

Mathematisches Institut der
Ludwig-Maximilians Universität München

Invarianten eines symmetrischen Tensors unter kristallographischen Symmetriegruppen

Richard Cattien

2011

Diplomarbeit
Betreuer: Prof. Dr. Georg Schlüchtermann

Zusammenfassung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Konstruktion von fundamentalen Systemen, so genannten Integritätsbasen, von Invarianten eines symmetrischen Tensors zweiter Stufe unter den 32 kristallographischen Symmetriegruppen. Neben einer Einführung über den Aufbau von Kristallen und den sich daraus ergebenden Symmetrieeigenschaften werden die benötigten Grundlagen von Tensoren behandelt. Nach der Darstellung einiger allgemeiner Tatsachen über algebraische Invarianten (Invarianten welche einer algebraischen Funktion genügen) werden Integritätsbasen polynomieller Invarianten eines symmetrischen Tensors zweiter Stufe unter allen 32 Symmetriegruppen der sechs grundlegenden Kristallsysteme entwickelt. Ein Abschnitt über Kontinuumsmechanik gewährt einen Ausblick über die Anwendung dieser Invarianten in der Darstellung einer Verzerrungsenergiedichtefunktion anisotroper hyperelastischer Materialien.

Inhaltsverzeichnis

1	Kristalle	6
1.1	Das Raumgitter	6
1.2	Die Kristallstruktur	9
1.3	Das Symmetrieprinzip	11
1.4	Die Kristallsysteme	15
1.5	Bravais-Gitter	20
2	Tensoren	22
2.1	Index-Notation	22
2.2	Das Kronecker-Delta	22
2.3	Transformationen	23
2.4	Tensoren zweiter Stufe	29
3	Invariantentheorie	33
3.1	Grundlagen	33
3.2	Klassische Resultate – algebraische Invarianten	38
3.3	Symmetriegruppen und Kristallklassen	43
3.4	Allgemeine Aussagen zu Integritätsbasen	50
3.5	Integritätsbasen für die 32 Kristallklassen	66
4	Anwendung in der Kontinuumsmechanik	86
4.1	Materialkörper	86
4.2	Deformationsgradient und Verzerrungstensoren	90

Einleitung

In der Kontinuumsmechanik möchte man das Deformationsverhalten verschiedener Materialien modellieren. Speziell werden skalarwertige Funktionen in den Komponenten eines einzelnen symmetrischen Tensors zweiter Stufe verwendet, um Stoffgesetze wie z. B. Fließgrenzen oder Bruchkriterien zu formulieren. Wir interessieren uns für anisotrope Feststoffe. Dies sind Materialien, deren physikalische Eigenschaften von der Orientierung des Materials abhängig sind. Zum Beispiel könnte ein Material, abhängig von der Richtung in der es belastet wird, unterschiedliche Stabilitätseigenschaften aufweisen.

Es ist eine physikalische Tatsache, dass die meisten Materialien dieser Art in ihrer molekularen Struktur Kristalle sind oder in ihrem Aufbau eine hohe Ähnlichkeit mit Kristallen aufweisen. Ein Kristall ist dadurch charakterisiert, dass sein atomarer Aufbau gewissen Regelmäßigkeiten genügt, d. h. die atomaren Bausteine sind in einem sich periodisch wiederholenden Gitter angeordnet. Dieser Umstand hat zur Folge, dass ein Material mit kristalliner Struktur bestimmte Symmetrieeigenschaften besitzt. Je nach Art der Gitterstruktur, welche einem Material zugrunde liegt, kann es beispielsweise sein, dass sich die Materialeigenschaften unter bestimmten Rotationen nicht verändern. Diese Symmetrieeigenschaften kann man dazu verwenden, Materialien zu charakterisieren. Jedem Material wird dadurch eine Symmetriegruppe zugeordnet, deren Elemente alle Bewegungen sind, unter denen die Materialeigenschaften unverändert bleiben.

Eine Forderung, die man an eine skalare Funktion, welche ein Stoffgesetz formuliert, stellt ist, dass sich eine solche Funktion unter der Symmetriegruppe eines Materials ebenfalls nicht verändert. Die Funktion soll eine *Invariante* bezüglich der Symmetriegruppe sein.

Berücksichtigt man die Symmetriegruppe eines Materials, so ergeben sich für eine solche skalare Funktion gewisse Einschränkungen, denen sie genügen muss. Aus diesen Einschränkungen lassen sich dann Invarianten ableiten. Wenn es gelingt, aus den einschränkenden Bedingungen ein System von Invarianten zu extrahieren, aus welchem sich *alle* möglichen Invarianten generieren lassen – eine so genannte *Integritätsbasis* – dann muss eine solche skalare Funktion eine Funktion in genau diesen grundlegenden Invarianten sein.

Ziel ist es, für sämtliche Kristallgitter ein solches System von Invarianten

anzugeben.

Die klassische Invariantentheorie beschäftigt sich mit Invarianten unter allgemeinen linearen Gruppen. Wie eingangs erwähnt, sind für uns besonders die Symmetriegruppen von Kristallen – endliche Untergruppen der orthogonalen Gruppe – von Interesse. Wir wollen in dieser Arbeit die notwendigen Bereiche aus Kristallographie, Invariantentheorie und Kontinuumsmechanik auf eine Weise darstellen, aus der sich ein Gesamtbild zum besseren Verständnis der Zusammenhänge dieser Disziplinen ergibt.

Wir beginnen in Kapitel 1 mit einer allgemeinen Einführung in den Aufbau von Kristallen. Dabei werden wir zunächst die Entstehung eines allgemeinen Raumgitters beschreiben sowie die verschiedenen Symmetrie erzeugenden Eigenschaften erläutern. Daraus ergeben sich dann spezielle Gitter von unterschiedlich hoher Symmetrie, welche zur einfacheren Vorstellung bildlich dargestellt werden.

Das zweite Kapitel versucht einen möglichst direkten und wenig abstrakten Zugang zum Umgang mit Tensoren zu vermitteln, welcher als das Handwerkszeug der darauf folgenden Ausführungen in der Invariantentheorie angesehen werden kann.

Das dritte Kapitel ist in einen allgemeinen und einen speziellen Teil gegliedert. Im allgemeinen Teil werden wichtige Tatsachen über Invarianten unter der Gruppe $O(n)$ geklärt. Im Anschluss daran gehen wir zu den speziellen Symmetriegruppen (endliche Untergruppen von $O(3)$) der verschiedenen Kristallklassen über. Es wird dort sukzessiv für jede einzelne der 32 Kristallklassen eine Integritätsbasis angegeben werden.

Das abschließende Kapitel 4 wird einen kurzen Ausblick in die konkrete Anwendung der Integritätsbasen im Rahmen der Kontinuumsmechanik gewähren. Dabei werden grundlegende Konzepte der Kontinuumsmechanik, wie *Konfigurationen* und der *Deformationsgradient*, erläutert.

1 Kristalle

Diese Arbeit ist durch den Wunsch motiviert, das Deformationsverhalten anisotroper¹ hyperelastischer Feststoffe mathematisch modellieren zu können. Die meisten dieser Materialien weisen eine kristalline Struktur auf ([Hau00], Seite 360), weshalb es lohnend ist, sich mit dem Aufbau von Kristallen zu beschäftigen. In den folgenden Abschnitten werden wir zunächst den Aufbau des allgemeinen Kristallgitters beschreiben und dann zu speziellen Gittern übergehen. Aus diesen speziellen Gittern ergeben sich dann sechs verschiedene Systeme von Kristallen, welche aus den unterschiedlichen Symmetrieeigenschaften der einzelnen Gitter hervorgehen. Diese sechs Kristallsysteme werden beschrieben und zur leichteren Vorstellung bildlich dargestellt. Eine mögliche Definition des Begriffs *Kristall* ist:

Definition 1 (Kristall). Ein *Kristall* ist ein anisotroper homogener Körper, der eine dreidimensional periodische Anordnung der Bausteine (Atome, Ionen, Moleküle) besitzt ([BO10]).

1.1 Das Raumgitter

Gemäß der Definition liegt in Kristallen eine periodische Anordnung der Bausteine in drei Dimensionen vor. Die Bausteine wiederholen sich nach dem Prinzip eines Raumgitters (manchmal auch Punktgitter genannt). Jedoch entsprechen die Punkte, aus denen das Gitter besteht, nicht den einzelnen Bausteinen des Kristalls, sondern sie geben vielmehr vor, nach welchem Muster sich diese Bausteine in der periodischen Anordnung wiederholen. Das Raumgitter selbst ist eine abstrakte unendliche Struktur in welcher sich die Bausteine eines Kristalls anordnen. Wir werden dies ausführlicher in Abschnitt 1.2 auf Seite 9 erläutern. Zunächst beschreiben wir nur den Aufbau des Raumgitters. Dabei werden wir das Raumgitter, ausgehend von einem Gitterpunkt, über die Gittergerade zur Gitterebene und schließlich zum Raumgitter entwickeln.

¹ Wenn eine physikalische Eigenschaft, wie z. B. die Wärmeleitfähigkeit, die Härte oder das Licht-Absorptionsverhalten in verschiedenen Richtungen unterschiedlich ist, so nennt man dieses Verhalten *anisotrop*. Ist das Verhalten physikalischer Eigenschaften in allen Richtungen gleich, so nennt man dies *isotrop* ([BO10]).

1.1.1 Gitterpunkte und Gittergeraden

Wir starten mit der Wahl eines beliebigen Gitterpunktes im dreidimensionalen Raum. Diesen Punkt bezeichnen wir mit 0. Er ist der Ausgangspunkt bei der Konstruktion des Raumgitters.

Wir legen nun einen Vektor \mathbf{h}_1 mit Betrag $|\mathbf{h}_1| = H_1 \in \mathbb{R}_+$ in beliebiger Richtung fest. Einen solchen Vektor nennen wir *Translationsvektor*. Durch anlegen von \mathbf{h}_1 am Punkt 0 erhalten wir an der Spitze des Vektors einen weiteren Gitterpunkt mit der Bezeichnung 1. Durch anlegen von \mathbf{h}_1 an 1 (alternativ auch $2\mathbf{h}_1$ an 0) erhalten wir den Punkt 2. Dieser Vorgang wird nun unendlich fortgesetzt. Da die Richtung von \mathbf{h}_1 fixiert wurde, ist klar, dass alle auf diese Weise konstruierten Punkte auf einer Gerade liegen. Diese Gerade wird *Gittergerade* genannt. Die beschriebene Operation, die wir zur Konstruktion der Gittergerade ausgeführt haben, nennen wir *Gittertranslation*. Der Vorgang ist in Abbildung 1.1 dargestellt.

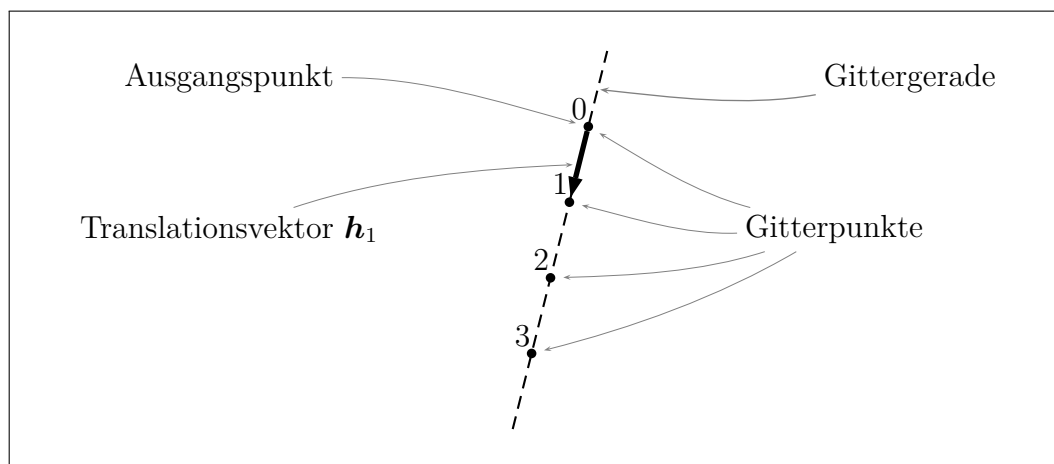


Abbildung 1.1: Konstruktion einer Gittergerade mittels Gittertranslation.

1.1.2 Gitterebene

Wir führen nun einen weiteren Translationsvektor \mathbf{h}_2 mit Betrag $|\mathbf{h}_2| = H_2 \in \mathbb{R}_+$ ein. \mathbf{h}_2 muss eine andere Richtung als \mathbf{h}_1 haben, d. h. $\mathbf{h}_2 \nparallel \mathbf{h}_1$. Lassen wir \mathbf{h}_2 in der selben Weise auf die Gittergerade einwirken, so ergibt sich eine *Gitterebene*, manchmal auch *Netzebene* genannt (siehe Abbildung 1.2 auf der nächsten Seite). Die Vektoren \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_2 spannen die so genannte *Elementarmasche* auf. Der Winkel zwischen \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_2 sei mit α bezeichnet, in Symbolen $\angle(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) = \alpha$. Die gesamte Gitterebene ist dann durch das Tripel (H_1, H_2, α) vollständig beschrieben.

Eine Tatsache, die für die folgenden Ausführungen zwar unerheblich ist, aber dennoch erwähnt werden sollte ist, dass die Wahl der Translationsvektoren nicht eindeutig ist. Man betrachte Abbildung 1.2 und stelle sich beispielsweise anstelle des Vektors \mathbf{h}_2 einen Vektor vor, dessen Spitze in die rechte untere Ecke der (dargestellten) Elementarmasche zeigt. Ein solches System von Translationsvektoren würde das selbe Gitter erzeugen.

Eine Netzebene zeichnet sich auch dadurch aus, dass parallele Gittergeraden immer die gleiche *Translationsperiode* besitzen, d. h. dass Gitterpunkte, welche auf parallelen Gittergeraden liegen, stets den selben Abstand zueinander haben. Stellt man sich zu den beiden in Abbildung 1.2 eingezeichneten Gittergeraden jeweils dazu parallel verlaufende Gittergeraden vor, so sieht man, dass die Abstände der Gitterpunkte bei allen parallelen Gittergeraden der selbe ist. Dieser Umstand wird auch als Charakteristikum für das Vorliegen einer Netzebene verwendet. Wenn in einem Gitter parallele Gittergeraden existieren, bei denen die jeweilige Translationsperiode unterschiedlich ist, kann es sich nicht um eine Netzebene handeln. ([BO10])

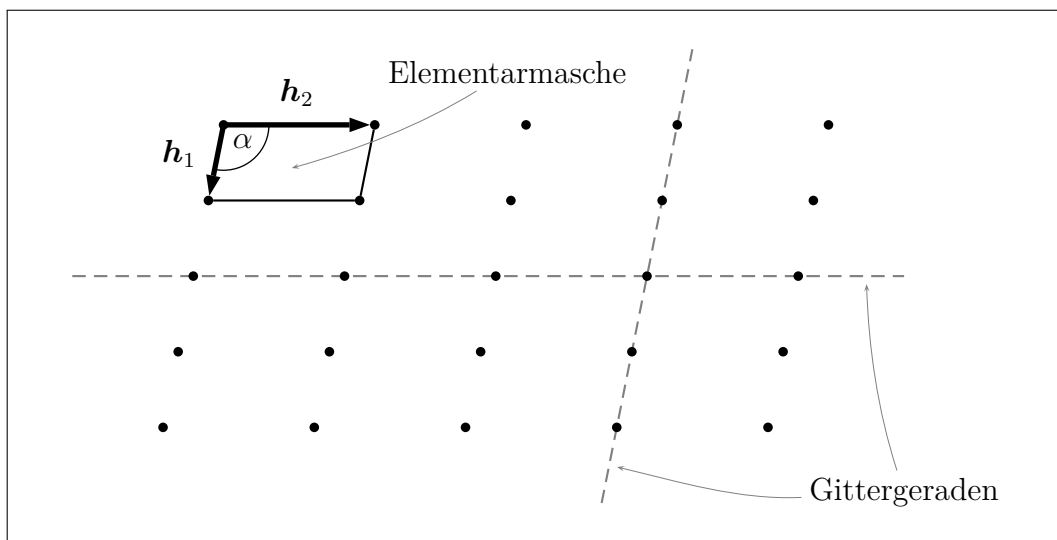


Abbildung 1.2: Gitterebene (Netzebene) mit der durch die Vektoren \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_2 aufgespannten Elementarmasche und zwei Gittergeraden.

1.1.3 Raumgitter

Ein dritter Translationsvektor \mathbf{h}_3 mit Länge $|\mathbf{h}_3| = H_3$, welcher nicht in der von \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_2 aufgespannten Ebene liegt, wird eingeführt. Lässt man die Gittertranslation entlang des Vektors \mathbf{h}_3 auf die in Abbildung 1.2 dargestellte

Gitterebene wirken, so entsteht ein Raumgitter (Abbildung 1.3). Die drei Vektoren $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3$ spannen eine *Elementarzelle* auf (vgl. Elementarmasche), welche durch die sechs Größen ($H_1, H_2, H_3, \angle(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2) = \alpha, \angle(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_3) = \beta, \angle(\mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3) = \gamma$) vollständig beschrieben ist. Die Einwirkung aller drei Gittertranslationen auf die Elementarzelle ergibt wieder das Raumgitter. Die Elementarzelle enthält somit die Gesamtinformation des Raumgitters.

Die mit D markierte Ecke der Elementarzelle gehört nicht nur zu der hervorgehobenen Elementarzelle, sondern zu allen acht dargestellten Zellen. D gehört somit nur zu $\frac{1}{8}$ zur markierten Elementarzelle. Dies gilt gleichermaßen für die verbleibenden 7 Ecken und $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$, d. h. jede Elementarzelle enthält nur einen Gitterpunkt.

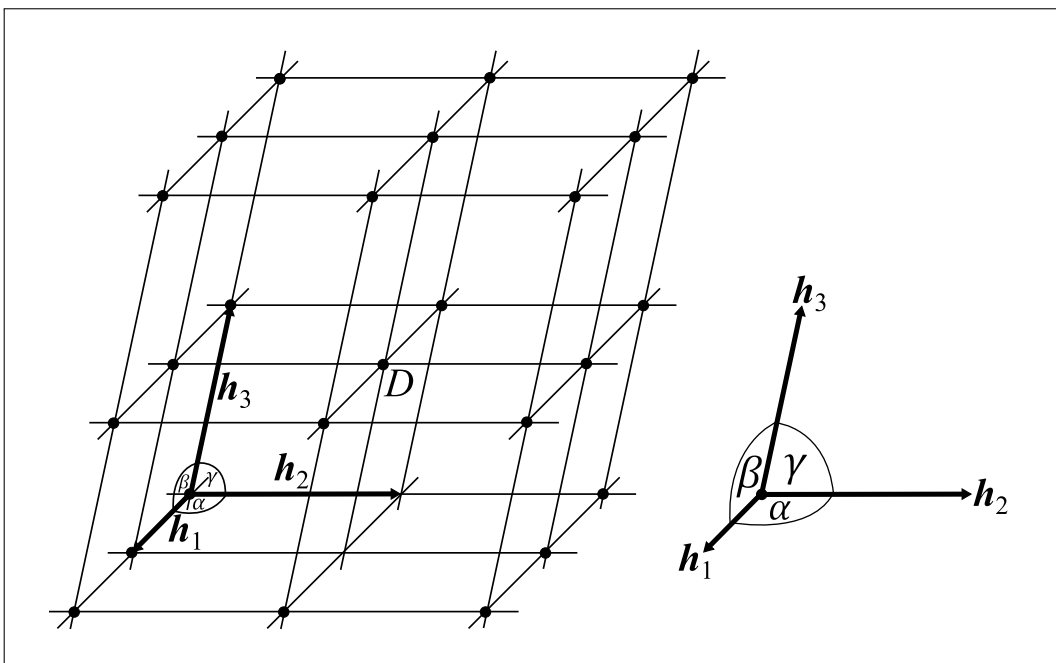


Abbildung 1.3: Links: Raumgitter (allgemeines Kristallgitter). Rechts: Kristallographisches Achsenkreuz bestehend aus den drei Vektoren $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3$, welche die Elementarzelle aufspannen. Durch Gittertranslation entlang dieser Vektoren entsteht das Kristallgitter.

1.2 Die Kristallstruktur

Wir wollen uns nun dem eigentlich Aufbau von Kristallen widmen. Wie in Definition 1 auf Seite 6 angegeben, besitzt ein Kristall eine periodische Struktur. In Abschnitt 1.1 auf Seite 6 über Raumgitter haben wir ein Gitter konstru-

iert, welches diese, die eigentliche Kristallstruktur, tragen soll. Wir werden dies anhand eines hypothetischen Kristalls, dessen Bausteine aus nur drei Elementarteilchen bestehen, und aus Gründen der einfacheren Darstellung nur in zwei Dimensionen, erläutern.

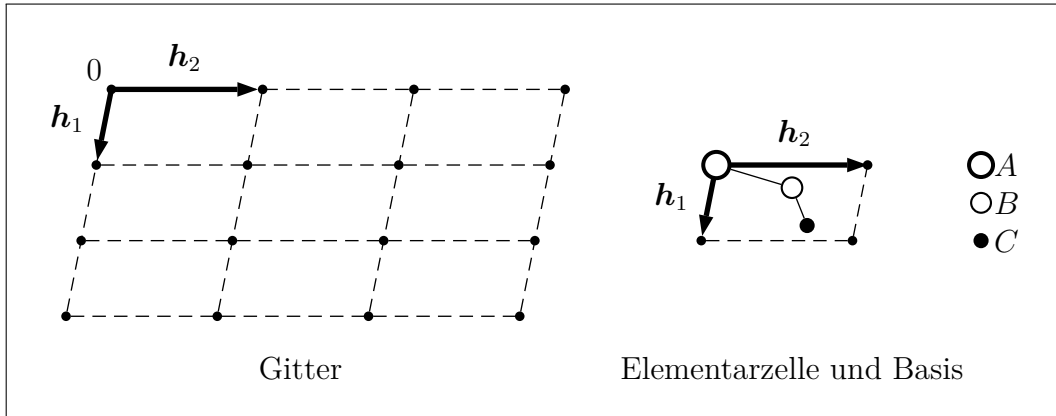


Abbildung 1.4: Links: Raumgitter in zweidimensionaler Darstellung. Rechts: Elementarzelle mit eingezeichneter Basis bestehend aus den Elementarteilchen A, B, C .

In Abbildung 1.4 ist ein Gitter mit einer Elementarzelle dargestellt. Als Kristallbaustein denken wir uns ein Molekül, bestehend aus den Elementarteilchen (Atomen) A, B und C . Diesen Baustein bringen wir in die abgebildete Elementarzelle² ein, und zwar so, dass A auf dem Punkt 0 liegt. B und C liegen dann innerhalb der Elementarzelle.

Wichtig ist die Lage der Elementarteilchen B und C relativ zu 0 und den drei Translationsvektoren $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ und \mathbf{h}_3 . Die Lage lässt sich durch Ortsvektoren beschreiben:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_B &= x_B \mathbf{h}_1 + y_B \mathbf{h}_2 + z_B \mathbf{h}_3, \\ \mathbf{r}_C &= x_C \mathbf{h}_1 + y_C \mathbf{h}_2 + z_C \mathbf{h}_3,\end{aligned}$$

für Koeffizienten $x_B, y_B, z_B, x_C, y_C, z_C \in \mathbb{R}$. Die Anordnung der Bausteine innerhalb einer Elementarzelle heißt *Basis*. Lässt man die Gittertranslationen auf die Basis einwirken, so wird das Molekül durch das gesamte Gitter bewegt. Das Ergebnis ist dann die *Kristallstruktur*, dargestellt in Abbildung 1.5 auf der nächsten Seite. Man kann diesen Sachverhalt auch als

$$\text{Gitter} + \text{Basis} = \text{Kristallstruktur} \quad (1.1)$$

²Aufgrund der zweidimensionalen Darstellung sieht es in Abbildung 1.4 so aus als wäre eine Elementarmasche gemeint. Tatsächlich ist natürlich eine (dreidimensionale) Elementarzelle gemeint.

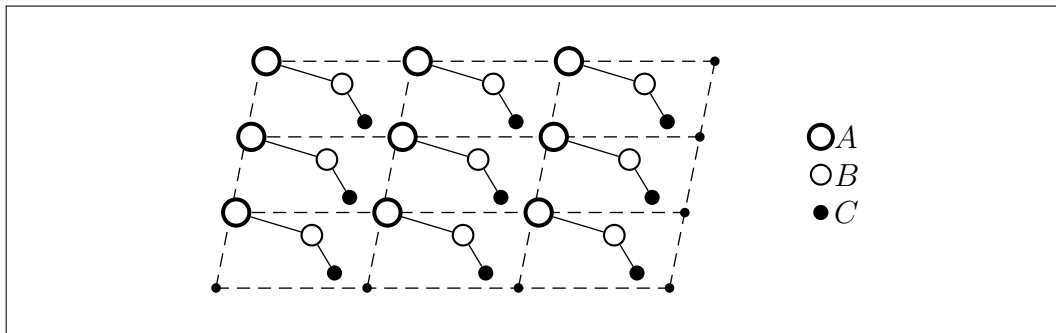


Abbildung 1.5: Zweidimensionale Darstellung der Kristallstruktur, bestehend aus Gitter und Basis. Durch Gittertranslation entsteht das Gitter aus der Elementarzelle. Die Basis wird ebenfalls durch Gittertranslation in jede Elementarzelle bewegt.

formulieren ([BO10]). Daraus ergibt sich, dass nicht nur A auf den Punkten eines Gitters liegt, sondern auch B und C , nur dass diese auf zum ursprünglichen Gitter kongruenten Gittern liegen. Diese kongruenten Gitter erhält man durch Translation des ursprünglichen Gitters entlang der Vektoren \mathbf{r}_B und \mathbf{r}_C , welche die Basis beschreiben. Alle Bausteine einer Kristallstruktur unterliegen ein und dem selben Translationsprinzip.

1.3 Das Symmetrieprinzip

Bisher haben wir nur die Gittertranslation betrachtet. Wir wollen nun aber auch Drehungen und Spiegelungen zulassen. Dabei werden Kristalle mit sich selbst zur Deckung gebracht, indem man sie um einen bestimmten Winkel und um eine bestimmte Achse dreht oder an einer bestimmten Ebene bzw. an einem bestimmten Punkt spiegelt. Auch Kombinationen dieser Operationen sind möglich. Operationen dieser Art heißen Symmetrietransformationen und sind orthogonal³. Diese Symmetrietransformationen werden durch Tensoren zweiter Stufe (Matrizen) beschrieben.⁴ Bei diesen Operationen gibt es immer Punkte, welche bei der Ausführung der Operation ihren Standort im Raum behalten. Bei einer Drehung um eine Achse sind dies die Punkte, die auf der Drehachse liegen. Bei der Spiegelung an einer Ebene sind es alle Punkte des Objekts, welche sich auf dieser Ebene befinden. Bei einer Punktspiegelung ist es nur ein einziger Punkt. Ein Element, welches bei der Ausführung einer bestimmten Symmetrietransformation am Ort verbleibt, nennt man das zu einer

³Orthogonal bedeutet, dass bei der Transformation Winkel und Längen zwischen Gitterpunkten gleich bleiben. Wir werden diesen Begriff später präzisieren.

⁴Die notwendigen Kenntnisse über Tensoren werden in Kapitel 2 auf Seite 22 behandelt.

Symmetrietransformation gehörende *Symmetrieelement*. Wir werden später in Abschnitt 3.3.1 auf Seite 43 genauer auf diese Transformationen eingehen. Wir wollen nun die verschiedenen Symmetrieelemente vorstellen.

1.3.1 Drehachse

Betrachten wir die in Abbildung 1.4 auf Seite 10 dargestellte Gitterebene und stellen uns vor, dieses Gitter innerhalb der Ebene, in der es sich befindet (die Papierebene), bzw. um eine Achse senkrecht zur Papierebene, um den Punkt 0 zu drehen, solange bis es wieder mit sich selbst zur Deckung kommt. Man vergesse hierbei nicht, dass das Gitter selbst unendlich ist und die Abbildung nur eine schematische Darstellung ist. Dies ist nach einer Drehung um 180° der Fall. Diese Symmetrieoperation wird *Drehung* genannt und das zugehörige Symmetrieelement heißt *Drehachse*. Drehen wir das Gitter ein weiteres Mal um 180° , so befindet es sich wieder in der ursprünglichen Lage. Die Anzahl der Drehungen um einen bestimmten Winkel, die notwendig ist, um ein Gitter wieder in die Ausgangslage zu bringen nennt man die *Zähligkeit* X einer Drehachse. Wenn wir den Drehwinkel mit ε in $^\circ$ bezeichnen, so ist X durch $X = \frac{360^\circ}{\varepsilon}$ definiert. Im vorliegenden Fall wäre also $X = \frac{360^\circ}{180^\circ} = 2$. Wir sprechen dann von einer 2-zähligen Drehachse.

Es stellt sich die Frage, ob auch Drehachsen mit einer Zähligkeit $X > 2$ existieren. Eine solche Drehachse würde bei Einwirkung auf einen Gitterpunkt mindestens zwei weitere Gitterpunkte erzeugen, die alle in einer Ebene liegen. Drei Punkte, welche nicht auf einer Geraden liegen, erzeugen aber bereits eine Netzebene. Dies bedeutet, dass Drehachsen nur senkrecht zu einer Netzebene gelagert sein können. Um zu überprüfen, ob eine X -zählige Drehachse möglich ist, müssen wir also überprüfen, ob das durch eine solche Drehung entstandene Gitter das Kriterium einer Netzebene erfüllt, d. h. ob die Translationsperiode auf allen parallelen Gittergeraden die selbe ist (vgl. Abschnitt 1.1.2 auf Seite 7). Wir möchten kurz darstellen welche Drehachsen möglich sind. Eine ausführliche und bebilderte Darstellung findet sich beispielsweise in [BO10] (Abschnitt 6.1).

- **3-zählige Drehachse:** Lässt man eine 3-zählige Drehachse auf einen Gitterpunkt einwirken, so entstehen zunächst zwei weitere Gitterpunkte, die zusammen mit dem ersten Gitterpunkt ein gleichseitiges Dreieck bilden. Durch Gittertranslation entsteht ein Gitter mit einem Parallelogramm als Elementarmasche. Parallele Gittergeraden besitzen dann immer die gleiche Translationsperiode, folglich können 3-zählige Drehachsen existieren.
- **4-zählige Drehachse:** Die Einwirkung einer 4-zähligen Drehachse auf einen Gitterpunkt erzeugt drei Gitterpunkte, welche zusammen mit dem

ersten Gitterpunkt ein Quadrat bilden. Man kann sich leicht vorstellen, dass auch hier alle parallelen Gittergeraden die selbe Translationsperiode besitzen. Auch 4-zählige Drehachsen sind also möglich.

- **5-zählige Drehachse:** Eine 5-zählige Drehachse erzeugt ein regelmäßiges Fünfeck (Pentagon). Nummeriert man die fünf Ecken eines Pentagons der Reihe nach mit 1–5 und verbindet z. B. die Ecken 2 und 5 sowie die Ecken 3 und 4, so erhält man zwei parallele Geraden. Die Länge der Verbindungsstrecke entspricht dabei der Translationsperiode. Wie aus den Zahlen ersichtlich ist, sind im zweiten Fall zwei direkt benachbarte Punkte miteinander verbunden, was der geringstmögliche Abstand zweier Punkte ist. Bei der anderen Verbindung ist dies nicht der Fall und der Abstand der Punkte ist größer. Wir haben also zwei verschiedene Translationsperioden auf zwei parallelen Gittergeraden gefunden. Als Folge kann eine 5-zählige Drehachse keine Netzebene erzeugen und somit können 5-zählige Drehachsen im Raumgitter auch nicht als Symmetrieelement auftreten.
- **6-zählige Drehachse:** Die geometrische Figur, die bei einer 6-zähligen Drehachse entsteht, entspricht einem regelmäßigen Sechseck (Hexagon). Durch Gittertranslation erhält man auch den „Mittelpunkt“ des Hexagons und erzeugt dadurch eine Elementarmasche in Form eines Parallelogramms, wie im Fall der 3-zähligen Drehachse. Die resultierende Gitterstruktur entspricht also der selben wie bei der 3-zähligen Drehachse.
- **Drehachsen mit Zähligkeit $X > 6$:** Analog zum Vorgehen bei der 5-zähligen Drehachse kann man zeigen, dass Drehachsen mit einer Zähligkeit von $X > 6$ keine Netzebenen erzeugen. Solche Drehachsen können im Raumgitter nicht vorkommen. ([BO10])

1.3.2 Spiegelebene

Als weitere Symmetrietransformation betrachten wir die *Spiegelung*. Das zugehörige Symmetrieelement heißt *Spiegelebene*. Jedem Gitterpunkt auf der einen Seite der Spiegelebene wird ein weiterer Punkt in gleichem Abstand auf der Normalen zur Ebene zugeordnet. Das Symbol für eine Spiegelebene ist m .

1.3.3 Inversionszentrum

Das *Inversionszentrum* ist das Symmetrieelement zur Symmetrietransformation *Inversion* (Punktspiegelung). Das Inversionszentrum selbst ist ein Punkt, aber

nicht notwendig ein Gitterpunkt. Bei der Inversion wird einem Gitterpunkt in der Art und Weise ein anderer Gitterpunkt zugeordnet, dass dieser in der entgegengesetzten Richtung liegt und den gleichen Abstand zum Inversionszentrum aufweist.

1.3.4 Koppelung von Symmetrietransformationen

Bisher haben wir die einfachen Symmetrietransformationen Drehung, Spiegelung und Inversion betrachtet. Diese Transformationen kann man auch miteinander kombinieren und erhält auf diese Weise weitere Symmetrietransformationen.

- **Drehinversionsachsen:** Bei einer Drehinversion wird eine Drehung um eine Achse und eine Inversion an einem Inversionszentrum als ein Vorgang ausgeführt. Als allgemeines Symbol verwendet man hier \bar{X} , angelehnt an die Zähligkeit X der Drehachse. Wie weiter oben erläutert, können in einem Kristallgitter als Drehachsen lediglich 1, 2, 3, 4 und 6-zählige Drehachsen existieren, daher lassen sich auch nur die Drehinversionsachsen $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ und $\bar{6}$ ableiten.
 - Drehinversionsachse $\bar{1}$: $\bar{1}$ bedeutet eine Drehung um 360° und Inversion an einem Inversionszentrum auf der Drehachse. Diese Operation ist offensichtlich mit der einfachen Inversion identisch und erzeugt insgesamt zwei Gitterpunkte.
 - Drehinversionsachse $\bar{2}$: Die Wirkung einer $\bar{2}$ auf einen Gitterpunkt ist mit der Spiegelung an einer Ebene senkrecht zur Drehachse identisch. Es werden ebenfalls zwei Gitterpunkte erzeugt.
 - Drehinversionsachse $\bar{3}$: Die $\bar{3}$ erzeugt bei Anwendung auf einen Gitterpunkt insgesamt sechs Gitterpunkte, deren Anordnung eine Drehachse 3 und die Inversion $\bar{1}$ enthält.
 - Drehinversionsachse $\bar{4}$: Die $\bar{4}$ erzeugt vier Gitterpunkte und enthält eine 2.
 - Drehinversionsachse $\bar{6}$: Eine $\bar{6}$ erzeugt wie die $\bar{3}$ sechs Gitterpunkte, jedoch in einer anderen Anordnung. Die $\bar{6}$ enthält eine 3 und eine Spiegelung senkrecht zur Drehachse.
- **Drehspiegelachsen:** Wie bei den Drehinversionsachsen kann man Drehspiegelachsen S_1, S_2, S_3, S_4 und S_6 definieren. Bei der Drehspiegelung wird eine Drehung um eine Achse und eine Spiegelung an einer Ebene

senkrecht zur Drehachse als ein Vorgang ausgeführt. Die Drehspiegelungen ergeben aber keine neuen Symmetrietransformationen, denn es gilt $S_1 \equiv m$, $S_2 \equiv \bar{1}$, $S_3 \equiv \bar{6}$, $S_4 \equiv \bar{4}$ und $S_6 \equiv \bar{3}$. ([BO10], S. 72).

Insgesamt haben wir somit zehn verschiedene Symmetrietransformationen: Die Drehungen 1 (identische Transformation), 2, 3, 4 und 6, sowie die Drehinversionen $\bar{1}$ (Inversion), $\bar{2}$ (Spiegelung m), $\bar{3}$, $\bar{4}$ und $\bar{6}$.⁵

Alle in einem Kristall vorhandenen Symmetrietransformationen bilden eine Gruppe, die Symmetriegruppe. Aus diesen zehn Symmetrietransformationen ergeben sich insgesamt 32 mögliche Symmetriegruppen, die im Falle von Kristallen als Kristallklassen bezeichnet werden. Wir werden in Kapitel 3 näher darauf eingehen.

1.4 Die Kristallsysteme

In Abschnitt 1.1 auf Seite 6 haben wir das allgemeine dreidimensionale Raumgitter beschrieben. Dort können in drei Richtungen beliebige Translationsperioden und beliebige Winkel zwischen den drei die Elementarmasche aufspannenden Vektoren auftreten. Das allgemeine Raumgitter enthält nur eine Art von Symmetrieelement: Ein Inversionszentrum.

Wenn Drehachsen oder Spiegelebenen vorliegen, entstehen spezielle Raumgitter, die wir nun darstellen wollen. Die nachfolgenden Zeichnungen enthalten jeweils die folgenden Merkmale:

- Die Gitterpunkte der Elementarzelle. In manchen Fällen existieren mehrere verschiedene Elementarmaschen, welche aber durch die selben Vektoren $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3$ und jeweiligen Winkel zwischen diesen Vektoren beschrieben werden.⁶
- Die Symmetrieelemente der jeweiligen Kristallklasse. Es werden nicht immer sämtliche Symmetrieelemente eingezeichnet sein, um die Zeichnungen nicht zu unübersichtlich werden zu lassen, aus dem gleichen Grund werden wir oft auf zweidimensionale Darstellungen zurückgreifen. Beispielsweise sind die Inversionszentren außer beim triklinen System nicht eingezeichnet.

⁵Zu den erwähnten Symbolen 1, 2, 3, 4, 6, $\bar{1}$, m ($= \bar{2}$), $\bar{3}$, $\bar{4}$ und $\bar{6}$, kommen noch die folgenden Symbole hinzu: $2/m$, $3/m$, $4/m$ und $6/m$. X/m bedeutet X -zählige Drehachse, welche senkrecht auf einer Spiegelebene m steht. Diese Schreibweise nennt man *Hermann-Mauguin-Symbolik*. Ausführlicher ist dies in [BO10], S. 129 beschrieben.

⁶Das sind die 14 Bravais-Gitter. Sie spielen für unsere Symmetriebetrachtungen keine Rolle. Eine kurze Erläuterung dazu findet sich in Abschnitt 1.5 auf Seite 20.

Wir verwenden die folgenden Symbole für 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehachsen: $\emptyset, \triangle, \square, \diamond$.

- Die drei beschreibenden Vektoren $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3$ und die Winkel $\alpha = \angle(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2)$, $\beta = \angle(\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_3)$, $\gamma = \angle(\mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3)$ mit den für das jeweilige Kristallsystem charakteristischen Eigenschaften.

Zur mathematischen Beschreibung der Symmetrieeigenschaften wird später in das Achsenkreuz, welches durch die drei Vektoren $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ und \mathbf{h}_3 gegeben ist, noch ein kartesisches Koordinatensystem gelegt. Dies wird unabhängig voneinander für jedes Kristallsystem gemacht, wobei die Eigenschaften des jeweiligen Kristallsystems ausgenutzt werden. Diese Vorgehensweise ermöglicht es, die Anzahl der benötigten Matrizen, mit denen Symmetrieeigenschaften beschrieben werden können, zu verringern, sowie die Form der Matrizen möglichst einfach zu halten. Auf welche Weise dieses kartesische Koordinatensystem bezüglich der kristallographischen Achsen $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3$ festgelegt wird, ist im Text an den entsprechenden Stellen erklärt.

1.4.1 Triklines System

Das triklone⁷ System weist die geringste Symmetrie auf und besitzt in der Elementarzelle nur Inversionszentren als Symmetrieelement. Für die Länge der Basisvektoren gilt

$$H_1 \neq H_2 \neq H_3, \quad H_1 \neq H_3.$$

Für die Winkel gilt

$$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ, \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma, \quad \alpha \neq \gamma$$

Das triklone Kristallsystem ist in Abbildung 1.6 auf der nächsten Seite dargestellt.

1.4.2 Monoklines System

Das monokline⁸ Kristallsystem hat wie das triklone Kristallsystem drei unterschiedlich lange Translationsperioden:

$$H_1 \neq H_2 \neq H_3, \quad H_1 \neq H_3.$$

⁷ *triklin* bedeutet „drei (tri) schiefe Winkel“.

⁸ *monoklin* bedeutet „ein (mono) schiefer Winkel“.

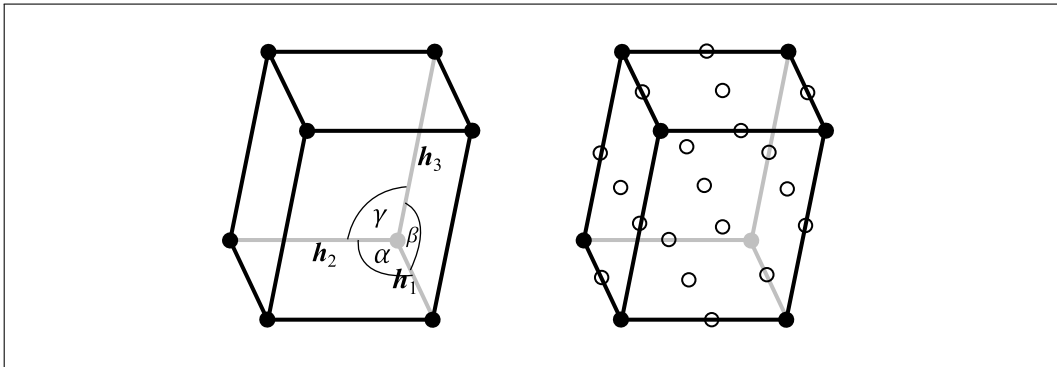


Abbildung 1.6: Triklinen Kristallgitter. Linke Seite: Elementarzelle eines triklinen Kristallgitters. Rechte Seite: Elementarzelle mit eingezeichneten Inversionszentren. Jeder Gitterpunkt ist ein Inversionszentrum, weiterhin die Mitte jeder Kante, sowie die Mitte jeder Diagonale zwischen zwei Gitterpunkten.

Zwei der drei Winkel in der Elementarzelle sind 90° -Winkel:

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \quad \gamma \neq 90^\circ.$$

Dies erhöht die Symmetrie. Das monokline Kristallsystem besitzt zwei Arten von Symmetrieelementen: 2-zählige Drehachsen und Spiegelebenen, welche senkrecht zu den Drehachsen stehen. Eine solche Anordnung von Symmetrieelementen wird mit $2/m$ bezeichnet. Beide Symmetrieelemente sind in Abbildung 1.7 dargestellt.

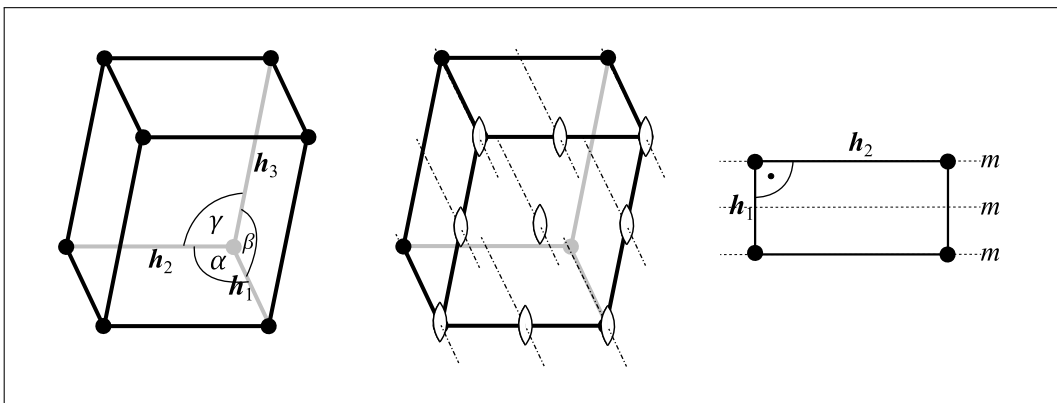


Abbildung 1.7: Monoklines Kristallgitter. Linke Seite: Elementarzelle eines monoklinen Kristallgitters. Mitte: 2-zählige Drehachsen parallel zu h_1 . Rechte Seite: Draufsicht mit Spiegelebenen m . Die gezeichneten Längen von h_1 und h_2 sind absichtlich nicht maßstabsgetreu zur linken und mittigen Zeichnung, um hervorzuheben, dass die Längen unterschiedlich sind.

1.4.3 Rhombisches System

Wie im triklinen und monoklinen System, sind auch im rhombischen Kristallsystem alle drei Translationsperioden unterschiedlich, der Unterschied besteht in einem zusätzlichen rechten Winkel, d. h. alle drei Winkel betragen 90° :

$$H_1 \neq H_2 \neq H_3, \quad H_1 \neq H_3, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Die Elementarzelle hat die Form eines Quaders. Dies bedeutet, dass jeweils parallel zu den sechs Begrenzungsflächen Spiegelebenen liegen, auf denen jeweils senkrecht 2-zählige Drehachsen stehen. Elementarzelle und Symmetrieelemente sind in Abbildung 1.8 dargestellt.

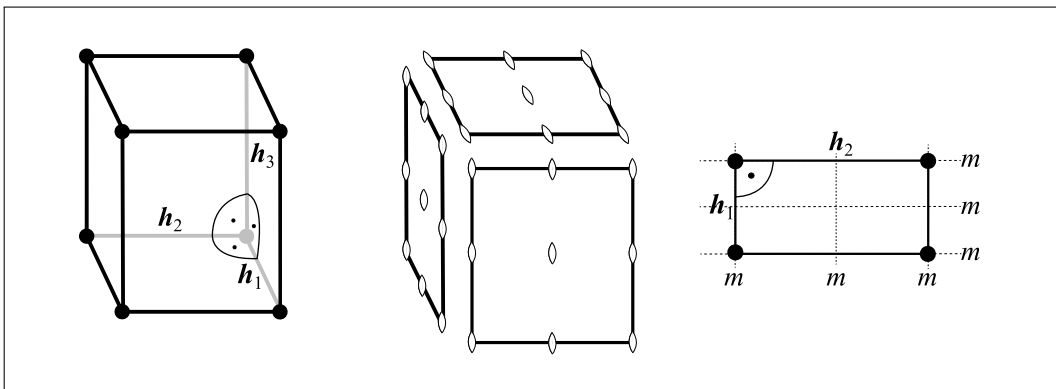


Abbildung 1.8: Rhombisches Kristallsystem. Linke Seite: Elementarzelle. Mitte: 2-zählige Drehachsen, jeweils senkrecht zur Fläche, auf welcher sie eingezeichnet sind stehend. Rechte Seite: Draufsicht mit Spiegelebenen m . Nicht eingezeichnet sind drei weitere Spiegelebenen, welche parallel zur eingezeichneten Ebene $\{h_1, h_2\}$ verlaufen. Man stelle sich eine ähnliche Abbildung (rechts) für die Ebenen $\{h_1, h_3\}$ und $\{h_2, h_3\}$ vor.

1.4.4 Tetragonales System

Die Elementarzelle des tetragonalen Kristallsystems hat ebenfalls die Form eines Quaders ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$), jedoch ist die Grundfläche quadratisch, d. h. $H_1 = H_2 \neq H_3$. Durch die quadratische Grundfläche erhalten wir eine Reihe von 4-zähligen Drehachsen sowie zwei zusätzliche (im Vergleich zum rhombischen System) diagonale Spiegelebenen. Das tetragonale Kristallsystem ist in Abbildung 1.9 auf der nächsten Seite dargestellt.

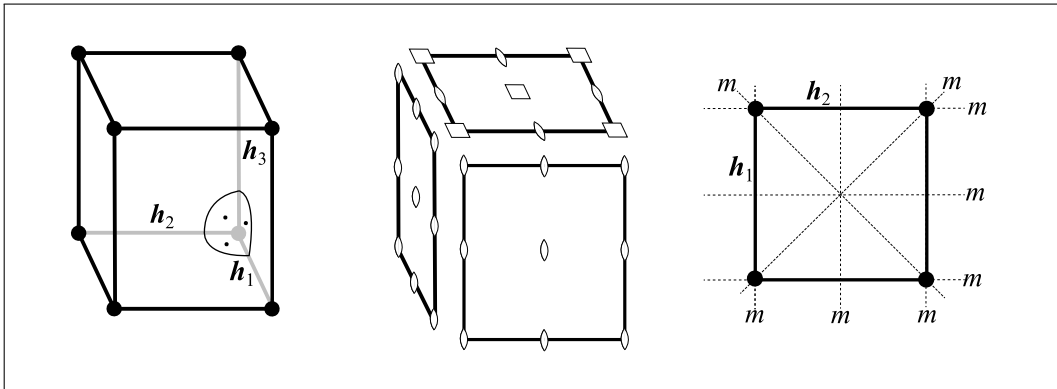


Abbildung 1.9: Tetragonales Kristallsystem. Linke Seite: Elementarzelle. Mitte: Angedeutet sind die 2- und 4-zähligen Drehachsen. Rechts: Eingezeichnet sind acht Spiegelebenen (senkrecht zur Papierebene). Nicht eingezeichnet sind drei weitere Spiegelebenen, welche parallel zur Papierebene verlaufen.

1.4.5 Hexagonales System

Für das hexagonale Kristallsystem gelten die Beziehungen

$$H_1 = H_2 \neq H_3, \quad \alpha = 120^\circ, \beta = \gamma = 90^\circ \quad (1.2)$$

Aufgrund des 120° Winkels existieren auch 3- und 6-zählige Drehachsen sowie eine Reihe zusätzlicher Spiegelebenen. Abbildung 1.10 zeigt das hexagonale Kristallsystem.

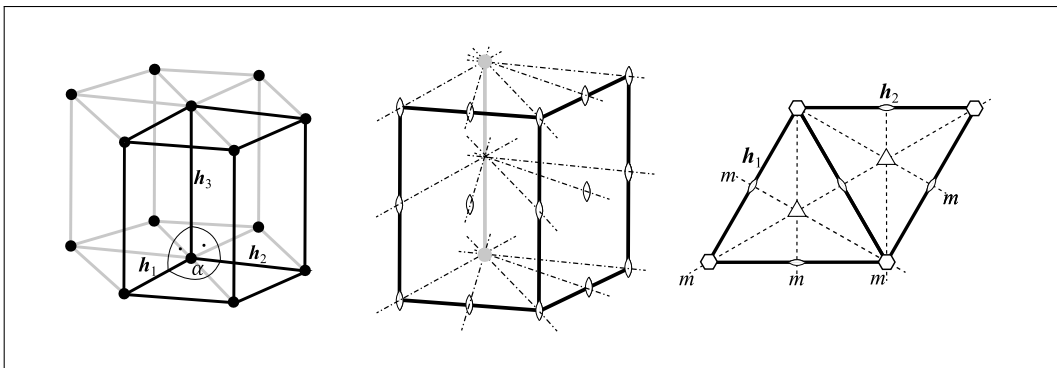


Abbildung 1.10: Hexagonales Kristallsystem. Linke Seite: Elementarzelle (schwarz). Mitte: 2-zählige Drehachsen. Rechte Seite: Draufsicht der Elementarzelle (Netzebene). Es sind Spiegelebenen (gestrichelt) eingezeichnet. Auch die durchgezogenen Linien sind Spiegelebenen. Außerdem sind 3- und 6-zählige Drehachsen senkrecht zur Papierebene eingezeichnet. Nicht eingezeichnet sind die Spiegelebenen parallel zur Papierebene.

1.4.6 Kubisches System

Das kubische Kristallsystem weist von allen Systemen die höchste Symmetrie auf. Alle Winkel betragen 90° , und alle Translationsperioden haben die selbe Länge. Es existieren 2-, 3- und 4-zählige Drehachsen sowie zahlreiche Spiegelebenen. Das kubische Kristallsystem ist in Abbildung 1.11 dargestellt.

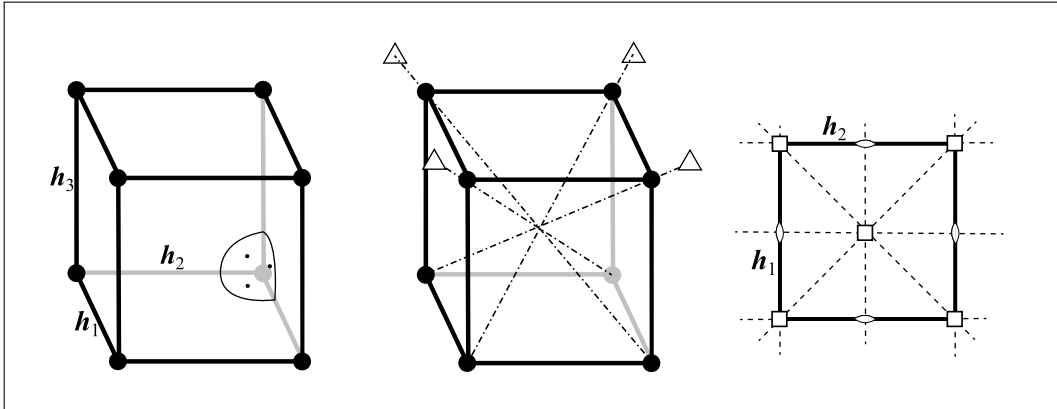


Abbildung 1.11: Kubisches Kristallsystem. Linke Seite: Elementarzelle. Mitte: Die vier 3-zähligen Drehachsen. Rechte Seite: Draufsicht mit eingezeichneten Spiegelebenen senkrecht zur Papierebene (gestrichelt) sowie 2- und 4-zähligen Drehachsen. Man stelle sich das selbe Bild (rechts) mit den permutierten Achsenbeschriftungen h_1, h_3 bzw. h_2, h_3 vor.

1.5 Bravais-Gitter

In den Abschnitten 1.4.1 bis 1.4.6 haben wir nur die so genannten *primitiven Gitter* dargestellt. Tatsächlich gibt es aber 14 prinzipiell verschiedene Möglichkeiten, einen dreidimensionalen Raum durch periodische Anordnung von Punkten aufzubauen. Man spricht dabei von den 14 *Bravais-Gittern*. Wir haben auf eine nähere Beschreibung dieser zusätzlichen Gitter verzichtet, da sie für die weiteren Symmetriebetrachtungen unerheblich sind. Die 14 Bravais-Gitter verteilen sich wie folgt auf die verschiedenen Kristallsysteme:

- Triklines System: Nur das primitive Gitter (1)
- Monoklines System: Monoklin primitiv (2), monoklin basiszentriert (3)
- Rhombisches System: Rhombisch primitiv (4), rhombisch basiszentriert (5), rhombisch raumzentriert (6), rhombisch flächenzentriert (7)

- Tetragonales System: Tetragonal primitiv (8), tetragonal raumzentriert (9)
- Hexagonales System: Hexagonal (10), trigonal (11)
- Kubisches System: Kubisch primitiv (12), kubisch raumzentriert (13), kubisch flächenzentriert (14)

Alle Kristalle sind auf der Grundlage dieser 14 verschiedenen Gitter aufgebaut (vgl. (1.1) auf Seite 10). Die nichtprimitiven Gitter weisen die selben Symmetrieeigenschaften des Kristallsystems, in dem sie sich befinden auf. Wir brauchen sie also nicht gesondert zu behandeln, solange wir uns nur für die Symmetrie von Kristallen interessieren. Eine ausführliche Beschreibung der Bravaisgitter findet sich in [BO10].

2 Tensoren

In diesem Kapitel wollen wir das Wichtigste über den Umgang mit Tensoren beschreiben. Die im Folgenden entwickelten Gesetzmäßigkeiten werden wir später oft verwenden. Eine ausführliche Einführung in die Tensoranalysis findet sich in [SN09].

2.1 Index-Notation

Es sei $M := \{1, \dots, n\} \subset \mathbb{N}$. M nennen wir *Wertevorrat*. Sei nun i ein Index mit Wertevorrat M , dann kann i nacheinander jeden Wert aus M annehmen. Mit dem Symbol (a_i) meinen wir das n -Tupel (a_1, \dots, a_n) , wobei a_i die i -te Komponente von (a_i) ist. Der Index i wird auch *laufender Index* genannt. Da wir größtenteils nur den 3-dimensionalen Fall behandeln, wird in dieser Arbeit der Wertevorrat, solange es nicht extra erwähnt wird, immer nur $\{1, 2, 3\}$ sein. Auch doppelte Indizes können vorkommen.

Im Falle zweier laufender Indizes kann das gemeinte Objekt als Matrix notiert werden. Haben beispielsweise die Indizes i und j den Wertevorrat $\{1, 2, 3\}$, so kann das gemeinte Objekt als Matrix in der üblichen Schreibweise notiert werden:

$$(A_{ij}) := \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix}$$

A_{ij} bezeichnet den entsprechenden Eintrag in der Matrix (A_{ij}) .

2.2 Das Kronecker-Delta

In der Tensoranalysis werden die Kronecker-Symbole häufig benötigt, daher werden sie hier kurz eingeführt.

Definition 2 (Kronecker-Delta). Seien $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Das Symbol

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.1)$$

heißt *Kronecker-Delta*.

Bemerkung 3. Es gilt natürlich $\delta_{ij} = \delta_{ji}$. Eine wichtige und häufige Rechenregel lautet

$$\sum_{m=1}^3 A_{im} \delta_{mn} = A_{in} \quad (2.2)$$

In Worten: Wird über einen Index von δ_{mn} summiert, so ersetze man diesen Index in der anderen Größe durch den anderen Index von δ_{mn} und lasse dort das δ_{mn} weg.

Beispiel 4. Sei $j \in \{1, 2, 3\}$ und $(a_i) = (a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3$, dann steht eine Gleichung

$$\sum_{i=1}^3 a_i \delta_{ij} = a_1 \delta_{1j} + a_2 \delta_{2j} + a_3 \delta_{3j}$$

eigentlich für die drei Gleichungen

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 a_i \delta_{i1} &= a_1 \delta_{11} + a_2 \delta_{21} + a_3 \delta_{31} = a_1 \\ \sum_{i=1}^3 a_i \delta_{i2} &= a_1 \delta_{12} + a_2 \delta_{22} + a_3 \delta_{32} = a_2 \\ \sum_{i=1}^3 a_i \delta_{i3} &= a_1 \delta_{13} + a_2 \delta_{23} + a_3 \delta_{33} = a_3. \end{aligned}$$

Diese drei Gleichungen lassen sich durch

$$\sum_{i=1}^3 a_i \delta_{ij} = a_j$$

kürzer ausdrücken. Ebenso funktioniert das auch mit mehrfach indizierten Größen.

2.3 Transformationen

Wir wollen in der Lage sein, Punkte im Raum unserer Anschauung quantitativ zu beschreiben. Hierfür benötigen wir ein Koordinatensystem. Wir beschränken uns auf kartesische Koordinatensysteme, bestehend aus einem Ursprung O und drei paarweise aufeinander senkrecht stehenden Einheitsvektoren e_1, e_2, e_3 . Ein

work in
progress

Punkt in einem solchen gegebenen Koordinatensystem lässt sich nun durch seine Koordinaten

$$(x_i) := (x_1, x_2, x_3) \quad (2.3)$$

bezüglich dieses Koordinatensystems, oder durch seinen Ortsvektor

$$\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + x_3 \mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{e}_i \quad (2.4)$$

ausdrücken.

2.3.1 Transformation kartesischer Koordinatensysteme

Es seien zwei kartesische Koordinatensysteme $(O, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ und $(\tilde{O}, \tilde{\mathbf{e}}_1, \tilde{\mathbf{e}}_2, \tilde{\mathbf{e}}_3)$ gegeben, welche in beliebiger Lage zueinander liegen.¹ Die relative Lage der beiden Koordinatensysteme zueinander lässt sich durch die beiden folgenden Angaben charakterisieren:

- (i) Der Ursprung \tilde{O} des geschweiften Koordinatensystems habe im ungeschweiften Koordinatensystem die Koordinaten $(\beta_1, \beta_2, \beta_3)$. Sein Ortsvektor ist also

$$\boldsymbol{\beta} = \beta_1 \mathbf{e}_1 + \beta_2 \mathbf{e}_2 + \beta_3 \mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^3 \beta_i \mathbf{e}_i. \quad (2.5)$$

- (ii) Die Basisvektoren $\tilde{\mathbf{e}}_i$ des geschweiften Koordinatensystems lassen sich bezüglich des ungeschweiften Koordinatensystems wie folgt ausdrücken:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{e}}_1 &= \alpha_{11} \mathbf{e}_1 + \alpha_{12} \mathbf{e}_2 + \alpha_{13} \mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^3 \alpha_{1i} \mathbf{e}_i \\ \tilde{\mathbf{e}}_2 &= \alpha_{21} \mathbf{e}_1 + \alpha_{22} \mathbf{e}_2 + \alpha_{23} \mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^3 \alpha_{2i} \mathbf{e}_i \\ \tilde{\mathbf{e}}_3 &= \alpha_{31} \mathbf{e}_1 + \alpha_{32} \mathbf{e}_2 + \alpha_{33} \mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^3 \alpha_{3i} \mathbf{e}_i. \end{aligned} \quad (2.6)$$

für $\alpha_{ij} \in \mathbb{R}$. Kürzer in Indexschreibweise:

$$\tilde{\mathbf{e}}_j = \sum_{i=1}^3 \alpha_{ji} \mathbf{e}_i. \quad (2.7)$$

¹Wir schreiben häufig „geschweiftes Koordinatensystem“ bzw. „ungeschweiftes Koordinatensystem“ und meinen damit das Koordinatensystem $(O, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ bzw. $(\tilde{O}, \tilde{\mathbf{e}}_1, \tilde{\mathbf{e}}_2, \tilde{\mathbf{e}}_3)$.

Die Transformation zwischen dem ungeschweiften und geschweiften Koordinatensystem ist durch die β_i und α_{ij} vollständig beschrieben. Die α_{ij} werden *Transformationskoeffizienten* genannt. Die Matrix

$$(\alpha_{ij}) = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

nennt man *Transformationsmatrix*.

2.3.2 Eigenschaften der Transformationskoeffizienten

Definition 5 (orthogonale Matrix). Sei A eine invertierbare $n \times n$ Matrix. A heißt *orthogonal* wenn gilt:

$$A^T = A^{-1} \quad \Leftrightarrow \quad AA^T = A^T A = I$$

wobei I die $n \times n$ Einheitsmatrix ist. In Indexschreibweise bedeutet dies

$$\begin{aligned} (A_{ij})(A_{ij})^T &= (A_{ij})(A_{ji}) = (\delta_{ij}) \quad \text{bzw.} \\ (A_{ij})^T(A_{ij}) &= (A_{ji})(A_{ij}) = (\delta_{ij}). \end{aligned}$$

Bemerkung 6. Bekanntlich gilt für die Multiplikation zweier $n \times n$ Matrizen A und B

$$AB = (C_{ij}) \quad \text{wobei} \quad C_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik}B_{kj} \quad (1 \leq i, j \leq n).$$

Daraus folgt für eine orthogonale $n \times n$ Matrix D

$$DD^T = (\delta_{ij}) \quad \text{wobei} \quad \delta_{ij} = \sum_{k=1}^n D_{ik}D_{jk} \quad \text{bzw.} \quad (2.8)$$

$$D^T D = (\delta_{ij}) \quad \text{wobei} \quad \delta_{ij} = \sum_{k=1}^n D_{ki}D_{kj}. \quad (2.9)$$

Es gilt außerdem

$$\det(D) = \pm 1 \quad (2.10)$$

Ein Beweis von Gleichung (2.10) findet sich in [Fis00] (S. 304).

Wir haben die beiden Koordinatensysteme – geschweift und ungeschweift – so gewählt, dass die jeweiligen Basisvektoren \mathbf{e}_i bzw. $\tilde{\mathbf{e}}_i$ paarweise senkrecht aufeinander stehen. Deswegen gilt jeweils die Beziehung

$$\langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \delta_{ij} \quad \text{bzw.} \quad \langle \tilde{\mathbf{e}}_i, \tilde{\mathbf{e}}_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.11)$$

Der Operator $\langle \cdot, \cdot \rangle$ bezeichnet hier das übliche Skalarprodukt zweier Vektoren. Wenden wir Gleichung (2.7) auf Seite 24 an, so erhalten wir

$$\begin{aligned}\delta_{ij} = \langle \tilde{\mathbf{e}}_i, \tilde{\mathbf{e}}_j \rangle &= \left\langle \sum_{m=1}^3 \alpha_{im} \mathbf{e}_m, \sum_{n=1}^3 \alpha_{jn} \mathbf{e}_n \right\rangle \\ &= \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{im} \alpha_{jn} \langle \mathbf{e}_n, \mathbf{e}_m \rangle \\ &= \sum_{m=1}^3 \alpha_{im} \underbrace{\sum_{n=1}^3 \alpha_{jn} \delta_{mn}}_{\alpha_{jm}} = \sum_{i=m}^3 \alpha_{im} \alpha_{jm}.\end{aligned}\tag{2.12}$$

Vergleichen wir nun die rechte Seite mit (2.8), dann sehen wir, dass die Transformationskoeffizienten eine orthogonale Matrix bilden. Zusammenfassend gilt:

$$\sum_{k=1}^3 \alpha_{ik} \alpha_{jk} = \delta_{ij} \quad \text{und} \quad \sum_{k=1}^3 \alpha_{ki} \alpha_{kj} = \delta_{ij}\tag{2.13}$$

Diese beiden Beziehungen nennen wir *Orthogonalitätsrelationen*.

Definition 7. Wir sprechen von einer *orthogonalen Transformation*, wenn die Transformationskoeffizienten die Orthogonalitätsrelationen (2.13) erfüllen.

2.3.3 Transformation von Basisvektoren

Bisher können wir die Basisvektoren des geschweiften Koordinatensystems $(\tilde{O}, \tilde{\mathbf{e}}_i)$ durch die Basisvektoren des ungeschweiften Koordinatensystems (O, \mathbf{e}_i) ausdrücken (siehe Gleichung (2.7) auf Seite 24). Wir möchten jedoch von beiden Koordinatensystemen ins jeweils andere übersetzen können. Es fehlt also noch die andere Übersetzungsrichtung. Dazu würden wir gerne Gleichung (2.7) auf Seite 24 nach \mathbf{e}_i auflösen. Unter Zuhilfenahme der Orthogonalitätsrelation (2.13) gelingt dies leicht. Wir multiplizieren in (2.7) auf beiden Seiten mit α_{jk} und bilden die Summe über j , dann erhalten wir:

$$\sum_{j=1}^3 \alpha_{jk} \tilde{\mathbf{e}}_j = \sum_{j=1}^3 \alpha_{jk} \sum_{i=1}^3 \alpha_{ji} \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \underbrace{\sum_{j=1}^3 \alpha_{jk} \alpha_{ji}}_{\delta_{ki}} \mathbf{e}_i = \mathbf{e}_k.$$

Zusammen mit (2.7) und Umbenennung der Indizes erhalten wir so das Transformationsgesetz für Basisvektoren:

$$\mathbf{e}_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji} \tilde{\mathbf{e}}_j \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{e}}_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij} \mathbf{e}_j.\tag{2.14}$$

Wir sind nun in der Lage die Basisvektoren eines Koordinatensystems durch die Basisvektoren des jeweils anderen Koordinatensystems auszudrücken. Im nächsten Schritt werden wir die Lage eines Punktes im Raum bezüglich verschiedener Koordinatensysteme darstellen.

2.3.4 Transformation von Punktkoordinaten

Man stelle sich einen Punkt P im Raum vor. P hat (x_1, x_2, x_3) als Koordinaten im ungeschweiften, und $(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \tilde{x}_3)$ als Koordinaten im geschweiften Koordinatensystem. Die entsprechenden Ortsvektoren von P seien mit \mathbf{x} im ungeschweiften und $\tilde{\mathbf{x}}$ im geschweiften Koordinatensystem bezeichnet. Dann gilt

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{e}_i, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \sum_{i=1}^3 \tilde{x}_i \tilde{\mathbf{e}}_i \quad \text{und} \quad \mathbf{x} = \boldsymbol{\beta} + \tilde{\mathbf{x}}.$$

wobei $\boldsymbol{\beta}$ wie in Gleichung (2.5) auf Seite 24 der Verschiebungsvektor des Ursprungs ist. Setzt man die beiden ersten in die letzte Gleichung ein und schreibt dann alles bezüglich der ungeschweiften Basis, so ergibt sich

$$\sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \beta_i \mathbf{e}_i + \sum_{i=1}^3 \tilde{x}_i \tilde{\mathbf{e}}_i = \sum_{i=1}^3 \beta_i \mathbf{e}_i + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \tilde{x}_i \alpha_{ij} \mathbf{e}_j.$$

Wir möchten die Basis ausklammern, daher müssen wir einige Indizes umbenennen:

$$\sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \beta_i \mathbf{e}_i + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \tilde{x}_j \alpha_{ji} \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (\beta_i + \alpha_{ji} \tilde{x}_j) \mathbf{e}_i.$$

Wie aus der Linearen Algebra bekannt ist, siehe etwa [Fis00] (S. 87 f.), ist die Darstellung eines Vektors bezüglich einer Basis eindeutig. Daher muss

$$x_i = \beta_i + \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji} \tilde{x}_j \tag{2.15}$$

gelten.

Wie bei der Herleitung des Transformationsgesetzes von Basisvektoren, wollen wir die Koordinaten x_i bzw. \tilde{x}_i von P in beiden Basen darstellen können. Dazu müssen wir Gleichung (2.15) nach \tilde{x}_j auflösen. Um die Orthogonalitätsrelation (2.13) ausnutzen zu können, multiplizieren wir mit α_{ki} und bilden die Summe

über i :

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^3 \alpha_{ki} x_i &= \sum_{i=1}^3 \alpha_{ki} \left(\beta_i + \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji} \tilde{x}_j \right) \\
&= \sum_{i=1}^3 \alpha_{ki} \beta_i + \underbrace{\sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 \alpha_{ki} \alpha_{ji} \tilde{x}_j}_{\substack{\delta_{kj} \\ \tilde{x}_k}} \\
&= \sum_{i=1}^3 \alpha_{ki} \beta_i + \tilde{x}_k \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{x}_k = \sum_{i=1}^3 \alpha_{ki} (x_i - \beta_i)
\end{aligned}$$

Als Transformationsgesetz für Punktkoordinaten erhalten wir somit

$$x_i = \beta_i + \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji} \tilde{x}_j \quad \text{und} \quad \tilde{x}_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij} (x_j - \beta_j). \quad (2.16)$$

2.3.5 Transformation von gerichteten Strecken

Eine gerichtete Strecke ist die Verbindungsstrecke zweier Punkte im Raum. Das Transformationsgesetz für gerichtete Strecken lässt sich aus dem Transformationsgesetz für Punktkoordinaten (Gleichung (2.16)) gewinnen, denn eine gerichtete Strecke ist die Differenz der beiden Ortsvektoren, welche auf die beiden Punkte zeigen.

Seien also P und Q zwei Punkte im Raum unserer Anschauung mit entsprechenden Ortsvektoren \mathbf{p} und \mathbf{q} im ungeschweiften, bzw. $\tilde{\mathbf{p}}$ und $\tilde{\mathbf{q}}$ im geschweiften Koordinatensystem. Eine gerichtete Strecke \mathbf{a} stellt sich dann als

$$\mathbf{a} = \mathbf{q} - \mathbf{p} = \tilde{\mathbf{q}} - \tilde{\mathbf{p}}$$

dar. Es gilt also

$$\sum_{i=1}^3 a_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 (q_i - p_i) \mathbf{e}_i \quad \Rightarrow \quad a_i = q_i - p_i \quad (2.17)$$

$$\sum_{i=1}^3 \tilde{a}_i \tilde{\mathbf{e}}_i = \sum_{i=1}^3 (\tilde{q}_i - \tilde{p}_i) \tilde{\mathbf{e}}_i \quad \Rightarrow \quad \tilde{a}_i = \tilde{q}_i - \tilde{p}_i \quad (2.18)$$

Beide Implikationen folgen wieder aus der Eindeutigkeit der Darstellung eines Vektors bezüglich einer Basis. Mit Gleichung (2.16) folgt nun

$$q_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji} \tilde{q}_j + \beta_i \quad \text{und} \quad p_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji} \tilde{p}_j + \beta_i$$

Eingesetzt in Gleichung (2.17) auf der vorherigen Seite ergibt sich

$$a_i = q_i - p_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji}(\tilde{q}_j - \tilde{p}_j) = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji}\tilde{a}_j$$

Umgekehrt folgt aus Gleichung (2.16) auf der vorherigen Seite auch

$$\begin{aligned} \tilde{q}_i &= \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij}q_j - \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij}\beta_j \quad \text{und} \quad \tilde{p}_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij}p_j - \sum_{i=1}^3 \alpha_{ij}\beta_j \\ \Rightarrow \tilde{a}_i &= \tilde{q}_i - \tilde{p}_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij}(q_j - p_j) = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij}a_j \end{aligned}$$

Als Transformationsgesetz für gerichtete Strecken erhalten wir damit

$$a_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ji}\tilde{a}_j \quad \text{und} \quad \tilde{a}_i = \sum_{j=1}^3 \alpha_{ij}a_j. \quad (2.19)$$

2.4 Tensoren zweiter Stufe

Gegeben sei eine Matrix (T_{ij}) , welche den Koordinaten B_i jedes beliebigen Vektors $\mathbf{B} = \sum_{i=1}^3 B_i \mathbf{e}_i$ in einem Koordinatensystem \mathbf{e}_i durch die Beziehung

$$A_i := \sum_{j=1}^3 T_{ij}B_j \quad (2.20)$$

die Koordinaten A_i eines anderen Vektors \mathbf{A} zuordnet. In einem beliebigen anderen Koordinatensystem $\tilde{\mathbf{e}}_j$ soll zwischen den Koordinaten \tilde{A}_i und \tilde{B}_j der beiden Vektoren $\tilde{\mathbf{A}}$ und $\tilde{\mathbf{B}}$ die analoge Beziehung

$$\tilde{A}_i = \sum_{j=1}^3 \tilde{T}_{ij}\tilde{B}_j \quad (2.21)$$

gelten. Wir interessieren uns für die Frage, welche Beziehung dann zwischen den beiden Matrizen (T_{ij}) und (\tilde{T}_{ij}) besteht.

Aus dem Transformationsgesetz für gerichtete Strecken (Gleichung (2.19)) erhalten wir zunächst:

$$A_i = \sum_{k=1}^3 \alpha_{ki}\tilde{A}_k \quad \text{und} \quad B_j = \sum_{n=1}^3 \alpha_{nj}\tilde{B}_n$$

Beides setzen wir nun in Gleichung (2.20) auf der vorherigen Seite ein. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^3 \alpha_{ki} \tilde{A}_k &= \sum_{j=1}^3 T_{ij} \sum_{n=1}^3 \alpha_{nj} \tilde{B}_n \\ &= \sum_{j=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{nj} T_{ij} \tilde{B}_n.\end{aligned}$$

Wie bereits einige Male zuvor, machen wir uns die Orthogonalitätsrelationen (Gleichung (2.13) auf Seite 26) zu Nutze:

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^3 \alpha_{mi} \sum_{k=1}^3 \alpha_{ki} \tilde{A}_k &= \sum_{i=1}^3 \alpha_{mi} \sum_{j=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{nj} T_{ij} \tilde{B}_n \\ \Leftrightarrow \sum_{k=1}^3 \underbrace{\sum_{i=1}^3 \alpha_{mi} \alpha_{ki}}_{\delta_{mk}} \tilde{A}_k &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{mi} \alpha_{nj} T_{ij} \tilde{B}_n \\ \Leftrightarrow \tilde{A}_m &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{mi} \alpha_{nj} T_{ij} \tilde{B}_n = \sum_{m=1}^3 \tilde{T}_{mn} \tilde{B}_n \\ \Leftrightarrow \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{mi} \alpha_{nj} T_{ij} \tilde{B}_n - \sum_{m=1}^3 \tilde{T}_{mn} \tilde{B}_n &= 0\end{aligned}\quad (2.22)$$

Um unnötige Schreibarbeit zu vermeiden setzen wir temporär abkürzend

$$S_{mn} := \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_{mi} \alpha_{nj} T_{ij}.$$

Damit wird Gleichung (2.22) zu

$$\sum_{n=1}^3 (S_{mn} - \tilde{T}_{mn}) \tilde{B}_n = 0. \quad (2.23)$$

Nun wählen wir drei linear unabhängige Vektoren \mathbf{a} , \mathbf{b} und \mathbf{c} . Jeder Vektor \mathbf{B} lässt sich dann als Linearkombination dieser drei Vektoren schreiben:

$$\mathbf{B} = \alpha \mathbf{a} + \beta \mathbf{b} + \gamma \mathbf{c} \quad \text{für } \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}$$

In Indexschreibweise stellt sich das als

$$B_j = \alpha a_j + \beta b_j + \gamma c_j \quad (2.24)$$

dar. Konsequente Ausnutzung des Transformationsgesetzes für gerichtete Strecken (Gleichung (2.19) auf Seite 29) und der Orthogonalitätsrelationen führt uns schließlich zu Gleichung (2.27). Es gilt zunächst

$$a_j = \sum_{k=1}^3 \alpha_{kj} \tilde{a}_k, \quad b_j = \sum_{k=1}^3 \alpha_{kj} \tilde{b}_k \quad \text{und} \quad c_j = \sum_{k=1}^3 \alpha_{kj} \tilde{c}_k \quad (2.25)$$

sowie

$$\tilde{B}_n = \sum_{j=1}^3 \alpha_{nj} B_j \quad (2.26)$$

Sukzessives Einsetzen von (2.24) und (2.25) in (2.26) ergibt

$$\begin{aligned} \tilde{B}_n &= \sum_{j=1}^3 \alpha_{nj} B_j \\ &= \sum_{j=1}^3 \alpha_{nj} (\alpha a_j + \beta b_j + \gamma c_j) \\ &= \alpha \underbrace{\sum_{k=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_{nj} \alpha_{kj} \tilde{a}_k}_{\tilde{a}_n} + \beta \underbrace{\sum_{k=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_{nj} \alpha_{kj} \tilde{b}_k}_{\tilde{b}_n} + \gamma \underbrace{\sum_{k=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_{nj} \alpha_{kj} \tilde{c}_k}_{\tilde{c}_n} \\ &= \alpha \tilde{a}_n + \beta \tilde{b}_n + \gamma \tilde{c}_n \end{aligned} \quad (2.27)$$

Gleichung (2.27) können wir nun wiederum in Gleichung (2.23) auf der vorherigen Seite einsetzen und sehen, dass Gleichung (2.23) auf der vorherigen Seite für beliebige Vektoren \mathbf{B} erfüllt ist, wenn sie für drei linear unabhängige Vektoren erfüllt ist. Wir setzen nun nacheinander \mathbf{a} , \mathbf{b} und \mathbf{c} für \mathbf{B} ein. Sei $m = 1$, dann ergibt das ein lineares Gleichungssystem der Gestalt

$$\begin{aligned} (S_{11} - \tilde{T}_{11})\tilde{a}_1 + (S_{12} - \tilde{T}_{12})\tilde{a}_2 + (S_{13} - \tilde{T}_{13})\tilde{a}_3 &= 0 \\ (S_{11} - \tilde{T}_{11})\tilde{b}_1 + (S_{12} - \tilde{T}_{12})\tilde{b}_2 + (S_{13} - \tilde{T}_{13})\tilde{b}_3 &= 0 \\ (S_{11} - \tilde{T}_{11})\tilde{c}_1 + (S_{12} - \tilde{T}_{12})\tilde{c}_2 + (S_{13} - \tilde{T}_{13})\tilde{c}_3 &= 0. \end{aligned}$$

Dieses Gleichungssystem ist für

$$(S_{11} - \tilde{T}_{11}), \quad (S_{12} - \tilde{T}_{12}) \quad \text{und} \quad (S_{13} - \tilde{T}_{13})$$

homogen und hat eine von Null verschiedene Koeffizientendeterminante, d. h. es gibt nur die triviale Lösung

$$S_{11} = \tilde{T}_{11}, \quad S_{12} = \tilde{T}_{12} \quad \text{und} \quad S_{13} = \tilde{T}_{13}.$$

Eine analoge Rechnung lässt sich für $m = 2$ und $m = 3$ durchführen. Als Ergebnis erhalten wir, dass die anderen Elemente der beiden Matrizen (S_{ij}) und (\tilde{T}_{ij}) ebenfalls übereinstimmen müssen. Zusammenfassend gilt damit

$$\tilde{T}_{mn} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_{mi} \alpha_{nj} T_{ij}.$$

Wie bisher auch wollen wir ein weiteres Mal die Orthogonalitätsrelationen verwenden, indem wir mit $\alpha_{mp} \alpha_{nq}$ multiplizieren und über m und n summieren, um auch die andere Richtung zu erhalten:

$$\begin{aligned} \left(\sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{mp} \alpha_{nq} \right) \tilde{T}_{mn} &= \left(\sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{mp} \alpha_{nq} \right) \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_{mi} \alpha_{nj} T_{ij} \\ &= \sum_{j=1}^3 \sum_{n=1}^3 \sum_{i=1}^3 \underbrace{\sum_{m=1}^3 \alpha_{mp} \alpha_{mi} \alpha_{nq} \alpha_{nj}}_{\delta_{pi}} T_{ij} \\ &= \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 \underbrace{\sum_{n=1}^3 \alpha_{nq} \alpha_{nj}}_{\delta_{qj}} \delta_{pi} T_{ij} \\ &= \sum_{j=1}^3 \underbrace{\sum_{i=1}^3 \delta_{pi} T_{ij}}_{T_{pj}} \delta_{qj} \\ &= \sum_{j=1}^3 \delta_{qj} T_{pj} = T_{pq} \end{aligned}$$

Somit haben wir ein Gesetz zur Transformation von Matrizen erhalten. Es lautet:

$$T_{ij} = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{mi} \alpha_{nj} \tilde{T}_{mn} \quad \text{und} \quad \tilde{T}_{ij} = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \alpha_{im} \alpha_{jn} T_{mn} \quad (2.28)$$

Mit dem obigen Transformationsgesetz sind wir nun in der Lage den Begriff des Tensors zweiter Stufe zu definieren.

Definition 8 (Tensor zweiter Stufe). Ein *Tensor zweiter Stufe* ist eine Größe, welche sich bei einem Wechsel des zugrunde gelegten Koordinatensystems nach Gleichung (2.28) transformiert.

3 Invariantentheorie

In diesem Kapitel werden wir zunächst einige grundlegende Tatsachen über Invarianten relativ allgemein beschreiben. Relativ deswegen, da wir uns in unserer Darstellung auf Invarianten unter beliebigen Untergruppen von $O(n)$ (orthogonale Gruppe), die algebraische Funktionen der Koordinaten endlich vieler Vektoren und Tensoren sind, beschränken und den höchst allgemeinen Begriff der Funktion außen vor lassen. Danach werden wir uns auf den speziellen Fall polynomieller Invarianten eines einzigen symmetrischen Tensors zweiter Stufe unter bestimmten endlichen Untergruppen von $O(n)$, den 32 Symmetriegruppen der Kristallklassen, konzentrieren.

3.1 Grundlagen

Auf den nächsten Seiten führen wir die grundlegenden Begriffe ein.

Definition 9 (Gruppe). Sei G eine Menge. G zusammen mit einer Abbildung

$$\begin{aligned} \star : G \times G &\longrightarrow G \\ (g, h) &\longmapsto g \star h \end{aligned}$$

heißt *Gruppe* wenn die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind:

- (i) Für alle $a, b, c \in G$ gilt: $a \star (b \star c) = (a \star b) \star c$ (Assoziativität)
- (ii) Es existiert ein $e \in G$, so dass für alle $a \in G$ gilt: $a \star e = a = e \star a$. Ein Element e wird *neutrales Element* genannt.
- (iii) Zu jedem $a \in G$ existiert ein a^{-1} , so dass gilt $a \star a^{-1} = e = a^{-1} \star a$. Das Element a^{-1} nennt man *Inverses von a* .

Kurz sagt man (G, \star) ist eine Gruppe. Gibt es ein $H \subset G$, so dass (H, \star) eine Gruppe bildet, dann nennt man H eine *Untergruppe*. Die Anzahl $|G|$ einer Gruppe nennt man *Ordnung* der Gruppe G . Im Falle $|G| < \infty$ spricht man von der *endlichen* Gruppe G .

Bemerkung 10. Sei \mathbb{F} ein Körper, die Menge

$$\mathrm{GL}(n; \mathbb{F}) := \{A \in \mathbb{F}^{n \times n} : A \text{ invertierbar}\}$$

ist mit der Matrixmultiplikation als Verknüpfung eine Gruppe und heißt *allgemeine lineare Gruppe* (**General Linear**). Beweis: [Fis00], S. 150. Die Menge $O(n) \subset \mathrm{GL}(n; \mathbb{R})$

$$O(n) := \{A \in \mathrm{GL}(n; \mathbb{R}) : A^{-1} = A^T\}$$

ist eine Untergruppe von $\mathrm{GL}(n, \mathbb{R})$ und heißt *orthogonale Gruppe*. Beweis: [Fis00], S. 304.

Definition 11 (Gruppenoperation). Sei X eine Menge und G eine Gruppe. Eine Abbildung

$$\mu : G \times X \longrightarrow X \\ (g, x) \longmapsto \mu(g, x) = gx$$

heißt *Operation der Gruppe G auf der Menge X* , wenn gilt:

- (i) $\mu(e, x) = x$, wenn e das neutrale Element von G ist
- (ii) $\mu(g, \mu(h, x)) = \mu(gh, x)$ für alle $g, h \in G$

Man sagt auch *G operiert via μ auf X* .

Definition 12. Einige Schreibweisen:

- Seien $X^{(1)} = (X_1^{(1)}, \dots, X_n^{(1)})$, \dots , $X^{(k)} = (X_1^{(k)}, \dots, X_n^{(k)}) \in \mathbb{R}^n$, $k, n \in \mathbb{N}$ Vektoren und

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}, \dots, A^{(\ell)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(\ell)} & \cdots & a_{1n}^{(\ell)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^{(\ell)} & \cdots & a_{nn}^{(\ell)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \ell \in \mathbb{N}$$

Tensoren zweiter Stufe. Wenn wir für $1 \leq i \leq \ell$ schreiben $a_{11}^{(i)}, \dots, a_{nn}^{(i)}$, so meinen wir die Reihenfolge

$$a_{11}^{(i)}, \dots, a_{1n}^{(i)}, a_{21}^{(i)}, \dots, a_{2n}^{(i)}, \dots, a_{n1}^{(i)}, \dots, a_{nn}^{(i)}$$

sämtlicher Koordinaten der Matrix $A^{(i)}$ „Zeile für Zeile“. Mit dieser Schreibweise sei nun das Symbol

$$M := \underbrace{(X_1^{(1)}, \dots, X_n^{(1)}, \dots, X_1^{(k)}, \dots, X_n^{(k)})}_{k \cdot n \text{ Koordinaten}}, \underbrace{(a_{11}^{(1)}, \dots, a_{nn}^{(1)}, \dots, a_{11}^{(\ell)}, \dots, a_{nn}^{(\ell)})}_{\substack{n^2 \text{ Koordinaten} \\ \ell \cdot n^2 \text{ Koordinaten}}}$$

das geordnete $(kn + \ell n^2)$ -Tupel sämtlicher Koordinaten der k Vektoren $X^{(1)}, \dots, X^{(k)}$ und Tensoren $A^{(1)}, \dots, A^{(\ell)}$.

- Sei nun $G \subset O(n)$ eine Gruppe, $g \in G$. Mit dem Symbol

$$\tilde{M} := (\tilde{X}_1^{(1)}, \dots, \tilde{X}_n^{(1)}, \dots, \tilde{X}_1^{(k)}, \dots, \tilde{X}_n^{(k)}, \tilde{a}_{11}^{(1)}, \dots, \tilde{a}_{nn}^{(1)}, \dots, \tilde{a}_{11}^{(\ell)}, \dots, \tilde{a}_{nn}^{(\ell)})$$

bezeichnen wir das geordnete $(kn + \ell n^2)$ -Tupel der mit einem $g \in G$ transformierten Koordinaten der Vektoren und Tensoren. Wenn wir sagen „transformiert“, so meinen wir transformiert im Sinne der Transformationsgesetze für Vektoren und Tensoren. Beispiel:

$$g \in G \text{ mit } g := \begin{pmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} \Rightarrow \tilde{X}_1^{(1)} = \sum_{j=1}^n g_{1j} X_j^{(1)}$$

und

$$\tilde{a}_{11}^{(1)} = \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n g_{1p} g_{1q} a_{pq}^{(1)}$$

Unter Anwendung der vorangegangenen Schreibweisen wollen wir nun die allgemeine Definition einer Invariante einführen.

Definition 13. Seien $X^{(1)}, \dots, X^{(k)} \in \mathbb{R}^n$, $k \in \mathbb{N}_0$ Vektoren, $A^{(1)}, \dots, A^{(\ell)} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\ell \in \mathbb{N}_0$ assoziierte Matrizen von Tensoren zweiter Stufe, $k > 0 \vee \ell > 0$, $G \subset O(n)$ Gruppe, M und \tilde{M} wie in Definition 12 auf der vorherigen Seite. Eine Abbildung

$$f : \begin{array}{l} \mathbb{R}^{kn + \ell n^2} \longrightarrow \mathbb{R} \\ M \longmapsto f(M) \end{array}$$

heißt *Invariante der Vektoren $X^{(1)}, \dots, X^{(k)}$ und Tensoren $A^{(1)}, \dots, A^{(\ell)}$ unter der Gruppe G* , wenn gilt:

$$f(\tilde{M}) = |g|^\rho f(M) \quad \forall g \in G$$

Die Zahl $\rho \in \mathbb{Z}$ heißt *Gewicht* der Invariante. Im Falle von $\rho = 0$ spricht man von einer *absoluten* Invariante, für $\rho \neq 0$ von einer *relativen* Invariante.

Bemerkung 14. Relative Invarianten werden uns nur im allgemein gehaltenen Abschnitt 3.2 auf Seite 38 begegnen. Danach betrachten wir nur absolute Invarianten unter endlichen Untergruppen von $O(3)$. Im Folgenden wird mit dem Ausdruck „Invariante“ immer „absolute Invariante“ gemeint sein, solange es nicht explizit anders ausgedrückt wird.

Zur Illustration der Definition wollen wir einige Beispiele von Invarianten unter orthogonalen Transformationen anführen.

Beispiele 15. Die folgenden zwei Beispiele orientieren sich an der obigen Definition 13 auf der vorherigen Seite. Es sei $A = (a_{ij}) \in O(3)$. Wir erinnern uns an die Orthogonalitätsrelation der Koordinaten von orthogonalen Matrizen: $\sum_{i=1}^3 a_{ik}a_{ij} = \delta_{kj} = \sum_{i=1}^3 a_{ki}a_{ji}$, $1 \leq k, j \leq 3$ (vgl. Gleichung (2.13) auf Seite 26).

- (i) Das Skalarprodukt zweier Vektoren $U = (U_1, U_2, U_3), V = (V_1, V_2, V_3) \in \mathbb{R}^3$ ist eine Invariante:

$$\begin{aligned}
 f(\tilde{U}_1, \tilde{U}_2, \tilde{U}_3, \tilde{V}_1, \tilde{V}_2, \tilde{V}_3) &:= \langle \tilde{U}, \tilde{V} \rangle = \sum_{i=1}^3 \tilde{U}_i \tilde{V}_i \\
 &= \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 a_{ij} U_j \right) \left(\sum_{k=1}^3 a_{ik} V_k \right) \\
 &= \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \underbrace{\sum_{i=1}^3 a_{ij} a_{ik}}_{\delta_{jk}} U_j V_k \\
 &= \sum_{k=1}^3 \underbrace{\sum_{j=1}^3 \delta_{jk} U_j}_{U_k} V_k \\
 &= \sum_{k=1}^3 U_k V_k = \langle U, V \rangle \\
 &= f(U_1, U_2, U_3, V_1, V_2, V_3)
 \end{aligned}$$

Das Skalarprodukt zweier Vektoren ist also unter jeder orthogonalen Transformation invariant. Erinnerung: Hier wurde Gleichung (2.19) auf Seite 29 und Gleichung (2.13) auf Seite 26 verwendet.

- (ii) Sei $T = (T_{ij}), 1 \leq i, j \leq 3$ die Matrix eines Tensors zweiter Stufe. Die

Spur $\text{Tr}(T) := \sum_{i=1}^3 T_{ii}$ ist unter $O(3)$ invariant.

$$\begin{aligned}
 f(\tilde{T}_{11}, \dots, \tilde{T}_{33}) &:= \text{Tr}(\tilde{T}) = \sum_{i=1}^3 \tilde{T}_{ii} \\
 &= \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 a_{ij} a_{ik} T_{jk} \right) \\
 &= \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \underbrace{\sum_{i=1}^3 a_{ij} a_{ik}}_{\delta_{jk}} T_{jk} \\
 &= \sum_{k=1}^3 \underbrace{\sum_{j=1}^3 \delta_{jk} T_{jk}}_{T_{kk}} \\
 &= \text{Tr}(T) = f(T_{11}, \dots, T_{33})
 \end{aligned}$$

Die Invariante f im Sinne von Definition 13 auf Seite 35 ist keinen Einschränkungen unterworfen, d. h. sie ist eine Abbildung in höchst allgemeiner Form. Dies wird sich auf den folgenden Seiten ändern. Wir werden im Weiteren Verlauf voraussetzen, dass f eine *algebraische Funktion* (genauer im nächsten Abschnitt) in ihren Argumenten ist. Es wird sich zeigen, dass sich alle algebraischen Invarianten aus Invarianten erzeugen lassen, welche Polynome in ihren Argumenten sind. Einen Ausblick auf nichtalgebraische Invarianten gibt [Spe71], S. 350 ff.

Bemerkung 16. Wir sagen in den weiteren Ausführungen *algebraische Invariante*, wenn wir eine Invariante meinen, die eine algebraische Funktion ist, *rationale Invariante* für eine Invariante, die eine rationale Funktion ist. Dem entsprechend wird auch von *polynomiellen* und *homogenen* Invarianten die Rede sein.

Ein zentrales Problem der Invariantentheorie ist es, zu einer gegebenen Menge von Variablen – in unserem Fall die Koordinaten von Vektoren und Tensoren – und einer gegebenen Gruppe von Transformationen, eine Menge von grundlegenden Invarianten zu finden, aus deren Elementen sich alle anderen Invarianten generieren lassen. Eine solche Menge wird *Integritätsbasis* genannt. Wir beschränken uns hier auf polynomielle Invarianten. Eine Rechtfertigung dafür folgt in Abschnitt 3.2 auf der nächsten Seite.

Definition 17 (reduzible/irreduzible Invariante). Sei $G \subset O(n)$ eine Gruppe, \mathbb{F} ein Körper von Charakteristik 0 (z. B. \mathbb{R}) und f eine polynomielle Invariante unter G , d. h.

$$f \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]^G := \{f \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n] : f \text{ invariant unter } G\}.$$

Man nennt f *reduzibel*, wenn sich f als ein Polynom in anderen unter G invarianten Polynomen ausdrücken lässt, d. h.

$$f \text{ reduzibel} \Leftrightarrow \exists f_1, \dots, f_k \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]^G : f \in \mathbb{F}[f_1, \dots, f_k].$$

Andernfalls heißt f *irreduzibel*.

Definition 18 (Integritätsbasis). Sei $G \subset O(n)$ eine Gruppe, \mathbb{F} Körper von Charakteristik 0 und

$$I_1, \dots, I_k \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]^G.$$

Die Menge $\{I_1, \dots, I_k\}$ heißt *Integritätsbasis*, wenn sich alle unter G invarianten Polynome in x_1, \dots, x_n als Polynome in den I_1, \dots, I_k schreiben lassen, d. h.

$$\{I_1, \dots, I_k\} \text{ Integritätsbasis} \Leftrightarrow \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]^G \subset \mathbb{F}[I_1, \dots, I_k]. \quad (3.1)$$

Eine Integritätsbasis heißt *minimal*, wenn aus ihr kein Element entfernt werden kann, ohne dass die Eigenschaft (3.1) verloren geht.

Bemerkung 19. Offensichtlich sind alle Elemente einer minimalen Integritätsbasis irreduzibel.

3.2 Klassische Resultate – algebraische Invarianten

Wir werden im Folgenden darlegen warum es bei der Suche nach algebraischen Invarianten ausreichend ist sich auf homogene polynomielle Invarianten zu beschränken. Wir folgen hier im Wesentlichen der Darstellung von [Spe71], welche sich auf [GY03], [Ell13], [Tur60], [Wei23] und [Gur64] bezieht. Diese klassischen Bücher eignen sich allerdings weniger für unsere Anwendung, da sie meist allgemeine lineare Transformationen, d. h. Invarianten unter $GL(n; \mathbb{R})$, behandeln. Wir interessieren uns jedoch in erster Linie für bestimmte orthogonale Transformationen (endliche Untergruppen $G \subset O(3)$) und die Invarianten unter diesen. In der Praxis ist es meist einfacher, die Invarianten für die orthogonale Gruppe

direkt zu konstruieren als auf die allgemeineren dort beschriebenen Methoden für die gesamte lineare Gruppe zurückzugreifen ([Spe71]). Dennoch enthält die klassische Theorie einige Resultate, welche hier wiedergegeben werden sollten.

Wir verwenden im Folgenden wieder die in Definition 12 auf Seite 34 eingeführten Schreibweisen. M steht für das geordnete Tupel aller Koordinaten der Vektoren und Tensoren, welche Argumente einer Invariante sind. \tilde{M} steht für das geordnete Tupel aller transformierten Koordinaten (vgl. Beispiel am Ende von Definition 12 auf Seite 34).

Definition 20 (algebraische Funktion). Sei eine Abbildung

$$\varphi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R} \\ \varphi : (X_1, \dots, X_n) =: X \longmapsto \varphi(X_1, \dots, X_n) =: \varphi(X)$$

gegeben. Die Abbildung φ heißt *algebraische Funktion in n Veränderlichen* über \mathbb{R} , wenn ein $k \in \mathbb{N}$ existiert und es rationale Funktionen $p_1, \dots, p_k \in \mathbb{R}(X_1, \dots, X_n)$ gibt, so dass gilt:

$$\varphi(X)^k + p_1(X)\varphi(X)^{k-1} + \dots + p_k(X) = 0. \quad (3.2)$$

Funktionen, die nicht algebraisch sind, heißen *transzendent*. Mit $\mathbb{R}(X_1, \dots, X_n)$ ist hier der *Quotientenkörper* des Polynomrings $\mathbb{R}[X_1, \dots, X_n]$ gemeint.¹

Bemerkung 21. Informal kann man sagen, dass alle Funktionen, die in einer endlichen Anzahl von Termen dargestellt werden können, welche nur die Grundrechenarten Addition, Subtraktion, Multiplikation und Division sowie Wurzelziehen einschließen, algebraisch sind. Es gibt jedoch auch algebraische Funktionen, die so nicht darstellbar sind. Der Nachweis der Existenz solcher Funktionen erfordert jedoch einen höheren Aufwand an Theorie. Siehe hierzu Texte über Galois-Theorie, etwa in [Lan05].

Beispiele für transzendente Funktionen sind die Exponentialfunktion, die trigonometrischen Funktionen oder auch der Logarithmus, da diese Funktionen nur durch eine unendliche Anzahl von Termen dargestellt werden können (Reihendarstellung).

Es folgen nun einige vergleichsweise simple Aussagen über Invarianten, die aber trotzdem von großer Bedeutung sind. Wir erinnern daran, dass wir algebraische Invarianten betrachten, d. h. Invarianten, die algebraische Funktionen in den Koordinaten der betrachteten Vektoren und Tensoren sind.

¹siehe etwa [Lan05], S. 110

Satz 22. Sei $\varphi(M)$ eine algebraische Invariante unter einer Untergruppe $G \subset O(n)$, M wie in Definition 12 auf Seite 34, d. h.

$$\varphi(M) = \varphi(\tilde{M}) \quad \forall g \in G. \quad (3.3)$$

Dann ist $\varphi(M)$ die Lösung einer algebraischen Gleichung

$$\varphi(M)^k + p_1(M)\varphi(M)^{k-1} + \dots + p_k(M) = 0 \quad (3.4)$$

deren Koeffizienten $p_i(M) \in \mathbb{R}(M)$, $1 \leq i \leq k$, rationale Invarianten unter G sind.

Beweis. Zu zeigen ist, dass die Koeffizienten $p_i(M)$ invariant unter G sind, dass also gilt:

$$p_i(M) = p_i(\tilde{M}) \quad \forall g \in G, \quad \forall i \in \{1, \dots, k\}.$$

Nach Voraussetzung ist $\varphi(M)$ eine algebraische Funktion, d. h. $\exists k \in \mathbb{N}$, so dass gilt:

$$\varphi(M)^k + p_1(M)\varphi(M)^{k-1} + \dots + p_k(M) = 0, \quad (3.5)$$

wobei die Koeffizienten $p_1(M), \dots, p_k(M) \in \mathbb{R}(M)$ rationale Funktionen von M sind.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir den Exponenten k bereits als den kleinstmöglichen annehmen. Die Koeffizienten $p_1(M), \dots, p_k(M)$ von Gleichung (3.5) sind dann eindeutig bestimmt. Denn angenommen die Koeffizienten von Gleichung (3.5) seien nicht eindeutig, dann existieren Koeffizienten $p'_1(M), \dots, p'_k(M)$ (rationale Funktionen von M) mit

$$\varphi(M)^k + p'_1(M)\varphi(M)^{k-1} + \dots + p'_k(M) = 0. \quad (3.6)$$

Die Differenz von Gleichung (3.5) und Gleichung (3.6) führt uns dann zu einer Gleichung von der Form Gleichung (3.5) mit Grad $< k$:

$$\begin{aligned} & [\varphi(M)^k + p_1(M)\varphi(M)^{k-1} + \dots + p_k(M)] - \\ & [\varphi(M)^k + p'_1(M)\varphi(M)^{k-1} + \dots + p'_k(M)] = 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

was äquivalent zu

$$(p_1(M) - p'_1(M))\varphi(M)^{k-1} + \dots + (p_k(M) - p'_k(M)) = 0 \quad (3.8)$$

ist. Dividieren wir durch den Leitkoeffizienten und benennen die dadurch entstehenden Koeffizienten um, erhalten wir wieder eine Gleichung von der Form von Gleichung (3.5):

$$\varphi(M)^{k-1} + p''_2(M)\varphi(M)^{k-2} + \dots + p''_k(M) = 0$$

Es wäre also ein kleinerer Exponent gefunden.

Da $\varphi(\tilde{M})$ die selbe Funktion von \tilde{M} ist wie $\varphi(M)$ von M , ist $\varphi(\tilde{M})$ eine Lösung der Gleichung

$$\varphi(\tilde{M})^k + p_1(\tilde{M})\varphi(\tilde{M})^{k-1} + \dots + p_k(\tilde{M}) = 0 \quad (3.9)$$

$\varphi(M)$ ist nach Voraussetzung aber invariant. Aus Gleichung (3.9) folgt damit

$$\varphi(M)^k + p_1(\tilde{M})\varphi(M)^{k-1} + \dots + p_k(\tilde{M}) = 0.$$

Wie weiter oben dargelegt, sind die Koeffizienten von Gleichung (3.5) aber eindeutig bestimmt, damit folgt

$$p_1(M) = p_1(\tilde{M}), \dots, p_k(M) = p_k(\tilde{M})$$

was zu zeigen war. □

Im nächsten Satz zeigen wir, dass eine rationale Invariante wie sie in Satz 22 auftritt, immer ein Quotient zweier polynomieller Invarianten ist.

Satz 23. *Sei $\varphi(M) \in \mathbb{R}(M)$ rationale Invariante unter einer Untergruppe $G \subset O(n)$, dann existieren (möglicherweise relative) polynomielle Invarianten $\psi(M), \chi(M) \in \mathbb{R}[M]$ mit*

$$\varphi(M) = \frac{\psi(M)}{\chi(M)}.$$

Beweis. Wir zeigen

$$\psi(\tilde{M}) = \pm\psi(M) \quad \text{bzw.} \quad \chi(\tilde{M}) = \pm\chi(M)$$

Sei also $\varphi(M)$ rationale Invariante. Dann existieren Polynome $\psi(M), \chi(M) \in \mathbb{R}[M]$, so dass

$$\varphi(M) = \frac{\psi(M)}{\chi(M)}, \quad (3.10)$$

wobei $\psi(M)$ und $\chi(M)$ keine gemeinsamen Faktoren mehr besitzen sollen. Wegen der Invarianz von $\varphi(M)$ folgt

$$\varphi(\tilde{M}) = \frac{\psi(\tilde{M})}{\chi(\tilde{M})}. \quad (3.11)$$

Aus $\varphi(\tilde{M}) = \varphi(M)$ erhalten wir mit Gleichung (3.10) auf der vorherigen Seite und Gleichung (3.11) auf der vorherigen Seite die Relation

$$\psi(\tilde{M}) = \frac{\psi(M)\chi(\tilde{M})}{\chi(M)}. \quad (3.12)$$

Wir hatten $\psi(M)$ und $\chi(M)$ als teilerfrei angenommen. Also muss $\chi(M)$ ein Teiler von $\chi(\tilde{M})$ sein. Die Grade der Monome in $\chi(\tilde{M})$ und $\chi(M)$ stimmen aber überein. Folglich können sich $\chi(\tilde{M})$ und $\chi(M)$ nur durch einen Faktor unterscheiden, welcher eine Funktion der Komponenten der zugrunde gelegten Transformation ist.² Nach einem Satz in [Gur64] (Theorem 15.1, S. 159 ff) kann eine solche Funktion aber nur ganzzahlige Potenz von $|g|$ (für $g \in G$) sein. Wegen $G \subset O(n)$ folgt damit $\chi(\tilde{M}) = \pm\chi(M)$, da $|g| = \pm 1$. Ganz analog zeigt man das für $\psi(M)$, und wir erhalten

$$\chi(\tilde{M}) = \pm\chi(M) \quad \text{und} \quad \psi(\tilde{M}) = \pm\psi(M). \quad (3.13)$$

Dies wollten wir zeigen. □

Bemerkung 24. Das Vorzeichen in (3.13) muss für beide Gleichungen übereinstimmen.

Wie sich zeigen wird, können wir uns bei der Suche nach algebraischen Invarianten noch weiter auf *homogene* polynomielle Invarianten einschränken.

Definition 25 (homogenes Polynom). Sei R ein kommutativer Ring, $n \in \mathbb{N}$ und $R[X_1, \dots, X_n]$ der Polynomring in den Variablen X_1, \dots, X_n über R . Für ein $f \in R[X_1, \dots, X_n]$ existieren ein $r \in \mathbb{N}$, sowie Koeffizienten $k_1, \dots, k_r \in R \setminus \{0\}$ und Monome $0 \neq m_1, \dots, m_r \in R[X_1, \dots, X_n]$, so dass sich f als

$$f(X_1, \dots, X_n) = k_1 m_1 + \dots + k_r m_r$$

darstellen lässt. f heißt *homogen*, wenn für alle paarweise verschiedenen $i, j \in \{1, \dots, r\}$ gilt:

$$\deg m_i = \deg m_j$$

Beispiele 26. Beispiele für homogene Polynome:

- (i) $2\alpha_{13}^2\alpha_{21}^3 + 5\alpha_{22}\alpha_{21}^4$ sei ein Polynom in den Komponenten einer Transformationsmatrix α_{ij} . Es ist homogen, denn die Grade der Monome $\alpha_{13}^2\alpha_{21}^3$ und $\alpha_{22}\alpha_{21}^4$ stimmen überein:

$$\deg(\alpha_{13}^2\alpha_{21}^3) = 2 + 3 = 5 = 1 + 4 = \deg(\alpha_{22}\alpha_{21}^4)$$

²Also z. B. $\chi(\tilde{M}) = \omega(g_{11}, \dots, g_{nn})\chi(M)$ für $\omega : \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}$, $g = (g_{ij})_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq n}} \in O(n)$

(ii) Das Polynom $\underbrace{\alpha_{33}^3 \alpha_{13}^2 \alpha_{23}}_{\text{deg}=6} + \underbrace{\alpha_{11} \alpha_{12}^2 \alpha_{13}^2 \alpha_{22} \alpha_{33}}_{\text{deg}=7}$ ist nicht homogen.

Definition 27 (homogene polynomielle Invariante). Eine polynomielle Invariante heißt *homogen*, wenn sie ein homogenes Polynom ist.

Satz 28. *Jede polynomielle Invariante von Vektoren und Tensoren ist eine Summe von homogenen polynomiellen Invarianten der selben Vektoren und Tensoren.*

Beweis. Die Transformationsgleichungen für die Koordinaten der Vektoren und Tensoren sind immer linear und homogen in diesen Koordinaten. Das heißt, jeder Term einer Invariante J in den Koordinaten dieser Vektoren und Tensoren wird nach einer linearen Transformation zu einer Summe von Termen gleichen Grades in den Koordinaten dieser Vektoren und Tensoren. Man nehme also in J alle Terme gleichen Grades in den Koordinaten der Vektoren und Tensoren und bilde aus ihnen die Summe J_1 . Bei einer Transformation, unter welcher J invariant ist, bleibt dann auch J_1 gleich, also muss J_1 selbst eine Invariante sein. \square

Dies bedeutet insbesondere, dass eine Integritätsbasis nur homogene Polynome als Elemente haben kann.

Satz 29 (Hilbert's Theorem). *Für jedes endliche System von Vektoren und Tensoren existiert eine Integritätsbasis bestehend aus einer endlichen Anzahl von Invarianten.*

Beweis. Der Beweis findet sich in [Gur64] auf den Seiten 235–244. \square

Dieser Satz ist von großer Bedeutung, garantiert er uns doch die Existenz einer endlichen Integritätsbasis für jedes endliche System von Vektoren und Tensoren. Dadurch ist natürlich auch erst die Suche nach solchen Integritätsbasen gerechtfertigt.

3.3 Symmetriegruppen und Kristallklassen

3.3.1 Die Kristallklassen

Die im Folgenden beschriebenen Gruppen beschreiben Materialien, für die es in der Referenzkonfiguration³ drei bevorzugte Richtungen gibt. Diese Richtungen

³Dieser Begriff stammt aus der Kontinuumsmechanik. Es ist damit eine bestimmte Ausgangslage des betrachteten Materialkörpers (z. B. ein Material mit kristalliner Molekular-

werden mit den drei Vektoren $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ und \mathbf{h}_3 beschrieben (vgl. Kapitel 1 auf Seite 6). Manchmal schreiben wir auch \mathbf{h}_i wenn alle drei Vektoren gemeint sind.

Es gibt 32 Kristallklassen. Jede Kristallklasse ist durch eine bestimmte endliche Untergruppe von $O(3)$ charakterisiert. Diese 32 Kristallklassen lassen sich in sechs Systeme gliedern, die wir in Abschnitt 1.4 auf Seite 15 beschrieben und dargestellt haben. In Nomenklatur und Notation richten wir uns nach [SR58], welche die Terminologie von [Hur71] adaptiert haben. Die mit den Kristallklassen korrespondierenden Gruppen wurden z. B. von [Lom59] hergeleitet.

(i) *Triklines* System

In diesem System gibt es keinerlei Einschränkung über die Orientierung der drei Vektoren $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ und \mathbf{h}_3 . Dieses System enthält zwei Klassen, namentlich *Pedial* und *Pinacoidal*.

(ii) *Monoklines* System

Hier ist eine der bevorzugten Richtungen, wir bestimmen dafür \mathbf{h}_1 , senkrecht zu der von den beiden verbleibenden Richtungen aufgespannten Ebene. Das System enthält drei Klassen: *Domatisch*, *Sphenoidal* und *Prismatisch*.

(iii) *Rhombisches* System

Die Vektoren \mathbf{h}_i stehen paarweise senkrecht aufeinander. Dieses System enthält drei Klassen: *Rhombisch-pyramidal*, *Rhombisch-disphenoidal* und *Rhombisch-dipyramidal*.

(iv) *Tetragonales* System

In diesem System stehen die Vektoren \mathbf{h}_i ebenfalls paarweise senkrecht aufeinander. Eine der bevorzugten Richtungen, wir bestimmen hierzu \mathbf{h}_3 , hat eine besondere Bedeutung und wird *Hauptsymmetrieachse* genannt. Das System beinhaltet sieben Kristallklassen: *Tetragonal-disphenoidal*, *Tetragonal-pyramidal*, *Tetragonal-dipyramidal*, *Tetragonal-scalenohedral*, *Ditetragonal-pyramidal*, *Tetragonal-trapezohedral* und *Ditetragonal-dipyramidal*.

struktur) gemeint. Der Referenzkonfiguration gegenüber steht die *Momentankonfiguration*, welche die Lage des betrachteten Körpers zu einem bestimmten Zeitpunkt während einer Deformation beschreibt (vgl. auch Definition 53 auf Seite 88).

(v) *Hexagonales System*

Der Vektor \mathbf{h}_3 steht senkrecht zur von \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_2 aufgespannten Ebene. \mathbf{h}_1 kann durch eine Rotation von 120° um die Richtung von \mathbf{h}_3 mit \mathbf{h}_2 zur Deckung gebracht werden. Das hexagonale System umfasst die zwölf Kristallklassen: *Trigonal-pyramidal*, *Rhombohedral*, *Ditrigonal-pyramidal*, *Trigonal-trapezohedral*, *Hexagonal-scalenohedral*, *Trigonal-dipyramidal*, *Hexagonal-pyramidal*, *Hexagonal-dipyramidal*, *Ditrigonal-dipyramidal*, *Dihexagonal-pyramidal*, *Hexagonal-trapezohedral* und *Dihexagonal-dipyramidal*.

(vi) *Kubisches System*

Abermals sind die drei bevorzugten Richtungen paarweise senkrecht zueinander ausgerichtet. Das kubische Kristallsystem enthält fünf Kristallklassen: *Tetartoidal*, *Diploidal*, *Hextetrahedral*, *Gyroidal* und *Hexoctohedral*.

Um die Transformationen, welche eine gegebene Kristallklasse charakterisieren, beschreiben zu können, ist es hilfreich, für jedes Kristallsystem ein kartesisches Referenzkoordinatensystem zu wählen. Wir wollen nun beschreiben, auf welche Weise wir für jedes Kristallsystem ein rechtwinkliges Koordinatensystem, bestehend aus den drei Einheitsvektoren $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$, abhängig von der Lage der *kristallographischen Achsen* $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3$, festlegen. Der Grund für die separate Festlegung eines Koordinatensystems pro Kristallsystem besteht darin, dass sich die Darstellung der Symmetrietransformationen durch Matrizen vereinfacht. Würden wir nur ein einziges Koordinatensystem wählen, so bräuchten wir deutlich mehr Matrizen, um alle Symmetrietransformationen darzustellen.

Triklines System: Da das triklone Kristallsystem bis auf Inversionszentren keine Symmetrieelemente enthält, kann ein beliebiges kartesisches Koordinatensystem gewählt werden.

Monoklines System: Für das Monokline System wählen wir das Koordinatensystem derart, dass die \mathbf{e}_1 -Achse parallel zum Vektor \mathbf{h}_1 verläuft, es ansonsten aber ein beliebiges rechtwinkliges Koordinatensystem ist, d. h. \mathbf{e}_1 steht senkrecht auf der Ebene $\{\mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3\}$. Die Achsen $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ bilden einen rechten Winkel in der $\{\mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3\}$ -Ebene.

Rhombisches, tetragonales und kubisches System: Für das rhombische, tetragonale und kubische System werden die Achsen $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ und \mathbf{e}_3 einfach entsprechend parallel der kristallographischen Achsen $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ und \mathbf{h}_3 gewählt.

Hexagonales System: Für das hexagonale System wählen wir ein rechtwinkliges Referenzkoordinatensystem, in dem die \mathbf{e}_1 - und \mathbf{e}_3 -Achse entsprechend parallel zu den Vektoren \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_3 verlaufen. Die Achse \mathbf{e}_2 steht dann senkrecht auf der Ebene $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3\}$.

Sind die Referenzkoordinatensysteme wie oben beschrieben gewählt, so lassen sich nach [SR58] (S. 177) sämtliche Transformationen, welche ein gegebenes Gitter in sich selbst überführen, durch die in Tabelle 3.1 angegebenen Matrizen beschreiben. Diese Transformationen werden Symmetrietransformationen genannt (vgl. Abschnitt 1.3 auf Seite 11). Transformationen, die sich aus Produkten dieser Matrizen ergeben, werden ebenfalls berücksichtigt. In Tabelle 3.2 auf der nächsten Seite sind die Matrizen, welche eine Kristallklasse charakterisieren, für jede der 32 Kristallklassen angegeben (Tabelle ist [Spe71] entnommen). Die mit einer gegebenen Kristallklasse korrespondierenden Matrizen bilden eine Gruppe, die so genannte Symmetriegruppe (ausführlich wurden diese Gruppen von [Lom59] hergeleitet).

Tabelle 3.1: Liste aller benötigten Symmetrietransformationen

Symmetrietransformation	Beschreibung
$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Einheitstransformation
$C = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Inversion am Punkt 0
$R_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Spiegelung (Reflektion) an der Ebene senkrecht zum Vektor \mathbf{h}_1
$R_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Spiegelung (Reflektion) an der Ebene senkrecht zum Vektor \mathbf{h}_2
$R_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	Spiegelung (Reflektion) an der Ebene senkrecht zum Vektor \mathbf{h}_2
$D_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	180° Drehung um die X_1 -Achse
$D_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	180° Drehung um die X_2 -Achse
$D_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	180° Drehung um die X_3 -Achse

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 3.1: Fortsetzung

Symmetrietransformation	Beschreibung
$T_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	Spiegelung an einer Ebene, welche durch jene Achse verläuft, die \mathbf{h}_1 enthält und den Winkel zwischen \mathbf{h}_2 und \mathbf{h}_3 halbiert
$T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	entsprechend T_1 : Achse durch \mathbf{h}_2 , Winkel zwischen \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_3
$T_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	entsprechend T_1 : Achse durch \mathbf{h}_2 , Winkel zwischen \mathbf{h}_1 und \mathbf{h}_2
$M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	120° Drehung um eine Achse, die den Punkt (0, 0, 0) und (1, 1, 1) enthält
$M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	240° Drehung um eine Achse, die den Punkt (0, 0, 0) und (1, 1, 1) enthält
$S_1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	120° Drehung um die Achse, die \mathbf{h}_3 enthält
$S_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	240° Drehung um die Achse, die \mathbf{h}_3 enthält

Tabelle 3.2: Die 32 Kristallklassen und ihre korrespondierenden Symmetrietransformationen. Das n in der letzten Spalte entspricht der Gruppenordnung.

System	Nr.	Kristallklasse	Symmetriegruppe	n
Triklin	1	Pedial	I	1
	2	Pinacoidal	I, C	2
Monoklin	3	Domatisch	I, R_1	2
	4	Sphenoidal	I, D_1	2
	5	Prismatisch	I, C, R_1, D_1	4
Rhombisch	6	Rhombisch-pyramidal	I, R_2, R_3, D_1	4
	7	Rhombisch-disphenoidal	I, D_1, D_2, D_3	4
	8	Rhombisch-dipyramidal	$I, C, R_1, R_2, R_3, D_1, D_2, D_3$	8

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 3.2: Fortsetzung

System	Nr.	Kristallklasse	Symmetriegruppe	n
Tetragonal	9	Tetragonal-disphenoidal	I, D_3, D_1T_3, D_2T_3	4
	10	Tetragonal-pyramidal	I, D_3, R_1T_3, R_2T_3	4
	11	Tetragonal-dipyramidal	$I, C, R_3, D_3, R_1T_3, R_2T_3, D_1T_3, D_2T_3$	8
	12	Tetragonal-scalenohedral	$I, D_1, D_2, D_3, T_3, D_1T_3, D_2T_3, D_3T_3$	8
	13	Ditetragonal-pyramidal	$I, R_1, R_2, D_3, T_3, R_1T_3, R_2T_3, D_3T_3$	8
	14	Tetragonal-trapezohedral	$I, D_1, D_2, D_3, CT_3, R_1T_3, R_2T_3, R_3T_3$	8
	15	Ditetragonal-dipyramidal	$I, C, R_1, R_2, R_3, D_1, D_2, D_3, T_3, CT_3, R_1T_3, R_2T_3, R_3T_3, D_1T_3, D_2T_3, D_3T_3$	16
	Hexagonal	16	Trigonal-pyramidal	I, S_1, S_2
17		Rhombohedral	$I, S_1, S_2, C, CS_1, CS_2$	6
18		Ditrigonal-pyramidal	$I, S_1, S_2, R_1, R_1S_1, R_1S_2$	6
19		Trigonal-trapezohedral	$I, S_1, S_2, D_1, D_1S_1, D_1S_2$	6
20		Hexagonal-scalenohedral	$I, S_1, S_2, C, CS_1, CS_2, R_1, R_1S_1, R_1S_2, D_1, D_1S_1, D_1S_2$	12
21		Trigonal-dipyramidal	$I, S_1, S_2, R_3, R_3S_1, R_3S_2$	6
22		Hexagonal-pyramidal	$I, S_1, S_2, D_3, D_3S_1, D_3S_2$	6
23		Hexagonal-dipyramidal	$I, S_1, S_2, C, CS_1, CS_2, R_3, R_3S_1, R_3S_2, D_3, D_3S_1, D_3S_2$	12
24		Ditrigonal-dipyramidal	$I, S_1, S_2, R_1, R_1S_1, R_1S_2, R_3, R_3S_1, R_3S_2, D_2, D_2S_1, D_2S_2$	12
25		Dihexagonal-pyramidal	$I, S_1, S_2, R_1, R_1S_1, R_1S_2, R_2, R_2S_1, R_2S_2, D_3, D_3S_1, D_3S_2$	12

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 3.2: Fortsetzung

System	Nr.	Kristallklasse	Symmetriegruppe	n
	26	Hexagonal-trapezohedral	$I, S_1, S_2, D_1, D_1S_1, D_1S_2, D_2, D_2S_1, D_2S_2, D_3, D_3S_1, D_3S_2$	12
	27	Dihexagonal-dipyramidal	$I, S_1, S_2, C, CS_1, CS_2, R_1, R_1S_1, R_1S_2, R_2, R_2S_1, R_2S_2, R_3, R_3S_1, R_3S_2, D_1, D_1S_1, D_1S_2, D_2, D_2S_1, D_2S_2, D_3, D_3S_1, D_3S_2$	24
Kubisch	28	Tetartoidal	$I, D_1, D_2, D_3, M_1, M_2, D_1M_1, D_1M_2, D_2M_1, D_2M_2, D_3M_1, D_3M_2$	12
	29	Diploidal	$I, C, R_1, R_2, R_3, D_1, D_2, D_3, M_1, M_2, CM_1, CM_2, R_1M_1, R_1M_2, R_2M_1, R_2M_2, R_3M_1, R_3M_2, D_1M_1, D_1M_2, D_2M_1, D_2M_2, D_3M_1, D_3M_2$	24
	30	Hextetrahedral	$I, D_1, D_2, D_3, M_1, M_2, T_1, T_2, T_3, D_1M_1, D_1M_2, D_1T_1, D_1T_2, D_1T_3, D_2M_1, D_2M_2, D_2T_1, D_2T_2, D_2T_3, D_3M_1, D_3M_2, D_3T_1, D_3T_2, D_3T_3$	24
	31	Gyroidal	$I, D_1, D_2, D_3, M_1, M_2, CT_1, CT_2, CT_3, R_1T_1, R_1T_2, R_1T_3, R_2T_1, R_2T_2, R_2T_3, R_3T_1, R_3T_2, R_3T_3, D_1M_1, D_1M_2, D_2M_1, D_2M_2, D_3M_1, D_3M_2$	24

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 3.2: Fortsetzung

System	Nr.	Kristallklasse	Symmetriegruppe	n
	32	Hexoctohedral	$I, C, R_1, R_2, R_3, D_1,$ $D_2, D_3, M_1, M_2, T_1, T_2,$ $T_3, CM_1, CM_2, CT_1,$ $CT_2, CT_3, R_1M_1, R_1M_2,$ $R_2M_1, R_2M_2, R_3M_1,$ $R_3M_2, R_1T_1, R_1T_2,$ $R_1T_3, R_2T_1, R_2T_2, R_2T_3,$ $R_3T_1, R_3T_2, R_3T_3,$ $D_1M_1, D_1M_2, D_2M_1,$ $D_2M_2, D_3M_1, D_3M_2,$ $D_1T_1, D_1T_2, D_1T_3,$ $D_2T_1, D_2T_2, D_2T_3,$ D_3T_1, D_3T_2, D_3T_3	48

Es folgt nun zunächst ein recht allgemeiner Teil, in dem wir den ersten Hauptsatz der Invariantentheorie für die symmetrische Gruppe S_n (vgl. Definition 30) vorstellen wollen (Satz 45 auf Seite 62). Eine weitere wichtige Aussage, der Endlichkeitssatz der Invarianten endlicher Gruppen, wird sich mit Hilfe des Hauptsatzes ebenfalls beweisen lassen (Satz 46 auf Seite 65). Danach werden wir zur eigentlichen Konstruktion der Integritätsbasen für die 32 Kristallklassen unter ihren jeweiligen Symmetriegruppen kommen und für diese Anwendung Spezialfälle der nun folgenden allgemeinen Aussagen formulieren (Sätze 47, 48 und 49).

3.4 Allgemeine Aussagen zu Integritätsbasen

Wir geben hier den ersten Hauptsatz der Invariantentheorie ([Wey39], S. 36) in einer modernen Version ([Smi95], S. 68) wieder, welcher die Rechtfertigung der später verwendeten Sätze 47 und 48 bildet. Direkt im Anschluss folgt dann aus dem Hauptsatz der Endlichkeitssatz der Invarianten endlicher Gruppen von Noether ([Noe16]). Körper \mathbb{F} seien im Folgenden immer von Charakteristik 0.

3.4.1 Symmetrische Polynome

Definition 30 (Permutation). Sei $0 < n \in \mathbb{N}$ und die Abbildung

$$\sigma : \mathbb{N} \supset \{1, \dots, n\} \longrightarrow \{1, \dots, n\} \subset \mathbb{N}$$

$$k \longmapsto \sigma(k)$$

bijektiv. Die Menge aller σ bildet mit der Komposition als Gruppenstruktur und Identität als neutrales Element eine Gruppe. Jedes σ heißt *Permutation*, und die gebildete Gruppe wird mit S_n bezeichnet und *symmetrische Gruppe* genannt.

Definition 31 (symmetrisches Polynom). Sei \mathbb{F} ein Körper (z. B. \mathbb{R}) und $\mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$, $n \in \mathbb{N}$ der Polynomring in n Variablen mit Koeffizienten in \mathbb{F} . Ein Polynom

$$f(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$$

heißt *symmetrisch*, wenn

$$f(x_1, \dots, x_n) = f(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(n)})$$

für alle $\sigma \in S_n$.

Beispiele 32. Einfache Beispiele für symmetrische Polynome sind

- $p(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 \in \mathbb{F}[x_1, x_2]$, allgemeiner die Potenzsummen
- $p_m(x_1, \dots, x_n) = x_1^m + \dots + x_n^m = \sum_{i=1}^n x_i^m \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$, $m \in \mathbb{N}_0$
- Das Produkt $x_1 \cdots x_n \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$

Bemerkung 33. Die in x_1, \dots, x_n symmetrischen Polynome bilden einen Unterring

$$\mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]^{S_n} := \{f \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n] : f \text{ symmetrisch}\} \subset \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n].$$

Denn wenn zwei Polynome $f, g \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$ symmetrisch sind, dann sind auch $f + g$ und $f \cdot g$ symmetrisch. Der Unterring besitzt auch ein neutrales Element 1, da die konstanten Polynome offensichtlich symmetrisch sind. Wie sich dieser Unterring beschreiben lässt, ist Gegenstand des nächsten Abschnitt 3.4.2.

3.4.2 Die elementarsymmetrischen Polynome

Wir führen eine neue Variable X ein, und betrachten die Gleichung

$$\Psi(X) = \prod_{i=1}^n (1 - x_i X) = \sum_{i=0}^n (-1)^i \varphi_i(x_1, \dots, x_n) X^i \quad (3.14)$$

welche $\varphi_i(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$ definiert. Äquivalent können wir φ_i mit der Gleichung

$$\prod_{i=1}^n (X + x_i) = \sum_{i=0}^n \varphi_i X^{n-i} \quad (3.15)$$

definieren.

Beispiel 34. Sei $n = 2$, dann folgt durch Auflösen von

$$\prod_{i=1}^2 (1 - x_i X) = \sum_{i=0}^2 (-1)^i \varphi_i(x_1, x_2) X^i$$

$$\Leftrightarrow 1 - x_1 X - x_2 X + x_1 x_2 X = 1 \varphi_0(x_1, x_2) - \varphi_1(x_1, x_2) X + \varphi_2(x_1, x_2) X^2$$

nach $\varphi_0(x_1, x_2)$, $\varphi_1(x_1, x_2)$ und $\varphi_2(x_1, x_2)$, dass

$$\varphi_0(x_1, x_2) = 1, \quad \varphi_1(x_1, x_2) = x_1 + x_2, \quad \text{und} \quad \varphi_2(x_1, x_2) = x_1 x_2.$$

φ_0 , φ_1 und φ_2 sind offensichtlich symmetrisch. Für beliebiges n gilt:

$$\begin{aligned} \varphi_0(x_1, \dots, x_n) &= 1 \\ \varphi_1(x_1, \dots, x_n) &= x_1 + \dots + x_n = \sum_{i=1}^n x_i \\ \varphi_2(x_1, \dots, x_n) &= x_1 x_2 + x_1 x_3 + \dots + x_{n-1} x_n = \sum_{0 < i < j \leq n} x_i x_j \\ &\vdots \\ \varphi_k(x_1, \dots, x_n) &= \sum_{0 < i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n} x_{i_1} \dots x_{i_k} \\ &\vdots \\ \varphi_n(x_1, \dots, x_n) &= x_1 x_2 \dots x_n = \prod_{i=1}^n x_i \end{aligned}$$

Definition 35. Die durch Gleichung (3.14) bzw. Gleichung (3.15) definierten Polynome φ_i für $0 \leq i \leq n$ nennt man *elementarsymmetrische Polynome*.

3.4.2.1 Newtons Identität

Die Potenzsummen $p_m(x_1, \dots, x_n) = x_1^m + \dots + x_n^m$ sind symmetrisch. Eine Formel die auf Isaac Newton zurückgeht zeigt, wie sich $p_m(x_1, \dots, x_n)$ in den elementarsymmetrischen Polynomen ausdrücken lässt. Um diese Formel zu bekommen, nehme man die logarithmische Ableitung⁴ der Funktion Ψ (vgl.

⁴siehe etwa [Wal99], S. 249

Gleichung (3.14) auf Seite 51):

$$-\frac{\Psi'(X)}{\Psi(X)} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{1 - x_i X} = p_1 + p_2 X + p_3 X^2 + \dots$$

Durch ausmultiplizieren erhalten wir

$$\Psi'(X) = -\Psi(X)(p_1 + p_2 X + p_3 X^2 + \dots)$$

und durch Koeffizientenvergleich erhält man

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= p_1 \\ 2\varphi_2 &= p_1\varphi_1 - p_2 \\ 3\varphi_3 &= p_1\varphi_2 - p_2\varphi_1 + p_3 \\ &\vdots \\ k\varphi_k &= \sum_{i=1}^k (-1)^{i-1} p_i \varphi_{k-i} \\ &\vdots \end{aligned} \tag{3.16}$$

was sich für $\varphi_0 = 1$ induktiv nach p_i auflösen lässt. Auf diese Weise erhält man für p_i eine Darstellung in den elementarsymmetrischen Polynomen. Die allgemeine Formel (3.16) wird oft als *Newtons Identität* bezeichnet.

Die Tatsache, dass sich die Potenzsummen $p_m(x_1, \dots, x_n)$ in den elementarsymmetrischen Polynomen ausdrücken lassen, ist ein Spezialfall des folgenden Satzes 38.

3.4.2.2 Der Fundamentalsatz über symmetrische Polynome

Definition 36 (Halbordnung). Sei L eine Menge. Eine *Halbordnung* auf L ist eine Relation \preceq wenn für alle $a, b, c \in L$, die folgenden drei Eigenschaften erfüllt sind:

- (i) $a \preceq a$ (Reflexivität)
- (ii) $a \preceq b$ und $b \preceq a \Rightarrow a = b$ (Antisymmetrie)
- (iii) $a \preceq b$ und $b \preceq c \Rightarrow a \preceq c$ (Transitivität)

Beispiele 37. Beispiele für Halbordnungen sind:

- Die Teilmengenrelation \subseteq in einem System von Mengen. Sei L eine Menge von Mengen. Dann gilt für alle $A, B, C \in L$

- (i) $A \subseteq A$
 - (ii) Wenn $A \subseteq B$ und $B \subseteq A \Rightarrow A = B$
 - (iii) Wenn $A \subseteq B \subseteq C \Rightarrow A \subseteq C$
- Die Teilerbeziehung $|$ auf \mathbb{N} . Für alle $a, b, c \in \mathbb{N}$ gilt
 - (i) $a|a$ (a teilt a)
 - (ii) $a|b$ und $b|a \Rightarrow a = b$
 - (iii) $a|b$ und $b|c \Rightarrow a|c$

Satz 38. *Jedes symmetrische Polynom*

$$f(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$$

kann als Polynom in den elementarsymmetrischen Polynomen geschrieben werden. Anders ausgedrückt, es gilt:

$$\mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]^{S_n} = \mathbb{F}[\varphi_1, \dots, \varphi_n]$$

Beweis. Dieser Beweis folgt [Smi95]. Wir machen uns die *lexikographische Ordnung* auf Monomen zu Nutze. Wir definieren eine Halbordnung⁵ \prec auf Monomen durch die Festlegung:

$$x_1^{a_1} \cdots x_n^{a_n} \prec x_1^{b_1} \cdots x_n^{b_n} \Leftrightarrow b_j - a_j > 0 \quad \text{und} \quad b_i - a_i = 0 \quad \forall i < j$$

(„wenn die erste Differenz $b_j - a_j$, welche ungleich 0 ist, positiv ist“. Es gilt z. B. $x_1^2 x_3^{17} \prec x_1^2 x_2^4$).

Wir machen vollständige Induktion über die lexikographische Ordnung. Sei $f(x_1, \dots, x_n)$ ein symmetrisches Polynom. Die Operation der symmetrischen Gruppe S_n wirft homogene Polynome (vgl. Definition 25 auf Seite 42) auf homogene Polynome vom selben Grad. Ein Polynom f ist daher genau dann symmetrisch, wenn jede seiner homogenen Komponenten symmetrisch ist.⁶ Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir daher annehmen, dass f homogen ist.

Sei $x_1^{a_1} \cdots x_n^{a_n}$ das größte (bzgl. der lexikographischen Ordnung) Monom mit von Null verschiedenem Koeffizient a von $f(x_1, \dots, x_n)$. Dann gilt $a_{i+1} \leq a_i$ für alle $i \in \{1, \dots, n-1\}$. Angenommen dies wäre nicht der Fall, dann gäbe es ein kleinstes i , so dass $a_{i+1} > a_i$. Die Transposition $\tau(i, i+1)$, welche i mit

⁵auch partielle Ordnung

⁶Jedes Polynom lässt sich offensichtlich als Summe homogener Polynome, die homogenen Komponenten des Polynoms, schreiben.

$i + 1$ vertauscht, ist Element von S_n , und weil f unter S_n invariant ist (f ist symmetrisch), müsste dann auch das Monom $x_1^{a_1} \cdots x_i^{a_i+1} x_{i+1}^{a_i} \cdots x_n^{a_n}$ mit Koeffizient a in f vorkommen. Dieses Monom ist in der lexikographischen Ordnung aber größer als $x_1^{a_1} \cdots x_n^{a_n}$, was einen Widerspruch darstellt, da $x_1^{a_1} \cdots x_n^{a_n}$ ja das größte Monom von f ist. Wir machen nun von der Tatsache Gebrauch, dass unser größtes Monom $x_1^{a_1} \cdots x_n^{a_n}$ von f auch das größte Monom von

$$\varphi_1^{a_1-a_2} \varphi_2^{a_2-a_3} \cdots \varphi_n^{a_n}$$

ist (das Produkt ist möglich wegen $a_{i+1} \leq a_i$ für alle i). Das Polynom

$$f(x_1, \dots, x_n) - a \varphi_1^{a_1-a_2} \varphi_2^{a_2-a_3} \cdots \varphi_n^{a_n} \quad (3.17)$$

hat als größtes Monom eines, welches kleiner ist als das größte Monom von f . (3.17) ist auch symmetrisch. Dieser Prozess lässt sich nun mit (3.17) wiederholen und mit dem daraus resultierenden Polynom und so weiter. Schließlich wird man das 0-Polynom erreichen und durch Umsortierung der resultierenden Gleichung erhält man für $f(x_1, \dots, x_n)$ einen Ausdruck in den elementarsymmetrischen Polynomen.⁷ \square

Bemerkung 39. Die Darstellung eines symmetrischen Polynoms als Polynom in den elementarsymmetrischen Polynomen ist eindeutig (vgl. [Lan05], S. 191).

3.4.3 Der Polarisierungsprozess

Definition 40 (Darstellung einer Gruppe). Es sei G eine Gruppe, \mathbb{F} ein Körper und V ein n -dimensionaler \mathbb{F} -Vektorraum. Eine Abbildung

$$\rho : \begin{array}{l} G \longrightarrow \mathrm{GL}(n, \mathbb{F}) \\ g \longmapsto \rho(g) \end{array}$$

heißt *Darstellung der Gruppe G auf V* wenn gilt:

$$\rho(gh) = \rho(g)\rho(h) \quad \forall g, h \in G$$

Es sei G eine endliche Gruppe, \mathbb{F} ein Körper, V ein endlichdimensionaler \mathbb{F} -Vektorraum und $\rho : G \longrightarrow \mathrm{Aut}(V) = \mathrm{GL}(V)$ ein Gruppenhomomorphismus, also eine Darstellung von G auf V .

Für einen \mathbb{F} -Vektorraum V meinen wir mit $\mathbb{F}[V]$ die *Algebra der Polynome* auf V , welche wir als die symmetrische Algebra auf $V^* = \mathrm{Hom}_{\mathbb{F}}(V, \mathbb{F})$, dem

⁷Ein alternativer Beweis findet sich in [Lan05], S. 191 ff.

Dualraum von V , definieren.⁸ Anders gesagt, wenn $\dim(V) = n$ und x_1, \dots, x_n eine Basis des Dualraums V^* ist, dann gilt

$$\mathbb{F}[V] = \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n] = \mathbb{F} \oplus V^* \oplus S^2(V^*) \oplus S^3(V^*) \oplus \dots$$

wobei $S^m(V^*)$ die m -te symmetrische Potenz von V^* ist, welche aus den homogenen Polynomen von Grad m in x_1, \dots, x_n besteht.

Sei $V = \mathbb{F}^n$ n -dimensionaler Vektorraum. S_n operiert auf V durch Permutation der Basis $\{x_1, \dots, x_n\}$. Wir bezeichnen diese Darstellung von S_n mit $\tau : S_n \hookrightarrow \text{GL}(n, \mathbb{F})$. Für jedes $k \in \mathbb{N}$ gibt es die Darstellung

$$\tau_k : S_n \hookrightarrow \text{GL}(kn, \mathbb{F})$$

welche in Matrixform durch

$$\tau_k(s) = \begin{pmatrix} \tau(s) & 0 & \cdots \\ 0 & \tau(s) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \tau(s) \end{pmatrix} \quad s \in S_n$$

dargestellt wird. Man stelle sich vor, dass jede der Variablen x_1, \dots, x_n durch eine k -dimensionale Vektor-Variable ersetzt wird. Wenn wir uns den Vektorraum \mathbb{F}^{kn} als den Raum der $k \times n$ -Matrizen vorstellen, dann operiert S_n mittels τ_k auf \mathbb{F}^{kn} durch Permutation der Spalten der Matrizen. Sei

$$\{x_{i,j} : i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n\}$$

die Basis von \mathbb{F}^{kn} , wobei $x_{i,j}$ jene Matrix ist, welche eine 1 im (i, j) -Eintrag hat und 0 überall sonst. Auf diese Weise ergibt die Darstellung τ_k eine Operation der symmetrischen Gruppe S_n auf dem Polynomring

$$\mathbb{F}[x_{i,j} : i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n].$$

Wir fragen uns nun, was die Struktur von

$$\mathbb{F}[x_{i,j} : i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n]^{S_n}$$

⁸Dies ist der formale Weg um die Polynome als Polynomfunktionen aufzufassen. Da wir für \mathbb{F} Charakteristik 0 vorausgesetzt haben, sind die Polynomfunktionen $\mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}$ auch eindeutig mit den Polynomen identifizierbar. Es ist daher meistens ausreichend sich die Elemente $f \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$ als Polynomfunktionen $f : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}$ vorzustellen. [Smi95] berücksichtigt auch endliche Körper.

ist. Dies ist auch die Frage, welche der weiter unten folgende Satz 45 beantworten wird.

Um die Invarianten von $\mathbb{F}[x_{i,j} : i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n]$ unter S_n beschreiben zu können führen wir die folgende Gleichung⁹ ein:

$$\prod_{j=1}^n (1 + u_1 x_{1,j} + \dots + u_k x_{k,j}) = \sum_{B=(b_1, \dots, b_k)} \sigma_B(x_{i,j})(u_1^{b_1} \dots u_k^{b_k}) \quad (3.18)$$

welche als Element von $\mathbb{F}[x_{i,j} : i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n][u_1, \dots, u_k]$ aufgefasst werden kann. Gleichung (3.18) definiert $\sigma_B \in \mathbb{F}[x_{i,j} : i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n]^{S_n}$, mit $B = (b_1, \dots, b_k)$, wobei $0 \leq b_1, \dots, b_k \leq n$ und $b_1 + \dots + b_k \leq n$. Die Funktion σ_B ist die B -te elementarsymmetrische Funktion in den Vektorvariablen $\{x_{i,j} : i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n\}$. [Wey39] (S. 37) bezeichnet diese Polynome als die *polarisierten elementarsymmetrischen Polynome*.

Beispiel 41. Die polarisierten elementarsymmetrischen Polynome sind im Folgenden für $k = 2$ und $n = 4$ aufgelistet. Dabei steht der zweite Index j von

⁹Gleichung (3.18) ist auch unter dem Namen *Galoissche Resolvente* ([Noe16]) bekannt.

$x_{i,j}$ für die Vektor-Variable und i für die Komponente dieser Vektor-Variable.

$$\begin{aligned}
\sigma_{(0,0)} &= 1 \\
\sigma_{(1,0)} &= x_{(1,1)} + x_{(1,2)} + x_{(1,3)} + x_{(1,4)} \\
\sigma_{(0,1)} &= x_{(2,1)} + x_{(2,2)} + x_{(2,3)} + x_{(2,4)} \\
\sigma_{(2,0)} &= x_{(1,1)}x_{(1,2)} + x_{(1,1)}x_{(1,3)} + x_{(1,1)}x_{(1,4)} + x_{(1,2)}x_{(1,3)} \\
&\quad + x_{(1,2)}x_{(1,4)} + x_{(1,3)}x_{(1,4)} \\
\sigma_{(0,2)} &= x_{(2,1)}x_{(2,2)} + x_{(2,1)}x_{(2,3)} + x_{(2,1)}x_{(2,4)} + x_{(2,2)}x_{(2,3)} \\
&\quad + x_{(2,2)}x_{(2,4)} + x_{(2,3)}x_{(2,4)} + \\
\sigma_{(1,1)} &= x_{(1,1)}x_{(1,2)} + x_{(1,1)}x_{(1,3)} + x_{(1,1)}x_{(1,4)} + x_{(1,2)}x_{(2,1)} + x_{(1,2)}x_{(2,3)} \\
&\quad + x_{(1,2)}x_{(2,4)} + x_{(1,3)}x_{(2,1)} + x_{(1,3)}x_{(2,2)} + x_{(1,3)}x_{(2,4)} + x_{(1,4)}x_{(2,1)} \\
&\quad + x_{(1,4)}x_{(2,2)} + x_{(1,4)}x_{(2,3)} \\
\sigma_{(3,0)} &= x_{(1,1)}x_{(1,2)}x_{(1,3)} + x_{(1,1)}x_{(1,2)}x_{(1,4)} + x_{(1,1)}x_{(1,3)}x_{(1,4)} + x_{(1,2)}x_{(1,3)}x_{(1,4)} \\
\sigma_{(0,3)} &= x_{(2,1)}x_{(2,2)}x_{(2,3)} + x_{(2,1)}x_{(2,2)}x_{(2,4)} + x_{(2,1)}x_{(2,3)}x_{(2,4)} + x_{(2,2)}x_{(2,3)}x_{(2,4)} \\
\sigma_{(2,1)} &= x_{(1,1)}x_{(1,2)}x_{(2,3)} + x_{(1,1)}x_{(1,2)}x_{(2,4)} + x_{(1,1)}x_{(1,3)}x_{(2,2)} + x_{(1,1)}x_{(1,3)}x_{(2,4)} \\
&\quad + x_{(1,1)}x_{(1,4)}x_{(2,2)} + x_{(1,1)}x_{(1,4)}x_{(2,3)} + x_{(1,2)}x_{(1,3)}x_{(2,1)} + x_{(1,2)}x_{(1,3)}x_{(2,4)} \\
&\quad + x_{(1,2)}x_{(1,4)}x_{(2,1)} + x_{(1,2)}x_{(1,4)}x_{(2,3)} + x_{(1,3)}x_{(1,4)}x_{(2,1)} + x_{(1,3)}x_{(1,4)}x_{(2,2)} \\
\sigma_{(1,2)} &= x_{(1,1)}x_{(2,2)}x_{(2,3)} + x_{(1,1)}x_{(2,2)}x_{(2,4)} + x_{(1,1)}x_{(2,3)}x_{(2,4)} + x_{(1,2)}x_{(2,1)}x_{(2,3)} \\
&\quad + x_{(1,2)}x_{(2,1)}x_{(2,4)} + x_{(1,2)}x_{(2,3)}x_{(2,4)} + x_{(1,3)}x_{(2,1)}x_{(2,2)} + x_{(1,3)}x_{(2,1)}x_{(2,4)} \\
&\quad + x_{(1,3)}x_{(2,2)}x_{(2,4)} + x_{(1,4)}x_{(2,1)}x_{(2,2)} + x_{(1,4)}x_{(2,1)}x_{(2,3)} + x_{(1,4)}x_{(2,2)}x_{(2,3)} \\
\sigma_{(4,0)} &= x_{(1,1)}x_{(1,2)}x_{(1,3)}x_{(1,4)} \\
\sigma_{(0,4)} &= x_{(2,1)}x_{(2,2)}x_{(2,3)}x_{(2,4)} \\
\sigma_{(3,1)} &= x_{(1,1)}x_{(1,2)}x_{(1,3)}x_{(2,4)} + x_{(1,1)}x_{(1,2)}x_{(1,4)}x_{(2,3)} \\
&\quad + x_{(1,1)}x_{(1,3)}x_{(1,4)}x_{(2,2)} + x_{(1,2)}x_{(1,3)}x_{(1,4)}x_{(2,1)} \\
\sigma_{(1,3)} &= x_{(1,1)}x_{(2,2)}x_{(2,3)}x_{(2,4)} + x_{(1,2)}x_{(2,1)}x_{(2,3)}x_{(2,4)} \\
&\quad + x_{(1,3)}x_{(2,1)}x_{(2,2)}x_{(2,4)} + x_{(1,4)}x_{(2,1)}x_{(2,2)}x_{(2,3)} \\
\sigma_{(2,2)} &= x_{(1,1)}x_{(1,2)}x_{(2,3)}x_{(2,4)} + x_{(1,1)}x_{(1,3)}x_{(2,2)}x_{(2,4)} + x_{(1,1)}x_{(1,4)}x_{(2,2)}x_{(2,3)} \\
&\quad + x_{(1,2)}x_{(1,3)}x_{(2,1)}x_{(2,4)} + x_{(1,2)}x_{(1,4)}x_{(2,1)}x_{(2,3)} + x_{(1,3)}x_{(1,4)}x_{(2,1)}x_{(2,2)}
\end{aligned}$$

3.4.4 Der erste Hauptsatz der Invariantentheorie

Es sei $\rho : G \hookrightarrow \text{GL}(n, \mathbb{F})$ die Darstellung einer endlichen Gruppe G . Weitere Darstellungen von G lassen sich durch ρ auf vielfältige Art und Weise

konstruieren. Sei z. B. $k \in \mathbb{N}$, dann existiert die Darstellung

$$\underbrace{\rho \oplus \cdots \oplus \rho}_{k\text{-mal}} = \bigoplus_k \rho : G \hookrightarrow \text{GL}(nk, \mathbb{F}),$$

welche die k -fache direkte Summe von ρ selbst ist. In einer Matrixnotation stellt sich diese Darstellung wie folgt dar:

$$\bigoplus_k \rho(g) = \begin{pmatrix} \rho(g) & 0 \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \rho(g) \end{pmatrix} \quad \forall g \in G$$

Sei nun $V = \mathbb{F}^n$. Wir identifizieren \mathbb{F}^{nk} mit

$$\bigoplus_k V = \underbrace{V \oplus \cdots \oplus V}_{k\text{-mal}},$$

dann ist die Operation von G auf \mathbb{F}^{nk} durch

$$\bigoplus_k \rho(g)(v_1, \dots, v_k) = (\rho(g)(v_1), \dots, \rho(g)(v_k)) \quad \forall g \in G, \quad (v_1, \dots, v_k) \in \bigoplus_k V$$

gegeben. Wir stellen uns nun folgende Frage: Sei eine Integritätsbasis für $\mathbb{F}[V]^G$ gegeben, können wir dann aus dieser Integritätsbasis eine Integritätsbasis für $\mathbb{F}[\bigoplus_k V]^G$ konstruieren? Dies wollen wir auf den folgenden Seiten für $G = S_n$ beantworten.

Definition 42 (äquivariante Abbildung). Sei G eine Gruppe und X, Y Mengen, auf welchen eine Operation

$$\begin{aligned} G \times X &\longrightarrow X \\ \mu_X : (g, x) &\longmapsto \mu_X(g, x) \end{aligned}$$

(analog μ_Y für Y) definiert ist. Eine Abbildung $f : X \rightarrow Y$ heißt G -äquivariant wenn gilt:

$$f(\mu_X(g, x)) = \mu_Y(g, f(x)).$$

Eine äquivalente Formulierung ist: $f : X \rightarrow Y$ heißt G -äquivariant wenn folgendes Diagramm kommutiert:

$$\begin{array}{ccc} X & \xrightarrow{\mu_X} & X \\ \downarrow f & & \downarrow f \\ Y & \xrightarrow{\mu_Y} & Y \end{array}$$

Durch die Definition der Darstellung $\bigoplus_k \rho$ sind die beiden Abbildungen

$$\Delta : \begin{array}{l} V \longrightarrow \bigoplus_k V \\ v \longmapsto (v, \dots, v) \end{array}$$

und

$$\Gamma : \begin{array}{l} \bigoplus_k V \longrightarrow V \\ (v_1, \dots, v_k) \longmapsto \sum_{i=1}^k v_i \end{array}$$

G -äquivariant, d. h. $\Delta(\rho(g)(v)) = \bigoplus_k \rho(\Delta(v))$ und

$$\Gamma \left(\bigoplus_k \rho(g)(v_1, \dots, v_k) \right) = \rho(g)(\Gamma(v_1, \dots, v_k)).$$

Δ und Γ induzieren Abbildungen Δ^* und Γ^* von Polynomringen, mit

$$\Delta^* : \begin{array}{l} \mathbb{F}[\bigoplus_k V]^G \subset \mathbb{F}[\bigoplus_k V] \longrightarrow \mathbb{F}[V] \supset \mathbb{F}[V]^G \\ f \longmapsto \Delta^*(f) \end{array}$$

wobei $\Delta^*(f)(v) = f(v, \dots, v)$ und

$$\Gamma^* : \begin{array}{l} \mathbb{F}[V]^G \subset \mathbb{F}[V] \longrightarrow \mathbb{F}[\bigoplus_k V] \supset \mathbb{F}[\bigoplus_k V]^G \\ h \longmapsto \Gamma^*(h) \end{array}$$

wobei $\Gamma^*(h)(v_1, \dots, v_k) = h(v_1 + \dots + v_k)$, welche uns ein Mittel in die Hand geben mit dem wir Invarianten in $\mathbb{F}[\bigoplus_k V]^G$ aus Invarianten in $\mathbb{F}[V]^G$ konstruieren können.

Die symmetrische Gruppe S_k operiert auf $\bigoplus_k V$ durch Permutation der Faktoren, und damit operiert sie auch auf $\mathbb{F}[\bigoplus_k V]$. Wenn S_k auf V trivial operiert, d. h. $\sigma(v) = v, \forall \sigma \in S_k, v \in V$, dann sind Δ und Γ auch S_k -äquivariant. Die Komposition $\Gamma \circ \Delta$ ist nichts weiter als eine Multiplikation mit k .¹⁰ Damit folgt $\Delta^* \circ \Gamma^*(f) = k^d f$, mit $d = \deg(f)$.

¹⁰ $\Gamma \circ \Delta(v) = \Gamma(v, \dots, v) = v + \dots + v = kv$

Definition 43 (multihomogenes Polynom). Ein Polynom $f \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]$ heißt *multihomogen von Multigrad* (d_1, \dots, d_k) , wenn gilt:

$$f(v_1, \dots, v_{i-1}, \lambda v_i, v_{i+1}, \dots, v_k) = \lambda^{d_i} f(v_1, \dots, v_i, \dots, v_k) \\ \forall \lambda \in \mathbb{F}, \quad (v_1, \dots, v_k) \in \bigoplus_k V$$

Sei nun x_1, \dots, x_n eine Basis von V^* . Wenn wir $x_{i,1}, \dots, x_{i,n}$ für jene Vektoren schreiben, welche eine Basis für den i -ten Faktor von $\bigoplus_k V$ bilden, dann bilden die Monome in $x_{i,1}, \dots, x_{i,n}$ von Grad d eine Basis der multihomogenen Polynome von Multigrad $(0, \dots, 0, d, 0, \dots, 0)$, wobei d an der i -ten Stelle steht. Damit folgt, dass die Monome

$$x_{1,1}^{d_{1,1}} \cdots x_{1,n}^{d_{1,n}} x_{2,1}^{d_{2,1}} \cdots x_{2,n}^{d_{2,n}} \cdots x_{k,1}^{d_{k,1}} \cdots x_{k,n}^{d_{k,n}}$$

eine Basis des Raums der multihomogenen Polynome von Multigrad (d_1, \dots, d_k) bilden, wobei $d_i = d_{i,1} + \dots + d_{i,n}$. Alle Monome dieser Art mit $d_1 + \dots + d_k = d$ bilden eine Basis der homogenen Polynome von Grad d in $\mathbb{F}[\bigoplus_k V]$. Dies bedeutet, dass wir jedes homogene Polynom $h \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]$ als eine Summe von multihomogenen Polynomen von Multigrad (d_1, \dots, d_k) , welche $d_1 + \dots + d_k = d$ erfüllen, schreiben können.

Definition 44. Schreiben wir für $h \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]$

$$h = \sum_{d_1 + \dots + d_k = d} h_{d_1, \dots, d_k}$$

wobei h_{d_1, \dots, d_k} multihomogen von Multigrad (d_1, \dots, d_k) ist, so nennen wir h_{d_1, \dots, d_k} die *Komponente von h mit Multigrad (d_1, \dots, d_k)* .

Sei nun $f \in \mathbb{F}[V]$ und

$$\Gamma^*(f) = \sum_{d_1 + \dots + d_k = \deg(f)} \Gamma^*(f)_{d_1, \dots, d_k}$$

die Dekomposition der Funktion $\Gamma^*(f)$ in seine multihomogenen Komponenten. $\Gamma^*(f)_{d_1, \dots, d_k} \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]$ heißt dann die (d_1, \dots, d_k) -*Polarisierung* von f und wird mit $\text{Pol}_{d_1, \dots, d_k}(f)$ notiert.

Für $h \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]$ multihomogen von Multigrad (d_1, \dots, d_k) und $g \in G$ ist gh wieder multihomogen von Multigrad (d_1, \dots, d_k) . Die multihomogenen Komponenten eines $h \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]^G$ sind daher invariant. Wenn $f \in \mathbb{F}[V]^G$ dann auch $\Gamma^*(f) \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]^G$ und damit

$$\text{Pol}_{(d_1, \dots, d_k)}(f) \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]^G \quad \forall (d_1, \dots, d_k) \quad \text{mit} \quad d_1 + \dots + d_k = \deg(f).$$

Die Polarisierungen von f liegen im Allgemeinen aber nicht im Bild von Γ^* und liefern uns somit neue Invarianten in $\mathbb{F}[\bigoplus_k V]^G$

Die polarisierten elementarsymmetrischen Polynome σ_{d_1, \dots, d_k} , welche uns aus Gleichung (3.18) bekannt sind, entsprechen den Polarisierungen $\text{Pol}_{(d_1, \dots, d_k)}(\varphi_i)$ der elementarsymmetrischen Polynome $\varphi_1, \dots, \varphi_n$.

Satz 45 (Erster Hauptsatz der Invariantentheorie für S_n). *Seien $n, k \in \mathbb{N}$, \mathbb{F} Körper von Charakteristik 0 und $\tau : S_n \hookrightarrow GL(n, \mathbb{F})$ die tautologische Darstellung von S_n als die Permutationsgruppe auf der kanonischen Basis von $V := \mathbb{F}^n$. Dann bilden die polarisierten elementarsymmetrischen Funktionen*

$$\left\{ \sigma_B : B = (b_1, \dots, b_k), b_1, \dots, b_k \in \mathbb{N}_0 \text{ und } \sum_{i=1}^k b_i \leq n \right\}$$

eine Integritätsbasis für

$$\mathbb{F}[\bigoplus_k V]^{S_n} = \mathbb{F}[x_{i,j} | 1 \leq i \leq k, 1 \leq j \leq n]^{S_n}$$

Beweis. Wir machen vollständige Induktion über n . Für $n = 1$ ist S_1 die triviale Gruppe und die Polarisierungen des elementarsymmetrischen Polynoms $\varphi_1 = x_1$ sind x_1, x_2, \dots, x_k , welche eine Basis von $\bigoplus_k V$ sind, wobei $V = \mathbb{F}$ Dimension 1 als Vektorraum über \mathbb{F} hat. Die Behauptung ist daher trivialerweise wahr.

Wir nehmen nun die Wahrheit der Behauptung für alle $0 < n' < n$ an. Sei x_1, \dots, x_n eine Basis von V^* (Dualraum von V) und setze

$$\tilde{V}^* := \text{Span}\{x_1, \dots, x_{n-1}\}.$$

Seien $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ die elementarsymmetrischen Polynome in x_1, \dots, x_n und setze

$$\tilde{\varphi}_i(x_1, \dots, x_{n-1}) = \begin{cases} \varphi_i(x_1, \dots, x_{n-1}, 0) & \text{für } i = 1, \dots, n-1 \\ 0 & \text{für } i = n \end{cases}$$

Die Polynome $\tilde{\varphi}_1, \dots, \tilde{\varphi}_{n-1}$ sind die elementarsymmetrischen Polynome in den Variablen x_1, \dots, x_{n-1} . Wir haben die folgenden Formeln, welche $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ mit $\tilde{\varphi}_1, \dots, \tilde{\varphi}_{n-1}$ in Zusammenhang setzen:

$$\begin{aligned}
\varphi_1 &= \tilde{\varphi}_1 + x_n \\
\varphi_2 &= \tilde{\varphi}_2 + x_n \tilde{\varphi}_1 \\
&\vdots \\
\varphi_{n-1} &= \tilde{\varphi}_{n-1} + x_n \tilde{\varphi}_{n-2} \\
\varphi_n &= x_n \tilde{\varphi}_{n-1}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Um dies nachvollziehen zu können betrachte die Definitionen

$$\begin{aligned}
\sum_{i+j=n} \varphi_i t^j &= \prod_{i=1}^n (t + x_i) \\
&= \left(\prod_{i=1}^{n-1} (1 + x_i t) \right) (1 + x_n t) \\
&= \left(\sum_{i+j=n-1} \tilde{\varphi}_i t^j \right) (1 + x_n t) \\
&= \sum_{i+j=n} (\tilde{\varphi}_i + x_n \tilde{\varphi}_{i-1}) t^j \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n][t]
\end{aligned}$$

aus denen man die obigen Formeln (3.19) durch Gleichsetzen der Koeffizienten von Potenzen von t erhält.

Die Formeln (3.19) lassen sich rekursiv nach $\tilde{\varphi}_1, \dots, \tilde{\varphi}_{n-1}$ auflösen:

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_1 &= \varphi_1 - x_n \\
\tilde{\varphi}_2 &= \varphi_2 - x_n \tilde{\varphi}_1 = \varphi_2 - x_n(\varphi_1 - x_n) \\
&\vdots \\
\tilde{\varphi}_{n-1} &= \varphi_{n-1} - x_n \tilde{\varphi}_{n-2} = \dots
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Anders gesagt, es existieren Formeln

$$\tilde{\varphi}_i = F_i(\varphi_1, \dots, \varphi_i, x_n) = \sum_{j=1}^i F_{i,j}(\varphi_1, \dots, \varphi_i) x_n^j$$

für $i = 1, \dots, n-1$. Durch Polarisierung dieser Formeln erhält man

$$\text{Pol}_D(\tilde{\varphi}_i) = \sum H_{D,A} x^A \tag{3.21}$$

wobei $D = (d_1, \dots, d_k)$, $i = d_1 + \dots + d_k$, $A = (a_1, \dots, a_k)$, $x^A = x_{1,n}^{a_1} \dots x_{k,n}^{a_k}$. $H_{D,A}$ ist ein Polynom in den polarisierten elementarsymmetrischen Polynomen $\varphi_1, \dots, \varphi_n$. $\text{Pol}_D(\tilde{\varphi}_i) = \tilde{\sigma}_D$ ist natürlich ein polarisiertes elementarsymmetrisches Polynom in $n - 1$ Variablen.

Sei nun $f \in \mathbb{F}[\bigoplus_k V]^{S_n}$ und schreibe f in der Form

$$f = \sum_A f_A x^A \quad (3.22)$$

wobei $f_A \in \mathbb{F}[\bigoplus_k \tilde{V}]$. Wir sehen, dass tatsächlich $f_A \in \mathbb{F}[\bigoplus_k \tilde{V}]^{S_{n-1}}$. Nach der Induktionsannahme kann f_A als Polynom in den polarisierten elementarsymmetrischen Polynomen $\tilde{\sigma}_D = \text{Pol}_D(\tilde{\varphi}_i)$, $D = (d_1, \dots, d_{n-1})$, wobei $d_1 + \dots + d_{n-1} = i$ für $1 \leq i \leq n - 1$, geschrieben werden. Wir wollen dies durch $f_A = L_A(\tilde{\sigma}_D)$ ausdrücken. Setzen wir dies in Gleichung (3.22) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} f &= \sum_A f_A x^A = \sum_{A,D} L_A(\tilde{\sigma}_D) x^A \\ &= \sum_A K_A x^A \end{aligned} \quad (3.23)$$

wobei K_A ein Polynom in den polarisierten elementarsymmetrischen Polynomen σ_B ist. Die Polynome f und K_A sind invariant unter S_n . Daher erhalten wir bei Mittelung¹¹ von Gleichung (3.23) über die von den zyklischen Permutationen von x_1, \dots, x_n erzeugte Untergruppe von S_n

$$f = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_A K_A x_{1,j}^{a_1} \dots x_{k,j}^{a_k}. \quad (3.24)$$

Polarisierung von Newtons Formel

$$x_1^a + \dots + x_n^a = s_a(\varphi_1, \dots, \varphi_n),$$

welche die Potenzsummen in den elementarsymmetrischen Polynomen ausdrückt, führt uns zu einer Formel, welche die Summe

$$\sum_{j=1}^n x_{1,j}^{a_1} \dots x_{k,j}^{a_k}$$

in den polarisierten symmetrischen Polynome von $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ ausdrückt. Setzen wir diese Formel in Gleichung (3.24) ein, so erhalten wir für f einen Ausdruck als Polynom in den polarisierten elementarsymmetrischen Polynomen σ_B von $\varphi_1, \dots, \varphi_n$. \square

¹¹siehe [Olv99], S. 74

3.4.5 Der Endlichkeitssatz der Invarianten endlicher Gruppen

Der folgende Satz wurde von Emmy Noether direkt bewiesen (siehe [Noe16]) und bildet die Rechtfertigung für Satz 49 auf Seite 67. Hermann Weyl ([Wey39], S. 275) führte den Beweis unter Verwendung des ersten Hauptsatzes der Invariantentheorie (vgl. Satz 45 auf Seite 62). Diese Variante geben auch wir hier wieder. Eine alternative Version des Satzes findet sich als Korollar in [Smi95] (Corollary 3.3.3, S. 63).

Satz 46. *Sei G eine endliche Gruppe linearer Transformationen, mit*

$$G = \{A_1, \dots, A_h\}, \quad A_k = (a_{ij}^{(k)}), \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad 1 \leq k \leq h.$$

Für $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ ist also

$$x_i^{(k)} = \sum_{j=1}^n a_{ij}^{(k)} x_j. \quad (3.25)$$

Sei nun $f(x) = f(x_1, \dots, x_n)$ eine polynomielle Invariante unter G , d. h.

$$f(x) = f(x^{(1)}) = \dots = f(x^{(h)}) = \frac{1}{h} \sum_{k=1}^h f(x^{(k)}) \quad (3.26)$$

wobei $x^{(k)} = (x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$ für $1 \leq k \leq h$.

Dann gilt: Eine Integritätsbasis für die Invarianten unter G besteht nur aus Invarianten, deren Grad die Gruppenordnung $|G| = h$ nicht übersteigt.

Beweis. Die rechte Seite von Gleichung (3.26) kann als Polynom in $n \cdot h$ unabhängigen Variablen aufgefasst werden. Als solches ist es symmetrisch in den n Vektor-Variablen

$$\begin{aligned} \zeta_1 &= (x_1^{(1)}, \dots, x_1^{(h)}) \\ &\vdots \\ \zeta_n &= (x_n^{(1)}, \dots, x_n^{(h)}) \end{aligned}$$

eines h -dimensionalen Vektorraumes. Aus dem ersten Hauptsatz der Invariantentheorie (vgl. Satz 45 auf Seite 62) folgt, dass sich Gleichung (3.26) in den polarisierten elementarsymmetrischen Polynomen ausdrücken lässt, welche sich als Koeffizienten σ_B in

$$\prod_{k=1}^h (u + u_1 x_1^{(k)} + \dots + u_n x_n^{(k)}) = \sum_{B=(b, b_1, \dots, b_n)} \sigma_B(x_i^{(k)}) u^b u_1^{b_1} \dots u_n^{b_n}$$

schreiben lassen (vgl. Gleichung (3.18) auf Seite 57), wobei $b + b_1 + \dots + b_n = h$. Die Polynome, welche sich ergeben, wenn man $\sigma_B(x_i^{(k)})$ unter Verwendung von Gleichung (3.25) auswertet, haben alle Grad $\leq h$. \square

3.5 Integritätsbasen für die 32 Kristallklassen

Wir werden in diesem Abschnitt für jede einzelne Kristallklasse eine irreduzible (aber nicht eindeutige) Integritätsbasis für einen symmetrischen Tensor zweiter Stufe angeben. Vorher werden wir noch einige theoretische Voraussetzungen für dieses Unterfangen klären. Die dargestellten Ergebnisse beruhen hauptsächlich auf [SR58]. Wir orientieren uns in den meisten Fällen aber mehr an der Arbeit von [Spe71].

3.5.1 Theoreme über Integritätsbasen

Wir möchten hier vier Sätze vorstellen, die wir bei der Konstruktion von Integritätsbasen für einen symmetrischen Tensor zweiter Stufe unter den 32 Symmetriegruppen, häufig benötigen werden. Die ersten beiden verhelfen uns zu Integritätsbasen für Polynome in zwei und drei Mengen von Variablen, welche invariant unter der symmetrischen Gruppe sind. Beide sind Spezialfälle des obigen Hauptsatzes. Der dritte Satz ermöglicht uns die Konstruktion von Invarianten für Polynome in drei Mengen von Variablen, welche invariant unter zyklischen Permutationen sind. Der vierte Satz unterstützt uns bei der Anwendung der ersten drei Sätze.

Satz 47. *Wir betrachten Polynome, die symmetrisch in den zwei Vektor-Variablen (y_1, \dots, y_n) und (z_1, \dots, z_n) sind, d. h. für ein Polynom f gilt*

$$f(y_1, \dots, y_n) = f(z_1, \dots, z_n).$$

Eine Integritätsbasis für Polynome dieser Art ist mit den folgenden Größen gegeben:

$$\begin{aligned} I_j &= (y_j + z_j)/2 & (1 \leq j \leq n) \\ I_{jk} &= (y_j z_k + y_k z_j)/2 & (1 \leq j, k \leq n) \end{aligned}$$

Satz 48. *Wir betrachten Polynome, die symmetrisch in den drei Vektor-Variablen (y_1, z_1) , (y_2, z_2) und (y_3, z_3) sind, d. h. ein Polynom f in diesen Variablen ist invariant unter der beliebigen Vertauschung dieser Variablenpärchen. Eine Integritätsbasis für Polynome dieser Art ist durch die folgenden*

Größen gegeben:

$$\begin{aligned}
J_1 &= y_1 + y_2 + y_3 \\
J_2 &= y_2y_3 + y_3y_1 + y_1y_2 \\
J_3 &= y_1y_2y_3 \\
J_4 &= z_1 + z_2 + z_3 \\
J_5 &= z_2z_3 + z_3z_1 + z_1z_2 \\
J_6 &= z_1z_2z_3 \\
J_7 &= y_2z_3 + y_3z_2 + y_3z_1 + y_1z_3 + y_1z_2 + y_2z_1 \\
J_8 &= y_1z_2z_3 + y_2z_3z_1 + y_3z_1z_2 \\
J_9 &= z_1y_2y_3 + z_2y_3y_1 + z_3y_1y_2
\end{aligned}$$

Die Sätze 47 und 48 sind Spezialfälle des obigen Hauptsatzes der Invariantentheorie.

Satz 49. *Wir betrachten Polynome in den Variablen $y_1, y_2, y_3, z_1, z_2, z_3$, welche unter zyklischer Permutation der Indizes 1, 2, 3 invariant sind. Eine Integritätsbasis für Polynome dieser Art ist durch die folgenden Größen gegeben:*

$$\begin{aligned}
K_1 &= y_1 + y_2 + y_3 & K_8 &= z_2y_3 + z_3y_1 + z_1y_2 \\
K_2 &= y_2y_3 + y_3y_1 + y_1y_2 & K_9 &= y_3y_2^2 + y_1y_3^2 + y_2y_1^2 \\
K_3 &= y_1y_2y_3 & K_{10} &= z_3z_2^2 + z_1z_3^2 + z_2z_1^2 \\
K_4 &= z_1 + z_2 + z_3 & K_{11} &= y_1z_2z_3 + y_2z_3z_1 + y_3z_1z_2 \\
K_5 &= z_2z_3 + z_3z_1 + z_1z_2 & K_{12} &= z_1y_2y_3 + z_2y_3y_1 + z_3y_1y_2 \\
K_6 &= z_1z_2z_3 & K_{13} &= y_1y_2z_2 + y_2y_3z_3 + y_3y_1z_1 \\
K_7 &= y_2z_3 + y_3z_1 + y_1z_2 & K_{14} &= z_1z_2y_2 + z_2z_3y_3 + z_3z_1y_1
\end{aligned}$$

Beweis. Der Beweis dieses Satzes folgt aus einem Theorem von Noether, welches besagt, dass der Grad der Elemente einer Integritätsbasis für Polynome, welche invariant unter einer endlichen Gruppe von Transformationen sind, die Gruppenordnung nicht übersteigen kann (vgl. Satz 46 auf Seite 65). Da die Gruppe der zyklischen Permutationen, welche hier betrachtet wird, von Ordnung drei ist, besteht die Integritätsbasis aus Polynomen deren Grad höchstens drei ist. Mit diesem Ergebnis ist es eine einfache Aufgabe, alle Polynome vom Grad drei oder weniger, welche die entsprechende Invarianzeigenschaft erfüllen, aufzuschreiben und die redundanten Elemente zu eliminieren. Diese Prozedur führt genau zum oben formulierten Resultat oder einem dazu äquivalenten ([Spe71], S. 309 ff). \square

Satz 50. Sei p ein Polynom in den Variablen x_1, \dots, x_n und I_1, I_2, \dots, I_m . Eine Integritätsbasis für Polynome p unter einer Gruppe von orthogonalen Transformationen, für welche I_1, I_2, \dots, I_m invariant sind, erhält man indem man zu I_1, I_2, \dots, I_m eine Integritätsbasis für Polynome in den Variablen x_1, \dots, x_n unter dieser Gruppe von Transformationen, hinzufügt.

Beweis. Sei $f(I_1, I_2, \dots, I_m, x_1, \dots, x_n)$ eine polynomielle Invariante. f ist dann eine Summe von Termen der Form

$$I_1^{r_1} I_2^{r_2} \cdots I_m^{r_m} \varphi(x_1, \dots, x_n) \quad (3.27)$$

wobei φ ein Polynom in seinen Argumenten ist. Nach Voraussetzung sind die I_k für $1 \leq k \leq m$ unter den betrachteten Transformationen invariant, also werden Terme in den I_k gegebenen Grades in Terme gleichen Grades in den I_k transformiert. Folglich müssen Ausdrücke der Form (3.27) Invarianten sein (vorausgesetzt sie enthalten alle Terme der gegebenen Grade in den I_k). Damit müssen aber auch die $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ Invarianten sein und können somit in den Elementen der Integritätsbasis für die x_1, \dots, x_n ausgedrückt werden. Damit ist der Satz bewiesen. \square

3.5.2 Invarianten eines symmetrischen Tensors

Wir nähern uns nun unserem Ziel, für jede der 32 Kristallklassen eine Integritätsbasis für polynomielle Invarianten eines symmetrischen Tensors zweiter Stufe angeben zu können. Dies soll nun auf den folgenden Seiten durchgeführt werden. Da es sich aber um viele einzelne, teilweise komplexe Rechnungen handelt, werden wir den Vorgang beispielhaft an einigen (weniger komplexen) Rechnungen vorführen. Im Detail unterscheiden sich die einzelnen Rechnungen für die 32 Kristallklassen, die grundlegende Vorgehensweise ist jedoch immer ähnlich. Für die vollständigen Resultate wird ggf. auf die Literatur verwiesen.

Wir bezeichnen den symmetrischen Tensor zweiter Stufe mit (a_{ij}) ($i, j = 1, 2, 3$) und fassen F als ein Polynom in den unabhängigen Komponenten von (a_{ij}) auf. Wir zeigen dann, wenn F invariant unter einer der für eine Kristallklasse charakteristischen Transformation ist (das sind genau die Elemente der entsprechenden Symmetriegruppe), F dann als ein Polynom in bestimmten anderen Polynomen in den Komponenten von (a_{ij}) geschrieben werden kann. Die Menge dieser bestimmten anderen Polynome bildet dann die gesuchte Integritätsbasis. Wenn wir uns auf eine bestimmte Kristallklasse beziehen, so werden wir dies der Einfachheit halber über die entsprechende Klassennummer (zweite Spalte) in Tabelle 3.2 auf Seite 47 tun. Sprechen wir also von „Klasse 12“ so meinen wir damit *Tetragonal-scalenohedral*.

Wir werden zunächst einige Beispiele (Klassen 1 und 2 bzw. 3–5) in aller Ausführlichkeit durchrechnen, um die Vorgehensweise zu erläutern. Später werden wir uns dann auf Tabellen beziehen müssen, da die Komplexität mancher Rechnungen den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde.

Wenn wir im Folgenden F schreiben, so ist immer $F(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, a_{13}, a_{12})$ gemeint.

3.5.2.1 Klassen 1 und 2 (Triklines System)

Sei F also eine polynomielle Invariante des symmetrischen Tensors zweiter Stufe

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3},$$

d. h. es muss gelten

$$F(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, a_{13}, a_{12}) = F(\tilde{a}_{11}, \tilde{a}_{22}, \tilde{a}_{33}, \tilde{a}_{23}, \tilde{a}_{13}, \tilde{a}_{12}).$$

Die geschweiften Komponenten \tilde{a}_{ij} bezeichnen dabei, wie im 2. Kapitel, die mit der jeweils für die Kristallklasse charakteristischen Transformationen transformierten Komponenten a_{ij} . Für die Klasse 1 ist das laut Tabelle 3.2 auf Seite 47 nur die identische Transformation I . Für Klasse 2 ist es zusätzlich noch die Transformation C (Inversion). Eine Begründung, warum wir diese beiden Klassen gemeinsam behandeln können, folgt etwas weiter unten. Wir werden die Rechnungen hier ausschreiben, damit die Vorgehensweise klar wird.

Um die einzelnen Transformationen durchzuführen, erinnern wir uns an das Transformationsgesetz für Tensoren zweiter Stufe in Gleichung (2.28) auf Seite 32. Da wir für die Transformationen Bezeichnungen mit tiefgestellten Indizes verwendet haben (siehe Tabelle 3.1 auf Seite 46) werden wir, wenn wir eine Komponente einer Transformation meinen, die Indizes oben schreiben. Beispielsweise meinen wir mit S_2^{21} die Komponente der Transformation S_2 welche sich in der zweiten Zeile und ersten Spalte befindet, in diesem Fall also $\frac{1}{2}\sqrt{3}$ (vgl. Tabelle 3.1 auf Seite 46). Für I ist klar, dass F invariant bleibt, denn es gilt für alle i, j

$$\tilde{a}_{ij} = \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 I^{im} I^{jn} a_{mn} = a_{ij} \quad (I^{im}, I^{jn} = 1 \text{ oder } 0) \quad (3.28)$$

Für die Transformation C gilt Gleichung (3.28) aber gleichermaßen, wenn man I durch C ersetzt ($I^{im}, I^{jn} = -1$ oder 0). Die transformierten Komponenten

haben also für die beiden Transformationen I und C den selben Wert. Dies ist auch der Grund, weshalb wir die beiden Kristallklassen 1 und 2 zusammen behandeln können.

Die Form von F ist somit keinen Einschränkungen unterworfen. Als Integrationsbasis erhalten wir damit:

$$a_{11}, \quad a_{22}, \quad a_{33}, \quad a_{23}, \quad a_{13}, \quad a_{12}$$

3.5.2.2 Klassen 3–5 (Monoklines System)

Wir wollen nun ein weiteres Beispiel ausführlich behandeln und dabei auch auf die Gruppenstruktur der für eine Kristallklasse charakteristischen Transformationen eingehen.

Wie bei den Klassen 1 und 2, interessiert uns zunächst welchen Einschränkungen die polynomielle Invariante F möglicherweise unterworfen ist. Dazu müssen wir als erstes \tilde{a}_{ij} für alle Transformationen, die die Klassen 3–5 charakterisieren, ausrechnen. Laut Tabelle 3.2 auf Seite 47 sind das I, C, R_1 und D_1 . Für I und C haben wir das schon im vorigen Beispiel getan. Es bleiben also R_1 und D_1 . Zu erst R_1 :

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{ij} &= \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 R_1^{im} R_1^{jn} a_{mn} \\ &= (R_1^{i1} R_1^{j1} a_{11} + R_1^{i1} R_1^{j2} a_{12} + R_1^{i1} R_1^{j3} a_{13}) + \\ &\quad (R_1^{i2} R_1^{j1} a_{21} + R_1^{i2} R_1^{j2} a_{22} + R_1^{i2} R_1^{j3} a_{23}) + \\ &\quad (R_1^{i3} R_1^{j1} a_{31} + R_1^{i3} R_1^{j2} a_{32} + R_1^{i3} R_1^{j3} a_{33}) \end{aligned}$$

Die einzelnen Komponenten des mit R_1 transformierten Tensors (a_{ij}) lassen sich nun leicht ablesen, da für jede Komponente alle Glieder der Summe bis auf eines gleich 0 sind:

$$\tilde{a}_{11} = a_{11}, \quad \tilde{a}_{22} = a_{22}, \quad \tilde{a}_{33} = a_{33}, \quad \tilde{a}_{23} = a_{23}, \quad \tilde{a}_{13} = -a_{13}, \quad \tilde{a}_{12} = -a_{12}$$

Diese Rechnung müssen wir mit D_1 ebenfalls durchführen:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{ij} &= \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 D_1^{im} D_1^{jn} a_{mn} \\ &= (D_1^{i1} D_1^{j1} a_{11} + D_1^{i1} D_1^{j2} a_{12} + D_1^{i1} D_1^{j3} a_{13}) + \\ &\quad (D_1^{i2} D_1^{j1} a_{21} + D_1^{i2} D_1^{j2} a_{22} + D_1^{i2} D_1^{j3} a_{23}) + \\ &\quad (D_1^{i3} D_1^{j1} a_{31} + D_1^{i3} D_1^{j2} a_{32} + D_1^{i3} D_1^{j3} a_{33}) \end{aligned}$$

Abermals lassen sich die transformierten Größen ablesen:

$$\tilde{a}_{11} = a_{11}, \quad \tilde{a}_{22} = a_{22}, \quad \tilde{a}_{33} = a_{33}, \quad \tilde{a}_{23} = a_{23}, \quad \tilde{a}_{13} = -a_{13}, \quad \tilde{a}_{12} = -a_{12}$$

Wir wollen zwei Dinge bemerken:

- (i) Wir stellen fest, dass die transformierten Größen für R_1 und D_1 übereinstimmen. Dies ist der Grund, warum wir die Klassen 3, 4 und 5 gemeinsam behandeln.
- (ii) Es kann keine weitere Transformation geben, denn die entsprechenden Mengen $\{I, R_1\}$ (Klasse 3), $\{I, D_1\}$ (Klasse 4) und $\{I, C, R_1, D_1\}$ (Klasse 5) bilden bereits die gesamte Symmetriegruppe der jeweiligen Kristallklasse. Um das zu zeigen, müssen wir nachweisen, dass diese Mengen bezüglich der Gruppenoperation (Matrixmultiplikation) abgeschlossen sind. Dies wollen wir tun:

$$\text{Klasse 3: } R_1^2 = R_1 R_1 = I$$

$$\text{Klasse 4: } D_1^2 = D_1 D_1 = I$$

$$\text{Klasse 5: } R_1 D_1 = C = D_1 R_1, \quad C^2 = I, \quad C R_1 = D_1 = R_1 C, \quad C D_1 = R_1 = D_1 C$$

Damit ist die Gruppenstruktur gezeigt. Gleiches gilt im Weiteren auch für die anderen Symmetriegruppen, wir wollen dies nicht für alle Fälle explizit nachrechnen.

Wenn F also eine polynomielle Invariante von (a_{ij}) unter den oben genannten Transformationen sein soll, dann ist F der Einschränkung

$$F(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, a_{13}, a_{12}) = F(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, -a_{13}, -a_{12}) \quad (3.29)$$

unterworfen. Auf der Suche nach einer Integritätsbasis kommen uns nun die weiter oben behandelten Sätze aus Abschnitt 3.5.1 auf Seite 66 zu Hilfe. Wir wählen nun in Satz 50 auf Seite 68

$$I_1 := a_{11}, \quad I_2 := a_{22}, \quad I_3 := a_{33}, \quad I_4 := a_{23}$$

diese sind, wie aus Gleichung (3.29) hervorgeht, bereits invariant unter allen vier Transformationen, d. h. unter den Symmetriegruppen, welche die Klassen 3–5 charakterisieren, wie es im Satz gefordert ist. Nach Satz 50 auf Seite 68 erhalten wir eine Integritätsbasis, indem wir zu den Invarianten I_1, \dots, I_4 eine Integritätsbasis für unter den betrachteten Gruppen invariante Polynome in den restlichen Variablen hinzufügen. Im vorliegenden Fall suchen wir also noch eine

Integritätsbasis für Polynome $F'(a_{13}, a_{12})$, welche unter den Transformationen R_1, D_1 und C invariant sind. Es gilt also die Einschränkung

$$F'(a_{13}, a_{12}) = F'(-a_{13}, -a_{12})$$

F' ist also symmetrisch in den Vektor-Variablen (a_{13}, a_{12}) und $(-a_{13}, -a_{12})$, ganz im Sinne von Satz 47 auf Seite 66. In diesem Satz wählen wir also

$$\begin{aligned}(y_1, \dots, y_n) &= (a_{13}, a_{12}) \\ (z_1, \dots, z_n) &= (-a_{13}, -a_{12})\end{aligned}$$

Als Ergebnis erhalten wir dann:

$$\begin{aligned}(y_1 + z_1)/2 &= (a_{13} - a_{13})/2 = 0 \\ (y_2 + z_2)/2 &= (a_{12} - a_{12})/2 = 0 \\ (y_1 z_1 + y_1 z_1)/2 &= (-a_{13} a_{13} - a_{13} a_{13})/2 = -a_{13}^2 \\ (y_2 z_2 + y_2 z_2)/2 &= (-a_{12} a_{12} - a_{12} a_{12})/2 = -a_{12}^2 \\ (y_1 z_2 + y_2 z_1)/2 &= (-a_{13} a_{12} - a_{13} a_{12})/2 = -a_{13} a_{12}\end{aligned}$$

Wir können 0 und konstante Faktoren weglassen, da wir diese ja im Zuge einer Polynombildung beliebig hinzufügen können. Die Integritätsbasis für F setzt sich nun aus den Invarianten I_1, \dots, I_4 sowie der Integritätsbasis für F' zusammen. Insgesamt erhalten wir also:

$$a_{11}, \quad a_{22}, \quad a_{33}, \quad a_{23}, \quad a_{13}^2, \quad a_{12}^2, \quad a_{13} a_{12} \quad (3.30)$$

Dies bedeutet: Jedes unter den den Transformationen R_1, D_1, C invariante Polynom

$$f(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, a_{13}, a_{12})$$

ist als ein Polynom

$$p(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{13} a_{12})$$

in den Elementen der Integritätsbasis ausdrückbar.

3.5.2.3 Klassen 6–8 (Rhombisches System)

Tabelle 3.2 auf Seite 47 entnehmen wir, dass zu den bisher behandelten Transformationen noch R_2, R_3, D_2 und D_3 hinzukommen. Etwaige Produkte müssen ebenfalls berücksichtigt werden. Wir müssten zunächst wieder für jede der

Transformationen R_2, R_3, D_2, D_3 die Größen \tilde{a}_{ij} berechnen. Dies ist eine uninteressante Aufgabe, die nur unnötig Platz wegnehmen würde. Wir übernehmen daher, auch im Hinblick auf die noch bevorstehenden Berechnungen der Klassen 9–32, Tabellen aus [SR58], wiedergegeben in Tabelle 3.3 auf der nächsten Seite und Tabelle 3.4 auf Seite 75.

Tabelle 3.3: Werte von \tilde{a}_{ij} berechnet mit Gleichung (2.28) auf Seite 32 für alle möglichen Transformationen welche sich aus Tabelle 3.1 auf Seite 46 ergeben.

Nr.	Transformation	\tilde{a}_{11}	\tilde{a}_{22}	\tilde{a}_{33}	\tilde{a}_{23}	\tilde{a}_{13}	\tilde{a}_{12}
1	I, C	a_{11}	a_{22}	a_{33}	a_{23}	a_{13}	a_{12}
2	R_1, D_1	a_{11}	a_{22}	a_{33}	a_{23}	$-a_{13}$	$-a_{12}$
3	R_2, D_2	a_{11}	a_{22}	a_{33}	$-a_{23}$	a_{13}	$-a_{12}$
4	R_3, D_3	a_{11}	a_{22}	a_{33}	$-a_{23}$	$-a_{13}$	a_{12}
5	T_1, CT_1	a_{11}	a_{33}	a_{22}	a_{23}	a_{12}	a_{13}
6	R_1T_1, D_1T_1	a_{11}	a_{33}	a_{22}	a_{23}	$-a_{12}$	$-a_{13}$
7	R_2T_1, D_2T_1	a_{11}	a_{33}	a_{22}	$-a_{23}$	a_{12}	$-a_{13}$
8	R_3T_1, D_3T_1	a_{11}	a_{33}	a_{22}	$-a_{23}$	$-a_{12}$	a_{13}
9	T_2, CT_2	a_{33}	a_{22}	a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{23}
10	R_1T_2, D_1T_2	a_{33}	a_{22}	a_{11}	a_{12}	$-a_{13}$	$-a_{23}$
11	R_2T_2, D_2T_2	a_{33}	a_{22}	a_{11}	$-a_{12}$	a_{13}	$-a_{23}$
12	R_3T_2, D_3T_2	a_{33}	a_{22}	a_{11}	$-a_{12}$	$-a_{13}$	a_{23}
13	T_3, CT_3	a_{22}	a_{11}	a_{33}	a_{13}	a_{23}	a_{12}
14	R_1T_3, D_1T_3	a_{22}	a_{11}	a_{33}	a_{13}	$-a_{23}$	$-a_{12}$
15	R_2T_3, D_2T_3	a_{22}	a_{11}	a_{33}	$-a_{13}$	a_{23}	$-a_{12}$
16	R_3T_3, D_3T_3	a_{22}	a_{11}	a_{33}	$-a_{13}$	$-a_{23}$	a_{12}
17	M_1, CM_1	a_{22}	a_{33}	a_{11}	a_{13}	a_{12}	a_{23}
18	R_1M_1, D_1M_1	a_{22}	a_{33}	a_{11}	a_{13}	$-a_{12}$	$-a_{23}$
19	R_2M_1, D_2M_1	a_{22}	a_{33}	a_{11}	$-a_{13}$	a_{12}	$-a_{23}$
20	R_3M_1, D_3M_1	a_{22}	a_{33}	a_{11}	$-a_{13}$	$-a_{12}$	a_{23}
21	M_2, CM_2	a_{33}	a_{11}	a_{22}	a_{12}	a_{23}	a_{13}
22	R_1M_2, D_1M_2	a_{33}	a_{11}	a_{22}	a_{12}	$-a_{23}$	$-a_{13}$
23	R_2M_2, D_2M_2	a_{33}	a_{11}	a_{22}	$-a_{12}$	a_{23}	$-a_{13}$
24	R_3M_2, D_3M_2	a_{33}	a_{11}	a_{22}	$-a_{12}$	$-a_{23}$	a_{13}

In Tabelle 3.4 auf der nächsten Seite wird außerdem folgende Notation verwendet:

$$y_1 := a_{11}, \quad y_2 := \frac{1}{4}a_{11} - \frac{\sqrt{3}}{2}a_{12} + \frac{3}{4}a_{22}, \quad y_3 := \frac{1}{4}a_{11} + \frac{\sqrt{3}}{2}a_{12} + \frac{3}{4}a_{22} \quad (3.31)$$

sowie

$$z_1 := a_{13}, \quad z_2 := -\frac{1}{2}a_{13} + \frac{\sqrt{3}}{2}a_{23}, \quad z_3 := -\frac{1}{2}a_{13} - \frac{\sqrt{3}}{2}a_{23} \quad (3.32)$$

Tabelle 3.4: Werte von \tilde{a}_{ij} berechnet mit Gleichung (2.28) auf Seite 32 für alle möglichen Transformationen, welche sich aus Tabelle 3.1 auf Seite 46 ergeben.

Nr.	Transf.	\tilde{a}_{11}	\tilde{a}_{22}	\tilde{a}_{33}	\tilde{a}_{23}	\tilde{a}_{13}	\tilde{a}_{12}
1	S_1, CS_1	y_2	$\frac{1}{3}(2y_1 - y_2 + 2y_3)$	a_{33}	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_3)$	z_2	$\frac{1}{\sqrt{3}}(y_1 - y_3)$
2	S_2, CS_2	y_3	$\frac{1}{3}(2y_1 + 2y_2 - y_3)$	a_{33}	$\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_2)$	z_3	$\frac{1}{\sqrt{3}}(y_2 - y_1)$
3	R_1S_1, D_1S_1	y_2	$\frac{1}{3}(2y_1 - y_2 + 2y_3)$	a_{33}	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_3)$	$-z_2$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(y_3 - y_1)$
4	R_1S_2, D_1S_2	y_3	$\frac{1}{3}(2y_1 + 2y_2 - y_3)$	a_{33}	$\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_2)$	$-z_3$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(y_1 - y_2)$
5	R_2S_1, D_2S_1	y_2	$\frac{1}{3}(2y_1 - y_2 + 2y_3)$	a_{33}	$\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_3)$	z_2	$\frac{1}{\sqrt{3}}(y_3 - y_1)$
6	R_2S_2, D_2S_2	y_3	$\frac{1}{3}(2y_1 + 2y_2 - y_3)$	a_{33}	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_2)$	z_3	$\frac{1}{\sqrt{3}}(y_1 - y_2)$
7	R_3S_1, D_3S_1	y_2	$\frac{1}{3}(2y_1 - y_2 + 2y_3)$	a_{33}	$\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_3)$	$-z_2$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(y_1 - y_3)$
8	R_3S_2, D_3S_2	y_3	$\frac{1}{3}(2y_1 + 2y_2 - y_3)$	a_{33}	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_2)$	$-z_3$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(y_2 - y_1)$

Es ist klar, dass die polynomielle Invariante F auf jeden Fall der Einschränkung aus Gleichung (3.29) auf Seite 71 unterworfen ist, da die dort betrachteten Symmetrietransformationen auch in den Symmetriegruppen der Klassen 6–8 enthalten sind. Folglich muss F in den Elementen der Integritätsbasis (3.30) ausdrückbar sein, etwa als ein Polynom F' . Zusätzlich aber muss dieses F' auch unter den Transformationen R_2, R_3, D_2 und D_3 invariant sein. Betrachtet man in Tabelle 3.3 auf der vorherigen Seite die transformierten Größen \tilde{a}_{ij} von a_{ij} bezüglich der neu hinzugekommenen Transformationen R_2, R_3, D_2 und D_3 , so ergibt sich die zusätzliche Einschränkung

$$F'(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{13}a_{12}) = F'(a_{11}, a_{22}, a_{33}, -a_{23}, a_{13}^2, a_{12}^2, -a_{13}a_{12})$$

Wieder können wir die Sätze 47 und 50 aus Abschnitt 3.5.1 auf Seite 66 anwenden. Wir wählen

$$\begin{aligned} (y_1, \dots, y_n) &= (a_{23}, a_{12}a_{13}) \\ (z_1, \dots, z_n) &= (-a_{23}, -a_{12}a_{13}) \end{aligned}$$

in Satz 47 auf Seite 66, sowie

$$(I_1, \dots, I_m) = (a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{13}^2, a_{12}^2)$$

in Satz 50 auf Seite 68. Wie Satz 50 auf Seite 68 zu entnehmen ist, sind die I_k ($k \in \{1, \dots, 5\}$), bereits Elemente der gesuchten Integritätsbasis. Die restlichen

Elemente müssen durch Satz 47 auf Seite 66 noch bestimmt werden:

$$\begin{aligned} (y_1 + z_1)/2 &= 0 \\ (y_2 + z_2)/2 &= 0 \\ (y_1 z_1 + y_1 z_1)/2 &= -a_{23}^2 \end{aligned} \tag{3.33}$$

$$(y_1 z_2 + y_2 z_1)/2 = -a_{23} a_{13} a_{12} \tag{3.34}$$

$$(y_2 z_2 + y_2 z_2)/2 = -a_{13}^2 a_{12}^2 \tag{3.35}$$

Konstante Faktoren sowie 0 können wieder weggelassen werden. Als Integritätsbasis erhalten wir somit vorerst

$$\underbrace{a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{13}^2, a_{12}^2}_{I_1, \dots, I_5}, \underbrace{a_{23}^2}_{(3.33)}, \underbrace{a_{23} a_{13} a_{12}}_{(3.34)}, \underbrace{a_{13}^2 a_{12}^2}_{(3.35)}$$

Dem Leser wird an dieser Stelle sicherlich auffallen, dass das letzte Element $a_{13}^2 a_{12}^2$ überflüssig ist, da wir dieses Element aus den bereits vorhandenen Elementen a_{13}^2 und a_{12}^2 erzeugen können. Endgültig erhalten wir als Integritätsbasis:

$$a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{23} a_{13} a_{12} \tag{3.36}$$

3.5.2.4 Klassen 9–11 (Tetragonales System)

Für die ersten drei Klassen des tetragonalen Systems (vgl. Tabelle 3.2 auf Seite 47) haben wir als eine erste Einschränkung für F

$$F(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, a_{13}, a_{12}) = F(a_{11}, a_{22}, a_{33}, -a_{23}, -a_{13}, a_{12})$$

Dies ergibt sich, wenn man die transformierten Größen in Zeile 4 (D_3 bzw. R_3) von Tabelle 3.3 auf Seite 74 in die Relation einträgt. In einer analog zum monoklinen Fall verlaufenden Rechnung (Abschnitt 3.5.2.2 auf Seite 70) erfahren wir, dass sich F als ein Polynom in den Polynomen

$$a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}, \text{ und } a_{23} a_{13}$$

ausdrücken lässt. Diesen Ausdruck wollen wir mit F' bezeichnen. Wie man Tabelle 3.2 auf Seite 47 entnehmen kann, gibt es aber neben D_3 noch weitere Symmetrietransformationen, aus denen sich auch weitere Einschränkungen ergeben. Diese dürfen natürlich nicht ignoriert werden. Wir nehmen als „zweite“ Einschränkung nun die transformierten Größen aus Zeile 14 von Tabelle 3.3 auf Seite 74 ($D_1 T_3$ bzw. $R_1 T_3$) hinzu:

$$F'(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}, a_{23} a_{13}) = F'(a_{22}, a_{11}, a_{33}, a_{13}^2, a_{23}^2, -a_{12}, -a_{23} a_{13})$$

Die Anwendung der Sätze 47 und 50 mit

$$\begin{aligned}(y_1, \dots, y_n) &= (a_{11}, a_{22}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}, a_{22}a_{13}), \\(z_1, \dots, z_2) &= (a_{22}, a_{11}, a_{13}^2, a_{23}^2, -a_{12}, -a_{23}a_{13})\end{aligned}$$

und

$$I_1 := a_{33}$$

führt uns zu der Einsicht, dass sich F' und damit auch F in einem Polynom in den Größen

$$\begin{aligned}a_{11} + a_{22}, \quad a_{33}, \quad a_{23}^2 + a_{13}^2, \quad a_{11}a_{22}, \quad a_{12}(a_{11} - a_{22}), \\a_{11}a_{13}^2 + a_{22}a_{23}^2, \quad a_{23}a_{13}(a_{11} - a_{22}), \quad a_{12}^2, \quad a_{12}(a_{13}^2 - a_{23}^2), \\a_{12}a_{23}a_{13}, \quad a_{23}^2a_{13}^2, \quad a_{23}a_{13}(a_{23}^2 - a_{13}^2)\end{aligned} \tag{3.37}$$

ausdrücken lässt. Die Rechnung um auf (3.37) zu kommen, haben wir hier erstmals nicht explizit durchgeführt. Offensichtlich redundante Elemente wurden wieder weggelassen. Ein solches Polynom – wie sich leicht nachprüfen lässt – erfüllt auch die Einschränkung, welche sich durch Zeile 15 von Tabelle 3.3 auf Seite 74 (D_2T_3 bzw. R_2T_3) ergibt. Damit bilden die Größen in (3.37) eine Integritätsbasis für die ersten drei Kristallklassen des tetragonalen Systems.

3.5.2.5 Klassen 12–15 (Tetragonales System)

Für die verbleibenden vier Klassen des tetragonalen Systems erhalten wir die Einschränkungen für F durch entsprechendes Einsetzen der transformierten Größen aus den Zeilen 2, 3, 4, 13, 14, 15 und 16 von Tabelle 3.3 auf Seite 74. Wir sehen, dass im Fall des rhombischen Systems die ersten drei dieser Einschränkungen (Zeilen 2, 3 und 4) dazu führen, dass F als ein Polynom, sagen wir F' , in den Größen aus (3.36) geschrieben werden kann. Nimmt man die Einschränkung, welche durch Zeile 13 gegeben ist, hinzu, so erhalten wir

$$F'(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) = F'(a_{22}, a_{11}, a_{33}, a_{13}^2, a_{23}^2, a_{12}^2, a_{23}a_{13}a_{12})$$

Die analoge Anwendung der Sätze 47 und 50 wie bisher und das Weglassen redundanter Elemente zeigt uns, dass sich F' , und damit auch F , als ein Polynom in

$$a_{11} + a_{22}, \quad a_{11}a_{22}, \quad a_{23}^2 + a_{13}^2, \quad a_{11}a_{23}^2 + a_{22}a_{13}^2, \quad a_{23}^2a_{13}^2$$

sowie

$$a_{33}, \quad a_{12}^2, \quad a_{23}a_{13}a_{12}$$

ausdrücken lässt.

Es lässt sich durch Betrachtung der Zeilen 14, 15 und 16 in Tabelle 3.3 auf Seite 74 leicht einsehen, dass ein solches Polynom automatisch die Einschränkungen, welche sich durch diese Zeilen ergeben, erfüllt. Diese Elemente bilden also eine Integritätsbasis für die Tetragonal-scalenohedrale, Ditetragonal-pyramidale, Tetragonal-trapezohedrale und Ditetragonal-dipyramidale Kristallklasse.

3.5.2.6 Klassen 16 und 17 (Hexagonales System)

Invarianten unter den die Trigonal-pyramidale und Rhombohedrale Klasse charakterisierenden Symmetriegruppen werden durch die Zeilen 1 und 2 von Tabelle 3.4 auf Seite 75 eingeschränkt. Unter Verwendung der auf Seite 74 eingeführten Notation erhalten wir

$$\begin{aligned} & F(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}, a_{13}, a_{12}) \\ &= F\left(y_2, \frac{1}{3}(2y_1 - y_2 + 2y_3), a_{33}, -\frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_3), z_2, \frac{1}{\sqrt{3}}(y_1 - y_3)\right) \quad (3.38) \\ &= F\left(y_3, \frac{1}{3}(2y_1 + 2y_2 - y_3), a_{33}, \frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_2), z_3, \frac{1}{\sqrt{3}}(y_2 - y_1)\right) \end{aligned}$$

Geeignetes Umformen und gegenseitiges Einsetzen bei (3.31) und (3.32) auf Seite 74 liefert

$$\begin{aligned} a_{11} &= y_1 \\ a_{22} &= \frac{1}{3}(2y_2 + 2y_3 - y_1) \\ a_{23} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(z_2 - z_3) \quad (3.39) \\ a_{13} &= z_1 \\ a_{12} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(y_3 - y_2) \end{aligned}$$

Wenn wir (3.39) in die linke Seite von (3.38) einsetzen und einige Terme etwas umsortieren, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
& F\left(y_1, \frac{1}{3}(2y_2 + 2y_3 - y_1), a_{33}, \frac{1}{\sqrt{3}}(z_2 - z_3), z_1, \frac{1}{\sqrt{3}}(y_3 - y_2)\right) = \\
& = F\left(y_2, \frac{1}{3}(2y_3 + 2y_1 - y_2), a_{33}, \frac{1}{\sqrt{3}}(z_3 - z_1), z_2, \frac{1}{\sqrt{3}}(y_1 - y_3)\right) \quad (3.40) \\
& = F\left(y_3, \frac{1}{3}(2y_1 + 2y_2 - y_3), a_{33}, \frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_2), z_3, \frac{1}{\sqrt{3}}(y_2 - y_1)\right).
\end{aligned}$$

Der Übersichtlichkeit halber können wir (3.40) dann auch als ein Polynom F' in $y_1, y_2, y_3, z_1, z_2, z_3$ und a_{33} schreiben:

$$\begin{aligned}
& F'(y_1, y_2, y_3, z_1, z_2, z_3, a_{33}) = \\
& = F'(y_2, y_3, y_1, z_2, z_3, z_1, a_{33}) \quad (3.41) \\
& = F'(y_3, y_1, y_2, z_3, z_1, z_2, a_{33})
\end{aligned}$$

Es lässt sich nun erkennen, dass F' unter zyklischen Permutationen der Indizes 1,2 und 3 von y und z , invariant ist. Wir können also Satz 49 auf Seite 67 anwenden. Setzen wir für die y_i und z_i wieder die ursprünglichen Werte (siehe (3.31) und (3.32) auf Seite 74) ein und setzen in Satz 50 auf Seite 68 $I_1 := a_{33}$, so erhalten wir als Integritätsbasis für die trigonal-pyramidale und rhombohedrale Kristallklasse die folgenden Elemente:

$$\begin{aligned}
& a_{33}, \quad a_{11} + a_{22}, \quad a_{11}a_{22} - a_{12}^2, \quad a_{11} \left[(a_{11} + 3a_{22})^2 - 12a_{12}^2 \right], \\
& a_{13}^2 + a_{23}^2, \quad a_{13}(a_{13}^2 - 3a_{23}^2), \quad (a_{11} - a_{22})a_{13} - 2a_{12}a_{23}, \\
& (a_{22} - a_{11})a_{23} - 2a_{12}a_{13}, \quad 3a_{12}(a_{11} - a_{22})^2 - 4a_{12}^2, \\
& a_{23}(a_{23}^2 - 3a_{13}^2), \quad a_{22}a_{13}^2 + a_{11}a_{23}^2 - 2a_{23}a_{13}a_{12}, \quad (3.42) \\
& a_{13} \left[(a_{11} + a_{22})^2 + 4(a_{12}^2 - a_{22}^2) \right] + 8a_{11}a_{12}a_{23}, \\
& a_{23} \left[(a_{11} + a_{22})^2 + 4(a_{12}^2 - a_{22}^2) \right] + 8a_{11}a_{12}a_{13}, \\
& (a_{11} - a_{22})a_{23}a_{13} + a_{12}(a_{23}^2 - a_{13}^2)
\end{aligned}$$

3.5.2.7 Klassen 18–20 (Hexagonales System)

Für diese Klassen erhalten wir die Einschränkungen für eine Invariante F aus der Zeile 2 von Tabelle 3.3 auf Seite 74 und den Zeilen 1, 2, 3 und 4 von Tabelle 3.4 auf Seite 75. Genau wie im vorherigen Fall der trigonal-pyramidalen und rhombohedralen Klassen, fassen wir F als ein Polynom F' in den Größen

$y_1, y_2, y_3, z_1, z_2, z_3$ (definiert in (3.31) und (3.32)) und a_{33} auf. Wir gewinnen dann die Einschränkungen, welche F' auferlegt sind, und führen eine weitere Notation ein:

$$\begin{aligned} Y_1 &:= y_1, & Y_2 &:= y_2, & Y_3 &:= y_3 \\ Z_1 &:= \frac{1}{\sqrt{3}}(z_2 - z_3), & Z_2 &:= \frac{1}{\sqrt{3}}(z_3 - z_1), & Z_3 &:= \frac{1}{\sqrt{3}}(z_1 - z_2) \end{aligned} \quad (3.43)$$

Wir fassen F' und damit auch F nun als ein Polynom F'' in den Größen $Y_1, Y_2, Y_3, Z_1, Z_2, Z_3$ und a_{33} auf. Wie sich zeigt, bleibt F'' bei beliebiger Vertauschung der Variablenpärchen (Y_1, Z_1) , (Y_2, Z_2) und (Y_3, Z_3) unverändert (die Abhängigkeit von a_{33} hat keine Einschränkungen zur Folge). Es gilt also

$$\begin{aligned} &F''(Y_1, Y_2, Y_3, Z_1, Z_2, Z_3, a_{33}) \\ &= F''(Y_2, Y_1, Y_3, Z_2, Z_1, Z_3, a_{33}) \\ &= F''(Y_3, Y_2, Y_1, Z_3, Z_2, Z_1, a_{33}) \\ &= F''(Y_1, Y_3, Y_2, Z_1, Z_3, Z_2, a_{33}) \\ &= F''(Y_2, Y_3, Y_1, Z_2, Z_3, Z_1, a_{33}) \\ &= F''(Y_3, Y_1, Y_2, Z_3, Z_1, Z_2, a_{33}) \end{aligned} \quad (3.44)$$

Wir können also Satz 48 auf Seite 66 und Satz 50 auf Seite 68 anwenden. Stellt man die durch die Anwendung der Sätze erhaltenen Ausdrücke wieder in ihrer ursprünglichen Weise (als Polynome in a_{ij}) dar, so erhalten wir als Integritätsbasis

$$\begin{aligned} &a_{33}, \quad a_{11} + a_{22}, \quad a_{11}a_{22} - a_{12}^2, \quad a_{11} \left[(a_{11} + 3a_{22})^2 - 12a_{12}^2 \right], \\ &a_{13}^2 + a_{23}^2, \quad a_{23} (a_{23}^2 - 3a_{13}^2), \quad (a_{11} - a_{22})a_{23} + 2a_{12}a_{13} \\ &a_{11}a_{13}^2 + a_{22}a_{23}^2 + 2a_{23}a_{13}a_{12}, \quad a_{23} \left[(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{22}^2 - a_{12}^2) \right] + 8a_{11}a_{12}a_{13} \end{aligned}$$

wobei die redundanten Elemente ebenfalls wieder weggelassen wurden.

3.5.2.8 Klassen 21–23 (Hexagonales System)

Die Einschränkungen für jede der Klassen 21–23 sind durch die Zeile 4 von Tabelle 3.3 auf Seite 74 und die Zeilen 1, 2, 7 und 8 von Tabelle 3.4 auf Seite 75 bestimmt.

Analog zur Vorgehensweise im Fall des monoklinen Kristallsystems (vgl. (3.30) auf Seite 72) kann man zeigen, dass sich eine Invariante F unter der Einwirkung der Einschränkung durch Zeile 4 von Tabelle 3.3 auf Seite 74 als ein Polynom F' wie folgt ausdrücken lässt:

$$F = F'(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}, a_{23}a_{13}) \quad (3.45)$$

Wir verwenden nun die Notation

$$Y_1 := y_1, \quad Y_2 := y_2, \quad Y_3 := y_3, \quad Z_1 := z_1^2, \quad Z_2 := z_2^2, \quad Z_3 := z_3^2 \quad (3.46)$$

wobei y_1, y_2, \dots, z_3 in (3.31) und (3.32) definiert wurden. Unter Zuhilfenahme von (3.39) auf Seite 78 drücken wir Gleichung (3.45) auf der vorherigen Seite erst in den y_1, y_2, \dots, z_3 und a_{33} aus, und schreiben sie dann anschließend in der soeben eingeführten Notation in Y_1, Y_2, \dots, Z_3 und a_{33} . Nun können wir F' als ein Polynom F'' in Y_1, Y_2, \dots, Z_3 auffassen. Lassen wir die Einschränkungen, welche sich aus den Zeilen 1, 2, 7 und 8 von Tabelle 3.4 auf Seite 75 ergeben, auf F'' einwirken so erhalten wir

$$\begin{aligned} & F''(Y_1, Y_2, Y_3, Z_1, Z_2, Z_3, a_{33}) \\ &= F''(Y_2, Y_3, Y_1, Z_2, Z_3, Z_1, a_{33}) \\ &= F''(Y_3, Y_1, Y_2, Z_3, Z_1, Z_2, a_{33}). \end{aligned} \quad (3.47)$$

Wir beobachten, dass F'' invariant unter zyklischen Permutationen der Indizes 1, 2 und 3 ist (a_{33} ist nicht betroffen) und können somit Satz 50 auf Seite 68 ($I_1 := a_{33}$) und Satz 49 auf Seite 67 mit

$$\begin{aligned} y_1 &:= Y_1, & z_1 &:= Z_1 \\ y_2 &:= Y_2, & z_2 &:= Z_2 \\ y_3 &:= Y_3, & z_3 &:= Z_3 \end{aligned}$$

anwenden. Als Ergebnis erhalten wir dann eine Integritätsbasis für F'' in den Größen Y_1, Y_2, \dots, Z_3 und damit auch für F . Wenn das Ergebnis per Substitution von (3.46), (3.31) und (3.32) wieder in den Größen a_{ij} ausgedrückt wird, so ergibt sich als Integritätsbasis für die trigonal-dipyramidale, die hexagonal-pyramidale und die hexagonal-dipyramidale Kristallklasse:

$$\begin{aligned} & a_{33}, \quad a_{11} + a_{22}, \quad a_{11}a_{22} - a_{12}^2, \quad a_{11} \left[(a_{11} + 3a_{22})^2 - 12a_{12}^2 \right], \\ & a_{13}^2 + a_{23}^2, \quad a_{13}^2 \left(a_{13}^2 - 3a_{23}^2 \right)^2, \quad a_{11}a_{13}^2 + a_{22}a_{13}^2 - 2a_{23}a_{13}a_{12}, \\ & a_{12} \left(a_{13}^2 - a_{23}^2 \right)^2 + (a_{22} - a_{11})a_{13}a_{23}, \quad 3a_{12}(a_{11} - a_{22})^2 - 4a_{12}^3, \\ & a_{13}a_{23} \left[3 \left(a_{13}^2 - a_{23}^2 \right)^2 - 4a_{13}^2a_{23}^2 \right], \\ & a_{11} \left(a_{13}^4 + 3a_{23}^4 \right) + 2a_{22}a_{13}^2 \left(a_{13}^2 + 3a_{23}^2 \right) - 8a_{12}a_{23}a_{13}^3, \\ & a_{13}^2 \left[(a_{11} + a_{22})^2 - 4 \left(a_{22}^2 - a_{12}^2 \right) \right] - 2a_{11} \left[(a_{11} + 3a_{22}) \left(a_{13}^2 + a_{23}^2 \right) - 4a_{23}a_{13}a_{12} \right], \\ & a_{23}a_{13} \left[(a_{11} + a_{22})^2 - 4 \left(a_{22}^2 - a_{12}^2 \right) \right] + 4a_{11}a_{12} \left(a_{23}^2 - a_{13}^2 \right), \\ & a_{12} \left[\left(a_{13}^2 + a_{23}^2 \right)^2 + 4a_{23}^2 \left(a_{13}^2 - a_{23}^2 \right) \right] - 4a_{13}^3a_{23}(a_{11} - a_{22}) \end{aligned}$$

3.5.2.9 Klassen 24–27 (Hexagonales System)

Die Einschränkungen, welchen eine Invariante F für diese vier Kristallklassen unterworfen ist, leiten sich aus den Zeilen 2, 3 und 4 von Tabelle 3.3 auf Seite 74 und den Zeilen 1–8 von Tabelle 3.4 auf Seite 75 ab. Im Zuge der Behandlung der drei vorherigen Kristallklassen des hexagonalen Systems (21–23) haben wir bereits Einschränkungen der Zeile 4 von Tabelle 3.3 auf Seite 74, sowie die Zeilen 1, 2, 7 und 8 von Tabelle 3.4 auf Seite 75 berücksichtigt. Dies bedeutet, dass sich F als ein Polynom F'' in den Größen a_{33} und $Y_1, Y_2, Y_3, Z_1, Z_2, Z_3$, definiert durch (3.46), (3.31) und (3.32), ausdrücken lässt, welches Gleichung (3.47) auf der vorherigen Seite genügt. Wir berücksichtigen nun noch die verbleibenden Einschränkungen, welche sich aus den Zeilen 2 und 3 von Tabelle 3.3 auf Seite 74 ergeben, sowie die Einschränkungen aus den Zeilen 3, 4, 5 und 6 von Tabelle 3.4 auf Seite 75. Für F'' ergeben sich dann drei weitere Relationen die von F'' erfüllt werden müssen:

$$\begin{aligned}
 & F''(Y_1, Y_2, Y_3, Z_1, Z_2, Z_3, a_{33}) \\
 &= F''(Y_1, Y_3, Y_2, Z_1, Z_3, Z_2, a_{33}) \\
 &= F''(Y_2, Y_1, Y_3, Z_2, Z_1, Z_3, a_{33}) \\
 &= F''(Y_3, Y_2, Y_1, Z_3, Z_2, Z_1, a_{33})
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

Nimmt man nun Gleichung (3.47) und Gleichung (3.48) zusammen, so sieht man, dass F'' in den drei Variablenpaaren (Y_1, Z_1) , (Y_2, Z_2) und (Y_3, Z_3) symmetrisch ist. Die Anwendung von Satz 50 auf Seite 68 ($I_1 := a_{33}$) und Satz 48 auf Seite 66 mit

$$\begin{aligned}
 y_1 &:= Y_1, & z_1 &:= Z_1 \\
 y_2 &:= Y_2, & z_2 &:= Z_2 \\
 y_3 &:= Y_3, & z_3 &:= Z_3
 \end{aligned}$$

verhilft uns zu einer Integritätsbasis für F'' – und damit auch für F – in den Größen Y_1, Y_2, \dots, Z_3 und a_{33} . Rücksubstitution über (3.46), (3.31) und (3.32) führt uns zu dieser Integritätsbasis, dargestellt in den Größen a_{ij} des symmetrischen Tensors:

$$\begin{aligned}
 & a_{33}, \quad a_{11} + a_{22}, \quad a_{11}a_{22} - a_{12}^2, \quad a_{11} \left[(a_{11} + 3a_{22})^2 - 12a_{12}^2 \right], \\
 & a_{13}^2 + a_{23}^2, \quad a_{13}^2 (a_{13}^2 - 3a_{23}^2), \quad a_{11}a_{23}^2 + a_{22}a_{13}^2 - 2a_{23}a_{13}a_{12}, \\
 & a_{11} (a_{13}^4 + 3a_{23}^4) + 2a_{22}a_{13}^2 (a_{13}^2 + 3a_{23}^2) - 8a_{12}a_{23}a_{13}^3, \\
 & a_{13}^2 \left[(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{22}^2 - a_{12}^2) \right] - 2a_{11} \left[(a_{11} + 3a_{22}) (a_{13}^2 + a_{23}^2) - 4a_{23}a_{13}a_{12} \right]
 \end{aligned}$$

3.5.2.10 Klassen 28 und 29 (Kubisches System)

Für die Kristallklassen tetartoidal und diploidal ist eine Invariante F durch die Zeilen 2, 3 und 4, sowie die Zeilen 17–24 von Tabelle 3.3 auf Seite 74 beschränkt (vgl. Tabelle 3.2 auf Seite 47). Einschränkungen durch die Zeilen 2, 3 und 4 sind uns schon beim rhombischen System (Abschnitt 3.5.2.3 auf Seite 72) begegnet. Wir können eine polynomielle Invariante F daher ohne Umschweife als ein Polynom F' in den Elementen der Integritätsbasis des rhombischen Systems (3.36) schreiben. Nehmen wir die Einschränkungen, welche uns durch die Zeilen 17–24 auferlegt werden, hinzu, fügt es sich folgendermaßen zusammen:

$$\begin{aligned}
 & F'(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \\
 &= F'(a_{22}, a_{33}, a_{11}, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{23}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \\
 &= F'(a_{33}, a_{11}, a_{22}, a_{12}^2, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{23}a_{13}a_{12})
 \end{aligned} \tag{3.49}$$

Wir wählen

$$I_1 := a_{23}a_{13}a_{12}$$

in Satz 50 auf Seite 68 und

$$\begin{aligned}
 y_1 &:= a_{11}, & z_1 &:= a_{23}^2 \\
 y_2 &:= a_{22}, & z_2 &:= a_{13}^2 \\
 y_3 &:= a_{33}, & z_3 &:= a_{12}^2
 \end{aligned}$$

in Satz 49 auf Seite 67, was uns zu folgender Integritätsbasis aus zunächst 15 (K_1 bis K_{14} und I_1) Elementen führt:

$$\begin{aligned}
 & a_{11} + a_{22} + a_{33}, & a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} + a_{11}a_{22}, & a_{11}a_{22}a_{33}, \\
 & a_{23}^2 + a_{13}^2 + a_{12}^2, & a_{13}^2a_{12}^2 + a_{12}^2a_{23}^2 + a_{23}^2a_{13}^2 \\
 & a_{23}^2a_{13}^2a_{12}^2, & a_{22}a_{12}^2 + a_{33}a_{23}^2 + a_{11}a_{13}^2, & a_{13}^2a_{33} + a_{12}^2a_{11} + a_{23}^2a_{22} \\
 & a_{33}a_{22}^2 + a_{11}a_{33}^2 + a_{22}a_{13}^2, & a_{12}^2a_{13}^4 + a_{23}^2a_{12}^4 + a_{13}^2a_{23}^4 \\
 & a_{11}a_{13}^2a_{12}^2 + a_{22}a_{12}^2a_{23}^2 + a_{33}a_{23}^2a_{13}^2, \\
 & a_{23}^2a_{22}a_{33} + a_{13}^2a_{33}a_{11} + a_{12}^2a_{11}a_{22}, \\
 & a_{11}a_{22}a_{13}^2 + a_{22}a_{33}a_{12}^2 + a_{33}a_{11}a_{23}^2, \\
 & a_{23}^2a_{13}^2a_{22} + a_{13}^2a_{12}^2a_{33} + a_{12}^2a_{23}^2a_{11}, \\
 & a_{23}a_{13}a_{12}
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

Das Element $K_6 = a_{23}^2a_{13}^2a_{12}^2 = I_1^2$ ist jedoch überflüssig, d. h. die Integritätsbasis besteht lediglich aus 14 Elementen.

3.5.2.11 Klassen 30–32 (Kubisches System)

Die Konstruktion einer Integritätsbasis für die hextetrahedrale, gyroidale und hexoctohedrale Kristallklasse beginnt genau so wie im Fall der Klassen 28 und 29. Ein Blick auf die Tabellen 3.2 und 3.3 verrät, dass eine Invariante F durch die Zeilen 2–24 limitiert ist. Wie aus dem rhombischen Fall bekannt, können wir dann (vgl. (3.36))

$$F = F'(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \quad (3.51)$$

schreiben. Die verbleibenden Einschränkungen ergeben:

$$\begin{aligned} & F'(a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \\ &= F'(a_{11}, a_{33}, a_{22}, a_{23}^2, a_{12}^2, a_{13}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \\ &= F'(a_{33}, a_{22}, a_{11}, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \\ &= F'(a_{22}, a_{11}, a_{33}, a_{13}^2, a_{23}^2, a_{12}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \\ &= F'(a_{22}, a_{33}, a_{11}, a_{13}^2, a_{12}^2, a_{23}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \\ &= F'(a_{33}, a_{11}, a_{22}, a_{12}^2, a_{23}^2, a_{13}^2, a_{23}a_{13}a_{12}) \end{aligned}$$

In den Sätzen 48 und 50 wählen wir

$$I_1 := a_{23}a_{13}a_{12}$$

und

$$\begin{aligned} y_1 &:= a_{11}, & z_1 &:= a_{23}^2 \\ y_2 &:= a_{22}, & z_2 &:= a_{13}^2 \\ y_3 &:= a_{33}, & z_3 &:= a_{12}^2 \end{aligned}$$

Nach Entfernung offensichtlich redundanter Elemente, erhalten wir als Integritätsbasis für die Kristallklassen 30–32

$$\begin{aligned} & a_{11} + a_{22} + a_{33}, & a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} + a_{11}a_{22}, & a_{11}a_{22}a_{33}, \\ & a_{23}^2 + a_{13}^2 + a_{12}^2, & a_{13}^2a_{12}^2 + a_{12}^2a_{23}^2 + a_{23}^2a_{13}^2, \\ & a_{22}a_{22}^2 + a_{33}a_{13}^2 + a_{33}a_{23}^2 + a_{11}a_{12}^2 + a_{11}a_{13}^2 + a_{22}a_{23}^2, \\ & a_{11}a_{13}^2a_{12}^2 + a_{22}a_{12}^2a_{23}^2 + a_{33}a_{23}^2a_{13}^2, \\ & a_{23}^2a_{22}a_{33} + a_{13}^2a_{33}a_{11} + a_{12}^2a_{11}a_{22} \end{aligned} \quad (3.52)$$

3.5.3 Minimalität der Integritätsbasen

Bei den Klassen 1–10 konnte man leicht erkennen, dass die jeweiligen Integritätsbasen minimal im Sinne von Definition 18 auf Seite 38 sind. Den entwickelten Integritätsbasen für die restlichen Klassen sieht man dies auf den ersten Blick nicht an. Der Nachweis der Minimalität für diese Klassen erfordert jedoch einigen Aufwand. In [Smi62] ist die Minimalität der Integritätsbasen für alle Kristallklassen nachgewiesen.

4 Anwendung in der Kontinuumsmechanik

Dieser kurze Anhang soll einen Ausblick auf die Anwendung der Integritätsbasen für die 32 kristallographischen Symmetriegruppen, welche wir in Abschnitt 3.5 auf Seite 66 dargestellt haben, in der Kontinuumsmechanik liefern. Notwendigerweise kann dieser Abschnitt nur sehr kurz ausfallen und wir müssen auf die entsprechende Literatur verweisen. Unsere Darstellung richtet sich größtenteils nach [Hau00].

4.1 Materialkörper

Die grundlegende Annahme der Kontinuumsmechanik ist, dass ein Material als den Raum kontinuierlich ausfüllend aufgefasst wird. Es wird also von der wahren Struktur eines Materials, bestehend aus Elementarteilchen wie Atomen, Ionen, etc. abstrahiert. Ein Materialkörper \mathcal{B} (auch als Kontinuum bezeichnet) wird zunächst ganz abstrakt als eine Menge von Partikeln¹ \mathcal{P} definiert, welche keinerlei Struktur oder Erscheinungsform hat. Erst eine so genannte Konfiguration gibt einem Materialkörper eine konkrete Gestalt im Raum unserer Anschauung. Eine Bewegung oder Deformation wird dann als eine Menge solcher (zeitabhängigen) Konfigurationen dargestellt.

Definition 51 (Materialkörper). Ein *Materialkörper* $\mathcal{B} = \{\mathcal{P} : \mathcal{P} \text{ ist Partikel}\}$ ist eine Menge von Elementen \mathcal{P} mit den folgenden Eigenschaften:

- (i) Es existiert eine Menge $\mathcal{K} = \{\chi\}$ von Bijektionen

$$\chi : \begin{array}{l} \mathcal{B} \longrightarrow \chi[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} \longmapsto \chi(\mathcal{P}) = (x^1, x^2, x^3) \end{array} \quad (4.1)$$

Jede solche Bijektion $\chi \in \mathcal{K}$ wird *Konfiguration* genannt und es gilt $\mathcal{P} = \chi^{-1}(x^1, x^2, x^3)$.

¹auch *Materialpunkte* oder *Materialelemente* genannt

(ii) Seien $\chi_1, \chi_2 \in \mathcal{K}$ zwei Konfigurationen mit $\chi_1(\mathcal{P}) = (x^1, x^2, x^3)$ und $\chi_2(\mathcal{P}) = (y^1, y^2, y^3)$, dann soll die Komposition

$$\chi_2 \circ \chi_1^{-1} : \begin{array}{l} \chi_1[\mathcal{B}] \longrightarrow \chi_2[\mathcal{B}] \\ (x^1, x^2, x^3) \longmapsto (y^1, y^2, y^3) = \chi_2(\chi_1^{-1}(x^1, x^2, x^3)) \end{array} \quad (4.2)$$

(hinreichend oft) stetig differenzierbar sein.

Durch eine Konfiguration wird einem Materialpunkt ein eindeutiges Tripel von reellen Zahlen zugeordnet. In Abbildung 4.1 ist das Konzept bildlich dargestellt. Die in der Definition geforderte stetige Differenzierbarkeit äußert sich physikalisch darin, dass benachbarte Teilchen immer benachbart bleiben, d. h. Risse oder Brüche im Materialkörper werden in diesem Modell a priori ausgeschlossen.

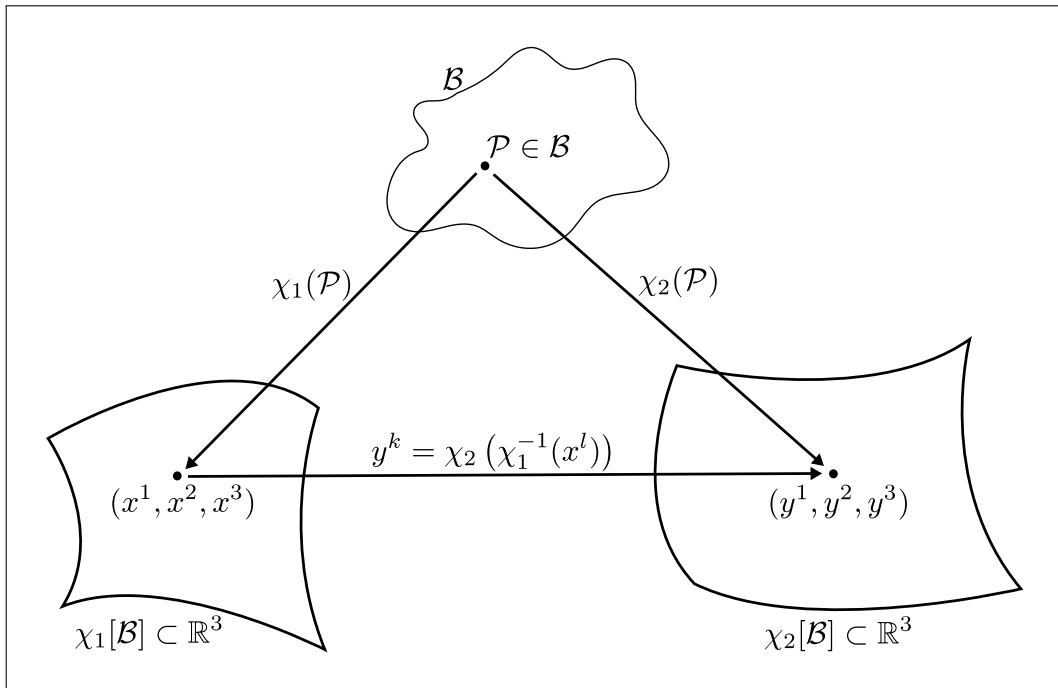


Abbildung 4.1: Der abstrakte Materialkörper \mathcal{B} und zwei mögliche Konfigurationen χ_1 und χ_2 .

Die folgende Definition stellt sicher, dass eine Konfiguration eines Materialkörpers während einer Bewegung von der Zeit t abhängig ist.

Definition 52 (Bewegung, Momentankonfiguration). Die *Bewegung* eines Materialkörpers ist eine glatte Familie von Konfigurationen mit t als Familienpa-

parameter:

$$\begin{aligned} t \mapsto \chi_t : \mathcal{B} &\longrightarrow \chi_t[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} &\longmapsto \chi_t(\mathcal{P}) = (x^1(t), x^2(t), x^3(t)) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Eine solche zeitabhängige Konfiguration χ_t nennt man *Momentankonfiguration*.

Um eine Bewegung klar darstellen zu können, müssen die abstrakt definierten Materialpunkte eliminiert werden. Dies geschieht, indem man eine bestimmte von allen vorstellbaren Konfigurationen herauspicks und ihr einen speziellen Namen gibt.

Definition 53 (Referenzkonfiguration). Eine *Referenzkonfiguration* ist eine feste, beliebig ausgewählte Konfiguration $R \in \mathcal{K}$

$$\begin{aligned} R : \mathcal{B} &\longrightarrow R[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} &\longmapsto R(\mathcal{P}) = (X^1, X^2, X^3) \end{aligned} \quad (4.4)$$

welche jedem Partikel $\mathcal{P} \in \mathcal{B}$ ein eindeutiges Tripel von reellen Zahlen zuordnet. Es gilt $\mathcal{P} = R^{-1}(X^1, X^2, X^3)$.

Durch die Auswahl einer Referenzkonfiguration R befinden wir uns nun in der Situation, dass jedem individuellen Partikel ein Name zugeordnet werden kann. Der Name des Partikels \mathcal{P} ist das Zahlentripel $(X^1, X^2, X^3) \in \mathbb{R}^3$. Die quantitative Beschreibung einer Bewegung ist nun eine unmittelbare Folge der obigen Definitionen. Die Familie von Konfigurationen

$$\chi_t(\mathcal{P}) = \chi_t(R^{-1}(X^1, X^2, X^3))$$

läuft auf drei reellwertige Funktionen hinaus, welche jeweils von vier Variablen abhängig sind:

$$\begin{aligned} x^1 &= \chi_R^1(X^1, X^2, X^3, t), \\ x^2 &= \chi_R^2(X^1, X^2, X^3, t), \\ x^3 &= \chi_R^3(X^1, X^2, X^3, t). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Kurz schreiben wir dafür

$$x^k = \chi_R^k(X^L, t), \quad (4.6)$$

wobei die Abbildung χ_R^k wie folgt definiert ist:

Definition 54 (Materialkoordinaten, räumliche Koordinaten). In der Abbildung

$$\chi_R^k : \begin{array}{ccc} R[\mathcal{B}] &\longrightarrow & \chi_t[\mathcal{B}] \\ (X^1, X^2, X^3) &\longmapsto & x^k = \chi_R^k(X^L, t) \end{array}$$

nennt man die Zahlentripel $X^L = (X^1, X^2, X^3)$ *Materialkoordinaten* und $x^k = (x^1, x^2, x^3)$ *räumliche Koordinaten* des Partikels \mathcal{P} .

In Abbildung 4.2 ist ein Materialkörper schematisch in seiner Referenz- und Momentankonfiguration dargestellt.

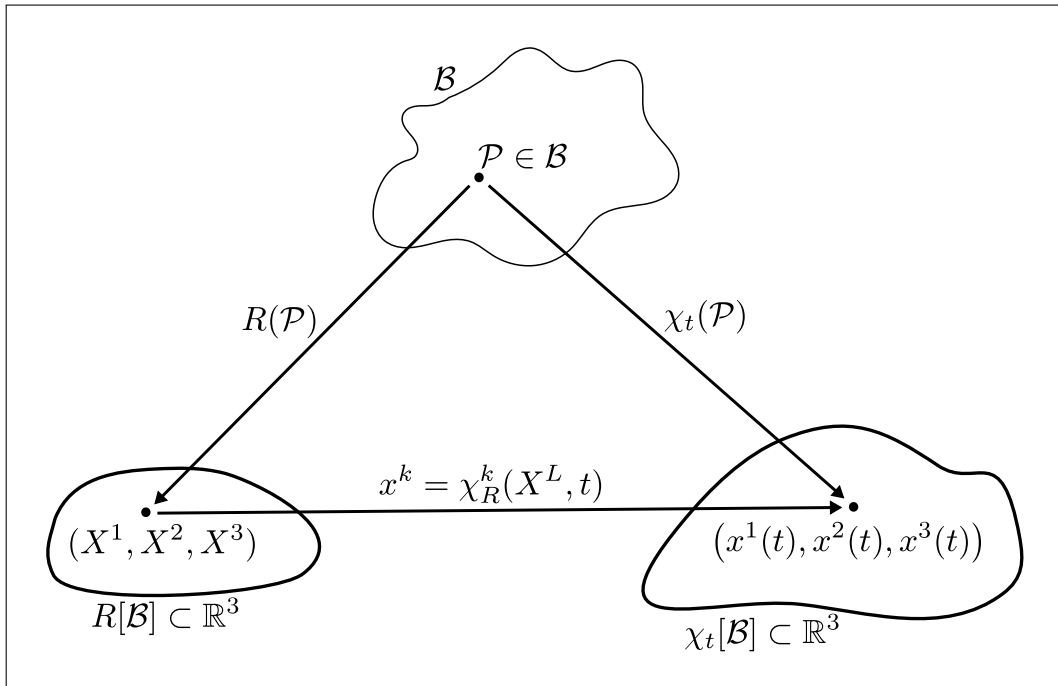


Abbildung 4.2: Darstellung eines Materialkörpers in Referenzkonfiguration und Momentankonfiguration sowie ein Punkt des Materialkörpers, angegeben in Materialkoordinaten und räumlichen Koordinaten.

Bemerkung 55. Die Referenzkonfiguration kann beliebig ausgewählt sein und muss physikalisch zu keinem Zeitpunkt wirklich angenommen werden. Sie dient nur dem Zweck, die abstrakten Materialpunkte benennen zu können. Häufig wird jedoch aus Bequemlichkeit die Momentankonfiguration eines bestimmten Zeitpunktes t_0 , etwa die Ausgangslage unmittelbar vor einer Bewegung, als Referenzkonfiguration ausgewählt.

Wir wollen \mathbb{R}^3 nun als Vektorraum mit einer Basis $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ auffassen. Durch die Festlegung

$$\langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \delta_{ij} \quad i, j \in \{1, 2, 3\}$$

ist uns ein kartesisches Koordinatensystem gegeben. Ein Materialpunkt in Momentankonfiguration lässt sich nun auch als ein Ortsvektor

$$\mathbf{x}(t) = \sum_{k=1}^3 x^k(t) \mathbf{e}_k$$

darstellen.² Ebenso gilt dies auch für einen Materialpunkt in Referenzkonfiguration:

$$\mathbf{X} = \sum_{k=1}^3 X^k \mathbf{e}_k$$

Im Vergleich zu [Hau00] haben wir hier eine Vereinfachung vorgenommen. Prinzipiell können unterschiedliche Basen für die Darstellung der Materialpunkte in Referenzkonfiguration, und der Darstellung der Materialpunkte in Momentankonfiguration gewählt werden. Wir haben hier für beide Darstellungen der Einfachheit halber die gleiche Basis gewählt. Durch die Identifikation von Zahlentripeln mit Vektoren in einem Vektorraum können wir eine Bewegung als eine Vektorfunktion

$$\chi_R : \begin{array}{l} R[\mathcal{B}] \times [t_0, t] \longrightarrow \chi_t[\mathcal{B}] \\ (\mathbf{X}, t) \longmapsto \mathbf{x} = \chi_R(\mathbf{X}, t) \end{array}$$

angeben.

4.2 Deformationsgradient und Verzerrungstensoren

Wir werden hier zunächst den Deformationsgradienten einführen, welcher in der Kontinuumsmechanik die zentrale Größe darstellt, um Deformationen (Bewegungen von Materialpunkten) in Materialien zu beschreiben. Aus dem Deformationsgradienten leiten sich dann verschiedene Verzerrungstensoren mit unterschiedlichen Eigenschaften ab. Einen dieser Verzerrungstensoren, den *Greenschen* Verzerrungstensor, wollen wir etwas genauer vorstellen.

4.2.1 Der Deformationsgradient

Seien \mathbf{X} und \mathbf{Y} zwei Materialpunkte in der Referenzkonfiguration eines Kontinuums. Wir bezeichnen dann die Verbindungsstrecke der beiden Punkte mit dem Symbol $d\mathbf{X} = \mathbf{Y} - \mathbf{X}$. Wird der Materialkörper nun verformt, so ändert sich die gegenseitige Lage der beiden Punkte zueinander, \mathbf{X} wird in \mathbf{x} und \mathbf{Y} in \mathbf{y} überführt. Die Verbindungsstrecke zwischen beiden Punkten im verformten

²Haupt verwendet für \mathbb{R}^3 aufgefasst als Euklidischer Vektorraum das Symbol \mathbb{V}^3 , und zusätzlich noch das Symbol \mathbb{E}^3 für den Euklidischen Punktraum als denjenigen Raum in dem wir einen Materialpunkt tatsächlich wahrnehmen. Zu den Details vgl. [Hau00] (S. 12).

Zustand, d. h. in Momentankonfiguration, bezeichnen wir mit $d\mathbf{x} = \mathbf{y} - \mathbf{x}$. Die Elemente $d\mathbf{X}$ und $d\mathbf{x}$ bezeichnet man als *Linielemente*. Die Bewegung eines Linielements ist in Abbildung 4.3 veranschaulicht. Die Wahl der Bezeichnungen $d\mathbf{X}$ und $d\mathbf{x}$ soll andeuten, dass es sich um infinitesimale Größen handelt. Der Deformationsgradient stellt nun die Verbindung zwischen dem unverformten (Referenzkonfiguration) und dem verformten (Momentankonfiguration) Linielement her.

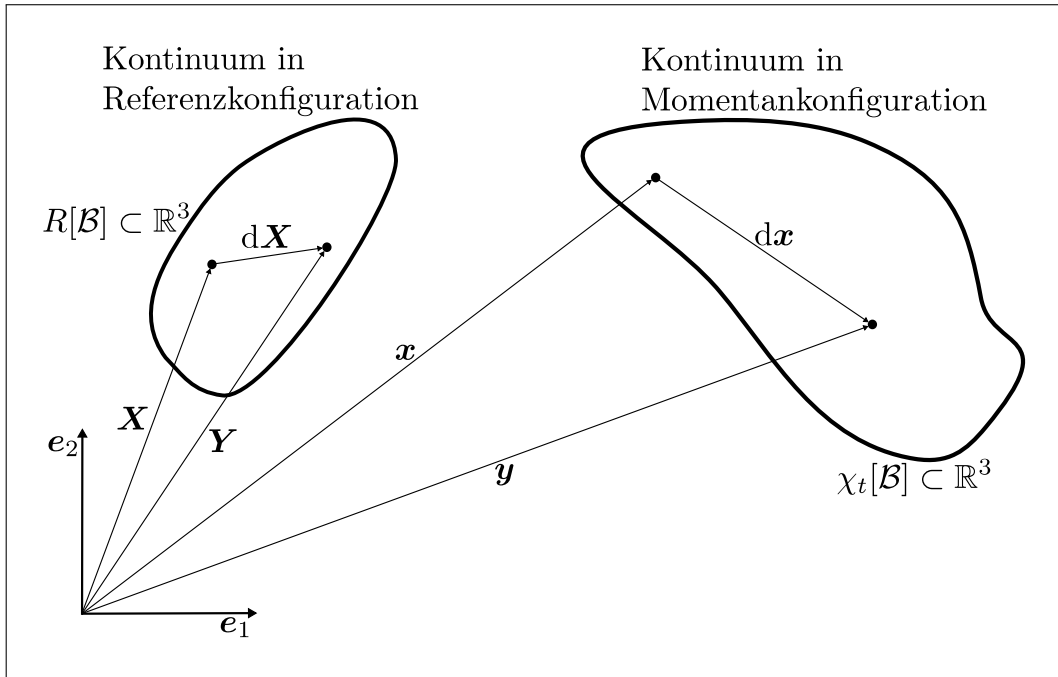


Abbildung 4.3: Zweidimensionale Darstellung eines Linielements in Referenzkonfiguration ($d\mathbf{X}$) und Momentankonfiguration ($d\mathbf{x}$). Betrag und Richtung des Linielements haben sich während der Verformung verändert.

Im Hinblick auf die Definitionen 51–53 ist die Koordinatendarstellung einer Bewegung $x^k = \chi_R^k(X^L, t)$ stetig differenzierbar. Selbiges gilt auch für die Vektordarstellung einer Bewegung $\mathbf{x} = \chi_R(\mathbf{X}, t)$. Dementsprechend existiert für ein $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^3$ eine Taylorreihenentwicklung am Punkt \mathbf{x} :

$$\chi_R(\mathbf{X} + \mathbf{H}, t) = \underbrace{\chi_R(\mathbf{X}, t)}_{\mathbf{x}} + (\text{Grad}\chi_R(\mathbf{X}, t)) \mathbf{H} + |\mathbf{H}| \Psi(\mathbf{X}, t, \mathbf{H}) \quad (4.7)$$

wobei für das Restglied

$$\lim_{|\mathbf{H}| \rightarrow 0} |\Psi(\mathbf{X}, t, \mathbf{H})| = 0$$

gilt. Der Operator „Grad“ meint die Differentiation nach den Materialkoordinaten X^1, X^2, X^3 (der so genannte *Materialgradient*, [Hau00], S. 23).

Definition 56 (Deformationsgradient). Der Materialgradient der Bewegung

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \text{Grad}\chi_R(\mathbf{X}, t)$$

d. h. die lineare Transformation

$$\mathbf{F} : \begin{array}{l} \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \\ \mathbf{H} \longmapsto \mathbf{F}\mathbf{H} \end{array}$$

nennt man *Deformationsgradient*.

Der Zusammenhang zwischen verformten und unverformten Linienelementen ergibt sich schließlich wie folgt. Wir beschreiben den Punkt \mathbf{y} durch Taylorreihenentwicklung am Punkt \mathbf{x} .³ Die Taylorreihe brechen wir nach dem linearen Term ab (lineare Approximation):

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \mathbf{x} + d\mathbf{x} \\ &= \chi_R(\mathbf{X} + d\mathbf{X}) \\ &= \underbrace{\chi_R(\mathbf{X}, t)}_{\mathbf{x}} + \underbrace{[\text{Grad}\chi_R(\mathbf{X}, t)]}_{\mathbf{F}} d\mathbf{X} \quad (\text{nach (4.7)}) \end{aligned}$$

Damit folgt nun der besagte Zusammenhang

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X}.$$

Ausgeschrieben hat der Deformationsgradient die Gestalt einer Matrix:

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x^1}{\partial X^1} & \frac{\partial x^1}{\partial X^2} & \frac{\partial x^1}{\partial X^3} \\ \frac{\partial x^2}{\partial X^1} & \frac{\partial x^2}{\partial X^2} & \frac{\partial x^2}{\partial X^3} \\ \frac{\partial x^3}{\partial X^1} & \frac{\partial x^3}{\partial X^2} & \frac{\partial x^3}{\partial X^3} \end{pmatrix},$$

wobei x^1, x^2, x^3 den Funktionen in (4.5) auf Seite 88 entspricht. Der Deformationsgradient enthält alle lokalen Eigenschaften einer gegebenen Bewegung. Entsprechend den Linienelementen lassen sich auch Oberflächen- und Volumenelemente definieren und auch für diese stellt der Deformationsgradient den Zusammenhang zwischen Referenz- und Momentankonfiguration her (vgl. Theorem 1.1 in [Hau00], S. 28).

³Dies ist möglich weil wir die beiden Punkte als unmittelbar benachbart ansehen, d. h. $d\mathbf{x}$ ist infinitesimal klein.

4.2.2 Polare Zerlegung des Deformationsgradienten

Eine Tatsache, die wir hier nicht beweisen wollen, ist, dass sich der Deformationsgradient multiplikativ in einen orthogonalen und einen symmetrischen Anteil zerlegen lässt (vgl. Theorem 1.2 in [Hau00]). Wir haben dies in Abbildung 4.4 angedeutet. Demnach besteht eine lokale Deformation aus einer Dehnung/Stauchung (in Abbildung 4.4 mit \mathbf{U} bezeichnet) und einer anschließenden Rotation (\mathbf{R} in der Abbildung) oder aus einer Rotation \mathbf{R} und einer anschließenden Dehnung/Stauchung (mit \mathbf{V} bezeichnet), d. h. es gilt

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}.$$

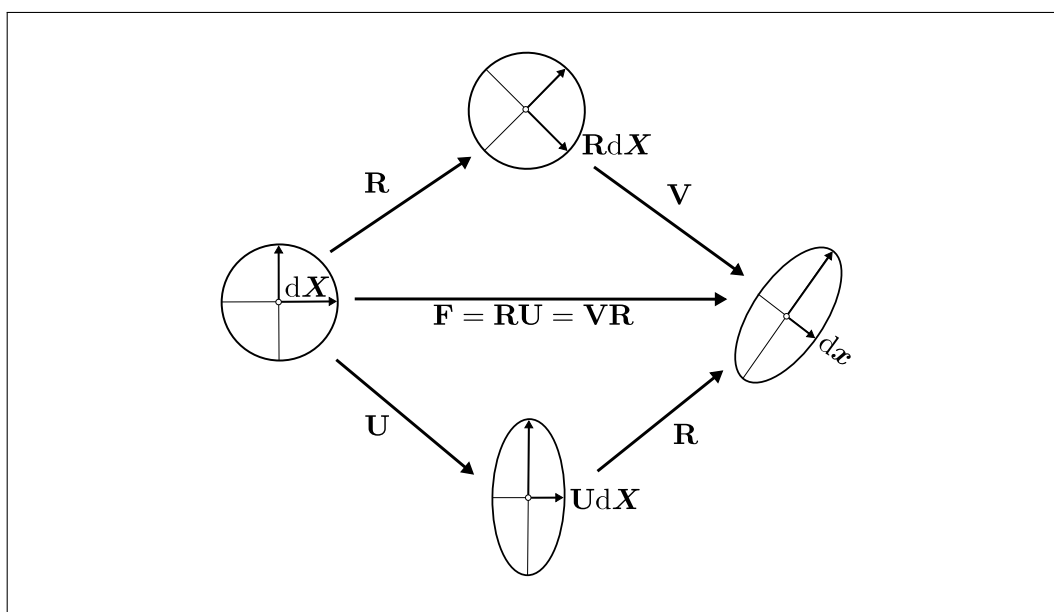


Abbildung 4.4: Polare Zerlegung des Deformationsgradienten in einen Rotations- und einen Stauchungsanteil.

Diese Komponenten einer lokalen Verformung haben eigene Namen, welche wir nun festlegen.

Definition 57. Der Tensor

\mathbf{U} heißt *rechter Dehnungstensor*

\mathbf{V} heißt *linker Dehnungstensor*

$\mathbf{C} := \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ heißt *Cauchy-Green-Tensor*

4.2.3 Der Greensche Verzerrungstensor

Wir wollen nun den *Greenschen Verzerrungstensor* einführen, welchen wir im Anschluss benötigen, um die Anwendung der 11 Integritätsbasen zu veranschaulichen. Zunächst noch eine Definition, welche die Bewegungen eines Kontinuums bei denen Abstände und Winkel zwischen Materialpunkten gleich bleiben, von solchen Bewegungen, bei denen dies nicht der Fall ist, unterscheidet.

Definition 58 (Starrkörperbewegung). Eine Bewegung der Form

$$\boldsymbol{x} = \chi_R(\boldsymbol{X}, t) = \mathbf{Q}(t)(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}_0) + \boldsymbol{x}_0(t)$$

wobei $\mathbf{Q}(t)$ ein orthogonaler Tensor abhängig von der Zeit t ist, \boldsymbol{X}_0 ein Referenzpunkt und $\boldsymbol{x}_0(t)$ eine vektorwertige Funktion der Zeit ist, wird *Starrkörperbewegung* genannt. Die Funktion $\boldsymbol{x}_0(t)$ steht für die Bewegung des Referenzpunktes \boldsymbol{X}_0 .

Die obige Definition besagt, dass sich eine solche Starrkörperbewegung nur aus einer Rotation $\mathbf{Q}(t)$ um den Referenzpunkt \boldsymbol{X}_0 und einer Translation um den Vektor $\boldsymbol{x}_0(t)$ zusammensetzt. Dies bedeutet insbesondere, dass sich das Kontinuum selbst nicht im Sinne einer Veränderung des Abstandes zweier Materialpunkte voneinander verformt ($|\mathrm{d}\boldsymbol{x}| = |\mathrm{d}\boldsymbol{X}|$). Der Deformationsgradient besteht somit nur aus der Rotation:

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{X}, t) = \mathbf{Q}(t).$$

In der Kontinuumsmechanik interessiert man sich allerdings weniger für solche Starrkörperbewegungen, sondern für Bewegungen die von Starrkörperbewegungen abweichen. Man hätte also gerne einen Verzerrungstensor, der für Starrkörperbewegungen verschwindet. Eine Möglichkeit hierfür ist der *Greensche Verzerrungstensor*.

Definition 59 (Greenscher Verzerrungstensor). Der Tensor

$$\mathbf{E}(\boldsymbol{X}, t) := \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbb{1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbb{1})$$

heißt *Greenscher Verzerrungstensor* ($\mathbb{1}$ ist hier der Einheitstensor).

Der Greensche Verzerrungstensor verschwindet wie behauptet für eine Starr-

körperbewegung⁴:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{X}, t) &= \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbb{1}) \\ &= \frac{1}{2}(\underbrace{\mathbf{Q}^T \mathbf{Q}}_{=1} - \mathbb{1}) \\ &= 0\end{aligned}$$

Die Norm des Greenschen Verzerrungstensors

$$\|\mathbf{E}\| = \sqrt{\langle \mathbf{E}, \mathbf{E} \rangle} = \sqrt{\text{Tr}(\mathbf{E}^2)} \quad (4.8)$$

ist damit ein Maß für die Abweichung einer Bewegung von einer Starrkörperbewegung.⁵

4.2.4 Anwendung der Invarianten

Nach [Hau00] (Definition 9.1, S. 326) ist ein so genanntes hyperelastisches Material durch die Existenz einer skalaren Funktion des Greenschen Verzerrungstensors \mathbf{E} , welche bestimmte Eigenschaften zu erfüllen hat, charakterisiert. Dabei ist diese skalare Funktion als Funktion der unabhängigen Komponenten von \mathbf{E} aufzufassen. Wenn wir also schreiben

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} \\ E_{21} & E_{22} & E_{23} \\ E_{31} & E_{32} & E_{33} \end{pmatrix}, \quad E_{ij} \in \mathbb{R}$$

dann hat \mathbf{E} die sechs unabhängigen Komponenten $E_{11}, E_{22}, E_{33}, E_{12}, E_{23}, E_{13}$, denn \mathbf{E} ist symmetrisch.

Nun ist ein anisotropes⁶ Material durch eine endliche Untergruppe von $O(3)$ charakterisiert ([Hau00], Definition 7.6, S. 284). Derer gibt es aus mathematischer Sicht unendlich viele. Für die Anwendung in der Kontinuumsmechanik

⁴und zwar nur für diese, was unmittelbar aus der Definition folgt.

⁵Die Norm welche in Gleichung (4.8) verwendet wird, ist die so genannte *Frobeniusnorm*, dabei ist $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das verallgemeinerte Skalarprodukt

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr}(A^T B) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{ij} b_{ij} \quad \text{für } A, B \in \mathbb{R}^{n \times m}.$$

Nach [Hau00] (S. 31) ist $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ symmetrisch und positiv definit, damit gilt dies auch für \mathbf{E} , deswegen existiert die Norm.

⁶vgl. Fußnote 1 auf Seite 6

(und nicht nur dort) sind aber nur bestimmte Untergruppen von $O(3)$ interessant. Der Grund hierfür liegt darin, dass fast alle anisotropen Feststoffe eine kristalline Struktur besitzen ([Hau00], S. 360), d. h. man betrachtet lediglich die Symmetriegruppen der 32 Kristallklassen.

Eine allgemeine Darstellung des Deformationsverhaltens anisotroper hyperelastischer Materialien verlangt für jede gegebene Symmetriegruppe G das Vorhandensein eines vollständigen Systems skalarer Funktionen, die unter jeder Transformation $g \in G$ invariant sind ([Hau00], S. 360). Diese skalaren Funktionen sind genau die Polynome, in den sechs unabhängigen Komponenten des Greenschen Verzerrungstensors welche wir als Elemente der 11 Integritätsbasen in den Abschnitten 3.5.2.1 bis 3.5.2.11 (S. 69–S. 84) angegeben haben. Die spezifische Verzerrungsenergiedichtefunktion eines solchen Materials hängt dann genau von diesen Invarianten ab, je nachdem welcher kristallinen Struktur das Material entspricht.

Literaturverzeichnis

- [BO10] BORCHARDT-OTT, Walter: *Kristallographie*. 7. überarb. und erw. Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer, 2010 (Springer-Lehrbuch)
- [Ell13] ELLIOT, E. B.: *Algebra of Quantics*. London and New York : Oxford University Press (Clarendon), 1913
- [Fis00] FISCHER, Gerd: *Lineare Algebra*. 12. Auflage. vieweg, 2000
- [Gur64] GUREVICH, G. B.: *Foundations of the Theory of Algebraic Invariants (English translation)*. Groningen : Noordhoff, 1964
- [GY03] GRACE, J. H. ; YOUNG, A.: *The Algebra of Invariants*. London, New York : Cambridge University Press, 1903
- [Hau00] HAUPT, Peter: *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Springer, 2000
- [Hur71] HURLBUT, Cornelius S. ; DANA, Edward S. (Hrsg.): *Dana's manual of mineralogy*. 18th edition. New York : Wiley, 1971
- [Lan05] LANG, Serge: *Algebra*. 3rd. Springer, 2005
- [Lom59] LOMONT, J. S.: *Applications of Finite Groups*. New York : Academic Press, 1959
- [Noe16] NOETHER, Emmy: Der Endlichkeitssatz der Invarianten endlicher Gruppen. In: *Mathematische Annalen* (1916), Nr. 77, S. 89–92
- [Olv99] OLVER, Peter J.: *Classical invariant theory*. Cambridge, New York, Melbourne : Cambridge Univ. Press, 1999 (London Mathematical Society student texts 44)
- [Smi62] SMITH, G. F.: Further Results on the Strain-Energy Function for Anisotropic Elastic Materials. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 10 (1962), Nr. 1, S. 108–118

- [Smi95] SMITH, Larry: *Polynomial Invariants of Finite Groups*. Wellesley, Massachusetts : A K Peters, 1995 (Research notes in mathematics 6)
- [SN09] SCHADE, Heinz ; NEEMANN, Klaus: *Tensoranalysis*. de Gruyter, 2009
- [Spe71] SPENCER, A. J. M. ; ERINGEN, A. C. (Hrsg.): *Continuum physics*. Bd. 1: *Theory of invariants*. Academic Press: New York, 1971
- [SR58] SMITH, G. F. ; RIVLIN, R. S.: The Strain-Energy Function for Anisotropic Elastic Materials. In: *Transactions of the American Mathematical Society* 88 (1958), May, Nr. 1, S. 175–193
- [Tur60] TURNBULL, H. W.: *The Theory of Determinants, Matrices and Invariants*. 3rd. Dover and New York, 1960
- [Wal99] WALTER, Wolfgang: *Analysis 1*. 5. Berlin, Heidelberg, New York, Barcelona, Hongkong, London, Mailand, Paris, Singapur, Tokio : Springer, 1999 (Grundwissen Mathematik)
- [Wei23] WEIZENBÖCK, R.: *Invariantentheorie*. Groningen : Noordhoff, 1923
- [Wey39] WEYL, Hermann: *The Classical Groups*. 8th. Princeton, New Jersey : Princeton University Press, 1939

Index

Symbole	
äquivariante Abbildung	59
A	
Abbildung	
äquivariante	59
absolute Invariante	35
algebraische Funktion	39
algebraische Invariante	37
anisotrop	6
Atom	6
B	
Basis (eines Kristalls)	10
Bewegung	86, 87
Bravais-Gitter	15, 20
D	
Deformation	86
Deformationsgradient	90, 92
Dihexagonal-dipyramidal	45
Ditetragonal-dipyramidal	44
Ditrigonal-dipyramidal	45
Dihexagonal-pyramidal	45
Diploidal	45
Ditetragonal-pyramidal	44
Ditrigonal-pyramidal	45
Domatisch	44
Drehachse	12
Drehinversion	14
Drehinversionsachse	14
Drehspiegelachse	14
Drehung	12
E	
Elementarmasche	7, 8
elementarsymmetrische Polynome	52
Elementarzelle	9
F	
Funktion	
algebraische	39
transzendente	39
G	
gerichtete Strecke	28
Gewicht	35
Gitter	6
Bravais-	20
ebene	6
gerade	6, 7
primitives	20
punkt	6, 7
Punkt-	6
Raum-	6, 9
translation	7
Gitterebene	6-8
Gittergerade	6, 7
Gitterpunkt	6, 7
Gittertranslation	7
Greenscher Verzerrungstensor	94
Gruppe	33
symmetrische	51
Gruppenoperation	34
Gyroidal	45
H	
Halbordnung	53, 54
Hauptsymmetrieachse	44
Hexagon	13
Hexagonal	45
Hexagonal-dipyramidal	45
Hexagonal-pyramidal	45
Hexagonal-scalenohedral	45
Hexagonal-trapezohedral	45
hexagonales Kristallsystem	19
Hexoctohedral	45
Hextetrahedral	45
homogene Invariante	37, 43
homogenes Polynom	42

I	
Integritätsbasis	38, 68
minimale	38
Invariante	
absolute	35
algebraische	37
Gewicht einer	35
homogene	37, 43
irreduzible	38
polynomielle	37
rationale	37
reduzible	38
relative	35
Invariantentheorie	33
Inversionszentrum	13
Ion	6
irreduzibel	38
isotrop	6
K	
Konfiguration	86
Momentan-	88
Referenz-	88, 89
Kontinuumsmechanik	43, 86
Kristall	6
Kristallklasse	43
Dihexagonal-dipyramidal	45
Ditetragonal-dipyramidal	44
Ditrigonal-dipyramidal	45
Dihexagonal-pyramidal	45
Diploidal	45
Ditetragonal-pyramidal	44
Ditrigonal-pyramidal	45
Domatisch	44
Gyroidal	45
Hexagonal-dipyramidal	45
Hexagonal-pyramidal	45
Hexagonal-scalenohedral	45
Hexagonal-trapezohedral	45
Hexoctohedral	45
Hextetrahedral	45
Pedial	44
Pinacoidal	44
Prismatisch	44
Rhombisch-disphenoidal	44
Rhombisch-dipyramidal	44
Rhombisch-pyramidal	44
Rhombohedral	45
Sphenoidal	44
Tetartoidal	45
Tetragonal-dipyramidal	44
Tetragonal-disphenoidal	44
Tetragonal-pyramidal	44
Tetragonal-scalenohedral	44
Tetragonal-trapezohedral	44
Trigonal-dipyramidal	45
Trigonal-pyramidal	45
Trigonal-trapezohedral	45
Kristallstruktur	10
Kristallsystem	
Hexagonales	45
Kubisches	45
Monoklines	44
Rhombisches	44
Tetragonales	44
Triklines	44
hexagonales	19
kubisches	20
monoklines	16
rhombisches	18
tetragonales	18
triklines	16
Kronecker-Delta	23
Kubisch	45
kubisches Kristallsystem	20
L	
lexikographische Ordnung	54
Linielement	91
logarithmische Ableitung	52
M	
Materialelement	86
Materialkörper	86
Materialpunkt	86
minimal	38
Molekül	6
Momentankonfiguration	88
Monoklin	44
monoklines Kristallsystem	16
Multigrad	61
multihomogenes Polynom	61
N	
Netzebene	7, 8
Newtons Identität	53

O		Strecke	28
Ordnung		gerichtete	28
lexikographische	54	Symmetrie	
partielle	54	element	12
orthogonale Transformation	26	Symmetrieelement	12
Orthogonalitätsrelation	26	Symmetriegruppe	46
P		Symmetrietransformation	11
partielle Ordnung	54	symmetrische Gruppe	51
Partikel	86	symmetrisches Polynom	51
Pedial	44	T	
Pentagon	13	Tensor	32
Permutation	50	zweiter Stufe	32
Pinacoidal	44	Tensoranalysis	22
Polynom		Tetartoidal	45
elementarsymmetrisches	52	Tetragonal	44
homogenes	42	Tetragonal-dipyramidal	44
multihomogenes	61	Tetragonal-disphenoidal	44
polarisiertes elementarsymmetrisches		Tetragonal-pyramidal	44
57		Tetragonal-scalenohedral	44
symmetrisches	51	Tetragonal-trapezohedral	44
polynomielle Invariante	37	tetragonales Kristallsystem	18
Potenzsumme	51, 52	Transformation	23
primitives Gitter	20	kartesischer Koordinatensysteme ..	24
Prismatisch	44	orthogonale	26
Punktgitter	6	Symmetrie-	11
Punktspiegelung	13	von Basisvektoren	26
Q		von gerichteten Strecken	28
Quotientenkörper	39	von Punktkoordinaten	27
R		Transformationsgesetz	
rationale Invariante	37	für Basisvektoren	26
Raumgitter	6, 9	für gerichtete Strecken	29
reduzibel	38	für Punktkoordinaten	28
Referenzkonfiguration	43, 88, 89	Transformationskoeffizient	25
relative Invariante	35	Transformationsmatrix	25
Rhombisch	44	Translationsperiode	8
Rhombisch-disphenoidal	44	Translationsvektor	7
Rhombisch-dipyramidal	44	transzendente Funktion	39
Rhombisch-pyramidal	44	Trigonal-dipyramidal	45
rhombisches Kristallsystem	18	Trigonal-pyramidal	45
Rhombohedral	45	Trigonal-trapezohedral	45
S		Triklin	44
Sphenoidal	44	triklines Kristallsystem	16
Spiegelebene	13	U	
Spiegelung	13	Untergruppe	33
Starrkörperbewegung	94	V	
		Verzerrungstensor	

Greenscher	94		
		W	
Wertevorrat	22		
			Z
		Zähligkeit	12

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich diese Diplomarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

München, 2. Februar 2011
