Man muss sich das so vorstellen:

$$(\tilde{\mathbf{b}}_1,\ \tilde{\mathbf{b}}_2) = (\mathbf{b}_1,\ \mathbf{b}_2)\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Basisvektoren werden *kovariant* transformiert, während Komponenten wie gewohnt *kontravariant*

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{pmatrix}$$

errechnet werden. Einfach sind auch die Matrixgruppen der Vertikalspiegelung

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

und der Klappung

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

Alle drei Gruppen besitzen die Einheit und sind vollständig. Jedes Element hat sein Inverses. Und für die Assoziativität sorgt die gewohnte Matrixmultiplikation.

Alle Elemente dieser Gruppen sind selbstinvers. Für alle ihre Matrizen B gilt also $B = B^{-1}$ und $B^2 = E$.

Als Beispiele und weil wir sie brauchen werden, gebe ich noch ein paar kompliziertere Matrixgruppen an:

$$C_{2v} \cong \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\}$$

Die Kombination aus C_2 und C_v ist offensichtlich.

Der wichtige Begriff des *erzeugenden Elements* lässt sich gut an

$$C_4 \cong \{E, A, A^2, A^3\}$$

mit

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

erklären. Sobald die Matrix A mit $A^4 = E$ bekannt ist, kann man alle anderen Matrizen durch Potenzierung von A errechnen.

Kombination der 4-zähligen Drehachse mit einer Vertikalspiegelung ergibt

$$C_{4v} \cong \{E, A, A^2, A^3, B, BA, BA^2, BA^3\}$$

mit dem gerade genannten A und $B = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ aus C_v. Nimmt man die andere Spiegelmatrix $B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, verändert sich in der Gruppe nur die Reihenfolge der Elemente. Als besonders nützlich erweist sich die *Vertauschungsrelation* $BA = A^3B$, die durch Nachrechnen leicht zu überprüfen ist. Damit können wir die Vollständigkeit der Gruppe rasch verifizieren. Z.B. ist

$$BA \cdot BA^2 = A^3B \cdot BA^2 = A^5 = A$$

Besonders sind die Gruppen mit 6- und 3-zähliger Drehachse. Hier ist ein schiefwinkliges Koordinatensystem unumgänglich. Ein hexagonales Gitter wird durch Rhomben aufgebaut, siehe die Tafel „Punkt- und Bewegungsgruppen in der Ebene". Als Basissystem nehmen wir die Kanten eines nach links geneigten Rhombus. Zwischen $\mathbf{b}_1$ und $\mathbf{b}_2$ liegt der Winkel $2\pi/3$. Bei einer Drehung um $\pi/3$ geht $\mathbf{b}_1$ in $\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$ über und $\mathbf{b}_2$ wird zu $-\mathbf{b}_1$. Die dies beschreibende Matrix ist

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und als zyklische Gruppe mit 6-zähliger Drehachse bekommen wir

$$C_6 \cong \{E, A, A^2, A^3, A^4, A^5\}$$

C_6 zu C_{6v} zu erweitern sei Ihnen als **Übungsaufgabe** überlassen. Sofort aufschreiben können wir jedenfalls

$$C_3 \cong \{E, A^2, A^4\}$$

Alle vorgeführten Darstellungen bestehen nur aus ganzen Zahlen. So muss es sein, denn sonst wären sie für die Kristallografie nicht brauchbar. Daraus ergibt sich eine besondere Äquivalenz: *Zwei Darstellungen sollen äquivalent heißen, wenn sich alle Matrizen G der einen Darstellung in die Matrizen $\ddot{G}$ der anderen Darstellung durch Ähnlichkeitstransformation*

$$\ddot{G} = TGT^{-1}$$

mit einer ganzzahligen Matrix T überführen lassen.

Die *ganzzahlige Äquivalenz* ist unter Kristallografen umstritten. Die meisten wollen T mit komplexen Zahlen zulassen. Daraus würde folgen, die oben gegebenen Darstellungen von C_v und C_k wären äquivalent, mithin C_v und C_k nicht unterscheidbar. Ich unterstütze **J.J.Burckhardt, Die Bewegungsgruppen der Kristallographie, Birkhäuser Verlag Basel 1966**, der für ganzzahlige Äquivalenz plädiert, weil sich damit die Bewegungsgruppen leichter aus den Punktgruppen errechnen lassen. Außerdem sei auf die strukturellen Unterschiede zwischen C_v und C_k verwiesen, die sich an der Darstellung durch Permutationen (siehe S.23) festmachen lassen.

5. Fundament: Frobenius-Kongruenz

Bekanntlich (S.20) werden die Bewegungsgruppen aus den Punktgruppen erzeugt, indem Verschiebungen zu den Drehspiegelungen addiert werden

$$\mathbf{g} = \mathbf{b}_i u^i_j m^j + \mathbf{b}_i n^i$$

Man könnte meinen, die simple Addition von Basisvektoren sei nur eine unabhängige Überlagerung. In Wirklichkeit werden durch gleichzeitige Drehspiegelungen und Verschiebungen neuartige Symmetrietransformationen möglich.

Bei der Berechnung der neuartigen Symmetrietransformationen, die *Gleitspiegelungen* und *Schraubungen* heißen, hilft die einheitliche Schreibung von Drehspiegelungen und Verschiebungen.

Wir erweitern alle Komponententupel x um eine Komponente, in der immer nur 1 steht: $x \to \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix}$. Die Drehspiegelung soll durch die Matrix A und die Verschiebung durch das Komponententupel a beschrieben werden. Wir erweitern auch die Matrix

$$A \to \begin{pmatrix} A & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dann folgt aus

$$\begin{pmatrix} \tilde{x} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 1 \end{pmatrix}$$

einerseits $\tilde{x} = Ax + a$, also die Gleichung mit Drehspiegelung und Verschiebung, andererseits $1 = 1$, was nicht stört.

Damit können wir die Bewegungsgruppen total mit Matrizen durchrechnen. Wenn A und B Drehspiegelungen einer Gruppe, a und b die zugehörigen Verschiebungen sind, dann liefert die Forderung nach Vollständigkeit der Gruppe

$$\begin{pmatrix} A & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C & c \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ein dummes $AB = C$ und ein merkwürdiges

$$Ab + a = c$$

Die Bedeutung der letzten, scheinbar trivialen Gleichung kann nicht überschätzt werden. Es handelt sich um die *Frobenius-Kongruenz*.

Wir werden zudem Ähnlichkeitstransformationen der erweiterten Matrizen durchführen müssen und brauchen dafür das Inverse einer erweiterten Matrix.