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

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 $Isom(\mathbb{R}^n)$.

1.5 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 $xu = g(u_1 u) \in gU$ und $xu = h(u_2 u) \in hU$ 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 $|G| = |U| + |U| + \cdots + |U| = k|U| = |G : U||U|$. $\square$

1.1 Gruppenoperationen

1.6 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:

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

1.7 Beispiel:
Wenn G bereits als Symmetriegruppe eines Objekts X gegeben ist, dann betrachtet man in 95% der Fälle 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 für die 5% der Fälle, in denen wir mit einer Symmetriegruppe auf anderen Mengen als X selbst operieren wollen.

1.8 Beispiel:
Die Gruppe aller starren Bewegungen $Isom(\mathbb{R}^n)$ 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.

1.9 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.

1.10 Lemma (Offensichtliches)**:**
Operiert G auf X, dann gilt:

a.) Das Einselement operiert als Identität: $\forall x \in X : {}^1x = x$

b.) Inverse Elemente operieren wie inverse Abbildungen: Die Abbildung $\tau_g : X \to X, x \mapsto {}^gx$ ist bijektiv für alle $g \in G$ und ihre inverse Abbildung ist $\tau_{g^{-1}}$.

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

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

Bahn von x oder Orbit von x.
Die Teilmenge

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

von G nennt man Stabilisator von x.

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

a.) $G_x \leq G$.

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

1.13: 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 ${}^1x = x$. Sind $g, h \in G_x$, dann gilt ${}^{gh}x = {}^g({}^hx) = {}^gx = x$, also $gh \in G_x$. Ist $g \in G_x$, dann gilt: ${}^{g^{-1}}x = {}^{g^{-1}}({}^gx) = {}^{g^{-1}g}x = {}^1x = x$, 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

$$G/G_x \to {}^Gx, hG_x \mapsto {}^hx$$

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 ${}^{h_1}x = {}^{h_2u}x = {}^{h_2}({}^ux) = {}^{h_2}x$.

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. $\square$

1.14 Korollar:
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 Einheitskugel, 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 [Drehungen$\circ$Inversion] 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 Achse? Genau Zwei: Der „Nordpol“ und „Südpol“ der Drehung.
Welche Punkte der Länge 1 liegen in einer gegebenen Ebene? Diese bilden einen Großkreis.

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 Kreise+endlich viele Punkte auf der Einheitskugel.
Das ist eine höchstens eindimensionale Figur auf einer zweidimensionalen Fläche, also werden die allermeisten Punkte der Einheitskugel niemals in dieser Figur liegen. Das heißt, dass für die allermeisten x der Länge 1 stets $G_x = \{1\}$ liegt.
Somit ist ${}^G x = |G : \{1\}| = |G|$.

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, $x + k_1 t_1 + k_2 t_2 + k_3 t_3$ 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 $\Lambda := \mathbb{Z}v_1 + \mathbb{Z}v_2 + \mathbb{Z}v_3 = \{ k_1 v_1 + k_2 v_2 + k_3 v_3 \mid k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z} \}$ 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.