$ , sodass als Matrixgleichung resultiert:

$$\begin{aligned}
 m_{1/4,y} \cdot \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \left( \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} 1/4 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Für die invarianten Punkte ergeben sich die Bedingungen:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 x &= -x + 1/2 \\
 y &= y + 0
 \end{aligned}$$

und damit  $x = 1/4$  und  $y$  beliebig.

In der ebenen Gruppe p2gg verläuft die erste der beiden Gleitspiegelebenen senkrecht zu  $a$  durch den Punkt  $(1/4, 0)$ . Entsprechend gilt nun die Matrizenform:

$$\begin{aligned}
 g_{1/4,y} \cdot \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \left( \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} 1/4 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Für die invarianten Punkte ergeben sich die Bedingungen:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \\
 x &= -x + 1/2 \\
 y &= y + 1/2 \\
 x &= 1/4 \\
 0 &= 1/2
 \end{aligned}$$

mit dem Widerspruch für die  $y$ -Komponente ist die Lösungsmenge der invarianten Punkte leer. Es gilt für alle Gleitspiegelebenen, dass es keine invarianten Punkte gibt.

Entsprechendes gilt natürlich auch für die einfache Translation,  $\mathbf{x}' = \mathbf{I}\mathbf{x} + \mathbf{t}$ . Auch hier ist die Lösungsmenge für  $\mathbf{x}' = \mathbf{x}$  leer. Etwas anders sieht es bei den Drehachsen aus. Führt man zunächst eine Drehung um den Ursprung um  $180^\circ$  und dann eine Translation um einen Gittervektor aus, erhält man beispielsweise mit der Translation parallel  $a$ :

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

Exakt dieselbe Gleichung erhält man aber auch für eine 2-zählige Drehung im Punkt  $(1/2, 0)$ ! Damit folgt die im Artikel aufgeführte Regel, dass zwischen zwei translationsäquivalenten 2-zähligen Drehachsen stets mittig eine weitere 2-zählige Drehachse steht. Entsprechende Gleichungen erhält man für die Hintereinanderausführung der anderen Drehachsen mit Translationen. Durch systematische Kombination erhält man auf diese Weise alle in Abb. 7 und 8 des Artikels eingezeichneten sekundären Drehachsen, welche nicht im Ursprung stehen. Entsprechende Herleitungen gelten für die sekundären Spiegelebenen.

## Punktlagen

Eine systematische Tabelle aller Punkte innerhalb einer ebenen Gruppe, welche bezüglich einer oder mehrerer Symmetrieoperationen invariant sind, wird zeigen, dass es davon meist mehrere verschiedene Typen gibt. Liegt ein Atom derart in der Elementarzelle, dass es von keiner der Symmetrieoperationen auf sich selber abgebildet wird, so spricht man von einem Atom in allgemeiner Lage. Liegt in der Kristallstruktur ein Atom dagegen invariant auf einer Symmetrieoperation so spricht man von einer speziellen Lage. Liegt das Atom z.B. auf einer Spiegelebene, so enthält auch die Umgebung um dieses Atom diese Spiegelebene als lokale Symmetrie. Ein Molekül, welches mit einem Atom auf der Spiegelebene liegt, muss dementsprechend diese Spiegelebene aufweisen. Liegt ein Atom dagegen im Kreuzungspunkt zweier Spiegelebenen, so muss auch die Umgebung diese Symmetrie widerspiegeln. In der ebenen Gruppe  $p4mm$  gibt es beispielsweise die folgenden verschiedenen Positionen:

Multiplizität	Symmetrie	Koordinaten
1	$4mm$	$(0,0)$
1	$4mm$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
2	$2mm$	$(\frac{1}{2}, 0); (0, \frac{1}{2})$
4	$m$	$(x, 0); (-x, 0); (0,x); (0,-x)$
4	$m$	$(x, \frac{1}{2}); (-x, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2},x); (\frac{1}{2},-x)$
4	$m$	$(x, x); (-x, -x); (-x,x); (x,-x)$
8	1	$(x,y); (-x,-y); (-y,x); (y,-x); (-x,y); (x,-y); (y,x); (-y,-x)$

In dieser Tabelle bezeichnet Multiplizität die Zahl der symmetrisch äquivalenten Atome von diesem Typ in einer Elementarzelle, Symmetrie beschreibt die Symmetrieoperationen, welche das betreffende Atom auf sich selber abbilden. Liegt in dem Kristall also ein Atom auf der Position  $(x,0)$  mit beliebigem, durch die Symmetrie nicht weiter eingeschränktem Wert von  $x$ , so gibt es in diesem Kristall vier Atome dieses Typs. Für  $x=0,123$  wären das die Atompositionen  $(0,123, 0)$ ;  $(-0.123, 0)$ ;  $(0, 0.123)$  und  $(0, -0.123)$ .

Jede ebene Gruppe enthält mindestens die allgemeine Lage. Bis auf die ebenen Gruppe  $p1$  und  $pg$  kommen dazu weitere spezielle Lagen hinzu, deren Anzahl für jede ebene Gruppe unterschiedlich ist. Alle Lagen, die mindestens einen Freiheitsgrad der Position haben können in einer Kristallstruktur mehrere verschiedene Atome liegen. In der ebenen Gruppe  $p4mm$  kann es beispielsweise verschiedene Atome mit allgemeiner Lage  $(x,y)$  geben, z.b. ein Si Atom mit den Koordinaten  $(0,1, 0,245)$  und ein Sauerstoffatom mit den Koordinaten  $(0,31, 0,457)$ . Ebenso kann es auf der oben bereits aufgeführten speziellen Position  $(x, 0)$  noch ein weiteres Atom mit einem anderen Wert von  $x$  geben. Auf der speziellen Lage  $(\frac{1}{2}, 0)$  kann dagegen natürlich nur ein Atom liegen. Ein weiteres, mit diesem Atom identisches Atom liegt dann auf der Position  $(0, \frac{1}{2})$ .

Diese verschiedenen Punktlagen lassen sich systematisch erarbeiten, indem man mit einem Atom beginnt, welches von keiner der Symmetrieoperationen der ebenen Gruppe auf sich selber abgebildet wird. Danach platziert man das Atom auf einer der Drehachsen innerhalb der Elementarzelle, auf einer der Spiegelebenen und schließlich auf allen Schnittpunkten der Spiegelebenen mit weiteren Spiegelebenen und/oder Drehachsen. Da Gleitspiegellinien keine invarianten Punkte besitzen, brauchen diese nicht in die Suche nach den Punktlagen einbezogen zu werden. Gerade für diese Suche ist der Escher Web Sketch (Schoeni et al.) ein hervorragendes Werkzeug.

## Literatur

- M.B. Boisen & G.V. Gibbs: *Mathematical Crystallography*, Reviews in Mineralogy Vol. 15, Mineralogical Society of America 1985.
- W. Borchardt-Ott: *Kristallographie*, Springer 2002.
- R. Borchardt & S. Turowski: *Symmetriehre in der Kristallographie*, Oldenbourg, 1999.
- C. Giacovazzo, H.L. Monaco, C. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli & M. Catti: *Fundamentals of Crystallography*, Oxford Science Publications 1995.
- T. Hahn (Herausgeber): *International Tables for Crystallography; Vol A Space-Group Symmetrie*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1993.
- T. Hahn (Herausgeber): *International Tables for Crystallography; Brief Teaching Edition of Vol A Space-Group Symmetrie*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1993.
- W.Kleber, H.-J. Bausch & J. Bohm: *Einführung in die Kristallographie*, Oldenbourg 2003.
- J. Köhler, R. Höwermann, H. Krämer: *Vektorielle Abbildungsgeometrie in Matrizendarstellung*, Diesterweg Salle, 1974.
- R.B. Neder: Die Symmetrie von Kristallen, *Der Mathematik-Unterricht*, Jahrgang 52, Heft 3, p48, 2006.
- P. Ramdohr & H. Strunz: *Klockmanns Lehrbuch der Mineralogie*, Enke, 1978.
- D.E. Sands: *Vectors and Tensors in Crystallography*, Addison-Wesley, 1982.
- N. Schoeni, W. Hardaker & G. Chapuis: *Escher Web Sketch*, <http://escher.epfl.ch/escher>
- D. Schwarzenbach: *Kristallographie*, Springer, 2001.