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? ↦ 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)

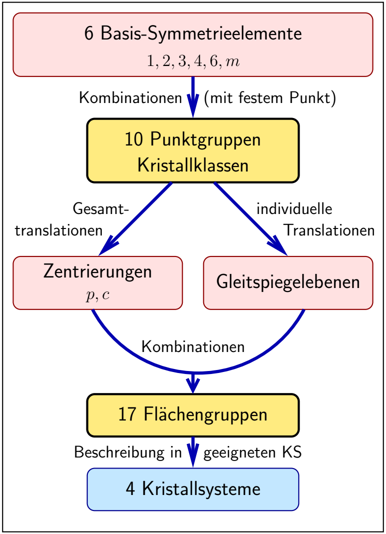
Evgraf S. Fedorov

(1853-1919)

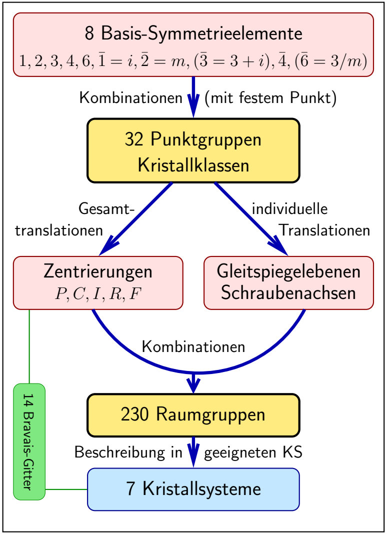
Klassifizierung von Symmetrie

- 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)

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.

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.

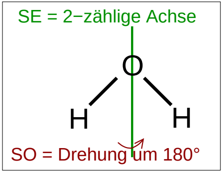
Alle Punkte, die bei dieser Bewegung unverändert bleiben, bilden das zugehörige Symmetrie-Element (SE).

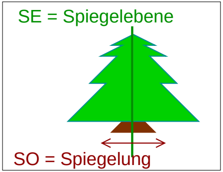
Symmetrie-Elemente/Operationen: Definitionen

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:

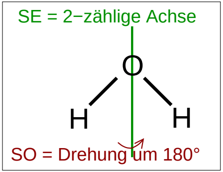


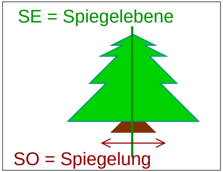


Symmetrie-Elemente/Operationen: Definitionen

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)

Bezeichnungen von Punktsymmetrien (SO und Gruppen)

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

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

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:
  - $\underbrace{\text{Drehspiegelung}}_{\text{Schönflies}}$ 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

$\mapsto$ Chiralität = Abwesenheit von Symmetrieelementen 2. Art

Punktgruppen – Kristallklassen

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

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

Punktgruppen – Kristallklassen

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 Neutralelement 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

Punktgruppen – Kristallklassen

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 Neutralelement 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	Koordinaten-System	Nr.	Hermann-Mauguin Symbol	Schönflies-Symbol	Koordinaten-System
1	1	C_1	schiefwinklig	5	411	C_4	quadratisch
2	2	C_2	($a \neq b$;	6	$4mm$	C_{4v}	($a = b; \gamma = 90°$)
			γ beliebig)	7	311	C_3	hexagonal
3	$1m1$	C_m	rechtwinklig	8	$3m1$	C_{3v}	$a = b$;
4	$2mm$	C_{2v}	($a \neq b$;	9	611	C_6	$\gamma = 120°$
			$\gamma = 90°$)	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			
Spiegelebene m (⊥ zur Blickrichtung)			
Inversion			
zusammengesetzte SO			

$\mapsto$ Matrizen der erlaubten Isometrien **W**

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

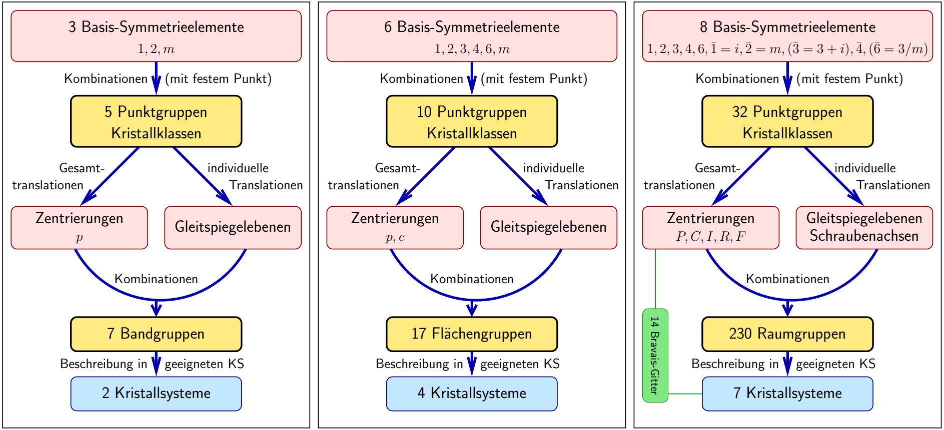
- mögliche Symmetrieelemente (SO/Isometrien)

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)	Ordnung	Isometrien
❶			
❷			
❸			
❹			
❺			

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



1-dim. Translation (Bandgruppen)

2-dim. Translation (Flächengruppen)

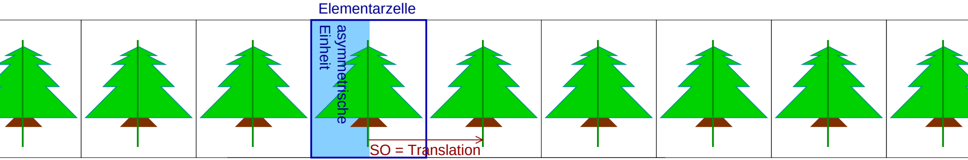
3-dim. Translation (Raumgruppen)

Translationssymmetrie

1D: $\mapsto$ Bänder

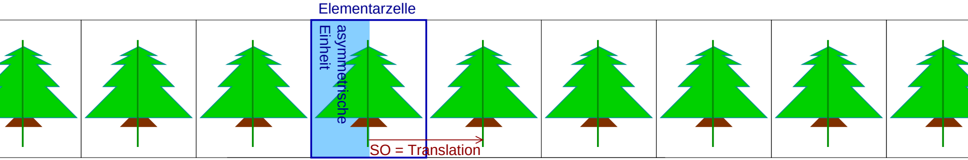
Translationssymmetrie

1D: $\mapsto$ Bänder



Translationssymmetrie

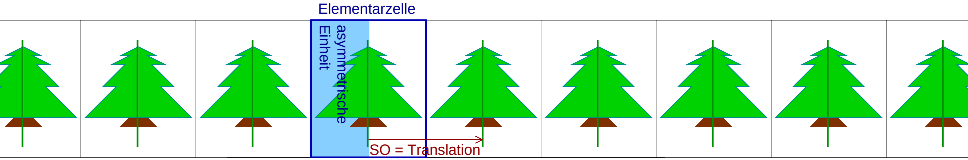
1D: $\mapsto$ Bänder



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

Translationssymmetrie

1D: $\mapsto$ Bänder



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

3D: $\mapsto$ z.B. Kristallstrukturen

kombinierte Symmetrieoperationen

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

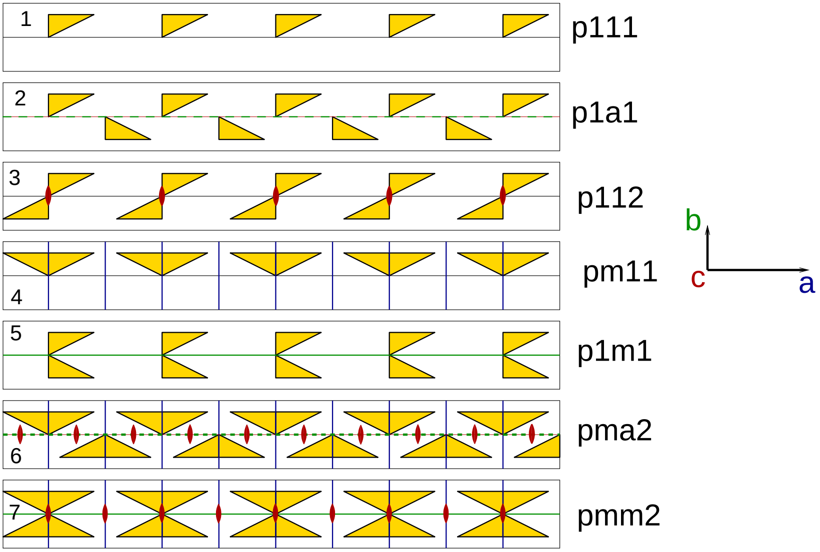
SE/SO	$\vec{a}$	$\vec{b}$	$\vec{c}$
Drehachsen n	1	1	1, 2
Spiegelebene m	m	m	-
Gleitspiegelebene	-	a	-

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

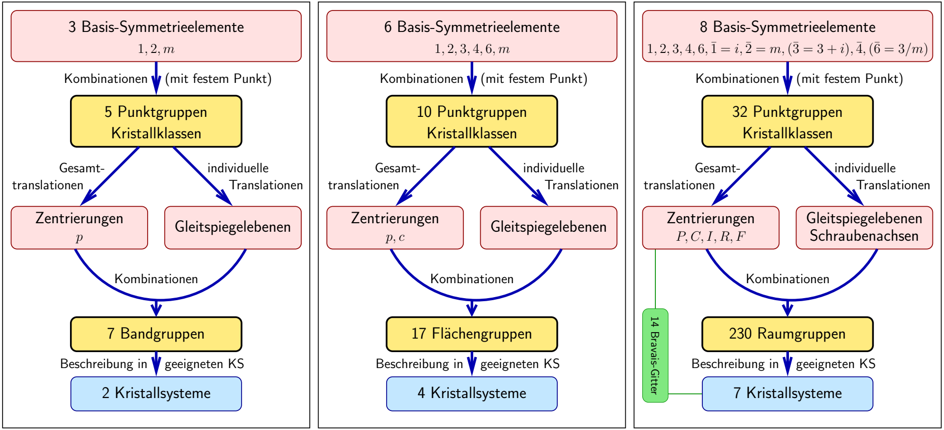
Gruppe (H.-M.-Bezeichnung) Beispiel

1.
2.
3.
4.
5.
6.
7.

Beispiele mit Symmetriegerüst und 'chiralem' Motiv



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



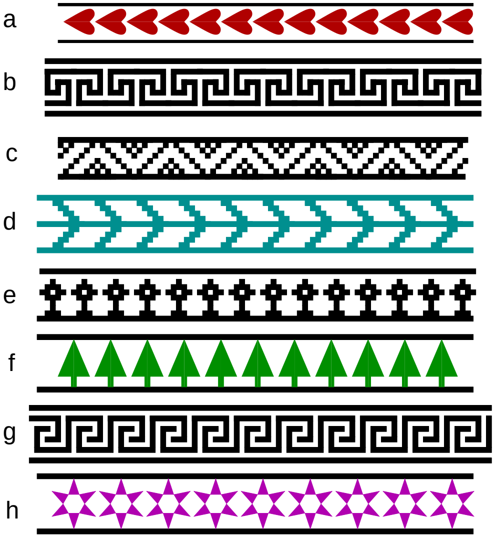
1-dim. Translation (Bandgruppen)

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 ...

Symmetrie ... ohne Ende ...

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

Literatur und Links

- 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 !!