



Weihnachts-Sonderstunde



Fries-Gruppen einseitiger Bänder



Anorganische Strukturchemie, 18.12.2020



Einleitung

Punktsymmetrien und -gruppen

Translationen und Bandgruppen

... 1D, 2D, 3D ... und noch lange kein Ende ...

Sinn und Zweck von (Punkt)-Symmetrie ... nicht nur zu Weihnachten

Was ist Symmetrie? \mapsto Definitionen

mathematisch

Symmetrie ist die Invarianz eines Systems gegenüber Transformationen.

praktisch

Symmetrie ist die Eigenschaft einer geometrischen Figur/eines Objektes, in verschiedenen Positionen gleich auszusehen.



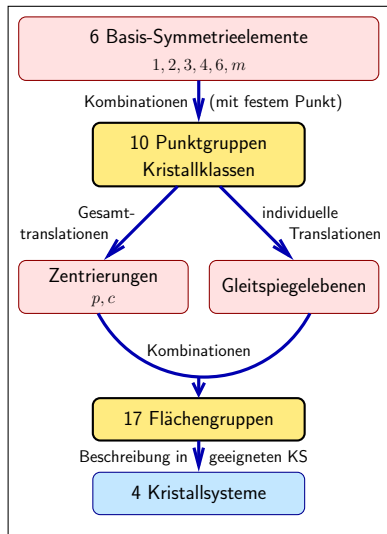
Alexei V. Shubnikov
(1887-1970)



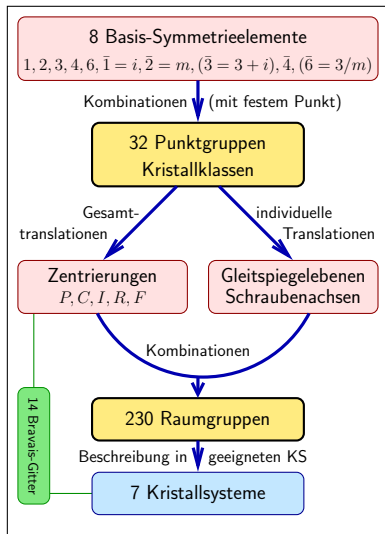
Evgraf S. Fedorov
(1853-1919)

- **Punkt-Symmetrie** (mindestens ein Punkt bleibt fest)
 - Drehungen, Spiegelung, Punktspiegelung (Inversion)
 - Kombinationen davon
- **Translations-Symmetrie**
 - kein Punkt bleibt fest
 - Vektor(en) beschreiben Verschiebungen in 1/2/3-Dimensionen
 - 1D: Bandgruppen (z.B. Friese, 1- oder 2-seitige Bänder)
 - 2D: periodische Muster (z.B. Tapeten, Stoffe, Fliesen usw.)
 - 3D: kristalline Festkörper

Erinnerung: kristallographische Symmetrien (2D und 3D)



2-dim. Translation (Flächengruppen)



3-dim. Translation (Raumgruppen)

Einleitung

Punktsymmetrien und -gruppen

Translationen und Bandgruppen

... 1D, 2D, 3D ... und noch lange kein Ende ...

Eine **Symmetrie(Deck)-Operation** (SO) ist eine Bewegung eines Körpers im Raum, die ihn in eine von der Ausgangslage ununterscheidbare Position bringt.

Eine **Symmetrie(Deck)-Operation** (SO) ist eine Bewegung eines Körpers im Raum, die ihn in eine von der Ausgangslage ununterscheidbare Position bringt.

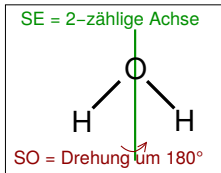
Alle Punkte, die bei dieser Bewegung unverändert bleiben, bilden das zugehörige **Symmetrie-Element** (SE).

Symmetrie-Elemente/Operationen: Definitionen

Eine **Symmetrie(Deck)-Operation** (SO) ist eine Bewegung eines Körpers im Raum, die ihn in eine von der Ausgangslage ununterscheidbare Position bringt.

Alle Punkte, die bei dieser Bewegung unverändert bleiben, bilden das zugehörige **Symmetrie-Element** (SE).

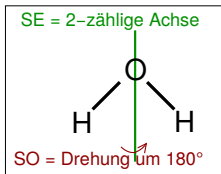
Beispiele:



Symmetrie-Elemente/Operationen: Definitionen

Eine **Symmetrie(Deck)-Operation** (SO) ist eine Bewegung eines Körpers im Raum, die ihn in eine von der Ausgangslage ununterscheidbare Position bringt.

Alle Punkte, die bei dieser Bewegung unverändert bleiben, bilden das zugehörige **Symmetrie-Element** (SE).



Beispiele:

!! ein Symmetrie-Element kann mehrere Symmetrie-Operationen bedingen !!

Beispiel: 3-zählige Drehachse (1 SE) = Drehung um 120° und 240° (2 SO)

Schönflies (z.B. C_{2v})

- ältere Bezeichnung
- in Spektroskopie/Molekülchemie weit verbreitet
- in Kristallographie (bei Translationssymmetrie) ungeeignet
- wenig systematisch



Arthur Moritz Schönflies (1853-1928)¹

Hermann-Mauguin (z.B. $2mm$)

- in der Kristallographie gebräuchlich
- einigermaßen systematisch
- Koordinatensystem (Blickrichtungen) erforderlich



Carl Hermann
(1898-1961)



Charles Victor Mauguin
(1878-1958)

¹ www.maa.org

generelle Einteilung

- Basis-SO/SE
 - Drehung/Drehachsen $n \mapsto 2D: 1, 2, 3, 4, 6$
 - Spiegelung/Spiegelebene m
 - Inversion, Punktspiegelung/Inversionszentrum \mapsto entfällt bei 1D und 2D
- zusammengesetzte SO:
 - Drehspiegelung bzw. Drehinversion \mapsto entfällt bei 1D und 2D
Schönflies H.-M.

Klassifizierung von Punkt-Symmetrie-Operationen

generelle Einteilung

- Basis-SO/SE
 - Drehung/Drehachsen $n \mapsto 2D$: 1, 2, 3, 4, 6
 - Spiegelung/Spiegelebene m
 - Inversion, Punktspiegelung/Inversionszentrum \mapsto entfällt bei 1D und 2D
- zusammengesetzte SO:
 - $\underbrace{\text{Drehspiegelung}}_{\text{Schönflies}}$ bzw. $\underbrace{\text{Drehinversion}}_{\text{H.-M.}} \mapsto$ entfällt bei 1D und 2D

Einteilung nach Chiralität

- eigentliche SO (1. Art): Drehungen \mapsto Chiralität bleibt erhalten
- uneigentliche SO (2. Art): Spiegelung, Inversion, Drehinversion/Drehspiegelung \mapsto Chiralität ändert sich

Klassifizierung von Punkt-Symmetrie-Operationen

generelle Einteilung

- Basis-SO/SE
 - Drehung/Drehachsen $n \mapsto 2D$: 1, 2, 3, 4, 6
 - Spiegelung/Spiegelebene m
 - Inversion, Punktspiegelung/Inversionszentrum \mapsto entfällt bei 1D und 2D
- zusammengesetzte SO:
 - Drehspiegelung bzw. Drehinversion \mapsto entfällt bei 1D und 2D
Schönflies H.-M.

Einteilung nach Chiralität

- eigentliche SO (1. Art): Drehungen \mapsto Chiralität bleibt erhalten
- uneigentliche SO (2. Art): Spiegelung, Inversion, Drehinversion/Drehspiegelung \mapsto Chiralität ändert sich

\mapsto Chiralität = Abwesenheit von Symmetrieelementen 2. Art

Punktgruppe = Sammlung aller Symmetrie-Operationen (Isometrien) eines Objektes (z.B. eines Moleküls)

¹ bzw. Multiplikation der $N \times N$ -Transformationsmatrizen

Punktgruppe = Sammlung aller Symmetrie-Operationen (Isometrien) eines Objektes (z.B. eines Moleküls)

- **Punkt**: mindestens ein Punkt bleibt fest
- **Gruppe**: Die Symmetrieoperationen erfüllen bzgl. der Verknüpfung *Hintereinanderausführen* (\circ)¹ die Bedingungen einer mathematischen Gruppe:

① Eine Gruppe ist eine Menge \mathfrak{G} von Elementen g_i , zwischen denen eine Verknüpfung besteht, so dass jedem geordneten Paar g_i, g_j genau ein Element $g_k \in \mathfrak{G}$ zugeordnet ist. (**Abgeschlossenheit**)

② Die Verknüpfung ist **assoziativ**, es gilt

$$(g_i \circ g_j) \circ g_k = g_i \circ (g_j \circ g_k)$$

③ Es gibt ein **Neutralement** e für das gilt:

$$e \circ g_i = g_i \circ e = g_i \text{ für alle } g_i \in \mathfrak{G}$$

④ Für alle Elemente g gibt es ein **Inverses Element** g^{-1} für das gilt:

$$g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$$

¹ bzw. Multiplikation der $N \times N$ -Transformationsmatrizen

Punktgruppe = Sammlung aller Symmetrie-Operationen (Isometrien) eines Objektes (z.B. eines Moleküls)

- **Punkt**: mindestens ein Punkt bleibt fest
- **Gruppe**: Die Symmetrieoperationen erfüllen bzgl. der Verknüpfung *Hintereinanderausführen* (\circ)¹ die Bedingungen einer mathematischen Gruppe:

① Eine Gruppe ist eine Menge \mathfrak{G} von Elementen g_i , zwischen denen eine Verknüpfung besteht, so dass jedem geordneten Paar g_i, g_j genau ein Element $g_k \in \mathfrak{G}$ zugeordnet ist. (**Abgeschlossenheit**)

② Die Verknüpfung ist **assoziativ**, es gilt

$$(g_i \circ g_j) \circ g_k = g_i \circ (g_j \circ g_k)$$

③ Es gibt ein **Neutralement** e für das gilt:

$$e \circ g_i = g_i \circ e = g_i \text{ für alle } g_i \in \mathfrak{G}$$

④ Für alle Elemente g gibt es ein **Inverses Element** g^{-1} für das gilt:

$$g \circ g^{-1} = g^{-1} \circ g = e$$

Kristallklassen: kristallographische Punktgruppen (nur Drehachsen 1, 2, 3, 4, 6)

Laueklassen: Kristallklassen mit Inversionszentrum

¹ bzw. Multiplikation der $N \times N$ -Transformationsmatrizen

Übersicht 2D-Punktgruppen

- mit Translation vereinbare SE \mapsto 1, 2, 3, 4, 6 und m
- Hauptachse senkrecht zur Ebene (z ist 3. Dimension)
- Bezeichnungsrichtungen: z , x , d ($z \perp$ Ebene)
- Kombination zu 10 Punktgruppen, nach 4 Koordinatensystemen (KS):

Nr.	Hermann-Mauguin Symbol	Schönflies-Symbol	Koordinatensystem	Nr.	Hermann-Mauguin Symbol	Schönflies-Symbol	Koordinatensystem
1	1	C_1	schiefwinklig ($a \neq b$; γ beliebig)	5	411	C_4	quadratisch ($a = b$; $\gamma = 90^\circ$)
2	2	C_2		6	4mm	C_{4v}	
3	1m1	C_m	rechtwinklig ($a \neq b$; $\gamma = 90^\circ$)	7	311	C_3	hexagonal $a = b$; $\gamma = 120^\circ$
4	2mm	C_{2v}		8	3m1	C_{3v}	
				9	611	C_6	
				10	6mm	C_{6v}	

- 1D-Punktgruppen sind Untergruppen davon \Downarrow

1D-/Fries-/Band-Gruppen: ? mögliche Punktsymmetrien/Isometrien ?

- Punkt-SE/SO/Isometrien, die mit 1-dimensionaler Translation verträglich sind
 - Drehungen (Drehachsen) ?
 - Spiegelungen (Spiegelebenen) ?
 - Inversion/Punktspiegelung ?
 - zusammengesetzte Punktsymmetrien (Drehinversion/Drehspiegelung) ?
- abhängig von der sog. 'Blickrichtung'

1D-/Fries-/Band-Gruppen: ? Punktsymmetrien/Isometrien ?



SE/SO	\vec{a}	\vec{b}	\vec{c}
Drehachsen n	1	1	1,2 -
Spiegelebene m (\perp zur Blickrichtung)	m'	m''	—
Inversion	—	—	—
zusammengesetzte SO	—	—	—

→ Matrizen der erlaubten Isometrien W

$$1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad 2 \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

① $\det(W)=1$ 1 ②

eigentliche S.O.

$$m' \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad m'' \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

③ ④

-1 -1

uneigentliche S.O.

1D-/Fries-/Band-Gruppen: ? Punktgruppen ?

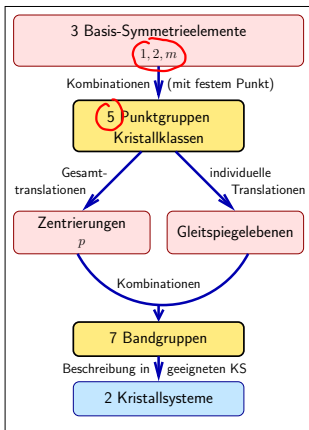
- mögliche Symmetrieelemente (SO/Isometrien)

SE/SO	\vec{a}	\vec{b}	\vec{c}
Drehachsen n	1	1	1, 2
Spiegelebene m	m	m	-

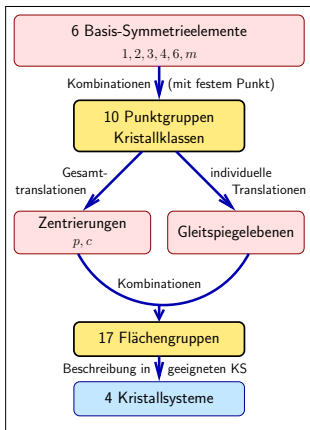
- \mapsto mögliche Kombinationen \mapsto Punktgruppen (für Bänder erlaubte)

	Gruppe (H.-M.-Bezeichnung) <u>Bsp.</u>	Ordnung	Isometrien
①	111 e	1	①
②	112 N	2	①, ②
③	$m11$ $\begin{array}{c} \vdots \\ N \\ \vdots \end{array}$	2	①, ③
④	$1m1$ $\begin{array}{c} \text{---} E \text{---} \end{array}$	2	①, ④
⑤	$mm2$ H	4	①, ②, ③, ④

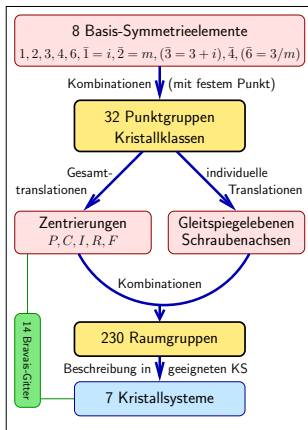
Kristallographische Symmetrien (1D, 2D und 3D)



1-dim. Translation (Bandgruppen)



2-dim. Translation (Flächengruppen)



3-dim. Translation (Raumgruppen)

Einleitung

Punktsymmetrien und -gruppen

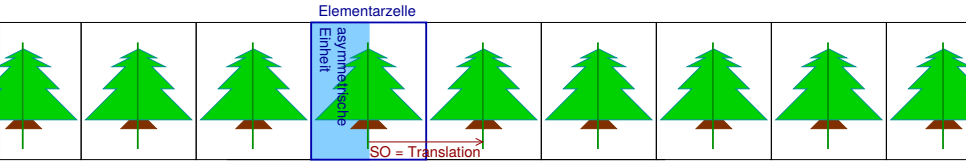
Translationen und Bandgruppen

... 1D, 2D, 3D ... und noch lange kein Ende ...

1D: \mapsto Bänder

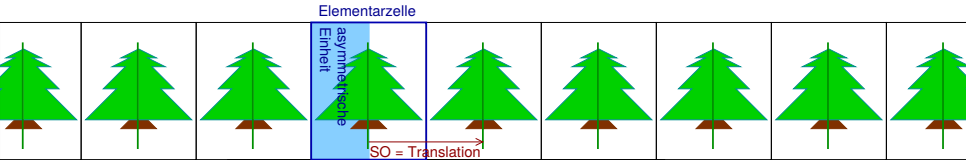
Fortsetzung.....

1D: \mapsto Bänder



Translationssymmetrie

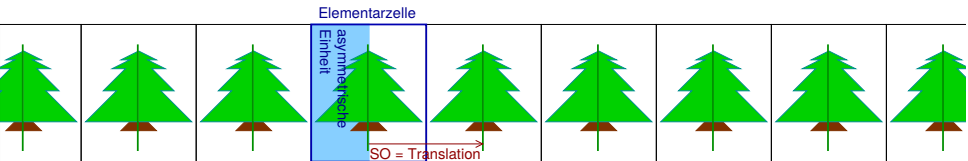
1D: \mapsto Bänder



2D: \mapsto Ornamente, Flächenmuster (z.B. Geschenkpapier)

Translationssymmetrie

1D: \mapsto Bänder



2D: \mapsto Ornamente, Flächenmuster (z.B. Geschenkpapier)

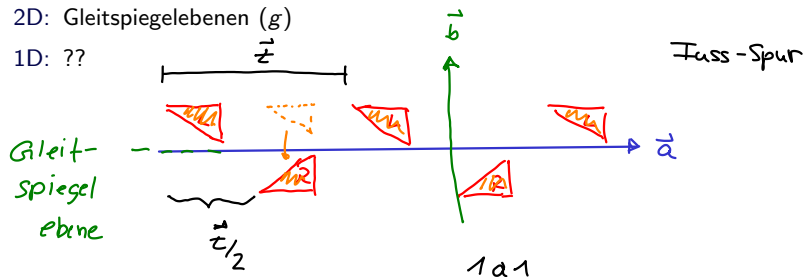
3D: \mapsto z.B. Kristallstrukturen

kombinierte Symmetrioperationen

3D: Gleitspiegelebenen (z.B. a , n , d), Schraubenachsen (z.B. 4_1 , 6_3)

2D: Gleitspiegelebenen (g)

1D: ??



1D-/Fries-/Band-Gruppen: Gruppen und Kristallsysteme

- mögliche Symmetrieelemente

SE/SO	\vec{a}	\vec{b}	\vec{c}
Drehachsen n	1	1	1, 2
Spiegelebene m	m	m	-
Gleitspiegelebene	-	a	-

- \mapsto + 1D-Translation \mapsto Bandgruppen:

\boxed{P} Gruppe (H.-M.-Bezeichnung)

- 1 $p111$
- 2 $p112$
- 3 $pm11$
- 4 $p1m1$
- 5 $pmm2$
- 6 $p1a1$
- 7 $pm a2$

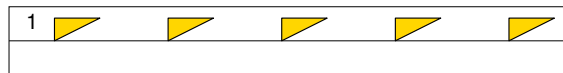
Beispiel

$\dots e e e e e \dots$
 $\dots n n n n n n n n \dots$
 $\dots w w w w w \dots$
 $\dots e e e e e \dots$
 $\dots h h h h h h h \dots$

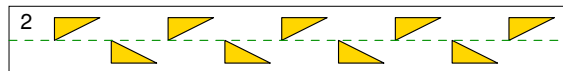
Fussspur

$\vee \vee \vee \vee \vee$

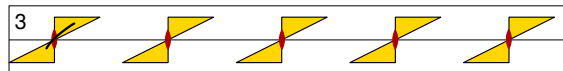
Beispiele mit Symmetriegerüst und 'chiralem' Motiv



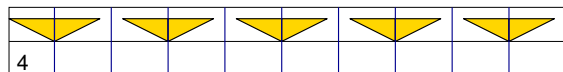
p111



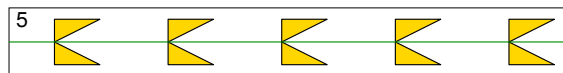
p1a1



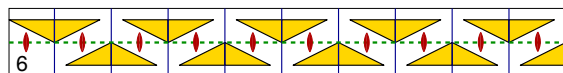
p112



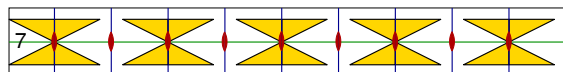
pm11



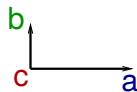
p1m1



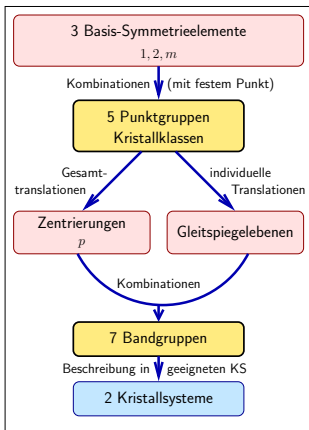
pma2



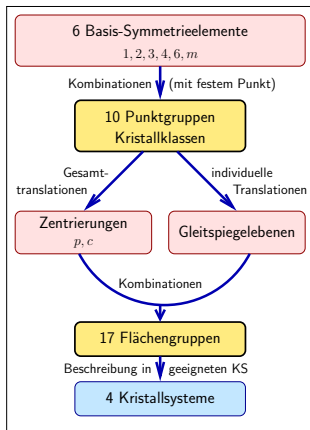
pmm2



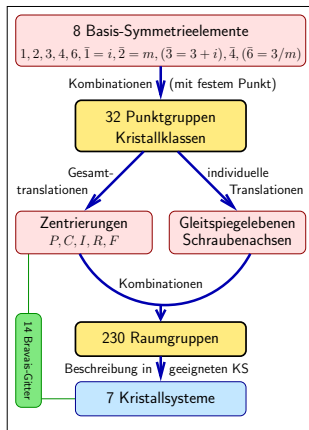
Kristallographische Symmetrien (1D, 2D und 3D)



1-dim. Translation (Bandgruppen)



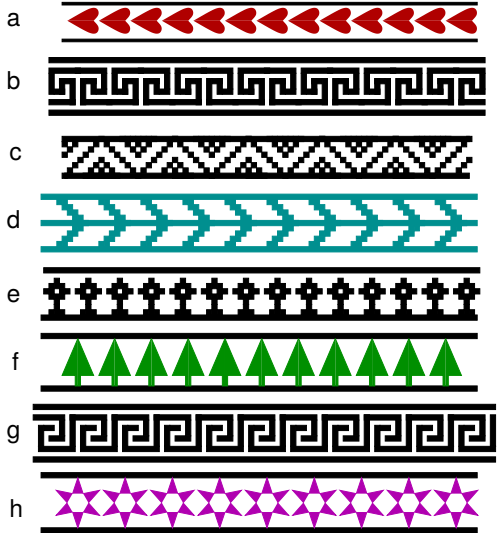
2-dim. Translation (Flächengruppen)



3-dim. Translation (Raumgruppen)

Übung

- Welche Bandgruppen haben die rechts gezeigten einseitigen Bänder?
- Zeichnen Sie die Elementarzellen und die asymmetrischen Einheiten ein.
- Zeichnen Sie die Symmetrieelemente ein. Welche Punktgruppen treten auf?



Einleitung

Punktsymmetrien und -gruppen

Translationen und Bandgruppen

... 1D, 2D, 3D ... und noch lange kein Ende ...

- Schwarz/Weiss-Gruppen (Shubnikov-Gruppen, magnetische Raumgruppen)
- Farbgruppen
- Symmetrie von höherdimensionalen Räumen
↳ Superraumgruppen (modulierte Strukturen, Quasikristalle)
- ... jenseits der euklidischen Geometrie ... ↳ Möbius-Transformation
- ... jenseits der Geometrie/Mathematik ...

- Istvan Hargittai, Magdolna Hargittai: Symmetry through the Eyes of a Chemist, Wiley VCH (1986).
- J. L. Locher et al.: Die Welten des M. C. Escher, Meulenhoff International Amsterdam (1971).
- Douglas R. Hofstadter: Gödel. Escher. Bach, DTV (1992).
- Java-Tool 'Escher Sketch'
- J. S. Bach: Krebs-Kanon auf dem Möbiusband

... und nun doch zum Ende ...

Alles Gute, vor allem Gesundheit,
friedliche und entspannende Feiertage,
einen guten Start ins neue Jahr 2021 !!