Übrig bleiben folgende reguläre Polyeder:
1) Oktaeder
2) Hexaeder alias Würfel
3) Tetraeder
4) 2-,3-,4-,6-eckige Dieder
Der Würfel kann dem Oktaeder einbeschrieben werden. Man muss nur die Mittelpunkte der dreieckigen Oktaeder-Flächen miteinander verbinden. Jede Symmetrietransformation des Würfels erzeugt darum eine Symmetrietransformation des Oktaeders und umgekehrt. Die beiden Gruppen sind isomorf. Ähnlich kann das Tetraeder dem Würfel einbeschrieben werden. Man muss nur auf einer Würfel-Fläche zwei diagonale Ecken miteinander verbinden; dann verbindet man auf der gegenüberliegenden Würfel-Fläche die dortigen diagonalen Ecken; die beiden Diagonalen sollen um $\pi/2$ gegeneinander verschert sein. Diese vier Ecken bilden dann die Ecken des einbeschriebenen Tetraeders. Die Konstruktion ist im Unterschied zur Würfel-Oktaeder-Konstruktion nicht eindeutig. Denn man kann zwei verschiedene Tetraeder in den Würfel setzen. Jede Symmetrietransformation eines Tetraeders erzeugt darum eine Symmetrietransformation des Würfels. Umgekehrt muss dies nicht der Fall sein. Denn bei einer Würfel-Transformation kann ein Tetraeder ins andere überführt werden. Die Tetraeder-Gruppe ist deshalb eine echte Untergruppe der Würfel-Gruppe.

Wegen seiner 4-zähligen Drehachse enthält die Oktaeder-Gruppe auch die Gruppen der 4- und 2-eckigen Dieder. Unerreichbar sind dem Oktaeder jedoch 6-zählige Drehungen. Die Gruppe des 3-eckigen Dieder lässt sich als Untergruppe der 6-Eck-Dieder-Gruppe auffassen.

Wir haben somit eine zweispitzige Hierarchie: Oktaeder und 6-Eck-Dieder. Alle 32 Punktgruppen[1] eines dreidimensionalen Kristalls lassen sich als Untergruppen von O_h und D_{6h} ableiten[2].

Im Zweidimensionalen können wir nur bei den Dieder-Gruppen fündig werden. Ober- und Unterseite gibt es im Zweidimensionalen aber nicht. Aus den Dieder-Gruppen D_{nh} werden die n-Eck-Gruppen C_{nv}. Möglich sind nur Drehungen und Spiegelungen, die ganz im Zweidimensionalen bleiben. Anders ausgedrückt: Die Oktaeder-Gruppe plattet ab zu C_{4v} und aus der 6-Eck-Dieder-Gruppe wird C_{6v}.

3. Fundament: Punktgruppen als Permutationsgruppen

Wie finden wir die vollständigen Punktgruppen von O_h und D_{6h}, C_{4v} und C_{6v}? Und wie ermitteln wir alle möglichen Untergruppen? Indem wir jeder

[1] Die 32 Punktgruppen werden von den Kristallografen meist *32 Kristallklassen* genannt, was den schillernden Begriff *Klasse* noch mehr verunklart.

[2] h bedeutet Horizontalspiegelung.

Ecke des Polyeders eine Ziffer zuordnen. Jeder Symmetrietransformation entspricht dann eine Permutation.
Beispiel: Die Dreieck-Gruppe C_{3v} ist der symmetrischen Gruppe S_3 isomorf. Wir nummerieren die Ecken des Dreiecks mit den Ziffern 1,2,3. Die Einheitspermutation $e = \begin{pmatrix} 1\,2\,3 \\ 1\,2\,3 \end{pmatrix}$ entspricht der Symmetrietransformation, bei der gar nichts geschieht. Die zyklische Permutation $(1\ 2\ 3) = \begin{pmatrix} 1\,2\,3 \\ 2\,3\,1 \end{pmatrix}$ entspricht einer Drehung des Dreiecks um $2\pi/3$. Analog bedeutet die Permutation $(132) = (123)^2 = (123)^{-1}$ eine Drehung um $4\pi/3$ oder $-2\pi/3$. Die drei Permutationen $\{e, (123), (132)\}$ bilden die zyklische Gruppe des Dreiecks C_3, die der alternierenden Gruppe A_3 isomorf ist.

Die Transpositionen lassen sich als Vertikalspiegelungen deuten. Z.B. bedeutet (1 2) eine Spiegelung, bei der die Spiegelebene durch die Ecke 3 und mitten durch die gegenüberliegende Dreieckskante geht.

Insgesamt lassen sich *alle* Permutationen von

$$C_{3v} \cong S_3 = \{e, (123), (132), (12), (13), (23)\}$$

als Symmetrietransformationen eines Dreiecks deuten. Im Allgemeinen sind die Punktgruppen der Kristallografie aber nur Untergruppen von symmetrischen Gruppen S_n.
Beispiel: Die Viereck-Gruppe C_{4v} ist eine Untergruppe der symmetrischen Gruppe S_4. (1234), (13)(24) und (1432) entsprechen Drehungen. (12)(34) und (14)(23) bedeuten Spiegelungen an Ebenen, die mitten durch zwei gegenüberliegende Viereckskanten gehen. Eine Spiegelung, allerdings anderer Art, ist (13); hier geht die Spiegelebene durch die Ecken 2 und 4. Zur Unterscheidung nennt man diese Spiegelung *Klappung*. Eine zweite Klappung ist (24).

Dagegen kann die Permutation (12) nicht als Symmetrietransformation eines Vierecks gedeutet werden. Vor der Permutation sind die Ecken 2 und 3 benachbart, nach der Permutation liegen sie diagonal. Alle Zweier-Zyklen mit benachbarten Ziffern sind keine Symmetrietransformationen. Das Gleiche gilt für alle Dreier-Zyklen. Z.B. wird liegt nach (234) die Ecke 2 diagonal zur Ecke 1, während die Ecken 2 und 1 vor der Permutation benachbart waren.

Insgesamt bekommen wir für die Viereck-Gruppe

$$C_{4v} \cong = \{e, (1234), (13)(24), (1432), (12)(34), (14)(23), (13), (24)\}$$

Es ist eine Gruppe der Ordnung 8, während S_4 die Ordnung 4!=24 aufweist.

Die allgemeine Regel lautet: *Um eine kristallografische Symmetriegruppe zu erhalten, nummeriere man die n Ecken der Einheitszelle mit den Ziffern*

$1, 2, 3, \dots, n$. *Dann wähle man aus allen Permutationen von S_n diejenigen aus, welche die Abstände zwischen allen Ecken unverändert lassen.* In Frage kommen also nur Permutationen, die als Drehungen und Spiegelungen gedeutet werden können.
Beispiel: Die Sechseck-Gruppe C_{6v}. Drehungen sind hier (123456), (135)(246), (14)(25)(36), (153)(264), (165432). Spiegelungen, bei denen die Spiegelebenen durch zwei gegenüberliegende Kanten gehen, sind (12)(36)(45), (14)(23)(56), (16)(25)(34). Klappungen, also Spiegelungen, bei denen die Spiegelebenen durch zwei gegenüberliegende Ecken gehen, sind (13)(46), (15)(24), (23)(56). Die gesamte Sechseck-Gruppe ist durch

$$\begin{aligned} C_{6v} \cong \; & \{e, (123456), (135)(246), (14)(25)(36), (153)(264), (165432), \\ & (12)(36)(45), (14)(23)(56), (16)(25)(34), (13)(46), (15)(24), (26)(35)\} \end{aligned}$$

gegeben. C_{6v} hat also die Ordnung 12, ein winziger Teil von 6!=720.

Um alle Punktgruppen der Ebene zu finden, müssen wir nur noch die Untergruppen von C_{4v} und C_{6v} ausrechnen. Dazu empfiehlt sich sich *theologische Methode*: C_{4v} und C_{6v} sind als Götter aufzufassen, die die Schöpfung emanieren.[3] Als erstes emaniert ein Gott jedoch nicht das nach ihm vollkommenste Wesen, sondern er lässt zuerst das primitivste entstehen. Daraus baut er die vollkommneren nacheinander auf. Dies geschieht, damit die dummen Menschen glauben, eine Evolution habe stattgefunden. Mit anderen Worten: Wir leiten aus den Spitzen der Hierarchie als erstes nicht die größten Untergruppen, sondern die kleinsten ab und erweitern die kleinsten immer mehr, bis die Spitzen erreicht sind.
Beispiel: Untergruppen der Viereck-Gruppe C_{4v}. Kleinste Untergruppe ist natürlich e, bei Kristallografen auch C_1 genannt. Wenn wir sie erweitern möchten, sehen wir uns zuerst nach selbstinversen Permutationen um, also solchen, die mit sich selbst multipliziert e ergeben. Selbstinverse Permutationen bestehen aus Zweier-Zyklen. So finden wir

$$C_2 \cong \{e, (13)(24)\}$$

und

$$C_v \cong \{e, (12)(34)\} \cong \{e, (14)(23)\}$$

und

$$C_k \cong \{e, (13)\} \cong \{e, (24)\}$$

C_2 ist eine Drehgruppe mit einer 2-zähligen Drehachse. C_v heißt Spiegelgruppe. Es ist physikalisch sinnlos, zwischen ihren beiden Formen zu unterscheiden. Beide Formen bedeuten die gleiche Symmetrietransformation in zwei

[3] *Emanation* ist die Erzeugung eines niederen Seins aus einem höheren.

verschiedenen Koordinatensystemen. Ähnliches gilt für die beiden Formen der Klappgruppe C_k.

Wenn wir C_2 um eine weitere Drehung, z.B. (1234), erweitern, müssen wir wegen der Vollständigkeit auch (1432) hinzunehmen, da $(1234) \cdot (13)(24) = (1432)$. Damit aber ist wieder eine Untergruppe komplett:

$$C_4 \cong \{e, (1234), (13)(24), (1432)\}$$

Wir können C_2 auch um eine Spiegelung, z.B. (12)(34), erweitern. Wegen der Vollständigkeit gehört dann auch die andere Spiegelung (14)(23) zur Gruppe, die damit allerdings komplett ist:

$$C_{2v} \cong \{e, (13)(24), (12)(34), (14)(23)\}$$

Ähnlich geht es, wenn eine Klappung zu C_2 *adjungiert* wird. Wir bekommen

$$C_{2k} \cong \{e, (13)(24), (13), (24)\}$$

Alle diese Untergruppen von C_{4v} haben die Ordnung 4.

Damit ist die gesamte von C_{4v} emanierte Schöpfung erforscht. Ganz egal, ob man zu C_4 eine Spiegelung oder Klappung, zu C_{2v} eine Drehung oder Klappung oder zu C_{2k} eine Drehung oder Spiegelung adjungiert, immer muss man alle anderen Permutationen von C_{4v} hinzuziehen, da sonst die entstehende Menge keine Gruppe wäre.

Beispiel: Untergruppen der Sechseck-Gruppe C_{6v}. Als Untergruppen der Ordnung 2 finden wir

$$C_2 \cong \{e, (14)(25)(36)\}$$

und

$$C_v \cong \{e, (12)(36)(45)\} \cong \{e, (14)(23)(56)\} \cong \{e, (16)(25)(34)\}$$

und

$$C_k \cong \{e, (13)(46)\} \cong \{e, (15)(24)\} \cong \{e, (23)(56)\}$$

Anders als bei C_{4v} gibt es hier auf niedrigstem Niveau eine zyklische Gruppe der Ordnung 3:

$$C_3 \cong \{e, (135)(246), (153)(264)\}$$

Erweiterung von C_3 um eine weitere Drehung ergibt die 6-zählige zyklische Gruppe.

$$C_6 \cong \{e, (123456), (135)(246), (14)(25)(36), (153)(264), (165432)\}$$

Diesselbe Gruppe bekommen wir, wenn wir C_2 um eine weitere Drehung erweitern.

Erweiterung von C_3 um eine Spiegelung erzeugt

$$C_{3v} \cong \{e, (135)(246), (153)(264), (12)(36)(45), (14)(23)(56), (16)(25)(34)\}$$

was wir auch erhalten hätten, wenn wir zu C_v eine Drehung (135)(246) oder (153)(264) oder eine weitere Spiegelung z.B. (14)(23)(56) adjungiert hätten.

Erweiterung von C_3 um eine Klappung gibt

$$C_{3k} \cong \{e, (135)(246), (153)(264), (13)(46), (15)(24), (26)(35)\}$$

Diese Gruppe hätte wir auch durch Erweiterung von C_k konstruieren können.

C_6, C_{3v} und C_{3k} sind Gruppen mit der Ordnung 6. Fügt man zu einer von ihnen irgendeine Permutation hinzu, landet man sofort bei C_{6v} mit der Ordnung 12. Außer durch hartnäckiges Rechnen erkennt man dies mit dem *Lagrange-Theorem*: *Die Ordnung einer Untergruppe teilt die Ordnung der Obergruppe.* 6 teilt 12. Dagegen teilen die Zahlen von 7 bis 11 die 12 nicht.

Damit haben wir alle 13 Punktgruppen der Ebene bestimmt: Die Drehgruppen C_1, C_2, C_3, C_4, C_6. Dazu $C_v = C_s$ und C_k als einfache Spiegelgruppen. Durch Kombination C_{2v} und C_{2k}, C_{3v} und $C_{3k} = C_{3s}$. Und Gruppen höchster Symmetrie C_{4v} und C_{6v}. Siehe die Tafel „Hierarchien der Punktgruppen“.

Allerdings gibt es 17 Bewegungsgruppen. Woher kommen die 4 zusätzlichen Bewegungsgruppen?

4. Übungsaufgabe: Beschreiben Sie O_h und D_{6h} durch Permutationen. Hinweis: Die Ordnungen der Gruppen betragen 48 und 24.

5. Übungsaufgabe: Berechnen Sie alle Untergruppen von O_h und D_{6h} und finden Sie so alle 32 Punktgruppen im Dreidimensionalen. Hinweis: Die sogenannten Kristallklassen werden in jedem Lehrbuch über Kristallografie und in fast jedem Lehrbuch über Gruppentheorie aufgezählt.

4. Fundament: Punktgruppen als Matrixgruppen

Jede endliche Gruppe lässt sich durch eine Permutationsgruppe darstellen. Der Satz stammt von Cayley. Einen unmittelbar einsichtigen Spezialfall des Satzes haben wir im 3. Fundament benutzt. Wir diskutieren eine weitere Darstellung von Gruppen, nämlich die durch Matrizen.

Seien $\mathbf{b}_1$ und $\mathbf{b}_2$ zwei normierte, orthogonale Basisvektoren. Dann wird die 2-zählige Drehgruppe durch folgende Matrizen dargestellt:

$$C_2 \cong \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\}$$

Die Einheitsmatrix lässt $\mathbf{b}_1$ und $\mathbf{b}_2$ unverändert, während die negative Einheitsmatrix die Vorzeichen von $\mathbf{b}_1$ und $\mathbf{b}_2$ umkehrt, was einer Drehung um π entspricht.