Theoret. chim. Acta (Berl.) 2, 193—201 (1964)

Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie der Technischen Hochschule München

Über Isomorphie bei Punktsymmetrien*

Von

Ernst Ruch

In der vorliegenden Abhandlung wird eine systematische Deduktion der Isomorphismen innerhalb der Gruppen und Doppelgruppen von Punktsymmetrien angegeben und das Resultat in Tabellen veranschaulicht. Dabei werden folgende Begriffe und Sätze aus der elementaren Gruppentheorie verwendet: Gruppe, Untergruppe, cyclische Untergruppe, Normalteiler, Ordnung, Index, Nebenklasse, direktes Produkt, Homomorphie, Isomorphie, Faktorgruppe, Isomorphiesatz.

In the present paper a systematic deduction of the isomorphisms among the groups and double-groups of point-symmetries is given. The results are shown in tables. The following concepts and theorems from elementary group theory are used: group, sub-group, cyclic sub-group, invariant sub-group, order, index, coset, direct product, homomorphism, isomorphism, factor-group, theorem of isomorphism.

Dans la présente publication une déduction systématique des isomorphismes parmi les groupes et double-groupes de symétries à point fixe est donnée; les résultats obtenus sont illustrés dans des tableaux. On a utilisé les notions et théorèmes suivants de la théorie élémentaire des groupes: groupe, sous-groupe, sous-groupe cyclique, sous-groupe invariant, ordre, indice, sous-groupe associé, produit direct, homomorphisme, isomorphisme, groupe factoriel et théorème d'isomorphisme.

Die praktisch wichtigste Anwendung der Gruppentheorie auf dem Gebiet der Quantenmechanik gründet sich auf Informationen, die wir mit Hilfe der Charaktere einer gegebenen Symmetrie entnehmen können. Ist nämlich eine beobachtbare Größe eines quantenmechanischen Systems – eine Observable – unempfindlich gegenüber Veränderungen des Systems und sind diese Veränderungen spezielle Deckoperationen zu einer bestimmten Symmetrie, sind also die Deckoperationen an dem System ohne Einfluß auf die Observable, dann erlaubt uns die Kenntnis der Charaktere zu dieser Symmetrie eine physikalisch sinnvolle Klassifizierung von Quantenzahlen und Eigenfunktionen, Einblick in ihr Transformationsverhalten bei Anwendung der Gruppenoperationen und ihren Entartungsgrad, qualitative Aussagen über die Wirkung kleiner Störungen des Systems von außen, wesentliche Vereinfachungen bei numerischen Rechnungen u. a. m.

Innerhalb der Chemie ist das System „Molekül" und die Beobachtung seiner Energie ein Hauptanliegen, und Symmetrien in diesem Zusammenhang sind solche mit gemeinsamem Fixpunkt aller Symmetrieoperationen, die „Punktsymmetrien". Klassifizierung der Energieeigenzustände und Terme, Schalenaufbau, optische Übergangsverbote, Termaufspaltung zufolge der Wirkung äußerer Felder, Eignung von Valenzzuständen zweier Molekülteile zur Formulierung einer homöopolaren Bindung, Klassifikation von Normalschwingungen usw. gehören in diesem Fall zum Informationsschatz der Charakterentafel.

---

* Meinem verehrten Lehrer, Herrn Professor Dr. Joseph Lense, in Dankbarkeit zugeeignet.

Bei der Benutzung der Charakterentafeln fällt auf, daß es verschiedene Symmetrien mit identischer Charakterentafel gibt. Als Grund dafür findet man, daß zwischen solchen Symmetrien die Möglichkeit einer umkehrbar eindeutigen Zuordnung der einzelnen Symmetrieoperationen besteht, und daß diese Zuordnung strukturtreu ist, d. h. auch bezüglich aller innerhalb der Gruppe möglichen Zerlegungen der Symmetrieoperation in Teiloperationen bestehen bleibt. Man sagt, die Symmetrien sind äquivalent, die Symmetriegruppen sind isomorph oder sie sind verschiedene geometrische Interpretationen einer abstrakten Gruppe.

Die Charakterentafel ist demnach durch die Struktur der Gruppe völlig bestimmt. Dem naheliegenden Bedürfnis, entweder alle isomorphen Symmetriegruppen ihrer gemeinsamen Charakterentafel zugeordnet zu finden oder aber eine Methode zur Herstellung dieser Ordnung zu haben, wird in den einschlägigen Lehrbüchern nicht oder unvollständig entsprochen. Darüber hinaus ist uns aus der Literatur keine generelle Argumentation mit den anschaulichen Begriffen der Symmetriegruppe bekannt, wonach diese Isomorphismen logisch zwingend erfaßt werden. Im folgenden soll daher ein solches Verfahren für die Gruppen und Doppelgruppen der Punktsymmetrien dargelegt und als Resultat eine vollständige Tabelle angegeben werden.

Wir behandeln zunächst die einfachen Punktsymmetriegruppen.

Die geometrische Interpretation einer Gruppe durch eine Punktsymmetrie erster Art, eine Symmetriegruppe, die nur Drehungen und keine Spiegelungen enthält, ist, falls möglich, eindeutig. Dieser Tatbestand wird anschaulich klar, wenn man sich mittels der Geometrie davon überzeugt, daß Zahl und Zähligkeit der Symmetrieachsen auch deren gegenseitige Orientierung und damit alles Erforderliche über das Symmetrieachsensystem festlegt. Da die einzig mögliche geometrische Interpretation einer cyclischen Gruppe der Ordnung m durch eine Symmetrie erster Art zur Symmetrie einer m-zähligen Drehachse führt, da andererseits Zahl und Ordnung der cyclischen Untergruppen in einer Gruppe endlicher Ordnung feststehen, ist die Symmetrie durch die Gruppe also festgelegt. Es gibt keine äquivalenten Punktsymmetrien erster Art.

Wir ergänzen die Punktsymmetrien erster Art durch solche zweiter Art. Dabei verwenden wir mit Vorteil das Korollar:

Enthält eine Klasse äquivalenter Punktsymmetrien mehr als eine Symmetrie, dann befindet sich darunter immer eine Symmetrie erster Art.

Beweis: Symmetrien zweiter Art enthalten eine Untersymmetrie erster Art vom Index 2; denn die Drehungen bilden für sich eine Gruppe, und die Zusammensetzung zweier beliebiger Operationen zweiter Art aus der Gesamtsymmetrie entspricht einer ihrer Drehungen. Also liegen alle Operationen zweiter Art in der einzigen Nebenklasse. Eine Symmetriegruppe zweiter Art S läßt demnach immer eine Zerlegung zu

$$S = (g_\nu \,;\; g_\nu s)\,, \tag{1}$$

wobei die g_ν die Drehungen und s irgendeine Operation zweiter Art aus der Symmetriegruppe S bezeichnen sollen.

Es ist nun zweckmäßig, diese Nebenklasseneinteilung (1) unter Benutzung der Inversion am Fixpunkt i zu schreiben. Das Element i ist von der Ordnung zwei, und es ist mit jeder beliebigen Drehung um eine Achse durch den Fixpunkt vertauschbar. Daraus geht hervor, daß ein beliebiges Element zweiter Art s aus S in eindeutiger Weise in die Inversion i und eine (nicht notwendig zu S gehörige) Drehung c zerlegt werden kann:

$$S = ic = ci \ .$$

Für die Nebenklasseneinteilung (1) sind demnach zwei Fälle möglich:

(1a) Die Symmetriegruppe S enthält die Inversion i.

Dann gilt: $S = (g_\nu \ ; \ g_\nu i) \ .$

(1b) Die Symmetriegruppe enthält die Inversion i nicht.

Dann gilt: $S = (g_\nu \ ; \ g'_\nu i) \ ,$

wobei die Drehungen $g'_\nu = g_\nu c$ nicht zu den Symmetrieoperationen aus S gehören.

Im Falle (1a) liegt ein direktes Produkt vor

$$S = \mathfrak{g} \times S_2 \ ,$$

wobei $\mathfrak{g}$ die Untersymmetrie erster Art mit den Drehungen g_ν und S_2 die Inversionsgruppe, bestehend aus der Einheit e und der Inversion i bezeichnet.

Im Falle (1b) führt der Übergang $i \to e$ ($e =$ Gruppeneins) zu einer Abbildung

$$S = (g_\nu \ ; \ g'_\nu i) \to (g_\nu \ ; \ g'_\nu) \ ,$$

die umkehrbar eindeutig

$$\left\{ \begin{matrix} g_\nu \longleftrightarrow g_\nu \\ g'_\nu i \longleftrightarrow g'_\nu \end{matrix} \right\}$$

und wegen

$$\left\{ \begin{matrix} g_\nu \ g_\mu \longleftrightarrow g_\nu \, g_\mu \\ g'_\nu i \, g_\mu \longleftrightarrow g'_\nu \, g_\mu \\ g'_\nu i \, g'_\mu i \longleftrightarrow g'_\nu \, g'_\mu \end{matrix} \right\}$$

ein Isomorphismus ist, der auf eine Symmetriegruppe erster Art führt.

Zu jeder Symmetriegruppe zweiter Art ohne Inversionszentrum gibt es also eine isomorphe Symmetriegruppe erster Art.

Demnach sind isomorphe Symmetriegruppen zweiter Art ohne Isomorphie zu einer Symmetriegruppe erster Art nur innerhalb der Symmetriegruppen mit Inversionszentrum zu suchen.

Eine solche Isomorphie

$$\mathfrak{g}_1 \times S_2 \simeq \mathfrak{g}_2 \times S_2$$

würde aber zur Isomorphie zwischen Symmetriegruppen erster Art $\mathfrak{g}_1 \simeq \mathfrak{g}_2$ führen, was der eingangs erwähnten Eindeutigkeit der Interpretation einer Gruppe durch eine Symmetrie erster Art widerspricht.

Damit ist aber unser Korollar bewiesen.

Um bestehende Isomorphismen systematisch aufzufinden, können wir also dem Korollar gemäß von den Punktsymmetrien erster Art ausgehen. Dabei wird sich die vorgenommene Fallunterscheidung als nützlich erweisen.

Besteht eine Isomorphie zwischen Punktsymmetriegruppen, dann muß die isomorphe Symmetriegruppe erster Art eine Untergruppe vom Index 2 besitzen. Indem wir alle möglichen, geometrisch nicht äquivalenten Zerlegungen nach einer solchen Untergruppe und ihrer Nebenklasse an den Symmetriegruppen erster Art vornehmen, bieten sich zwei Wege zur Erzeugung isomorpher Symmetrien zweiter Art an.

(2b) Gemäß dem Übergang

$$G = (g_\nu \, ; \, g'_\nu) \rightarrow (g_\nu \, ; \, g'_\nu i)$$

erhalten wir Symmetriegruppen zweiter Art ohne Inversionszentrum. Alle von den verschiedenen Zerlegungen einer Gruppe erster Art G auf diese Weise abgeleiteten Symmetriegruppen zweiter Art sind untereinander und zu G isomorph. Mit dieser Zuordnung werden alle Symmetriegruppen zweiter Art ohne Inversionszentrum erfaßt.

(2a) Erweist sich eine Zerlegung der obigen Art als direktes Produkt aus der Untergruppe $\mathfrak{g}$ und eine Untergruppe der Ordnung zwei, ist also

$$G = (g_\nu \, ; \, g'_\nu) = (g_\nu \, ; \, g_\nu c_2) = \mathfrak{g} \times C_2 \ ,$$

so besteht neben der Zuordnung (2b) noch (vgl. 1a) die Zuordnung

$$G = \mathfrak{g} \times C_2 = (g_\nu \, ; \, g_\nu c_2) \rightarrow (g_\nu \, ; \, g_\nu i) = \mathfrak{g} \times S_2 \ ,$$

welche zu einer isomorphen Symmetriegruppe mit Inversionszentrum führt.

(2c) Die mit (2a) und (2b) noch nicht erfaßten Symmetriegruppen sind notwendig von der Form $G \times S_2$, sie entstehen durch direkte Produktbildung von S_2 mit allen beim Schritt (2a) nicht als direkte Faktoren aufgetretenen Symmetriegruppen erster Art.

Bevor wir an Hand des dargelegten Verfahrens eine Tabelle der äquivalenten Punktsymmetrien aufstellen, ist es zweckmäßig, sich die geometrische Bedeutung des direkten Produktes zweier Untergruppen erster Art von der Ordnung 2 bzw. dem Index 2 klarzumachen.

Die Symmetrieuntergruppe erster Art von der Ordnung 2, die C_2, enthält die Einheit und eine Drehung c_2 um den Winkel π. Sie kann dann und nur dann als direkter Faktor auftreten, wenn c_2 mit allen übrigen Drehungen vertauschbar ist und nicht in der Untergruppe $\mathfrak{g}$ aus der Zerlegung $G = \mathfrak{g} \cdot C_2$ vorkommt. Die Bedingung für Vertauschbarkeit wird anschaulich klar an der geometrischen Bedeutung von konjugierten Drehungen. Gilt nähmlich $c' = d\,c\,d^{-1}$, so repräsentiert c' eine Drehung desselben Winkels wie c um eine Achse, in die die Achse zu c zufolge der Drehung d übergeht. Vertauschbarkeit von c und d in der Form $c = d\,c\,d^{-1}$ bzw. $d = c\,d\,c^{-1}$ interpretiert, besagt also, daß Achsenrichtungen und Drehwinkel durch wechselseitige Konjugation nicht verändert werden. Vertauschbare Drehungen haben demnach zusammenfallende Achsen oder auch, falls die Drehwinkel Umklappungen sind, aufeinander senkrechte Achsen. Zusammen mit der Bedingung, daß c_2 nicht in $\mathfrak{g}$ vorkommen darf, ergibt sich damit:

Die Zerlegung von G in ein direktes Produkt der Form $G = \mathfrak{g} \times C_2$ ist dann und nur dann möglich, wenn das Achsensystem der Symetrieuntergruppe $\mathfrak{g}$ außer einer Drehachse ungerader Zähligkeit in Achsenrichtung von C_2 und dazu senkrechten Zweierachsen keine weiteren Drehachsen aufweist.

Mit diesen Bemerkungen dürfte es ohne große Mühe möglich sein, in der nachstehenden Tab. 1 die angegebenen Isomorphien der Punktsymmetriegruppen selbst nachzuprüfen. Ausgehend von einer Symmetrie erster Art überzeugt man sich von ihren Zerlegungsmöglichkeiten nach einer Untergruppe vom Index 2 (jeweils in einer Zeile aufgeführt) und schließt gemäß (2b) (Doppelpfeil) und, falls möglich, gemäß (2a) (einfacher Pfeil) auf eine jeweils isomorphe Symmetriegruppe zweiter Art. Klassen äquivalenter Symmetrien sind am linken Tabellenrand noch durch Klammern deutlich gemacht. Das Fehlen einer Untergruppe vom Index 2 bei der Tetraeder- und Ikosaedergruppe T und J kann aus der Isomorphie zu $\mathfrak{A}_4$ und $\mathfrak{A}_5$, den alternierenden Permutationsgruppen, geschlossen werden. Es gilt nämlich der Satz, daß $\mathfrak{A}_n$ keine Untergruppen vom Index 2 hat, falls $n \geq 4$ ist.

Zur Nomenklatur sei noch bemerkt: Große Buchstaben kennzeichnen Gruppen, kleine Buchstaben Symmetrieoperationen; Drehungen um den Winkel $\frac{2\pi}{n}$ sind durch den Index n charakterisiert. Allgemein sind Drehungen durch den Buchstaben c und, falls es sich um zweizählige Drehungen um zur Hauptachse senkrechte Diederachsen handelt, mit d_2 bezeichnet. Die Schreibweise $D_{2n} = (C_{2n}\ ;\ C_{2n} \cdot d_2)$ z. B. bedeutet eine Zerlegung von D_{2n} in die Untergruppe C_{2n} und die Nebenklasse $C_{2n} \cdot d_2$, bestehend aus allen Produkten der Elemente von C_{2n} mit d_2.

Die Tabelle gilt streng nur für $n > 1$; für $n = 1$ wird die Gruppenbezeichnung speziell bei den Diedergruppen inkonsequent. Deshalb ist am rechten Tabellen-

Tabelle 1. *Zur Isomorphie der Punktsymmetriegruppen*

n = ungerade	C_n									C_1
	C_{2n}	$= (C_n; C_n \cdot c_2)$	$\Downarrow$	$=$	$\downarrow$	$C_n \times C_2$				C_2 $\Downarrow$ $\downarrow$
	C_{nh}	$= (C_n; C_n \cdot c_2 \cdot i)$								S
	S_{2n}	$= (C_n; C_n \cdot i)$		$=$		$C_n \times S_2$				S_2
n = gerade	C_{2n}	$= (C_n; C_{2n} \cdot c_n)$	$\Downarrow$							
	S_{2n}	$= (C_n; C_{2n} \cdot c_n \cdot i)$								
	C_{nh}	$= (C_n; C_n \cdot i)$		$=$		$C_n \times S_2$ (für $n = 2$ siehe letzte Spalte)				
n = ungerade	D_n	$= (C_n; C_n \cdot d_2)$	$\Downarrow$							$\div$
	C_{nv}	$= (C_n; C_n \cdot d_2 \cdot i)$								$\div$
	D_{2n}	$= (C_{2n}; C_{2n} \cdot d_2)$	$\Downarrow$	$=$	$\Downarrow$	$(D_n; D_n \cdot c_2)$	$=$	$\downarrow$	$D_n \times C_2$	D_2 $\Downarrow$ $\downarrow$
	C_{2nv}	$= (C_{2n}; C_{2n} \cdot d_2 \cdot i)$								C_{2v}
	D_{nh}	$=$		$=$		$(D_n; D_n \cdot c_2 \cdot i)$				$[C_{2h}]$
	D_{nd}			$=$		$(D_n; D_n \cdot i)$	$=$		$D_n \times S_2$	C_{2h}
n = gerade	D_{2n}	$= (C_{2n}; C_{2n} \cdot d_2)$	$\Downarrow$	$=$	$\Downarrow$	$(D_n; D_n \cdot c_{2n})$				
	C_{2nv}	$= (C_{2n}; C_{2n} \cdot d_2 \cdot i)$		$=$						
	D_{nd}			$=$		$(D_n; D_n \cdot c_{2n} \cdot i)$				
	D_{nh}	$= (D_{2n}; D_{2n} \cdot i)$		$=$		$D_{2n} \times S_2$				
	T									
	T_h	$= (T; T \cdot i)$		$=$		$T \times S_2$				
	O	$= (T; T \cdot c_4)$	$\Downarrow$							
	T_d	$= (T; T \cdot c_4 \cdot i)$								
	J									
	J_h	$= (J; J \cdot i)$		$=$		$J \times S_2$				

rand die für $n = 1$ bei Umdeutung von Haupt- und Nebenachsen entstehende Bezeichnung angegeben. Dabei ergibt sich speziell für C_{2h} im Gegensatz zur Gruppe C_{2nh} Isomorphie mit anderen Symmetriegruppen.

Für die in der Tabelle angeführten Punktsymmetrien kann n beliebig große endliche Werte annehmen. Der Grenzübergang $n \to \infty$ allerdings stößt auf Schwierigkeiten, wie man schon aus der Abhängigkeit der Klasseneinteilung nach äquivalenten Symmetrien von der Teilbarkeit der Zahl n durch 2 erkennt. Der Übergang $n \to \infty$ würde zu Gruppen abzählbarer Ordnung führen, deren geometrische Interpretation besonders dann auf topologische Schwierigkeiten, auf physikalisch gesehen pathologische Symmetrien führen würde, wenn wir zur Interpretation als Symmetrie die geometrische Sonderstellung von solchen Untergruppen verstehen müßten, die aus der Gesamtheit der Operationen zu einer Achse unendlicher Zähligkeit eine unendliche Teilgesamtheit enthalten. Es ist demnach physikalisch naheliegend, auf einen Grenzübergang der diskutierten Art zu verzichten und allen Achsen mit nicht endlicher Zähligkeit das Kontinuum der Drehungen um Winkel $0 \leq \varphi < 2\pi$ zuzuordnen. Damit sind die Symmetriegruppen erster Art C_∞, D_∞ und K, die Kugeldrehgruppe, erklärt. Jeder Versuch, einer Symmetrie oder Untersymmetrie C_∞ eine Untergruppe vom Index 2 zu entnehmen und die Nebenklassenelemente durch Multiplikation mit i oder in anderer Weise umzuinterpretieren, würde, falls er gelänge, zu physikalisch unsinnigen Symmetrien führen. Es ist daher angezeigt, nach solchen Zerlegungen gar nicht zu suchen und nur jene Schlüsse aus unserer Tabelle zu entnehmen, die von solchen Zerlegungen nicht Gebrauch machen. Mit der Beschränkung auf das physikalisch Sinnvolle können wir nun die Punktsymmetrien endlicher Ordnung durch solche nichtendlicher Ordnung nach Tab. 1a vervollständigen.

Tabelle 1a

$$\begin{array}{l}
C_\infty \\
C_{\infty h} = C_\infty \times S_2 \\
\left\{\begin{array}{l} D_\infty = (C_\infty\,;\, C_\infty \cdot d_2) \\ C_{\infty v} = (C_\infty\,;\, C_\infty \cdot d_2 \cdot i) \end{array}\right. \Downarrow \\
K \\
K_h = K \times S_2
\end{array}$$

Die bisher angestellten Betrachtungen eignen sich ebenfalls zur Klassifizierung der Doppelgruppen von Punktsymmetrien nach dem Merkmal gegenseitiger Isomorphie.

Wenn man unter Symmetrieoperation erster Art mit Fixpunkt eine Operation versteht, die einen Punkt fest läßt und, ohne den Drehsinn einer Schraube zu verändern, eine beliebige geometrische Figur in eine kongruente Figur überführt, dann braucht man von den Einzelheiten dieser Bewegung nichts zu wissen. Verschiedene Möglichkeiten einer geometrischen Interpretation dieser Operation sind durch verschiedene Wege gekennzeichnet, wobei unter einem Weg eine kontinuierliche Folge von Zwischenlagen zu verstehen ist. Sieht man von den Unterschieden dieser Wege ab, so bleibt als ihr gemeinsames Merkmal eine Beziehung zwischen Anfangs- und Endlage bestehen, und wir können die Operation oder die Gesamtheit der Wege durch eine Drehung um eine feste Achse mit einem bestimmten Winkel repräsentieren. Nimmt man die Verschiedenheiten der Wege aber zur Kenntnis, so findet man unendlich viele Möglichkeiten, die Operation durchzuführen.

Betrachtet man stetig ineinander deformierbare Wege als äquivalent, so zeigt sich, daß eine Drehung um den Winkel 2π zwar stetig in eine Drehung desselben

Winkels um jede andere Achse deformierbar ist, aber nicht in eine Drehung um den Winkel 4π. Dagegen erweisen sich die Drehung um den Winkel 4π und die der Gruppeneinheit entsprechende Operation als äquivalent. (Vgl. das H. Weylsche Modell der abrollenden Kegel.) Als Folge der angedeuteten topologischen Verhältnisse findet man, daß eine Symmetriegruppe, für deren Operationen die Frage der Äquivalenz von Wegen aus irgendwelchen Gründen von Einfluß ist, zu jeder ihrer Operationen jeweils eine weitere Operation besitzt, die sich von der ersten durch eine Drehung ε mit dem Winkel 2π unterscheidet. Da die Drehung 4π der Gruppeneinheit äquivalent ist, muß ε von der Ordnung 2 sein, und außerdem findet man ε mit allen Gruppenoperationen vertauschbar.

Es ist erstaunlich, daß es quantenmechanische Teilchen gibt – es sind solche mit halbzahligem Spin –, die eine Frage nach ihrem Symmetrieverhalten nur dann in eindeutiger Weise zu beantworten gestatten, wenn zwischen nicht-äquivalenten Wegen unterschieden wird. Punktsymmetriegruppen, die zwischen nicht-äquivalenten Wegen unterscheiden, nennt man Doppelgruppen.

Doppelgruppen bestehen demnach aus Elementen $(g_\nu, g_\nu\,\varepsilon)$, die sich paarweise um den Faktor ε unterscheiden. Wir unterscheiden Doppelgruppen erster und zweiter Art, je nachdem ob sie keine oder auch Spiegelungen enthalten. Die Spiegelungen sind erklärt, wenn wir die Inversion i in ihrer geometrischen Bedeutung unverändert auch innerhalb der Doppelgruppe verwenden. Das Elementepaar (e, ε) bildet eine Untergruppe (Normalteiler). Indem wir in einer Doppelgruppe $G^\dagger$ von der Frage der Äquivalenz von Wegen absehen, also e und ε als nicht verschieden betrachten, erhalten wir eine Gruppe, die als gewöhnliche Punktsymmetriegruppe G interpretiert werden kann. Oder: auf Grund der Abbildung $(e, \varepsilon) \to e$ wird $G^\dagger$ homomorph auf G abgebildet.

Die Klassifizierung der Doppelgruppen nach ihrer Isomorphie unterliegt nun folgender Betrachtung:

Sind zwei Symmetriedoppelgruppen erster Art isomorph, $G_1^\dagger \cong G_2^\dagger$, so sind es auch ihre durch den Übergang $(e, \varepsilon) \to e$ entstehenden homomorphen Bilder G_1 und G_2. Da es aber keine isomorphen Punktsymmetrien erster Art gibt, muß diese Behauptung auch für Doppelgruppen erster Art gelten.

Da i, die Inversion, innerhalb der Doppelgruppen die gleiche Rolle spielt wie innerhalb der einfachen Symmetriegruppen, können wir die bei den einfachen Symmetriegruppen benützten Argumente in gleicher Weise auf Doppelgruppen beziehen, und wir haben nur anzumerken, daß die Untergruppe der Drehungen in einer Doppelgruppe zweiter Art ebenfalls Doppelgruppe ist, d. h. aus Elementen erster Art g_ν, $g_\nu\,\varepsilon$ besteht. Damit stoßen wir erst bei der Fragestellung, wann bei Gruppen erster Art ein direktes Produkt aus einer Doppeluntergruppe vom Index 2 und einer Untergruppe der Ordnung 2 vorliegt, auf einen charakteristischen Unterschied.

Während nämlich bei einfachen Symmetriegruppen das Element c_2, eine Drehung um den Winkel π, von der Ordnung 2 ist, ist die Ordnung einer solchen Drehung bei der Doppelgruppe 4. Das einzige Element der Ordnung 2 in einer Doppelgruppe erster Art ist ε.

Würden wir bei einer Zerlegung einer Doppelgruppe erster Art in eine Doppeluntergruppe vom Index 2 und ihre Nebenklasse auf eine direkte Produktzerlegung stoßen, so müßte wegen $G^\dagger = (g_\nu;\ g_\nu\,\varepsilon) \times (e, \omega)$ das Element ω, da es von der

Ordnung 2 sein muß, mit ε übereinstimmen. Da ε aber schon in der Untergruppe $(g_\nu, g_\nu\, \varepsilon)$ auftritt, ist dies ein Widerspruch zur Definition des direkten Produktes.

Demnach entfällt für Doppelgruppen der Schluß (2a), weil die Voraussetzungen dafür in keinem Falle zutreffen können. Es bleiben also nur noch die in Tab. 1 und 1a durch Doppelpfeile angedeuteten Schlüsse (2b) bestehen, und die Isomorphiebetrachtung für Doppelgruppen ist damit abgeschlossen.

Tabelle 2

		$n > 1$			Spezialfälle $n = 1$		
$C_n^\dagger$			C_n		$C_1^\dagger$		C_1
$C_{2n}^\dagger\ C_{nh}^\dagger$	$S_{2n}^\dagger$	$n =$ ungerade	$C_{2n}\ C_{nh}\ S_{2n}$		$C_2^\dagger\ S^\dagger$	$S_2^\dagger$	$C_2\ S\ S_2$
$C_{2n}^\dagger\ S_{2n}^\dagger$	$C_{nh}^\dagger$	$n =$ gerade	$C_{2n}\ S_{2n}$	C_{nh}			
$D_{2n}^\dagger\ C_{nv}^\dagger$			$D_n\ C_{nv}$				
$D_{2n}^\dagger\ C_{2nv}^\dagger\ D_{nh}^\dagger$	$D_{nd}^\dagger$	$n =$ ungerade	$D_{2n}\ D_{2nv}\ D_{dh}\ D_{nd}$		$D_2^\dagger\ C_{2v}^\dagger$	$C_{2h}^\dagger$	$D_2\ C_2\ C_{2h}$
$D_{2n}^\dagger\ C_{2nv}^\dagger\ D_{nd}^\dagger$	$D_{nh}^\dagger$	$n =$ gerade	$D_{2n}\ C_{2n}\ D_{nd}$	D_{nh}			
$T^\dagger$			T				
$T_h^\dagger$			T_h				
$O^\dagger\ T_d^\dagger$			$O\ T_d$				
$J^\dagger$			J				
$J_h^\dagger$			J_h				
$C_\infty^\dagger$			C_∞				
$C_{\infty h}^\dagger$			$C_{\infty h}$				
$D_\infty^\dagger\ C_{\infty v}^\dagger$			$D_\infty\ C_{\infty v}$				
$K^\dagger$			K				
$K_h^\dagger$			K_h				

In Tab. 2 sind die Doppelgruppen hinsichtlich Äquivalenz geordnet aufgeführt und den entsprechenden gewöhnlichen Punktsymmetriegruppen gegenübergestellt.

Es bleiben noch die Isomorphismen zwischen Doppelgruppen und gewöhnlichen Symmetriegruppen zu klären.

Die Möglichkeit, jeder Symmetriegruppe $G^\dagger$ eine gewöhnliche Symmetriegruppe zuzuordnen, indem man die Inäquivalenz von Wegen nicht zur Kenntnis nimmt, also die Einheit und die Drehung ε um 2π identifiziert, beinhaltet eine Homomorphie $G^\dagger \to G$ und damit die Isomorphie der Faktorgruppe von $G^\dagger$ nach dem Normalteiler (e, ε) mit G.

$$\frac{G^\dagger}{(e, \varepsilon)} \cong G.$$

Besteht darüber hinaus eine Isomorphie zwischen einer Doppelgruppe $G^\dagger$ und einer einfachen Symmetriegruppe G', so gilt folgendes:

Ist $G^\dagger$ erster Art oder zu einer Doppelgruppe erster Art isomorph, enthält demnach also nur ein einziges Element der Ordnung 2, nämlich ε, so muß eine dazu isomorphe einfache Symmetriegruppe vom Typ C_{2n} oder dazu isomorph sein; denn alle anderen Punktsymmetrien haben mehr als ein Element der Ordnung 2 (vgl. Tab. 1). Es genügt also, die Isomorphie $C_n^\dagger \cong C_{2n}$ zu kennen, die wegen der Eigenschaft der beiden Gruppen, cyclisch von der Ordnung $2n$ zu sein, evident ist.

Ist $G^\dagger$ nicht von der ersten Art und auch nicht isomorph dazu, also, wie wir gesehen haben, von der Form $\mathfrak{g}^\dagger \times S_2$ und hat sie demnach drei Elemente der Ordnung 2, nämlich ε, i, $\varepsilon \cdot i$, so muß auch eine isomorphe einfache Symmetriegruppe von der Form $\mathfrak{g} \times S_2$ oder isomorph dazu sein. Liegt nämlich bei einfachen Symmetriegruppen ein direktes Produkt mit einer Gruppe der Ordnung 2 vor, so ist es entweder bereits von der Form $\mathfrak{g} \times S_2$ oder aber isomorph dazu. Aus der Isomorphie $\mathfrak{g}^\dagger \times S_2 \cong \mathfrak{g} \times S_2$ folgt die Isomorphie $\mathfrak{g}^\dagger \cong \mathfrak{g}$ zwischen einer Doppelgruppe erster Art und einer gewöhnlichen Gruppe. Die ist aber bereits behandelt.

Damit sind die in Tab. 3 aufgeführten Isomorphien verständlich, die einzigen, die zwischen Doppelgruppen und gewöhnlichen Symmetriegruppen bestehen.

Tabelle 3

	$n > 1$	Spezialfall $n = 1$
n = ungerade	$C_n^\dagger$ C_{2n} C_{nh} S_{2n}	$C_1^\dagger$ C_2 S S_2
	$C_{2n}^\dagger$ $C_{nh}^\dagger$ C_{4n} S_{4n}	$C_2^\dagger$ $S^\dagger$ C_4 S_4
	$S_{2n}^\dagger$ C_{2nh}	$S_2^\dagger$ D_2 C_{2h} C_{2v}
n = gerade	$C_{2n}^\dagger$ $S_{2n}^\dagger$ C_{4n} S_{4n}	
	$C_{nh}^\dagger$ C_{2nh}	

Die Veranlassung, die hier dargestellten Überlegungen auch auf Doppelgruppen auszudehnen, verdanke ich einer privaten Bemerkung von Herrn E. Fick (vgl. Handbuchartikel E. Fick und G. Joos „Kristallspektren", Handbuch der Physik, S. Flügge, Bd. XXVIII, Berlin, Göttingen, Heidelberg: Springer 1957), wonach gerade bei den Doppelgruppen der Mangel an einer systematischen Deduktion der Isomorphismen empfunden wird.

(Eingegangen am 13. März 1964)