Kristallographie

Johannes Hahn Andrea Hanke

19. Mai 2019

1 Gruppentheorie

1.1 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.

1.2 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.) 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:

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

b.) 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.

c.) 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.

d.) 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:

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

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

1.3 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: $\mathbb{Q} \setminus \{0\}, \mathbb{R} \setminus \{0\}, \mathbb{C} \setminus \{0\}$ 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).

1.4 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 $Isom(\mathbb{R}^n)$. Eine Spiegelung ist nicht orientierungserhaltend, eine Drehung schon.

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

2 Kristalle

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

a.) ... Translationssymmetrie hat, d.h. es gibt Vektoren $t_1, t_2, t_3 \in \mathbb{R}^3$ in drei unabhängige Richtungen, sodass immer, wenn $x \in \Lambda$ ein Punkt im Kristall ist, $x + k_1t_1 + k_2t_2 + k_3t_3$ auch ein Punkt im Kristall ist für alle ganzen Zahlen $k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}$.

b.) ... 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: $x \neq y \implies \|x - y\| \geq \delta$.

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

2.3 Definition:
Die Symmetriegruppe 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 $\mathrm{Aut}(\Lambda)$.

2.4 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.

2.5: Weil die Punkte in Λ einen Mindestabstand haben, ist die Translationsuntergruppe diskret, d.h. sie enthält eine Basis: Drei Translationen $\tau_1, \tau_2, \tau_3 \in \mathrm{Aut}(\Lambda)$, sodass sich jede beliebige Translation $\tau \in \mathrm{Aut}(\Lambda)$ auf eindeutige Weise als $\tau_1^{k_1} \circ \tau_2^{k_2} \circ \tau_3^{k_3}$ mit $k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}$ schreiben lässt.
Die Translationsuntergruppe ist also zur Gruppe $(\mathbb{Z}^3, +)$ isomorph.

2.6 Beispiel:
Umgekehrt: Wenn $v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{R}^3$ drei beliebige, linear unabhängige Vektoren sind, dann ist $\Lambda := \mathbb{Z}v_1 + \mathbb{Z}v_2 + \mathbb{Z}v_3 = \{ k_1v_1 + k_2v_2 + k_3v_3 \mid k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z} \}$ ein Gitter, dessen Translationsuntergruppe die drei Translationen $\tau_i := x \mapsto x + v_i$ als (eine mögliche von vielen) Basis hat.

2.7 Definition:
Es sei Λ ein Kristallgitter und T 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. $\Lambda = \bigcup_{t \in T} t(M)$.

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

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

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

2.8: Da Z kompakt ist und die Punkte in Λ einen Mindestabstand haben, muss $M = Z \cap \Lambda$ endlich sein.