Kristallographie

Johannes Hahn   Andrea Hanke

15. Juli 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 im $\mathbb{R}^3$: 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 $\mathrm{id} : x \mapsto x$. Das ist gleichzeitig die Translation um die Distanz 0 (in jede Richtung) und 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.

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

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 das Skalarprodukt von Vektoren und Winkel zwischen Vektoren.

Beweis. a. Sei zunächst $0 \leq \lambda \leq 1$. Der Punkt $\lambda p_1 + (1-\lambda)p_0 = p_0 + \lambda(p_1 - p_0) = p_1 - (1-\lambda)(p_1 - p_0)$ ist genau derjenige Punkt, der genau Abstand $\lambda\|p_1 - p_0\|$ von p_0 und $(1-\lambda)\|p_1 - p_0\|$ von p_1 hat und es gibt nur einen solchen Punkt. Daher ist $f(\lambda p_1 + (1-\lambda)p_0)$ genau derjenige Punkt, der den Abstand $\lambda\|p_1 - p_0\| = \lambda\|f(p_1) - f(p_0)\|$ von $f(p_0)$ und den Abstand $(1-\lambda)\|p_1 - p_0\| = (1-\lambda)\|f(p_1) - f(p_0)\|$ von $f(p_1)$ hat. Weil es nur einen solchen Punkt gibt, muss $f(\lambda p_1 + (1-\lambda)p_0) = \lambda f(p_0) + (1-\lambda) f(p_1)$ sein.
Im allgemeinen Fall liegen die drei Punkte p_0, p_1 und $p_\lambda := \lambda p_1 + (1-\lambda)p_0$ ja auf einer gemeinsamen Geraden. Es gibt also immer einen, der zwischen den anderen zweien positioniert ist. Wenn das z.B. p_0 ist, dann gibt es eine Gleichung der Form $p_0 = \alpha p_\lambda + (1-\alpha)p_1$ mit $\alpha \in [0,1]$ (Übung: Man berechne α aus λ und umgekehrt). Wenn p_1 zwischen p_0 und p_λ liegt, gibt es analog eine Gleichung der Form $p_1 = \beta p_\lambda + (1-\beta)p_1$ mit $\beta \in [0,1]$. In beiden Fällen folgt aus dem schon bewiesenen auch die gleiche Gleichung für $f(p_0)$, $f(p_1)$ und $f(p_\lambda)$.

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 $\cos(\sphericalangle(v_1, v_2)) = \frac{\langle v_1, v_2 \rangle}{\|v_1\| \cdot \|v_2\|}$. □

Tabelle 1.1: Symbolnotationen für Bewegungen ohne Translationsanteil

Symbol	Hermann-Maguin-Symbol	Symmetrien	Gruppenordnung
	$\overline{1}$	Inversion	1
	2	2-zählige Drehung	1
	3	3-zählige Drehung	3
	4	4-zählige Drehung	4
	6	6-zählige Drehung	6
	$m \quad (= \overline{2})$	Ebenenspiegelung	2
	$\overline{3}$ „drei quer“	3-zählige Drehinversion	6
	$\overline{4}$ „vier quer“	4-zählige Drehinversion	4
	$\overline{6}$ „sechs quer“	6-zählige Drehinversion	6
	$\frac{2}{m}$ „zwei über m“	Spiegelung & 2-zählige Drehung um Spiegelebenennormale	4
	$\frac{3}{m} = \overline{6}$ „drei über m“	Spiegelung & 3-zählige Drehung um Spiegelebenennormale	6

Tabelle 1.2: Symbolnotationen für Bewegungen mit Translationsanteil

Symbol	Hermann-Maguin-Symbol	Symmetrien mit Translation um t	Ordnung der induzierten Punktgruppe
	2_1	2-zählige Schraubung, $t = \frac{1}{2}$	2
	$3_1 \quad 3_2$	3-zählige Schraubung, $t = \frac{1}{3}, t = \frac{2}{3}$	3
	$4_1 \quad 4_2$ 4_3	4-zählige Schraubung, $t = \frac{1}{4}, t = \frac{2}{4}, t = \frac{3}{4}$	4
	$6_1 \quad 6_2$ $6_3 \quad 6_4$ 6_5	6-zählige Schraubung, $t = \frac{1}{6}, t = \frac{2}{6}, t = \frac{3}{6}$, $t = \frac{4}{6}, t = \frac{5}{6}$	6
$\rightarrow$	a, b, c, n, d	Gleitspiegelung, $t = \frac{1}{2}\mathbf{a}, t = \frac{1}{2}\mathbf{b}, t = \frac{1}{2}\mathbf{c}, t = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\tau_1} + \boldsymbol{\tau_2}), t = \frac{1}{4}(\boldsymbol{\tau_1} + \boldsymbol{\tau_2})$	2, 4

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:

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

1.1 Klassifikation der Bewegungen

1.6 Lemma (Reduktion von beliebigen auf orthogonale Bewegungen)**:**
Haben wir einen Nullpunkt gewählt, dann ist ein beliebiges $f \in \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$ eine orthogonale Abbildung gefolgt von einer Translation (mglw. um den Abstand 0).

Beweis. Ist $f(0) =: v$, dann betrachten wir die Translation τ_v. Dann ist nämlich $(\tau_v^{-1} \circ f)(0) = 0$, also ist $f = \tau_v \circ (\tau_v^{-1} \circ f)$ eine Komposition aus der orthogonalen Abbildung $\tau_v^{-1} \circ f$ gefolgt von der Translation τ_v. □

1.7 Satz (Klassifikation von Bewegungen in kleinen Dimensionen)**:**
Alle orthogonalen Abbildungen des

a.) $\mathbb{R}^1$ sind die Identität oder Spiegelung im Nullpunkt.

b.) $\mathbb{R}^2$ sind Drehungen (ggf. um den Winkel 0) um den Nullpunkt oder Spiegelungen an Geraden durch den Nullpunkt.

c.) $\mathbb{R}^3$ sind Drehungen oder Drehinversionen (ggf. um den Drehwinkel 0) um eine Achse durch den Nullpunkt oder Ebenenspiegelungen an Ebenen durch den Nullpunkt.

Allgemeiner: Alle Bewegungen des

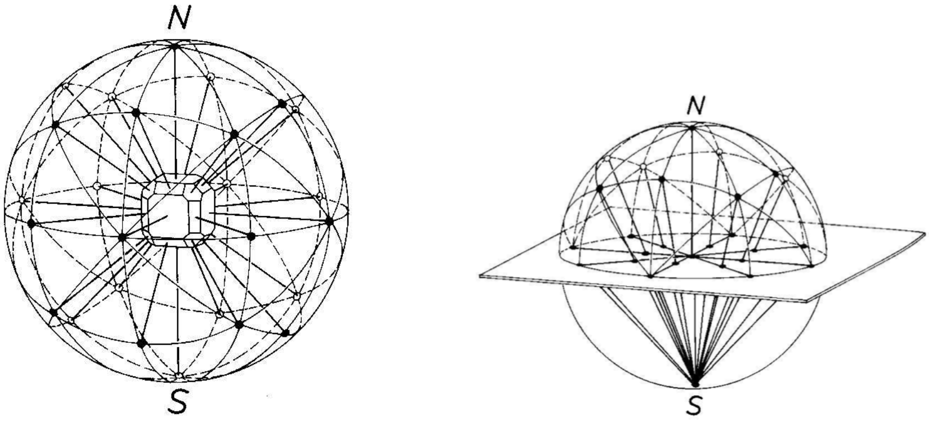
a.) $\mathbb{R}^1$ sind Translationen oder Spiegelungen.

b.) $\mathbb{R}^2$ sind Drehungen (ggf. um den Drehwinkel 0) oder Geradenspiegelungen gefolgt von einer Translation (ggf. um den Abstand 0).

c.) $\mathbb{R}^3$ sind Drehungen oder Drehinversionen (ggf. um den Drehwinkel 0) oder Ebenenspiegelungen gefolgt von einer Translation (ggf. um den Abstand 0).

1.2 Stereografische Projektion

Mittels der stereografischen Projektion werden alle Punkte auf der Kugeloberfläche von S^3 bis auf dem Südpol als Punkte auf einer Ebene dargestellt. Wir nutzen sie, um Orientierungen von Vektoren im dreidimensionalen Raum zueinander im zweidimensionalen Raum darzustellen. Diese Vektoren können verschiedenes symbolisieren, bei uns meist die Orientierung von Drehachsen und Flächennormalen von konvexen Körpern.
Dazu nutzen wir eine Kugel mit Oberfläche S^2, Mittelpunkt m, Nordpol N, Südpol S und Äquatorebene A. Die Vektoren, die wir darstellen wollen, verlängern wir zu von m ausgehenden Halbgeraden, die S^2 in einem Schnittpunkt p schneiden. Jeder dieser



(a) Schnittpunkte der Flächennormalen auf S^2 (b) Projektion auf die Äquatorebene

Abbildung 1.1: Stereografische Projektion eines konvexen Körpers

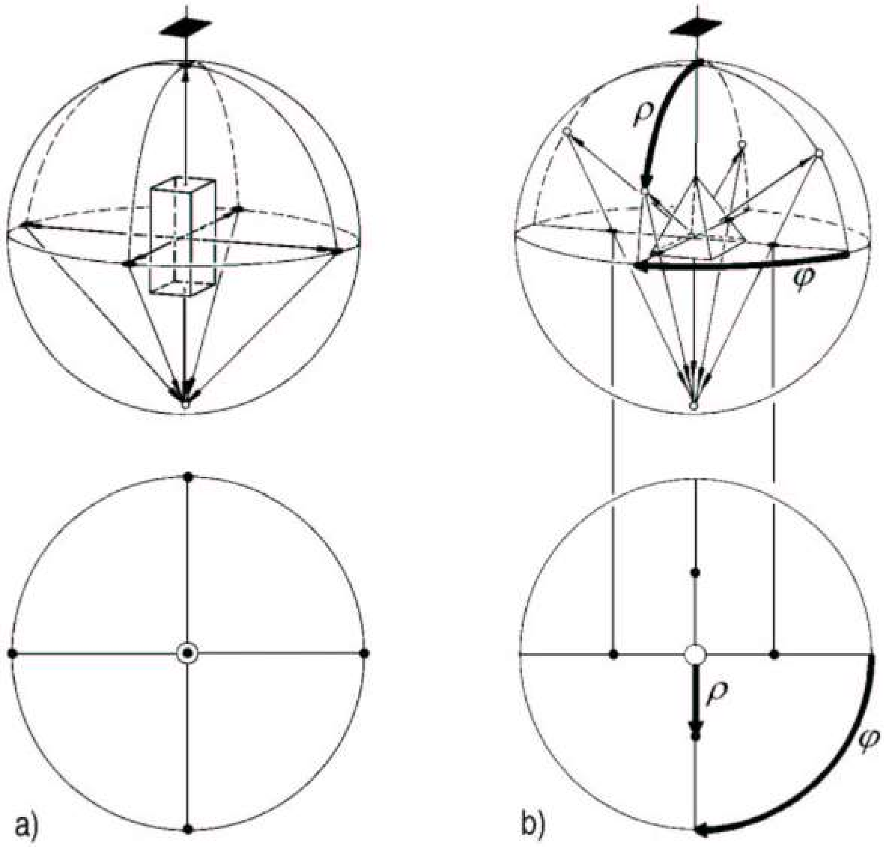
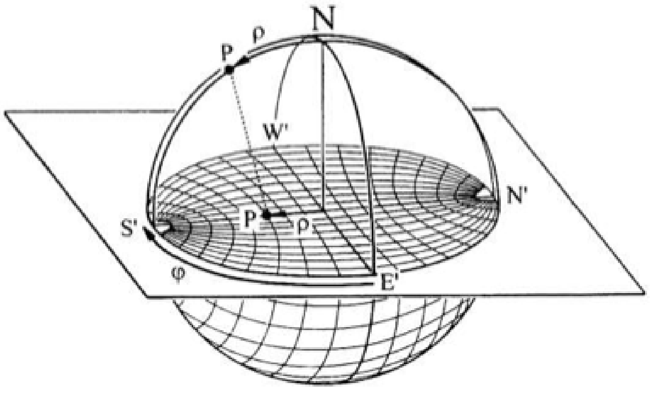
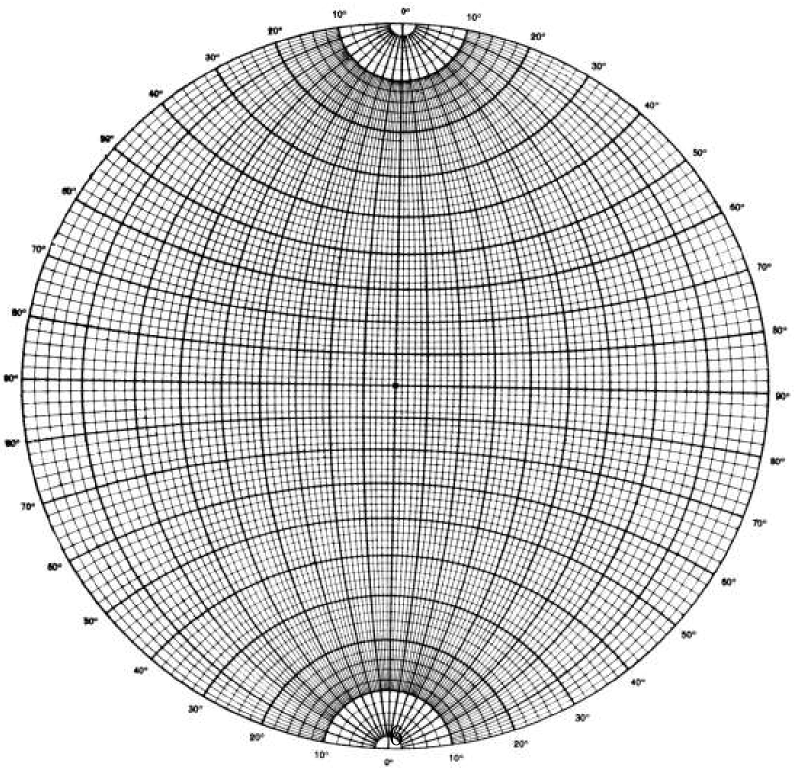


Abbildung 1.2: Stereografische Projektion verschiedener Körper



(a) Lage der Winkel ϕ und ρ



(b) Das Wulffsche Netz

Abbildung 1.3: Orientierung ablesen mit dem Wulffschen Netz

Schnittpunkte p wird mit einer Geraden mit dem Südpol der Kugel verbunden. Der Schnittpunkt a einer solchen Geraden mit der Äquatorebene ist die Projektion des Vektors. Diese Stereografische Projektion ist winkelerhaltend (aber nicht abstandserhaltend) und eignet sich daher, Orientierungen (aber keine Tranlationen) in 3D auf einem (unendlich großen) Stück Papier darzustellen. Man beachte, dass bei dieser Konstruktion alle Punkte auf der Nordhalbkugel innerhalb des Äquatorkreises projiziert werden, der Äquator auf sich selbst abgebildet wird und alle Punkte der Südhalbkugel außerhalb des Äquators landen.
Eine in der Kristallographie oft verwendete Variation der stereografischen Projektion ist die folgende: Alle Punkte der Nordhalbkugel werden mit dem Südpol verbunden und die Schnittpunkte werden mit einem Kreuz gekennzeichnet. Alle Punkte der Südhalbkugel werden hingegen mit dem Nordpol verbunden und die Schnittpunkte werden mit einem Kreis gekennzeichnet. Dadurch braucht es nur noch ein endlich großes Stück Papier (nämlich genau die Fläche, die durch den Äquator eingeschlossen wird). Oft wird diese (kristallographische) stereografische Projektion benutzt, um 3-dimensionale konvexe Körper darzustellen. Dazu werden die Normalenvektoren aller Flächen vom Körper wie oben beschrieben projiziert. Man kann sich auch vorstellen, dass der Mittelpunkt des konvexen Körpers auf dem Mittelpunkt m der Kugel sitzt und dann die Flächennormalen verlängern, bis sie S^2 durchstoßen. Aber Achtung: Der Ursprung der projizierten Flächennormalen des konvexen Körpers ist nicht frei wählbar - er muss mit dem Schnittpunkt der entsprechenden Halbgeraden von m aus übereinstimmen. Insbesondere liegt der Ursprung oft, aber nicht notwendigerweise auf dem Flächenmittelpunkt.
Nebst der Transportabilität einer solch erhaltenen Projektion (man beachte das Gewicht eines unendlich großen Blatt Papiers), hat diese Variation der stereografischen Projektion auch den Vorteil, dass Spiegelungen am Äquator sowie die Inversion am Kugelmittelpunkt sehr leicht erkennbar sind. Der Nachteil ist, dass Drehungen, die nicht senkrecht zur Äquatorebene stehen (oder bei 2-zähligen Drehungen ⬮ auch in Äquatorebene liegen) deutlich schwieriger auszuführen sind. Wie wir im Folgenden noch sehen werden, stört uns dieser Nachteil aber fast nie, da für kristallographische Anwendungen die möglichen Orientierungen sehr eingeschränkt sind.

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:

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

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.
Wenn aus dem Kontext klar ist, welche Verknüpfung $\circ$ sein soll, oder wenn die Verknüpfung einer generischen Gruppe gemeint ist, schreibt man sie meistens als Multiplikation, d.h. man schreibt $g \cdot h$ oder gar gh anstelle von $g \circ h$.

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 im jeweiligen Kontext relevanten Transformationen umfasst, welche X nicht verändern. 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 ohne geometrische oder irgendeine andere Struktur, dann bezeichnet man mit $\mathrm{Sym}(X)$ die symmetrische Gruppe auf/von X. Dass die Menge unstrukturiert ist, bedeutet, dass wir einfach *alle* Abbildungen $X \to X$ betrachten, 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 zwnagsweise invertierbar sind)

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 Gruppen, die gar keine Symmetrien geometrischer Objekte 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 Definition (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. Wir schreiben für diesen Sachverhalt $U \leq G$, um deutlich zu machen, dass es sich nicht um eine beliebige Teilmenge handelt, sondern um eine Untergruppe.

2.5 Beispiel:
Dies tritt häufig auf, wenn wir nicht alle Symmetrien eines Objekts betrachten, sondern nur Symmetrien eines bestimmten Typs.

a.) Die orientierungserhaltenden Bewegungen (d.h. solche, die Rechtssysteme wieder auf Rechtssysteme abbilden) $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 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 $\mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$.

c.) Haben wir einen Nullpunkt gewählt, dann sind die orthogonalen Abbildungen eine Untergruppe von $\mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$.

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

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

für ein $g \in G$ 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 $|G : U| = \frac{|G|}{|U|}$.

2.7 Beispiel: a.) Wir fixieren einen Nullpunkt und betrachten $G = \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$ und $U = O(\mathbb{R}^n)$. Wenn wir einen Punkt $y \in \mathbb{R}^n$ haben, dann ist

$$\{ h \in G \mid h(0) = y \}$$

eine Nebenklasse von U. Es gibt immer mindestens eine Bewegung, die 0 auf y abbildet, nämlich die Translation τ_y. Ist g irgendeine Bewegung mit $g(0) = y$, dann gilt

$$h(x) = y \iff g^{-1}(h(0)) = g^{-1}(y) = 0 \iff g^{-1}h \in U \iff h = g(g^{-1}h) \in gU$$

also ist $\{ h \in G \mid h(x) = y \} = gU$.

b.) Sei $G = \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$ und $U = \mathrm{Isom}_0(\mathbb{R}^n)$ die Untergruppe aller orientierungserhaltenden Bewegungen. Dann ist die Menge aller orientierungs*umkehrenden* Bewegungen eine Nebenklasse von 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. Wenn sie disjunkt sind, dann sind wir schon fertig. Wenn gU und hU nicht disjunkt sind, 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 wir 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 $|G| = |U| + |U| + \cdots + |U| = k|U| = |G : U||U|$. $\square$

2.8 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.

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

2.10: 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 $\mathrm{kgV}(3, 5) = 15$ teilbare Ordnung (oder ∞) haben muss.

2.1 Gruppenoperationen

2.11 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:

a.) $\forall x \in X : {}^1x = x$

b.) $\forall g, h \in G \forall x \in X : {}^g({}^hx) = {}^{g \circ h}x$

2.12 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.

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

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.

2.13 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.

2.14 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

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

eine Operation.

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

a.) $\tau_1 = \mathrm{id}_X$ und $\tau_{gh} = \tau_g \circ \tau_h$.

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

2.16 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.
Die Teilmenge

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

von G nennt man Stabilisator von x.

2.17 Satz (Bahn-Stabilisator-Theorem)**:**
Operiert G auf X und ist $x \in X$ beliebig, dann gilt:

a.) $G_x \leq G$.

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

2.18: 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 alle Elemente der (vielleicht sehr großen) Gruppe G komplett durchprobieren und jeweils ${}^{g}x$ berechnen.
Es genügt, sich über die (meistens deutlich weniger) 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 $y \in {}^Gx$ ein beliebiges Element in der Bahn. Warum tritt es mindestens einmal als Output der Zuordnung auf? Weil ein Element der Bahn die Gestalt $y = {}^gx$ 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 ${}^gx = {}^hx$, 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. $\square$

2.19 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 ${}^gx$ 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 ${}^Gx = |G : \{1\}| = |G|$ 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.

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

$$X/G := \left\{ {}^Gx \;\middle|\; x \in X \right\}$$

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

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

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 $\mathrm{Isom}(\mathbb{R}^0)$.

2.21 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.

2.22 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 $n \in \mathbb{N}_{\geq 1}$, 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.

2.23 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 eine 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 $0, \frac{2\pi}{n}, \frac{2}{n}2\pi, \ldots, \frac{(n-1)}{n}2\pi$ besteht.

b.) Diedergruppen, von Rotationen erzeugt: Es gibt 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 $S^2 := \{\, x \in \mathbb{R}^3 \mid \|x\| = 1 \,\}$. Wir betrachten darin die Menge

$$\Omega := \{\, x \in S^2 \mid \exists g \in G \setminus \{\, 1 \,\} : g(x) = x \,\}$$

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 $g \in G \setminus \{\, 1 \,\}$ 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, $p_1, \dots, p_r$ je ein Punkt aus jeder Bahn und $a_i := |G_{p_i}|$ die Größe der dazugehörigen Stabilisatoren. Aufgrund des Satzes von Burnside gilt also:

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

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. $\square$

2.24: 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.

2.25: *Nicht* jede dieser Gruppen kommt auch in den Symmetrien eines dreidimensionalen Kristalls vor, z.B. gibt es keine dreidimensionalen 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.
(Es gibt aber durchaus vierdimensionale Kristalle mit Ikosaedersymmetrien und sechsdimensionale Kristalle mit siebenzähligen Drehsymmetrien etc.)

3 Kristalle

3.1 Definition (Kristalle)**:**
Ein Kristall ist eine Punktmenge $\emptyset \neq \Lambda \subseteq \mathbb{R}^3$ (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 Kristall 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 impliziert 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, ist 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 (Basiszellen und Motive)**:**
Es sei Λ ein Kristall. Wählen wir drei unabhängige $v_1, v_2, v_3 \in Trans(\Lambda)$ und einen Basispunkt $a \in \mathbb{R}^n$, dann nennt man den Parallelepiped

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

eine Basiszelle von Λ und die Menge $M := Z \cap \Lambda$ man Motiv des Kristalls.
Eine Basiszelle, in der Z das kleinstmöglichen Volumen hat, heißt elementare Basiszelle des Gitters.

3.7: Z heißt *Basis*zelle, weil die Kantenvektoren v_1, v_2, v_3 eine Basis von $\mathbb{R}^3$ bilden, da sie linear unabhängig sind.
ACHTUNG: Sie müssen keine Basis von $Trans(\Lambda)$ bilden, z.B. könnten wir im kubischen Gitter $\mathbb{Z}^3$ ja die Vektoren $2e_1, 3e_2, 5e_3$ betrachten. Sie sind linear unabhängig, aber kein Erzeugendensystem von $\mathbb{Z}^3$, weil z.B. $e_1+e_2+e_3$ nicht als ganzzahlige Linearkombination von $2e_1, 3e_2$ und $5e_3$ darstellbar ist.
Die Vektoren v_1, v_2, v_3 bilden eine Basis von $Trans(\Lambda)$ dann und nur dann, wenn die Basiszelle elementar ist.

3.8 (Von Basiszellen zurück zu Kristallen)**:** Hat man umgekehrt einen Parallelepiped

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

zusammen mit einem irgendeinem Motiv $M \subseteq Z$, dann 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 als Basiszelle (und M als Motiv), 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. Das hängt vom Motiv ab.

3.9: Da es unendlich viele Basiszellen gibt und die meisten (vielleicht sogar alle) davon furchtbar schiefwinklig sind, kann man i.A. wenig Aussagen über die Symmetrie des Kristalls treffen, wenn man nur eine beliebige Basiszelle und das Motiv kennt.
Es ist daher wünschenswert, sich möglichst hübsche Basiszellen zu besorgen. Die müssen aber gar nicht existieren; es könnte sein, dass alle Basiszellen hässlich sind. Kristalle werden anhand ihrer Symmetrien in Kristallklassen und Kristallsysteme eingeordnet, die auch charakterisieren, was wir bestenfalls von einer Basiszelle erwarten können.

3.1 Punktgruppen, Kristallklassen und Kristallsysteme

3.1.1 Punktgruppen

3.10 Definition (Punktgruppen)**:**
Sei $G \leq \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$ eine Gruppe von Bewegungen. Wenn es ein $x \in \mathbb{R}^n$ gibt, das ein Fixpunkt von G ist, d.h.

$$\forall g \in G : g(x) = x$$

dann nennt man G eine Punktgruppe. Ist zusätzlich auch $G \leq \mathrm{Aut}(\Lambda)$ erfüllt für einen Kristall $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^n$, dann nennt man G eine kristallographische Punktgruppe.

3.11 Lemma (Punktgruppen vs. endliche Untergruppen)**:**
Sei $G \leq \mathrm{Isom}(\mathbb{R}^n)$ eine Gruppe von Bewegungen.

a.) Ist G endlich, dann ist G eine Punktgruppe.

b.) Ist G kristallographisch, dann ist G endlich.

Beweis. a. Wir haben das eigentlich schon einmal bewiesen: Wenn x ein beliebiger Punkt und G endlich ist, dann ist

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

ein Fixpunkt von ganz G.

b. Wir wählen uns ein Koordinatensystem so, dass der Nullpunkt ein Fixpunkt 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 0 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 $g \in \mathrm{Aut}(\Lambda)$ und $g(0) = 0$, so sind die drei Punkte $g(a_1), g(a_2), g(a_3)$ wieder aus X. Weil a_1, a_2, a_3 linear unabhängig sind und g als orthogonale Abbildung linear ist, ist g eindeutig festgelegt durch diese drei Bildpunkte. Es gibt also maximal $|X|^3$ viele Elemente von G. □

3.12: Nicht jede endliche Punktgruppe ist auch eine kristallographische Gruppe. Wir werden gleich z.B. sehen, dass die Ikosaedergruppe zwar endlich, aber nicht kristallographisch ist.

3.1.2 Kristallklassen und Kristallsysteme

3.13: Wir wissen, dass es nur eine sehr begrenzte Anzahl von (Konjugationsklassen von) endlichen Untergruppen von $O(\mathbb{R}^3)$ gibt und wir haben eine Liste, die wir gut verstehen. In der Tat gibt es in jeder Dimension immer nur endlich viele endliche Untergruppen von $O(\mathbb{R}^n)$.
Es bietet sich daher an, Kristalle danach zu klassifizieren, welche Punktgruppen sie haben. Naiv könnte man einfach die Punktgruppe $\mathrm{Aut}(\Lambda)_0$ betrachten, d.h. die Untergruppe aller derjenigen Symmetrien $g \in \mathrm{Aut}(\Lambda)$, die $g(0) = 0$ erfüllen. Das Problem dabei ist, dass es außer der Identität überhaupt keine Symmetrien im Kristall geben muss, die den Nullpunkt festlassen. Der Nullpunkt könnte schlecht gewählt sein relativ zum Kristall, sodass er von keiner der möglichen, von id verschiedenen Drehung, keiner Spiegelung oder Drehinversion festgelassen wird (was ja die einzigen Bewegungen sind, die überhaupt Fixpunkte haben).
Und selbst wenn das nicht der Fall ist, könnte es sein, dass gar keine von id verschiedenen Drehungen, Spiegelungen oder Drehinversionen in $\mathrm{Aut}(\Lambda)$ existieren; jede Symmetrie könnte eine Translation, eine Schraubung oder Gleitspiegelung sein. Dann hätten wir keine Information gewonnen und würden viele sehr verschieden aussehende Kristalle in eine gemeinsame Kategorie „triviale Punktgruppe“ einordnen.
Wenn wir das nicht wollen (und das wollen wir nicht), müssen wir uns überlegen, wie wir Symmetrien erfassen, die einen Translationsanteil $\neq 0$ haben, aber nicht gleich einer Translation sind, und wir den translationsfreien Anteil zweier solcher Symmetrien unterscheiden. Es stellt sich heraus, dass es eine andere, vom Kristall bestimmte Punktgruppe gibt, die das für uns tut.

3.14: Wir erinnern uns, dass jede Bewegung $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ sich nach Wahl eines Nullpunkts schreiben lässt als Anwendung einer orthogonalen Bewegung Q gefolgt von einer Translation τ_v, d.h.

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

3.15 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 wie eben $g(x) = Q(x) + v$ ist.

Beweis. Zunächst müssen wir beweisen, dass ${}^g\tau_w = g \circ \tau_w \circ g^{-1}$ wieder eine Translation ist.

Was für eine Bewegung ist das? Es gilt für alle Punkte $x \in \mathbb{R}^n$:

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

D.h. $g \circ \tau_w \circ g^{-1} = \tau_{Q(w)}$ ist wieder eine Translation.

Nun müssen wir nachweisen, dass dies wirklich eine Operation ist. Es gilt

$$1 \circ \tau_w \circ 1^{-1} = \tau_w \circ 1 = \tau_w$$

also ${}^1w = w$ und

$$g \circ (h \circ \tau_w \circ h^{-1}) \circ g^{-1} = (g \circ h) \circ \tau_w \circ (h^{-1} \circ g^{-1}) = (g \circ h) \circ \tau_w \circ (g \circ h)^{-1}$$

also ${}^g({}^hw) = {}^{g\circ h}w$. Das sind genau die Bedingungen, die wir brauchen. □

3.16: Man beachte, dass bzgl. dieser Operation die Translationen und nur die Translationen trivial operieren, d.h. von jedem $g \in G$ ist nur der translationsfreie Anteil (das Q) relevant.
Das vereinfacht die Art der vorkommenden Symmetrien drastisch: Wenn $g \in \mathrm{Aut}(\Lambda)$ eine Schraubung um Winkel α ist, dann ist die Symmetrie $R_g : w \mapsto {}^gw$ des Translationsgitters nur noch eine Drehung um Winkel α. Analog ist R_s eine Spiegelung, wenn s eine (Gleit)spiegelungen war.

3.17 Korollar:
Sei $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Kristall. Die Gruppe $\{ R_g \mid g \in G \}$ ist eine kristallographische Punktgruppe. Insbesondere ist sie endlich.

Beweis. Alle R_g sind orthogonal. Insbesondere fixieren sie alle den Nullvektor. Also ist es eine Punktgruppe. Sie ist eine Untergruppe von $\mathrm{Aut}(Trans(\Lambda))$, also eine kristallographische Punktgruppe. □

3.18: Sofern die Übungsaufgaben zu Normalteilern und Quotienten bearbeitet wurden: Die Translationsuntergruppe ist ein Normalteiler (da – wie eben bewiesen – konjugieren mit beliebigen $g \in G$ aus Translationen wieder Translationen macht). Es ist also wohldefiniert, von der Quotientengruppe $\mathrm{Aut}(\Lambda)/Trans(\Lambda)$ zu sprechen.
Die Punktgruppe $\{ R_g \mid g \in G \}$ ist kanonisch isomorph zu diesem Quotienten.

3.19 (Geometrische Interpretation – Operation auf dem 3-Torus)**:** Wir wählen uns eine elementare Basiszelle Z des Kristalls Λ. Eine Möglichkeit, die Punktgruppe $\{ R_g \mid g \in G \}$ geometrisch zu interpretieren ist folgende:
Wenn wir in Z die obere mit der unteren, die rechte mit der linken und die vordere mit der hinteren Seitenfläche verkleben, erhalten wir einen sogenannten 3-Torus T. Man stelle sich das wie gewisse einfache Computerspiele vor: Wenn man am rechten Rand hinausläuft, kommt man sofort am linken Rand wieder rein ins „Spielfeld“ usw.

R_g kann nun auch aufgefasst werden als eine Bewegung $T \to T$, nämlich die folgende: Für einen Input-Punkt $x \in T$ ist $R_g(x)$ derjenige Punkt, der wie folgt entsteht:

a.) Zunächst fassen wir $x \in T$ als Punkt $\hat{x} \in Z$ auf.

b.) Dann wenden wir g auf diesen Punkt an.

c.) Das Ergebnis $g(\hat{x})$ liegt in irgendeiner Zelle Z', die eine translatierte Kopie $Z' = \tau(Z)$ der Basiszelle ist (möglicherweise mit einer Verschiebung um 0, d.h. $\tau = \mathrm{id}$). Wir machen die Translation τ rückgängig und erhalten wieder einen Punkt in $\hat{y} = \tau^{-1}(g(\hat{x})) \in Z$.

d.) Diesen fassen wir wieder als Punkt $y \in T$ im 3-Torus auf. Das ist dann unser Output-Punkt: $y = R_g(x)$.

Man beachte, dass diese Symmetrien $T \to T$ nicht analog zu den Symmetrien $Trans(\Lambda) \to Trans(\Lambda)$ sein müssen. Ist etwa g eine Schraubung oder eine Drehung, so ist $R_g : Trans(\Lambda) \to Trans(\Lambda)$ in beiden Fällen eine Drehung. Hingegen operieren Schraubungen und Drehungen nicht identisch auf T.
Dies ist also ein weiteres Beispiel dafür, dass dieselbe Gruppe nicht nur auf eine Weise als Symmetriegruppe auftreten kann. Dieselbe Gruppe (hier $\mathrm{Aut}(\Lambda)/Trans(\Lambda)$) kann auf verschiedenen Objekten (hier etwa: Dem Translationsgitter und dem 3-Torus) auf völlig verschiedene Arten operieren.

3.20 Definition (Kristallklassen)**:**
Wir sagen, dass zwei Kristalle $\Lambda, \Lambda' \subseteq \mathbb{R}^n$ in derselben Kristallklasse sind, wenn die beiden Punktgruppen

$$\{ R_g \mid g \in \mathrm{Aut}(\Lambda) \}$$

und

$$\left\{ R_g \;\middle|\; g \in \mathrm{Aut}(\Lambda') \right\}$$

in $O(\mathbb{R}^n)$ konjugiert sind.

3.21: Es gibt möglicherweise sehr viele Kristallklassen in einer Dimension. Und trotzdem sehen Kristalle in verschiedene Kristallklassen manchmal sehr ähnlich aus.
Deshalb möchten wir zusätzlich zur Einteilung in Kristallklassen die Kristalle etwas gröber einteilen und zwar nach der Form der möglichen Basiszellen des Kristalls.

3.22 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 $\mathrm{Aut}(T)_0$ 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 die Punktgruppe $\{ R_g \mid g \in \mathrm{Aut}(\Lambda) \}$ eine Untergruppe von G_i ist, aber nicht von einem kleineren G_j.

3.1.3 Klassifikation der dreidimensionalen Kristallsysteme

3.23: Unser Ziel ist es jetzt, die dreidimensionalen Kristallsysteme zu klassifizieren. Laut Definition müssen wir also die Punktgruppen aller Translationsgitter bestimmen.

3.24 Satz und Definition (Klassifikation der dreidimensionalen 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 ...

a.) Triklin: ... der Inversion.

b.) Monoklin: ... der Inversion und einer 2-zähligen Drehung.

Jeder monokline Kristall besitzt eine Basiszelle, in denen eine Basisrichtung eine zweizählige Symmetrieachse ist (d.h. der Kristall hat eine 180°-Drehung, -Drehinversion oder -Schraubung um diese Achse) und die anderen beiden Basisrichtungen senkrecht auf ihr stehen.

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

Jeder orthorhombische Kristall besitzt eine Basiszelle mit drei rechten Winkeln, in der alle drei Basisrichtungen zweizählige Symmetrieachsen sind.

d.) Trigonal: ... der Inversion, einer 2- und einer 3-zähligen Drehung um zueinander senkrechte Achsen.

Jeder trigonale Kristall besitzt eine Basiszelle, in der die Winkel 90°, 90° und 120° sind, eine Basisrichtung eine dreizählige Symmetriachse ist und die anderen beiden zweizählige Symmetrieachsen.

e.) Tetragonal: ... der Inversion, einer 2- und einer 4-zähligen Drehung um zueinander senkrechte Achsen.

Jeder tetragonale Kristall besitzt eine Basiszelle mit drei rechten Winkeln, in der eine Basisrichtung eine vierzählige und die anderen beiden zweizählige Symmetrieachsen sind.

f.) Hexagonal: ... der Inversion, einer 2- und einer 6-zähligen Drehung um zueinander senkrechte Achsen.

Jeder hexagonal Kristall besitzt eine Basiszelle, in der die Winkel 90°, 90° und 120° sind, eine Basisrichtung eine sechszählige Symmetriachse ist und die anderen beiden zweizählige Symmetrieachsen.

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

Jeder kubische Kristall besitzt eine würfelförmige Basiszelle, in der durch alle drei Basisrichtungen vierzählige Symmetrieachsen laufen und durch alle vier Raumdiagonalen jeweils dreizählige Symmetrieachsen.

Diese Gruppen sind ineinander enthalten wie in Diagramm ?? angegeben.

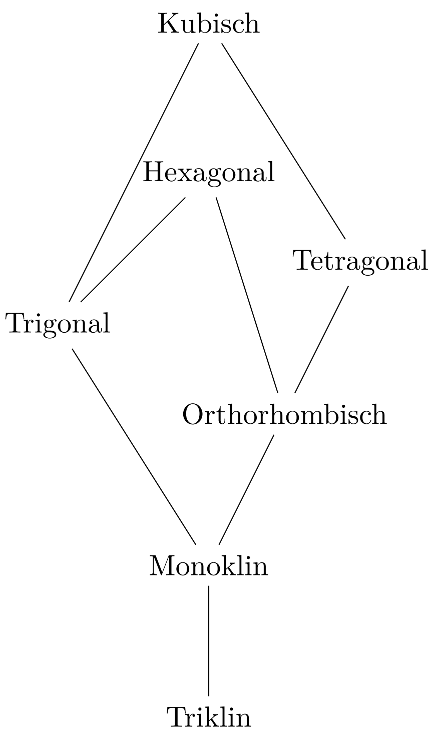


Abbildung 3.1: Hasse-Diagramm der sieben dreidimensionalen Kristallsysteme

3.25 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 des Translationsgitters), 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 gleichem 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 $v = \left(\begin{smallmatrix} x \\ y \\ z \end{smallmatrix}\right)$ 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 $v_2 = \left(\begin{smallmatrix} x_2 \\ 0 \\ 0 \end{smallmatrix}\right)$ 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 $v = \left(\begin{smallmatrix} x \\ 0 \\ z \end{smallmatrix}\right)$ und $v_2 = \left(\begin{smallmatrix} (2\cos(\alpha) - 2)x \\ 0 \\ 0 \end{smallmatrix}\right)$. Aus der Tabelle mit den expliziten Werten lesen wir ab, dass für $k \in \{1, 2, 3, 4\}$ der Gittervektor $v_1 := v_2 + kv = \left(\begin{smallmatrix} 0 \\ 0 \\ kz \end{smallmatrix}\right)$ in Richtung der Drehachse liegt. $\square$

3.26: 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 dreidimensionalen 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 $n+1$. Insbesondere gibt es im $\mathbb{R}^4$ schon Kristalle mit 5-zähligen Symmetrien.

3.27 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.

3.28: 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 Gittervektoren enthält und eine größere Basiszelle hat. Die so konstruierte Basiszelle ist vielleicht größer als sie sein müsste (sie ist also keine *elementare* Basiszelle), kann aber den Vorteil haben, geometrisch einfacher zu sein als eine elementare Basiszelle, 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.

Beweis der Klassifikation der Kristallsysteme. Es ist $G \leq O(\mathbb{R}^3)$ und somit $D := G \cap SO(\mathbb{R}^3)$ eine Untergruppe von G, die Untergruppe aller *orientierungserhaltenden* Symmetrien. Man beachte nun, dass wir stets die Inversion im Nullpunkt in G enthalten haben, da dies immer eine Symmetrie von T ist (es muss keine Symmetrie des T zugrundeliegenden Kristalls sein).
Jedes Element $g \in G$ ist entweder bereits in D enthalten oder $-g$ ist in D enthalten. Daher ist $G = \{ \pm g \mid g \in G \} = \langle -1, D \rangle$. Es genügt also, die möglichen Drehgruppen zu klassifizieren. G (und damit auch D) ist endlich, weil es eine kristallographische Punktgruppe ist. Wir kennen aufgrund von 2.23 alle möglichen, endlichen Drehgruppen und aufgrund von 3.25 können aber nur solche Drehgruppen auftreten, in den alle Drehungen Ordnung 1,2,3,4 oder 6 haben. Das reduziert unsere Liste auf genau die angegebenen Gruppen. $\square$