Kristallographie

Johannes Hahn Andrea Hanke

21. Mai 2019

1 Geometrie

1.1 Definition:
Eine starre Bewegung oder Isometrie ist eine Abbildung $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, die abstandserhaltend ist, d.h.

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n : \|\phi(x) - \phi(y)\| = \|x - y\|$$

1.2 Beispiel: a.) Translationen: $\tau_v(x) := x + v$.

b.) Drehungen: Bis auf Koordinatenwahl die Abbildungen der Form

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \cos(\alpha)x + (-\sin(\alpha))y \\ \sin(\alpha)x + \cos(\alpha)y \\ z \end{pmatrix}$$

α wird dabei als Drehwinkel bezeichnet. Die Drehachse erkennt man daran, dass es eine Gerade $A \subseteq \mathbb{R}^3$ ist, die $D(A) = A$ erfüllt. In obiger Beschreibung ist das Koordinatensystem so gewählt worden, dass die Drehachse genau die Gerade $\left\{ \left(\begin{smallmatrix} 0 \\ 0 \\ z \end{smallmatrix}\right) \,\middle|\, z \in \mathbb{R} \right\}$ ist.

c.) Inversionen = Punktspiegelungen

d.) Spiegelungen an einer Geraden (in $\mathbb{R}^2$) bzw. an einer Ebene (in $\mathbb{R}^3$) bzw. allgemein an einer Hyperebene ($(n-1)$-dimensionale Unterräume von $\mathbb{R}^n$).

e.) Wenn f, g Isometrien sind, dann auch $f \circ g$, z.B.

   i.) Gleitspiegelungen: Im $\mathbb{R}^2$ eine Spiegelung an einer Geraden gefolgt von einer Translation in Richtung derselben Geraden.

   ii.) Drehinversionen: Eine Drehung g gefolgt von einer Inversion f in einem Punkt auf der Drehachse von g.

   iii.) Schraubungen: Eine Drehung g gefolgt von einer Translation f entlang der Drehachse.

f.) Die Identität id : $x \mapsto x$. Das ist gleichzeitig die Translation τ_0, die Drehung um den Winkel 0 (mit jeder Drehachse).

1.3 Definition:
Angenommen, wir haben einen Nullpunkt gewählt. Eine Isometrie, die den Nullpunkt fixiert, wird orthogonale Abbildung genannt.

1.4 Satz:
Es sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ eine Bewegung. Dann gilt:

a.) f ist affin, d.h.

$$\forall p_0, p_1 \in \mathbb{R}^n, \lambda \in \mathbb{R} : f(\lambda p_1 + (1-\lambda)p_0) = \lambda f(p_0) + (1-\lambda)f(p_0)$$

b.) Haben wir einen Nullpunkt gewählt und ist f orthogonal, dann ist f sogar linear, d.h.

i.) $\forall v_1, v_2 \in \mathbb{R}^n : f(v_1 + v_2) = f(v_1) + f(v_2)$

ii.) $\forall v \in \mathbb{R}^n, \lambda \in \mathbb{R} : f(\lambda v) = \lambda f(v)$.

c.) f erhält Längen von Vektoren und Winkel zwischen Vektoren.

Beweis. a. Wir betrachten die Gerade G, die durch p_0 und p_1 geht. Geraden haben die Eigenschaft, dass für alle Punkte $q_0, q_1 \in G$ der kürzeste Weg von q_0 nach q_1 in G enthalten ist. Der kürzeste Weg zwischen q_0 und q_1 muss durch eine abstandserhaltende Abbildung f natürlich auf den kürzesten Weg zwischen $f(q_0)$ und $f(q_1)$ abgebildet werden. Daher muss f auch Geraden auf Geraden abbilden.
Der Punkt $\lambda p_1 + (1-\lambda)p_0 = p_0 + \lambda(p_1 - p_0)$ ist genau derjenige Punkt auf der Geraden, die durch p_0 und p_1 führt, der in Richtung $p_0 \to p_1$ gesehen, genau Abstand $\lambda\|p_1 - p_0\|$ von p_0 hat.
Der Punkt $\lambda f(p_1) + (1-\lambda)f(p_0) = f(p_0) + \lambda(f(p_1) - f(p_0))$ ist analog genau derjenige Punkt auf der Geraden, die durch $f(p_0)$ und $f(p_1)$ führt, der in Richtung $f(p_0) \to f(p_1)$ gesehen, genau den Abstand $\lambda\|f(p_1) - f(p_0)\| = \lambda\|p_1 - p_0\|$ hat.
f bildet die Gerade durch p_0 und p_1 auf die Gerade durch $f(p_0)$ und $f(p_1)$ ab. Also muss auch $\lambda p_1 + (1-\lambda)p_0$ auf $\lambda f(p_0) + (1-\lambda)f(p_1)$ abgebildet werden.
b. Wenn $f(0) = 0$ ist, dann können wir $p_0 = 0$ und $p_1 = v$ in a. einsetzen und erhalten direkt, dass $f(\lambda v) = \lambda f(v)$ gilt.
Daraus folgern wir nun:

$$f(v_1 + v_2) = 2f(\tfrac{1}{2}(v_1 + v_2)) = 2f(\tfrac{1}{2}v_1 + \tfrac{1}{2}v_2) \overset{a.}{=} 2(\tfrac{1}{2}f(v_1) + \tfrac{1}{2}f(v_2)) = f(v_1) + f(v_2)$$

c. folgt aus $\frac{1}{2}(\|v_1 + v_2\|^2 - \|v_1\|^2 - \|v_2\|^2) = \langle v_1, v_2\rangle$, $\|v\| = \|f(v)\|$ und b.
Winkelerhaltung folgt dann aus $\cos(\sphericalangle(v_1, v_2)) = \frac{\langle v_1, v_2\rangle}{\|v_1\| \cdot \|v_2\|}$. □

1.5: Aus der Linearität und der Tatsache, dass wir nur Räume endlicher Dimension betrachten, kann man folgern, dass jede Isometrie bijektiv ist, also eine Umkehrabbildung besitzt. Die Umkehrabbildung muss dann selbst wieder eine Isometrie sein, denn:

$$\|p_1 - p_2\| = \|f(f^{-1}(p_1)) - f(f^{-1}(p_2))\| = \|f^{-1}(p_1) - f^{-1}(p_2)\|$$

1.6 Satz (Klassifikation von Bewegungen in kleinen Dimensionen)**:**
Alle Bewegungen des

a.) $\mathbb{R}^1$ sind Translationen oder Spiegelungen.

b.) $\mathbb{R}^2$ sind Drehungen oder Geradenspiegelungen gefolgt von einer Translation.

c.) $\mathbb{R}^3$ sind Drehungen, Ebenenspiegelungen oder Drehinversionen gefolgt von einer Translation.

2 Gruppentheorie

2.1 Definition:
Eine Gruppe $(G, \circ)$ besteht aus

- einer Menge G sowie
- einer Abbildung $\circ : G \times G \to G$, d.h. einer Verknüpfung, die aus zwei Gruppenelementen $g_1, g_2 \in G$ ein neues Gruppenelement $g_1 \circ g_2$ macht

die die folgenden Eigenschaften erfüllen:

(G1) Assoziativität, d.h. wir dürfen in zusammengesetzten Ausdrücken beliebig umklammern:

$$\forall x, y \in G : x \circ (y \circ z) = (x \circ y) \circ z$$

In der Praxis bedeutet das, dass wir Klammern einfach weglassen und z.B. $x \circ y \circ z$ schreiben.

(G2) Neutrales Element: Es gibt (genau) ein Element, das gar nichts tut, wenn wir es mit anderen Gruppenelementen verknüpfen:

$$\exists 1_G \in G \forall x \in G : 1_G \circ x = x = x \circ 1_G$$

(G3) Inverse Elemente: Jede durch ein Gruppenelement repräsentierte Aktion kann durch (genau) ein anderes Gruppenelement rückgängig gemacht werden:

$$\forall x \in G \exists x^{-1} \in G : x \circ x^{-1} = 1_G = x^{-1} \circ x$$

Manche Gruppen erfüllen zusätzliche Eigenschaften, z.B. wird eine Gruppe kommutativ oder abelsch genannt, wenn sie

(G4) Kommutativität: Es ist egal, in welcher Reihenfolge wir Elemente verknüpfen:

$$\forall x, y \in G : x \circ y = y \circ x$$

erfüllt.

2.2 Beispiel (Symmetriegruppen)**:**
Wir beschäftigen uns mit Gruppen, weil sie Symmetrien von Objekten beschreiben. Für jedes geometrische oder abstrakt-mathematische Objekt X gibt es eine Gruppe $\mathrm{Aut}(X)$, die alle jeweiligen Kontext relevanten Transformation umfasst, welche X nicht verändert. Die Gruppenverknüpfung $\circ$ ist in diesen Beispielen die Hintereinanderausführung von Transformation, d.h. $f \circ g$ ist die Operation „f nach g“, also diejenige Transformation, die man erhält, wenn man zuerst g und dann f anwendet. Das neutrale Element in diesen Beispielen ist immer die identische Transformation id, also diejenige, die alles so lässt wie es ist.

a.) $\mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$ ist eine Gruppe, denn die Verknüpfung von zwei Isometrien ist wieder eine Isometrie, id ist eine Isometrie, jede Isometrie ist bijektiv und die Umkehrabbildung einer Isometrie ist selbst eine Isometrie.

b.) Ist X etwa eine Punktmenge im $\mathbb{R}^n$, z.B. ein Polyeder oder ein Kristall, so ist $\mathrm{Aut}(X)$ die Gruppe aller starren (=abstandserhaltenden) Bewegungen, die X unverändert lassen:

$$\mathrm{Aut}(X) := \{\, g \in \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n) \mid g(X) = X \,\}$$

c.) Ist z.B. X ein gleichseitiges Dreieck in der Ebene, dann hat $\mathrm{Aut}(X)$ genau sechs Elemente:

Die Identität, d.h. die Drehung um 0°, die Drehung um 120°, die Drehung um 240° sowie drei Spiegelungen an den drei möglichen Spiegelachsen jeweils durch einen Eckpunkt und den gegenüberliegende Seitenmittelpunkt.

d.) Ist X einfach irgendeine Menge, dann bezeichnet man mit $\mathrm{Sym}(X)$ die symmetrische Gruppe auf/von X. Da eine beliebige Menge völlig unstrukturiert ist, werden einfach *alle* Abbildungen betrachtet, d.h.

$$\mathrm{Sym}(X) := \{\, f : X \to X \mid f \text{ ist bijektiv} \,\}$$

(Bijektivität ist wichtig, damit wir wirklich inverse Element bekommen. Beliebige Abbildungen sind nicht invertierbar. Im geometrischen Beispiel brauchten wir das nicht, da starre Bewegungen immer invertierbar sind: Jede Verschiebung, Drehung, Punkt- oder Ebenenspiegelung kann durch eine Verschiebung, Drehung, Punkt- bzw. Ebenenspiegelung rückgängig gemacht werden)

Speziell, wenn X eine endliche Menge ist, dann bezeichnet man bijektive Abbildungen $X \to X$ auch als Permutationen und die Gruppe $\mathrm{Sym}(X)$ auch als Permutationsgruppe. Es gibt genau $|\mathrm{Sym}(X)| = |X|!$ viele Permutationen.

e.) Ist z.B. $X = \{1, 2, 3\}$, dann gibt es genau $3! = 6$ Permutationen dieser Menge: Die Identität

$$1 \mapsto 1, 2 \mapsto 2, 3 \mapsto 3$$

drei Transpositionen, d.h. Permutationen, die genau zwei Elemente tauschen:

$$1 \mapsto 2, 2 \mapsto 1, 3 \mapsto 3$$

$$1 \mapsto 3, 2 \mapsto 2, 3 \mapsto 1$$

$$1 \mapsto 1, 2 \mapsto 3, 3 \mapsto 2$$

sowie zwei 3-Zyklen, die Permutationen, die drei Elemente im Kreis permutieren:

$$1 \mapsto 2, 2 \mapsto 3, 3 \mapsto 1$$

$$1 \mapsto 3, 2 \mapsto 1, 3 \mapsto 2$$

2.3 Beispiel (Abstrakte Gruppen)**:**
Es gibt Gruppen, denen man nicht sofort ansieht, dass sie Symmetrien beschreiben. Es gibt auch (wenige) Gruppen, die gar keine Symmetrien beschreiben.

a.) Zahlenbereiche mit Addition: $\mathbb{Z}, \mathbb{Q}, \mathbb{R}, \mathbb{C}, \mathbb{R}^n$ jeweils zusammen mit $\circ = +$ sind kommutative Gruppen. Das neutrale Element ist die Zahl Null bzw. der Nullvektor. Inverse Elemente sind Negative.

b.) Zahlenbereiche mit Multiplikation: $\mathbb{Q}\backslash\{0\}, \mathbb{R}\backslash\{0\}, \mathbb{C}\backslash\{0\}$ sind jeweils zusammen mit $\circ = \cdot$ kommutative Gruppen. Das neutrale Element ist die Zahl Eins. Inverse Elemente sind Reziproke.

Gruppen dienen also gleichzeitig der gemeinsamen Beschreibung (einiger) der Eigenschaften, die die uns bekannten Grundrechenarten erfüllen. Sie werden ebenso benutzt, um die Eigenschaften von anderen Strukturen zu beschreiben, die sich in bestimmten Aspekten ähnlich verhalten wie die uns bekannten Zahlenbereiche sich bzgl. Addition und Multiplikation verhalten (sogenannte Ringe und Körper).

2.4 Beispiel (Untergruppen)**:**
Kennen wir bereits eine Gruppe $(G, \circ)$ und ist $U \subseteq G$ eine Teilmenge mit den folgenden Eigenschaften:

(UG1) U enthält das neutrale Element:

$$1_G \in U$$

(UG2) U ist unter Multiplikation abgeschlossen:

$$\forall x, y \in U : x \circ y \in U$$

(UG3) U ist unter Inversenbildung abgeschlossen:

$$\forall x \in U : x^{-1} \in U$$

Dann ist U selbst eine Gruppe mit der gleichen Verknüpfung.
Dies tritt häufig auf, wenn wir nicht alle Symmetrien eines Objekts betrachten, sondern nur Symmetrien eines bestimmten Typs.

a.) Die orientierungserhaltenden Bewegungen $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ bilden eine Untergruppe von $\mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$. Eine Spiegelung ist nicht orientierungserhaltend, eine Drehung oder Translation schon.

b.) Die Translationen bilden eine Untergruppe von $\mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$.

2.5 Satz und Definition (Satz von Lagrange)**:**
Sei G eine Gruppe und $U \leq G$ eine Untergruppe. Eine Teilmenge der Form

$$gU := \{ gu \mid u \in U \}$$

heißt (Links)Nebenklasse von U in G. Die Anzahl aller Linksnebenklassen wird mit $|G : U|$ bezeichnet und heißt Index von U in G.
Die Teilmengen haben die folgenden Eigenschaften:

a.) Alle Nebenklassen von U sind gleich groß: $\forall g \in G : |gU| = |U|$

b.) Zwei Nebenklassen sind entweder identisch oder disjunkt.

c.) Ist G endlich, so gilt $|G : U| = \frac{|G|}{|U|}$.

Beweis. a. $U \to gU, u \mapsto gu$ ist eine Bijektion, denn $gU \to U, x \mapsto g^{-1}x$ ist eine inverse Abbildung. Wenn es eine Bijektion zwischen zwei Mengen gibt, dann sind sie gleich groß.

b. Betrachte $g, h \in G$ und die beiden Nebenklassen gU und hU. Angenommen gU und hU sind nicht disjunkt, d.h. es gibt ein $x \in gU \cap hU$. Dann muss es laut Definition zwei Elemente $u_1, u_2 \in U$ geben, sodass $x = gu_1$ sowie $x = hu_2$ gilt. Wenn man nun von rechts mit einem beliebigen Element $u \in U$ multipliziert, findet man, dass $xu = g(u_1u) \in gU$ und $xu = h(u_2u) \in hU$ ist. Also folgt $xU \subseteq gU$ und $xU \subseteq hU$.
Umgekehrt gilt aber auch $g = xu_1^{-1}$ und $h = xu_2^{-1}$. Mit der gleichen Überlegung folgt also auch $gU \subseteq xU$ und $hU \subseteq xU$. Setzen wir beide Erkenntnisse zusammen, so finden wir $gU = xU = hU$.

c. Wenn G endlich ist, dann ist $|U|$ sowie die Anzahl der Nebenklassen $|G : U|$ auch endlich. Jedes Element von g ist in mindestens einer Nebenklasse enthalten, nämlich in gU (denn $g = g1$ und $1 \in U$). Andererseits kann es nicht in mehr als einer Nebenklasse enthalten sein, denn die sind ja alle disjunkt, wie soeben herausgefunden haben. Also ist jedes Element von G in *genau einer* Nebenklasse enthalten, d.h. wenn g_1U, g_2U, ..., g_kU eine vollständige Auflistung aller Nebenklassen ist (d.h. $k = |G : U|$), dann muss

$$|G| = |g_1U| + |g_2U| + \cdots + |g_kU|$$

gelten. In a. haben wir jedoch gesehen, dass alle diese Summanden die gleiche Zahl sind, nämlich $|U|$. Also folgt $|G| = |U| + |U| + \cdots + |U| = k|U| = |G : U||U|$. □

2.6 Definition:
Ist G eine endliche Gruppe, so nennt man ihre Größe $|G|$ auch Ordnung der Gruppe. Ist $g \in G$ ein Element von G, so nennt man die Ordnung der Untergruppe $\langle g\rangle := \{\, g^k \mid k \in \mathbb{Z}\,\}$ auch Ordnung des Elements.

2.7 Beispiel: a.) Die Identität hat Ordnung 1.

b.) Spiegelungen sind Elemente der Ordnung 2.

c.) Eine Drehung um den Winkel $\frac{k}{n}2\pi$, wobei $\frac{k}{n}$ vollständig gekürzt ist, hat genau Ordnung n.

d.) Eine Drehinversion um einen Winkel $\frac{k}{n}2\pi$, wobei $\frac{k}{n}$ vollständig gekürzt ist, hat Ordnung n, wenn n gerade ist, und Ordnung $2n$, wenn n ungerade ist.

e.) Eine Translationen, Schraubungen im Raum und Gleitspiegelungen in der Ebene, die einen Verschiebungsanteil $\neq 0$ haben, haben jeweils unendliche Ordnung.

2.8: Aufgrund des Satzes von Lagrange sind Elementordnungen immer Teiler der Gruppenordnung. Wenn wir also in einer Symmetriegruppe bestimmte Symmetrien sofort sehen, z.B. eine Drehung um $72 = \frac{2\pi}{5}$ und eine um $120 = \frac{2\pi}{3}$, dann wissen wir, dass die gesamte Symmetriegruppe eine durch $kgV(3, 5) = 15$ teilbare Ordnung (oder ∞) haben muss.

2.1 Gruppenoperationen

2.9 Definition:
Eine Gruppenoperation besteht aus

- einer Gruppe $(G, \circ)$,
- einer Menge X,
- einer Abbildung $G \times X \to X, (g, x) \mapsto {}^g x$, die wir uns als „wende g auf x an“ vorstellen.

die die folgende Eigenschaft erfüllt:

$$\forall g, h \in G \forall x : {}^g({}^h x) = {}^{gh}x$$

2.10 Beispiel:
Wenn G bereits als Symmetriegruppe eines Objekts X gegeben ist, dann betrachtet man meistens zuerst die Operation von G auf X, die einfach durch Anwenden der Transformationen auf Elemente von X entsteht, d.h.

$$ {}^g x := g(x)$$

Das Konzept der Symmetrieoperation ist dafür gedacht, auch diejenigen Fälle zu erfassen, in denen die Gruppe irgendwie anders gegeben ist, oder Fälle, in denen wir mit einer Symmetriegruppe auf anderen Mengen als X selbst operieren wollen.

2.11 Beispiel:
Die Gruppe aller starren Bewegungen $\mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$ operiert nicht nur auf $\mathbb{R}^n$, d.h. der Menge aller Punkte im n-dimensionalen Raum, sondern auch auf vielen abgeleiteten Mengen, z.B. der Menge aller Geraden, der Menge aller Ebenen, der Menge aller Kreise, der Menge aller Kombinationen (p, G) aus einem Punkt und einer Geraden, der Menge aller Kombinationen $(K_1, \ldots, K_5, p_1, \ldots, p_{17}, E_1, E_2, E_3)$ aus fünf Kreisen, siebzehn Punkten und drei Ebenen, uvm.

2.12 Beispiel:
Sei $v \in \mathbb{R}^n$ ein fester Vektor. Die abstrakte Gruppe $(\mathbb{R}, +)$ operiert auf $\mathbb{R}^n$ durch Translation in Richtung v, d.h. für $g \in \mathbb{R}$ und $x \in \mathbb{R}^n$ ist

$$ {}^g x := x + gv$$

eine Operation.

2.13 Lemma (Offensichtliches)**:**
Operiert G auf X, dann betrachten wir die Abbildungen $\tau_g : X \to X, x \mapsto {}^g x$. Es gilt:

a.) Das Einselement operiert als Identität: $\tau_1 = \mathrm{id}_X$

b.) Inverse Elemente operieren wie inverse Abbildungen: τ_g ist bijektiv und ihre inverse Abbildung ist $\tau_{g^{-1}}$.

c.) $\tau_{gh} = \tau_g \circ \tau_h$.

2.14 Definition (Bahn und Stabilisator)**:**
Operiert G auf X und ist $x \in X$ ein beliebiges Element, so heißt die Menge

$$^{G}x := \{\, ^{g}x \mid g \in G \,\}$$

Bahn von x oder Orbit von x.
Die Teilmenge

$$G_x := \{\, g \in G \mid {}^{g}x = x \,\}$$

von G nennt man Stabilisator von x.

2.15 Satz (Orbit-Stabiliser-Theorem)**:**
Operiert G auf X und ist $x \in X$ beliebig, dann gilt:

a.) $G_x \leq G$.

b.) $|^{G}x| = |G : G_x|$

2.16: Wenn wir also bestimmen wollen, wie viele verschiedene Punkte wir erreichen, indem wir bei x beginnend, alle Elemente der Gruppe anwenden, dann müssen wir nicht die (vielleicht sehr große) Gruppe G komplett durchprobieren.
Es genügt, sich über die Elemente von G Gedanken zu machen, die x überhaupt nicht bewegen, und diese zu zählen. Wenn wir diese Anzahl nämlich haben, dann können wir mittels des Satzes von Lagrange den Index $|G : G_x|$ als $|G|/|G_x|$ berechnen und kennen somit auch die Größe der Bahn von x.

Beweis. a. G_x erfüllt $1 \in G_x$, denn $^{1}x = x$. Sind $g, h \in G_x$, dann gilt $^{gh}x = {}^{g}({}^{h}x) = {}^{g}x = x$, also $gh \in G_x$. Ist $g \in G_x$, dann gilt: $^{g^{-1}}x = {}^{g^{-1}}({}^{g}x) = {}^{g^{-1}g}x = {}^{1}x = x$, also $g^{-1} \in G_x$. Das sind genau die drei Eigenschaften, die wir brauchen, die eine Untergruppe von G ausmachen.

b. Es sei $G/G_x := \{\, hG_x \mid h \in G \,\}$ die Menge aller Linksnebenklasse von G_x in G. Dann ist

$$G/G_x \to {}^{G}x, hG_x \mapsto {}^{h}x$$

eine bijektive Abbildung, d.h. jedes Element in der rechten Menge tritt einmal und nur einmal als Output eines Elements in der linken Menge auf. Zunächst müssen wir uns Gedanken machen, ob diese Zuordnung überhaupt sinnvoll ist, d.h. ob, wenn dieselbe Nebenklasse auf zwei verschiedene Weisen geschrieben wird $h_1G_x = h_2G_x$, die entsprechenden Outputs ^{h_1}x und ^{h_2}x auch dieselben sind.
Das gilt, denn $h_1G_x = h_2G_x$ bedeutet ja u.A., dass $h_1 \in h_2G_x$ gilt, d.h. es gibt ein Element $u \in G_x$ mit $h_1 = h_2u$. Daraus folgt $^{h_1}x = {}^{h_2u}x = {}^{h_2}({}^{u}x) = {}^{h_2}x$.

Sei nun $y \in {}^G x$ ein beliebiges Element in der Bahn. Warum tritt es mindestens einmal als Output der Zuordnung auf? Weil ein Element der Bahn die Gestalt $y = {}^g x$ für irgendein $g \in G$ hat und das ist der Output der Linksnebenklasse gG_x.
Warum tritt es höchstens einmal auf? Wären gG_x und hG_x zwei Nebenklassen mit ${}^g x = {}^h x$, dann müsste ja $x = {}^{g^{-1}}{}^g x = {}^{g^{-1}}{}^h x$ sein, d.h. $g^{-1}h \in G_x$. Das heißt jedoch, dass $h = g(g^{-1}h) \in gG_x$ ist, d.h. hG_x und gG_x haben mindestens ein Element gemeinsam und sind deshalb identisch. □

2.17 Beispiel:
Wir betrachten eine endliche Gruppe $G \leq O(\mathbb{R}^3)$ von Drehungen und Spiegelungen im $\mathbb{R}^n$ und einen generischen Punkt x aus der Einheitssphäre, d.h. $\|x\| = 1$.
Wie groß ist die Bahn von x unter G? Wir betrachten den Stabilisator G_x.

Welche Drehungen bewegen x nicht? Genau diejenigen Drehungen, bei denen x auf der Drehachse liegt oder die Drehung um 0, d.h. die Identität.
Welche Ebenenspiegelungen bewegen x nicht? Genau diejenigen, bei denen x in der Spiegelebene liegt.
Welche Drehinversionen bewegen x nicht? Gar keine. Wenn x rechts/links der Drehebene ist, dann ist ${}^g x$ links/rechts der Drehebene. Wenn x in der Drehebene ist, wird es gedreht.

Welche Punkte der Länge 1 liegen auf einer gegebenen Drehachse? Genau Zwei: Der „Nordpol" und „Südpol" der Drehung.
Welche Punkte der Länge 1 liegen in einer gegebenen Spiegelebene? Diese bilden einen Großkreis auf der Sphäre. (Man denke Längenkreise oder Äquator auf einem Globus)

Wenn wir nur endlich viele Elemente in G haben, dann gibt es nur endlich viele Drehachsen oder Spiegelebenen, die wir betrachten müssen. Das sind also nur endlich viele Großkreise+endlich viele Punkte auf der Einheitskugel.
Das ist eine höchstens eindimensionale Figur auf einer zweidimensionalen Fläche, also werden die allermeisten Punkte der Einheitssphäre niemals in dieser Figur liegen. Das heißt, dass für die allermeisten x der Länge 1 stets $G_x = \{1\}$ liegt.
Somit ist ${}^G x = |G : \{1\}| = |G|$ für fast alle Punkte der Einheitssphäre. Man nennt diese Zahl auch Flächenzahl der Gruppe, weil man diese Vektoren als Normalvektoren von Ebenen tangential zur Einheitskugel auffassen kann, die dann einen Polyeder bilden, der von G invariant gelassen wird.

2.18 Satz (Satz von Burnside)**:**
Sei G eine endliche Gruppe, die auf der endlichen Menge X operiert. Es sei

$$X/G := \{ {}^G x \mid x \in X \}$$

die Menge aller Bahnen dieser Operation. Dann gilt:

$$|X/G| = \text{durchschnittliche Anzahl von Fixpunkten} = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} |Fix(g)|$$

Beweis. Beweis durch „doppeltes Abzählen“: Wir betrachten die Menge

$$Y := \{\, (g, x) \in G \times X \mid {}^{g}x = x \,\}$$

Wenn wir sie auf die eine Weise zählen, erhalten wir:

$$|Y| = \sum_{g \in G} |\{\, g \,\} \times \{\, x \in X \mid {}^{g}x = x \,\}| = \sum_{g \in G} 1 \cdot |Fix(g)|$$

Zählen wir auf die andere Weise, erhalten wir:

$$|Y| = \sum_{x \in X} |\{\, g \in G \mid {}^{g}x = x \,\} \times \{\, x \,\}| = \sum_{x \in X} |G_x| 1$$

Wenn wir nun beachten, dass Elemente derselben Bahn gleich große Stabilisatoren haben, wird für jede Bahn $B = {}^{G}x$ also genau $|B|$-mal $|G_x| = \frac{|G|}{|B|}$ aufaddiert. Wir erhalten also $|Y| = |X/G| \cdot |G|$.
Vergleichen wir beide Zählweisen, erhalten wir also die Gleichung

$$|X/G| \cdot |G| = |Y| = \sum_{g \in G} |Fix(g)| \qquad \square$$

2.2 Klassifikation der endlichen Bewegungsgruppen in ≤ 3 Dimensionen

Es gibt genau eine Bewegungsgruppe in Null Dimensionen, nämlich die triviale Gruppe $\{\, 1 \,\}$, denn das ist gleich der vollen Bewegungsgruppe $Isom(\mathbb{R}^0)$.

2.19 Satz (Dimension 1)**:**
Es sei $G \leq \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^1)$ eine endliche Gruppe von eindimensionalen Bewegungen. Dann ist G eine der folgenden Gruppen:

a.) Die triviale Gruppe $\{\, \mathrm{id} \,\}$.

b.) Spiegelungen: Es gibt einen Punkt $x \in \mathbb{R}$, sodass G genau aus der Identität und der Spiegelung an x besteht.

2.20 Satz (Dimension 2)**:**
Es sei $G \leq \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^2)$ eine endliche Gruppe von zweidimensionalen Bewegungen. Dann ist G eine der folgenden Gruppen:

a.) Drehgruppen: Es gibt einen Punkt $x \in \mathbb{R}^2$ und eine natürliche Zahl $n \in \mathbb{N}_{\geq 1}$, sodass G genau aus den Drehungen mit Drehmittelpunkt x um die Winkel $0, \frac{2\pi}{n}, \frac{2}{n}2\pi, \ldots, \frac{(n-1)}{n}2\pi$ besteht.

b.) Diedergruppen: Es gibt einen Punkt $x \in \mathbb{R}^2$ ein $n \in \mathbb{N}_{\geq 2}$, sodass G genau aus den n Drehungen mit Drehmittelpunkt x um die Winkel $0, \frac{2\pi}{n}, \frac{2}{n}2\pi, \ldots, \frac{(n-1)}{n}2\pi$ und n Spiegelungen an Geraden, die sich allesamt in x schneiden und mit $\frac{2\pi}{n}$-Winkel Abstand angeordnet sind.

2.21 Satz (Klassifikation der endlichen Drehgruppen in drei Dimensionen)**:**
Sei $G \leq \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^3)$ eine endliche Gruppe von orientierungserhaltenden dreidimensionalen Bewegungen. Dann ist G eine der folgenden Gruppen:

a.) Zyklische Gruppen, von einer Drehung erzeugt: Es gibt Gerade $A \subseteq \mathbb{R}^3$ und eine natürliche Zahl $n \in \mathbb{N}_{\geq 1}$, sodass G genau aus den n Drehungen mit Drehachse A um die Winkel $0, \frac{2\pi}{n}, \frac{2}{n}2\pi, \ldots, \frac{(n-1)}{n}2\pi$.

b.) Diedergruppen, von Rotationen erzeugt: Es eine Gerade $A \subseteq \mathbb{R}^3$, eine dazu senkrechte Ebene $E \leq \mathbb{R}^3$ und eine natürliche Zahl $n \in \mathbb{N}_{\geq 2}$, sodass G genau aus den n Drehungen mit Drehachse A um die Winkel $0, \frac{2\pi}{n}, \frac{2}{n}2\pi, \ldots, \frac{(n-1)}{n}2\pi$ sowie aus n 180°-Drehungen mit Drehachsen in E, die sich alle im Punkt $E \cap A$ schneiden und regelmäßig im $\frac{2\pi}{n}$ Winkel-Abstand angeordnet sind, besteht.

c.) Die Drehgruppe eines regelmäßigen Tetraeders.

d.) Die Drehgruppe eines Würfels / Oktaeders.

e.) Die Drehgruppe eines Ikosaeders / Dodekaeders.

Beweis. Schritt 0: Nullpunkt festlegen.
Jede endliche Bewegungsgruppe fixiert mindestens einen Punkt. Wählen wir nämlich ein beliebiges $x \in \mathbb{R}^3$, dann ist

$$\frac{1}{|G|}\sum_{g \in G} g(x)$$

ein Punkt, der ein gemeinsamer Fixpunkt aller Elemente von G ist.
Einen solchen globalen Fixpunkt erklären wir zum Nullpunkt eines Koordinatensystems. Wir wissen jetzt aus der Klassifikation, dass jede Bewegung, die den Nullpunkt festlässt, eine Drehung oder Ebenenspiegelung oder Drehinversion ist. Spiegelungen und Drehinversionen sind nicht Orientierungserhaltend, also besteht G aus Drehungen um Achsen, die sich im Nullpunkt schneiden.

Schritt 1: Eine Gruppenoperation finden.
G erhält Längen, d.h. es operiert auf $S^2 := \left\{ x \in \mathbb{R}^3 \;\middle|\; \|x\| = 1 \right\}$. Wir betrachten darin die Menge

$$\Omega := \left\{ x \in S^2 \;\middle|\; \exists g \in G \setminus \{1\} : g(x) = x \right\}$$

der Fixpunkte von nichttrivialen Elementen.
G operiert wirklich auf Ω, denn wenn $g(x) = x$ gilt und $h \in G$ ist, dann ist $h(x)$ ein Fixpunkt von hgh^{-1}.

Schritt 2: Zählen.
Da jede Drehung außer der um 0° die Punkte auf der Drehachse fixiert, hat jedes Element $g \in G$ genau zwei Fixpunkte der Länge 1. Die Identität hat natürlich genau $|\Omega|$ Fixpunkte.

Es sei $r := |\Omega/G|$ die Anzahl der Bahnen der Operation von G auf Ω. Und sei $p_1, \ldots, p_r$ je ein Punkt aus jeder Bahn und $a_i := |G_{p_i}|$ die Größe der dazugehörigen Stabilisatoren. Aufgrund des Satzes von Burnside gilt also:

$$\begin{aligned} r &= \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} |Fix(g)| \\ &= \frac{|\Omega| + (|G| - 1)2}{|G|} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^{r} |^G p_i|}{|G|} + 2(1 - \frac{1}{|G|}) \\ &= \frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} + \cdots + \frac{1}{a_r} + 2(1 - \frac{1}{|G|}) \end{aligned}$$

Umgestellt:

$$2 - \frac{2}{|G|} = \sum_{i=1}^{r} (1 - \frac{1}{a_i}) \iff \frac{2}{|G|} + (-2 + r) = \sum_{i=1}^{r} \frac{1}{a_i}$$

Schritt 3: Fallunterscheidungen.
Hierbei sind $|G|$ und a_i natürliche Zahlen. Außerdem ist $a_i > 1$, da nach Definition p_i ja von mindestens einem Element außer der Identität fixiert wird, und a_i außerdem ein Teiler von $|G|$.
Die Summanden $1 - \frac{1}{a_i}$ sind also alle $\geq 1 - \frac{1}{2}$ und $2 - \frac{2}{|G|}$ ist eine Zahl < 2. Also kann es maximal drei Summanden geben.
Fall 3.1.: $r = 0$.
Das tritt nur ein, wenn $\Omega = \emptyset$ ist, d.h. wenn es überhaupt keine nichttrivialen Elemente gibt, d.h. wenn $G = \{ 1 \}$ ist. Das ist eine Gruppe vom Typ a.
Fall 3.2.: $r = 1$.
Dann muss $|G| = a_1 b_1$ sein für ein $b_1 \in \mathbb{N}$ und die Gleichung $2 - \frac{2}{|G|} = 1 - \frac{1}{a_1}$ ist äquivalent zu $a_1 + 1 = \frac{2}{b_1}$. Links steht eine ganze Zahl größer gleich 3, rechts eine Zahl kleiner 2. Das ist unmöglich.
Fall 3.3.: $r = 2$.
Die rechte Gleichung ist dann $\frac{2}{|G|} = \frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2}$ und nur erfüllbar, wenn a_1 und a_2 gleich $|G|$ sind, denn a_1, a_2 sind ja Teiler von, also kleiner gleich $|G|$.
Alle Elemente der Gruppe fixieren also p_1 und p_2. Da mit p_1 auch $-p_1$ ein Fixpunkt ist, muss $p_2 = -p_1$ sein. Also fixiert die Gruppe auch die Gerade durch p_1 und $-p_1$, also den eindimensionalen Unterraum $U = \mathbb{R}p_1$. Da G aus orthogonalen Transformationen besteht, werden rechte Winkel erhalten, d.h. G bildet die Ebene $U^\perp$, die aus allen Vektoren besteht, die senkrecht zu U sind, in sich ab. Es handelt sich somit um eine zweidimensionale, orientierungserhaltende Bewegungsgruppe. Das ist eine Drehgruppe.
Fall 3.4.: $r = 3$.
O.B.d.A. nehmen wir an, dass $a_1 \geq a_2 \geq a_3$ ist. Die rechte Gleichung ist dann $\frac{2}{|G|} + 1 = \frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} + \frac{1}{a_3}$.

Fall 3.4.1.: $a_1 = a_2 = a_3 = 2$. Dann ist $|G| = 4$. Da orthogonale Abbildungen linear sind, ist ${}^G(-p) = -({}^Gp)$, d.h. wenn B eine Bahn ist, ist $-B$ auch eine Bahn. Da es nur drei Bahnen gibt, muss mindestens eine davon $B = -B$ erfüllen, d.h. diese Bahn besteht aus zwei antipodalen Punkten, die von einem Element von G vertauscht werden. OBdA ist das die erste Bahn. Die Gerade A durch $\pm p_1$ ist somit G-invariant.
Fall 3.4.2.: $a_1 > 2$ und $a_2 = a_3 = 2$. Dann ist $|G| = 2n$, wobei $n = a_1$. Dann gibt es genau eine Bahn mit 2 Punkten, nämlich ${}^Gp_1$, die dann also ein Paar von Antipoden sein müssen. Die Gerade A durch diese beiden Punkte wird also von G auf sich selbst abgebildet und von einigen Elementen in der Richtung geflippt.
In 3.4.1 und 3.4.2 finden wir also eine invariante Gerade A. Die Elemente des Stabilisators G_{p_1} sind n Drehungen um A. Die Elemente, die nicht im Stabilisator liegen, müssen p_1 und $-p_1$ vertauschen, sind also 180°-Drehungen um Achsen, die senkrecht zu A sind. Das sind die anderen n Elemente. Wir haben also eine in beiden Fällen eine Diedergruppe gefunden.
Fall 3.4.3: $(a_1, a_2, a_3) = (3, 3, 2)$. Dann ist $|G| = 12$. Die vier Punkte in der ersten bzw. zweiten Bahn bilden jeweils einen regelmäßigen Tetraeder, in dessen Symmetriegruppe G einbettet.
Fall 3.4.4: $(a_1, a_2, a_3) = (4, 3, 2)$. Dann ist $|G| = 24$. Die sechs Punkte in der ersten Bahn bilden die Eckpunkte eines Oktaeders und die acht Punkte in der zweiten Bahn bilden die Eckpunkte eines Würfels, in dessen Symmetriegruppen G jeweils einbettet.
Fall 3.4.5: $(a_1, a_2, a_3) = (5, 3, 2)$. Dann ist $|G| = 60$. Die 12 Punkte der ersten Bahn bilden die Eckpunkte eines Dodekaeders, die 20 Punkte der zweiten Bahn bilden die Eckpunkte eines Ikosaeders, in dessen Symmetriegruppen G jeweils einbettet. □

2.22: Jede dieser Gruppen kommt als Drehgruppe eines Polyeders vor. Die Diedergruppen sind Drehgruppen von n-eckigen, geraden Prismen. Die zyklischen Gruppen sind z.B. die Drehgruppen von n-eckigen Pyramiden.

2.23: *Nicht* jede dieser Gruppen kommt auch in den Symmetrien eines Kristalls vor, z.B. gibt es keine Kristalle mit Ikosaeder/Dodekaeder-Symmetrie und keine, die Drehungen der Ordnung 5 oder ≥ 7 enthalten. Nur Drehungen der Ordnung 2,3,4 und 6 treten in Kristallen auf. Wir werden noch sehen, wieso.

3 Kristalle

3.1 Definition (Kristalle)**:**
Ein Kristall (auch Kristallgitter) ist eine Punktmenge $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^3$ (gedacht als die Menge aller Atome im Kristall) ...

a.) ... die Translationssymmetrie hat, d.h. es gibt Vektoren $v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{R}^3$ in drei unabhängige Richtungen, sodass immer, wenn $a \in \Lambda$ ein Atom im Kristall ist, $a+k_1v_1+k_2v_2+k_3v_3$ auch ein Atom im Kristall ist für alle ganzen Zahlen $k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}$.

b.) ... die aus isolierten Punkten besteht, d.h. es gibt einen Mindestabstand $\delta > 0$, sodass sich keine zwei Punkte $x, y \in \Lambda$ näher als δ kommen: $x \neq y \implies \|x-y\| \geq \delta$.

Streng genommen müssten wir verschiedene Sorten von Atome unterscheiden, die im Kristall vorkommen, z.B. nach ihrem Element, d.h. zu einem Kristallgitter könnte auch eine Funktion gehören, die jedem Punkt $a \in \Lambda$ ein Unterscheidungsmerkmal zuordnet, z.B. eine Zahl (man denke: Nr. im Periodensystem) zuordnet und

c.) Die Punkte $a + k_1v_1 + k_2v_2 + k_3v_3$ für $k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}$ haben alle dieselbe Nummer.

erfüllt. Es ist aber für Symmetriebetrachtungen ausreichend, nur ein-atomige Kristalle zu betrachten. Erst, wenn es um die Chemie dahinter geht, werden die tatsächlich auftretenden Elemente im Kristall wichtig.

3.2: Insbesondere bedeutet die Bedingung des Mindestabstands, dass es nur abzählbar viele Punkte im Gitter gibt.

3.3 Definition:
Die Symmetriegruppe oder auch Raumgruppe eines Kristalls Λ ist die Gruppe aller starren (=abstandserhaltenden) Bewegungen, die das Gitter in sich selbst abbilden:

$$\mathrm{Aut}(\Lambda) := \left\{ s \in \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^3) \;\middle|\; s(\Lambda) = \Lambda \right\}$$

Nach Definition enthält $\mathrm{Aut}(\Lambda)$ mindestens die drei Translationen $x \mapsto x + t_i$. Die Menge *aller* Translationen, die Λ in sich selbst abbilden, sind eine Untergruppe von $\mathrm{Aut}(\Lambda)$.

3.4 Definition:
Ist Λ ein Kristall, dann ist

$$Trans(\Lambda) := \left\{ v \in \mathbb{R}^3 \;\middle|\; \forall a \in \Lambda : a + v \in \Lambda \right\}$$

das Translationsgitter des Kristalls.

3.5: Weil die Punkte in Λ einen Mindestabstand haben, haben die Elemente des Translationsgitters denselben (vielleicht sogar einen größeren) Mindestabstand. Man kann daraus folgern (wir werden es aber nicht tun), dass $Trans(\Lambda)$ unabhängige Vektoren v_1, v_2, v_3 enthält, sodass

$$Trans(\Lambda) = \mathbb{Z}v_1 + \mathbb{Z}v_2 + \mathbb{Z}v_3$$

gilt. Dies können, müssen aber nicht, die drei Vektoren aus der Definition sein.

3.6 Definition:
Es sei Λ ein Kristallgitter und $T = \{ \tau_v \mid v \in Trans(\Lambda) \}$ die Gruppe aller Translationen, die Λ invariant lassen.
Eine Basiszelle von Λ ist ein Paar (Z, A) bestehend aus einem (konvexer, kompakter) Polyeder $Z \subseteq \mathbb{R}^3$ und einer Punktmenge $M \subseteq Z$, sodass

a.) ... die Translate von M ganz Λ überdecken, d.h. $\Lambda = \bigcup_{\tau \in T} \tau(M)$.

b.) ... die Translate von Z ganz $\mathbb{R}^3$ überdecken, d.h. $\mathbb{R}^3 = \bigcup_{\tau \in T} \tau(Z)$.

c.) ... die Translate von Z im wesentlichen disjunkt sind, d.h. $Z \cap \tau(Z)$ ist eine Seitenfläche, eine Kante, ein Eckpunkt des Polyeders oder komplett leer, wenn $\tau \in T \setminus \{ id \}$ ist.

Die Menge M nennt man Motiv des Kristallgitters.
Eine Basiszelle, in der Z das kleinstmöglichen Volumen hat, heißt elementare Basiszelle des Gitters.

3.7 (Von Basiszellen zurück zu Kristallen)**:** Meistens betrachtet man einen Parallelepiped als Basiszelle, d.h. man nimmt drei unabhängige Vektoren v_1, v_2, v_3 und betrachtet

$$Z := \{ \lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2 + \lambda_3 v_3 \mid 0 \leq \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \leq 1 \}$$

zusammen mit einem irgendeinem Motiv $M \subseteq Z$. Daraus lässt sich dann wieder ein Kristall bauen, indem man die Translationen entlang der Vektoren v_1, v_2, v_3 wiederholt anwendet.
Achtung: Der so erhaltende Kristall hat (Z, M) als Basiszelle, aber i.A. nicht als elementare Basiszelle, es könnte eine kleinere Zelle geben. v_1, v_2, v_3 müssen auch keine Basis des Translationsgitters sein. Es könnte z.B. sein, dass es $\frac{1}{42}v_1 + \frac{1}{7}v_2$ auch eine Translation des so erhaltenen Gitters ist.

3.1 Punktgruppen und Kristallsysteme

3.8 Lemma und Definition (Punktgruppen)**:**
Ist $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Kristall, $x \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger Punkt und $G := \mathrm{Aut}(\Lambda)_x$ die Gruppe all derjenigen Symmetrien des Kristalls, welche den Punkt x nicht bewegen, dann ist G endlich.
Ist x ein Punkt im Kristall selbst, dann nennt man solch ein G eine Punktgruppe des Kristalls.

Beweis. Wir wählen uns ein Koordinatensystem so, dass x der Nullpunkt wird. Starre Bewegungen, die den Nullpunkt fixieren, sind orthogonale Abbildungen.
Wir wählen drei Punkte $a_1, a_2, a_3 \in \Lambda$ im Kristall in drei unabhängige Richtungen von x aus. Sei $r := \max\{\, \|a_1\|, \|a_2\|, \|a_3\| \,\}$. Aufgrund der Mindestabstand-Bedingung für Kristalle ist

$$X := \{\, a \in \Lambda \mid \|a\| \leq r \,\}$$

endlich. Ist $g \in G$, so sind die drei Punkte $g(a_1), g(a_2), g(a_3)$ aus X. Weil a_1, a_2, a_3 linear unabhängig sind, ist g eindeutig festgelegt durch diese drei Bildpunkte. Es gibt also maximal $|X|^3$ viele Elemente von G. □

3.9 Definition (Kristallsysteme)**:**
Betrachte alle n-dimensionalen Translationsgitter $T = \mathbb{Z}v_1 + \cdots + \mathbb{Z}v_n \subseteq \mathbb{R}^n$ und die jeweilige Punktgruppe $G := \mathrm{Aut}(T)_0$ des Nullpunkts.
Es seien $G_1, G_2, G_3, \ldots$ die so auftretenden Punktgruppen.
Ein Kristall $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^n$ gehört zum selben Kristallsystem wie G_i, wenn alle Punktgruppen von Λ Untergruppen von G_i sind, aber nicht von einem kleineren G_j.

3.10: Man kann zeigen, dass es nur eine (stark wachsende) endliche Anzahl von endlichen Gruppen pro Dimension gibt. Daher gibt es auch nur endlich viele Punktgruppen und endlich viele Kristallsysteme pro Dimension.

3.11 Satz (Klassifikation der dreidimensioanlen Kristallsysteme)**:**
Betrachte ein Translationsgitter $T = \mathbb{Z}v_1 + \mathbb{Z}v_2 + \mathbb{Z}v_3 \subseteq \mathbb{R}^3$. Es sei $G := \mathrm{Aut}(T)_0$ die Punktgruppe des Nullpunkts.
G ist dann genau eine der folgenden sieben Gruppen: G ist erzeugt von der Inversion und ...

a.) Triklin: ... nichts weiter.

b.) Monoklin: ... einer 2-zähligen Drehung

c.) Orthorhombisch: ... zwei 2-zähligen Drehungen um zueinander senkrechte Achsen.

d.) Trigonal: ... einer 2- und einer 3-zähligen Drehung um zueinander orthogonale Achsen.

e.) Tetragonal: ... einer 2- und einer 4-zähligen Drehung um zueinander orthogonale Achsen.

f.) Hexagonal: ... einer 2- und einer 6-zähligen Drehung um zueinander orthogonale Achsen.

g.) Kubisch: ... einer 3- und einer 4-zähligen Drehung.

TODO: Hasse-Diagram mit TikZ

3.12: Gut, das sagt uns jetzt etwas über Symmetrien des Kristalls mit Fixpunkten. Aber was ist mit Symmetrien wie Schraubungen, die gar keine Fixpunkte haben müssen?
Darüber können wir trotzdem etwas aussagen, indem wir sie als Symmetrien eines anderen Gitters auffassen: Wir erinnern uns, dass jede starre Bewegung $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ sich schreiben lässt als Anwendung einer orthogonalen Bewegung Q gefolgt von einer Translation τ_v, d.h.

$$\forall x \in \mathbb{R}^n : g(x) = Q(x) + v$$

Ist nun τ_w eine Translation, dann betrachten wir die dazu konjugierte Symmetrie $g \circ \tau_w \circ g^{-1}$. Was für eine Bewegung ist das? Es gilt

$$\begin{aligned}
(g \circ \tau_w \circ g^{-1})(x) &= g(\tau_w(g^{-1}(x))) \\
&= Q(\tau_w(Q^{-1}(x - v)) + v \\
&= Q(Q^{-1}x - Q^{-1}v + w) + v && \text{da } Q^{-1} \text{ linear ist} \\
&= x - v + Qw + v && \text{da } Q \text{ linear ist} \\
&= x + Qw
\end{aligned}$$

D.h. $g \circ \tau_w \circ g^{-1} = \tau_{Q(w)}$ ist wieder eine Translation.
Man sieht außerdem: Es gilt genau dann $g \circ \tau_w \circ g^{-1} = \tau_w$, wenn $Q(w) = w$ ist.

3.13 Lemma:
Sei $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Kristall. Dann operiert $G = \mathrm{Aut}(\Lambda)$ auf der Translationsuntergruppe bzw. dem Translationsgitter $Trans(\Lambda)$ durch Konjugation:

$$^g\tau_w := g \circ \tau_w \circ g^{-1} \quad \text{bzw.} \quad ^g w = Q(w)$$

(wobei $g(x) = Q(x) + v$ wie oben.)

3.14: Man beachte, dass bzgl. dieser Operation die Translationen trivial operieren, d.h. nur der Anteil an G, der über Translationen hinausgeht, ist hier wichtig.
Das vereinfacht die Art der vorkommenden Symmetrien drastisch: Wenn $g \in \mathrm{Aut}(\Lambda)$ eine Schraubung um Winkel α ist, dann ist die Symmetrie $R_g : w \mapsto {}^g w$ des Translationsgitters nur noch eine Drehung um Winkel α. Analog ist R_s eine Spiegelung, wenn s eine (Gleit)spiegelungen war.
Man beachte außerdem, dass die Punktinversion $v \mapsto -v$ immer eine Symmetrie jedes Translationsgitters ist, d.h. wenn wir statt einer Drehsymmetrie eine Drehinversion finden, dann können wir durch Multiplikation mit der Punktinversion auch immer eine Drehung finden. Eine Ebenenspiegelung ist dasselbe wie eine Drehinversion mit 180°-Winkel. ist also eine Ebenenspiegelung oder Gleitspiegelung in $\mathrm{Aut}(\Gamma)$ enthalten, so hat $Trans(\Lambda)$ eine 180°-Drehsymmetrie.

3.15 Korollar:
Sei $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Kristall. Die Gruppe $\{ R_g \mid g \in G \} \leq \mathrm{Aut}(Trans(\Lambda)) \cap O(\mathbb{R}^n)$ ist endlich.

Beweis. Es ist eine Untergruppe der Automorphismengruppe eines Gitters und alle R_g fixieren den Nullvektor. $\square$

3.16 Satz (Geometrische Einschränkungen)**:**
Sei $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Kristall und $1 \neq g \in \mathrm{Aut}(\Lambda)$ eine Drehung oder Schraubung um den Winkel α.

a.) Die einzigen möglichen Winkel sind $180° = \frac{2\pi}{2}, 120° = \frac{2\pi}{3}, 90° = \frac{2\pi}{4}$, $60° = \frac{2\pi}{6}$ oder $\alpha = 0$.

b.) Ist $\alpha \neq 0$, dann gibt es unabhängige Vektoren v_1, v_2, v_3 im Translationsgitter (nicht notwendigerweise eine Basis), sodass

   i.) v_1 in Richtung der Drehachse von g zeigt und

   ii.) v_2 und v_3 senkrecht auf v_1 stehen,

   Ist außerdem $\alpha \neq \pi$, dann können wir zusätzlich auch

   iii.) $v_3 = {}^g v_2$

   erreichen.

Beweis. Wir betrachten die orthogonale Abbildung $R_g := w \mapsto {}^g w$ auf dem Translationsgitter. In unserem Fall ist das eine Drehung.
Die Drehachse geht natürlich durch den Nullpunkt, aber weil wir mit Translationen verknüpfen können, hat das Translationsgitter natürlich auch Drehsymmetrien mit dem gleichen Winkel und paralleler Drehachse durch jeden anderen Punkt des Gitters.
Wir legen uns das Koordinatensystem so, dass die z-Achse in Richtung der Drehachse zeigt und betrachten einen beliebigen Vektor $v = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ im Translationsgitter, der nicht in Richtung der Drehachse zeigt, d.h. $(x, y) \neq (0, 0)$. Solche Vektoren gibt es, z.B. müssen immer mindestens zwei Vektoren in jeder Basis des Gitters diese Eigenschaft haben. O.B.d.A. können wir sogar annehmen, dass wir das Koordinatensystem so gewählt haben, dass $y = 0$ ist.

Da R das Translationsgitter auf sich selbst abbildet, sind Rv und $R^{-1}v$ wieder Vektoren im Gitter. Wir können explizit beschreiben, was Rv und $R^{-1}v$ sind:

$$Rv = \begin{pmatrix} \cos(\alpha)x \\ \sin(\alpha)x \\ z \end{pmatrix}, R^{-1}v = \begin{pmatrix} \cos(\alpha)x \\ -\sin(\alpha)x \\ z \end{pmatrix}$$

Daraus folgt, dass der Gittervektor $v_2 := Rv + R^{-1}v - 2v$ die Form

$$(R + R^{-1})v - 2v = \begin{pmatrix} (2\cos(\alpha) - 2)x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

hat.

Kann dies der Nullvektor sein? Das geht nur, wenn $2\cos(\alpha) - 2 = 0$, d.h. $\alpha = 0$ ist. Ansonsten haben wir einen von Null verschiedenen Vektor v_2 im Gitter gefunden, der senkrecht zur Drehachse ist.
Wenn wir noch einen zweiten, Vektor v' nehmen, der von v und der Drehachse linear unabhängig ist (z.B. wieder einen Basisvektor), dann können wir auf dieselbe Weise einen von v_2 linear unabhängigen Vektor v_3 finden, der senkrecht zur Drehachse ist. Wenn α nicht zufällig π ist, dann ist Rv_2 auch linear unabhängig von v_2 und senkrecht zur Drehachse.

Wir betrachten also zwei Gitterpunkte $A \neq B$ mit Differenzvektor v_2, die in einer Ebene senkrecht zur Drehachse liegen (z.B. den Nullpunkt und v_2 selbst). Daraus können wir die Punkte A' und B', indem wir die Drehungen anwenden, deren Achsen durch A bzw. B laufen.
Rechnen:

$$B = A + v_2, \qquad B' = A + Rv_2$$

$$A = B - v_2, \qquad A' = B - R^{-1}v_2$$

Die Punkte A',B' sind selbst Gitterpunkte, d.h. ihre Differenz $B' - A' = (A - B) + Rv_2 + R^{-1}v_2 = (R + R^{-1} - 1)v_2$ ist selbst wieder ein Vektor im Translationsgitter. Wir rechnen nach: Wenn $v_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ist, dann ist

$$(R + R^{-1} - 1)v_2 = \begin{pmatrix} (2\cos(\alpha) - 1)x_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

d.h. $(R + R^{-1})v_2 - v_2$ ist ein Vielfaches von v_2. Da beides Gittervektoren sind, ist das nur möglich, wenn es sich um ein *ganzzahliges* Vielfaches handelt, d.h. $2\cos(\alpha) - 1$ muss eine ganze Zahl sein!
Die einzigen möglichen Werte für $\alpha \in [0, \pi]$, die das erfüllen, sind:

α	0	$\frac{2\pi}{6}$	$\frac{2\pi}{4}$	$\frac{2\pi}{3}$	π
$\cos(\alpha)$	1	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	-1
$2\cos(\alpha) - 1$	1	0	-1	-2	-3
$2\cos(\alpha) - 2$	0	-1	-2	-3	-4

Das zeigt schon einmal, dass nicht beliebige Winkelwerte für Drehungen eines Translationsgitters vorkommen können.

Kehren wir zurück zu $v = \begin{pmatrix} x \\ 0 \\ z \end{pmatrix}$ und $v_2 = \begin{pmatrix} (2\cos(\alpha)-2)x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. Aus der Tabelle mit den expliziten Werten lesen wir ab, dass für $k \in \{1, 2, 3, 4\}$ der Gittervektor $v_1 := v_2 + kv = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ kz \end{pmatrix}$ in Richtung der Drehachse liegt. $\square$

3.17: Das schließt also insbesondere auch aus, dass es Kristalle mit Dodekaeder-Symmetrien gibt, denn ansonsten müsste es Drehungen der Ordnung 5 im Translationsgitter geben.

Mehr Einschränkungen gibt es jedoch nicht mehr, d.h. jede der endlichen Drehgruppen, die ausschließlich 2-, 3-, 4- oder 6-zählige Symmetrien hat, kommt tatsächlich in der Symmetriegruppe eines Kristalls vor.
Der hier vorgestellte Beweis verallgemeinert sich nicht auf höhere Dimensionen. Je höher die Dimension ist, desto höher kann die Ordnung der vorkommenden Drehungen sein. Beispielsweise hat das n-dimensionale Würfelgitter $\mathbb{Z}^n$ eine Symmetrie der Ordnung $n+1$.

3.18 Beispiel: a.) Der Kristall $\mathbb{Z}^3 \subseteq \mathbb{R}^3$ hat die Würfelgruppe in seiner Symmetriegruppe. Also besitzt er sowohl 3- als auch 4-zählige Drehsymmetrien. Wenn es eine 4-zählige Drehung gibt, gibt es auch eine 2-zählige.

b.) Der Kristall $(\mathbb{Z} + (\frac{1+\sqrt{3}i}{2})\mathbb{Z}) \times \mathbb{Z} \subseteq \mathbb{C} \times \mathbb{R} = \mathbb{R}^3$ (Honigwaben) hat eine 6-zählige Drehsymmetrie.

3.19: Wenn wir linear unabhängige Vektoren $v_1, v_2, v_3 \in Trans(\Lambda)$ gefunden haben, z.B. mit Hilfe der obigen Konstruktion, dann ist $T_0 := \mathbb{Z}v_1 + \mathbb{Z}v_2 + \mathbb{Z}v_3 \leq Trans(\Lambda)$ ein Untergitter, das ggf. weniger Gitterpunkte enthält und eine größere Basiszelle hat. Die so konstruierte Basiszelle ist vielleicht größer als sie sein müsste, kann aber den Vorteil haben, geometrisch einfacher zu sein als eine Basiszelle von $Trans(\Lambda)$ selbst, z.B. ist in der Situation des obigen Satzes v_2 und v_3 senkrecht auf v_1. Es muss keine Basis von $Trans(\Lambda)$ geben, die diese Eigenschaft besitzt.