

Wissenschaftliche Arbeit im Rahmen des Studiums für das Lehramt an
Gymnasien im Fach Mathematik
in der Fachrichtung Mathematik der Fakultät Mathematik und Informatik der
Universität des Saarlandes

Einführung in die geometrische Gruppentheorie mit Anwendung auf die Klassifikation chemischer Moleküle

Fromm, Johanna

06.09.2022

Erstgutachter: Dr. Moritz Weber
Zweitgutachter: Dr. Anselm Lambert

Selbstständigkeitserklärung:

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Wissenschaftliche Arbeit *Einführung in die geometrische Gruppentheorie mit Anwendung auf die Klassifikation chemischer Moleküle* selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel benutzt habe. Die Stellen der Arbeit, die anderen Werken dem Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, sind unter Angabe der Quellen als Entlehnung kenntlich gemacht. Bei Zeichnungen, Skizzen oder Plänen sowie bildlichen und grafischen Darstellungen ist angegeben, wenn sie nach eigenen Angaben durch andere ausgeführt oder übernommen worden sind. Sollte ich Teile dieser Arbeit bereits für andere Prüfungen eingereicht haben, habe ich dies ebenfalls kenntlich gemacht. Die eingereichte elektronische Version der Arbeit stimmt mit der vorliegenden schriftlichen überein.

eingereicht am: 06.09.2022

Unterschrift:

Inhaltsverzeichnis

I.	Einleitung.....	1
II.	Mathematik.....	3
1.	Grundlagen.....	3
1.1.	Isometrien in der Ebene	3
1.2.	Isometrien in höheren Dimensionen.....	10
2.	Gruppen und Untergruppen.....	13
2.1.	Gruppen.....	13
2.2.	Untergruppen	22
2.3.	Satz von Lagrange.....	30
2.4.	Homo- und Isomorphismen.....	34
2.5.	Punktgruppen	37
III.	Chemie.....	40
1.	Klassifikation chemischer Moleküle	40
1.1.	Kristallklassen	40
1.2.	Ermittlung der Kristallklasse	48
1.3.	Exkurs Raumgruppen.....	50
2.	Charaktertafeln.....	53
2.1.	Aufbau	53
2.2.	Exkurs Orbitale	55
2.3.	Beispielhafte Entwicklung einer Charaktertafel für das Wassermolekül.....	58
IV.	Fazit	63
	Literaturverzeichnis.....	I
	Abbildungsverzeichnis.....	III
	Tabellenverzeichnis	IV

I. Einleitung

Blüten, Kristalle, Schneckenhäuser oder auch der menschliche Körper – überall in unserem Alltag begegnen uns Symmetrien, die wir häufig nur unbewusst erkennen. Was wir allerdings immer wahrnehmen, ist die scheinbare Schönheit, die symmetrische Gegenstände und Körper gemeinsam haben. Diese Empfindung ist evolutionär bedingt und spielt sowohl bei Mensch und Tier in der Partnerwahl, als auch im alltäglichen Leben sowie in der Architektur eine große Rolle. Die Schönheit der Symmetrie kann jedoch nicht nur bewundert und als gegeben hingenommen, sondern auch mathematisch hinterfragt werden, um die natürliche Ordnung und Vollkommenheit der Natur greifbarer zu machen.

Vor diesem Hintergrund beschäftigt sich diese wissenschaftliche Arbeit zum einen mit den Grundlagen der geometrischen Gruppentheorie und zum anderen mit der Anwendung dieser bei der Klassifikation chemischer Moleküle. Hierfür werden im zweiten Kapitel zunächst Isometrien als Zusammenfassungen von Operationen thematisiert, die eine zweidimensionale Figur wieder in sich selbst überführen. Daraufhin findet eine Übertragung und Erweiterung auf den dreidimensionalen Raum statt, wodurch ein Grundgerüst an Symmetrieeoperationen entsteht, mit welchem sich Körper im Alltag hinsichtlich ihrer Symmetrie klassifizieren lassen. Im Anschluss zeigt die wissenschaftliche Arbeit Isometrien und deren Verknüpfung als mathematische Gruppen sowie deren Nutzen in der Mathematik allgemein auf. Sie thematisiert darüber hinaus den Zusammenhang einzelner Gruppen, der durch die Untersuchung von Untergruppen und die Anwendung des Satzes von Lagrange sichtbar wird. Das daran anschließende Unterkapitel definiert den Begriff der Homomorphismen als Abbildungen zwischen verschiedenen Gruppen. Konkret steht hier der Homomorphismus zwischen den Elementen einer Gruppe und Matrizen im Vordergrund. Eine solche Matrix wird zur Vereinfachung durch ihre Spur ersetzt, welche auch als Charakter bezeichnet wird und vor allem in der Chemie eine wichtige Rolle spielt. Bevor die Anwendung der Mathematik in der Chemie zum Untersuchungsgegenstand werden kann, muss zuvor noch die Relevanz von Gruppen als Möglichkeit, Symmetriephänomene algebraisch zu beschreiben, angesprochen werden. Eine dementsprechende Beschreibung erfolgt mit Hilfe von Punktgruppen, die, je nach Körper, verschiedene Symmetrieelemente enthalten und für jede neue Kombination derer eine andere Bezeichnung erhalten. Dadurch können Körper hinsichtlich ihrer Symmetrien verglichen und genau klassifiziert werden. Die Inhalte des zweiten Kapitels liefern somit insgesamt das notwendige Vorwissen, um sich im zweiten Teil der Arbeit mit Molekülen als Grundlage jedes organischen oder anorganischen Körpers zu beschäftigen und diese mathematisch zu untersuchen.

Unabhängig von ihrem Aggregatzustand setzen sich alle Stoffe aus einer Vielzahl von Molekülen zusammen, die in ihrer Reinform häufig Kristallstrukturen aufweisen. Dieser Aufbau überträgt sich im

festen Zustand sehr oft auch auf den gesamten Körper, weshalb Feststoffe meist kristallin sind. Durch eine Veränderung der Temperatur ändert sich jedoch die Anordnung der einzelnen Moleküle, sodass flüssige und gasförmige Stoffe keine Kristallstruktur mehr besitzen, während die einzelnen Moleküle hingegen ihre ursprüngliche, symmetrische Gestalt beibehalten. Demzufolge bilden Kristalle als besonders regelmäßige, ebene und damit symmetrische Körper die Bausteine des Lebens und entsprechen gerade in den Naturwissenschaften einem wichtigen Untersuchungsgegenstand. Allerdings werden in der Literatur meist nur die Eigenschaften der Kristalle bezüglich ihrer Symmetrien aufgezählt, ohne tiefergreifende Erklärungen anzugeben oder das Verständnis für das Vorliegen genau dieser Eigenschaften zu fördern. Außerdem werden auch die Verschiedenheiten im Aufbau der einzelnen Kristalle selten angesprochen, sodass die teilweise großen Unterschiede zwischen den Kristallstrukturen ähnlicher Moleküle unentdeckt bleiben. Um diesem Problem entgegenzuwirken, befasst sich das dritte Kapitel der wissenschaftlichen Arbeit mit einer Verknüpfung von Mathematik und Chemie, bei der vor allem die Punktgruppen als mathematische Klassifizierungsmöglichkeit von Molekülen und das Aussehen der Moleküle im Vordergrund stehen. Nachdem zuerst der Gruppenbegriff in die Kristallographie übertragen und vor diesem Hintergrund Punktgruppen erneut thematisiert werden, folgt eine Anleitung zur Bestimmung der Kristallklasse eines gegebenen Moleküls. Hierbei spielen gerade die Symmetrien eine entscheidende Rolle. Darüber hinaus spricht ein weiteres Unterkapitel die Erweiterung der Gruppen im Raum an, bevor sogenannte Charaktertafeln erläutert werden, welche die Zusammenhänge zwischen der Klassifikation eines Moleküls bezüglich seiner Symmetrien und der zugrundeliegenden Mathematik verdeutlichen. Hierfür werden die Punktgruppen abermals aufgegriffen und in einem neuen Kontext betrachtet. Gegen Ende des dritten Kapitels erfolgt die konkrete Anwendung der zuvor zusammengefassten Grundlagen, um ein Molekül mit Hilfe dieser Angaben exemplarisch schrittweise zu klassifizieren und die auftretenden Symmetrien in die entsprechende Tabelle zu übertragen.

Im Fazit der Arbeit wird noch einmal die Relevanz der Gruppentheorie für die Mathematik angesprochen. Zudem verdeutlicht das letzte Kapitel erneut, dass gerade Symmetrien überall in unserer Umgebung zu finden sind und diese nicht nur in der Mathematik eine große Bedeutung haben, sondern auch eine wichtige Rolle in chemischen Reaktionen spielen. Zum Abschluss stellt das Fazit heraus, dass die Erforschung des Inhalts dieser Arbeit nicht mit Abgabe derer abgeschlossen ist, sondern viele weitere Ansatzpunkte offen sind, die in Zukunft untersucht werden können.

II. Mathematik

1. Grundlagen

1.1. Isometrien in der Ebene

Um Symmetrien in der Umwelt erforschen und charakterisieren zu können, ist eine Reihe an Vorüberlegungen notwendig. Zunächst muss bestimmt werden, welche Symmetrieoperationen existieren und wie sich diese voneinander unterscheiden. Zur Vereinfachung werden zuerst Figuren in der Ebene und wie diese auf sich selbst abgebildet werden untersucht. Dazu sind einige grundlegende Definitionen nötig.

1.1.1. Definition Figur/ Körper:

Unter einer **Figur** versteht man eine beschränkte Teilmenge der Ebene im $\mathbb{R}^2$ mit stückweise linearem Rand. Im $\mathbb{R}^3$ wird eine beschränkte Teilmenge später als **Körper** bezeichnet.

Dass eine Figur beispielsweise auf sich selbst abgebildet werden kann, wird durch das Vorliegen einer Funktion oder Abbildung ermöglicht.

1.1.2. Definition Funktion/ Abbildung:

Eine mathematische **Funktion** oder **Abbildung** ist eine Beziehung zwischen zwei Mengen D und W , die jedem Element der Definitionsmenge D genau ein Element der Wertemenge W zuordnet.

Eine derartige Zuordnung erfolgt über eine Metrik, die den Abstand zwischen zwei Punkten angibt. Dabei wird häufig die sogenannte Standardmetrik verwendet, die durch das Standardskalarprodukt definiert ist.

1.1.3. Definition Standardskalarprodukt (Modler & Kreh, 2015):

Das **Standardskalarprodukt** zweier Vektoren $x, y \in \mathbb{R}^n$ mit $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ und $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ ist definiert durch:

$$\langle x, y \rangle = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

Die Definition der Abbildung kann mit Hilfe des Standardskalarprodukts zusätzlich durch den Aspekt der Längentreue erweitert werden, wobei der Abstand zweier beliebiger Punkte aus der Definitionsmenge nach Abbildung auf die Wertemenge unverändert ist.

1.1.4. Definition (ebene/lineare) Isometrie (Rosebrock, 2019):

Unter einer **(ebenen/linearen) Isometrie** $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ versteht man eine längenerhaltende Abbildung der Ebene auf sich selbst, das heißt für alle $x, y \in \mathbb{R}^2$ gilt:

$$\|f(x) - f(y)\| = \|x - y\|.$$

Hierbei steht $\|z\| = \sqrt{\langle z, z \rangle}$ für die Länge eines Vektors bezüglich des Standardskalarprodukts. Innerhalb der Isometrien existieren Beispiele, die den Nullpunkt festhalten und solche, die den Nullpunkt nicht festlassen, sondern eine Verschiebung hervorrufen. Eine derartige Verschiebung $t_g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, x \mapsto x + g$ wird als **Translation** bezeichnet und stellt selbst eine Isometrie nach 1.1.4 dar.

1.1.5. Satz:

Jede Isometrie $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ist die Komposition einer linearen Isometrie mit einer Translation t_{-g} und somit eine affin lineare Abbildung.

Beweis:

Sei $g = f(0)$. Die Komposition der Isometrien f und t_{-g} ist offensichtlich wieder eine Isometrie $t_{-g} \circ f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, die 0 unverändert lässt. Damit ist $h = t_{-g} \circ f$ eine lineare Abbildung und es gilt $f = t_g \circ h$ mit einer linearen Isometrie h . Damit entspricht f einer affin linearen Abbildung. □

Zusätzlich zur Längentreue erfüllt eine Isometrie auch die Winkeltreue.

1.1.6. Definition winkeltreu:

Eine Abbildung $f: D \rightarrow W$ heißt **winkeltreu**, wenn für zwei Vektoren $x, y \in D$ gilt:

$$\angle(f(x), f(y)) = \angle(x, y).$$

Zur Berechnung eines Winkels zwischen zwei Vektoren x und y wird die folgende Formel verwendet.

1.1.7. Definition Winkel zwischen zwei Vektoren (Modler & Kreh, 2015):

Seien $x, y \in D$ zwei Vektoren mit $x, y \neq 0$. Der **Winkel α zwischen den beiden Vektoren** ist gegeben durch:

$$\cos(\alpha) = \frac{\langle a, b \rangle}{\|a\| \cdot \|b\|}.$$

Die Winkeltreue kann anhand der Wahl dreier beliebiger Punkte aus einer Ebene verdeutlicht werden, solange diese nicht auf derselben Geraden liegen. Durch die jeweilige Verbindung zweier Punkte mit dem dritten Punkt entstehen zwei Strecken, die durch Vektoren beschrieben werden können. Der eingeschlossene Winkel wird anschließend mit der oben genannten Formel berechnet.

Mathematisch lässt sich dies am nächsten Beispiel demonstrieren:

1.1.8. Beispiel (Winkeltreue):

Betrachte die Vektoren $a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Der Winkel zwischen den beiden Vektoren wird mit der Formel aus 1.1.7 berechnet:

$$\cos(\alpha) = \frac{\langle a, b \rangle}{\|a\| \cdot \|b\|} = \frac{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}{\sqrt{1^2+0^2} \cdot \sqrt{1^2+1^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Leftrightarrow \alpha = \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = 45^\circ.$$

Eine Drehung um 90° gegen den Uhrzeigersinn lässt sich durch die Abbildungsmatrix

$D_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ darstellen. Damit ergeben sich folgende Vektoren:

$$a' = D_1 \cdot a = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$b' = D_1 \cdot b = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Für den Winkel zwischen a' und b' gilt dementsprechend:

$$\cos(\alpha') = \frac{\langle a', b' \rangle}{\|a'\| \cdot \|b'\|} = \frac{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}}{\sqrt{0^2+1^2} \cdot \sqrt{(-1)^2+1^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Leftrightarrow \alpha' = \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = 45^\circ = \cos(\alpha).$$

Die Drehung um 90° ist somit winkeltreu. Dies kann auch für die übrigen Isometrie-Arten nachgerechnet werden, die in 1.1.9 aufgelistet sind. Eine Veranschaulichung des Beispiels ist in Abbildung 1 dargestellt:

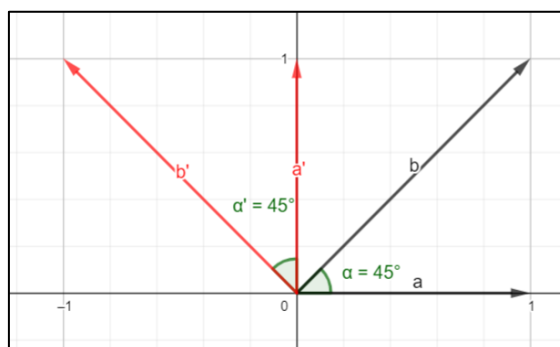


Abbildung 1: Darstellung der Drehung um 90° .

Innerhalb einer Ebene gibt es insgesamt lediglich vier verschiedene Möglichkeiten, eine Figur durch Isometrien auf sich selbst abzubilden. Diese werden in der nachfolgenden Liste zusammengefasst:

1.1.9. Isometrie-Arten (Brückler, 2019):

- **Spiegelung** an einer Spiegelgeraden.
- **Drehung** um einen bestimmten Punkt mit einem bestimmten Winkel gegen den Uhrzeigersinn.
- **Translation** als Verschiebung um einen festen Betrag in eine festgelegte Richtung, die sich durch einen Vektor eindeutig beschreiben lässt.
- **Gleitspiegelung** als Kombination einer Spiegelung, gefolgt von einer Translation.

Die Kombination von Drehung und Spiegelung entspricht der Spiegelung an einer neuen Spiegelgeraden, während eine Drehung, gefolgt von einer Translation eine Translation um einen neuen Vektor darstellt. Für ein besseres Verständnis werden in der anschließenden Abbildung die Spiegelung, die Drehung sowie die Translation anhand des Buchstabens F verdeutlicht:

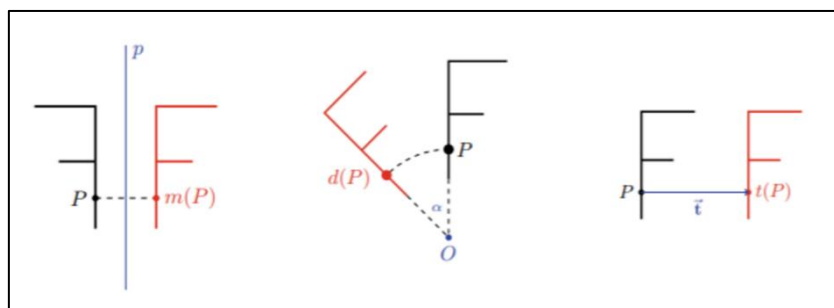


Abbildung 2: Spiegelung, Drehung und Translation des Buchstabens F.

Die Art der Isometrie kann hinsichtlich der Orientierungstreue einer Figur in der Ebene untersucht werden.

1.1.10. Definition orientierungserhaltend, orientierungsumkehrend:

Eine Isometrie ist **orientierungserhaltend**, solange der Umlaufsinn der Figur erhalten bleibt. Dies ist damit gleichzusetzen, dass die Reihenfolge zuvor nummerierter Eckpunkte der Figur nach Anwendung der Isometrie dieselbe ist. Wird die zyklische Reihenfolge der Eckpunkte durch Anwendung der Isometrie hingegen vertauscht, so wird diese als **orientierungsumkehrend** bezeichnet.

Als Beispiel für eine orientierungserhaltende Isometrie kann erneut eine Drehung wie in Beispiel 1.1.8 herangezogen werden. In Abgrenzung hierzu ist eine Spiegelung hingegen orientierungsumkehrend.

1.1.11. Beispiel (orientierungsumkehrende Isometrie):

Betrachte erneut die Vektoren $a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ sowie die Abbildungsmatrix

$D_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Nach Multiplikation der beiden Vektoren mit der Abbildungsmatrix folgt:

$$a'' = D_2 \cdot a = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$b'' = D_2 \cdot b = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Durch den Vergleich der Vektoren a mit a'' und b mit b'' werden die Vertauschung des Umlaufsinnnes und damit auch die Orientierungsumkehrung deutlich. Eine graphische Darstellung ist in Abbildung 3 zu sehen.

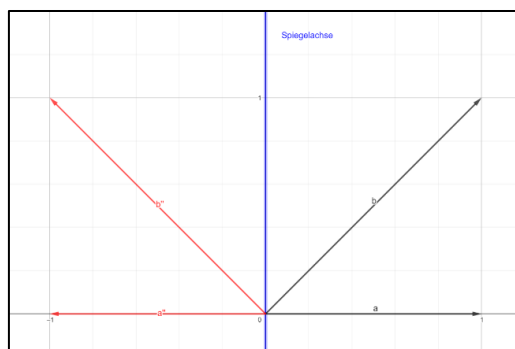


Abbildung 3: Darstellung der Spiegelung an der y-Achse.

Eine zusätzliche Möglichkeit zur Unterscheidung von Isometrien bietet die Existenz eines Fixpunktes innerhalb der Ebene.

1.1.12. Definition Fixpunkt, fixpunktfrei:

Ist f eine Isometrie in der Ebene, dann heißt jeder Punkt P **Fixpunkt**, für den gilt: $f(P) = P$.

Ist $f(P) \neq P$ für alle Punkte P in der Ebene, dann ist die Isometrie **fixpunktfrei**.

Bildet die Isometrie eine komplette Figur F auf sich ab, so heißt F **invariant** unter f . Bei einer invarianten Figur muss jedoch nicht zwingend ein Fixpunkt vorliegen. Dieser Umstand wird an nachfolgendem Beispiel deutlich.

1.1.13. Beispiel (invariante Figur ohne Fixpunkt):

Betrachte eine Kreislinie. Dann führt die Drehung derer um 90° wieder zur selben Figur, ohne dass sich ein Punkt R der Kreislinie an derselben Stelle befindet wie zuvor. Die Figur ist folglich invariant unter ihrer Drehung, besitzt aber gleichzeitig keinen Fixpunkt.

Zur Unterscheidung der vier Isometrie-Arten kann der nächste Satz festgehalten werden:

1.1.14. Satz (Rosebrock, 2019):

Eine Isometrie **mit Fixpunkt** ist eine **Drehung**, wenn sie die **Orientierung erhält** und eine **Spiegelung**, wenn sie **orientierungsumkehrend** ist. Eine Isometrie **ohne Fixpunkt** ist eine **Translation**, wenn sie **orientierungserhaltend** ist und eine **Gleitspiegelung**, wenn sie die **Orientierung nicht erhält**.

Beweis:

Der Beweis dieser Aussage lässt sich den Seiten 175 und 176 aus dem Anhang des Buches „Anschauliche Gruppentheorie. Eine computerorientierte geometrische Einführung.“ von Rosebrock (2019) entnehmen. □

Der erste Teil des Satzes wurde in den beiden Beispielen 1.1.8 und 1.1.11 exemplarisch dargestellt. Insgesamt ergibt sich demnach folgende Zusammenfassung:

Tabelle 1: Unterscheidung der Isometrie-Arten anhand ihrer Merkmale.

Eigenschaft	orientierungserhaltend	orientierungsumkehrend
Fixpunkt	Drehung	Spiegelung
kein Fixpunkt	Translation	Gleitspiegelung

Die verschiedenen Isometrien können an einem „Vorfahrt gewähren“-Schild als Alltags-Beispiel näher demonstriert werden.

1.1.15. Beispiel (Demonstration der Isometrie-Arten):

Das „Vorfahrt gewähren“-Schild stellt ein gleichseitiges Dreieck dar, dessen Ecken gegen den Uhrzeigersinn mit den Buchstaben *A*, *B* und *C* bezeichnet werden (Abbildung 4).

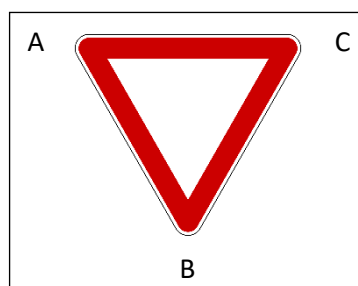


Abbildung 4: „Vorfahrt gewähren“-Schild als Beispiel für ein gleichseitiges Dreieck.

Der Mittelpunkt des Dreiecks entspricht dem Fixpunkt der Figur unter Rotation um diesen Punkt, um welchen sich das Dreieck beispielsweise um 120° gegen den Uhrzeigersinn drehen lässt. Dabei bleibt die Orientierung der Ecken erhalten. Darüber hinaus ist die Leserichtung der Buchstaben ebenfalls dieselbe, wenn das Verkehrsschild um einen bestimmten Betrag in eine Richtung verschoben wird, was mit einer Translation übereinstimmt.

Gleichzeitig kann das „Vorfahrt gewähren“-Schild auch an einer Höhe des Dreiecks gespiegelt werden, ohne dass das Aussehen der Figur verändert wird. Dadurch ändert sich jedoch der Umlaufsinn der Buchstaben und die Orientierung wird umgekehrt. Analog erfolgt eine Orientierungsumkehrung durch eine Spiegelung und anschließende Verschiebung.

Die Umkehrung der Leserichtung durch eine Spiegelung entlang der Höhe durch die Ecke *B* ist exemplarisch in Abbildung 5 zu sehen.

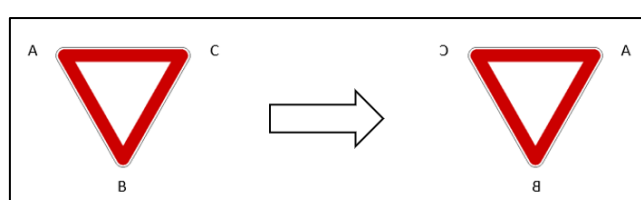


Abbildung 5: Orientierungsumkehrung der Leserichtung.

Liegen mehrere Fixpunkte innerhalb einer Figur vor, muss die Lagebeziehung dieser näher untersucht werden, um festzustellen, ob eine Spiegelung oder die Identität selbst vorliegt. Weil bei einer Drehung per Definition nur ein Fixpunkt existiert, kann diese Isometrie-Art bei Vorlage mehrerer Fixpunkte nicht auftreten.

1.1.16. Definition kollinear:

Drei Punkte aus der Ebene heißen **kollinear**, wenn sie auf einer gemeinsamen Geraden liegen. Liegen die drei Punkte nicht auf einer Geraden, werden sie als nicht kollinear beschrieben. Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 6 zu sehen.

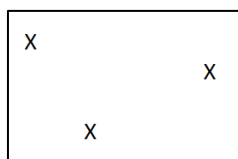


Abbildung 6: Beispiel für drei nicht-kollineare Punkte.

Mit Hilfe dieser Definition kann eine Unterscheidung zwischen der Identität und der Spiegelung an einer Geraden getroffen werden.

1.1.17. Satz (Rosebrock, 2019):

Jede Isometrie in der Ebene, die **drei nicht-kollineare Fixpunkte** besitzt, ist die **Identität**.

Beweis:

Seien P, Q und R drei nicht-kollineare Fixpunkte einer Isometrie f . Jede Isometrie ist nach Satz 1.1.5 affin linear, was bedeutet, dass Parallelität, Kollinearität und Teilverhältnisse bewahrt bleiben. Dadurch gibt es einen Translationsanteil $z \in \mathbb{R}^2$ von f , sodass $f(x) - z$ linear ist. Somit gilt für eine Gerade $(\lambda P + \mu Q)$:

$$(f - z)(\lambda P + \mu Q) = \lambda(f - z)(P) + \mu(f - z)(Q).$$

Die Anwendung von $(f - z)$ auf eine Gerade durch zwei Punkte P und Q führt demnach zu einer neuen Geraden, die ebenfalls durch die beiden Punkte verläuft. Diese entspricht der ursprünglichen Geraden, da eine Gerade durch zwei Punkte bereits eindeutig beschrieben ist, sodass die Isometrie die gesamte Gerade fixiert. Die Isometrie f kann demzufolge nur die Spiegelung an der Geraden oder die Identität selbst darstellen. Da jedoch nach 1.1.16 für den dritten Fixpunkt $R \notin (\lambda P + \mu Q)$ gilt, handelt es sich bei f nicht um eine Geradenspiegelung, sondern um die Identität. □

Weil in der Praxis eher die Symmetrien dreidimensionaler Körper statt zweidimensionaler Figuren Untersuchungsgegenstand sind, werden für weiterführende Untersuchungen die Isometrien der Ebene im folgenden Unterkapitel auf höhere Dimensionen übertragen.

1.2. Isometrien in höheren Dimensionen

Körper aus dem Alltag besitzen eine dreidimensionale Struktur und dadurch auch komplexere Symmetrien als zweidimensionale Figuren. Darüber hinaus spielt in einer höheren Dimension auch die Lage im Raum eine wichtige Rolle, sodass die Liste an Symmetrie-Arten erweitert und die Sätze für den zweidimensionalen Fall abgeändert werden müssen. Viele Definitionen des Kapitels 1.1 können allerdings unmittelbar auf höhere Dimensionen übertragen werden, ohne dass eine große Anpassung notwendig ist.

1.2.1. Definition Isometrie (Rosebrock, 2019):

Unter einer **Isometrie** versteht man eine längenerhaltende, bijektive Abbildung des $\mathbb{R}^n$ auf sich selbst, also $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Analog können auch die Isometrie-Arten der Ebene durch eine entsprechende Anpassung für eine höhere Dimension übernommen und erweitert werden. Wegen der späteren Betrachtung dreidimensionaler Körper findet die Übertragung hier konkret auf den Raum $\mathbb{R}^3$ statt.

1.2.2. Isometrie-Arten im $\mathbb{R}^3$:

- **Spiegelung** an einer Spiegelebene.
- **Punktspiegelung** an einem Inversionszentrum.
- **Drehung** mit einem bestimmten Winkel gegen den Uhrzeigersinn um eine Gerade, welche als Drehachse bezeichnet wird.
- **Translation** als Verschiebung um einen festen Betrag in eine festgelegte Richtung, die sich durch einen Vektor eindeutig beschreiben lässt.
- **Gleitspiegelung** als Kombination einer Spiegelung, gefolgt von einer Translation.
- **Rotationsspiegelung** als Kombination einer Spiegelung, begleitet von einer Rotation um eine Drehachse, die senkrecht auf der Spiegelebene steht.
- **Schraubung** als Kombination einer Drehung um eine Achse und der anschließenden Verschiebung entlang dieser Achse.

Die Kombination aus Spiegelung, Drehung und Translation stellt erneut eine Gleitspiegelung mit Verschiebung um einen neu angepassten Vektor dar.

Nach der Erweiterung der Isometrie-Arten muss folglich auch Tabelle 1 erweitert werden:

Tabelle 2: Unterscheidung der Isometrie-Arten im $\mathbb{R}^3$ anhand ihrer Merkmale.

Eigenschaft	orientierungserhaltend	orientierungsumkehrend
Fixpunkte	Punktspiegelung, Drehung	Spiegelung, Rotationsspiegelung
kein Fixpunkt	Translation, Schraubung	Gleitspiegelung

Nachdem im $\mathbb{R}^2$ drei nicht-kollineare Fixpunkte einer Isometrie implizieren, dass es sich um die Identität handelt, kann diese Aussage ebenfalls auf den dreidimensionalen Raum übertragen werden, in welchem vier linear unabhängige Fixpunkte die Existenz der Identität anzeigen. Dieser Zusammenhang wird induktiv für den Hyperraum $\mathbb{R}^n$ erweitert.

1.2.3. Definition Hyperraum:

Unter einem **Hyperraum** $\mathbb{R}^n$ versteht man einen Raum mit mehr als drei Dimensionen.

Damit ergibt sich eine Anpassung von Satz 1.1.17 auf den n -dimensionalen Raum.

1.2.4. Satz (Rosebrock, 2019):

Eine Isometrie f in $\mathbb{R}^n$, die **$n + 1$ linear unabhängige Punkte** festhält, ist die **Identität**.

Beweis:

Die Aussage kann induktiv bewiesen werden:

- Induktionsanfang: $n = 1$

Im eindimensionalen Raum, der einem Zahlenstrahl entspricht, liegt die Identität offensichtlich vor, sobald die Isometrie f zwei linear unabhängige Punkte P_1 und P_2 festhält. Dadurch bleibt auch die Gerade l zwischen diesen Punkten unverändert, die bereits den Zahlenstrahl darstellt.

Für $n = 2$ stimmt die Aussage mit Satz 1.1.17. überein.

- Induktionsvoraussetzung:

Für feste $n \geq 1$ gilt: Jede Isometrie f im $\mathbb{R}^{n-1}$, die n linear unabhängige Punkte festhält, ist die Identität.

- Induktionsschluss: $n \Rightarrow n + 1$

Seien $n + 1$ linear unabhängige Punkte $P_1, \dots, P_{n+1}$ in $\mathbb{R}^n$ sowie eine Isometrie f gegeben. Dann bildet f nach der Induktionsvoraussetzung den $n - 1$ -dimensionalen Hyperraum H , der ohne Einschränkung die Punkte $P_1, \dots, P_n$ enthält, identisch auf sich selbst ab. Somit liegen alle n Punkte auf einer gemeinsamen Hyperebene, die den Hyperraum H definiert. Die Isometrie f entspricht demnach entweder einer Spiegelung an dieser Ebene oder der Identität. Da P_{n+1} nach Definition jedoch nicht in H liegt, muss f die Identität darstellen. $\square$

Insgesamt wird deutlich, dass die Identität als Isometrie in jeder Dimension vorkommt und nach Satz 1.2.4 eng mit der minimalen Anzahl der Fixpunkte zusammenhängt. Sie gehört damit zu den Symmetrieelementen jedes Körpers, sodass sie einem wichtigen Bestandteil bei der Bestimmung der Gruppenordnung entspricht. Auf die Ordnung einer Gruppe und die genaue Rolle der Identität für die Untersuchung von Körpern wird im nächsten Kapitel näher eingegangen.

2. Gruppen und Untergruppen

2.1. Gruppen

Die Menge aller Symmetrien eines Körpers kann in einer Gruppe zusammengefasst werden und behält unabhängig von Anzahl oder Art der Elemente immer einige Eigenschaften bei. Vor diesem Hintergrund stellt eine Gruppe ein wichtiges mathematisches Konstrukt dar, welches außerdem noch um verschiedene Aspekte wie „abelsch“ oder „zyklisch“ erweitert werden kann, wodurch die Gruppe genauer klassifiziert wird. Aufgrund der Betrachtung chemischer Moleküle stehen neben zyklischen Gruppen und deren Eigenschaften sogenannte Diedergruppen (2.1.15) im Fokus des zweiten Kapitels. Da innerhalb der Arbeit eine starke Verknüpfung der Algebra mit der Geometrie der jeweiligen Gruppen stattfindet, wird bei den Diedergruppen das Vorliegen zweier senkrecht stehender Hauptachsen besonders hervorgehoben.

2.1.1. Definition (kommutative/abelsche) Gruppe (Glosauer, 2016):

Sei G eine Menge und $\circ$ eine Verknüpfung, die je zwei Elementen $a, b \in G$ wieder ein Element aus G zuordnet:

$$\circ: G \times G \rightarrow G, (a, b) \mapsto a \circ b.$$

Das Paar $(G, \circ)$ heißt **Gruppe**, wenn die folgenden Gruppenaxiome erfüllt sind:

(G1) Assoziativität:

Für alle $a, b, c \in G$ gilt: $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$.

(G2) Existenz neutrales Element:

Es gibt ein **neutrales Element** $e \in G$, welches bei der Verknüpfung das ursprüngliche Element erhält: $e \circ g = g = g \circ e$ für alle $g \in G$.

(G3) Existenz inverser Elemente:

Jedes Element $g \in G$ besitzt ein **inverses Element** $g^{-1} \in G$, welches bei der Verknüpfung das neutrale Element liefert: $g \circ g^{-1} = e = g^{-1} \circ g$.

g^{-1} heißt auch das **Inverse** zu g .

Wenn $\circ$ zusätzlich noch die Eigenschaft der Kommutativität erfüllt, so heißt G **kommutative** oder **abelsche Gruppe**:

(G4) Kommutativität:

Für alle $a, b \in G$ gilt: $a \circ b = b \circ a$.

Eine Gruppe erfüllt bereits aufgrund ihrer Definition die Eigenschaft der Abgeschlossenheit.

2.1.2. Definition Abgeschlossenheit:

Unter der **Abgeschlossenheit** einer Menge bezüglich einer Verknüpfung versteht man, dass die Verknüpfung beliebiger Elemente dieser Menge wieder ein Element der Menge ergibt.

Allein in der Mathematik finden sich zahlreiche Beispiele für Gruppen. Bekannte Vertreter hierfür werden im folgenden Beispiel angesprochen.

2.1.3. Beispiel (mathematische Gruppen):

- Die Menge der natürlichen Zahlen $\mathbb{N}$ bildet mit der Addition als Verknüpfung eine abelsche Gruppe.
- Die Menge der reellen Zahlen ohne Null $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ bildet mit der Multiplikation als Verknüpfung eine abelsche Gruppe.
- Die Menge der Symmetrioperationen eines Quadrats bildet mit der Hintereinanderausführung dieser Elemente eine Gruppe, die aber nicht abelsch ist:

Die Drehung des Quadrats um 90° mit anschließender Spiegelung an einer der beiden Diagonalen führt zum Beispiel nicht zur selben Abbildung wie die Spiegelung an der gleichen Diagonale, gefolgt von einer Drehung um 90° .

Unter Betrachtung der Beispiele wird deutlich, dass die unendliche Menge der natürlichen Zahlen weitaus mehr Elemente beinhaltet als die endliche Menge der Symmetrioperationen eines Quadrats. Um die Anzahl der Elemente innerhalb einer Gruppe anzugeben, wird der Begriff Ordnung eingeführt.

2.1.4. Definition Ordnung, Endlichkeit:

Die Mächtigkeit oder Anzahl der Elemente von G heißt **Ordnung** der Gruppe und wird mit $|G|$ notiert. Eine Gruppe heißt **endlich**, wenn gilt: $|G| < \infty$.

Durch die, in 1.2.2 aufgelistete, endliche Anzahl an Symmetrie-Arten, die auf einen Körper angewendet werden können, ist auch die Menge an Symmetrien selbst begrenzt und lässt sich somit in endlichen Gruppen zusammenfassen. Aus diesem Grund wird der Fokus der Arbeit überwiegend auf solche endlichen Gruppen gelegt.

Insgesamt gilt für den Zusammenhang zwischen Ordnung und Symmetrie: **Je höher die Symmetrie eines Körpers, desto größer ist seine Ordnung und umgekehrt.**

Des Weiteren wird eine Gruppe durch ihre Elemente inklusive der Verknüpfung kategorisiert. Da auch eine Beschreibung von Gruppen unendlicher Ordnung möglich sein soll, werden Gruppen folglich nur durch Angabe der notwendigen Elemente definiert. Diese erzeugen durch Verknüpfung untereinander und mit ihren Inversen alle verbleibenden Elemente einer Gruppe und werden als Erzeugendensystem bezeichnet.

2.1.5. *Definition (endliches) Erzeugendensystem, Generatoren* (Brückler, 2019):

Sei $(G, \circ)$ eine Gruppe und besitze $E \subseteq G$ die Eigenschaft, dass jedes $g \in G$ als endliche Komposition von Elementen aus E und deren Inversen dargestellt werden kann. Dann wird E ein **Erzeugendensystem** genannt und die Elemente von E heißen **Generatoren**. Für ein endliches $E = \{g_1, \dots, g_n\}$ heißt G **endlich erzeugt**. Schreibe:

$$G = \langle E \rangle = \langle g_1, \dots, g_n \rangle.$$

Vor der genaueren Betrachtung von Gruppen sollen vorab noch einige wichtige Eigenschaften zusammengefasst werden, die für weitere Untersuchungen von Bedeutung sind. Hierzu werden zunächst einige Konventionen festgelegt.

2.1.6. *Konventionen zum Potenzieren von Gruppenelementen:*

- Es ist: $a^0 = e$.
- Induktiv folgt: $a^{n+1} = a^n \cdot a$, für $n \in \mathbb{N}$.
- Für negative Potenzen gilt: $a^{-n} = (a^{-1})^n$ für $n \in \mathbb{N}$.

Mit Hilfe dieser Festlegungen können allgemeine Rechenvorschriften näher erläutert werden. Darüber hinaus existieren folgende Eigenschaften:

2.1.7. *Satz:*

Sei $(G, \circ)$ eine Gruppe mit neutralem Element $e \in G$ und beliebigen $a, b, c \in G$. Dann gilt:

- (1) $a \circ b \circ b^{-1} \circ c = a \circ c$.
- (2) $(a^{-1})^{-1} = a$.

Beweis:

Mit den Gruppenaxiomen folgt:

- (1) $a \circ b \circ b^{-1} \circ c = a \circ (b \circ b^{-1}) \circ c = a \circ e \circ c = a \circ c$.
- (2) $(a^{-1})^{-1} = (a^{-1})^{-1} \circ e = (a^{-1})^{-1} \circ (a^{-1} \circ a) = ((a^{-1})^{-1} \circ a^{-1}) \circ a = e \circ a = a$. □

Zusätzlich können auch weitere Aussagen zu den Inversen und dem neutralen Element sowie zur Möglichkeit des Kürzens getroffen werden.

2.1.8. *Satz* (Rosebrock, 2019):

Sei $(G, \circ)$ eine Gruppe mit $a, b, c \in G$. Dann gilt:

- (1) In G gibt es ein eindeutiges neutrales Element e .
- (2) Zu jedem Element der Gruppe gibt es genau ein Inverses.
- (3) Aus $a \circ b = a \circ c$ sowie aus $b \circ a = c \circ a$ folgt $b = c$.
- (4) Sind $g_1, g_2, \dots, g_n \in G$, dann ist: $(g_1 \circ g_2 \circ \dots \circ g_n)^{-1} = g_n^{-1} \circ \dots \circ g_2^{-1} \circ g_1^{-1}$.

Beweis:

(1) Seien e, e' neutrale Elemente von G . Dann ist $e \circ e' = e$, da e' ein neutrales Element ist und gleichzeitig $e \circ e' = e'$, da e ebenfalls ein neutrales Element ist. Somit folgt $e' = e \circ e' = e$.

(2) Seien $a, b \in G$ beide Inverse von $c \in G$. Dann folgt mit e als neutralem Element von G :

$$a = e \circ a = (b \circ c) \circ a = b \circ (c \circ a) = b \circ e = b.$$

(3) Aus $a \circ b = a \circ c$ folgt $a^{-1} \circ a \circ b = a^{-1} \circ a \circ c$, da die Verknüpfung mit demselben Element auf beiden Seiten keine Veränderung der Gleichheit hervorruft. Somit ist $b = c$. Analog folgt aus $b \circ a = c \circ a$ durch Verknüpfung von a^{-1} von rechts: $b \circ a \circ a^{-1} = c \circ a \circ a^{-1}$ und damit ebenfalls $b = c$.

(4) Es gilt:

$$\begin{aligned} & (g_1 \circ g_2 \circ \dots \circ g_n) \circ (g_n^{-1} \circ \dots \circ g_2^{-1} \circ g_1^{-1}) \\ &= g_1 \circ g_2 \circ \dots \circ g_n \circ g_n^{-1} \circ \dots \circ g_2^{-1} \circ g_1^{-1}. \end{aligned}$$

Durch $g_n \circ g_n^{-1} = e = \dots = g_2 \circ g_2^{-1} = g_1 \circ g_1^{-1}$ bleibt nur das neutrale Element e übrig, sodass $g_n^{-1} \circ \dots \circ g_2^{-1} \circ g_1^{-1}$ das Inverse von $g_1 \circ g_2 \circ \dots \circ g_n$ darstellt. $\square$

Die Menge der Isometrien aus dem ersten Kapitel stellt eine Gruppe dar, in der jedes Element laut Definition ein eindeutiges Inverses besitzt. Diese können konkret wie folgt aufgelistet werden:

Das Inverse der Spiegelung an einer Spiegelebene ist die erneute Spiegelung an derselben Ebene, wodurch der Körper sich wieder in seiner Ausgangslage befindet. Analog liegt auch bei einer Punktspiegelung nach der zweifachen Anwendung der Operation wieder der Ausgangskörper vor.

Spiegelungen sind demnach **selbstinvers**.

2.1.9. Definition selbstinvers:

Sei $(G, \circ)$ eine Gruppe mit $e, g^{-1} \in G$. Dann gilt $g \circ g = e$ bzw. $g^{-1} = g$ für $g \in G$. Eine Symmetrieoperation ist demnach **selbstinvers**, wenn die doppelte Hintereinanderausführung einer Operation wieder das neutrale Element ergibt.

Die **Translation** eines Körpers ist hingegen **nicht selbstinvers**, weil der Verschiebungsvektor umgekehrt werden muss, um wieder die Identität zu erhalten. Die inversen Elemente können jedoch einfach bestimmt werden, indem der entsprechende Verschiebungsvektor mit -1 multipliziert wird:

Ist $f(x) = x + u$ eine Translation mit Verschiebungsvektor u , so stellt $f^{-1}(x) = x - u$ das zugehörige inverse Element dar.

Drehungen sind ebenfalls **nicht selbstinvers**, da eine Drehung um einen positiven Winkel immer in die gleiche Richtung erfolgt und sich die Inversen somit zu 360° oder Vielfachen hiervon ergänzen müssen. Ausnahmen stellen hierbei Drehungen um Vielfache von 180° dar. Diese entsprechen entweder der

Spiegelung an einer Geraden oder als Vielfache von 360° direkt der Identität und sind somit in beiden Fällen selbstinvers. Ein Beispiel für die Existenz nicht selbstinverser Drehoperationen findet sich auch in einem gleichseitigen Dreieck.

2.1.10. Beispiel (nicht selbstinverse Drehoperationen im gleichseitigen Dreieck):

In einem gleichseitigen Dreieck liegen als einfachste Symmetrieelemente Drehungen um 120° , 240° und 360° vor, die ab jetzt durch d_{120° , d_{240° und d_{360° ausgedrückt werden. Das Inverse der Drehung um 120° ist dabei die Drehung um 240° und umgekehrt, während die Drehung um 360° die Identität darstellt und folglich selbstinvers ist.

Gleitspiegelungen, Schraubungen und Rotationsspiegelungen sind als Verknüpfung einer selbstinversen mit einer nicht selbstinversen Operation ebenfalls **nicht selbstinvers**:

Das Inverse einer Gleitspiegelung ist ebenfalls wieder eine Gleitspiegelung, bei der der Verschiebungsvektor jedoch analog zur gewöhnlichen Translation mit -1 multipliziert werden muss. Auch bei der Schraubung kann als inverses Element erneut eine Schraubung verwendet werden, die die Translation umkehrt und den ersten Drehwinkel zu einem Winkel von 360° oder einem Vielfachen hiervon ergänzt. Bei einer Rotationsspiegelung wird das Element der Spiegelung als selbstinverse Operation beibehalten, allerdings muss auch hier die Drehoperation zu dem nächstgrößeren Vollwinkel erweitert werden.

Um das Beispiel der Drehungen im Dreieck erneut aufzugreifen und die Elemente inklusive ihrer Inverser vollständig aufzuschreiben, kann eine sogenannte Verknüpfungstafel eingesetzt werden.

2.1.11. Definition Verknüpfungstafel:

Eine **Verknüpfungstafel** ist eine Tabelle, die zweistellige Verknüpfungen ausdrückt und sowohl in der ersten Zeile als auch in der ersten Spalte die zu untersuchenden Symmetrieelemente enthält. Die einzelnen Felder im Inneren geben dabei an, welches Symmetrieelement durch die Anwendung des Elements in der ersten Spalte, gefolgt von der Anwendung des Elements in der ersten Zeile, entsteht.

Zum Ausfüllen der Tabelle werden die einzelnen Kombinationsmöglichkeiten betrachtet und das jeweilige Ergebnis ergänzt. Da die Drehung d_{120° eines gleichseitigen Dreiecks verknüpft mit d_{240° der Drehung d_{360° entspricht und damit wieder zur Identität führt, wird an dieser Stelle der Tabelle ein e für Identität ergänzt. Insgesamt ergibt sich die nachgestellte Verknüpfungstafel für die Drehoperationen eines gleichseitigen Dreiecks:

Tabelle 3: Verknüpfungstafel für die Drehoperationen eines gleichseitigen Dreiecks.

$\circ$	d_{120°	d_{240°	$d_{360^\circ} = e$
d_{120°	d_{240°	e	d_{120°
d_{240°	e	d_{120°	d_{240°
$d_{360^\circ} = e$	d_{120°	d_{240°	e

Unter Betrachtung der Tabelle wird deutlich, dass sich die Verknüpfung zweier Drehungen immer wieder durch ein Element aus der ursprünglichen Menge der Drehoperationen darstellen lässt. Dies liegt daran, dass jeder Winkel größer als der Vollwinkel einem Winkel zwischen 0° und 360° zugeordnet werden kann. Die Drehung um einen Winkel von 480° dreht die Figur beispielsweise insgesamt nur um 120° . Die untersuchte Menge ist demnach abgeschlossen nach Definition 2.1.2.

Darüber hinaus besagt Satz 2.1.8, dass die Menge der Drehoperationen genau ein neutrales Element e sowie eindeutige Inverse enthält. Dies wird in Tabelle 3 daran deutlich, dass jede Zeile und jede Spalte genau einmal die Identität enthalten. Zusätzlich ist die Verknüpfung assoziativ, da zum Beispiel gilt:

$$(d_{120^\circ} \circ d_{120^\circ}) \circ d_{240^\circ} = d_{240^\circ} \circ d_{240^\circ} = d_{120^\circ} = d_{120^\circ} \circ e = d_{120^\circ} \circ (d_{120^\circ} \circ d_{240^\circ}).$$

Somit kann bereits durch die Betrachtung der Verknüpfungstafel festgestellt werden, dass die **Menge der Drehoperationen inklusive ihrer Hintereinanderausführung als Verknüpfung** eine eigene **Gruppe** bildet, die zudem **auch kommutativ** ist.

Eine weitere wichtige Eigenschaft, die mit Hilfe der Tabelle deutlich wird, ist die Möglichkeit der Darstellung jedes Elements durch die Hintereinanderausführung der kleinsten Drehung:

$$d_{120^\circ} = d_{120^\circ},$$

$$d_{240^\circ} = d_{120^\circ} \circ d_{120^\circ},$$

$$d_{360^\circ} = d_{120^\circ} \circ d_{120^\circ} \circ d_{120^\circ}.$$

Betrachte als weiteres Beispiel ein ebenes Quadrat. Dieses besitzt als Symmetrieoperationen unter anderem die Drehungen d_{90° , d_{180° , d_{270° und d_{360° , welche wieder zur selben Gestalt führen und anhand von Abbildung 7 sichtbar werden.

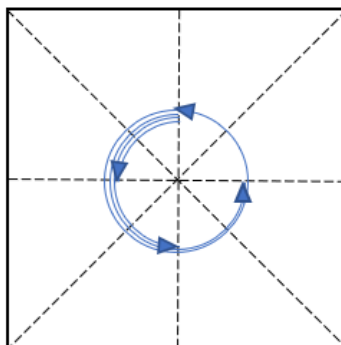


Abbildung 7: Quadrat mit eingezeichneten Spiegelachsen und Drehmöglichkeiten.

Durch die Bezeichnung der kleinstmöglichen Drehung um 90° als „ d “ statt d_{90° kann die Gruppe der Drehungen D° wie folgt dargestellt werden:

$$D^\circ = \{d, d^2, d^3, d^4 = e\} \text{ mit } d_{180^\circ} = d^2 = d \circ d, d_{270^\circ} = d^3 = d \circ d \circ d \text{ und } d_{360^\circ} = d^4 = d \circ d \circ d \circ d = e.$$

Eine derartige Gruppe wird als zyklisch bezeichnet.

2.1.12. Definition zyklische Gruppe (Glosauer, 2016):

Eine Gruppe $(G, \circ)$ heißt **zyklisch**, wenn sie durch ein einziges Element erzeugt wird. Weil jedes der regelmäßigen n -Ecke ebenfalls einer **zyklischen Gruppe** entspricht, werden diese allgemein durch C_n gekennzeichnet, wobei n die Zahl der Ecken angibt.

Da das neutrale Element e Bestandteil jeder Gruppe sein muss, gilt für jedes Element, welches eine zyklische Gruppe erzeugt: Es gibt ein $n \in \mathbb{N}$, sodass gilt: $g^n = e$. Dieser Wert wird in Abgrenzung zur Ordnung einer Gruppe auch als Ordnung des Elements bezeichnet.

2.1.13. Definition Ordnung/ Periode eines Elements (Rosebrock, 2019):

Die **Ordnung** oder **Periode** eines Elements $g \in G$ ist die kleinste Zahl $n \in \mathbb{N}$, sodass gilt:

$$g^n = e. \text{ Man schreibt } |g| = n, \text{ falls } |g| < \infty.$$

In unserem Beispiel ist $d^4 = e$, sodass d als Erzeuger der Gruppe der Drehungen die Ordnung vier besitzt. Aber auch für alle anderen Elemente g einer Gruppe gibt es einen kleinsten Exponenten n , sodass gilt $g^n = e$:

d^3 als Drehung um 270° muss zum Erhalten der Identität viermal verknüpft werden und hat dementsprechend die Ordnung vier, während die Drehung um 180° nur eine Periodenlänge von zwei aufweist. Die Drehung um 360° als Identität selbst besitzt die Ordnung eins, da gilt: $d_{360^\circ} = e$.

Der Zusammenhang zwischen der Ordnung einer Gruppe, der Ordnung der enthaltenen Elemente sowie der Eigenschaft, dass es sich um eine zyklische Gruppe handelt, wird im folgenden Satz verdeutlicht:

2.1.14. Satz (Rosebrock, 2019):

Ist $|g| < \infty$ und gilt $|g| = |G|$, so ist $G = \langle g \rangle$. Man sagt auch: **g ist der Erzeuger von G** .

Beweis:

Es genügt zu zeigen, dass G von g erzeugt wird, da nach Definition G dann bereits zyklisch ist.

Sei $|g| = |G| = n$. Dann ist $g^n = e$ und $g^i \neq e$ für alle $1 < i < n$. Damit ist $\{e, g^1, g^2, \dots, g^{n-1}\}$ eine Menge mit n verschiedenen Elementen. Angenommen, es gelte $g^i = g^j$ für $i, j < n$. Dann ist nach der Eigenschaft (2) in Satz 2.1.8: $g^i = g^j \Rightarrow g^{i-j} = e$. Sei ohne Einschränkung $i > j$ also: $0 \leq i - j < n$. Somit ist nach der Annahme $i = j$. Dadurch sind alle Elemente g^i, g^j mit $i \neq j$ aus $\{e, g^1, g^2, \dots, g^{n-1}\}$ wie behauptet unterschiedlich mit $1 < i, j < n$. Weil auch $|G| = n$ gilt, folgt: $G = \{e, g^1, g^2, \dots, g^{n-1}\}$. Jedes Element der Gruppe lässt sich dementsprechend als Potenz von g schreiben, sodass g die gesamte Gruppe erzeugt. □

Unter erneuter Betrachtung von Abbildung 7 wird deutlich, dass ein Quadrat nicht nur durch Drehungen auf sich selbst abgebildet werden kann, sondern auch durch Spiegelungen entlang verschiedener Achsen, die in der Darstellung durch gestrichelte Linien gekennzeichnet sind. Hierbei fällt auf, dass die Ordnung von Spiegelungen immer zwei beträgt. Dies kann damit begründet werden, dass Spiegelungen selbstinvers sind und eine gerade Anzahl an Ausführungen der entsprechenden Operation wieder zur Ausgangslage der Figur führt.

Die Gruppe der Symmetrieoperationen für das Quadrat setzt sich insgesamt aus vier Drehungen inklusive der Identität als Drehung um 360° sowie vier Spiegelungen zusammen. Weil die Anzahl an Symmetrieoperationen ebener, regelmäßiger n -Ecke stets einer gewissen Gesetzmäßigkeit entspringt, werden die entstehenden Gruppen als Diedergruppen bezeichnet und mit D_n abgekürzt. Der Index n gibt dabei die Zahl der Ecken an, weshalb die Gruppe der Symmetrieoperationen für das Quadrat auch als D_4 gekennzeichnet wird. Der Begriff der Diedergruppe kann jedoch auch für dreidimensionale Körper verallgemeinert werden:

2.1.15. Definition Diedergruppe (Brückler, 2019):

Sei $n \geq 2 \in \mathbb{N}$. Eine **Diedergruppe D_n** ist eine endliche Gruppe der Ordnung $2n$ mit zwei Generatoren. Der erste Generator ist eine Drehung n -facher Ordnung um die Hauptachse, als zweiter Generator kann eine Rotationsachse senkrecht zur ersten gewählt werden, sodass eine Drehung zweiter Ordnung vorliegt.

Zusätzlich zu der hier genannten, geometrischen Definition der Diedergruppe ist es möglich, diese auch auf algebraische Weise zu beschreiben. Aufgrund der größeren Gewichtung der Geometrie in den nachfolgenden Kapiteln wird diese jedoch außer Acht gelassen. Dass es sich bei der Menge aller

Symmetrieoperationen des Quadrats tatsächlich um eine Gruppe handelt, kann ebenfalls auf allgemeine n -Ecke übertragen und wie folgt bewiesen werden (Rosebrock, 2019):

2.1.16. Lemma:

Für $n \geq 2$ bildet $(D_n, \circ)$ eine **Gruppe**.

Beweis:

Weil es sich bei Symmetrieoperationen per Definition um längenerhaltende Abbildungen handelt, führt auch die Verknüpfung zweier längenerhaltender Abbildungen zu einer längenerhaltenden Abbildung, sodass die Menge D_n abgeschlossen ist. Außerdem gilt für alle Operationen $s, t, v \in D_n$ und einen festen Punkt x in der Ebene:

$$(s \circ t) \circ v(x) = s(t(v(x))) = s \circ (t \circ v)(x),$$

was bereits exemplarisch für D_3 gezeigt wurde. Demnach ist die zugehörige Verknüpfung zu D_n assoziativ. Das neutrale Element stellt die Identität dar, die keine Veränderung an der Ausgangsfigur vornimmt und für jedes n -Eck existiert. Außerdem findet sich für jede Symmetrieoperation d aus der untersuchten Menge eine eindeutige Abbildung d' , die diese aufhebt und die Figur wieder auf sich selbst abbildet. Da dieses d' wieder einer eigenen Symmetrieoperation entspricht, ist es ebenfalls Teil der Menge D_n .

Insgesamt erfüllt die Menge der Symmetrieelemente der regelmäßigen n -Ecke D_n mit der allgemeinen Verknüpfung $\circ$ die Eigenschaften einer Gruppe für $n \geq 2$. $\square$

Bei dem Quadrat aus Abbildung 7 stellt der erste Generator die senkrechte Achse durch den Mittelpunkt des Quadrats als Schnittpunkt der beiden Diagonalen dar, um welchen das Quadrat viermal gedreht werden kann. Der zweite Generator fasst die Spiegelungen des Quadrats an den Diagonalen und den Mittelsenkrechten zusammen, die alle in einer Ebene liegen und damit senkrecht auf der ersten Rotationsachse stehen. Insgesamt lässt sich jedes regelmäßige Vieleck mit n Ecken n -mal drehen und an n Achsen spiegeln, was zu einer Anzahl von $2n$ Symmetrie-Elementen führt. Eine Zusammenfassung für die Diedergruppen D_3 bis D_6 mit den Abkürzungen d für eine Drehungen um $\frac{360^\circ}{n}$ und s für die Spiegelungen entlang der Hauptachsen ist in Tabelle 4 dargestellt.

Tabelle 4: Zusammenfassung der Diedergruppen D_3 bis D_6 inklusive ihrer Eigenschaften.

	D_3	D_4	D_5	D_6
Aussehen				
Ordnung	6	8	10	12
Symmetrieelemente	$d, d^2, d^3 = e,$ s_1, s_2, s_3	$d, d^2, d^3, d^4 = e,$ s_1, s_2, s_3, s_4	$d, d^2, d^3, d^4,$ $d^5 = e, s_1, s_2,$ s_3, s_4, s_5	$d, d^2, d^3, d^4,$ $d^5, d^6 = e, s_1,$ s_2, s_3, s_4, s_5, s_6

Bei genauerer Untersuchung von **Diedergruppen** wird deutlich, dass diese **für $n \geq 3$ nicht abelsch** sind. Dies kann mit Hilfe der vollständigen Verknüpfungstafel für die Gruppe D_3 gezeigt werden, in welcher zuerst die Elemente der ersten Spalte g und danach die Elemente der ersten Zeile h auf das Dreieck angewendet werden. Für die Darstellung der Verknüpfung gilt: $(h \circ g)(\cdot) = h(g(\cdot))$.

Tabelle 5: Verknüpfungstafel für die Symmetrieoperationen eines gleichseitigen Dreiecks.

$\circ$	d_{120°	d_{240°	$d_{360^\circ} = e$	s_1	s_2	s_3
d_{120°	d_{240°	e	d_{120°	s_3	s_1	s_2
d_{240°	e	d_{120°	d_{240°	s_2	s_3	s_1
$d_{360^\circ} = e$	d_{120°	d_{240°	e	s_1	s_2	s_3
s_1	s_2	s_3	s_1	e	d_{120°	d_{240°
s_2	s_3	s_1	s_2	d_{240°	e	d_{120°
s_3	s_1	s_2	s_3	d_{120°	d_{240°	e

Nach Tabelle 5 gilt unter anderem: $s_1 \circ d_{240^\circ} = s_3 \neq s_2 = d_{240^\circ} \circ s_1$.

Das Beispiel zeigt, dass die Kommutativität für Diedergruppen mit $n = 3$ nicht erfüllt ist. Dies lässt sich analog für alle $n > 3$ zeigen, weshalb Diedergruppen für $n \geq 3$ nicht kommutativ sind. Da alle Elemente der Gruppe in jeder Zeile und Spalte allerdings genau einmal vorkommen, handelt es sich insgesamt um eine nicht abelsche Gruppe.

Betrachte in Abgrenzung hierzu erneut nur die Menge der Drehungen des gleichseitigen Dreiecks aus Tabelle 3. Diese bilden eine Gruppe, die im Gegensatz zu D_3 auch abelsch ist. Die Gruppe der Drehungen stellt somit eine Gruppe innerhalb einer Gruppe dar, was als Untergruppe bezeichnet wird. Solche Untergruppen können, wie zuvor beschrieben, andere Eigenschaften aufweisen als die übergeordnete Gruppe. Diese Eigenschaften und Zusammenhänge werden in Kapitel 2.2 näher erläutert.

2.2. Untergruppen

Nachdem in Kapitel 2.1 gezeigt wurde, dass Gruppen gemeinsame Eigenschaften besitzen, liegt es nahe, dass Gruppen mit denselben Elementarten durch Ergänzen oder Entfernen bestimmter Elemente geradewegs ineinander überführt werden können. Das entstehende Konstrukt zwischen den Gruppen führt zum Begriff der Untergruppen, der diesem eine gewisse Struktur verleiht. Besonders hervorzuheben ist hierbei das Untergruppenkriterium (2.2.11), welches eine notwendige Voraussetzung liefert, ob es sich bei einer Gruppe um die Untergruppe einer anderen handelt oder nicht.

2.2.1. Definition Untergruppe (Rosebrock, 2019):

Eine Teilmenge U einer Gruppe G heißt **Untergruppe von G** , wenn U mit der Verknüpfung von G wieder eine Gruppe bildet. Eine Untergruppe U von G wird durch $U \leq G$ notiert.

Jede Gruppe besitzt mindestens eine Untergruppe, da sie das neutrale Element enthält. Dieses erfüllt zusammen mit jeder Verknüpfung die Gruppenaxiome (G1) bis (G3) aus Definition 2.1.1 und stellt damit eine eigene Gruppe dar, die auch triviale Gruppe genannt wird.

2.2.2. Definition triviale Gruppe:

Die **triviale Gruppe** $(\{e\}, \circ)$ ist eine einelementige Gruppe, die nur das neutrale Element e enthält. Die einzige mögliche Gruppenoperation lautet: $e \circ e = e$.

Durch die Selbstinvertierbarkeit und das Vorhandensein eines einzigen Elements können alle Gruppeneigenschaften der trivialen Gruppe einfach nachgewiesen werden. Über die triviale Gruppe hinaus beinhalten die meisten Gruppen weitere Untergruppen, deren Anzahl an Elementen kleiner ist als die Anzahl der Elemente der ursprünglichen Gruppe. Diese werden als echte Untergruppen bezeichnet.

2.2.3. Definition echte Untergruppe:

Unter einer **echten Untergruppe** versteht man eine Untergruppe von G , die weder der trivialen Gruppe noch der Gruppe G selbst entspricht. Schreibe: $U < G$.

Um konkrete Beispiele von echten Untergruppen zu betrachten, wird zunächst die symmetrische Gruppe definiert, deren Elemente sogenannte Permutationen darstellen.

2.2.4. Definition Permutation, symmetrische Gruppe (Glosauer, 2016):

Sei M_n eine n -elementige Menge $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. Eine bijektive Selbstabbildung $\pi: M_n \rightarrow M_n$ heißt (n -stellige) **Permutation** von M_n . Die Menge aller n -stelligen Permutationen wird als **symmetrische Gruppe S_n** bezeichnet, also $S_n := \{\pi \mid \pi \text{ ist Permutation von } M_n\}$.

Die Anzahl der Elemente der symmetrischen Gruppe ist abhängig von der Anzahl der Elemente von M_n .

2.2.5. Lemma (Beutelspacher, 2003):

Sei M_n eine **n -elementige Menge** $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. Dann gibt es **genau $n!$ Permutationen** von M_n . Schreibe: $|S_n| = n!$.

Beweis:

Sei $M_n = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. Lege zunächst die Bilder $\pi(1), \pi(x_2), \dots, \pi(x_n)$ fest, um die Permutation π zu bestimmen. Für $\pi(x_1)$ existieren n Möglichkeiten, weil alle Elemente von M_n verfügbar sind. Sobald $\pi(x_1)$ festgelegt ist, gibt es für $\pi(x_2)$ nur noch $n - 1$ Möglichkeiten, und zwar alle bis auf $\pi(x_1)$. Diese Überlegung kann für alle Elemente weitergeführt werden, sodass das vorletzte Element x_{n-1} nur noch zwei Möglichkeiten besitzt, da $\pi(x_1), \pi(x_2), \dots, \pi(x_{n-2})$ bereits festgelegt sind. Für das letzte Element x_n bleibt nur noch eine Möglichkeit übrig. Demnach liegen insgesamt $n \cdot (n - 1) \cdot \dots \cdot 2 \cdot 1 = n!$ Möglichkeiten vor, eine Permutation von M_n festzulegen, weshalb es auch $n!$ verschiedene Permutationen gibt. $\square$

Die symmetrische Gruppe einer vierelementigen Menge beinhaltet nach dem vorangegangenen Lemma $4! = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 24$ Elemente. Bevor diese notiert werden können, muss allerdings zunächst geklärt werden, wie eine Permutation beschrieben werden kann. Zu diesem Zweck werden vorab einige notwendige Begriffe definiert, um im Anschluss die beiden geläufigsten Schreibweisen vorzustellen und zu erläutern.

2.2.6. Definition Fixpunkt einer Permutation, zyklische Permutation, Länge eines Zyklus:

Sei π eine Permutation der Menge M_n . Diese hält das Element $x_i \in M_n$ fest, wenn gilt $\pi(x_i) = x_i$. In diesem Fall wird x_i **Fixpunkt der Permutation** genannt. Darüber hinaus heißt eine Permutation **zyklische Permutation**, falls die, von π bewegten, Elemente in einem Zyklus vertauscht werden können: Es existieren also paarweise verschiedene $x_1, \dots, x_m \in \{x_1, \dots, x_n\}$, sodass einerseits $\pi(x_i) = x_{i+1}$ für alle $i \in \{x_1, \dots, x_{m-1}\}$ sowie $\pi(x_m) = x_1$ gilt und andererseits $\pi(x) = x$ für alle $x \notin \{x_1, \dots, x_m\}$. Die Anzahl der Elemente einer solchen zyklischen Permutation wird als **Länge eines Zyklus** bezeichnet.

Ist eine Wahl der Nummerierung der Elemente fest getroffen, wird häufig $\pi(i) = j$ statt $\pi(x_i) = j$ für $i, j \in \mathbb{N}$ geschrieben. Mit Hilfe dieser Definitionen können die zwei üblichen Notationen genauer beschrieben werden:

2.2.7. Notationen einer Permutation (Beutelspacher, 2003):

- **Zweizeilenform:** Die erste Möglichkeit zum Notieren einer Permutation ist die Darstellung über eine Matrix mit zwei Zeilen und n Spalten. In der ersten Zeile stehen die n Elemente der Menge, die für gewöhnlich in ihrer natürlichen Reihenfolge angegeben werden. In der zweiten Zeile stehen unter jedem Element die zugehörigen Bilder. Eine sechselementige Menge wird beispielsweise demzufolge dargestellt:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ \pi(1) & \pi(2) & \pi(3) & \pi(4) & \pi(5) & \pi(6) \end{pmatrix}$$

- **Zyklenschreibweise:** Die zweite Möglichkeit liefert eine einzeilige Schreibweise, die dadurch deutlich kürzer ist und häufiger verwendet wird. Hierbei wird bei einem beliebigen Element begonnen und notiert, auf welches dieses abbildet. Im Anschluss wird, von dieser Zahl ausgehend, so lange weiter untersucht, auf welches Element diese abgebildet wird, bis das ursprüngliche Element wieder erreicht ist. Damit entsteht ein erster Zyklus. Dieses Schema wird so oft angewendet, bis alle Elemente in einem der entstandenen Zyklen enthalten sind. Zyklische Permutationen der Länge eins stellen nach Definition Fixpunkte dar und werden beim Aufschreiben der Permutation vernachlässigt, während die übrigen Zyklen in beliebiger Reihenfolge aneinandergereiht werden.

Zur Verdeutlichung der beiden Notationen werden diese anhand desselben Beispiels gezeigt:

2.2.8. Beispiel (Schreibweise von Permutationen):

1. Möglichkeit:

$$\pi = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 1 & 5 & 4 & 6 & 3 \end{pmatrix}$$

2. Möglichkeit:

$$\pi = (1, 2)(3, 5, 6)$$

Die Permutation π bildet das Element 1 auf die 2 ab und umgekehrt. Darüber hinaus bildet sie die 3 auf die 5, die 5 auf die 6 und die 6 wieder auf die 3 ab, sodass ein Zyklus der Länge zwei und ein Zyklus der Länge drei vorgefunden wird. Das Element 4 wird durch die Permutation auf sich selbst abgebildet, weshalb es sich hierbei um einen Fixpunkt handelt.

Wegen der effizienteren Zyklenschreibweise wird diese im Verlauf der restlichen Arbeit eingesetzt, um Permutationen anzugeben. Die 24 Elemente der symmetrischen Gruppe S_4 lauten nach Anwendung dieser Darstellung:

$$\begin{aligned} S_4 = \{ & (1), (1,2), (1,3), (1,4), (2,3), (2,4), (3,4), (1,2)(3,4), (1,3)(2,4), (1,4)(2,3), (1,2,3), \\ & (1,2,4), (1,3,2), (1,3,4), (1,4,2), (1,4,3), (2,3,4), (2,4,3), (1,2,3,4), (1,2,4,3), (1,3,2,4), \\ & (1,3,4,2), (1,4,2,3), (1,4,3,2) \}. \end{aligned}$$

Anhand der oben aufgeführten Elemente wird schnell deutlich, dass es sich bei der symmetrischen Gruppe S_4 tatsächlich um eine mathematische Gruppe handelt. Die Aussage kann jedoch auch für allgemeine S_n mit $n \in \mathbb{N}$ gezeigt werden.

2.2.9. Lemma:

Die **symmetrische Gruppe** S_n erfüllt zusammen mit der Komposition von Abbildungen als Verkettungen die **Eigenschaften einer Gruppe** für alle $n \in \mathbb{N}$.

Beweis:

Die Gesamtmenge an Permutationen ist abgeschlossen bezüglich ihrer Verknüpfungen, da jede Permutation nur die Reihenfolge der Elemente vertauscht, die in der Menge enthalten sind. Durch die Hintereinanderausführung mehrerer Permutationen kann demnach kein Element außerhalb der Menge getroffen werden, sondern es erfolgt lediglich eine erneute Veränderung der Reihenfolge. Zudem ist die Reihenfolge dreier Verknüpfungen der Elemente für das Endergebnis irrelevant, sodass die symmetrische Gruppe auch assoziativ ist. Das neutrale Element der Gruppe wird durch diejenige Permutation dargestellt, welche jede Zahl auf sich selbst abbildet. Diese wird per Definition mit (1) ausgedrückt. Des Weiteren lässt sich jede Änderung durch eine eindeutige Permutation wieder umkehren, so ist beispielsweise das Inverse zu (1,3,2) die Permutation (1,2,3). Die symmetrische Gruppe erfüllt demzufolge die Gruppenaxiome (G1) bis (G3) und ist somit eine Gruppe. $\square$

Auch die Elemente der Diedergruppe aus Abschnitt 2.1 können mit Hilfe von Permutationen ausgedrückt werden:

Zunächst werden die vier Eckpunkte des Quadrats in der Gruppe D_4 mit den Zahlen eins bis vier beschriftet. Im Anschluss wird die Veränderung der Lage der Eckpunkte mit Hilfe von Permutationen ausgedrückt. Die Drehung des Quadrates um 270° kann beispielsweise als (1,4,3,2) beschrieben werden, was in Abbildung 8 sichtbar wird.

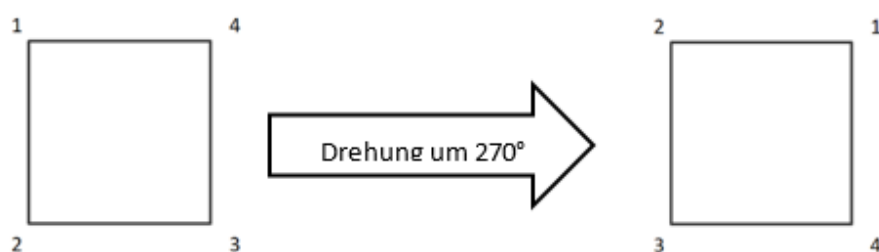


Abbildung 8: Exemplarische Darstellung der Drehung eines Quadrats um 270° .

Die eins steht nach der Drehung an der ursprünglichen Stelle der vier, während diese sich an der dritten Ecke befindet und so weiter. Dadurch entsteht insgesamt eine neue Anordnung der Eckpunkte, die durch (1,4,3,2) ausgedrückt wird. Die Menge aller Elemente der Diedergruppe für ein Quadrat lauten in Permutationsschreibweise:

$$D_4 = \{(1), (1,3), (2,4), (1,2)(3,4), (1,3)(2,4), (1,4)(2,3), (1,2,3,4), (1,4,3,2)\}.$$

Aufgrund des Ausdrückens der Symmetrioperationen durch Permutationen ist es leicht möglich, die Diedergruppe beispielsweise mit der symmetrischen Gruppe zu vergleichen und Aussagen über ihre Beziehung zu treffen.

2.2.10. Beispiel (echte Untergruppen):

- Die Diedergruppe ist eine echte Untergruppe der symmetrischen Gruppe: $D_n < S_n$ für $n \geq 3$.
- Die zyklische Gruppe ist eine echte Untergruppe der Diedergruppe: $C_n < D_n$ für $n \geq 2$.

Es ist bereits bekannt, dass es sich sowohl bei der Dieder- als auch bei der symmetrischen und der zyklischen Gruppe um Gruppen handelt. Die symmetrische Gruppe hat mit $n!$ Elementen für $n \geq 3$ mindestens genauso viele Elemente wie die Diedergruppe, deren Ordnung $2n$ beträgt. Die zyklische Gruppe enthält n Elemente und damit noch einmal halb so viele wie die Diedergruppe. Während S_n alle möglichen Permutationen des n -Ecks und somit alle Spiegelungen und Rotationen zusammenfasst, gibt D_n in Abgrenzung hierzu nur die Elemente an, die durch Rotation um zwei, senkrecht aufeinander stehende Achsen entstehen. Dabei werden jedoch nicht alle möglichen Spiegelungen eines Körpers berücksichtigt, sodass D_n einer echten Untergruppe der symmetrischen Gruppe S_n entspricht. Die zyklische Gruppe fasst wiederum nur die Elemente zusammen, welche durch Rotation um die Hauptdrehachse entstehen, sodass C_n für $n \geq 2$ eine echte Untergruppe von D_n darstellt. Die zyklische Gruppe C_n ist damit außerdem eine echte Untergruppe von S_n für alle $n \geq 3$. Mathematisch wird dieser Sachverhalt durch das Untergruppenkriterium untermauert.

2.2.11. Satz Untergruppenkriterium (Rosebrock, 2019, S. 38):

Eine **nichtleere Teilmenge U von G** ist genau dann eine **Untergruppe von G** , wenn gilt:

$$ab^{-1} \in U \text{ für alle } a, b \in U.$$

Beweis:

„ $\Leftarrow$ “ Sei $ab^{-1} \in U$ für alle $a, b \in U$ und U Teilmenge von G . Überprüfe die Gruppeneigenschaften für U als Untergruppe von G :

- Assoziativität:

U ist nicht leer. Dadurch existieren Elemente in U , für die zusätzlich gilt, dass sie in G liegen, weil U Teilmenge von G ist. Da die Assoziativität in G als Gruppe bereits für alle enthaltenen Elemente gegeben ist, gilt diese auch für die Menge U als Teilmenge.

- Existenz neutrales Element:

Mit $a = b$ folgt mit der Bedingung von oben: $ab^{-1} = aa^{-1} = e \in U$, sodass das neutrale Element von G ebenfalls in U liegt.

- Existenz inverser Elemente:

Mit $e, a \in U$ ist auch $ea^{-1} = a^{-1} \in U$ und somit liegt für jedes $a \in U$ das entsprechende Inverse auch in U .

- Abgeschlossenheit:

Zu $a, b \in U$ ist durch die Existenz der inversen Elemente auch $b^{-1} \in U$ gegeben. Dadurch gilt: $a(b^{-1})^{-1} = ab \in U$. Somit liefert die Verknüpfung zweier beliebiger Elemente aus U immer wieder ein Element in U , sodass die Gruppe auch abgeschlossen bezüglich ihrer Verknüpfung ist.

Damit ist U eine Untergruppe von G .

„ $\Rightarrow$ “ Wenn U eine Untergruppe von G ist und die Eigenschaften der Gruppe erbt, dann wird durch die Eigenschaft der Abgeschlossenheit unmittelbar deutlich, dass auch die Verknüpfung des Elements mit dem Inversen eines weiteren Elements wieder innerhalb der Untergruppe liegen muss. $\square$

Wie bereits in dem Beweis des Satzes 2.2.11 deutlich wird, werden einige Eigenschaften einer Gruppe an ihre Untergruppe vererbt. Unter diesem Aspekt kann auch der folgende Satz festgehalten werden.

2.2.12. Satz (Rosebrock, 2019):

Die **Untergruppe einer zyklischen Gruppe** ist **wieder zyklisch**.

Beweis:

Sei $G = \langle g \rangle$ eine zyklische Gruppe und $U \leq G$ eine nichttriviale Untergruppe. Wähle $g^n \in U$ so, dass n dem minimal möglichen Betrag aller Potenzen von g ungleich dem neutralen Element entspricht. Sei $g^k \in U$ ein beliebiges Element der Untergruppe. Führe eine Division mit Rest von k durch n durch. Damit ergibt sich $k = ni + r$ für $0 \leq r < n$ für $i, r \in \mathbb{N}$. Angewendet auf die Elemente der Gruppe folgt $g^k = g^{ni} \circ g^r \Leftrightarrow g^r = g^k \circ (g^n)^{-i}$. Da die rechte Seite der Gleichung als Verknüpfung von Elementen aus U wieder Element von U ist, muss auch $g^r \in U$ sein. Wegen des minimalen $|n|$ ist jedoch $r = 0$, sodass gilt: $g^k = (g^n)^i$. Hieraus folgt, dass sich jedes Element von U durch eine Potenz von g^n ausdrücken lässt. $U = \langle g^n \rangle$ ist also ebenfalls zyklisch. $\square$

Umgekehrt ist allerdings nicht jede Gruppe automatisch zyklisch, nur weil ihre Untergruppe zyklisch ist. Dies wird zum Beispiel an C_4 als zyklische Untergruppe der nicht-zyklischen symmetrischen Gruppe S_4 sichtbar.

Bei genauerer Betrachtung von S_4 wird zusätzlich deutlich, dass diese neben D_4 und C_4 eine Vielzahl weiterer Untergruppen besitzt, die teilweise wie die beiden genannten Gruppen auch untereinander

Untergruppen bilden. Diese Beziehungen werden in Abbildung 9 dargestellt, in welcher die verschiedenen Arten von Gruppen mit Hilfe derselben Farbe gekennzeichnet sind. Zur besseren Übersichtlichkeit werden nur die direkten Untergruppen einer Gruppe durch die Verbindungslinien gekennzeichnet, die Untergruppen einer Gruppe stellen jedoch immer auch weitere Untergruppen der übergeordneten Gruppe dar, weshalb D_2 beispielsweise ebenfalls eine Untergruppe von S_4 ist.

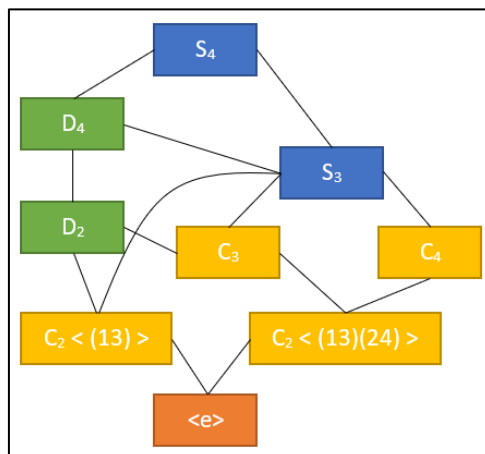


Abbildung 9: Untergruppen der S_4 .

Die Gruppen $C_2 <(13)>$ und $C_2 <(13)(24)>$ unterscheiden sich dadurch voneinander, dass bei der ersten zyklischen Gruppe zwei der vier Ecken beibehalten werden, was einer Drehung an der Diagonalen durch diese Punkte entspricht. Die zweite zyklische Gruppe vertauscht hingegen jeweils zwei gegenüberliegende Ecken miteinander, was die Drehung an einer, senkrecht zum Quadrat stehenden, Achse darstellt. Aufgrund der verschiedenen Elemente, die innerhalb der Gruppen enthalten sind, stellt die zyklische Gruppe $C_2 <(13)>$ keine Untergruppe von C_4 dar, wohingegen $C_2 <(13)(24)>$ zum Beispiel eine Untergruppe von C_4 ist.

Bei der Betrachtung von Abbildung 9 wird des Weiteren auch die Aussage des vorangehenden Satzes erneut ersichtlich: Es ist bereits bekannt, dass C_3 und C_4 zyklische Gruppen sind, weshalb die Untergruppen $C_2 <(13)(24)>$ und $<e>$ nach Satz 2.2.12 ebenfalls zyklisch sein müssen. Diese Eigenschaft ist bereits per Definition erfüllt.

Insgesamt besitzt die symmetrische Gruppe S_4 nicht nur Untergruppen von Körpern mit derselben Anzahl an Ecken, sondern auch Untergruppen, die die Symmetrieelemente kleinerer n -Ecke darstellen. Die symmetrische Gruppe der Dreiecke S_3 beinhaltet beispielsweise einen Teil der Elemente von S_4 und stellt gleichzeitig wieder eine, in sich abgeschlossene Gruppe dar.

Nachdem sich dieses Unterkapitel mit Untergruppen, deren Eigenschaften sowie dem Zusammenhang zwischen Gruppen und Untergruppen beschäftigt hat, kann die Beziehung darüber hinaus auch hinsichtlich der einzelnen Gruppenordnungen untersucht werden. Zu diesem Zweck wird im Anschluss der Satz von Lagrange thematisiert.

2.3. Satz von Lagrange

Joseph-Louis Lagrange war ein italienisch-französischer Mathematiker, der 1771 einen wichtigen Beitrag zur Gruppentheorie lieferte, indem er einen mathematischen Ansatz zur Bestimmung von Untergruppen entwickelte. Der daraus resultierende Satz spielt bis heute eine große Rolle bei der Untersuchung von Gruppen und verdeutlicht einen wichtigen Zusammenhang zwischen Gruppen und Untergruppen. Bevor jedoch der besagte Satz von Lagrange in 2.3.6 angesprochen werden kann, muss zunächst etwas Vorarbeit geleistet werden.

2.3.1. Definition Linksnebenklasse:

Sei H eine Untergruppe der Gruppe G mit $g \in G$. Dann heißt gH **Linksnebenklasse** und es gilt $gH = \{gh | h \in H\}$. Die Elemente von gH bilden eine Teilmenge von G .

Analog existieren sogenannte **Rechtsnebenklassen** mit $Hg = \{hg | h \in H\}$.

Besitzen eine Links- und eine Rechtsnebenklasse keine gemeinsamen Elemente, so sind sie disjunkt:

2.3.2. Definition disjunkt:

Zwei Mengen A und B heißen **disjunkt**, wenn sie kein gemeinsames Element besitzen.

Da die Elemente der Links- bzw. Rechtsnebenklasse von G eine Teilmenge von G bilden, ist es möglich, die gesamte Gruppe als Verknüpfung dieser Teilmengen zu schreiben.

2.3.3. Satz (Rosebrock, 2019, S. 41):

Sei G eine Gruppe und $H < G$ eine echte Untergruppe. Dann kann G als **disjunkte Vereinigung der Linksnebenklassen gH** geschrieben werden.

Beweis:

Mit $e \in H$ folgt

$$G = \bigcup_{g \in G} gH.$$

Dadurch ist in der Nebenklasse gH mindestens das Element g enthalten.

Zeige weiter: Wenn zwei Linksnebenklassen aH und bH ein beliebiges gemeinsames Element c haben, dann sind diese gleich:

Seien $c = ah_1$ und $c = bh_2$ mit $h_1, h_2 \in H$. Dann folgt $a = ch_1^{-1} = bh_2h_1^{-1}$. Dadurch hat jedes Element $ah \in aH$ die Form $ah = bh_2h_1^{-1}h = b(h_2h_1^{-1}h)$ und ist durch die Verknüpfung von Elementen aus H ebenfalls Element der Linksnebenklasse bH . Also gilt $aH \subset bH$. Analog kann die Beziehung $bH \subset aH$ gezeigt werden, sodass gilt $aH = bH$.

Da mehrfach auftretende Nebenklassen identisch sind, kann G aus disjunkten Linksnebenklassen zusammengesetzt werden. $\square$

Dieser Satz gilt ebenfalls für die Rechtsnebenklassen und wird auf die gleiche Weise bewiesen. Als unmittelbare Konsequenz folgt aus dem Satz, dass alle Nebenklassen dieselbe Ordnung besitzen müssen.

2.3.4. Lemma:

Ist $H < G$ **echte Untergruppe** einer Gruppe G , dann besitzen **alle H -Linksnebenklassen dieselbe Ordnung**.

Beweis:

Die Linkstranslation $l_g: H \rightarrow gH, h \mapsto gh$ ist bijektiv mit der Umkehrabbildung $l_{g^{-1}}$. Damit ist $|gH| = |l_g(H)| = |H|$ für alle $g \in G$. $\square$

Das Lemma kann analog für die Ordnung der Rechtsnebenklassen bewiesen werden.

Die **Gesamtmenge aller Nebenklassen** wird mit G/H bezeichnet. Demnach ist jedes Element der Menge G/H eine Nebenklasse. Die Gesamtzahl der Nebenklassen wird durch den sogenannten Index beschrieben.

2.3.5. Definition Index:

Der **Index von H in G** wird durch $\text{ind}(G:H) = |G:H| = \text{ord}(G/H)$ definiert.

Mit Hilfe dieses Vorwissens ist es möglich, den Satz von Lagrange zu beweisen.

2.3.6. Satz von Lagrange (Glosauer, 2016, S. 85):

Sei H eine Untergruppe der endlichen Gruppe G . Dann ist die **Ordnung von H Teiler der Ordnung von G** und der **Quotient von $\frac{|G|}{|H|}$ ist der Index von H in G** .

Schreibe: $H \leq G \Rightarrow |G:H| = \frac{|G|}{|H|} \in \mathbb{N}$.

Beweis:

Es seien $|G:H| = n \in \mathbb{N}$ der Index von H in G und

$$G = \bigcup_{i=1}^n g_i H$$

die disjunkte Zerlegung der Linksnebenklassen von G aus Satz 2.3.3. Aufgrund des letzten Lemmas folgen $|g_i H| = |H|$ für alle $i = \{1, 2, \dots, n\}$ und somit für die Ordnung von G :

$$|G| = n \cdot |H| = |G:H| \cdot |H|.$$

Aus der Division der Gleichung durch $|H|$ folgt die Behauptung. $\square$

Der Satz von Lagrange wird eingesetzt, um anhand der Ordnung einer Gruppe zu erkennen, ob eine zweite Gruppe eine Untergruppe darstellen kann oder nicht. Dies wird an nachfolgendem Beispiel noch einmal verdeutlicht.

2.3.7. Beispiel (Anwendung Satz von Lagrange):

Die Symmetriegruppe S_5 besitzt nach Lemma 2.2.5 genau $5! = 120$ Elemente. Nach dem Satz von Lagrange aus 2.3.6 sind als ganzzahlige Teiler von 120 echte Untergruppen der nachstehenden Ordnungen möglich:

2; 3; 4; 5; 6; 8; 10; 12; 15; 20; 24; 30; 40 und 60.

Die Diedergruppe D_7 beinhaltet $2 \cdot 7 = 14$ Elemente und somit die Ordnung 14, die keinem natürlichen Teiler von 120 entspricht. Nach dem Satz von Lagrange kann die Diedergruppe D_7 demnach keine Untergruppe der Symmetriegruppe S_5 sein.

Dass es sich bei einer Menge mit einer Verknüpfung um eine Untergruppe handelt, wird durch die Verknüpfung beliebiger Elemente und Inverser aus der entsprechenden Menge verdeutlicht. Werden hingegen ein Element aus der übergeordneten Gruppe, ein Element aus der Untergruppe sowie das zugehörige Inverse des ersten Elements miteinander verknüpft und befindet sich das entstehende Element wieder innerhalb der Untergruppe, dann wird die Gruppe als Normalteiler bezeichnet.

2.3.8. Definition Normalteiler (Brückler, 2019):

Sei N eine Untergruppe einer Gruppe G . Wenn gilt: $gng^{-1} \in N$ für alle $g \in G$ und $n \in N$, dann heißt N **Normalteiler von G** .

Eine andere Formulierung der Definition lautet: N heißt **Normalteiler von G** , wenn gilt:

Für alle $g \in G$ ist $gN = Ng$.

Schreibe auch: $N \trianglelefteq G$.

Betrachtet man erneut die Isometrie-Arten in der Ebene, so wird deutlich, dass die Menge der Translationen mit der Hintereinanderausführung derer beispielsweise eine Untergruppe der Isometriegruppe bildet. Sie lässt sich auch genauer als Normalteiler der Isometriegruppe klassifizieren.

2.3.9. Beispiel:

Die Translationen bilden einen Normalteiler in der Isometriegruppe der Ebene.

Beweis:

Der Beweis dieser Aussage lässt sich den Seiten 56 und 57 aus dem Kapitel über Translationen des Buches „Anschauliche Gruppentheorie. Eine computerorientierte geometrische Einführung.“ von Rosebrock (2019) entnehmen. $\square$

Um allgemein zu erkennen, ob es sich bei einer Untergruppe um einen Normalteiler handelt oder nicht, sollte die Menge der Nebenklassen genauer untersucht werden.

2.3.10. Satz (Rosebrock, 2019, S. 54):

Sei $N < G$. N ist ein **Normalteiler von G** ($N \trianglelefteq G$) genau dann, wenn die Nebenklassen gN für alle $g \in G$ eine **Gruppe G/N mit der Operation $g_iN \cdot g_kN = (g_i g_k)N$ bilden.**

Beweis:

„ $\Rightarrow$ “: Beachte zunächst: Für beliebige Untergruppen $N \leq G$ ist: $gN = g'N \Leftrightarrow g' \in gN$, was aus $N \trianglelefteq G$ folgt.

Zeige nun die Wohldefiniertheit der Verknüpfung: Seien dazu $h_i \in g_iN$ und $h_k \in g_kN$.

Dann gilt:

$$\begin{aligned} h_i h_k N &= h_i g_k N, & \text{da } h_k \in g_k N \\ &= h_i N g_k, & \text{weil } g_k N = N g_k \\ &= g_i N g_k, & \text{da } h_i \in g_i N \\ &= g_i g_k N, & \text{weil } g_k N = N g_k. \end{aligned}$$

Somit ist $g_iN \cdot g_kN = (g_i g_k)N$ wohldefiniert. Um die Hinrichtung des Beweises vollständig zu zeigen, müssten zusätzlich die Gruppenaxiome aus Definition 2.1.1 nachgerechnet werden, dies wird aber an dieser Stelle vernachlässigt und als gegeben angenommen.

„ $\Leftarrow$ “: Sei G/N eine Gruppe mit $g_iN \cdot g_kN = (g_i g_k)N$.

Mit $h_i = g_i \cdot n_i$ und $h_k = g_k \cdot n_k$ für $g_i, g_k \in G, n_i, n_k \in N$ folgt:

$$\begin{aligned} \exists w \in N: h_i \cdot h_k &= g_i \cdot g_k \cdot w. \\ \Leftrightarrow (g_i \cdot n_i) \cdot (g_k \cdot n_k) &= g_i \cdot g_k \cdot w \\ \Leftrightarrow n_i \cdot g_k \cdot n_k &= g_k \cdot w \\ \Leftrightarrow n_i \cdot g_k &= g_k \cdot w \cdot n_k^{-1} \text{ mit } w \cdot n_k^{-1} \in N. \end{aligned}$$

Für $n_i \in N$ ist $n_i \cdot g_k \in g_kN$, sodass gilt: $Ng_k \subseteq g_kN$.

Für g_k^{-1} statt g_k ergibt sich:

$$n_i \cdot g_k^{-1} = g_k^{-1} \cdot w \cdot n_k^{-1} \text{ oder } g_k \cdot n_i = w \cdot n_k^{-1} \cdot g_k.$$

Damit ist $g_kN \subseteq Ng_k$ und insgesamt $g_kN = Ng_k$. N ist demnach ein Normalteiler von G und die Aussage somit gezeigt. $\square$

Die oben angesprochene Gruppe inklusive der entsprechenden Operation wird als Faktorgruppe oder Quotient bezeichnet.

2.3.11. Definition Faktorgruppe/Quotient:

Sei $N \trianglelefteq G$. Die Gruppe G/N , bei der die Nebenklassen gN die Elemente darstellen und die Operation durch $g_iN \cdot g_kN = (g_i \cdot g_k)N$ bestimmt ist, heißt **Faktorgruppe von G nach N** . Die Gruppe G/N wird auch als **Quotient der Gruppe G** bezeichnet.

Das zweite Kapitel hat bisher Gruppen als Objekte der Gruppentheorie thematisiert. Um diese aufeinander abbilden zu können, werden ferner noch sogenannte Morphismen benötigt.

2.4. Homo- und Isomorphismen

Während eine Isometrie allgemein für eine längen- und abstandserhaltende Abbildung steht, die eine Menge auf eine weitere abbildet, kann diese Definition unter Einbezug von Gruppen konkretisiert werden. Um solche Abbildungen zwischen Gruppen von allgemeinen Abbildungen abzugrenzen, werden diese als Morphismen bezeichnet. Wegen ihrer Relevanz im Verlauf der Arbeit werden in diesem Kapitel Abbildungen von Gruppen auf Matrizen thematisiert. Da diese Darstellungen allerdings sehr schnell unübersichtlich sind, werden sogenannte Charaktere in Form von Skalaren eingeführt, die die betrachtete Darstellung ausdrücken und das Rechnen vereinfachen.

2.4.1. Definition (Gruppen-)Homomorphismus, Isomorphismus (Glosauer, 2016):

Eine Abbildung $\varphi: G \rightarrow H$ zwischen zwei Gruppen $(G, \circ)$ und $(H, *)$ heißt **(Gruppen-)Homomorphismus**, wenn für alle $a, b \in G$ gilt:

$$\varphi(a \circ b) = \varphi(a) * \varphi(b).$$

Ist die Abbildung φ zudem bijektiv, dann wird sie als **Isomorphismus** bezeichnet.

Über Homo- und Isomorphismen hinaus gibt es auch Morphismen, die nur injektiv oder nur surjektiv sind. Da diese jedoch für die Inhalte dieser Arbeit keine Rolle spielen, werden sie in der Definition vernachlässigt. Wichtig sind hingegen die Eigenschaften der zuvor definierten Abbildung, die im folgenden Lemma angesprochen werden.

2.4.2. Lemma:

Es gilt:

$$\varphi(e) = e' \text{ und}$$

$$\varphi(a^{-1}) = \varphi(a)^{-1} \text{ für } a, a^{-1}, e \in G \text{ und } e' \in H.$$

Jeder **Homomorphismus $\varphi: G \rightarrow H$** bildet das **neutrale Element von G** auf das **neutrale Element von H** und das **Inverse eines Elements** auf das **Inverse seines Bildes** ab.

Beweis:

Die Aussage des Lemmas lässt sich durch Anwendung der Definition nachweisen:

Sei $\varphi: G \rightarrow H$ ein beliebiger Homomorphismus mit e als neutralem Element von G und e' als neutralem Element von H . Dann ist:

$$\varphi(a) = \varphi(a \circ e) = \varphi(a) * \varphi(e).$$

Durch Multiplikation von links mit $\varphi(a)^{-1}$ folgt:

$$e' = \varphi(a)^{-1} * \varphi(a) = \varphi(a)^{-1} * \varphi(a \circ e) = \varphi(a)^{-1} * \varphi(a) * \varphi(e) = e' * \varphi(e).$$

Damit $e' = e' * \varphi(e)$ erfüllt ist, muss $\varphi(e)$ das neutrale Element e' von H sein. Somit wird e durch den Homomorphismus auf e' abgebildet.

Außerdem gilt nach Multiplikation von rechts mit $\varphi(a)^{-1}$:

$$e' = \varphi(e) = \varphi(a \circ a^{-1}) = \varphi(a) * \varphi(a^{-1}).$$

Es ist also $\varphi(a)^{-1} = \varphi(a^{-1})$, sodass das Inverse eines Elements auf das Inverse seines Bildes abgebildet wird. □

Während ein Homomorphismus die Abbildung einer Gruppe auf eine andere Gruppe beschreibt, kann eine Gruppe auch auf quadratische Matrizen abgebildet werden. Eine derartige Abbildung wird genauer als Darstellung bezeichnet.

2.4.3. Definition Darstellung (Aradi, 2022):

Die **Darstellung** $\Gamma: G \rightarrow \mathbb{R}^{n \times m}$ einer Gruppe ist ein Homomorphismus der Gruppe G auf quadratische, nicht singuläre Matrizen aus $\mathbb{R}^{n \times m}$ mit Matrixmultiplikation als Gruppenoperation, wobei n der Dimension der Darstellung entspricht.

Darstellungen können demnach ein- oder mehrdimensional sein. Dies ist abhängig von der Dimension der quadratischen Matrix.

2.4.4. Definition Dimension einer Darstellung:

Die **Dimension einer Darstellung** hängt von der Dimension der quadratischen Matrix dieser Darstellung ab.

Die Dimension einer Matrix setzt sich aus der Dimension des Kerns der Matrix und dem Rang der Matrix zusammen. Um den Kern einer Matrix zu berechnen, werden Vektoren gesucht, die multipliziert mit der vorgegebenen Matrix zum Nullvektor führen. Die maximale Anzahl der linear unabhängigen Vektoren, die eine solche Gleichung erfüllen, gibt die Dimension des Kerns an. Der Rang der Matrix lässt sich bestimmen, indem die Matrix durch Zeilenumformungen in eine Zeilenstufenform überführt wird. Der Rang stimmt dann mit der Anzahl der Nicht-Nullzeilen der Matrix überein. Insgesamt lässt sich zusammenfassen:

2.4.5. Dimensionssatz (Beutelspacher, 2003):

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Matrix. Dann gilt für die Dimension n der Matrix:

$$n = \dim(\ker(A)) + \operatorname{rg}(A),$$

mit $\dim$ = Dimension, $\ker$ = Kern und rg = Rang.

Wie bereits erwähnt, können Matrizen mit Hilfe von Zeilenumformungen verändert werden. Dabei ist die Entstehung sogenannter **Blockdiagonalmatrizen** möglich, deren Hauptdiagonaleinträge Teil von Blockmatrizen sind, während die übrigen Blöcke Nullmatrizen beinhalten (Beutelspacher, 2003). Blockdiagonalmatrizen haben die Form:

$$B = \begin{pmatrix} B_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & B_n \end{pmatrix}, \text{ wobei } B_k \text{ quadratische Matrizen darstellen für } k \in \{1, \dots, n\}.$$

Darstellungen, die sich in eine solche blockdiagonale Form umwandeln lassen, werden als **reduzibel** bezeichnet. Ist eine derartige Transformation hingegen nicht möglich, wird die Darstellung als **irreduzibel** beschrieben.

2.4.6. Definition *reduzibel, irreduzibel*:

Eine Darstellung ist **reduzibel**, wenn sie sich auf blockdiagonale Form transformieren lässt und **irreduzibel**, wenn sie sich nicht auf blockdiagonale Gestalt transformieren lässt.

Für die Anwendung in der Chemie spielen gerade die Matrizen mit irreduziblen Darstellungen eine wichtige Rolle. Um jedoch nicht mit großen und unübersichtlichen Tabellen arbeiten zu müssen, werden Charaktere eingeführt, die jedem Element einer Gruppe statt einer Matrix einen Zahlenwert zuordnen.

2.4.7. Definition *Charakter, Spur* (Aradi, 2022):

Der **Charakter** $\chi_i(A)$ des Gruppenelements A einer Gruppe G in der Darstellung Γ_i wird durch die Spur der zugehörigen Matrix angegeben, das heißt:

$$\chi_i(A) = \operatorname{Sp}(A) = \sum_{m=1}^{l_i} \Gamma_i(A)_{mm}.$$

l_i entspricht dabei der Dimension der Darstellung. Die **Spur** einer Matrix stellt die Summe der Hauptdiagonaleinträge einer Matrix dar.

Da Matrizen aus dem $\mathbb{R}^{n \times n}$ stammen, können mit Hilfe dieser auch komplexe Zahlen dargestellt werden, deren Gesamtheit dem Vektorraum $\mathbb{R}^2$ entspricht. Aus diesem Grund liegt auch die Spur der zugehörigen Matrix im Bereich der komplexen Zahlen, also $\chi_i(A) \in \mathbb{C}$. Für die Dimension eines Charakters gilt damit: $\dim(\chi) = \chi$, falls der Charakter reell ist und $\dim(\chi) = 2\chi$, wenn der Charakter

imaginär ist (Mathiak & Stingl, 1968). Folglich gibt es **ein- und mehrdimensionale Charaktere**. Wie viele Dimensionen ein Charakter genau besitzt, hängt zusätzlich zu dem Wert auch von der Dimension der Darstellung Γ ab.

Bevor die Anwendung der Charaktere in Zusammenhang mit den Punktgruppen in Kapitel III erläutert werden kann, müssen zum Abschluss Punktgruppen mathematisch untersucht werden.

2.5. Punktgruppen

Punktgruppen stellen Untergruppen der Symmetriegruppen dar, die sich unmittelbar auf geometrische Körper beziehen und deren Symmetrien beschreiben. Sie stehen zudem in engem Zusammenhang mit zyklischen Gruppen und Diedergruppen, was in dem Satz von Leonardo in 2.5.2 angesprochen wird. Konkret zusammenfassen lassen sich diese Erkenntnisse wie folgt.

2.5.1. Definition Punktgruppe:

Eine **Punktgruppe** ist ein spezieller Typ einer endlichen Symmetriegruppe. Sie beschreibt die Symmetrie eines Körpers beziehungsweise seiner Punktmenge.

Da es sich bei Punktgruppen um besonders anschauliche Gruppen handelt, wurden seit Entwicklung des Gruppenbegriffs viele Untersuchungen zuerst an Punktgruppen durchgeführt. Dabei bemerkte beispielsweise Leonardo da Vinci, dass in einer Ebene lediglich zyklische Gruppen oder Diedergruppen als Punktgruppen in Frage kommen. Diese Feststellung ist allgemein unter dem Namen Satz von Leonardo bekannt. Da keine gute Quelle für den Beweis gefunden wurde, wurde dieser von mir selbst entwickelt und formuliert.

2.5.2. Satz von Leonardo (Brückler, 2019, S. 117):

Wenn G eine **endliche Punktgruppe** darstellt, die die **Symmetriegruppe eines Körpers in der Ebene** ist, dann ist G **entweder eine zyklische Gruppe C_n oder eine Diedergruppe D_n** .

Beweis:

Sei G eine endliche Punktgruppe.

- (1) Überprüfe zunächst, dass es sich bei G nicht um eine Translation oder eine Gleitspiegelung handelt:

Dass G keine nichtidentische Translation T enthält, ist klar, weil sonst $T, T^2, T^3, \dots$ unendlich viele, paarweise verschiedene Elemente von G wären. Dies widerspräche der Endlichkeit der Gruppe. G kann außerdem keine Gleitspiegelung S enthalten, da sonst S^2 als doppelte Gleitspiegelung wieder einer Translation entsprechen würde. Dies steht allerdings im Widerspruch dazu, dass die Punktgruppe keine Translation enthält.

- (2) Beweise weiter, dass alle Drehungen der Gruppe das gleiche Drehzentrum besitzen sowie alle Spiegelachsen durch einen einzigen Punkt gehen:

Seien a und b zwei Drehungen von G , die nicht der Identität entsprechen. Dann hat a das Drehzentrum A und b das Drehzentrum B , welche zwei Fixpunkte der Punktgruppe darstellen mit $a(A) = A$ und $b(B) = B$. Drehungen sind zudem kommutativ, sodass gilt $a \circ b = b \circ a$. Damit folgt:

$$(a \circ b)(A) = (b \circ a)(A) = b(A),$$

sodass $b(A)$ per Definition ebenfalls Fixpunkt von a ist, also $b(A) = A$. Da A somit auch Fixpunkt von b ist und dieser als B definiert wurde, gilt $A = B$, weshalb zwei beliebige Drehungen einer Punktgruppe das gleiche Drehzentrum besitzen.

Seien c und d zwei verschiedene Spiegelungen von G . Diese können keine parallelen Spiegelachsen haben, da ihre Verknüpfung sonst eine nichtidentische Translation wäre (Widerspruch zu (1)). Folglich schneiden sich die Spiegelachsen der beiden Spiegelungen in einem festen Punkt S , sodass die Verknüpfung $c \circ d$ einer Drehung um das Zentrum S entspricht. Weil es sich bei c und d um verschiedene Spiegelungen handelt, kann es sich bei der Verknüpfung ebenfalls nicht um die Identität handeln. Betrachte eine weitere Spiegelung f mit weiterem Schnittpunkt S' der Spiegelachsen der Drehungen d und f . Die Verknüpfung $d \circ f$ stellt demnach eine neue Drehung um ein Zentrum S' dar. Es wurde bereits bewiesen, dass alle Drehungen einer Gruppe um ein Drehzentrum erfolgen, sodass gilt: $S = S'$. Damit gehen alle Spiegelachsen einer Gruppe analog zu den Drehachsen durch einen gemeinsamen Schnittpunkt.

Durch (1) und (2) wurde gezeigt, dass eine endliche Punktgruppe in der Ebene als Elemente lediglich Drehungen und Spiegelungen enthält.

- (3) Zeige zum Abschluss noch, dass G entweder nur Drehungen enthält und damit mit einer zyklischen Gruppe C_n übereinstimmt oder ferner mindestens eine Spiegelung existiert, sodass eine Diedergruppe D_n vorliegt:

Annahme: Sei G eine Gruppe, die als Elemente nur Spiegelungen und keine Drehungen besitzt. Ein solcher Fall existiert nicht, da jede Gruppe die triviale Gruppe $\langle e \rangle$ enthält und diese bereits einer Drehung um 360° entspricht. Aus diesem Grund enthalten Gruppen mit Spiegelungen automatisch auch immer Drehungen. In die andere Richtung gilt diese Aussage jedoch nicht, was zum Beispiel an Drehgruppen regelmäßiger Vielecke oder den sogenannten Restklassen deutlich wird.

Insgesamt wurde bewiesen, dass eine endliche Punktgruppe G in der Ebene nur Drehungen oder Spiegelungen beinhalten kann. Außerdem wurde gezeigt, dass die Punktgruppe entweder nur Drehungen oder Drehungen sowie Spiegelungen enthält, das ausschließliche Vorliegen

von Spiegelungen ist hingegen nicht möglich. Während die Gruppe aller Drehungen der zyklischen Gruppe C_n gleichkommt, führt eine Erweiterung durch Spiegelungen zur Diedergruppe D_n . □

Wegen der abzählbaren Existenz bestimmter Formen in der Natur gibt es lediglich zehn Möglichkeiten für Punktgruppen planarer Moleküle: $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, D_1, D_2, D_3, D_4$ und D_6 .

Moleküle mit einer fünf- oder sieben-zähligen Drehachse kommen auf natürlicher Weise hingegen nicht vor. Allerdings weisen die wenigsten Moleküle in der Chemie tatsächlich eine planare Struktur auf, weshalb für die konkrete Anwendung im dritten Teil der Arbeit die Isometrien im dreidimensionalen Raum untersucht werden. Dadurch erhöht sich die Anzahl der möglichen Punktgruppen um mehr als das Dreifache. Die genaue Anzahl der Punktgruppen sowie die Unterschiede zwischen den einzelnen Gruppen werden im anschließenden Kapitel näher dargelegt.

III. Chemie

1. Klassifikation chemischer Moleküle

1.1. Kristallklassen

Die geometrische Gruppentheorie findet über den mathematischen Bereich hinaus große Anwendung in der Chemie, um die Symmetrie von Molekülen genauer zu beschreiben und diese zu klassifizieren. Dies geschieht durch die, in Kapitel 2.5 beschriebenen Punktgruppen, welche als sogenannte Kristallklassen die Gesetzmäßigkeiten verschiedener Kristallzustände inklusive der Anordnung ihrer Atome zusammenfassen. Die unterschiedlichen Kristallklassen ähneln in ihren Bezeichnungen teilweise stark den bereits bekannten Gruppen aus der Mathematik und stehen vereinzelt ebenfalls in sehr enger Verbindung zueinander, was vor allem anhand Abbildung 11 sichtbar wird.

1.1.1. Definition kristallografische Punktgruppe/Kristallklasse (Borchardt-Ott & Sowa, 2018):

Unter einer **kristallografischen Punktgruppe** bzw. **Kristallklasse** versteht man die Gruppe von Punktsymmetrioperationen, bei denen ein Punkt des Kristalls dauerhaft an seinem Ort bleibt. Dadurch werden Gittertranslation-enthaltende Operationen ausgeschlossen.

Dass es sich bei Punktgruppen tatsächlich um mathematische Gruppen handelt, wurde bereits in Kapitel II bewiesen und kann unmittelbar auf kristallografische Punktgruppen übertragen werden.

Vor dem Hintergrund der Definition einer Kristallklasse kommt als mögliche Symmetrioperation eines Moleküls neben der Spiegelung an Ebenen oder Punkten und der Drehung bezüglich bestimmter Achsen nur die Drehspiegelung als Hintereinanderausführung einer Drehung und einer Spiegelung in Frage. Translationen und Gleitspiegelungen als weitere Isometrien spielen bei der kristallografischen Klassifikation eines Moleküls hingegen zunächst keine Rolle (Mathiak & Stingl, 1968).

1.1.2. Definition Symmetriezentrum:

Die Stelle, deren Lage sich während aller Ausführungen der Punktsymmetrioperation nicht verändert, entspricht dem **mathematischen Fixpunkt** unter allen Symmetrien und wird als **Symmetriezentrum** des Moleküls bezeichnet.

Häufig handelt es sich hierbei um ein Atom, das Symmetriezentrum kann aber auch zwischen mehreren Atomen liegen. Gehört zu den Symmetrien eines Moleküls eine Punktspiegelung, so wird der entsprechende Spiegelpunkt auch **Inversionszentrum** genannt. Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 10 dargestellt.

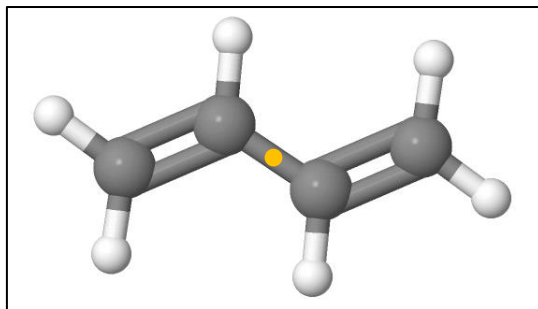


Abbildung 10: 1,3-Butadien als Molekül mit einem Inversionszentrum zwischen dem zweiten und dritten C-Atom.

1.1.3. Schoenflies-Symbolik:

Zur einfacheren Darstellung der Symmetrioperationen aus Kapitel II werden die, von Arthur Schoenflies entwickelten **Schoenflies-Symbole** eingesetzt, die im Folgenden aufgelistet sind:

- E : Identität,
- σ : Spiegelung,
- C_n : Drehung um einen Winkel von $\frac{360^\circ}{n}$ (vgl. zyklische Gruppen),
- $\sigma_{h/v/d}$: horizontale/vertikale/diagonale Spiegelebene zur Hauptdrehachse,
- i : Inversionszentrum,
- S_n : Verknüpfung von Spiegelung und Drehung,
- D_n : Verknüpfung mehrerer, zueinander senkrecht stehender Drehachsen (vgl. Diedergruppen).

Besonders charakteristische Formen, wie beispielsweise Tetraeder, Oktaeder oder Ikosaeder, erhalten eigene Symbole, die mit T , O und I abgekürzt werden. Zudem kommen für einzelne Gruppen spezielle Bezeichnungen zum Einsatz (Borchardt-Ott & Sowa, 2018).

1.1.4. Hermann-Mauguin-Symbolik:

In Abgrenzung zur Darstellung von Symmetrioperationen durch die Schoenflies-Symbole liegt häufig auch die Beschreibung durch die **Hermann-Mauguin-Symbolik** vor, die von Carl Hermann und Charles-Victor Mauguin entwickelt wurde. Anders als bei der Schoenflies-Symbolik werden hierbei so viele der entsprechenden Zeichen aufgelistet, bis die Gruppe eindeutig identifiziert werden kann. Neben der Art der Notation unterscheiden sich auch die Symbole innerhalb der beiden Schreibweisen:

Eine Drehung um $\frac{360^\circ}{n}$ wird durch die Zahl n statt des Symbols C_n angegeben. Die 1 entspricht als Drehung um 360° der Identität, während das Symbol ∞ die Drehung um einen beliebig kleinen Winkel ermöglicht. Sind mehrere Drehachsen innerhalb eines Moleküls vorhanden, werden die Zahlen aneinandergereiht, sodass ein Molekül der Klasse D_3 nach Schoenflies in der Hermann-Mauguin Symbolik mit 32 bezeichnet wird. Ein Inversionszentrum wird durch einen Strich über der Zahl der zugehörigen Achse angegeben, weshalb eine dreizählige Inversionsachse zum Beispiel mit $\bar{3}$ gekennzeichnet wird. Das Vorhandensein von Spiegelebenen wird mit Hilfe von m ausgedrückt. Wenn

die Drehachse n senkrecht zur Spiegelachse m steht, wird dies durch n/m verdeutlicht (Mathiak & Stingl, 1968).

1.1.5. Übersicht über die Kristallklassen (Kleber et al., 2010):

Insgesamt finden sich in der Natur **32 kristallografische Punktgruppen**, denen jedes Molekül eindeutig zugeordnet werden kann und deren **Beschreibung durch die Schoenflies- oder Hermann-Mauguin-Symbole** erfolgt. Die Punktgruppen werden darüber hinaus aufgrund ihrer Symmetrien in **sieben Kristallsystemen** zusammengefasst.

Trikline Moleküle aus den Kristallklassen C_1 bzw. 1 und C_i bzw. $\bar{1}$ besitzen die geringste Symmetrie, weil sie keine Drehachse aufweisen. Das kubische Kristallsystem enthält hingegen die Moleküle mit der höchsten Symmetrie, wie beispielsweise O bzw. 432, deren Erscheinungsbilder auch zu den platonischen Körpern gehören.

Eine **Zusammenfassung aller Kristallklassen** nach Schoenflies und Hermann-Mauguin sowie ihre Zuordnung zu den Kristallsystemen und die jeweiligen Bezeichnungen sind in Tabelle 6 dargestellt.

Tabelle 6: Die 32 Kristallklassen inklusive der Einordnung in die Kristallsysteme und der Bezeichnungen.

Kristallsystem	Kristallklasse nach Schoenflies	Kristallklasse nach Hermann-Mauguin	Bezeichnung
triklin	C_1	1	triklin-pedial
	C_i	$\bar{1}$	triklin-pinakoidal
monoklin	C_2	2	monoklin-sphenoidisch
	C_{2h}	$2/m$	monoklin-prismatisch
	C_s	m	monoklin-domatisch
trigonal	C_3	3	trigonal-pyramidal
	C_{3v}	$3m$	ditrigonal-pyramidal
	D_3	32	trigonal-trapezoedrisch
	D_{3d}	$\bar{3}m$	ditrigonal-skalenoedrisch
	S_6	$\bar{3}$	rhomboedrisch
hexagonal	C_{3h}	$\bar{6}$	trigonal-dipyramidal
	C_6	6	hexagonal-pyramidal
	C_{6v}	$6mm$	dihexagonal-pyramidal
	C_{6h}	$6/m$	hexagonal-dipyramidal
	D_{3h}	$\bar{6}2m$	ditrigonal-dipyramidal
	D_6	622	hexagonal-trapezoedrisch
	D_{6h}	$6/mmm$	dihexagonal-dipyramidal
orthorhombisch	C_{2v}	$mm2$	orthorhombisch-pyramidal
	D_2	222	orthorhombisch-disphenoidisch
	D_{2h}	mmm	orthorhombisch-dipyramidal
tetragonal	C_4	4	tetragonal-pyramidal
	C_{4v}	$4mm$	ditetragonal-pyramidal
	C_{4h}	$4/m$	tetragonal-dipyramidal
	D_{2d}	$\bar{4}m2$	tetragonal-skalenoedrisch
	D_4	422	tetragonal-trapezoedrisch
	D_{4h}	$4/mmm$	ditetragonal-dipyramidal
	S_4	$\bar{4}$	tetragonal-disphenoidisch
kubisch	O	432	pentagon-ikositetraedrisch
	O_h	$m\bar{3}m$	hexaisoktaedrisch
	T	23	tetraedrisch-pentagondodekaedrisch
	T_h	$m\bar{3}$	disdodekaedrisch
	T_d	$\bar{4}3m$	hexakistetraedrisch

Kristallsysteme klassifizieren die zu beschreibenden Moleküle dreidimensional mit Hilfe von Basisvektoren, wobei die Bedingungen und Abhängigkeiten dieser Vektoren innerhalb der Tabelle von oben nach unten zunehmen. Konkret bedeutet dies beispielsweise für das triklin Kristallsystem, dass drei kleinstmögliche und primitive Basisvektoren verwendet werden, deren Winkel und Länge an keine Bedingungen gebunden sind. Das Wort „triklin“ lässt sich hierbei aus dem altgriechischen mit „dreifach

geneigt“ übersetzen, was die freie Wahl der Winkel verdeutlicht, da keiner der drei Vektoren auf den Koordinatenachsen liegt. Beim monoklinen oder auch „einfach geneigten“ System wird hingegen ein Basisvektor in die vorliegende, zweizählige Drehachse gelegt, sodass zwei rechte Winkel entstehen. Die Achsenlänge ist jedoch noch nicht festgelegt. In Abgrenzung zu den weniger symmetrischen Systemen liegen im tetragonalen oder „vier Ecken besitzenden“ Kristallsystem bereits drei rechte Winkel zwischen den Basisvektoren und zwei gleichlange Achsen vor, während das kubische bzw. „würfelförmige“ System drei rechte Winkel sowie drei gleichlange Achsen enthält und damit die größte Symmetrie innehat (Kleber et al., 2010). Die genauen Bedingungen für jedes Kristallsystem sind in Tabelle 7 aufgelistet.

Tabelle 7: Bedingungen der sieben Kristallsysteme.

Kristallsystem	Bedingungen
triklin	freie Wahl der Winkel mit $\alpha, \beta > 90^\circ$, keine festgelegte Achsenlänge
monoklin	zwei rechte Winkel $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta > 90^\circ$, keine festgelegte Achsenlänge
trigonal	drei gleiche Winkel $\alpha = \beta = \gamma$, drei gleiche Achsenlängen oder: hexagonale Bedingungen
hexagonal	zwei rechte Winkel $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta = 120^\circ$, zwei gleiche Achsenlängen
orthorhombisch	drei rechte Winkel $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, keine festgelegte Achsenlänge
tetragonal	drei rechte Winkel $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, zwei gleiche Achsenlängen
kubisch	drei rechte Winkel $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, drei gleiche Achsenlängen

Da die Moleküle unterschiedlicher Kristallklassen auf derselben Abhängigkeit der Basisvektoren aufbauen, werden diese Kristallklassen im selben Kristallsystem zusammengeschlossen und stehen in enger Verbindung zueinander.

1.1.6. Zusammenhang zwischen den Kristallklassen:

Anhand der Kristallklassen wird insgesamt deutlich, dass chemische Moleküle ein charakteristisches Erscheinungsbild besitzen. Während Moleküle einer Kristallklasse die gleiche Kristallstruktur aufweisen, existieren nach dem Konzept der Kristallsysteme zwischen den Molekülen verschiedener Kristallklassen ebenfalls ähnliche Formen und Symmetrien. Um das Ausmaß dieser Ähnlichkeiten zu ermitteln und sie zu gruppieren, können die Kristallklassen als weitere Möglichkeit anhand der Flächenzahl des Polyeders der allgemeinen Form geordnet werden, die gleichzeitig der Ordnung der zugehörigen Gruppe entspricht. Während die Kristallklasse C_1 bzw. 1 nur eine Fläche aufweist, besitzt die Punktgruppe O_h bzw. $m\bar{3}m$ als Gruppe der höchsten Ordnung 48 Flächen. Die übrigen Kristallklassen werden dazwischen eingeordnet. Über den Vergleich der Flächenzahl hinaus lassen sich

die Kristallstrukturen mancher Kristallklassen auch durch das Strecken entlang einer Achse oder die Substitution eines Moleküls in eine andere Klasse überführen, wodurch sich innerhalb der kristallografischen Punktgruppen ein komplexes Geflecht an Untergruppen ausbildet, welches sowohl die Ordnungen als auch die Beziehungen innerhalb der Kristallklassen aufgreift.

Carl Hermann entwickelte neben der Bezeichnung der verschiedenen Gruppen auch eine **Abbildung zur Zusammenfassung der Beziehungen zwischen den 32 Kristallklassen** (Abbildung 11). Die dick umrandeten Punktgruppen, wie zum Beispiel D_{3d} , stellen die höchstsymmetrischen Punktgruppen des jeweiligen Kristallsystems dar, zudem sind die Verbindungen zwischen Punktgruppen eines Kristallsystems durchgängig und stark gezeichnet. Die Verbindungslinien kennzeichnen ferner die untenstehenden Punktgruppen als Untergruppen der oberen, sodass die Kristallklasse D_4 zum Beispiel eine Untergruppe der Punktgruppe O ist. Doppelte und dreifache Linien zeigen darüber hinaus Aufteilungen in ungleichwertige Untergruppen an (Borchardt-Ott & Sowa, 2018). Bei genauerer Betrachtung der Abbildung wird deutlich, dass D_{4h} beispielsweise in die zwei ungleichwertigen Untergruppen D_{2d} und D_{2h} aufgeteilt wird. Zudem stellen auch D_4 , C_{4h} und C_{4v} Untergruppen der Gruppe D_{4h} dar, was Abbildung 11 ebenfalls entnommen werden kann.

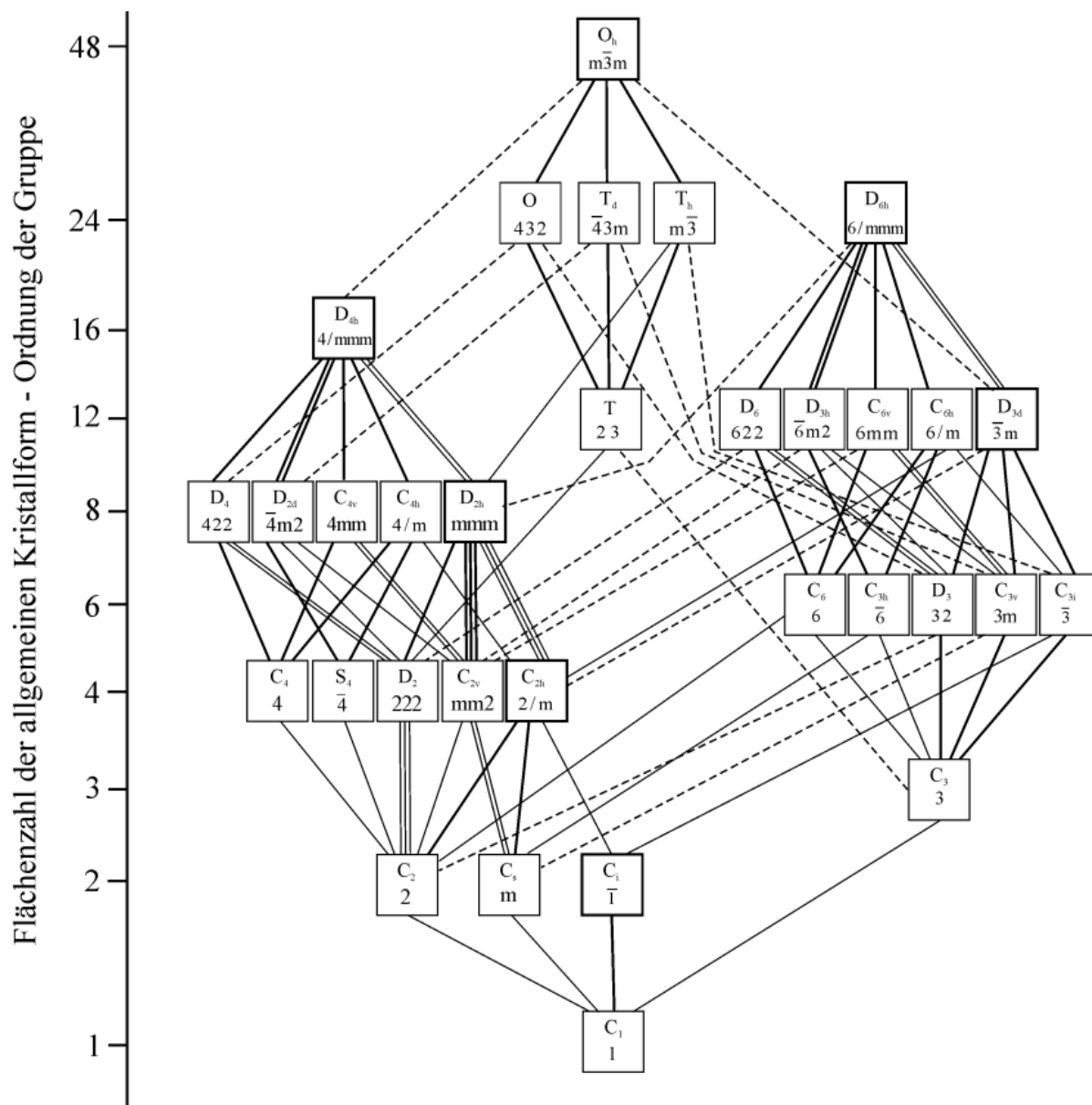


Abbildung 11: Beziehungen zwischen den 32 Kristallklassen nach Hermann.

Zur weiteren Veranschaulichung der Abbildung wird zunächst das Molekül Ethen betrachtet, welches aufgrund seiner drei zweizähligen, senkrecht aufeinander stehenden Drehachsen und der drei Spiegelebenen einen Vertreter der Punktgruppe D_{2h} darstellt und in Abbildung 12 zu sehen ist. Durch die Identität und ein Inversionszentrum als zusätzliches Symmetrieelement besitzt es acht Symmetrieelemente, was auch der Gruppenordnung entspricht und aus Abbildung 11 herausgelesen werden kann. Insgesamt sind alle Moleküle der Kristallklasse D_{2h} planar, sie liegen somit in einer Ebene.

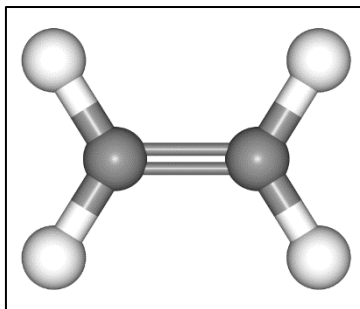


Abbildung 12: Ethen als Molekül der Kristallklasse D_{2h} .

Eine Untergruppe der Gruppe D_{2h} ist nach Abbildung 11 unter anderem die Kristallklasse C_{2v} , die neben C_{2h} eine ungleichwertige Untergruppe darstellt. In dieser Gruppe befindet sich zum Beispiel die cis-Form des Moleküls 1,2-Dichlorethen, welche in Abbildung 13 dargestellt ist.

1,2-Dichlorethen beinhaltet wegen der Substitution zweier Atome nur noch eine C_2 -Achse und zwei vertikale Spiegelebenen. Außerdem liegt im Vergleich zu Ethen kein Inversionszentrum mehr vor, sodass vier der acht zuvor vorhandenen Symmetrieelemente durch die Substitutionen verloren gehen und die Kristallklasse nur noch eine Ordnung der Größe vier besitzt. Durch den Verlust der horizontalen Spiegelebene müssen Moleküle der Kristallklasse C_{2v} außerdem nicht mehr zwingend in einer Ebene liegen, sodass sich diese teilweise sehr stark von Molekülen der Klasse D_{2h} unterscheiden können. Dieses Beispiel wurde jedoch so gewählt, dass die beiden Moleküle durch zwei Substitutionen ineinander überführbar sind und somit eine sehr ähnliche, räumliche Struktur aufweisen. Das Ethen-Molekül stellt als sehr regelmäßiges Molekül mit gleichen Substituenten an allen vier Ecken allerdings eine allgemeinere Form dar als das 1,2-Dichlorethen, weshalb dieses auch deutlich weniger symmetrisch ist.

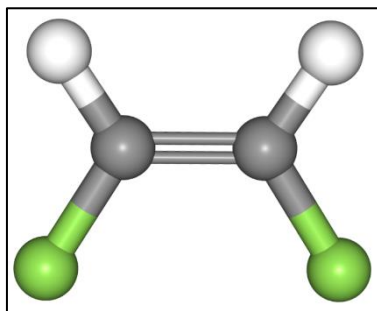


Abbildung 13: 1,2-Dichlorethen als Molekül der Kristallklasse C_{2v} .

Die Abbildung von Hermann ermöglicht demnach nicht nur den anschaulichen Vergleich von Molekülen derselben Stoffklasse, sondern zeigt auch an, welche Kristallklassen durch wenige Veränderungen ineinander überführt werden können. Zudem bietet Abbildung 11 die Möglichkeit, die Symmetrie eines Moleküls sehr schnell zu erkennen und Rückschlüsse auf das Reaktionsverhalten ähnlicher Moleküle zu ziehen, da sich verwandte Moleküle in ihrer Reaktivität oftmals gleichen. Nachdem in diesem Unterkapitel die Kristallklassen der Moleküle zum Erklären der Grundlagen vorgegeben wurden, ist es für das bessere Verständnis der weiteren Inhalte notwendig, selbst zu einer

Einordnung der Moleküle zu den entsprechenden Kristallklassen fähig zu sein. Eine Anleitung hierzu wird im nächsten Unterkapitel näher angesprochen und erläutert.

1.2. Ermittlung der Kristallklasse

Nach der Beschreibung des Zusammenhangs zwischen mathematischen Gruppen und chemischen Kristallklassen im vorangehenden Teil steht im Anschluss in erster Linie die Begründung für deren praktischen Einsatz im Mittelpunkt. Moleküle werden häufig hinsichtlich ihrer spektroskopischen Daten untersucht, die Rückschlüsse auf ihre Symmetrien liefern. Mittels dieser Daten können dann physikalische und chemische Eigenschaften vorhergesagt werden. Aus diesem Grund ist es in der Chemie meist von großem Nutzen, vor weiteren Untersuchungen anhand der Molekülgestalt zunächst die Punktgruppe zu ermitteln, um den experimentellen Aufwand auf ein Minimum zu beschränken. Damit hierbei nicht alle 32 Gruppen einzeln betrachtet und mit dem Molekül verglichen werden müssen, wurde **ein Algorithmus zur Bestimmung der Punktgruppe** entwickelt, der sich je nach Lehrbuch teilweise in einzelnen Schritten unterscheidet. Ein oft verwendetes Flussdiagramm ist in Abbildung 14 dargestellt.

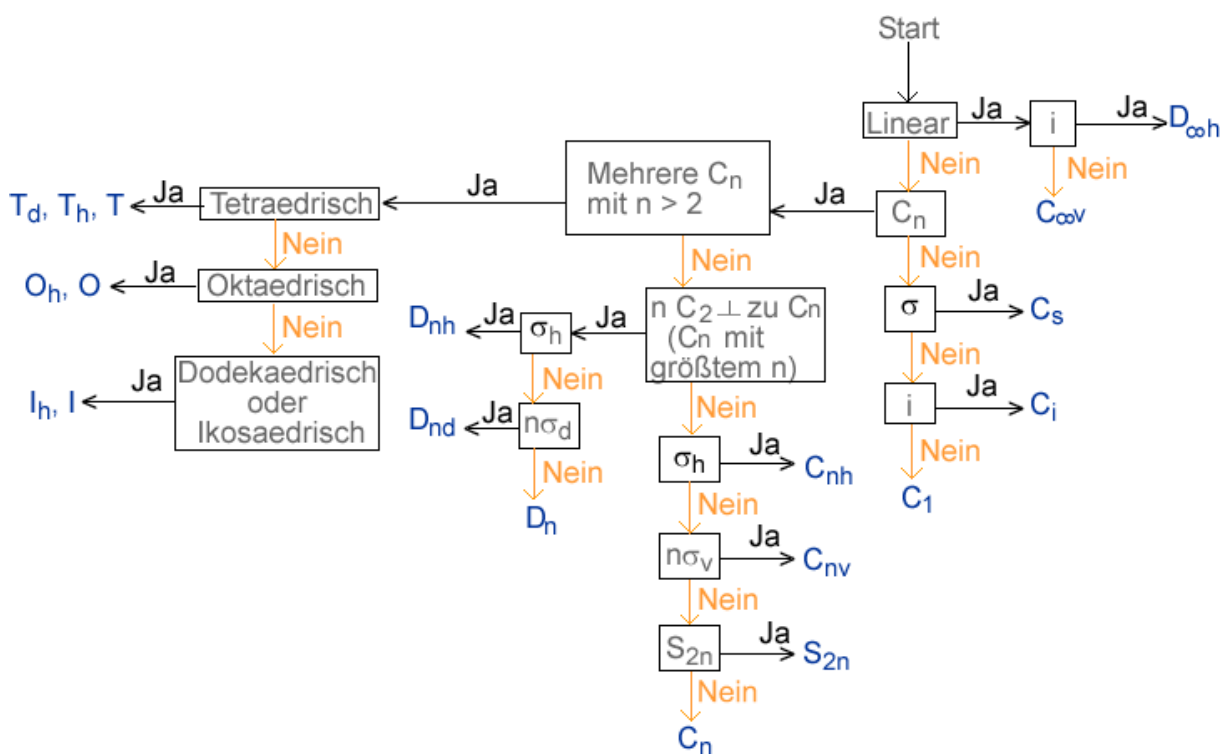


Abbildung 14: Flussdiagramm zur Bestimmung der Kristallklasse.

Bei der Untersuchung eines Moleküls werden die Fragen vom Startpunkt aus so weit abgearbeitet, bis das Ende eines Pfades erreicht und die Kristallklasse ermittelt sind. Die genauere Unterscheidung der Kristallklassen des kubischen Kristallsystems muss bei der Verwendung dieses Flussdiagramms bei Vorliegen eines tetraedrischen bzw. oktaedrischen Moleküls jedoch selbstständig geschehen. Hierzu

sollte aus 1.1.3 bekannt sein, dass sich die Klassen T_d , T_h und T sowie O_h und O hinsichtlich des Vorhandenseins von Spiegelebenen innerhalb des Moleküls unterscheiden.

Zur Bestimmung der kristallographischen Punktgruppe wird die Strukturformel des Moleküls herangezogen, da die genaue Anordnung der Moleküle inklusive der Bindungswinkel eine wichtige Rolle bei der Klassifizierung spielt. Vor diesem Hintergrund reicht zur Untersuchung der Punktgruppe auch eine Summen- oder Halbstrukturformel nicht aus, sondern es wird die tatsächliche Strukturformel benötigt. Diese kann aber unter Beachtung einiger Regeln aus der Summenformel selbstständig entwickelt werden, was in dieser Arbeit allerdings zu weit vom eigentlichen Thema wegführen würde und aus diesem Grund vernachlässigt wird.

Eine **exemplarische Bestimmung der kristallographischen Punktgruppe** wird im Folgenden an dem Molekül Methan dargestellt, dessen Strukturformel in Abbildung 15 zu sehen ist.

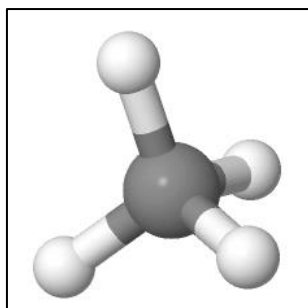


Abbildung 15: Methan als Molekül der Kristallklasse T_d .

Bei Methan handelt es sich um eine Verbindung aus einem Kohlenstoffatom und vier Wasserstoffatomen, die sich gegenseitig abstoßen und deswegen in einem größtmöglichen Abstand um das Kohlenstoffatom verteilt sind, sodass der Bindungswinkel zwischen den einzelnen Achsen $109,5^\circ$ beträgt. Dadurch liegt kein lineares Molekül vor, weshalb die erste Frage nach der Linearität im Fließdiagramm mit „Nein“ beantwortet werden muss. Im nächsten Schritt wird überprüft, ob das Molekül Drehachsen enthält. Da vier dreizählige Achsen vorliegen, wird diese Frage mit „Ja“ beantwortet. Außerdem wird direkt deutlich, dass laut Flussdiagramm mehrere C_n mit $n > 2$ existieren, sodass in diesem Schritt ebenfalls der Pfeil „Ja“ weiterverfolgt wird. Auch die nächste Antwort lautet „Ja“, weil leicht erkennbar ist, dass Methan eine tetraedrische Form besitzt. Im letzten Schritt muss eine Einordnung in die Klasse T_d , T_h oder T getroffen werden. Diese unterscheiden sich nur darin, dass diagonale, horizontale oder keine Spiegelebenen im Molekül aufzufinden sind. Weil in diesem Beispiel zu jeder der vier Drehachsen diagonale Spiegelebenen auftreten, ist das Molekül Methan der Kristallklasse T_d zuzuordnen.

Alles in allem weist das Molekül durch die gleichartigen Wasserstoffatome eine hohe Symmetrie auf und hat nach Abbildung 11 mit einer Anzahl von 24 Symmetrieelementen die zweitgrößte Ordnung innerhalb der Kristallklassen inne. Zur besseren Veranschaulichung sind in Abbildung 16 eine Drehachse sowie die zugehörige diagonale Spiegelebene in das Methan-Molekül eingezeichnet.

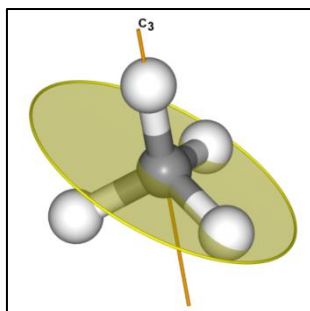


Abbildung 16: Darstellung einer Drehachse inklusive diagonalen Spiegelebene am Beispiel Methan.

1.3. Exkurs Raumgruppen

Bei der Untersuchung von Molekülen in Verbänden wird im ersten Schritt immer die Kristallklasse eines einzelnen Moleküls ermittelt. Allerdings spielen aufgrund des Vorliegens großer Kristallverbände statt einzelner Kristalle in der Realität Verschiebungen innerhalb des Verbandes dennoch eine Rolle, auch wenn dadurch kein Fixpunkt mehr vorliegt und die ursprüngliche Definition einer Kristallklasse somit nicht mehr zutrifft. Diese Verschiebungen im Raum werden als Gittertranslationen bezeichnet und enthalten als zusätzliche Operationen Schraubungen und Gleitspiegelungen, die bereits bei der Isometrie-Betrachtung in höheren Dimensionen in Kapitel II untersucht wurden. Um diese in den Untersuchungen zu berücksichtigen, werden sie mit den Symmetrioperationen der Kristallklassen kombiniert, wodurch 230 Raumgruppen entstehen (Kleber et al., 2010). Dass diese Raumgruppen ebenfalls die mathematischen Eigenschaften einer Gruppe erfüllen, wird im Satz 1.3.2 deutlich.

1.3.1. Definition Raumgruppe, Schraubung, Gleitspiegelung:

Unter einer **Raumgruppe** versteht man eine Erweiterung der Kristallklassen um Schraubungen und Gleitspiegelungen. **Schraubungen** treten auf, wenn eine Drehung und eine Verschiebung parallel zur Drehachse kombiniert werden. **Gleitspiegelungen** entstehen durch die Hintereinanderausführung einer Spiegelung und einer Verschiebung parallel zur Spiegelebene.

Die Symmetrietransformationen inklusive Verschiebung im Raum können als $g' = V \cdot g + t$ beschrieben werden. Dabei stellt V eine Matrix dar, die die orthogonale Transformation angibt, während t für eine beliebige Translation steht. Das Gleichungssystem wird im weiteren Verlauf zur Vereinfachung als $g' = (V | t) \cdot g$ geschrieben.

1.3.2. Satz (Burckhardt, 1947):

Die **Erweiterung der Kristallklassen auf die Raumgruppen** bildet trotz Integration der Gittertranslationen immer noch eine **mathematische Gruppe**.

Beweis:

- Abgeschlossenheit:

Das Produkt zweier Raumtransformationen ist unabhängig von ihrem konkreten Aufbau wieder eine Raumtransformation:

$$(V|t) \cdot (V'|t') \cdot g = (V \cdot V' | V \cdot t' + t) \cdot g = (V^\circ | t^\circ) \cdot g$$

mit $V^\circ = V \cdot V'$ und $t^\circ = V \cdot t' + t$.

- Assoziativität:

Sowohl Punktsymmetrieoperationen als auch Translationen sind assoziativ, sodass die Verknüpfung ebenfalls assoziativ ist. Genauer gilt:

$$\begin{aligned} [(V|t) \cdot (V'|t')] \cdot (V''|t'') \cdot g &= (V \cdot V' | V \cdot t' + t) \cdot (V''|t'') \cdot g \\ &= (V \cdot V' \cdot V'' | V \cdot V' \cdot t'' + V \cdot t' + t) \cdot g \\ (V|t) \cdot [(V'|t') \cdot (V''|t'')] \cdot g &= (V|t) \cdot (V' \cdot V'' | V' \cdot t'' + t') \cdot g \\ &= (V \cdot V' \cdot V'' | V \cdot V' \cdot t'' + V \cdot t' + t) \cdot g \end{aligned}$$

- Existenz neutrales Element:

Das Matrizenpaar $(E|0)$ mit E als quadratischer Einheitsmatrix und 0 als Nullvektor entspricht dem neutralen Element:

$$\begin{aligned} (E|0) \cdot (V|t) \cdot g &= (E \cdot V | E \cdot t + 0) \cdot g = (V|t) \cdot g \\ (V|t) \cdot (E|0) \cdot g &= (V \cdot E | V \cdot 0 + t) \cdot g = (V|t) \cdot g \end{aligned}$$

- Existenz inverser Elemente:

Das inverse Element zu $(V|t)$ ist $(V|t)^{-1} = (V^{-1} | -V^{-1} \cdot t)$:

$$\begin{aligned} (V|t) \cdot (V^{-1} | -V^{-1} \cdot t) \cdot g &= (V \cdot V^{-1} | -V \cdot V^{-1} \cdot t + t) \cdot g = (E|0) \cdot g \\ (V^{-1} | -V^{-1} \cdot t) \cdot (V|t) \cdot g &= (V^{-1} \cdot V | V^{-1} \cdot t - V^{-1} \cdot t) \cdot g = (E|0) \cdot g \end{aligned}$$

Somit handelt es sich bei den Raumgruppen um mathematische Gruppen. □

Da die Aussagekraft der Schoenflies-Symbole wegen der Vernachlässigung von Gittertranslationen bei den Raumgruppen sehr gering ist, werden die Hermann-Mauguin-Symbole zur Beschreibung von Raumgruppen verwendet. Dies ist möglich, weil Hermann und Mauguin in der Entwicklung der Notation die Verschiebung im Raum durch ergänzende Bezeichnungen bereits berücksichtigt haben und folglich jedes Molekül einer eindeutigen Raumgruppe zugeordnet werden kann (Kleber et al., 2010).

Nachdem sich dieses Kapitel mit den Kristallklassen und Raumgruppen beschäftigt hat und bekannt ist, wie diese ermittelt werden können, widmet sich das anschließende Kapitel der Darstellung dieses Wissens in Tabellenform, sodass alle Informationen zu Molekülen einer bestimmten kristallografischen Punktgruppe übersichtlich verfügbar sind. Eine solche Tabelle, die alle notwendigen Eigenschaften

eines Moleküls aufzeigt, wird als Charaktertafel bezeichnet und im nachfolgenden Kapitel ausführlich thematisiert.

2. Charaktertafeln

2.1. Aufbau

Jede Kristallklasse beinhaltet verschiedene Symmetrieelemente, deren Ausführung das untersuchte Molekül wieder in sich selbst überführen. Die Zusammensetzung dieser Operationen ist hierbei spezifisch, sodass mit etwas Übung bereits anhand der Symmetrieelemente die zugehörige Punktgruppe erkannt werden kann. Damit jedoch auch ungeübte Personen Zugriff auf das Wissen erhalten, das mit dem Bestimmen einer Kristallklasse einhergeht, werden die zugehörigen Operationen sowie alle verbundenen Eigenschaften in der zugehörigen Charaktertafel aufgelistet. Für diese Charaktertafel findet sich, ähnlich wie bei den Kristallklassen selbst, eine spezifische Schreibweise, die in Tabelle 9 zusammengefasst wird.

2.1.1. Definition Charaktertafel:

Eine **Charaktertafel** fasst die irreduziblen Darstellungen Γ einer Kristallklasse als endlicher Gruppe zusammen und liefert Informationen über die chemischen und physikalischen Eigenschaften von Molekülen der entsprechenden Punktgruppe.

Die Charaktertafel hat die Form einer quadratischen Tabelle, in deren linker oberer Ecke die Bezeichnung der Punktgruppe angegeben ist. Um die Tabelle auszufüllen, werden die Elemente der Kristallklasse zuerst in Klassen konjugierter Elemente aufgeteilt, indem sie nach der Isometrie-Operation geordnet werden, durch welche sie entstehen. Im Anschluss wird jede dieser Klassen durch ein beliebiges enthaltenes Element in der obersten Zeile vertreten. Die Anzahl der konjugierten Elemente wird zusätzlich durch die entsprechende Zahl davor ergänzt. Insgesamt bilden die n Symmetrieelemente der ersten Zeile eine Klasse der Ordnung n , was zudem mit der Anzahl der Flächen übereinstimmt. In der ersten Spalte der Tabelle sind die irreduziblen Darstellungen zu finden, welche mit Hilfe der Mulliken-Symbole aus 2.1.2 angegeben werden. Im Inneren der Tabelle stehen die Werte der zugehörigen Charaktere χ , welche die Funktionen der Gruppenelemente darstellen. Da die Funktionswerte der Symmetrieelemente einer Klasse übereinstimmen, genügt es, den Wert für ein Element der Klasse anzugeben (Mathiak & Stingl, 1968).

Tabelle 8: Allgemeine Darstellung einer Charaktertafel.

Punktgruppe	Symmetrieelemente
Irreduzible Darstellungen Γ	Werte der Charaktere χ

Für die **Bezeichnung der irreduziblen Darstellungen** entwickelte Robert S. Mulliken eigene Symbole, die einem geübten Betrachter sofort den Wert des Charakters einiger Symmetrieeoperationen verdeutlichen. Die Bedeutung der einzelnen Bezeichnungen wird nachfolgend näher beschrieben.

2.1.2. Bezeichnung der irreduziblen Darstellungen (Mathiak & Stingl, 1968):

- 1-dimensionale Charaktere werden mit A und B , 2-dimensionale mit E und 3-, 4- und 5-dimensionale Charaktere mit F , G und H bezeichnet.
- 1-dimensionale Charaktere mit der Hauptdrehachse C_n erhalten den Buchstaben A , wenn $\chi(C_n) = 1$ und den Buchstaben B , wenn $\chi(C_n) = -1$ gilt.
- Die Charaktersymbole werden mit g für gerade indiziert, falls $\chi(i) = 1$ ist. Falls $\chi(i) = -1$ gilt, werden sie mit u indiziert, was der Abkürzung für ungerade entspricht. Dadurch wird deutlich, wie sich das Vorzeichen des Charakters bei der Anwendung des Inversionsoperators ändert.
- Wenn sich ein Charakter bei einer horizontalen Spiegelung symmetrisch verhält und das Vorzeichen durch die Operation σ_h gleich bleibt, so wird dies durch einen Strich am Hauptsymbol verdeutlicht: A' bezeichnet einen Charakter mit $\chi(\sigma_h) = 1$.
Verhält sich der Charakter hingegen antisymmetrisch und ändert sich das Vorzeichen, wird dies durch zwei Striche gekennzeichnet: A'' bezeichnet einen Charakter mit $\chi(\sigma_h) = -1$.
- Falls eine weitere C_2 -Drehung um eine Nebenachse vorliegt, erhält der Charakter mit $\chi(C_2) = 1$ den Index 1. Der Charakter mit $\chi(C_2) = -1$ bekommt hingegen den Index 2.

Eine **Zusammenfassung der irreduziblen Darstellungen nach Mulliken** ist in Tabelle 9 aufgelistet.

Tabelle 9: Bezeichnung der irreduziblen Darstellungen nach Mulliken.

Dimension	1	2	3	4	5
Hauptsymbole	A (symmetrisch gegenüber C_n) B (antisymmetrisch gegenüber C_n)	E	F	G	H
Indizierung	Verhalten zur Symmetrieoperation				
Symmetrieoperation	symmetrisch		antisymmetrisch		
i	g		u		
σ_h	'		"		
σ_v oder $C_2 \perp C_n$	1		2		

Zusätzlich werden Charaktertafeln häufig noch durch **zwei weitere Spalten** ergänzt. Die erste hinzugefügte Spalte gibt die **Basen der irreduziblen Darstellungen** bzw. die **Vektoren** an, die den **p -Orbitalen des Moleküls** entsprechen, während die zweite Spalte analog die **Basen zu den d -Orbitalen** bzw. **Tensoren** beinhaltet. In der ersten Spalte treten die Symbole R_x , R_y und R_z auf, die die Rotation des Moleküls um die entsprechende Achse bezeichnen, während x , y und z die Eigenschwingungen in die verschiedenen Richtungen und somit die Translationen des Moleküls angeben. Darüber hinaus besitzen Moleküle ab einer gewissen Größe d -Orbitale, die einen großen Einfluss auf die chemischen Eigenschaften haben. Hier erfolgt ebenfalls ein Vergleich mit den irreduziblen Darstellungen, indem untersucht wird, welches Basis-Orbital analog zu welcher Darstellung transformiert. Zu den Orbitalen,

die in Charaktertafeln angesprochen werden, gehören zum Beispiel x^2 , y^2 , z^2 , xy , xz , yz (Huheey, Keiter, & Keiter, 2014).

Um die Transformation der Orbitale besser zu verstehen, werden zunächst in einem separaten Unterkapitel der Begriff des Orbitals erläutert sowie die verschiedenen Formen dargestellt.

2.2. Exkurs Orbitale

Ein Atom setzt sich aus einem positiv geladenen Atomkern und einer negativ geladenen Elektronenhülle zusammen. Während der Atomkern positiv geladene Protonen und neutral geladene Neutronen enthält, befinden sich in der Elektronenhülle die Elektronen, die vom Kern angezogen werden. Da diese negativ geladen sind, stoßen sie sich untereinander so weit wie möglich ab, sodass eine spezifische Anordnung innerhalb der Hülle auftritt, die sich nach der Anzahl der Elektronen richtet. Bei der Untersuchung des Atomaufbaus wird deutlich, dass sich gewisse Elektronen aufgrund der gegenseitigen Abstoßung in bestimmten Bereichen bewegen und diese nur durch einen sehr hohen Energieeinsatz verlassen. Um diese Bereiche näher zu beschreiben, wurde der Begriff des Orbitals entwickelt. Anders als ursprünglich vermutet, besitzen verschiedene Orbitale jedoch nicht die gleiche Gestalt. Welche Formen innerhalb der Orbitale beispielsweise auftreten, kann Abbildung 17 entnommen werden.

2.2.1. Definition Orbital:

Unter einem **Orbital** versteht man die räumliche Darstellung eines Ortes in der Nähe des Atomkerns, an dem sich ein Elektron mit einer Wahrscheinlichkeit von etwa 90 % befindet.

Da Elektronen durch äußere und gegenseitige Einflüsse ständig in Bewegung sind und ihr genauer Weg nicht sichtbar ist, kann nie exakt festgestellt werden, wo sich ein Elektron genau befindet. Zudem kann ein einzelnes Orbital wegen der gegenseitigen Abstoßung maximal zwei Elektronen beinhalten, welche eindeutig unterschieden werden können. Dies liegt daran, dass jedes Elektron eine bestimmte Energie beziehungsweise einen charakteristischen Zustand besitzt, der durch Quantenzahlen angegeben wird und unabhängig vom Aufenthaltsort innerhalb eines Orbitals gleichbleibt.

2.2.2. Definition Quantenzahl:

Unter einer **Quantenzahl** versteht man allgemein einen Wert, der bestimmte messbare Größen eines Teilchens, eines Systems oder eines Zustands angibt. In der Chemie wird durch sie ein Teil des charakteristischen Zustands eines Teilchens ausgedrückt. Insgesamt gibt es vier Quantenzahlen, die zusammen den Zustand des Teilchens vollständig charakterisieren.

Die ersten drei Quantenzahlen bestimmen die Form und Orientierung der Orbitale. Während die **Hauptquantenzahl n** die Größe und gleichzeitig die Anzahl der Knotenpunkte eines Orbitals angibt,

beschreibt die **Nebenquantenzahl l** die Form der Orbitale, da sie der Anzahl an Knotenflächen entspricht, die durch den Atommittelpunkt gehen. Die **Orientierungsquantenzahl m** verdeutlicht des Weiteren die Orientierung des Orbitals im Raum. Während n die Zahlenwerte 0, 1, 2, ... annehmen kann, wird die Nebenquantenzahl l entweder durch die Zahlenwerte 0 bis $n - 1$ oder durch kleine Buchstaben gekennzeichnet, die sich aus den Eigenschaften der zugehörigen Spektrallinien ableiten: s steht für „sharp“ und beschreibt den kugelförmigen Aufbau eines Orbitals, p ist die Abkürzung von „principal“ und bezeichnet drei hantelförmige Orbitale, die senkrecht aufeinander stehen. Darüber hinaus existieren noch die beiden Nebenquantenzahlen d von „diffuse“, sowie f als Abkürzung von „fundamental“. Insgesamt gibt es fünf d -Orbitale, von denen vier wie eine gekreuzte Doppelhantel aussehen, während das letzte ähnlich wie die p -Orbitale eine Hantelform aufweist, die zusätzlich noch durch einen Ring ergänzt wird (Abbildung 17). Da mit jeder neuen Nebenquantenzahl vier weitere Elektronen untergebracht werden, existieren sieben f -Orbitale, die jedoch für die Auswertung von Charaktertafeln keine Rolle spielen und aus diesem Grund in dieser Arbeit vernachlässigt werden.

Die Orientierungsquantenzahl m wird erneut in Zahlen angegeben und nimmt alle ganzzahligen Werte von $-l$ bis l an, sodass beispielsweise für die Nebenquantenzahl 1, die gleichzeitig der Orbitalform p entspricht, die Orientierungsquantenzahlen $-1, 0$ und 1 in Frage kommen. Die vierte Quantenzahl zeigt als **Spinquantenzahl s** den Drehimpuls jedes Teilchens an und liefert somit eine Unterscheidung der Elektronen innerhalb eines Orbitals, da sich die Drehimpulse jeweils um ihr Vorzeichen unterscheiden (Jander & Blasius, 2006). Durch die Unterscheidung der Elektronen desselben Orbitals in der letzten Quantenzahl existiert für jedes Elektron ein charakteristischer Zustand, der von keinem weiteren Elektron des Moleküls angenommen werden kann, was auch als Pauli-Prinzip beschrieben wird.

Insgesamt ergeben sich folgende Orbitale für die ersten drei Hauptquantenzahlen:

Tabelle 10: Zusammenhang zwischen den vier Quantenzahlen und den Orbitalen.

Hauptquantenzahl	Nebenquantenzahl	Orientierungsquantenzahl	Spinquantenzahl	Orbitale
$n = 0, 1, 2, \dots$	$l = 0, 1, \dots, n - 1$	$m = -l, -l + 1, \dots, 0, l - 1, l$	$s = \pm \frac{1}{2}$	-
1	0	0	$s = \pm \frac{1}{2}$	1 s-Orbital
2	0	0	$s = \pm \frac{1}{2}$	1 s-Orbital
	1	-1, 0, 1	$s = \pm \frac{1}{2}$	3 p-Orbitale
3	0	0	$s = \pm \frac{1}{2}$	1 s-Orbital
	1	-1, 0, 1	$s = \pm \frac{1}{2}$	3 p-Orbitale
	2	-2, -1, 0, 1, 2	$s = \pm \frac{1}{2}$	5 d-Orbitale

Zur Benennung der einzelnen Orbitale werden die Werte der Quantenzahlen aneinandergereiht und durch Indizes ergänzt, sodass sie eindeutig zugeordnet werden können. Das $3p_x$ -Orbital entspricht zum Beispiel einem relativ großen, hantelförmigen Orbital, welches entlang der x -Achse ausgerichtet ist. Die **genaue Anordnung der s-, p- und d-Orbitale im Raum sowie ihr charakteristisches Aussehen und die Benennung der verschiedenen Orbitale** sind in Abbildung 17 an den $1s$ -, $2p$ - und $3d$ -Orbitalen exemplarisch dargestellt. Die übrigen Orbitale weisen die gleiche Form auf, unterscheiden sich jedoch in ihrer Größe. Das $3s$ -Orbital besitzt zum Beispiel ebenfalls eine Kugelgestalt, gleichzeitig ist es mit einem deutlich größeren Radius um den Atomkern angesiedelt als das $2s$ -Orbital. Durch die Zunahme der Elektronenzahl innerhalb des Periodensystems und der damit verbundenen Erhöhung der Anzahl an Orbitalen kann es teilweise zu Überschneidungen dieser kommen. Da Orbitale aber sehr große Aufenthaltsräume beschreiben, in denen sich zwei deutlich kleinere Elektronen mit hoher Wahrscheinlichkeit befinden, verteilen sich die Elektronen als negativ geladene Teilchen automatisch so im Raum, dass sie zueinander jeweils den größten Abstand einnehmen.

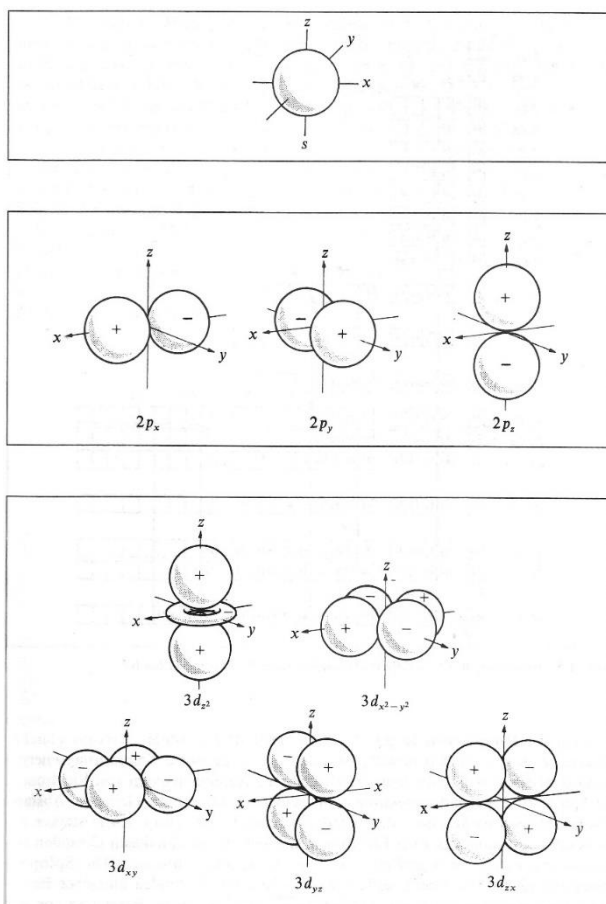


Abbildung 17: Darstellung der 1s-, 2p- und 3d-Orbitale.

Durch den Zusammenschluss mehrerer Atome zu einem Molekül entsteht ein Molekülorbital, welches ein neues Energieniveau besitzt sowie andere Eigenschaften aufweist als die ursprünglichen Atomorbitale. Da mit Hilfe einer Charaktertafel immer die Verbindung mehrerer Atome beschrieben wird, finden sich hier teilweise auch neue Orbitalbezeichnungen, wie zum Beispiel y^2 oder z^2 .

Die Bedeutung der verschiedenen Orbitale spielt beim Aufstellen von Charaktertafeln eine wichtige Rolle. Aus diesem Grund wird nach der Entwicklung einer Charaktertafel im nächsten Abschnitt exemplarisch eine Zuordnung der Orbitale zu den entsprechenden irreduziblen Eigenschaften durchgeführt.

2.3. Beispielhafte Entwicklung einer Charaktertafel für das Wassermolekül

Nachdem sowohl die Theorie zu den Kristallklassen und deren Bedeutung für die einzelnen Moleküle als auch die Orbitale und deren Rolle beim Aufbau eines Moleküls angesprochen wurden, wird dieses Wissen zum Aufstellen einer Charaktertafel im Folgenden verknüpft und durch einige zusätzliche Aspekte erweitert. Zur besseren Verdeutlichung der Bestimmung der einzelnen Charaktere und der schrittweisen Entwicklung einer vollständig ausgefüllten Charaktertafel wird beispielhaft die Charaktertafel für ein Wassermolekül ausgearbeitet. Hierzu werden die folgenden Schritte

durchlaufen, deren Beschreibung bereits teilweise ausführlich in den vorangegangenen Unterkapiteln stattfand:

2.3.1. Anleitung zur Entwicklung einer Charaktertafel:

1. Bestimmung der Kristallklasse
2. Bestimmung der Symmetrieeoperationen
3. Aufstellen der Charaktertafel
4. Bestimmung der Mulliken-Symbole
5. Erweiterung der Charaktertafel

Die Schritte 1-5 werden der Reihe nach ausgeführt.

1. Bestimmung der Kristallklasse:

Ein Wassermolekül besteht aus einem Sauerstoffatom, welches mit zwei Wasserstoffatomen verbunden ist und ferner zwei freie Elektronenpaare besitzt, was zu einer gewinkelten Struktur führt (Abbildung 18).

Nach dem Flussdiagramm in Abbildung 14 handelt es sich offensichtlich nicht um ein lineares Molekül. Stattdessen liegt eine C_2 -Achse vor und das Molekül enthält keine Drehachse C_n mit $n > 2$. Außerdem findet sich auch keine weitere C_2 -Achse senkrecht zur Hauptdrehachse. Darüber hinaus existieren zwar keine horizontale, aber zwei vertikale Spiegelebenen zur C_2 -Achse, weshalb das Wassermolekül der Kristallklasse C_{2v} zugeordnet wird.

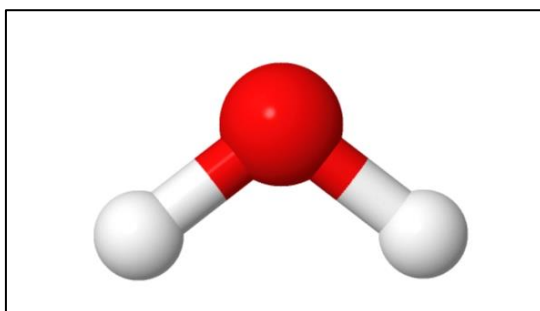


Abbildung 18: Wasser als Molekül der Kristallklasse C_{2v} .

2. Bestimmung der Symmetrieeoperationen:

Die zugehörigen Symmetrieelemente sind die Identität, die C_2 -Achse sowie die beiden vertikalen Spiegelebenen σ_v und σ_v' . Mathematisch kann die Hauptdrehachse mit der z -Achse eines dreidimensionalen Koordinatensystems gleichgesetzt werden, während die beiden Spiegelebenen der xz - und der yz -Ebene entsprechen.

3. Aufstellen der Charaktertafel:

Weil eine Charaktertafel immer quadratisch ist, müssen neben den vier Symmetrieelementen auch vier irreduzible Darstellungen vorliegen. Zusätzlich gelten allgemeine **Orthogonalitätseigenschaften**, welche wichtige Voraussetzungen sind, um die Charaktere einer Kristallklasse zu bestimmen.

2.3.2. Orthogonalitätseigenschaften:

- Die erste irreduzible Darstellung und damit die erste Zeile der Tabelle besteht immer aus Einsen.
- Die Summe der Quadrate in beliebiger irreduzibler Darstellung ist gleich der Ordnung der Punktgruppe.
- Das Punktprodukt zweier irreduzibler Darstellungen muss immer gleich Null sein.

Nach der ersten Eigenschaft sind in der ersten Zeile lediglich Einsen zu finden, außerdem besteht nach der zweiten Eigenschaft die erste Spalte ebenfalls nur aus Einsen, da die Punktgruppe die Ordnung vier besitzt und somit gilt:

$$1 + 1 + 1 + 1 = 4.$$

Mit Hilfe des dritten Punkts können die übrigen drei Zeilen ausgefüllt werden. Am Ende des Verfahrens entsteht die folgende Charaktertafel, die lediglich in der Anordnung der letzten drei Zeilen variieren kann:

Tabelle 11: Charaktertafel mit vollständig angegebenen Charakteren.

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	-1	1	-1
Γ_3	1	-1	-1	1
Γ_4	1	1	-1	-1

4. Bestimmung der Mulliken-Symbole:

Zur Bestimmung der Mulliken-Symbole können verschiedene Einträge der Tabelle untersucht werden: Aus dem Wert 1 des Charakters der irreduziblen Darstellung Γ_1 in Bezug auf das Symmetrieelement C_2 wird deutlich, dass die Darstellung symmetrisch bezüglich der zweifachen Drehung um die z-Achse ist, weshalb die Darstellung nach Tabelle 9 ein A erhält. Dies folgt ebenfalls aus der Darstellung von Γ_4 in Bezug auf C_2 . Im Gegensatz dazu geben die entsprechenden Werte für Γ_2 und Γ_3 an, dass es sich um antisymmetrische Darstellungen handelt, die dem Symbol B zugeschrieben werden.

Zur Unterscheidung von Γ_1 und Γ_4 kann die dritte Spalte betrachtet werden. Hier bedeutet eine 1 in der ersten Zeile, dass sich die Darstellung symmetrisch bezüglich der vertikalen Spiegelung verhält,

was laut Tabelle 9 dem Index 1 entspricht. Der negative Wert in der letzten Zeile erhält hingegen den Index 2. Analog können die Indizes für Γ_2 und Γ_3 bestimmt werden (Huheey, Keiter, & Keiter, 2014). Somit ergibt sich eine, in Tabelle 12 dargestellte, finale Charaktertafel, deren Zeilen meist noch anders angeordnet werden.

Tabelle 12: Charaktertafel der Kristallklasse C_{2v} .

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'
A_1	1	1	1	1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1
A_2	1	1	-1	-1

5. Erweiterung der Charaktertafel:

Nach der Entwicklung der Charaktertafel wird diese, wie bereits in Kapitel 2.1 beschrieben, noch durch zwei Spalten erweitert. In diesen Spalten werden die Basisfunktionen ergänzt, die den irreduziblen Darstellungen entsprechen: Das Orbital p_z transformiert zum Beispiel wie A_1 , was bedeutet, dass das Orbital sich symmetrisch zur Spiegelebene und zur Hauptdrehachse verhält. Das Orbital p_x verhält sich hingegen antisymmetrisch zur Hauptdrehachse, aber symmetrisch zu den Spiegelebenen, weshalb es wie B_1 transformiert. Analog transformiert auch die Rotation um die y -Achse wie B_1 . Bei Betrachtung der d -Basis-Orbitale wird deutlich, dass die Orbitale x^2, y^2 und z^2 ebenfalls wie A_1 transformieren, während beispielsweise das d -Orbital in der xy -Ebene wie A_2 transformiert. Nach Betrachtung aller Orbitale, Symmetrieelemente und irreduziblen Darstellungen kann die erweiterte Charaktertafel der Kristallklasse C_{2v} wie in Tabelle 13 dargestellt werden.

Tabelle 13: Erweiterte Charaktertafel Kristallklasse C_{2v} .

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'	p -Orbitale	d -Orbitale
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy

2.3.3. Feststellung:

Charaktertafeln beziehen sich immer auf eine ganze Kristallklasse und nicht auf ein konkretes Molekül, sodass **32 unveränderliche Charaktertafeln** existieren, die viele **Eigenschaften und das Reaktionsverhalten** der zugehörigen Moleküle **vorhersagen**.

Es ist beispielsweise nicht möglich, dass Orbitale verschiedener Symmetrien miteinander wechselwirken. Dies wird im Labor anhand des Vergleichs der Charaktertafeln der vorliegenden Reaktionspartner bereits vor Beginn einer chemischen Reaktion berücksichtigt und erleichtert die Forschung somit deutlich.

Vor diesem Hintergrund spielen die Kristallklassen und ihre zugehörigen Charaktertafeln in der anorganischen und analytischen Chemie eine große Rolle. Für angehende Chemiker*innen in diesem Fachgebiet ist es demnach besonders wichtig, auch anhand von Summenformeln eigenständig Strukturformeln entwickeln und sich diese räumlich vorstellen zu können. Durch dieses Grundwissen ist es im Anschluss einfacher möglich, die Punktgruppe richtig zu bestimmen und infolgedessen keine falsche Vorhersage über den Ausgang eines Experimentes zu treffen. Aus diesem Grund werden Charaktertafeln bereits während des Chemie-Studiums thematisiert und immer wieder aufgegriffen, auch wenn die zugrundeliegende Mathematik eher selten angesprochen wird.

IV. Fazit

Diese wissenschaftliche Arbeit fasst die wichtigsten Grundlagen der Gruppentheorie zusammen und veranschaulicht durch die Verbindung mit der Klassifikation chemischer Moleküle deren Relevanz für die Erforschung nicht unmittelbar mathematischer Gebiete. Dabei zeigt gerade der letzte Teil des dritten Kapitels die praktische Anwendung der zuvor aufgearbeiteten, theoretischen Inhalte und stellt eine Bedeutsamkeit für den Einsatz von Mathematik heraus, wie sie selten deutlich wird. Während die Gruppentheorie bereits seit zwei Jahrhunderten weiterentwickelt und meist durch Geometrie als einfach verständliches Anschauungsmaterial ergänzt wird, werden die Verbindungen mit der naturwissenschaftlichen Gruppentheorie hingegen erst seit einigen Jahrzehnten untersucht. Aus diesem Grund gibt es im direkten Vergleich deutlich weniger Nachschlagewerke, die den Zusammenhang zwischen der Gruppentheorie und der Gestalt von Molekülen aus mathematischer Sicht beschreiben, woraus die Idee für das Verfassen dieser Arbeit entstand.

Das zweite Kapitel beginnt zunächst mit einigen allgemeinen Definitionen als den einfachsten Grundlagen der Algebra. Diese werden jedoch schnell um abstraktere Begriffe und Inhalte der Gruppentheorie als Teilgebiet der Algebra erweitert und mit Hilfe von Alltagsbeispielen zur besseren Anschaulichkeit erklärt. Gegen Ende des mathematischen Teils der Arbeit stehen wichtige Erkenntnisse der Mathematik wie das Untergruppenkriterium oder der Satz von Lagrange im Vordergrund, die die Relevanz der Gruppentheorie zum einen in der höheren Mathematik, zum anderen aber auch in praktischen Anwendungen darstellen.

Ein spezieller Bereich dieser Beispiele wird in Kapitel III thematisiert. Nach der Beschreibung der kristallinen Erscheinungsform von Molekülen wird weiterführend die Existenz verschiedener Kristallarten angesprochen. Die Unterschiede zwischen den einzelnen Arten variiert dabei teilweise von fast gleichen bis hin zu völlig verschiedenen Formen. Um chemische Moleküle bei einer solchen Vielfalt entsprechend eindeutig klassifizieren zu können, werden die Formen in Kristallklassen zusammengefasst. Diese entsprechen mathematischen Gruppen, sodass im weiteren Verlauf des dritten Kapitels einige Inhalte aus dem vorangegangenen Teil der Arbeit explizit auf diese übertragen werden. Das daraus resultierende Wissen wird in sogenannten Charaktertafeln zusammengefasst, mit Hilfe derer chemische Moleküle unmissverständlich eingeordnet werden können.

Das Ziel der wissenschaftlichen Arbeit ist am Ende des dritten Kapitels soweit erreicht, dass ein exemplarisch ausgewähltes Molekül mit Hilfe der Mathematik beschrieben und die mathematischen mit den chemischen Eigenschaften verknüpft werden können.

Durch die Wahl der Alltagsbezüge innerhalb der Arbeit zeigt sich, dass Symmetrien und damit verbunden auch Gruppen zwar ohne große Anstrengungen wahrgenommen, meistens jedoch nicht unter Berücksichtigung der zugrundeliegenden Mathematik betrachtet werden. Gerade mathematisch interessierten Personen bietet diese Arbeit allerdings die Möglichkeit, verstärkt auf die Mathematik

hinter natürlichen Erscheinungen einzugehen und ihre Sensibilität hierfür auszubauen. Darüber hinaus betont die wissenschaftliche Arbeit erneut die Rolle, welche Symmetrien in unserem Leben spielen und zeigt, dass der Gruppenbegriff sowohl im Großen als auch im Kleinen den Zugang zur Natur ermöglicht. Während die Raumformen beispielsweise unmittelbar auf das Universum und die Anordnung der Sonnensysteme übertragen werden können, untersuchen kristallografische Punktgruppen Moleküle als Bausteine allen Lebens. Jeder uns bekannte Bereich weist demzufolge Symmetrien auf, die nicht nur eine Bedeutung für die Mathematik und die Naturwissenschaften, sondern auch für die Kunst, die Musik und alle weiteren wichtigen Gebiete unseres Lebens haben.

Anhand der zahlreichen Möglichkeiten zur Untersuchung von Symmetrien und Gruppen wird deutlich, dass in dieser Arbeit nur ein kleiner Teil der Mathematik hinter der Gruppentheorie angesprochen wurde, da Gruppen und alle Themen, die damit einhergehen, ein immenses Forschungspotential besitzen. So können Gruppen wie in Kapitel II zum Beispiel durch Geometrien und deren Symmetrieoperationen erklärt werden, gleichzeitig bieten aber auch Matrizen die Möglichkeit, die Gruppentheorie anschaulich zu erläutern. Weil sich diese Arbeit jedoch besonders auf die chemische Anwendung von Gruppen konzentriert und hier Matrizen überwiegend für die Darstellung der Inhalte eingesetzt werden, wird das Hauptaugenmerk auf die Geometrie gelegt. Dadurch wird verstärkt der Inhalt der Matrizen erklärt. In einer weiteren Bearbeitung des Themas könnten aus diesem Grund vor allem die mathematischen Inhalte zur Gruppentheorie noch weiter vertieft werden. Gerade eine Beschreibung von Matrizen und den zugehörigen Operationen innerhalb eines weiteren Kapitels wäre denkbar, um den Aufbau chemischer Charaktertafeln noch weiter und umfassender erklären zu können und so eine stärkere Verknüpfung zwischen den Gebieten zu erzielen.

Die wissenschaftliche Arbeit *Einführung in die geometrische Gruppentheorie mit Anwendung auf die Klassifikation chemischer Moleküle* stellt demnach alles in allem einen Versuch zur Kombination von Algebra und analytischer Chemie dar, der noch deutlich ausgebaut werden kann.

Literaturverzeichnis

- Aradi, B. (2022). *Einführung in die Gruppentheorie*. Abgerufen am 27.05.2022 von Bremen Center for Computational Materials Science:
<https://www.bccms.uni-remen.de/fileadmin/BCCMS/CMS/people/aradi/gruppentheorie.pdf>
- Beutelspacher, A. (2003). *Lineare Algebra. Eine Einführung in die Wissenschaft der Vektoren, Abbildungen und Matrizen*. Wiesbaden: Vieweg + Teubner.
- Borchardt-Ott, W., & Sowa, W. (2018). *Kristallographie - Eine Einführung für Studierende der Naturwissenschaften*. Berlin: Springer.
- Brückler, F. (2019). *Mathematische Grundlagen der Kristallographie für Mathematiker und Naturwissenschaftler*. Berlin: Springer.
- Burckhardt, J. (1947). *Die Bewegungsgruppen der Kristallographie*. Basel: Birkhäuser AG.
- Glosauer, T. (2016). *Elementar(st)e Gruppentheorie. Von den Gruppenaxiomen bis zum Homomorphiesatz*. Wiesbaden: Springer.
- Huheey, J., Keiter, E., & Keiter, R. (2014). *Anorganische Chemie. Prinzipien von Struktur und Reaktivität*. (R. Steudel, F. Breher, M. Finze, D. Johrendt, & M. Kaupp, Hrsg.) Berlin: De Gruyter.
- Jander, G., & Blasius, E. (2006). *Lehrbuch der analytischen und präparativen anorganischen Chemie*. Stuttgart: Hirzel.
- Kleber, W., Bautsch, H., Bohm, J., & Klimm, D. (2010). *Einführung in die Kristallographie*. München: Oldenbourg.
- Mathiak, K., & Stingl, P. (1968). *Gruppentheorie für Chemiker, Physiko-Chemiker, Mineralogen. Ab 5. Semester*. Braunschweig: Friedrich Vieweg & Sohn.
- Modler, F., & Kreh, M. (2015). *Tutorium Analysis 2 und Lineare Algebra 2. Mathematik von Studenten für Studenten erklärt und kommentiert*. Berlin: Springer.
- Otterbein University. (2021). *Symmetry Resources at Otterbein University, Galery*. Abgerufen am 26.05.2022 von <https://symotter.org/gallery>.
- Pixabay. *Kostenlose & lizenzfreie Bilder*. (2022). Abgerufen am 01.07.2022 von <https://pixabay.com/de/images/search/vorfahrt-achten-schild/>.
- Rosebrock, S. (2019). *Anschauliche Gruppentheorie. Eine computerorientierte geometrische Einführung*. Berlin: Springer.
- Schmitz, R. (2022). *3D-Molekül-Viewer*. Abgerufen am 20.05.2022 von Chemie interaktiv. Animationen für den Chemieunterricht: https://chemie-interaktiv.net/mol_viewer.html.
- Wiley Information Services GmbH. (2016). *Symmetriebetrachtungen und Punktgruppen. Vorgehensweise zur Bestimmung der Punktgruppe eines Moleküls*. Abgerufen am 26.05.2022 von Chemgapedia:

http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/3/anc/ir_spek/symmetrie.vlu/Page/vsc/de/ch/3/anc/ir_spek/schwspek/symmetrie/ir_5_2/ir_5_2_11/punktschema_m20ht0700.vscml.html.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Darstellung der Drehung um 90° (eigene Darstellung mit GeoGebra).	5
Abbildung 2: Spiegelung, Drehung und Translation des Buchstabens F (basierend auf Brückler, 2019, S. 65,70,73).	6
Abbildung 3: Darstellung der Spiegelung an der y-Achse (eigene Darstellung mit GeoGebra).	7
Abbildung 4: „Vorfahrt gewähren“-Schild als Beispiel für ein gleichseitiges Dreieck (Pixabay. Kostenlose und lizenzfrei Bilder, 2022).	8
Abbildung 5: Orientierungsumkehrung der Leserichtung (eigene Darstellung).	8
Abbildung 6: Beispiel für drei nicht-kollineare Punkte (eigene Darstellung).	9
Abbildung 7: Quadrat mit eingezeichneten Spiegelachsen und Drehmöglichkeiten (eigene Darstellung).	19
Abbildung 8: Exemplarische Darstellung der Drehung eines Quadrats um 270° (eigene Darstellung).	26
Abbildung 9: Untergruppen der S_4 (eigene Darstellung).	29
Abbildung 10: 1,3-Butadien als Molekül mit einem Inversionszentrum zwischen dem zweiten und dritten C-Atom (basierend auf Schmitz, 2022).	41
Abbildung 11: Beziehungen zwischen den 32 Kristallklassen nach Hermann (Borchardt-Ott & Sowa, 2018, S.135).	46
Abbildung 12: Ethen als Molekül der Kristallklasse D_{2h} (Otterbein University, 2021).	47
Abbildung 13: 1,2-Dichlorethen als Molekül der Kristallklasse C_{2v} (Otterbein University, 2021).	47
Abbildung 14: Flussdiagramm zur Bestimmung der Kristallklasse (Wiley Information Services GmbH, 2016).	48
Abbildung 15: Methan als Molekül der Kristallklasse T_d (Schmitz, 2022).	49
Abbildung 16: Darstellung einer Drehachse inklusive diagonaler Spiegelebene am Beispiel Methan (Otterbein University, 2021).	50
Abbildung 17: Darstellung der 1s-, 2p- und 3d-Orbitale (Jander & Blasius, 2006, S.11).	58
Abbildung 18: Wasser als Molekül der Kristallklasse C_{2v} (Schmitz, 2022).	59

Tabellenverzeichnis

<i>Tabelle 1: Unterscheidung der Isometrie-Arten anhand ihrer Merkmale (eigene Darstellung).</i>	8
<i>Tabelle 2: Unterscheidung der Isometrie-Arten im $\mathbb{R}^3$ anhand ihrer Merkmale (eigene Darstellung).</i>	11
<i>Tabelle 3: Verknüpfungstafel für die Drehoperationen eines gleichseitigen Dreiecks (eigene Darstellung).</i>	18
<i>Tabelle 4: Zusammenfassung der Diedergruppen D_3 bis D_6 inklusive ihrer Eigenschaften (eigene Darstellung).</i>	21
<i>Tabelle 5: Verknüpfungstafel für die Symmetrieoperationen eines gleichseitigen Dreiecks (eigene Darstellung).</i>	22
<i>Tabelle 6: Die 32 Kristallklassen inklusive der Einordnung in die Kristallsysteme und der Bezeichnungen (Kleber et al., 2010).</i>	43
<i>Tabelle 7: Bedingungen der sieben Kristallsysteme (eigene Darstellung).</i>	44
<i>Tabelle 8: Allgemeine Darstellung einer Charaktertafel (Mathiak & Stingl, 1968).</i>	53
<i>Tabelle 9: Bezeichnung der irreduziblen Darstellungen nach Mulliken (eigene Darstellung).</i>	54
<i>Tabelle 10: Zusammenhang zwischen den vier Quantenzahlen und den Orbitalen (eigene Darstellung).</i>	57
<i>Tabelle 11: Charaktertafel mit vollständig angegebenen Charakteren (eigene Darstellung).</i>	60
<i>Tabelle 12: Charaktertafel der Kristallklasse C_{2v} (eigene Darstellung).</i>	61
<i>Tabelle 13: Erweiterte Charaktertafel Kristallklasse C_{2v} (eigene Darstellung).</i>	61