



## Symmetry Relationships between Crystal Structures

Symmetrieverhältnisse zwischen Kristallstrukturen bilden ein tragendes Element zum Verständnis von Phasenübergängen und beim Vergleich von Festkörpern. Strukturbestimmungen werden immer schneller durchgeführt, und die Information in den betreffenden Datenbanken wächst exponentiell, aber das Wissen um Symmetriezusammenhänge unter den zahlreichen Wissenschaftlern, die mit der Auswertung struktureller Befunde befasst sind, scheint gelegentlich dazu eher abzunehmen. Die International Tables for Crystallography und der Bilbao Crystallographic Server bieten im Prinzip sowohl im Internet als auch in Papierform das vollständige Instrumentarium für anwendungsorientierte Chemiker oder Materialwissenschaftler. Zum Einstieg bedürfen jedoch mindestens Interessenten ohne Kenntnis elementarer kristallographischer Zusammenhänge eines eigens darauf ausgerichteten Kurses oder eines Übungsbuches. Entsprechende Kurse werden seit Jahrzehnten angeboten, richten sich aber naturgemäß an einen vergleichsweise kleinen und motivierten Teilnehmerkreis; es wurde höchste Zeit für ein Buch!

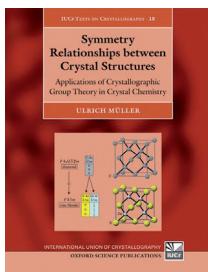
Hinter diesem Buch steckt unter mindestens zwei Gesichtspunkten mehr, als der Titel erwarten lässt. Erstens behandelt es nicht nur Beziehungen zwischen Kristallstrukturen, sondern vermittelt dem Leser das ganze Werkzeug der Gruppentheorie und Symmetrielehre, das bereits für das Verständnis und die sachgerechte Beschreibung einer einzelnen Struktur benötigt wird. Diese kristallographischen und mathematischen Grundlagen werden in neun Kapiteln des ersten Teils gelegt. Zweitens ist das Buch auch ein didaktisches Meisterstück: Beim oberflächlichen Blick auf das Inhaltsverzeichnis hatte ich die Befürchtung, der Leser müsse vor seiner ersten Begegnung mit einem Bärnighausen-Stammbaum die Hälfte des Buches mit der Wiederholung von Grundlagen durcharbeiten. Glücklicherweise lag ich ganz verkehrt: Schon auf Seite 4 werden erste Appetithappen gereicht! Von Anfang an kann der Leser zuversichtlich sein, dass sein Engagement für grundlegendes Verständnis belohnt wird. Bei wesentlichen, aber abstrakten Sachverhalten hilft der Autor mit Beispielen; etwa greift er bei der Nebenklassenzerlegung auf die zuvor eingeführten Symmetrieelemente des Quadrates zurück und liefert eine geometrische Analogie für die Beziehung zwischen Untergruppe und Faktorgruppe. Normalisatoren werden nicht nur definiert, sondern ihre (recht kleine) Elementarzelle wird ab-

gebildet, und die Frage der Isotypie wird an einigen Verbindungen diskutiert.

Mit Beginn des zweiten Teils liegen 130 Seiten Basiswissen hinter dem Leser, ohne dass die geringste Langeweile aufkommen kann. In hervorragender Übereinstimmung mit dem einleitenden ersten Teil wird auf Seite 135 erneut ein Bärnighausen-Stammbaum vorgestellt, diesmal jedoch unter Bezug auf die zuvor vermittelten Grundlagen. Auch hier in der Mitte des Buches spürt der Leser deutlich, dass er auf dem richtigen Weg ist. Im folgenden Kapitel 11 werden Beispiele für die verschiedenen Arten von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen vorgestellt und in Bärnighausen-Stammbäume umgesetzt. Nach diesen Positivbeispielen werden in Kapitel 12 mögliche Fehlerquellen angesprochen. Die nächsten beiden Kapitel gelten zwei kristallchemischen Modellen: Symmetrierniedrigung kann erfolgen, indem Zwischen-gitterplätze in dichten Packungen besetzt werden oder indem die molekularen Bausteine eine Punktgruppe niedrigerer Symmetrie aufweisen. Nach dem Vergleich zwischen chemisch verschiedenen Strukturen werden in den Kapiteln 15 und 16 die Beziehungen zwischen unterschiedlichen Phasen der gleichen Verbindung angesprochen; dabei werden weitergehende Gesichtspunkte der Landau-Theorie in den Anhang B verschoben. Über den Themenschwerpunkt des Titels hinaus gehen die nächsten Kapitel, in denen die Gruppentheorie als Werkzeug zur Bestimmung der richtigen Raumgruppe und zur Ermittlung denkbbarer, aber experimentell noch nicht gefundener Strukturen vorgestellt wird. Das Buch schließt mit einem kurzen geschichtlichen Überblick.

Wiederholt und zu Recht verweist der Autor auf H. Bärnighausen und H. Wondratschek als die Väter des Ansatzes, aber auch er selbst war gleich auf mehreren Ebenen beteiligt: Als Autor hat er relevante primärwissenschaftliche Beiträge zur Thematik geliefert, als Herausgeber zeichnet er mitverantwortlich für den Band A1 der International Tables, und er hat regelmäßig in Kursen für Fortgeschrittene unterrichtet. Erwartungsgemäß ist das Buch derart makellos, dass es aktiver Suche bedürfte, um vereinzelte Druckfehler zu finden. Die deutsche Ausgabe ist 2012 in der Reihe „Studienbücher Chemie“ erschienen; das unterstreicht den didaktischen Anspruch des Buches. Übungsaufgaben am jeweiligen Kapitelende legen nahe, das Buch unter Verwendung von Papier und Bleistift durchzuarbeiten und stellen sicher, dass der Stoff nicht nur gelesen, sondern auch verstanden wird. Die Aufgaben basieren häufig auf echten kristallchemischen Fragestellungen und beziehen sich bisweilen sogar auf bereits gedruckten „Unsinn“.

Das Buch von Ulrich Müller nimmt auf die International Tables Bezug und versetzt den Leser



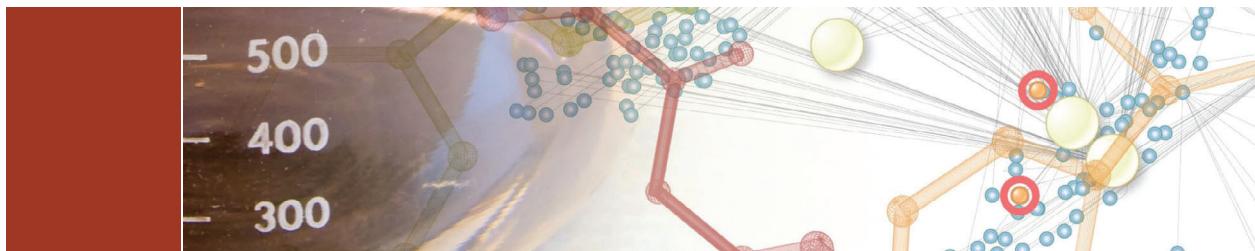
**Symmetry Relationships between Crystal Structures**  
Applications of Crystallographic Group Theory in Crystal Chemistry. Von Ulrich Müller. Oxford University Press, Oxford, 2013. 352 S., geb., 49,95 £.—ISBN 978-0199669950

in den Stand, sie effizient zu nutzen. Für an Festkörpern interessierte Strukturchemiker gehört *Symmetry Relationships between Crystal Structures* zur Pflichtlektüre; auch Leser mit einigen Vorkenntnissen können noch viel dazulernen. Nicht zuletzt dank seines klaren Aufbaus und der hervorragend gewählten Übungsaufgaben kann ich das Buch auch fortgeschrittenen Studenten der Fächer Chemie, Physik und Materialwissenschaften wärmstens empfehlen: In Hinblick auf Grundlagen der Kristallographie und Gruppentheorie

können sie bereits im Bachelorstudiengang vom ersten Teil profitieren, und im Zuge einer späteren Spezialisierung können sie nahtlos auf die Kapitel 7–18 zurückgreifen.

*Ulli Englert*  
Institut für Anorganische Chemie  
RWTH Aachen

DOI: [10.1002/ange.201306902](https://doi.org/10.1002/ange.201306902)



## Novartis Chemistry Lectureship

Novartis is pleased to announce the following Novartis Chemistry Lecturers for 2013 – 2014.

**Benjamin F. Cravatt**  
The Skaggs Institute for  
Chemical Biology  
The Scripps Research Institute  
La Jolla, CA, USA

**Robert Glen**  
University of Cambridge  
Cambridge, UK

**Kenichiro Itami**  
Nagoya University  
Nagoya, Japan

**Andreas Kirschning**  
Leibniz University of  
Hannover  
Hannover, Germany

**Gary A. Molander**  
University of Pennsylvania  
Philadelphia, PA, USA

**Christopher D. Vanderwal**  
University of California at  
Irvine  
Irvine, CA, USA



The Novartis Chemistry Lectureship is awarded to scientists in recognition of outstanding contributions to organic and computational chemistry, including applications to biology.