

Pretty Little Crystals

Krystallografi fra et matematisk aspekt
Speciale

10. januar 2018

• Vini Mølgaard Olsen •



Institut for Matematiske Fag

Skjernvej 4A • 9220 Aalborg Ø • 99409940



AALBORG UNIVERSITY
STUDENT REPORT

Institut for Matematiske Fag

Matematik

Skjernvej 4A

99409940

<http://math.aau.dk>

Synopsis:

Givet en krystallografisk gruppe G , har vi en abelsk normal undergruppe Γ , bestående af translationer, en kvotient gruppe G/V , der er isomorf til den krystallografiske punktgruppe G_0 og en virkning G_0 på gitteret Γ . Lad G_0 afbilde Γ ind i sig selv. Her vil de ordnede par (G_0, Γ) bestemme en aritmetisk krystalklasse. Vi spørger efter de mulige krystallografiske grupper i (G_0, Γ) , hvorfor formålet med specialet er at introducere en metode til at finde de krystallografiske grupper i (G_0, Γ) , således vi kan finde de 230 krystallografiske grupper. Ifm. dette vil specialet introducere teori der præsenterer isometrier i det n -dimensionelle euklidiske rum, introducere de mulige krystallografiske punktgrupper som opfylder den krystallografiske restriktion. Gitteret Γ og virkningen af en punktgruppe, der lader gitteret være invariant, samt definitionen af en krystallografisk gruppe.

Titel:

Pretty Little Crystals

Tema:

Diskret Matematik

Studerende:

Vini Mølgaard Olsen

Vejleder:

Martin Raussen

Sider: 64 (65 inkluderet index)

Afsluttet den: 10. januar 2018

Abstract

The purpose of this master's thesis is to define a crystallographic group and describe how to find them. To do this we examine isometries of the three-dimensional euclidean space. In Kapitel 1 we will be familiar with isometries such as translations and orthogonal maps. The chapter is to be seen as an introduction where concepts are used in the later chapters. Isometries that hold at least one point in the lattice, such as rotations about an axis, reflections or a combination of these form a group. This group describes the symmetry of the crystal itself and is called the crystal point group. In Kapitel 2 introduces these crystallographic point groups and we find that there are 32 point groups known as geometric crystal classes.

Any translation within the three-dimensional euclidean space is defined by a translation vector that can be described as a combination of three independent base vectors. All translation vectors depicting the crystal itself form a three-dimensional lattice in the space. In Kapitel 3, a n -dimensional lattice is introduced, after which some examples are considered, including one associated with the acts of a point group on the lattice of the three-dimensional euclidean space in combination with the introduction of the 73 arithmetic crystal classes. Here we describe 14 different Bravais lattice types, named after the French mathematician and geophysician A. Bravais, after classifying the possible lattices around 1834.

The central results regarding crystallographic groups were proven by Bieberbach in the years 1910-1912, because of this in Kapitel 4 we postulate his results. In addition, we become acquainted with the terminology affine equivalent. Affine equivalent plays a major role in Kapitel 5 where we see when two crystallographic groups are considered to be the same and thus arrive at the 230 crystallographic groups. The mentioned chapters except Kapitel 1 play an important role in how we reach the 230 crystallographic group. We start from six crystal families and work us down to 230 actually affine crystallographic groups.

Læsevejledning

Dette projekt er blevet produceret i efteråret 2017, som et specialeprojekt i 11. semester i matematik på Aalborg universitet. I forbindelse med at forstå konceptet til fulde, kræves at læseren har kendskab til gruppeteori i forbindelse med kurset *Algebra 1* på Aalborg universitet, samt kan identificere forskellige typer af isometrier, så som spejlinger og glidespejlinger, både i to- og tre-dimensioner. Herunder forventets også man genkender egenskaberne ved gruppen $O(n)$, i forbindelse med matricer og deres determinant.

I sammenspil med symboler, vil der i rapporten bruges \subset i stedet for \subseteq , i tilfælde hvor der ikke sker lighedstegn vil \subsetneq blive favoriseret.

Igennem projektet følger definitioner, eksempler, sætninger mv. den samme nummereringssystem, hvor de første to cifre angiver afsnittet. Afslutningen af et bevis er illustreret med en ■, mens afslutningen af et eksempel er illustreret med en ◀. Ligninger følger en separeret nummereringssystem, hvor det første ciffer indikere kapitlet. Figurer og tabeller er hver nummeret ved et enkelt tal.

I slutningen af projektet er inddraget et index over mest anvendte symboler, samt bibliografi af kilder. Ved nogle kilder har årstallet for forskellige kilders udgivelsesår været uvist, hvorfor disse er benævnt med årstallet 0000. Vi får derfor ved kildehenvisning (*Efternavn* 0000), ved de kilder med uvist udgivelsesår.

Indhold

Abstract	i
Læsevejledning	iii
Indledning	vi
Afgrensning	viii
Kapitel 1 Grundlæggende begreber	1
1.1 Den affine gruppe	1
1.2 Isometrier	3
Kapitel 2 Krystallografiske punktgrupper	10
2.1 Endelige rotationsgrupper	13
2.2 Endelige undergrupper af $O(3)$	24
2.3 Geometriske krystalklasser	27
Kapitel 3 Gitter	29
3.1 Aritmetiske krystalklasser	34
Kapitel 4 Krystallografiske grupper	38
4.1 Bieberbachs resultater	40
Kapitel 5 Gruppe kohomologi	43
Kapitel 6 Konklusion	59
Kapitel 7 Perspektivering	61
Bibliografi	63
Indeks	

Indledning

Vi mennesker har været fascineret af krystallerne, overrasket, og betaget af deres regelmæssige geometri, deres særlige symmetri og mystiske farvebrydninger. Menneskets fascination af krystaller skinner igennem fra en tidlig tidsalder og grundet denne fascination, er krystallerne aldrig blevet glemt i naturen, men er blevet brugt inden for forskellige fag/grene, og ikke blot i naturfagene. Kunsten er en af de steder, hvor krystallerne bryder tydeligt frem af finde. Mellem de europæiske kunstnere, som tiltræk sig stor opmærksomhed med brug af krystaller, er tyskeren M. Escher. Escher skabte mange interessante kunstværker, ved brug af hans kreative evner, hvilket gjorde de fleste krystallografer interesseret i hans arbejde. Eschers kunstværker fascinerede krystallograferne allerede fra begyndelsen, hvor mange gjorde brug af værkerne i undervisningen af krystallografi, samt bøger, der bearbejdede værkerne i et krystallografisk øjemed, blev udgivet. Hvorfor denne store interesse inden for Eschers kunstværker (Necefoglu 2003)?

Krystallografer er forskere, som studerer hvorledes solide stoffer er dannet af atomer og molekyler. Deres mål var at etablere en sammensmeltning mellem deres interne struktur og egenskaber. Fra 1912 begyndte krystallograferne at opdage strukturen af krystaller ved at anvende røntgenstråler. Det viste sig at atomer og molekyler disponerede sig i krystaller som Escher illustrerede. Dog ulig Eschers kunstværker arrangerede atomgrupperne og molekylerne, som dannede krystaller, sig periodisk i et tre-dimensionalt rum (Necefoglu 2003).

Ordet krystal er græsk og betyder is. Krystaller er faste stoffer, hvis komponenter atomer, ioner eller molekyler udgør en regelmæssig krystalstruktur, matematisk benævnt som et gitter. Vi anvender ofte ordet krystal til at betegne krystallernes form, når de udvikles ud fra deres rumlige gitter (Greuel 2015).

Betragtes Krystallografi geometrisk, kan det anskue som sigtning mod at klassificere den rumlige fordeling af atomer, ioner eller molekyler af en krystal ifølge dens symmetrier. Den rumlige arrangement af atomerne, ionerne eller molekylerne af en krystal kaldes for dens struktur. Isometrier af krystalstrukturen danner herefter den såkaldte krystallografiske gruppe af krystallen. Den centrale del af teorien omhandlende krystallografiske grupper er tilknyttet studiet om symmetriske ornamenten, $n = 2$, og krystaller, $n = 3$. En klassifikation af alle planar og rumlige krystallografiske grupper blev opnået i slutningen af 19-århundredet af E.S. Fedorov, som var en russisk matematiker, krystallograf og mineralogist. Senere af A. Schoenflies, som var en tysk matematiker. I forbindelse med

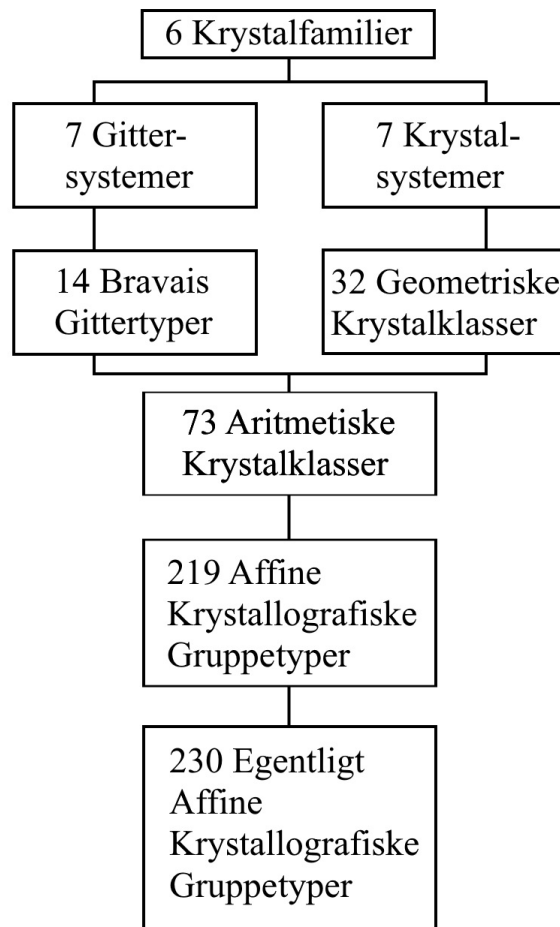
ækvivalens relation, konkluderes at der eksistere 17 planer og 219 rumlige krystallografiske grupper. Dog hvis de rumlige grupper betragtes, at være konjugerede i sammenhæng med orienteret bevarende affine afbildninger, eksistere der 230 rumlige krystallografi grupper, beskrevet som egentligt affine typer af krystallografiske grupper. Schoenflies fandt de 230 typer beskrevet ved symmetri grupper af regelmæssige punktsystemer. E.S. fedorov fandt de samme klasser af symmetri grupper omkring 1890, da han fastlagde rummets normalisatorer. Begge klassifikationer skete ved at analysere arrangementet af symmetrielementer; rotationer, skrueaser, refleksioner, glidespejlinger eller rotations spejlinger (Strebel 2003), (Vinberg 2016).

Krystaller klassificeres efter deres symmetriske egenskaber, hvorfor vi undersøger isometrier af det tre-dimensionelle euklidiske rum. I Kapitel 1 skal vi gøre os bekendte med isometrier, såsom translationer og ortogonale afbildninger, ydermere introduceres den affine gruppe. Kapitlet skal forstås som en introduktion hvor der præsenteres begreber, der bruges i de senere kapitler. Isometrier som fastholder mindst et punkt i gitteret, for eksempel rotationer omkring en akse, refleksioner eller en kombination deraf, danner en gruppe. Denne gruppe beskriver symmetrien for selve krystallen og kaldes krystallets punktgruppe. I Kapitel 2 introduceres disse krystallografiske punktgrupper og vi finder der eksisterer 32 punktgrupper, kendt som geometriske krystalklasser. De forskellige punktgrupper er kombineret i et krystalsystem. I dag, eksisterer syv forskellige krystalsystemer.

Enhver translation indenfor det tre-dimensionelle euklidiske rum er defineret af en translationsvektor, der kan beskrives som en kombination af tre uafhængige basis vektorer. Alle translationsvektorer, der afbilder krystallet ind i sig selv, former et tre-dimensionel gitter i rummet. I Kapitel 3 introduceres et n -dimensionel gitter, hvorefter der betragtes nogle eksempler, herunder et i forbindelse med virkningen af en punktgruppe på gitteret i det tre-dimensionelle euklidiske rum, i sammenspil med introduktion af de 73 aritmetiske krystalklasser. Vi beskriver her 14 forskellige Bravais gittertyper, hvilket er opkaldt efter den franske matematiker og geofysiker A. Bravais, efter han klassificerede de mulige gitre omkring 1834.

De centrale resultater omhandlende krystallografiske grupper, blev bevist af Bieberbach i årene 1910-1912, hvorfor vi i Kapitel 4 postulerer hans resultater. Yderligere bliver vi bekendte med terminologien affin ækvivalent. Affin ækvivalent spiller en stor rolle i Kapitel 5, hvor vi ser hvornår to krystallografiske gruppe anses at være ens, og således kommer frem til de 230 krystallografiske grupper. De nævnte kapitler, undtagen Kapitel 1, spiller en vigtig rolle, for hvorledes vi kommer frem til de 230 krystallografiske gruppe. Vi ser fra Figur 1 hvorledes vi starter fra seks krystalfamilier og arbejder os ned til 230 egentligt affine krystallografiske grupper. Vi kan herfra udlede en problemformulering som;

Hvad er en Krystallografisk gruppe og hvordan kan man klassificere dem, samt hvor mange forskellige krystallografiske grupper findes der?



Figur 1. Struktur for at finde de 230 krystallografiske grupper.

Afgrænsning

Ser vi på Figur 1, er der introduceret nogle emner som ikke vil blive behandlet i projektet. Der vil ikke blive uddybet i de seks krystalfamilier, samt de syv krystalsystemer og gittersystemer, dog vil de sidste blive nævnt i forbindelse med geometriske krystalklasser og gittertyper. Ydermere vil kun benævnes, at der eksisterer 73 aritmetiske krystalklasser, hvor der indrages et eksempel på hvorledes vi finder en aritmetisk krystalklasse. Endvidere vil de fjorten Bravais gittertyper kun blive beskrevet kort, mens et eksempel for den kubiske gittertype bearbejdes, og i samspil introduceret de tre kubiske gitre. Vi forholder os derfor kun til højre side af Figur 1, samt det punkt hvor vi finder de 219 affine krystallografiske grupper. Metoden for at finde de resterende egentligt affine krystallografiske grupper bliver introduceret kort, da teorien er lignende den for affine krystallografiske grupper. Teorien for at komme fra de 73 aritmetiske krystalklasser til de 219 munder ud i kun et eksempel, hvor vi betragter en aritmetisk krystalklasse $P4$ der splittes til fire egentligt affine krystallografiske typer. Tankegangen bag eksemplet kan dog benyttes ved andre aritmetiske krystalklasser.

KAPITEL 1

Grundlæggende begreber

Følgende kapitel introduceres for at give indblik i de basale grundlæggende begreber, som benyttes i de senere kapitler. Vi starter med at introducere den affine gruppe efterfulgt af isometrier. Ved introduktion af den affine gruppe arbejder vi i det reelle vektorrum \mathbb{R}^n og med dens tilhørende egenskaber, mens vi ved introduktionen af isometrier også definerer et nyt vektorrum, hvilket er en delmængde af \mathbb{R}^n , betegnet som det n -dimensionelle euklidiske rum, samt nogle simple egenskaber som bevares fra det reelle vektorrum.

1.1 Den affine gruppe

Vi starter med at præsentere den affine gruppe, defineret $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$, afsnittet er baseret på (Abhyankar m.fl. 2002). For at udtrykke dette på et hurtigt og nemt niveau betragtes rummet \mathbb{R} og afbildningen

$$x \mapsto ax + b,$$

for $a, b \in \mathbb{R}$. Her kræves at $a \neq 0$, da ellers vil den ikke være en afbildning, ydermere hvis $b \neq 0$ vil den ikke være en lineær afbildning, da 0 ikke er fast. Lad H være en mængde af afbildninger $\{x \mapsto ax + b \mid a \neq 0, a, b \in \mathbb{R}\}$. Vi viser hurtigt at H er en gruppe. Hvis H er en gruppe vil gruppeoperation være kompositionen af afbildninger. Først undersøges om den er lukket under komposition. Lad $f : x \mapsto ax + b$ og $g : x \mapsto cx + d$. Ved sammensætning af f og g fås $f \circ g : x \mapsto cax + cb + d$, da $0 \neq ca \in \mathbb{R}$ og $(cb + d) \in \mathbb{R}$ gælder at $f \circ g \in G$. Associativ kommer automatisk, da kompositionen af to arbitrære afbildninger er associativ. Hvis $a = 1$ og $b = 0$ har vi identitets elementet. Sidste tjekkes invers. Hvis $f : x \mapsto ax + b$ så er invers $f^{-1} : x \mapsto \frac{x}{a} - \frac{b}{a}$. Da der gælder $a \neq 0$, skabes ingen problematik med a som nævner.

Afbildningen $x \mapsto ax + b$ kalder vi en affin afbildning og gruppen H bestående af affine afbildninger $x \mapsto ax + b$, hvor $a \neq 0$, for den affine gruppe af \mathbb{R} . En affin afbildning er en funktion mellem to affine rum, som bevarer punkter, streger og planer. Yderligere forbliver parallelle linjer parallelle. En affin afbildning bevarer ikke nødvendigvis vinklen mellem linjer, eller afstanden mellem punkter. Ydermere bemærkes at en affin afbildning $x \mapsto ax + b$ gør to forskellige ting ved x . Den skalere x med $a \neq 0$ og translaterer med b . Det er tydeligt at den additive gruppe \mathbb{R}^+ , som består af reelle tal \mathbb{R} , er isomorf til undergruppen $N = \{x \mapsto ax + b \mid a = 1\} = \{x \mapsto x + b\}$, hvilket består af translationer. Den generelle definition for en translation er:

1.1.1 Definition (Translation):

Lad vektor $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$. En afbildning $t_a : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ defineret ved følgende

$$t_a(\mathbf{x}) = \mathbf{a} + \mathbf{x}$$

kaldes en translation af \mathbb{R}^n .

Inversafbildningen af t_a udtrykkes som t_a^{-1} og t_0 definerer identitets elementet.

Yderligere er den multiplikative gruppe \mathbb{R}^\times , bestående af ikke-nul elementer af \mathbb{R} , isomorf til undergruppen $A = \{x \mapsto ax + b \mid a \neq 0, b = 0\} = \{x \mapsto ax \mid a \neq 0\}$ hvilket består af skaleringer.

Gruppen af affine lineære afbildninger af \mathbb{R} er et produkt af de to undergrupper $N = \{x \mapsto x + b\}$ og $A = \{x \mapsto ax \mid a \neq 0\}$. Bemærk at dette ikke er det direkte produkt, men dog det semidirekte produkt.

1.1.2 Definition:

Lad H og K være grupper med henholdsvis gruppe multiplikation ' \circ ' og ' $+$ '. Yderligere eksisterer en gruppehomomorfi $\alpha : H \rightarrow \text{Aut}(K)$, hvor $\text{Aut}(K)$ indikerer alle automorfierne af gruppen K . Ækvivalent med dette har vi en venstrevirkning af H på K ved gruppeautomorfier. Det semidirekte produkt $K \rtimes H$ af grupperne H og K er mængden af alle par (h, k) for $h \in H$ og $k \in K$ med følgende multiplikation

$$(k_1, h_1)(k_2, h_2) = (k_1 + h_1(k_2), h_1 h_2).$$

For at forklare hvorledes dette er sandt, undersøges hvorledes de to undergrupper N og A er inden i H . Først bemærkes at enhver affin afbildning $f : x \mapsto ax + b$, hvor $a, b \in \mathbb{R}$ og $a \neq 0$ er en komposition ud fra et element fra N og et element fra A . Ydermere ses at $N \cap A = x \mapsto x$, hvor $a = 1$ og $b = 0$, hvilket angiver identitetsafbildningen, en afbildning, der fastholder elementerne. Sidst ses at N er normal i G , da hvis $g : x \mapsto x + d$ tilhører N og $f : x \mapsto ax + b$ tilhører A , så gælder $f \circ g \circ f^{-1} : x \mapsto x + ad$ tilhørende N . Disse tre betingelser argumentere for hvorledes N og A forholder sig i G , hvilket karakterisere strukturen kaldt det indre semidirekte produkt.

1.1.3 Definition:

En gruppe H er betegnet en indre semidirekte produkt af undergrupperne N og A , hvis følgende betingelser holder

- (i) N er en normal undergruppe af H
- (ii) N og A er permutable komplementar, således $G = NA$ og $N \cap A = \{id_H\}$, hvor id_H er identitets elementet af H .

Ved brug af det indre semidirekte produkt, kan vi nu generalisere definitionen af den affine gruppe af \mathbb{R} til \mathbb{R}^n . Lad A være gruppen af alle nonsingulære lineære afbildninger i \mathbb{R}^n , denne gruppe er den generelle lineære gruppe af \mathbb{R}^n , betegnet som $GL_n(\mathbb{R})$. Betragt afbildningen $\mathbf{x} \mapsto \phi(\mathbf{x}) + \mathbf{b}$, hvor $\phi \in A$ og \mathbf{b} er en n -dimensional vektor af \mathbb{R}^n . Vi definere

den affine gruppe af \mathbb{R}^n ved $\text{Aff}(\mathbb{R}^n) = \{\mathbf{x} \mapsto \phi(\mathbf{x}) + \mathbf{b} \mid \phi \in \text{Gl}_n(\mathbb{R}), \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n\}$. Bemærk at den affine gruppe af \mathbb{R}^n er det indre semidirekte produkt af N ved $\text{Gl}_n(\mathbb{R})$, hvor N betegner den normale undergruppe bestående af translationer t_a af \mathbb{R}^n . Ved brug af Definition 1.1.2 kan vi definere en gruppehomomorfi $\alpha : \text{Gl}_n(\mathbb{R}) \rightarrow \text{Aut}(\mathbb{R}^n)$.

Vi vil nu begive os ud i at introducere isometrier.

1.2 Isometrier

Følgende afsnit er baseret på (Szczepanski 2012), (Klemm 1982), (Lauritzen 2003), (Iversen 1995), (Rowland 2017) og (Hiller 1986). Vi stater med at betegne et nyt rum, som er en delmængde af \mathbb{R}^n . Lad \mathbb{E}^n betegne det n -dimensionelle Euklidiske rum, hvor det indre produkt af to vektorer \mathbf{v} og \mathbf{w} udtrykkes som $\langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle = \sum_{i=1}^n v_i w_i$, normen af en vektor \mathbf{v} er $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^n v_i^2}$, mens en metrik defineres som $d(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n (v_i - w_i)^2}$, hvor $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^n$ og $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_n) \in \mathbb{R}^n$. Vi har at alle euklidiske rum er affine, mens affine rum nemt kan være ikke-euklidiske rum.

En isometri er en bijektiv afbildning $f : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$, som er afstandsbevarende.

1.2.1 Definition (Isometri):

En bijektiv afbildning $f : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$ kaldes en isometri af \mathbb{E}^n , hvis der for enhver $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{E}^n$, gælder

$$d(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = d(f(\mathbf{v}), f(\mathbf{w})).$$

Mængden af alle isometrier i \mathbb{E}^n definerer en gruppe $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ med sammensætninger af afbildninger som komposition. Senere vises at $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ er en gruppe, men først introduceres nogle begreber.

I forbindelse med isometrier er det nyttigt at se på forskellige isometrier: translationer, hvilken er introduceret i Definition 1.1.1 og lineære ortogonale afbildninger. Vi ved en translation er en afbildning der flytter ethvert punkt $\mathbf{x} \in \mathbb{E}^n$ med en fast afstand og retning, hvor flytningen er givet ved en vektor \mathbf{a} . Der gælder herfra, at en translation er afstandsbevarende og således en isometri.

1.2.2 Proposition:

En translation $t_a : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$ er en isometri, hvor $\mathbf{a} \in \mathbb{E}^n$.

Bevis:

Lad $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{E}^n$ så gælder

$$d(t_a(\mathbf{x}), t_a(\mathbf{y})) = \|(\mathbf{a} + \mathbf{x}) - (\mathbf{a} + \mathbf{y})\| = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| = d(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad \blacksquare$$

Yderligere er en sammensætning af to translationer $t_{a+b} = t_a t_b$ også en translation. Mængden af alle translationer af \mathbb{E}^n former en normal undergruppe af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$. Lad nu $V = \{t_a : \mathbf{a} \in \mathbb{E}^n\}$ definere vektorrummet indeholdende translationerne. Betragter vi tidligere gruppe $N = \{\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x} + \mathbf{b}\}$, for $\mathbf{b} \in \mathbb{E}^n$, præcenteret i afsnittet ovenover, ser vi at

elementerne i N er ens med elementerne i V , for $\mathbf{a} = \mathbf{b}$, hvorfor der gælder at den affine gruppe kan defineres som $\text{Aff}(\mathbb{E}^n) = V \times \text{Gl}_n(\mathbb{R})$. $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$ betegner her den affine gruppe af det euklidiske rum \mathbb{E}^n .

En ortogonal afbildning er en invertibel lineær afbildning $\phi : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$, der bevarer det indre produkt.

1.2.3 Definition:

En lineær afbildning $\phi : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$ kaldes ortogonal, hvis der gælder

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle,$$

for alle \mathbf{x} og \mathbf{y} .

Ydermere er ϕ bijektiv, da $\phi(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ medfører at $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ og dermed injektiv. Vi viser nu at hvis ϕ er en isometri, der fastholder origo, så er ϕ en ortogonal afbildning.

1.2.4 Sætning:

Lad ϕ være en isometri, hvor der gælder $\phi(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$. Så er ϕ en ortogonal afbildning.

Bevis:

Antag at ϕ er en ortogonal afbildning og lad $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{E}^n$. Udtryk $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$ så gælder

$$\|\phi\mathbf{u}\|^2 = (\phi\mathbf{u})^T(\phi\mathbf{u}) = \mathbf{u}^T\phi^T\phi\mathbf{u} = \|\mathbf{u}\|^2.$$

Dermed er $\|\phi\mathbf{u}\| = \|\mathbf{u}\|$. Yderligere er

$$d(\phi\mathbf{v}, \phi\mathbf{w}) = \|\phi\mathbf{v} - \phi\mathbf{w}\| = \|\phi(\mathbf{v} - \mathbf{w})\| = \|\phi\mathbf{u}\| = \|\mathbf{u}\| = \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\| = d(\mathbf{v}, \mathbf{w}).$$

Ud fra Definition 1.2.1 må gælde at ϕ er en isometri.

Omvendt, hvis ϕ er en isometri gælder $d(\phi\mathbf{v}, \phi\mathbf{w}) = d(\mathbf{v}, \mathbf{w})$ og navnlig $\|\phi\mathbf{v}\| = \|\mathbf{v}\|$, for alle $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{E}^n$. Dette medfører

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle &= \frac{1}{2}(\|\mathbf{v}\|^2 + \|\mathbf{w}\|^2 - \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|^2) \\ &= \frac{1}{2}(\|\phi\mathbf{v}\|^2 + \|\phi\mathbf{w}\|^2 - \|\phi\mathbf{v} - \phi\mathbf{w}\|^2) \\ &= \langle \phi\mathbf{v}, \phi\mathbf{w} \rangle. \end{aligned}$$

ϕ bevarer således det indre produkt, denne betingelse er ikke en tilstrækkelig betingelse, for at antage ϕ er ortogonal. Derfor lad $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ være en ortonormal basis for \mathbb{E}^n , så gælder at $\langle \phi\mathbf{e}_i, \phi\mathbf{e}_j \rangle = \langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle$ er lig 0 eller 1, for $i, j = \{1, \dots, n\}$, hvorfor $\phi\mathbf{e}_1, \dots, \phi\mathbf{e}_n$ også er en ortonormal basis for \mathbb{E}^n . For vilkårlig $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{E}^n$ gælder, at for alle $\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n x_i \mathbf{e}_i \in \mathbb{E}^n$, for $i = \{1, \dots, n\}$, hvor der gælder $x_i = \langle \mathbf{v}, \mathbf{e}_i \rangle = \langle \phi\mathbf{v}, \phi\mathbf{e}_i \rangle$, har \mathbf{v} og \mathbf{x} ens koefficienter, hvorfor der må gælde $\phi\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n x_i(\phi\mathbf{e}_i)$.

Dette bevirker, sammen med $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^n y_i \mathbf{e}_i$, konstrueret på samme som \mathbf{v} , at,

$$\phi(\mathbf{v} + \mathbf{w}) = \phi \sum_{i=1}^n (x_i + y_i) \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^n (x_i + y_i) \phi\mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^n x_i \phi\mathbf{e}_i + \sum_{i=1}^n y_i \phi\mathbf{e}_i = \phi\mathbf{v} + \phi\mathbf{w}.$$

Yderligere medfølger at $\phi(a\mathbf{v}) = a(\phi\mathbf{v})$, for alle $a \in \mathbb{R}$. Hvilket konkluderer at ϕ er lineær. For $\phi\mathbf{v} = \mathbf{0}$ må der gælde

$$\|\mathbf{v}\| = \|\phi\mathbf{v}\| = 0,$$

hvorfor $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ og dermed injektiv. Da vi ved at $\dim(\mathbb{E}^n) < \infty$ er ϕ surjektiv, hvilket bevirker at ϕ er bijektiv, og dermed ortogonal. ■

Senere i projektet vil det være oplagt at arbejde med en ortogonal matrix. Derfor hvis ϕ er en ortogonal afbildning og således en lineær isometri, er den specielt en lineær operator, $\phi \in \mathcal{L}(\mathbb{E}^n)$, så ϕ definerer en $n \times n$ ortogonal matrix A . Matricen A beskriver dermed en lineær isometri i \mathbb{E}^n og $\phi(\mathbf{x}) = A\mathbf{x}$ for alle $\mathbf{x} \in \mathbb{E}^n$. En ortogonal afbildning fikserer origo, derfor hvis ϕ er en lineær isometri så gælder at, den er længdebevarende, vinkelbevarende og bevarer prikproduktet. Vi har således, at $A\mathbf{0} = \mathbf{0}$ og $\langle A\mathbf{x}, A\mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$, dette udnyttes til nedenstående sætning.

1.2.5 Sætning:

Lad $\phi \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ og A være en ortogonal $n \times n$ matrix. $\phi \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ hvis og kun hvis $A^T A = I$.

Bevis:

Lad ϕ være en isometri, der bevarer det indre produktet så gælder

$$\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle = \langle A\mathbf{x}, A\mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^T \cdot I\mathbf{y}.$$

Ydermere har vi

$$\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle = \langle A\mathbf{x}, A\mathbf{y} \rangle = (A\mathbf{x})^T \cdot A\mathbf{y} = \mathbf{x}^T \cdot (A^T A)\mathbf{y}. \quad (1.1)$$

Hvilket medfører at $A^T A = I$. Omvendt bevarer $\phi \in \mathcal{L}(\mathbb{E}^n)$ prikproduktet, hvis $A^T A = I$. Yderligere ved indsættelse af $\mathbf{y} = \mathbf{x}$ i Ligning (1.1) har vi at $d(\phi\mathbf{x}, \phi\mathbf{x})^2 = d(\mathbf{x}, \mathbf{x})^2$. Fra lineariteten af ϕ følger at

$$d(\phi\mathbf{x}, \phi\mathbf{y}) = \|\phi\mathbf{x} - \phi\mathbf{y}\| = \|\phi(\mathbf{x} - \mathbf{y})\| = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| = d(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad \blacksquare$$

Mængden af matricer i \mathbb{E}^n , som tilfredsstillere egenskaben $A^T A = I$, er en undergruppe af $\text{Gl}_n(\mathbb{R})$, defineret ved $O(n)$ og kaldes for ortogonal gruppen.

De to typer isometrier, translation og ortogonal afbildning, er nu introduceret, og det er muligt at skrive at enhver isometri er en kombination af disse.

1.2.6 Proposition:

Enhver isometri kan skrives entydigt som en sammensætning af en ortogonal lineær afbildning og en translation. Lad $f : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$ være en isometri af \mathbb{E}^n , så eksisterer der en translation t_a og en ortogonal afbildning $\phi : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$ således $f = t_a \circ \phi$, defineret som (\mathbf{a}, ϕ) .

Bevis:

Lad $f : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$ være en isometri i \mathbb{E}^n . Definerer $\phi(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{0})$, så gælder $\phi(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ og $f(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) + f(\mathbf{0})$. Lad $\phi(\mathbf{0}) \in \mathbb{E}^n$ og sæt $\mathbf{a} = -f(\mathbf{0})$. Da både f og t_a er isometrier gælder $f, t_a \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ og

$$\phi(\mathbf{x}) = t_a(\mathbf{x}) \circ f = (\mathbf{a}, f)(\mathbf{x}) = \mathbf{a} + f(\mathbf{x}) = -f(\mathbf{0}) + f(\mathbf{x}).$$

Hvilket bevirker at $\phi(\mathbf{x})$ er en isometri og ud fra Sætning 1.2.4 ortogonal. Dette medfører at vi kan skrive $f(\mathbf{x}) = t_a \circ \phi$. ■

Bemærk at virkningen af elementet (\mathbf{a}, ϕ) på en vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{E}^n$ gives ved

$$(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{x}) = t_a(\phi(\mathbf{x})) = \mathbf{a} + \phi(\mathbf{x}). \quad (1.2)$$

1.2.7 Lemma:

Multiplikationen i $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ udtrykkes som

$$(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{a}', \phi') = (\mathbf{a} + \phi(\mathbf{a}'), \phi\phi')$$

Bevis:

Ud fra Ligning (1.2) kan udtrykkes

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{a}', \phi')(\mathbf{x}) &= (\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{a}' + \phi'(\mathbf{x})) \\ &= \mathbf{a} + \phi(\mathbf{a}' + \phi'(\mathbf{x})) \\ &= \mathbf{a} + \phi(\mathbf{a}') + \phi\phi'(\mathbf{x}) \\ &= (\mathbf{a} + \phi(\mathbf{a}'), \phi\phi')(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Hvilket giver resultatet. ■

Ved brug af Lemma 1.2.7 er det muligt at bevise, at $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ faktisk er en gruppe.

1.2.8 Sætning:

Mængden af isometrier betegnet $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ udgør en gruppe.

Bevis:

Beviset følger at vise, at betingelserne for en gruppe er opfyldt.

(i) Kompositionen er associativ: Ved brug af Lemma 1.2.7 ses

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}', \phi')((\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{a}'', \phi'')) &= (\mathbf{a}', \phi')((\mathbf{a} + \phi(\mathbf{a}''), \phi\phi'')) \\ &= (\mathbf{a}' + \phi'(\mathbf{a} + \phi(\mathbf{a}'')), \phi'(\phi\phi'')) \\ &= (\mathbf{a}' + \phi'(\mathbf{a}) + \phi'\phi(\mathbf{a}''), (\phi'\phi)\phi'') \\ &= (\mathbf{a}' + \phi'(\mathbf{a}), \phi'\phi)(\mathbf{a}'', \phi'') \\ &= ((\mathbf{a}', \phi')(\mathbf{a}, \phi))(\mathbf{a}'', \phi). \end{aligned}$$

(ii) Eksistens af identitets-elementet $(0, I)$:

$$(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{0}, I) = (\mathbf{a} + \phi(\mathbf{0}), \phi I) = (\mathbf{a}, \phi),$$

$$(\mathbf{0}, I)(\mathbf{a}, \phi) = (\mathbf{0} + I(\mathbf{a}), I\phi) = (\mathbf{a}, \phi).$$

(iii) Eksistens af Inverselementet $(\mathbf{a}, \phi)^{-1} = (-\phi^{-1}(\mathbf{a}), \phi^{-1})$:

$$(\mathbf{a}, \phi)(-\phi^{-1}(\mathbf{a}), \phi^{-1}) = (\mathbf{a} + \phi(-\phi^{-1}(\mathbf{a})), \phi\phi^{-1}) = (\mathbf{a} - \mathbf{a}, I) = (\mathbf{0}, I),$$

$$(-\phi^{-1}(\mathbf{a}), \phi^{-1})(\mathbf{a}, \phi) = (-\phi^{-1}(\mathbf{a}) + \phi^{-1}(\mathbf{a}), \phi^{-1}\phi) = (\mathbf{0}, I). \quad \blacksquare$$

Bemærk at virkning af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ på undergruppen V , er givet ved $(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{t}, I)(\mathbf{a}, \phi)^{-1} = (\phi(\mathbf{t}), I)$, hvor (\mathbf{t}, I) er en translation med vektor $\mathbf{t} \in \mathbb{E}^n$, hvilket følger fra

1.2.9 Lemma:

Gruppen V bestående af translationer er en normal undergruppe af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$.

Bevis:

Lad $(\mathbf{a}, \phi) \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{t}, I)(\mathbf{a}, \phi)^{-1} &= (\mathbf{a} + \phi(\mathbf{t}), \phi)(-\phi^{-1}(\mathbf{a}), \phi^{-1}) \\ &= (\mathbf{a} + \phi(\mathbf{t}) + \phi(-\phi^{-1}(\mathbf{a})), \phi\phi^{-1}) \\ &= (\mathbf{a} + \phi(\mathbf{t}) - \mathbf{a}, I) = (\phi(\mathbf{t}), I). \end{aligned}$$

$(\phi(\mathbf{t}), I)$ er en translation, hvor $\phi(\mathbf{t})$ er en vektor, hvilket bevirker at V er en normal undergruppe af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$. ■

Multiplikationen i $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ er ikke den sædvanlige gruppe struktur ved brug af det direkte produkt. Konstruktion som vil klarlægge multiplikationen for $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ er derfor ligesom den generelle affine lineære gruppe et indre semidirekte produkt. Vi får således

$$\text{Isom}(\mathbb{E}^n) = V \rtimes O(n).$$

Ud fra Proposition 1.2.6 ses at $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ faktisk er mængden af alle parene $(t_a, \phi) = (\mathbf{a}, \phi) \in V \rtimes O(n)$ med multiplikation

$$(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{a}', \phi') = (\mathbf{a} + \phi(\mathbf{a}'), \phi\phi'),$$

hvor $(\mathbf{a}', \phi') \in V \rtimes O(n)$. En mere abstrakt karakterisering af det semidirekte produkt kan udtrykkes ved gruppeudvidelse. Først defineres en eksakt følge som

1.2.10 Definition (Eksakt følge):

En følge

$$\cdots \xrightarrow{\alpha_{q-1}} A_{q-1} \xrightarrow{\alpha_q} A_q \xrightarrow{\alpha_{q+1}} A_{q+1} \xrightarrow{\alpha_{q+2}} \cdots$$

af grupper og hvor $\alpha_q : A_i \rightarrow A_{q+1}$ er en gruppe homomorfi, for $q = 0, \dots, n$ kaldes eksakt, hvis gruppe homomorfierne tilfredsstillers

$$\text{Im}(\alpha_q) = \text{Ker}(\alpha_{q+1}),$$

hvor Im betegner billedet af α_q og Ker betegner gruppekernen af α_{q+1} . Dette betyder at, for $a \in A_q$ gælder $\alpha_q(a) = 0$ hvis og kun hvis $a = \alpha_{q-1}(a')$ for nogle $a' \in A_{q-1}$. Der følger herfra at $\alpha_{q+1} \circ \alpha_q = 0$.

Hvis K , G og H er grupper, hvor K er abelsk, kan en kort eksakt følge, givet ved to afbildninger $\alpha_1 : K \rightarrow G$ og $\alpha_2 : G \rightarrow H$, udtrykkes som

$$0 \rightarrow K \xrightarrow{\alpha_1} G \xrightarrow{\alpha_2} H \rightarrow 0.$$

Ved en kort eksakt følge gælder at α_1 er injektiv og α_2 er surjektiv. Yderligere, at gruppekernen af α_2 er billedet af α_1 . Dette bevirker at K kan anses som en normal undergruppe af H , og H er isomorf til G/K , udtrykt $G/K \cong H$. Her siges at, G er en udvidelse af K ved H . Herfra kan skrives at det semidirekte produkt $G = K \rtimes H$ passer ind i en eksakt følge $K \rightarrow G \rightarrow H$. Faktisk kan vi karakterisere det semidirekte produkt i form af gruppeudvidelse. En gruppeudvidelse $0 \rightarrow K \xrightarrow{\alpha_1} G \xrightarrow{\alpha_2} H \rightarrow 0$ er split, hvis der eksisterer en homomorfi $\sigma : H \rightarrow G$, hvor der gælder at, $\alpha_2 \circ \sigma$ er lig identitetslementet af H , defineret $\alpha_2 \circ \sigma = id_H$. Vi kalder σ et snit af α_2 .

1.2.11 Proposition:

Hvis $G = K \rtimes H$ er et semidirekte produkt, er gruppeudvidelsen $K \rightarrow G \rightarrow H$ split. Omvendt hvis gruppeudvidelsen $K \rightarrow G \rightarrow H$ er split, så er $G \cong K \rtimes H$, hvor H virker på K ved konjugation.

Bevis:

¹ Hvis $G = K \rtimes H$ definerer vi σ ved $\sigma(\phi) = (id_K, \phi)$, hvor id_K er identitetslementet af K og $\phi \in H$, er det tydeligt der eksisterer en sådan afbildning for $G = K \rtimes H$.

Omvendt hvis gruppeudvidelsen $K \rightarrow G \rightarrow H$ er split, et snit $\sigma : H \rightarrow G$ vælges. Vi ønsker at vise at kriterierne for Definition 1.1.3 er opfyldt. Vi ved følgen er eksakt hvorfor der følger $\text{Im}(\alpha_1) = \text{Ker}(\alpha_2)$, hvorfor $\alpha_1(K)$ er normal i G .

Betragt $g \in G$, ved brug af homomorfin α_2 kan vi udtrykke $\alpha_2(g) \in H$, ydermere ved brug af snittet får vi $\sigma(\alpha_2(g)) \in G$. Vi kan ikke antage at g og $\sigma(\alpha_2(g))$ er det samme element, hvorfor vi igen afbilder $\sigma(\alpha_2(g))$ over i H . Vi får her $\alpha_2(\sigma(\alpha_2(g)))$, da vi arbejder med en eksakt følge ved vi at, $\alpha_2 \circ \sigma$ er lig identiteten af H , hvorfor vi kan antage at $\alpha_2(g) = \alpha_2(\sigma(\alpha_2(g)))$. Herfra kan vi skrive $\alpha_2(g(\sigma(\alpha_2(g))))^{-1} = \alpha_2(\sigma(\alpha_2(g))(\sigma(\alpha_2(g))))^{-1} = \alpha_2(I) = id_H$, vi får således $g(\sigma(\alpha_2(g)))^{-1} \in \text{Ker}(\alpha_2) = \text{Im}(\alpha_1) = \alpha_1(K)$. Dette medfører at vi kan skrive $g = g(\sigma(\alpha_2(g)))^{-1} \cdot \sigma(\alpha_2(g)) = \sigma(\alpha_2(g)) \cdot g(\sigma(\alpha_2(g)))^{-1}$, hvor $\sigma(\alpha_2(g)) \in \sigma(H)$ og $g(\sigma(\alpha_2(g)))^{-1} \in \alpha_1(K)$, hvorfor $G = \alpha_1(K) \cdot \sigma(H)$.

Antag $g \in G$, ligger i både $\alpha_1(K)$ og $\sigma(H)$. Lad $G = \sigma(h)$. Vi har, at $\sigma(h) \in \text{Im}(\alpha_1) = \text{Ker}(\alpha_2)$, hvorfor $h = \alpha_2(\sigma(h)) = id_H$. Vi kan derfor skrive $g = \sigma(h) = \sigma(id_H) = id_G$, hvorfor $\alpha_1(K) \cap \sigma(H) = \{id_G\}$.

¹Beviset følger beviset for Theorem 7 i Djao 2013, s. 3, navnet Djao er et pseudonym, hvorfor forfatterens rigtige navn ikke er kendt.

Vi har nu bevist, at G er den indre semidirekte produkt af $\alpha_1(K)$ og $\sigma(H)$. $\alpha_1(K)$ og $\sigma(H)$ er henholdsvis isomorf til K og H . Vi får derfor, at G er isomorf til et semidirekte produkt af $K \rtimes H$. ■

Vi har nu argumenteret for de semidirekte produkter $V \rtimes \text{Gl}_n(\mathbb{R})$ og $V \rtimes \text{O}(n)$, der betegner henholdsvis $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ og $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$. Ser vi på forskellen af $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ og $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$, så er isometrier afstandsbevarende mens affine afbildninger ikke nødvendigvis behøver at være afstandsbevarende, vi har således følgende proposition

1.2.12 Proposition:

Der eksistere en følge af undergrupper

$$\text{Isom}(\mathbb{E}^n) \subsetneq \text{Aff}(\mathbb{R}^n) \subset \text{Gl}_{n+1}(\mathbb{R})$$

Bevis:

Ud fra definitionen af opbygningen af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ og $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$ gælder $\text{Isom}(\mathbb{E}^n) \subsetneq \text{Aff}(\mathbb{R}^n)$. For at vise $\text{Aff}(\mathbb{R}^n) \subset \text{Gl}_{n+1}(\mathbb{R})$ lad $(b, A) \in \text{Aff}(\mathbb{R}^n)$, hvor A er en $n \times n$ matrix. Herfra er det tydeligt vi har en $(n+1) \times (n+1)$ affin afbildningens matrix

$$\begin{bmatrix} A & b \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

hvilket tydeligt definere en inklusion $\text{Aff}(\mathbb{R}^n) \subset \text{Gl}_{n+1}(\mathbb{R})$. ■

Vi har nu præsenteret forskellige grupper som vi vil arbejde med i de senere kapitler. Den første gruppe er den affine gruppe $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$, den næste er $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$. Begge grupper indeholder translationer samt ortogonale afbildninger. Ydermere har vi argumenteret for at ortogonale afbildninger kan repræsenteres af en $n \times n$ matrix. Ud over at præsentere de to nævnte grupper har vi argumenteret for at de kan udtrykkes som semidirekte produkter, en egenskab som skal vise sig nyttig senere.

KAPITEL 2

Krystallografiske punktgrupper

Følgende kapitel baserer på (Lauritzen 2003), (Morandi 2007), (Engel 1986) (Iversen 1995) og (Strebel 2010)¹. En punktgruppe betragtes som en gruppe bestående af isometrier der fastholder mindst et punkt. En punktgruppe, kan eksistere i det euklidiske vektorrum i enhver dimension, og hvor hver punktgruppe i dimension n , kan anses at være en undergruppe af $O(n)$. Vi kan således realisere en punktgruppe som en mængde af ortogonale matricer ϕ som transformere et punkt \mathbf{x} om til et punkt \mathbf{y} ved $\phi\mathbf{x} = \mathbf{y}$, hvor origo betragtes som det faste punkt. En punktgruppe kan således bestå af afbildninger ϕ , med $\det(\phi) = 1$ eller $\det(\phi) = -1$. Går vi skridtet videre kan vi betragte en krystallografisk punktgruppe ved understående definition.

2.0.1 Definition:

En krystallografisk punktgruppe G_0 i \mathbb{E}^n , er en gruppe bestående af ortogonale afbildninger og bringer et translations gitter Γ ind i sig selv.

Ud fra ovenstående definition kan vi betragte en mængde $G_0 = \{\phi \in O(n) \mid (a, \phi) \in G \text{ for nogle } a \in \mathbb{E}^n\}$, hvor G definerer en krystallografisk gruppe. En yderligere egenskab for en krystallografisk punktgruppe er, at den er isomorf til kvotientgruppen konstrueret af den tilhørende krystallografiske gruppe og translationsgitter. Forinden vi beviser dette postulerer vi en sætning til et vigtigt argument i beviset.

2.0.2 Sætning (Isomorfisætningen):

Lad H og K være grupper. Hvis afbildningen $f : H \rightarrow K$ er en homomorfi med kernen $N = \text{Ker}(f)$, så gælder at $H/N \cong f(H) = K$, hvor N er en normal undergruppe af H .

2.0.3 Sætning:

Hvis G er en krystallografisk gruppe med translationsgitter Γ og en krystallografisk punktgruppe G_0 , gælder at kvotientgruppen G/Γ er isomorf til punktgruppen G_0 , $G_0 \cong G/\Gamma$.

Bevis:

Lad $\varphi : \text{Isom}(\mathbb{E}^n) \rightarrow O(n)$ være en afbildning defineret ved $\varphi(a, \phi) = \phi$, for $(a, \phi) \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$, således φ er en homomorfi. Kernen er V , da $\varphi(a, \phi) = I$ medfører at $\phi = I$ og

¹Bogen er endnu kun et manuskript af Ralph Strebel, den er derfor ikke færdig til udgivelse, den er skriften til et foredrag om krystallografiske grupper, af Ralph Strebel ved universitetet Fribourg i Schweiz, den er uploaded af Klaus Volkert på <http://bit.ly/2kkXSnv>

$\text{Ker}(\varphi) = \{(a, I) : a \in \mathbb{E}^n\}$. Ses på restriktionen af φ på den krystallografiske gruppe G , så får vi en gruppe homomorfi, der udtrykker $\varphi(G) = G_0$. Yderligere har vi at φ er surjektiv med $\text{Ker}(\varphi) = G \cap V = \Gamma$, hvor tilfældet bliver at Γ er normal. Ud fra isomorfi-sætningen gælder at $G_0 \cong G/\Gamma$. ■

I forbindelse med introduktionen af isometri gruppen $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ i Kapitel 1, blev vi bekendte med en virkning på V , bestående af translationer, af $O(n)$ ved konjugation. Vi vil nu se hvad der sker, hvis vi lader den krystallografiske punktgruppe G_0 for en krystallografisk gruppe G virke på gitteret Γ . Her vil vi se at virkningen altid vil give os et element i gitteret. Fra ovenstående sætning ved vi at $G_0 \cong G/\Gamma$. Derfor lad $\alpha : G_0 \times \Gamma \rightarrow \Gamma$ givet ved $\alpha(\mathbf{t}, \phi) = (\mathbf{b}, \phi)(\mathbf{t}, I)(\mathbf{b}, \phi)^{-1}$. α er en gruppevirkning, hvor $\phi \in G_0$, hvis der eksisterer et $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, således $(\mathbf{b}, \phi) \in G$ og vi har homomorfien $\varphi(\mathbf{b}, \phi) = \phi$, som beskrevet i ovenstående bevis. Det ses klart at α afbilder ind i Γ .

$$\begin{aligned}\alpha(\mathbf{t}, \phi) &= (\mathbf{b}, \phi)(\mathbf{t}, I)(\mathbf{b}, \phi)^{-1} \\ &= (\mathbf{b}, \phi)(\mathbf{t}, I)(-\phi^{-1}\mathbf{b}, \phi^{-1}) \\ &= (\mathbf{b}, \phi)(-\phi^{-1}\mathbf{b} + \mathbf{t}, \phi^{-1}) = (\phi\mathbf{t}, I) \in \Gamma.\end{aligned}$$

Dette argument udleder til følgende sætning omkring en gruppevirkning af en krystallografisk punktgruppe på et gitter.

2.0.4 Sætning:

En krystallografisk punktgruppe G_0 , af en krystallografisk gruppe G , virker på gitteret Γ med afbildningen $\alpha : G_0 \times \Gamma \rightarrow \Gamma$ givet ved $\alpha(\mathbf{t}, \phi) = \phi\mathbf{t}$.

Denne virkning, samt gruppestrukturen af Γ , giver anledning til at bestemme grupper, der opstår som krystallografiske punktgrupper G_0 for nogle krystallografiske grupper G . Følgende lemma er vigtigt for at bestemme de mulige krystallografiske punktgrupper G_0 .

2.0.5 Lemma:

Den krystallografiske punktgruppe G_0 af en krystallografisk gruppe G er endelig.

Bevis:

Lad $\{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3\}$ være en gitterbasis for Γ , og lad $\mathcal{B}_{\Gamma, r} := \{x \in \Gamma \mid \|x\|^2 \leq r^2\}$ være en kugle centreret i origo, som indeholder $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2$ og \mathbf{t}_3 i sit indre. Antag, der eksisterer kun endelig mange elementer af Γ inde i \mathcal{B} . Vi viser efterfølgende, at dette er en korrekt antagelse. Da G_0 er en undergruppe af $O(3)$, er den længdebevarende og virkningen $\alpha : G_0 \times \Gamma \rightarrow \Gamma$ er givet ved $\alpha(\mathbf{t}, \phi)$, med $\phi\mathbf{t} \in \Gamma$, hvorfor $\mathbf{t} \in \mathcal{B} \rightarrow \phi\mathbf{t} \in \mathcal{B}$. Vi har således at der eksisterer endelig mange valg for $\phi\mathbf{t}$, og der må eksistere endeligt mange valg for $\phi(\mathbf{t}_1), \phi(\mathbf{t}_2)$ og $\phi(\mathbf{t}_3)$. Da G_0 består af lineære afbildninger, er elementer $\phi \in G_0$ fuldstændigt bestemt ved deres virkning, på basisvektorerne, hvorfor G_0 er endelig.

Sidst mangler vi at vise, at der kun findes endeligt mange vektorer fra Γ i en vilkårlig kugle i \mathbb{E}^3 . Det er nok at se på en kugle med centrum i origo. Lad $\mathcal{B}_{\Gamma, r} := \{x \in \Gamma \mid \|x\|^2 \leq$

r^2 være mængden af punkter fra Γ i kuglen med radius r . Ydermere lad \mathbf{x} være på formen $\mathbf{x} = a\mathbf{t}_1 + b\mathbf{t}_2 + c\mathbf{t}_3$ for passende $a, b, c \in \mathbb{Z}$. Vi kan udregne

$$\begin{aligned} \|a\mathbf{t}_1 + b\mathbf{t}_2 + c\mathbf{t}_3\|^2 &= (a\mathbf{t}_1 + b\mathbf{t}_2 + c\mathbf{t}_3) \cdot (a\mathbf{t}_1 + b\mathbf{t}_2 + c\mathbf{t}_3) \\ &= (\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_1)a^2 + (\mathbf{t}_2 \cdot \mathbf{t}_2)b^2 + (\mathbf{t}_3 \cdot \mathbf{t}_3)c^2 + 2(\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2)ab \\ &\quad + 2(\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_3)ac + 2(\mathbf{t}_2 \cdot \mathbf{t}_3)bc \leq r^2 \end{aligned} \quad (2.1)$$

Vi vælger nu at betragte en nemmere notation, derfor lad $\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{t}_j = t_{ij}$. Overstående udtryk ser derfor således ud

$$t_{11}a^2 + t_{22}b^2 + t_{33}c^2 + 2t_{12}ab + 2t_{13}ac + 2t_{23}bc \leq r^2.$$

Vi kan udtrykke dette på matrix form

$$(a, b, c) \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = r^2$$

Vi ønsker at skrive dette ved en ellipsoide som er på formen

$$\frac{x^2}{q^2} + \frac{y^2}{p^2} + \frac{z^2}{s^2} = 1.$$

Vi betragter derfor matricen

$$T = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix}.$$

Grundet prikproduktet er kommutativ, ved vi at T er symmetrisk, ydermere er den kvadratisk. T er derfor en ortogonalt diagonaliserbar matrix, ud fra spektralsætningen². Vi har således at egenverdierne er reelle tal, samt at egenvektorerne er ortogonale. Lad derfor $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ betegne egenverdierne, samt $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ tilhørende egenvektorer. Vi vælger nu $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ til at være enhedsvektorer, og definerer en matrix $P = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3]$. Da $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3\}$ er en ortogonal mængde, får vi at P er en ortogonal matrix. Vi benytter nu P til at diagonalisere matricen T . Ved ortogonal diagonalisering gælder $PTP^T = D$, hvor D er diagonal matricen bestående af egenverdierne. Ved omskrivning får vi $T = P^TDP$, vi får således

$$(a, b, c) \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = (a, b, c)P^TDP \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \left(P \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \right)^T DP \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = X^TDX,$$

hvor $X = P(a, b, c)^T$. Ved at introducere X 's komponenter som

$$X = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

²Argumentet for hvorledes T er diagonaliserbar og hvordan vi skaber senere ækvivalens mellem Ligning (2.1) og resultatet af diagonaliseringen bygger på (Jackson 2006, s. 3)

er det nu muligt at udtrykke

$$X^T DX = (x, y, z) \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \lambda_1 x^2 + \lambda_2 y^2 + \lambda_3 z^2.$$

Der må derfor gælde at tidligere Ligning (2.1) er ækvivalent med overstående ligning. Ved division med r^2 kan vi udtrykke

$$\frac{\lambda_1 x^2}{r^2} + \frac{\lambda_2 y^2}{r^2} + \frac{\lambda_3 z^2}{r^2} = 1 = \frac{x^2}{q^2} + \frac{y^2}{p^2} + \frac{z^2}{s^2}.$$

Som et sidste argument for at ovenstående lighed er sandt, må egenverdierne være positive. Til dette bruger vi at T kan udtrykkes på formen $U^T U$, for $U = [\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3]$. Ved brug af en generel regel inden for egenverdier gælder $U^T U \mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}$, for en egenvektor $\mathbf{u} \neq \mathbf{0}$. Vi kan udregne

$$\lambda \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = \langle \lambda \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = \langle U^T U \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = \langle U \mathbf{u}, U \mathbf{u} \rangle,$$

hvilket leder til

$$\lambda = \frac{\langle U \mathbf{u}, U \mathbf{u} \rangle}{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle} > 0.$$

Hvis vi anskuer (x, y, z) som punkter i det rumlige koordinatsystem, vil ovenstående ulighed beskrive alle $x, y, z \in \mathbb{Z}$, som er indeholdt i ellipsoiden med centrum i origo. Det er klart vi kan finde en kasse $K = A \times B \times C$ af heltals intervaller A, B og C , således ellipsoiden er indeholdt i K . Vi ved at en kasse indeholder endeligt mange punkter (x, y, z) , hvorfor dette også må gælde for ellipsoiden. Vi kan derfor konkludere at der kun eksistere endeligt mange $\mathbf{x} = x\mathbf{t}_1 + y\mathbf{t}_2 + z\mathbf{t}_3 \in \mathcal{B}_{\Gamma, r}$ med $x, y, z \in \mathbb{Z}$. ■

Vi har nu beskæftiget os med nogle egenskaber for en krystallografisk punktgruppe, og vi ønsker derfor nu at finde mulige punktgrupper. I efterfølgende afsnit beskæftiger vi os derfor med endelige rotationsgrupper og derefter et afsnit med endelige undergrupper af $O(3)$.

2.1 Endelige rotationsgrupper

I følgende afsnit skal vi beskæftige os med endelige undergrupper af den specielle ortogonale gruppe, $SO(3)$, af det tre-dimensionelle euklidiske vektorrum \mathbb{E}^3 . Vi har at en rotation af \mathbb{E}^3 er en ortogonal afbildning ϕ med $\det(\phi) = 1$. For at gøre det geometriske af en rotation klart, benytter vi os af et lemma af Euler

2.1.1 Lemma (Eulers Lemma):

Lad \mathbb{E}^3 være det tre-dimensionelle euklidiske vektorrum. En ortogonal afbildning ϕ af \mathbb{E}^3 med $\det(\phi) = 1$ fastholder en linje, således den er en rotation om linjen.

Bevis:

Beviset svarer til at vise at ϕ har egenværdi 1, da $\phi(\mathbf{v}) = 1 \cdot \mathbf{v}$ medfører at hele linjen gennem origo, med retningsvektor \mathbf{v} , fastholdes. Vi starter med at betragte det karakteristiske polynomium af ϕ defineret som $\mathcal{X}(t) = \det(tI - \phi)$. Da $\det(\phi) = 1$ tilfredsstiller $\mathcal{X}(0) = -1$ og $\mathcal{X}(t) \rightarrow +\infty$ når $t \rightarrow +\infty$. Ud fra kontinuitet gælder at $\mathcal{X}(t)$ må have en rod $a > 0$. Da ϕ er ortogonal og derfor længdebevarende, så kan den kun have ± 1 som de eneste reelle egenværdier, hvorfor ± 1 er de eneste rødder for $\mathcal{X}(t)$. Vi kan derfor konkludere at $\mathcal{X}(t)$ har rod 1 som påkrævet. ■

Inden vi løfter sløret for en vigtig sætning, i forbindelse med at repræsentere de krystallografiske punktgrupper, postuleres Orbit-Stabilisator sætningen³, samt introduceret Burnsides formel, som bruges ved beviset.

2.1.2 Sætning (Orbit-Stabilisator sætning):

Lad G være en gruppe der virker på en mængde X , lad x være et element i X . Ydermere lad O_x og S_x definere henholdsvis banen af x og stabilisatoren af x . Så gælder $|G| = |O_x| |S_x|$.

For bevis henvises til (Virk 0000).

2.1.3 Sætning (Burnsides formel):

Lad en endelig gruppe G virke på en mængde X , hvor for et $\sigma \in G$, $X^\sigma = \{x \in X \mid \sigma x = x\}$ definerer mængden af de fikspunkter for σ på X , mens $G \setminus X$ definerer mængden af baner af X . Da gælder

$$|G \setminus X| = \frac{1}{|G|} \sum_{\sigma \in G} |X^\sigma|.$$

Bevis:

⁴ Vi starter med at arbejde med $\sum_{\sigma \in G} |X^\sigma|$. Vi ser at denne kan omregnes til at være en sum over X

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma \in G} |X^\sigma| &= \sum_{\sigma \in G} |\{x \in X \mid \sigma x = x\}| = |\{(\sigma, x) \in G \times X \mid \sigma x = x\}| \\ &= \sum_{x \in X} |\{\sigma \in G \mid \sigma x = x\}| = \sum_{x \in X} |G_x|, \end{aligned}$$

hvor G_x betegner stabilisatoren for x . Ved at gøre brug af Orbit-Stabilisator sætningen ser vi at vi kan udtrykke

$$\sum_{x \in X} |G_x| = \sum_{x \in X} \frac{|G|}{|O_x|} = |G| \sum_{x \in X} \frac{1}{|O_x|},$$

hvor O_x er banen af x . Ved $\sum_{x \in X} \frac{1}{|O_x|}$ har vi at hver x tilføjer $\frac{1}{|O|}$ til summen, og vi har at der eksisterer $|O|$ af sådan x der tilføjer dette. Vi har derfor at x i den givne bane O er

³Orbit-Stabilisator sætningen er udtrykt ud fra (Virk 0000), som er noter fra Rahbar Virk under hans studetid, hvorfor årstallet er diffus.

⁴Beviset følger (Koswara m.fl. 0000)

præcis 1, derfor må gælde at summet dækker over antallet af banerne i $G \setminus X$ af X , hvorfor $\sum_{x \in X} 1 = |G \setminus X|$. Vi kan udlede resultatet fra

$$|G||G \setminus X| = \sum_{\sigma \in G} |X^\sigma|. \quad \blacksquare$$

Vi vil nu begive os ud i en sætning der repræsenterer hvilke grupper en krystallografisk punktgruppe kan være isomorf til.

2.1.4 Sætning:

Lad G være en endelig undergruppe af $SO(3)$. Så er G isomorf til præcis en af følgende grupper:

C_n , ($n \geq 1$) en rotationssymmetrigruppe af en n -pyramide. Kaldt en cyklisk gruppe.

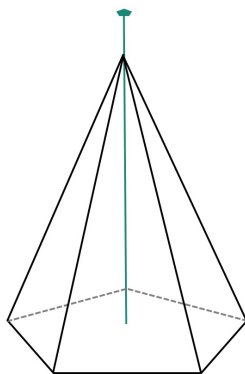
D_{2n} , ($n \geq 2$) en rotationssymmetrigruppe af en n -prisme. Kaldt en diedergruppe.

T en rotationssymmetrigruppe af en regulær tetraeder.

O en rotationssymmetrigruppe af en regulær oktaeder.

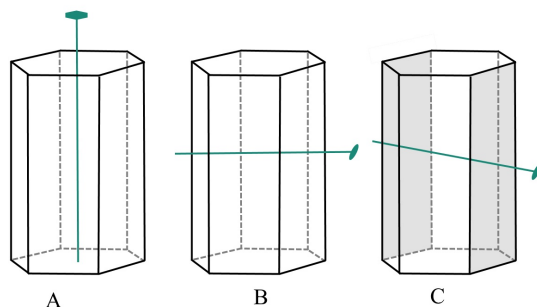
Y en rotationssymmetrigruppe af en regulær ikosaeder.

Inden beviset tager vi et blik på de forskellige grupper, for at få en forståelse for hvordan grupperne er konstrueret. Starter vi med at se på en cyklisk gruppe, der er repræsenteret med en n -pyramide. Her benævner vi en n -pyramide som en pyramide med en n -gon som fod. I Figur 2 er illustreret C_5 . Rotationsaksen har orden 5, går gennem spidsen af pyramiden og står ortogonal på 5-gonen (pentagonen). Vi får således at C_n , med ($n \geq 1$), har orden n .



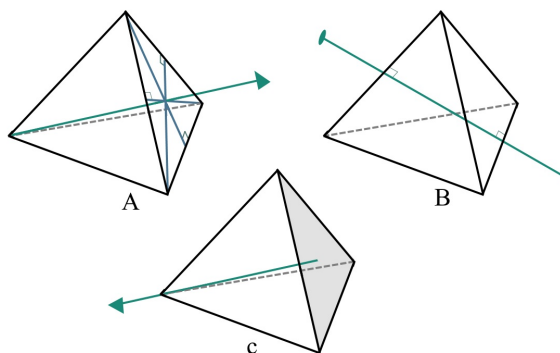
Figur 2. C_5 , cyklisk gruppe med orden 5.

Diedergruppen D_{2n} er repræsenteret af en n -prisme. Vi ved en prisme er en figur, hvor to flader er parallelle. De to flader er repræsenteret af en n -gon. I Figur 3 er illustreret D_6 . På Figur 3.A ser vi en rotationsakse med orden 6, som går gennem figuren ortogonalt på de to 6-goner (heksagoner). I Figur 3.B og C, ser vi hver en rotationsakse med orden 2, hvor rotationsaksen for Figur 3.B er placeret således den går igennem to kanter, med længst afstand, mens på Figur 3.C går rotationsaksen igennem to parallelle sider.



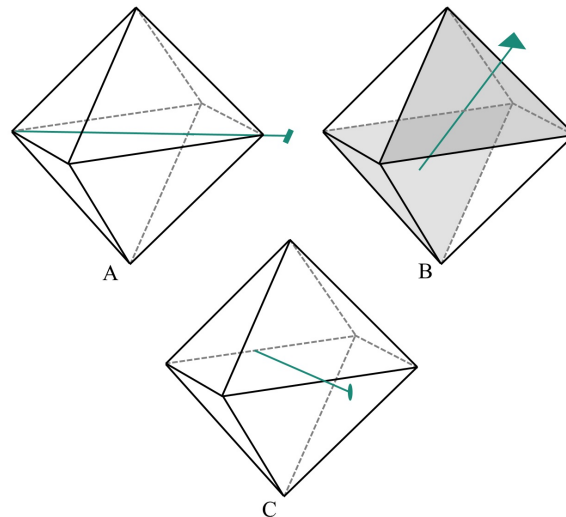
Figur 3. D_6 diedergruppe med orden 6.

Ser vi på gruppen T som er vist i Figur 4 har vi en regulær tetraeder illustreret. På Figur 4.A er der illustreret en rotationsaksen, som går gennem spidsen af tetraederen og igennem midten af den regulære trekantede bund. Denne rotationsakse har orden 3, da vi ser at ved rotation med samme vinkel tre gange, opnås udgangspunktet. På Figur 4.B er rotationsaksen placeret anderledes, denne akse vil have orden 2. På Figur 4.C ses en rotationsaks, som er lignende rotationsaksen på Figur 4.A, men hvor vi her betragter forskellige baner. Banen for Figur 4.A vil være hjørne til hjørne rotationer, mens Figur 4.C vil banen indeholde side til side rotationer.



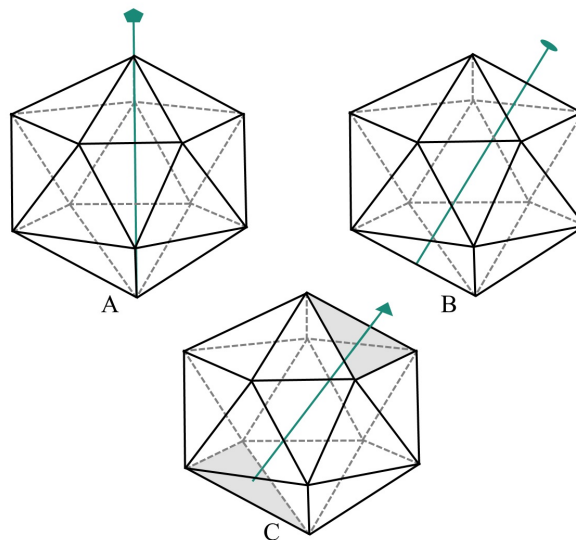
Figur 4. T en rotationssymmetrigruppe af en regulær tetraeder.

I Figur 5 er illustreret gruppen O , som er repræsenteret af en regulær oktaeder. Ser vi på Figur 5.A har vi en rotationsakse med orden 4, som går gennem figuren mellem to spidser med længst afstand. På Figur 5.B er illustreret en rotationsakse med orden 3, som går igennem to parallelle sider. Ydermere på Figur 5.C eksistere en rotationsakse med orden 2 som går gennem to parallelle kanter.



Figur 5. O en rotationssymmetrigruppe af en regulær oktaeder

Sidst ser vi på Figur 6, hvor vi har illustreret I , som er repræsenteret af en regulær ikosaeder. I Figur 6.A er illustreret en rotationsakse fra to spidser, som har længst afstand fra hinanden, denne har orden 5. Ved Figur 6.B er rotationen placeret således, den går gennem to parallelle kanter og har orden 3. Figur 6.C viser en rotationsakse, som går gennem to parallelle sider, med orden 2.



Figur 6. I en rotationssymmetrigruppe af en regulær ikosaeder

Ikke alle figurer viser, at når en rotationsakse placeres til at gå gennem en falde, så er den placeret præcis midt i fladen, således vi får akse stå ortogonal på falden, bemærk at denne betingelse gælder for alle tilfælde. Samme betingelse gælder for en rotationsakse, som går gennem en kant. Vi kan nu gå i gang med beviset.

Bevis:

⁵ Bemærk at i følgende bevis vil $\{e\}$ betegne identitetslementet tilhørende G . Lad G være en endelig undergruppe af $SO(3)$. Hvert element af G , undtagen $\{e\}$ repræsenterer en rotation i \mathbb{E}^3 omkring en akse, der går gennem origo. Herfra lad S^2 være en enhedssfære med centrum i origo. Hver rotation bestemmer to poler på S^2 , som vil være antipodal, hvilket svarer til skæringen af rotationsaksen med enhedssfæren. Lad X betegne mængden bestående af alle poler af elementerne i $G \setminus \{e\}$. For at undersøge denne mængde betragt da en stabilisator af G . Vi har således at for et punkt $x \in S^2$, vil undergruppen af G givet ved

$$G_x = \{\phi \in G \mid \phi(x) = x\},$$

være en stabilisator for G . Vi kan derfor antage, at en pol for G som værende et punkt $x \in S^2$, hvor der gælder $G_x \neq \{e\}$.

Vi påstår at G virker på mængden X . Lad os bekræfte dette. Lad $\phi \in G$ og $x \in X$. Hvis x er en pol for et element $\gamma \in G$ kan vi udtrykke

$$(\phi\gamma\phi^{-1})(\phi(x)) = \phi\gamma(\phi^{-1}\phi)(x) = \phi\gamma(x) = \phi(x).$$

Ud fra dette kan vi konkludere at $\phi(x)$ er en pol for $(\phi\gamma\phi^{-1})$, hvorfor $\phi(x) \in X$, vi ser her at X er stabil under G .

Det næste vi vil gøre i beviset, er at udnytte Burnsid's formel på virkningen af G på X , og derigennem vise at X skal være en særlig konfiguration af punkter på S^2 . Lad $G \setminus X$ betegne mængden af baner af G i X . Bemærk at identiteten $\{e\}$ fikser samtlige poler x , hvilket udtrykkes $|X^e| = |X|$ og hver $g \neq \{e\}$ fixer præcis to poler, udtrykt som $\sum_{g \neq e} |X^g| = (|G| - 1)2$. Ved at bruge Burnsid's formel får vi

$$|G \setminus X| = \frac{1}{|G|} (|X| + (|G| - 1)2).$$

Vælg nu en repræsentant fra hver bane $x_1, \dots, x_{|G \setminus X|}$. Vi kan udtrykke $|X|$ til at bestå af summen af antallet af poler på hver bane, vi lader $Orb_G(x_i)$ betegne mængden af poler på den i 'te bane. Vi har således at $|X| = \sum_{i=1}^{|G \setminus X|} |Orb_G(x_i)|$. Vi kan nu skrive

$$|G \setminus X| = \frac{1}{|G|} \left(\sum_{i=1}^{|G \setminus X|} |Orb_G(x_i)| + (|G| - 1)2 \right).$$

Ved brug af Orbit-Stabilisator sætningen kan vi udtrykke $|Orb_G(x_i)| = \frac{|G|}{|G_{x_i}|}$. Ved

⁵Bevises følger et notesæt uploadet af en underviser Maud De Visscher til hendes hold, der fulgte kurset *Groups and Symmetry* på *Centre for Mathematical Science, City University London* i 2012-13 (Visscher 0000), samt (Armstrong 1988, Kapitel 19, s. 104)

omskrivning får vi

$$\begin{aligned}
 2\left(1 - \frac{1}{|G|}\right) &= |G \setminus X| - \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G \setminus X|} |Orb_G(x_i)| \\
 &= |G \setminus X| - \sum_{i=1}^{|G \setminus X|} \frac{|Orb_G(x_i)|}{|G|} \\
 &= |G \setminus X| - \sum_{i=1}^{|G \setminus X|} \frac{1}{|G_{x_i}|} \\
 &= \sum_{i=1}^{|G \setminus X|} \left(1 - \frac{1}{|G_{x_i}|}\right).
 \end{aligned}$$

Antag at $G \neq \{e\}$, så gælder at $\frac{1}{|G|} < 1$ hvorfor vi har

$$1 \leq 2\left(1 - \frac{1}{|G|}\right) < 2.$$

Hver G_{x_i} indeholder mindst $\{e\}$, samt en rotation, hvorfor $|G_{x_i}| \geq 2$, og da $\frac{1}{|G_{x_i}|} < 1$ gælder

$$\frac{1}{2} \leq 1 - \frac{1}{|G_{x_i}|} < 1,$$

for $1 \leq i \leq |G \setminus X|$. Da vi på venstre side har et tal fra intervallet $[1, 2[$, altså minimum 1 og på højre side et tal fra intervallet $[\frac{1}{2}, 1[$, et tal der aldrig vil give 1, hvis $|G \setminus X| = 1$, må $|G \setminus X| > 1$. Ydermere har vi et tal på venstre side som aldrig vil være 2, mens hvis $|G \setminus X| = 4$ vil højre side være lig 2, hvorfor $|G \setminus X| < 4$. Vi har derfor $|G \setminus X| = 2$ eller 3.

Hvis $|G \setminus X| = 2$ får vi

$$\begin{aligned}
 2\left(1 - \frac{1}{|G|}\right) &= \sum_{i=1}^2 \left(1 - \frac{1}{|G_{x_i}|}\right) = 1 - \frac{1}{|G_{x_1}|} + 1 - \frac{1}{|G_{x_2}|} \\
 &\Downarrow \\
 -2\frac{1}{|G|} &= -\frac{1}{|G_{x_1}|} - \frac{1}{|G_{x_2}|}.
 \end{aligned}$$

Ved omskrivning kan vi udtrykke

$$2 = \frac{|G|}{|G_{x_1}|} + \frac{|G|}{|G_{x_2}|} = |Orb_G(x_1)| + |Orb_G(x_2)| = |X|.$$

Vi ser her, at antallet af poler er lig 2, hvorfor hver bane indeholder en pol. Disse poler må være antipoler, hvorfor hele gruppen fikserer en linje gennem origo, som repræsenterer en rotation i \mathbb{E}^3 . Vi kan ud fra dette konkludere at hver rotation har samme akse. Da vi nu har en rotation af \mathbb{E}^3 med endelig orden n som fikserer en linje kan vi yderligere argumentere for at G er en cyklisk gruppe, hvorfor G er isomorf til C_n .

2.1. Endelige rotationsgrupper

Hvis $|G \setminus X| = 3$ er problemet helt andeledes og mere kompleks, vi skal her betragte ikke-cykliske grupper. Antag $x = x_1, y = x_2, z = x_3$. Så får vi

$$\begin{aligned}
 2\left(1 - \frac{1}{|G|}\right) &= \sum_{i=1}^3 \left(1 - \frac{1}{|G_{x_i}|\right) = 1 - \frac{1}{|G_x|} + 1 - \frac{1}{|G_y|} + 1 - \frac{1}{|G_z|} \\
 &\Downarrow \\
 -1 - 2\frac{1}{|G|} &= -\frac{1}{|G_x|} - \frac{1}{|G_y|} - \frac{1}{|G_z|} \\
 &\Downarrow \\
 1 + \frac{2}{|G|} &= \frac{1}{|G_x|} + \frac{1}{|G_y|} + \frac{1}{|G_z|}. \tag{2.2}
 \end{aligned}$$

Vi ordner banerne for x, y og z således de tilsvarende ordren $|G_x|, |G_y|$ og $|G_z|$ tilfredsstillere $|G_x| \leq |G_y| \leq |G_z|$. Så kan vi konkludere

$$\frac{1}{|G_x|} + \frac{1}{|G_y|} + \frac{1}{|G_z|} > 1,$$

da $2 \leq |G_x| \leq |G_y| \leq |G_z|$.

For at overstående uligheder gælder, eksistere fire mulige tilfælde.

a)

$$\frac{1}{|G_x|} = \frac{1}{2}, \quad \frac{1}{|G_y|} = \frac{1}{2}, \quad \frac{1}{|G_z|} = \frac{1}{n}, \quad \text{for } n \geq 2.$$

b)

$$\frac{1}{|G_x|} = \frac{1}{2}, \quad \frac{1}{|G_y|} = \frac{1}{3}, \quad \frac{1}{|G_z|} = \frac{1}{3}.$$

c)

$$\frac{1}{|G_x|} = \frac{1}{2}, \quad \frac{1}{|G_y|} = \frac{1}{3}, \quad \frac{1}{|G_z|} = \frac{1}{4}.$$

d)

$$\frac{1}{|G_x|} = \frac{1}{2}, \quad \frac{1}{|G_y|} = \frac{1}{3}, \quad \frac{1}{|G_z|} = \frac{1}{5}.$$

Vi betragter nu hver tilfælde separat:

Tilfælde a)

Hvis $|G_x| = |G_y| = |G_z| = 2$ udregner vi ved brug af Ligning (2.2) at $|G| = 4$. Vi kan udregne, ved brug af Orbit-Stabilisator sætningen, at $|Orb_G(z)| = \frac{|G|}{|G_z|} = 2$, hvorfor vi har at $Orb_G(z)$ indeholder 2 poler som må være antipodal. Vi får således at hver rotation fastholder et par antipoler. Lad g generere G_z som opfylder at bevare længden. Vi har at polerne x og $g(x)$ har samme længde til z , samme gælder for y og $g(y)$. Vi får at $-z$ er det andet punkt i G_z , ydermere at $g(x) = -x$ og $g(y) = -y$. Vi har derfor at rotationsakserne, der går gennem x, y og z er vinkelret på hinanden. Dette svarer til gruppen D_{2n} , hvor $n = 2$.

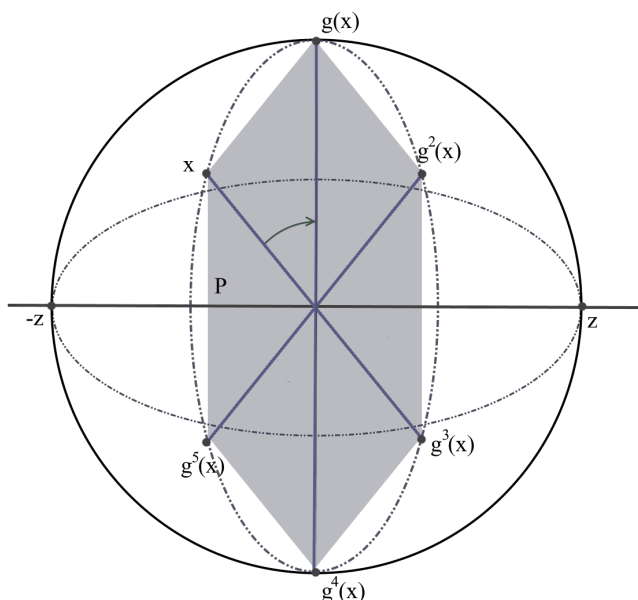
Hvis $|G_x| = |G_y| = 2$ og $|G_z| = n \geq 3$, kan vi, ved brug af Ligning (2.2), udregne at $|G| = 2n$. Betragt G_z som en undergruppe, der indeholder rotationer med en rotationsakse der går gennem z og $-z$. Vi får derfor her at G_z er en cyklisk gruppe med orden n

$$G_z = \{e, g, g^2, \dots, g^{n-1}\},$$

for nogle $g \in G$. Vi påstår at $x, g(x), \dots, g^{n-1}(x)$ er distinkte. For at argumentere for dette. Lad $g^i(x) = g^j(x)$, for nogle $n \geq i > j \geq 1$, så gælder $g^{i-j}(x) = x$. Ud fra definitionen af G_z gælder at z og $-z$ er de eneste to punkter G_z fikserer, hvorfor $x \neq -z$, da vi har at $|G_x| = 2$ og $|G_z| = |G_{-z}| \geq 3$. Da $|G_x| = 2$ må der eksisterer en rotation $g \in G_x$ med orden 2, således vi har en rotation omkring akse gennem x , der roterer z over i $-z$. Dog skal der gælde at x er ortogonal med z . Vi argumenterer ved at lade et element $h \in G_x$, så gælder $hx = x$ og $hz = -z$, da vi ved at z 's bane kun består af de to elementer. Derfor gælder $|x - z| = |hx - hz| = |x + z|$, hvorfor $x \cdot z = 0$. Ydermere har vi, grundet g er længdebevarende,

$$|x - g(x)| = |g(x) - g^2(x)| = \dots = |g^{n-1}(x) - x|,$$

og $|z - x| = |z - g^i(x)|$ for alle $i = 1, \dots, n - 1$. Dette betyder at alle punkterne $x, g(x), \dots, g^{n-1}(x)$ ligger på samme plan og former en regulær n -gon P , se Figur 7, hvor der illustreres P som en heksagon. Vi ser at P indeholder origo og er ortogonal til akse gennem z .



Figur 7. P med orden $n = 6$.

Vi kan udregne ved brug af Ligning (2.2), at $|Orb_G(x)| = \frac{|G|}{|G_x|} = n$, hvorfor der må gælde $Orb_G(x) = \{x, g(x), \dots, g^{n-1}(x)\}$. Ydermere består G af $2n$ rotationer som hver

afbilder P over i P , vi kan udtrykke en homomorfi

$$\phi : G \rightarrow G',$$

hvor G' betegner de tre-dimensionelle rotationssymmetrier af P , altså alle de elementer $g \in G$ som afbilder P over i sig selv. I forbindelse med dette vil hver ikke-triviell rotation i G kun have to faste punkter i X , hvorfor P ikke er punktfast. For at argumentere for dette se Figur 7, lad x og $g^3(x)$ være faste, så får vi at punktet $g(x)$ roteres over i $g^5(x)$ og $g^2(x)$ over i $g^4(x)$. Derfor får vi $\text{Ker}(\phi) = e$. Den eneste gruppe som repræsenterer en n -prisme er D_{2n} , derfor må gælde $|G| = |G'| = |D_{2n}|$, hvorfor vi har at ϕ er en isomorfi og $G \cong G' \cong D_{2n}$.

Tilfælde b)

Vi har $|G_x| = 2$ og $|G_y| = |G_z| = 3$. Vi kan udregne $|G| = 12$ ud fra Ligning (2.2) og ud fra Orbit-Stabilizer sætningen kan vi udregne $|Orb_G(z)| = \frac{|G|}{|G_z|} = 4$. Vi har således at $Orb_G(z)$ indeholder 4 poler med orden 3. Vi starter med at vælge et punkt $u \in Orb_G(z)$ med $|z - u| < 2$, dette er muligt da alle poler ligger på enhedssfæren S^2 og $|Orb_G(z)| > 2$, samt at diameteren i S^2 er lig 2, hvorfor $u \neq -z$. Da $|G_z| = 3$ ved vi at $G_z \cong C_3$. Vælg $g \in G_z$, hvor $\langle g \rangle = G_z$ gælder. Ved brug af samme argumentation som i **Case a)**, har vi at $u, g(u), g^2(u)$ er distinkte. Da g er en isometri gælder, at g bevarer længden, derfor få vi at $u, g(u), g^2(u)$ danner en ligesidet trekant og alle punkterne har samme afstand til z . Banen z indeholder elementerne $Orb_G(z) = \{z, u, g(u), g^2(u)\}$ som er bevaret under virkning af G , både da elementerne i $Orb_G(z)$ tilhører X , samt vi har tidligere vist at X er stabil under G , og da vi har en hel bane G_z kan vi udtrykke $GG_z = G_z$. For $h \in G_u$ har vi $h(u) = u$ hvorfor h permuterer $z, g(u), g^2(u)$. Da vi igen har at h er en isometri, gælder at h bevarer længden, hvorfor længden fra u til $z, g(u), g^2(u)$ er ens. Vi har derfor at $\{z, u, g(u), g^2(u)\}$ danner en regulær tetraeder T og som i **Case a)** gælder vi har en homomorfi

$$\phi : G \rightarrow G',$$

hvor G' i dette tilfælde betegner de tre-dimensionelle rotationssymmetrier af T . Vi får at ingen rotationer ud over $\{e\}$ fastholder T punktvis, hvorfor $\text{Ker}(\phi) = \{e\}$, og ϕ er injektiv. Vi får således $|G| = |G'| = 12$ og ϕ er surjektiv. ϕ er således en isomorfi, da den er en homomorfi, som er bijektiv, med $G \cong G' \cong T$.

Tilfælde c)

Vi har $|G_x| = 2$ og $|G_y| = 3$ og $|G_z| = 4$. Ved Ligning (2.2) kan vi hurtigt udregne at $|G| = 24$ og $|Orb_G(z)| = 6$. Da $|G_z| = 4$ må vi have at $G_z \cong C_4$ med $G_z = \{e, g, g^2, g^3\}$ for nogle $g \in G$. Vælg $u \in Orb_G(z)$ således $u \neq z, -z$. Som i **Case b)** kan vi vise at $u, g(u), g^2(u), g^3(u)$ danner i dette tilfælde et kvadrat, hvor hver punkt har samme afstand til z . Da $-z \in Orb_G(z)$ ved vi at $-z \notin Orb_G(x)$ eller $Orb_G(y)$, da dette vil resultere i $Orb_G(z) = Orb_G(x)$ eller $Orb_G(y)$, hvorfor vi har

$$Orb_G(z) = \{z, -z, u, g(u), g^2(u), g^3(u)\}.$$

Lad $-u \in Orb_G(z)$, da $|G_{-u}| = |G_u| = |G_z|$ og $-u \neq z, -z$, da $u \neq z, -z$. Vi kommer frem til, at $|g(u) - u| = |g^3(u) - u| < 2$, da $u, g(u), g^2(u), g^3(u)$ danner et kvadrat og hver ligger på S^2 , hvorfor $-u = g^2(u)$. Vi får således at $z, -z, u, g(u), g^2(u), g^3(u)$ beskriver hjørnerne på en regulær oktaeder O . Som **Case a)** og **Case b)** får vi en homomorfi

$$\phi : G \rightarrow G',$$

hvor G' i dette tilfælde betegner de tre-dimensionelle rotationssymmetrier af O . $\text{Ker}(\phi) = \{e\}$, hvorfor ϕ er injektiv og da $|G| = |G'| = 24$ har vi at ϕ er en isomorfi og vi har $G \cong G' \cong O$.

Tilfælde d)

Vi har $|G_x| = 2$ og $|G_y| = 3$ og $|G_z| = 5$. Ved Ligning (2.2) får vi $|G| = 60$ og $|Orb_G(z)| = 12$. Vælg to punkter $u, v \in Orb_G(z)$, som tilfredsstiller

$$0 < \|z - u\| < \|z - v\| < 2.$$

Dette er muligt, hvis g er en minimal rotation som frembringer G_z , så gælder at $u, g(u), g^2(u), g^3(u), g^4(u)$ alle er distinkte med lige lang afstand til z , og ligger på hjørnerne af en regulær pentagon. Ydermere får vi samme situation ved $v, g(v), g^2(v), g^3(v), g^4(v)$, med dog en længere afstand til z end u , som igen former hjørnerne af en regulær pentagon. Dette lader $-z$ være den sidste tolvte punkt af G_y . Vi får beskrivelsen

$$Orb_G(z) = \{z, -z, u, g(u), g^2(u), g^3(u), g^4(u), v, g(v), g^2(v), g^3(v), g^4(v)\}.$$

Betragter vi først u , ser vi at $-u \in G_u = G_z$. Da vi har at $-u$ ligger med en afstand på 2 fra u , må det gælde at den er et af punkterne $v, g(v), g^2(v), g^3(v), g^4(v)$. Ved omstrukturering, kan vi arrangere således $-u = v$, når $-g^r(u) = g^r(v)$, for $1 \leq r \leq 4$, hvilket ses i Figur 8.

Ud fra u ser vi der eksisterer elleve punkter, hvor fem er tættest på u , og alle må have samme afstand til u . Disse er $z, g(u), g^3(v), g^2(v), g^4(u)$, hvorfor der gælder

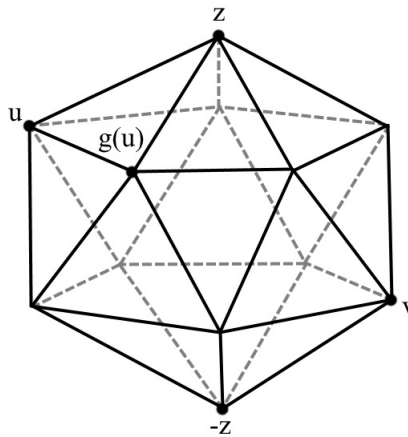
$$\|u - z\| = \|u - g(u)\| = \|u - g^2(v)\|$$

Herfra kan vi tjekke at de nævnte tolv punkter alle ligger på hjørnet af en regulær ikosaeder I . Ved brug af samme argumentation fra tidligere cases, får vi en homomorfi

$$\phi : G \rightarrow G',$$

hvor G' i dette tilfælde betegner de tre-dimensionelle rotationssymmetrier af I , som er injektiv, og da $|G| = |G'| = 60$ er ϕ en isomorfi. Vi får derfor $G \cong G' \cong I$ ■

Vi har nu set på endelige rotationsgrupper og vil nu gå et step videre og finde endelig undergrupper af $O(3)$ af det euklidiske vektorrum \mathbb{E}^3 . Her vil vi yderligere finde undergrupper indeholdende refleksionsplaner.



Figur 8. Placering af u og v i I .

2.2 Endelige undergrupper af $O(3)$

Vi starter med at opsummerer nogle basale fakta omkring gruppen $O(3)$. Som det første er den bestående af ortogonale afbildninger af det tre-dimensionelle euklidiske rum. Ydermere ved vi at elementerne i $O(n)$ er 3×3 matricer, endvidere at determinanten af en matrix $A \in O(3)$ er ± 1 . Den specielle ortogonale gruppe $SO(3)$ indeholder elementer givet ved 3×3 matricer med determinant 1. Afbildningen $\det : O(3) \rightarrow \mathbb{R} \setminus \{0\}$ er en homomorfi. Da $\det(A)$, for $A \in O(n)$ er ± 1 , gælder at gruppekernen af homomorfien er lig $SO(3)$. Ydermere har vi at determinanten af en 3×3 matrix tilhørende $O(3) \setminus SO(3)$ er -1 . $SO(3)$ er således en normal undergruppe af $O(3)$ af index 2. Vi får en eksakt følge

$$0 \rightarrow SO(3) \rightarrow O(3) \xrightarrow{\det} \{\pm 1\} \rightarrow 0.$$

Ved at fokusere på en inversafbildningen $-\mathbb{I}$, givet ved $-\mathbb{I}(x) = -x$ for $x \in \mathbb{E}^3$, hvorfor den har orden 2, er det muligt at split ovenstående eksakte følge ved en venstre split. Dette er muligt da $-\mathbb{I}$ kommutere med ethvert element i både $SO(3)$ og $O(3)$, tilhører centret af $O(n)$ og har determinant -1 . Vi definerer en tilbagetrækning

$$\delta : O(n) \rightarrow SO(n), \tag{2.3}$$

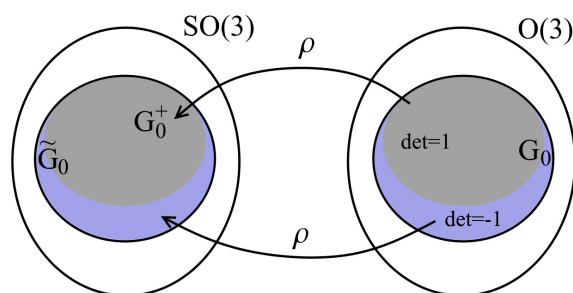
givet ved $\delta(\sigma) = \det(\sigma)\sigma$, for $\sigma \in O(n)$. Ved at kombinere med en homomorfi, der går fra $SO(3)$ over i $O(3)$ og er injektiv, giver dette en isomorfi af $O(3)$ med det direkte produkt af $SO(3)$ og den cykliske gruppe $Z = \{\mathbb{I}, -\mathbb{I}\}$, hvor \mathbb{I} er identitetsafbildningen,

$$O(3) = SO(3) \times Z.$$

Bemærk at kernen af tilbagetrækningen δ er frembragt af $-\mathbb{I}$, hvorfor $\text{Ker}(\delta) = \{\mathbb{I}, -\mathbb{I}\}$. Vi ønsker nu at finde alle undergrupperne af $O(3)$. I forbindelse med dette finder vi tre forskellige typer af undergrupper. Vi kalder dem henholdsvis for første, anden og tredje type.

Den første type af undergrupper i $O(3)$ henviser vi til rotationsgrupperne. Disse grupper har vi allerede fundet i Sætning 2.1.4. Ved anden type ser vi på undergrupper G_0 som indeholder inversafbildningen $-\mathbb{I}$. Da $-\mathbb{I}$ har orden 2, kan vi betragte den som en cyklisk gruppe $Z = \{\mathbb{I}, -\mathbb{I}\}$. Ydermere da begge elementer kommutere med ethvert element i G_0 gælder at Z er en normal undergruppe af G_0 . Anden type undergrupper er således et direkte produkt af $G_0^+ = G_0 \cap SO(3)$ og den cykliske gruppe Z , hvilket gælder ud fra den tidligere nævnte eksakte følge. Her gælder at G_0^+ er en af de fundne grupper i Sætning 2.1.4.

Vi ønsker nu at se på den tredje type af endelige undergrupper i $O(3)$. Her gælder at $G_0 \subset O(3)$ er af den tredje type hvis inversafbildningen $-\mathbb{I}$ ikke tilhører G_0 og ikke er en rotationsgruppe. Vi betragter restriktionen $\rho = \delta|_{G_0} : G_0 \rightarrow SO(n)$, givet i Ligning (2.3), som er injektiv, da $\text{Ker}(\rho) = id_{G_0}$. Vi har mulighed for at illustrere situationen visuelt. Betragt Figur 9, her ser vi at der skabes en undergruppe \tilde{G}_0 , som består yderligere af en undergruppe $G_0^+ = G_0 \cap SO(3)$, som netop består af de elementer, tilhørende G_0 , som ρ i princippet intet gør ved, da de allerede har determinant 1. Anden halvdel af \tilde{G}_0 består af de elementer, tilhørende G_0 , som ρ ændrer til at få determinant 1 fra -1 . Vi kan således betragte G_0^+ som en undergruppe med index 2. Ydermere gælder at G_0^+ er normal, da $\text{Ker}(\rho) = id_{G_0} = G_0^+$. Herfra har vi at $G_0 = G_0^+ \cup (\rho(G_0) \setminus G_0^+) \cdot (-\mathbb{I})$.



Figur 9. Illustration af restriktionen ρ .

Ud fra ovenstående kan vi udtrykke følgende proportion for de tre typer undergrupper, hvor første type henviser til (i), anden til (ii) og tredje type til (iii).

2.2.1 Proposition:

Lad G være en gruppe og G^+ en normal undergruppe af G af index 2 og et element $z \in G \setminus G^+$ være af orden 2 som kommutere med alle elementerne i G^+ . Så eksistere der tre typer af undergrupper af G

- (i) G_0 er en undergruppe af G^+ .
- (ii) For $z \in G_0$, så gælder at G_0 er det direkte produkt af den normale undergruppe $G_0^+ = G_0 \cap G^+$ og den cykliske gruppe genereret af z .
- (iii) For $z \notin G_0$ og $G_0 \not\subseteq G^+$. Så er udtrykket

$$\delta : x \mapsto \begin{cases} x & \text{hvis } x \in G_0^+ = G_0 \cap G^+ \\ x \cdot z & \text{hvis } x \in G_0 \setminus G_0^+ \end{cases}$$

2.2. Endelige undergrupper af $O(3)$

en injektiv homomorfi δ af G_0 til en undergruppe \tilde{G}_0 af G^+ . Ydermere er $G_0^+ = G_0 \cap G^+$ en undergruppe af index 2 i \tilde{G}_0 .

Betragtes de endelige undergrupper i Sætning 2.1.4 som vi behandlede i tidligere afsnit,

$$C_1, C_2, \dots, D_2, D_3, \dots, T, O, I,$$

har vi at C_q er en cyklisk gruppe genereret af en rotation af orden q , diedergruppen D_q har orden D_{2q} , mens grupperne T, O og I er fuldstændige grupper af rotationssymmetrier af en regulær tetraeder, oktaeder og ikosaeder. Vi får en komplet liste af index 2 par af undergrupper af $SO(3)$ bestående af

$$(C_{2q}, C_q), (D_{2q}, D_q), (D_q, C_q), (O, T).$$

Ved den information vi har fået omkring punktgrupper, kan vi se at der eksistere uendelig mange, vi vil derfor frasortere de punktgrupper som ikke opfylder den krystallografiske restriktion. Følgende proposition gør dette muligt

2.2.2 Proposition:

Hvis en endelig undergruppe G_0 af $O(3)$ af \mathbb{E}^3 stabilisere et gitter Γ i \mathbb{E}^3 , så vil en rotation indeholdende i G_0 have orden 1, 2, 3, 4 eller 6.

Bevis:

En rotation ϕ af orden q har en rotationsmatrix

$$\phi = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

for $\theta = 2\pi/q$, med hensyn til en passende ortonormal basis. Dette giver sporet af matricen ϕ

$$\text{tr}(\phi) = 1 + 2\cos(2\pi/q).$$

Omvendt ved vi at sporet i matricen er lig et heltal da vi ved at matricen for ϕ med hensyn til en basis, der frembringer Γ , har indgange tilhørende \mathbb{Z} . Vi betragter $\text{tr}(\phi)$ som en funktion af q , og udplukker de værdier for q som opfylder $\text{tr}(\phi) \in \mathbb{Z}$. Vi får således følgende

q	1	2	3	4	6
$\text{tr}(\phi)$	3	-1	0	1	2

■

Vi har nu præsenteret punktgrupper, i næste afsnit vil vi præsentere de punktgrupper som opfylder den krystallografiske restriktion. Den krystallografiske restriktion ligger grundlag for at en endelig undergruppe G_0 af $O(3)$, for hvilke der eksisterer et gitter Γ i \mathbb{E}^3 , således der gælder $\phi(\Gamma) = \Gamma$ for $\phi \in G_0$, og opfylder Proposition 2.2.2. Vi siger således at G_0 tilfredsstiller den krystallografiske restriktion.

2.3 Geometriske krystalklasser

Vi har tidligere vist, at det er muligt at finde uendelig mange punktgrupper i \mathbb{E}^3 , da vi allerede i Sætning 2.1.4 har C_n , for $n \leq 1$ og $D_n \leq 2$. Vi ønsker derfor at kunne skelne de punktgrupper der anses at være krystallografiske punktgrupper ved at klassificere dem i forhold til geometriske krystalklasser. Ved en geometrisk krystalklasse betragter vi en konjugeret klasse af endelige undergrupper af $O(n)$ af \mathbb{E}^n , som tilfredsstiller den krystallografiske restriktion. To krystallografiske punktgrupper, i det tre-dimensionelle euklidiske rum, tilhører den samme geometriske krystalklasse ud fra følgende definition

2.3.1 Definition:

Lad G_0 og G'_0 være krystallografiske punktgrupper af det tre-dimensionelle euklidiske rum \mathbb{E}^3 . Vi siger at G_0 og G'_0 tilhører den samme geometriske krystalklasse, hvis de er geometrisk ækvivalente, $G_0 \stackrel{\Delta}{=} G'_0$.

For at forstå hvad det betyder at være geometrisk ækvivalent kommer her definitionen

2.3.2 Definition:

Undergrupperne G_0 og G'_0 af $O(n)$ af \mathbb{R}^n , er geometrisk ækvivalent, $G_0 \stackrel{\Delta}{=} G'_0$, når der eksisterer en afbildning $\phi \in O(n)$ hvor der gælder $\phi G_0 \phi^{-1} = G'_0$.

Ud fra Proposition 2.2.2 gælder krystallografiske punktgrupper kun kan have rotationer af orden 1, 2, 3, 4 eller 6. Grundet denne betingelse, frasorteres flest af de punktgrupper vi fandt i Sætning 2.1.4 og Afsnit 2.2. Herfra finder vi iblandt de cykliske grupper følgende geometriske krystalklasser

$$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, C_s, C_i, C_{3h}, S_4, C_{3i}.$$

Hvis vi ydermere tilligger en refleksionsplan kan yderligere tilføjes

$$C_{2h}, C_{4h}, C_{6h}, C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$$

Blandt diedergrupperne får vi følgende geometriske krystalklasser

$$D_2, D_3, D_4, D_6, D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{6h}, D_{2d}, D_{3d}$$

Yderligere har vi at teraeder og oktaeder punktgrupperne også tilhører geometriske krystalklasser

$$T, T_h, T_d, O, O_h.$$

I alt får vi således, at der eksisterer 32 geometriske krystalklasser i \mathbb{E}^3 . Grupperne er noteret med Schönflies notation for punktgrupper, hvilket er en anderledes metode end den vi har benævnt i Afsnit 2.2. Schönflies notation benytter vigtigheden af placeringen af en rotationsakse, refleksionsplan og rotations-refleksionsplanen. Derfor hvis ϕ er en rotation af orden 2, så gælder at $-\phi = (-1) \circ \phi$ er en refleksion, dvs. den har en refleksionsplan. Hvis rotationsaksen er vertikal så er refleksionsplanen horisontal, som Schönflies notere

2.3. Geometriske krystalklasser

med et h . Ydermere benævner vi de grupper, som har refleksionsplaner som indeholder rotationsakserne, med vertikale refleksionsplaner med et v . Vi får således at fra notationen i Afsnit 2.2 at $SO(3) \times Z$, for $Z = \{\mathbb{I}, -\mathbb{I}\}$, betegner Schönflies notationen C_{qh} eller D_{qh} for $q = 2, 3, 4, 6$, dog er $D_3 \times Z$ noteret som D_{3d} . For parende (C_{2q}, C_q) betegner Schönflies notationen C_s for $q = 1$, S_4 for $q = 2$ og C_{3h} for $q = 3$. Ved parende (D_{2q}, D_q) har vi notationen D_{2d} for $q = 2$ og D_{3h} for $q = 3$. Til sidst har vi parende (D_q, C_q) som noteres C_{qv} for $q = 2, 3, 4, 6$. En anden metode for notation er international notationen af Herman og Mauguin, hvor der henvises til (Klemm 1982, Kapitel 10, s. 122), her er de geometriske krystalklasser yderligere inddelt i syv forskellige krystalsystemer, som består i trikliniske, monoklinisk, ortorombisk, tetragonalt, trigonalt, hexagonal og kubisk.

Vi har nu præsenteret de mulige krystallografiske punktgrupper som eksisterer i det tre-dimensionelle euklidiske rum og fundet derved 32 geometriske krystalklasser som repræsenterer disse.

Formålet med kapitlet er at få en forståelse for et gitter, og hvilken betydningen det har i forbindelse med krystallografiske grupper. Kapitlet baserer på (Engel 1986), (Strebel 2003) samt (Woodward 0000). Et gitter er en undergruppe af et euklidisk vektor rum i n -dimension, hvilket har specielle egenskaber. De er vigtige for krystallografiske grupper grundet to betingelser. Et er at dens baner, kaldt punktgitre, er de simpleste typer af regulære punktsystemer, den anden er at dens translationsvektorer af translationer for en krystallografisk gruppe danner et gitter.

3.0.1 Definition:

Et Gitter Γ i \mathbb{E}^n består af n lineært uafhængige gittervektorer $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ med betingelsen at hver gittervektor $\mathbf{t} \in \Gamma$ er repræsenteret som en lineær kombination

$$\mathbf{t} = m_1 \mathbf{a}_1 + \dots + m_n \mathbf{a}_n,$$

for $m_i \in \mathbb{Z}$.

I forbindelse med at arbejde med gitre har vi brug for en ekstra gruppe kaldet symmetrigruppen af gitteret, som bruges til at identificere gittertyper.

3.0.2 Definition:

Lad Γ være et gitter af \mathbb{E}^n . Vi lader

$$Gl_n(\Gamma) = \{\phi \in Gl_n(\mathbb{E}) \mid \phi\Gamma = \Gamma\}$$

og

$$S(\Gamma) = Gl_n(\Gamma) \cap O(n).$$

Vi kalder $S(\Gamma)$ symmetrigruppen af Γ .

Vi har således at symmetrigruppen af et gitter består af ortogonale afbildninger $\phi : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$, som afbilder gitteret ind i sig selv. Ud fra denne definition, kan vi udlede at en gruppe G_0 er en krystallografisk punktgruppe, hvis der eksisterer et gitter Γ af rank 3, hvor der gælder $G_0 \subset S(\Gamma)$. Dette kan udledes ud fra virkningen nævnt i Sætning 2.0.4, hvor vi ser at enhver ortogonal afbildning $\phi \in G_0$ afbilder gitteret Γ over i sig selv, hvorfor den må ligge i $S(\Gamma)$. Vi vil nu se på et eksempel omkring et gitter, hvor vi vil identificere gitre ved

at gøre brug af symmetrigruppen for at undersøge om gitterne er ækvivalente. Vi definerer to gitter til at være geometrisk og/eller aritmetisk ækvivalente ved

3.0.3 Definition:

To gitter Γ og Γ' er geometrisk ækvivalente, hvis parrene $(\Gamma, S(\Gamma))$ og $(\Gamma', S(\Gamma'))$ er geometrisk ækvivalente. Analogt med aritmetisk ækvivalent.

For at ovenstående giver meningen, skal vi have defineret hvornår to par er henholdsvis geometrisk og/eller aritmetisk ækvivalent, hvilket følger fra understående definition.

3.0.4 Definition:

To par $(\Gamma, G_0 \subset S(\Gamma))$ og (Γ', G'_0) er aritmetisk ækvivalente, hvis der eksisterer en lineær isomorfi $\phi: \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n$, som tilfredsstiller betingelsen

$$\Gamma' = \phi(\Gamma) \quad \text{og} \quad G'_0 = \phi G_0 \phi^{-1}.$$

For geometrisk ækvivalent gælder hvis ϕ opfylder den svagere betingelse

$$G'_0 = \phi G_0 \phi^{-1}$$

Forinden eksemplet, ser vi på hvilken betingelse ovenstående definitioner kan medføre. Vi har der eksisterer ækvivalens hvis $G'_0 = \phi G_0 \phi^{-1}$, hvis ϕ opfylder kriterierne ovenfor. Hvis vi tager et element $\rho \in G_0$, og definerer egenvektoren $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ til ρ . Så gælder, fra almene regler i forbindelse med lineære operatorer og kvadratiske matricer, at $\rho(\mathbf{u}) = \lambda \mathbf{u}$, for egenværdi λ til ρ . Dette medfører at $\phi(\mathbf{u})$ er en egenvektor til $\phi \rho \phi^{-1}$ med samme egenværdi. Vi argumenterer her ved en beregning

$$(\phi \rho \phi^{-1})(\phi(\mathbf{u})) = \phi \rho(\mathbf{u}) = \phi(\lambda \mathbf{u}) = \lambda \phi(\mathbf{u}).$$

Ovenstående argument bliver brugt senere i afsnittet. Vi begiver os nu ud i eksemplet.

3.0.5 Eksempel:

Betragt vektorrummet \mathbb{R}^3 . Lad $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ være standardbasisvektorer af \mathbb{R}^3 . Gruppen $\mathbb{Z}^3 \subset \mathbb{R}^3$ er diskret og indeholder en basis af \mathbb{R}^3 , ydermere er den et gitter af \mathbb{R}^3 . Yderligere gælder at enhver undergruppe af \mathbb{Z}^3 som indeholder en basis af \mathbb{R}^3 , er et gitter i \mathbb{R}^3 . For eksempel frembringer følgende delmængder S_3, S'_3 og S''_3 gitterne Γ_3, Γ'_3 og Γ''_3 ,

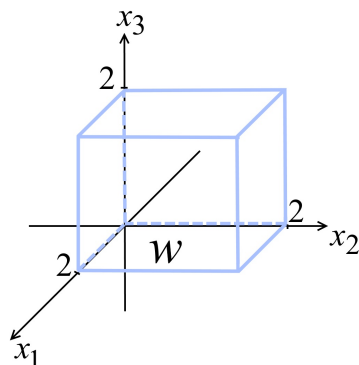
$$S_3 = \{\pm 2\mathbf{e}_l \mid 1 \leq l \leq 3\}$$

$$S'_3 = \{\pm \mathbf{e}_i \pm \mathbf{e}_j \mid 1 \leq i < j \leq 3\}$$

$$S''_3 = S_3 \cup \{\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3\}$$

I dette specifikke tilfælde har vi at punktgruppen for alle tre delmængder er O_h . Alle elementerne i punktgruppen permuterer standardbasisvektorerne $\{\pm \mathbf{e}_1, \pm \mathbf{e}_2, \pm \mathbf{e}_3\}$, hvorfor elementerne er ortogonale. Endvidere gælder at hvis $\phi(\Gamma) = \Gamma'$, for ϕ , der opfylder kriterierne i Definition 3.0.4, så medfører dette at begge gitter har samme antal korteste vektorer. Vi betragter Γ_3 , hvilket betegner det primitive kubiske gitter. Gitteret har seks

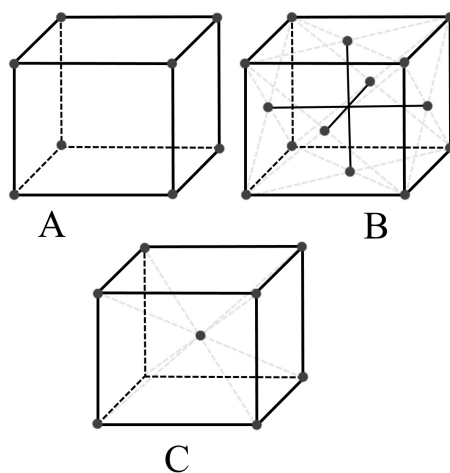
vektorer med positiv norm givet af $\pm 2\mathbf{e}_1, \pm 2\mathbf{e}_2, \pm 2\mathbf{e}_3$. Definer den akseparallelle kube $W = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid 0 \leq x_l \leq 2\}$, illustreret på Figur 10. Ved at betragte kubens byggesten, kan vi ved brolægning inddele hele rummet ved kvadranten.



Figur 10. Kvadrant W placeret i koordinatsystemet.

Betragter vi mængden S'_3 får vi gitterpunkter, som er centreret på fladerne af kubens. Beregningen $2\mathbf{e}_i = (\mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j) + (\mathbf{e}_i - \mathbf{e}_j)$ viser, at Γ'_3 inkluderer det primitive gitter $\Gamma_3 = (2\mathbb{Z})^3$. Γ'_3 kaldes for det sidecentrerede kubiske gitter. Gitteret har tolv vektorer givet ved $\pm \mathbf{e}_i \pm \mathbf{e}_j$, for $1 \leq i < j \leq 3$.

Som det sidste har vi gitteret Γ''_3 . Dette består af gitteret Γ_3 samt en sideklasse $\Gamma_3 + (1, 1, 1)^T$. Vi kalder dette gitter for det indrecenterede kubiske gitter. Punkterne i sideklassen $\Gamma_3 + (1, 1, 1)^T$ angiver centrene af kuberne $W + \mathbf{x}$ for $\mathbf{x} \in \Gamma_3$. Gitteret har otte punkter med mindste længde givet ved $\pm \mathbf{e}_1 \pm \mathbf{e}_2 \pm \mathbf{e}_3$. Vi har således, at den ikke er ens med hverken den primitive eller den sidecentrerede kubiske gitter. Vi har at punktgrupperne for de tre gitter Γ_3 , Γ'_3 og Γ''_3 er isomorf med O_h , samt at gitterne er geometrisk ækvivalente, da de alle er kubiske. Ydermere er de ikke aritmetisk ækvivalente, da de hver består af forskellige antal korteste vektorer. Der eksisterer derfor tre forskellige kubiske gitter.



Figur 11. Kubiske gittere.

I Figur 11 er illustreret de tre forskellige kubiske gitter. Figur 11.A er det primitive kubiske gitter, Figur 11.B er det sidecentrerede kubiske gitter og Figur 11.C er det indrecenterede kubiske gitter. ◀

Symmetrigruppen, af et gitter Γ af \mathbb{E}^n , er en undergruppe af den ortogonale gruppe $O(n)$, med et specielt egenskab udtrykt i følgende sætning.

3.0.6 Sætning:

Symmetrigruppen, $S(\Gamma)$ af et gitter, er endelig.

Bevis:

Beviset er et specielt tilfælde af Lemma 2.0.5, hvorfor vi henviser hertil. ■

En sidste ting vi ønsker at beskrive ved et gitter er, at den både er normal i den krystallografiske gruppe G , samt er en maksimal abelsk undergruppe.

3.0.7 Sætning:

Gitteret Γ er normal i G og er en maksimal fri abelsk undergruppe af G

Bevis:

Ud fra definitionen af et gitter har vi at Γ er en fri abelsk gruppe. Vi kan nemt vise den er normal da vi har at for ethvert element $(\mathbf{a}, \phi) \in G$ og en hver translation $\mathbf{t} \in \Gamma$ gælder

$$(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{t}, I)(\mathbf{a}, \phi)^{-1} = (\phi\mathbf{t}, I).$$

Vi opnår at $\phi \in G_0$ afbilder Γ ind i sig selv, hvorfor $\phi\mathbf{t} \in \Gamma$ for hver $\mathbf{t} \in \Gamma$. Antag $\Gamma \subset G'$, hvor $G' \subset G$ er en større abelsk undergruppe af G . For enhver $(\mathbf{a}, \phi) \in G'$ som ikke er indeholdt i Γ opnår vi som over

$$(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{t}, I)(\mathbf{a}, \phi)^{-1} = (\phi\mathbf{t}, I).$$

Da vi har at G' er abelsk, er det muligt at ombytte (\mathbf{a}, ϕ) og (\mathbf{t}, I) , hvorfor vi opnår

$$(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{t}, I)(\mathbf{a}, \phi)^{-1} = (\mathbf{t}, I)(\mathbf{a}, \phi)(\mathbf{a}, \phi)^{-1} = (\mathbf{t}, I),$$

hvorfor $(\phi\mathbf{t}, I) = (\mathbf{t}, I)$ for alle $\mathbf{t} \in \Gamma$. Da vi har, at Γ består af n lineære uafhængige translationer, følger det at $\phi = I$, hvorfor $(\mathbf{a}, \phi) \in \Gamma$. Vi har derfor at $\Gamma = G'$ og må være en maksimal abelsk undergruppe af G . ■

Vi vil nu begive os ud i virkningen af en krystallografisk punktgruppe G_0 på et gitter Γ . Vi ønsker at beskrive hvilke gittertyper, der konstrueres ved en sådan virkning. De forskellige typer af gitter i tre-dimensioner blev bestemt geometrisk af Frankenheim og Bravais. I alt eksisterer der fjorten forskellige gittertyper. De fjorten forskellige gittertyper kan arrangeres i syv forskellige gittersystemer. De syv nævnte gittersystemer er trikliniske, monoklinisk, ortorombisk, tetragonalt, rhomboedrisk, hexagonal og kubisk. I tidligere

eksempel arbejdede vi inden for den kubiske gittersystem. Ydermere da vi arbejder i det tre-dimensionelle rum, så har vi forskellige muligheder for centrering af gitteret. De seks mulige centreringer er udtrykt i nedenstående tabel.

Centrering	Centreringsvektorer
Sidecentrering	$\pm \mathbf{x} \pm \mathbf{y}, \pm \mathbf{x} \pm \mathbf{z}, \pm \mathbf{y} \pm \mathbf{z}$
Indrecentrering	$\pm \mathbf{x} \pm \mathbf{y} \pm \mathbf{z}$
Base centrering	$C : \pm \mathbf{x} \pm \mathbf{y}, B : \pm \mathbf{x} \pm \mathbf{z}, A : \pm \mathbf{y} \pm \mathbf{z}$

Bemærk, at ved base centrering er udtrykt tre forskellige muligheder ved centrering. Base centrering betyder at kun to modstående sider på enhedscellen er centreret. Hvis de to modstående sider ligger i xy -planen er den C -centreret, hvis de ligger i xz -planen er den B -centreret, og A -centreret når de ligger i yz -planen. Ser vi på de forskellige centreringer og sammenligner med Eksempel 3.0.5, er det tydeligt ud fra konstruktionen af gitrene, at vi har centreringsvektorerne $\pm \mathbf{e}_i \pm \mathbf{e}_j$, for $1 \leq i < j \leq 3$, for den sidecentrerede kubiske gitter, samt centreringsvektoren $\pm \mathbf{e}_1 \pm \mathbf{e}_2 \pm \mathbf{e}_3$ for den indrecentrerede kubiske vektor.

Hvis vi kombinerer de syv krystalsystemer, nævnt i Afsnit 2.3, med centreringstranslationer, kan de fjorten unikke gittertyper beskrives. Hvert gitter er defineret ud fra deres enhedscelle, hvor vi i Eksempel 3.0.5 så på en enhedscelle på formen kvadrant. Enhedscellen er en del af en brolægning, der danner hele brolægningen ved brug af kun translationer, og som er så lille som muligt. Vi vil i Kapitel 4 betragte denne som et fundamentalområde. Nedenstående tabel beskriver de fjorten unikke gittertyper, hvor α, β, γ beteges vinklerne mellem vektorerne $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$, som danner enhedscellen.

Gittersystem	Gitter	Enhedscelles dimension	Nødvendige symmetrielementer
Trikliniske	Primitiv	$\mathbf{x} \neq \mathbf{y} \neq \mathbf{z}$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	Ingen
Monoklinisk	Primitiv C -centrering	$\mathbf{x} \neq \mathbf{y} \neq \mathbf{z}$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	Enten en reflektionsplan eller en 2-fold akse
Ortorombisk	Primitiv C -centrering Indrecentreret Sidecentreret	$\mathbf{x} \neq \mathbf{y} \neq \mathbf{z}$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Enhver kombination af tre indbyrdes \perp 2-fold akser eller reflektionsplan
Tetragonalt	Primitiv Indrecentreret	$\mathbf{x} = \mathbf{y} \neq \mathbf{z}$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	En 4-fold akse
Rhomboedrisk	Primitiv	$\mathbf{x} = \mathbf{y} \neq \mathbf{z}$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	en 3-fold akse
Hexagonal	Primitiv	$\mathbf{x} = \mathbf{y} \neq \mathbf{z}$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	En 6-fold akse
Kubisk	Primitiv Indrecentreret Sidecentreret	$\mathbf{x} = \mathbf{y} = \mathbf{z}$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	fire 3-fold akser

Vi vil nu sammenkoble punktgrupperne med gittertyper. Vi starter med at opsummere kort hvad en krystallografisk gruppe er. En krystallografisk punktgruppe består af ortogonale afbildninger som afbilder gitteret over i sig selv. Ydermere ved vi at vi kan repræsentere en krystallografisk gruppe ved brug af en 3×3 matrix tilhørende $O(3)$. Betragter vi alle de krystallografiske punktgrupper som afbilder gitteret Γ over i selv, ønsker vi at fremhæve de punktgrupper som indeholder alle de symmetri operationer af gitteret Γ , som bevarer origo, hvilket vi vil kalde for en Bravais punktgruppe, vi får her følgende definition.

3.0.8 Definition:

En Bravais punktgruppe B_0 er en krystallografisk punktgruppe, som indeholder alle de isometrier som afbilder gitter Γ over i sig selv.

I forbindelse med de fundne krystallografiske punktgrupper, som er defineret under de geometriske krystalklasser i Afsnit 2.3 får vi syv Bravais punktgrupper

$$C_i, C_{2h}, D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h}, O_h.$$

Vi henviser til (Engel 1986, Kapitel 7, s. 123-128), hvor teorien, samt metoden, for at finde de ovenstående Bravais punktgrupper er beskrevet. Under er en tabel som sammensætter Bravais punktgrupperne med gittersystemet, samt viser hvilke resterende krystallografiske punktgrupper, som virker på gitrene.

Gittersystem	Bravais punktgruppe	Krystallografiske punktgrupper
Trikliniske	C_i	C_1
Monoklinisk	C_{2h}	C_2, C_s
Ortorombisk	D_{2h}	D_2, C_{2v}
Tetragonalt	D_{4h}	$C_4, S_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{2d}$
Rhomboedrisk	D_{3d}	C_3, S_6, D_3, C_{3v}
Hexagonal	D_{6h}	$C_6, C_{3h}, C_{6h}, D_6, C_{6v}, D_{3h}$ $C_3, S_6, D_3, C_{3v}, D_{3d}$
Kubisk	O_h	T, T_h, O, T_d

Vi vil nu sammenflette gitre med punktgrupperne, hvilket sker i forbindelse med at finde aritmetiske krystalklasser som er vigtige for at finde krystallografiske grupper. Princippet med at finde aritmetiske krystalklasser, spiller på virkningen af en punktgruppe på et gitter. Ovenstående tabel er således vigtig i sammenspil med hvilken gittertype en punktgruppe kan virke på.

3.1 Aritmetiske krystalklasser

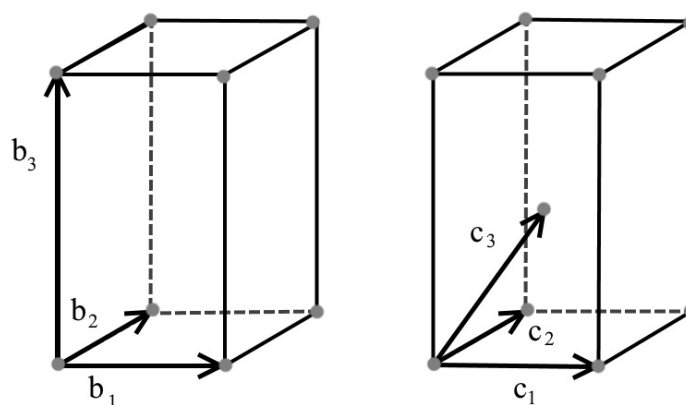
I dette afsnit sættes fokus på aritmetiske krystalklasser i \mathbb{E}^3 . Vi benytter notationen (Γ, G_0) for en aritmetisk krystalklasse, hvor G_0 er en punktgruppe og Γ er et gitter hvorpå G_0 virker. Aritmetiske krystalklasser er vigtige i forbindelse med at klassificere krystallografiske grupper, hvilket kort vil blive uddybet i slutningen af afsnittet. De aritmetiske krystalklasser

af \mathbb{E}^3 kan findes på forskellige måder. En metode, som stammer tilbage fra det 19-århundrede, vil de aritmetiske krystalklasser opnås ved at kombinere de geometriske krystalklasser med tilsvarende gitre. Derfor for at opnå en repræsentant fra hver aritmetisk krystalklasse er det nødvendigt at betragte en repræsentant fra den geometriske klasse og bestemme alle aritmetiske repræsentanter som lader et gitter Γ være invariant. Vi bestemmer således de aritmetiske krystalklasser ved at betragte om de er aritmetisk ækvivalente eller ej.

Følgende eksempel viser hvorledes vi kan finde aritmetiske krystalklasser ved at betragte en bestemt krystallografisk punktgruppe, også benævnt som en geometrisk krystalklasse.

3.1.1 Eksempel:

Lad G_0 være en endelig undergruppe af $SO(\mathbb{E}^3)$ af typen C_4 . Vi ser nu hvorledes C_4 virker på et gitter Γ . Fra tidligere ved vi at C_4 virker på gitre tilhørende det tetragonale gittersystem, som indeholder henholdsvis det primitive tetragonale gitter og det indrecenterede tetragonale gitter, gitrene er illustreret i Figur 12.



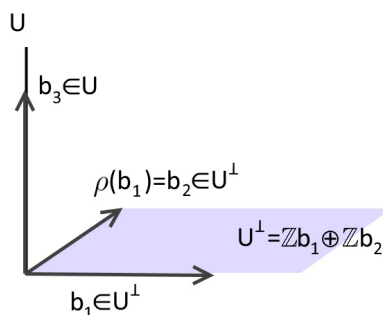
Figur 12. De to forskellige gitre: primitiv tetragonale gitter og indrecentereret tetragonale gitter.

Lad ρ være en rotation med rotationsakse U som frembringer G_0 . Yderligere lad Γ være et gitter af \mathbb{E}^3 som er invariant under G_0 . Vi påstår at der eksisterer gittervektorer i U og U^\perp . Lad gitterpunktet $\mathbf{v} \in \Gamma \setminus U$ tilhøre gitteret. Med $\mathbf{v} \in \Gamma$ gælder yderligere at $\rho(\mathbf{v})$ også er et gitterpunkt. Yderligere har vi et tredje gitterpunkt $\mathbf{w} = \mathbf{v} - \rho(\mathbf{v}) \in U^\perp$ forskellige fra $\mathbf{0}$, da prikproduktet for \mathbf{w} og $\mathbf{u} \in U$ er lig nul ud fra beregningen

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{u} = (\mathbf{v} - \rho(\mathbf{v})) \cdot \mathbf{u} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} - \rho(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{u} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} - \rho(\mathbf{v}) \cdot \rho(\mathbf{u}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{0}.$$

Der eksisterer derfor et gitterpunkt af positiv længde i rotationsplanet U^\perp . Endvidere får vi at, vektorsummet $\mathbf{x} = \mathbf{v}' + \rho(\mathbf{v}') + \rho^2(\mathbf{v}') + \rho^3(\mathbf{v}')$ er forskellig fra $\mathbf{0}$, for et $\mathbf{v}' \in \Gamma \setminus U^\perp$, og er fastholdt af ρ , så $\rho(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$. $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ ligger således på U . Vi har at $\Gamma \cap U^\perp$ er et kvadratisk gitter af U^\perp . Lad $\mathbf{0} \neq \mathbf{b}_1 \in U^\perp$ med korteste længde, ved at rotere \mathbf{b}_1 med ρ kan vi få en vektor som er ortogonal på \mathbf{b}_1 med samme længde, derfor lad $\mathbf{b}_2 = \rho(\mathbf{b}_1) \in U^\perp$, disse

frembringer $\Gamma \cap U^\perp$, hvilket argumentere for at $\Gamma \cap U^\perp$ er kvadratisk. Argumentet er baseret på, at C_4 , i et 2-dimensionalt vektorrum, virker på et kvadratisk gitter, for nærmere detaljer se (Morandi 2007, Kapitel 3, s. 36). Ydermere er $U \cap \Gamma$ et gitter i U , hvor der eksisterer en vektor $\mathbf{b}_3 \in \Gamma \cap U$ med mindste positiv længde, for illustration se Figur 13. Disse tre vektorer frembringer gitteret $\Gamma_1 = \mathbb{Z}\mathbf{b}_1 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{b}_2 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{b}_3 \subset \Gamma$, som er invariant under C_4 .



Figur 13. Placering af vektor \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 og \mathbf{b}_3 i forhold til hinanden.

Der opstår nu to tilfælde. Enten er $\Gamma = \Gamma_1$ eller $\Gamma_1 \subset \Gamma$, hvor vi i sidste tilfælde viser $\Gamma = \Gamma_1 \oplus (\Gamma_1 + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T)$. For at forstå andet tilfælde se Figur 12, hvor \mathbf{c}_3 er centerpunktet i det indrecenterede tetragonale gitter. Vi ønsker at finde en sådan punkt. Betragt derfor en vektor $\mathbf{u} \in \Gamma_1 \setminus \Gamma$, hvor $\mathbf{u} = (\alpha, \beta, \gamma)^T$, for $0 \leq \alpha, \beta, \gamma < 1$. Vi ønsker nu at finde endelige værdier af α, β, γ . Betragt

$$\rho(\mathbf{u}) - \mathbf{u} = \begin{pmatrix} -\beta \\ \alpha \\ \gamma \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\alpha + \beta) \\ \alpha - \beta \\ 0 \end{pmatrix} \in \Gamma_1 \cap U^\perp.$$

Vi har at $\Gamma_1 \cap U^\perp = \mathbb{Z}\mathbf{b}_1 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{b}_2$. Vi får således $\alpha - \beta \in \mathbb{Z}$ og $\alpha + \beta \in \mathbb{Z}$. Herfra har vi

$$\alpha = \frac{\alpha + \beta}{2} + \frac{\alpha - \beta}{2} \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$$

$$\beta = \frac{\alpha + \beta}{2} - \frac{\alpha - \beta}{2} \in \frac{1}{2}\mathbb{Z},$$

vi får nu $\mathbf{u} = (\alpha, \beta, \gamma)^T$, med $\alpha = 0$ eller $\alpha = \frac{1}{2}$, samt $\beta = 0$ eller $\beta = \frac{1}{2}$. Da det ikke er muligt at have kombinationerne $\alpha = 0$ og $\beta = \frac{1}{2}$, samt $\alpha = \frac{1}{2}$ og $\beta = 0$, hvilket vil resultere i $\rho(\mathbf{u}) - \mathbf{u} = (-\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, 0)^T \in \Gamma_1 \cap U^\perp$, hvilket ikke er muligt, hvorfor $\alpha = \beta = \frac{1}{2}$. Vi har nu $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \gamma)^T \in \Gamma_1$ og $2(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \gamma)^T = (1, 1, 2\gamma) \in \Gamma$. Da $(1, 1, 0) \in \Gamma$ gælder

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2\gamma \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2\gamma \end{pmatrix} \in \Gamma \cap U$$

Dette bevirker at $2\gamma \in \mathbb{Z}$, hvorfor γ er enten 0 eller $\frac{1}{2}$. Vi har at 0 ikke er en mulighed, da der så gælder $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)^T \in \Gamma_1 \cap U^\perp$. Derfor må $\gamma = \frac{1}{2}$ og vi får således at $\alpha = \beta = \gamma = \frac{1}{2}$. Gitteret Γ_1 frembringes af Γ ved centrering.

Dette resultat viser at den geometriske krystalklasse C_4 består af nøjagtigt to aritmetiske krystalklasser.

Vi betragter nu $C_4 \subset SO(3)$. ρ er drejningen ved 90° omkring egenvektor \mathbf{u}' . Ved brug af tidligere betingelse, argumenteret ud fra Definition 3.0.4, kan vi udtrykke egenværdi 1 til ρ ved $\rho(\mathbf{u}') = \mathbf{u}'$. Dette medfører at $\phi(\mathbf{u}')$ er egenvektor til $\phi\rho\phi^{-1}$, med samme egenværdi, og ligger på rotationsaksen for denne drejning, da vi får $(\phi\rho\phi^{-1})(\phi(\mathbf{u}')) = \phi(\mathbf{u}')$. Betragter vi ρ^2 , får vi at planen U' bestående af egenvektorer til egenværdi -1 , medfører dette at $\phi(U')$ er egenvektor til egenværdi -1 af $\phi\rho^2\phi^{-1}$. Vi ser nu specielt på standardbasis $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$. Her betragter vi \mathbf{e}_3 som aksens for ρ og $\phi\rho\phi^{-1}$, ydermere vil $\text{span}\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ være egenrummet til egenværdi -1 for ρ^2 og $\phi\rho^2\phi^{-1}$. Dette medfører at $\phi(\mathbf{e}_3) = \pm\mathbf{e}_3$, hvilket betyder at vi bevarer rotationsaksen $U = \text{span}\{\mathbf{e}_3\}$, samt $\phi(\text{span}\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}) = \text{span}\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$, hvorfor planet $U^\perp = \text{span}\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ bevares. Derfor er ϕ på formen

$$\left[\begin{array}{c|c} A & 0 \\ \hline 0 & \pm 1 \end{array} \right],$$

hvor A er en 2×2 matrix med heltals indgange. Vi kan herfra konkludere at $\phi(\Gamma) = \Gamma$.

I første tilfælde, hvor vi har $\Gamma_1 = \mathbb{Z}\mathbf{b}_1 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{b}_2 \oplus \mathbb{Z}\mathbf{b}_3$, vil parret (Γ_1, C_4) være aritmetisk ækvivalent med parret (\mathbb{Z}^3, C_4) . I andet tilfælde, hvor $\Gamma_1 = \Gamma_1 \oplus (\Gamma_1 + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T)$, vil den være aritmetisk ækvivalent med parret $(\mathbb{Z}^3 + (\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{2}(1, 1, 1)^T), C_4)$. De to par er ikke aritmetisk ækvivalente, da \mathbb{Z}^3 er genereret af gitterpunkter som ligger på aksens $U = \mathbb{R} \cdot \mathbf{e}_3$ og planet $W = (U)^\perp$, samt at $\phi(\Gamma) = \Gamma$, hvorfor Definition 3.0.4 ikke er opfyldt. ◀

Ved at tage hver geometriske krystalklasse og lader dem virke på et gitter, vil vi opnå i alt 73 aritmetiske krystalklasser. Vi henviser her til (Iversen 1995, Kapitel IV.9, s. 101-105), for detaljer og flere eksempler. For at forstå hvilken betydning aritmetiske krystalklasser har i forbindelse med at finde krystallografiske grupper, er notationen et vigtigt element. Tidligere benævnte vi en aritmetisk krystalklasse ved notationen (Γ, G_0) . Vi lader derfor de krystallografiske grupper som har samme gitter Γ samt samme krystallografiske punktgruppe G_0 indgå i den samme aritmetiske krystalklasse, og ser hvordan der sker et split, hvilket uddybes i Kapitel 5, som munder ud i nogle eksempler hvor dette vises.

KAPITEL 4

Krystallografiske grupper

En diskret undergruppe G af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ kaldes en krystallografisk gruppe hvis den har kompakt fundamentalområde. Yderligere anses krystallografiske grupper at være ækvivalente, hvis de er konjugerede i gruppen $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$, bestående af affine afbildninger af \mathbb{E}^n . Følgende kapitel er baseret på (Hiller 1986), (Strebel 2003) samt (Edvardsson 2014).

I følgende kapitel vil Bieberbachs sætning blive introduceret, inden beskrives matematisk hvad en krystallografisk gruppe er. Som start præsenteres et fundamentalområde. Groft sagt er et fundamentalområde, for en gruppe bestående af isometrier, i et metrisk rum X en delmængde af X , der kun indeholder præcist et element fra hver bane.

4.0.1 Definition (Fundamentalområde):

Lad $X \subset \mathbb{R}^n$ være et metrisk rum. Hvis en gruppe G virker på X , så er et fundamentalområde for denne virkning en åben delmængde D af X , som tilfredsstiller to betingelser

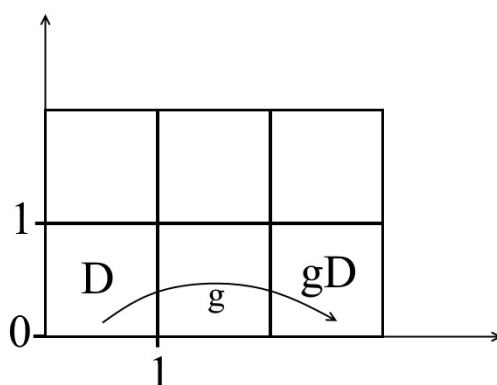
$$(i) \quad X = \bigcup_{g \in G} g\overline{D}.$$

$$(ii) \quad gD \cap g'D = \emptyset, \text{ for alle } g \neq g' \in G.$$

Bemærk at at ved betingelse (i) kan betragtes en stor nok D , samt ved (ii) kan betragtes en lille nok D . Derfor hvis D er for lille kan X ikke skrives ved foreningsmængden, da der vil være chance for huller, samt, hvis D er for stor vil der være chance for at fællesmængden ikke forbliver tom. For at understøtte forståelsen for definitionen, kommer her et eksempel.

4.0.2 Eksempel:

Betragt $X = \mathbb{E}^2$ og $G = \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} \subset V \subset \text{Isom}(\mathbb{E}^2)$, der virker på \mathbb{E}^2 som en gruppe af translationer. Vi har derfor $g = (m, n) \in (\mathbb{Z} \times \mathbb{Z})$, som afbilder et element $(x, y) \in \mathbb{E}^2$ ind i $(x + m, y + n)$. Den åbne enhedskvadrat $D = (0, 1) \times (0, 1)$ er et fundamentalområde for denne virkning, hvor $\overline{D} = [0, 1] \times [0, 1]$. Det ses tydeligt, at D er et fundamental område for \mathbb{E}^2 , da elementerne i G består af heltal, og derfor ved endelig mange translation kan brolægge \mathbb{E}^2 ved foreningsmængden, se Figur 14. Ydermere ved at betragte $g = (m_1, n_1) \in G$ og $g' = (m_2, n_2) \in G$ således $g \neq g'$, gælder at $gD = (0 + m_1, 1 + m_1) \times (0 + n_1, 1 + n_1)$ og $g'D = (0 + m_2, 1 + m_2) \times (0 + n_2, 1 + n_2)$ er forskellige. Vi har at begge elementer tilhørende G består af heltal, og eftersom $m_1 \neq m_2$ og $n_1 \neq n_2$ bliver enhedskvadranten forskudt forskellige steder hen i rummet \mathbb{Z}^2 , vi får således at $gD \cap g'D = \emptyset$. Hvis enhedskvadranterne ligger op ad hinanden, vil betingelsen at enhedskvadranten er åben, medvirke at randen ikke er inddraget, hvorfor fællesmængden for de to kvadranter er tom.



Figur 14. Enhedsfirkant som fundamental område for \mathbb{E}^n .

En anden måde at forklare dette på er ved at betragte kvotienten af virkningen af G på X . For at forstå dette ser vi først på virkningen af G på X og definere en ækvivalens relation \sim .

4.0.3 Proposition:

Virkningen af G på X giver anledning til en ækvivalens relation \sim ved $x \sim y$, hvis der eksisterer $g \in G$, som tilfredsstiller $x = g \cdot y$.

Bevis:

Da $e \cdot x = x$, gælder $x \sim x$, for identitets-elementet $\{e\}$ i G . Ydermere gælder at hvert element i G har en invers, hvorfor hvis $x = g \cdot y$, så er $y = g^{-1} \cdot x$ og $x \sim y$ medfører $y \sim x$. Sidst har vi, at $x \sim y$ hvis og kun hvis der eksisterer et $g_1 \in G$, således $x = g_1 \cdot y$, og $y \sim z$ hvis og kun hvis der eksisterer et $g_2 \in G$, således $y = g_2 \cdot z$, så får vi $x = g_1 g_2 \cdot z$ og dermed $x \sim z$. Vi har således vist at relationen \sim er reflektiv, symmetrisk og transitiv, hvorfor \sim er en ækvivalens relation. ■

Vi bruger nu ovenstående proposition til at definere kvotientrummet $X/G = X/\sim$

4.0.4 Definition:

Lad X være en topologisk rum og lad \sim være en ækvivalens relation på X . Kvotientrummet $X/G = X/\sim$ er defineret som $X/G = \{[x] \mid x \in X\}$, hvor $[x]$ er ækvivalensklassen, der indeholder x .

Ser vi på ovenstående definition i sammenhæng med overstående ækvivalens relation i Proposition 4.0.3, vil kvotientrummet X/G forstås som mængden af baner $G \cdot x$ for x , da ækvivalensklassen $[x]$ kan anses som banen $G \cdot x$ for x . For at argumentere for dette definerer vi først hvad en bane er.

4.0.5 Definition:

Lad $\alpha : G \times X \rightarrow X$ være en virkning af G på X , og $x \in X$ et element af X . Så kaldes

4.1. Bieberbachs resultater

$G \cdot x = Gx = \{gx \mid g \in G\}$ for banen af x under virkning af G . Mængden af baner $\{Gx \mid x \in X\}$ benævnes ofte som X/G .

Lader vi \sim være en ækvivalens relation, som opfylder kriterierne i Proposition 4.0.3, så kan vi udtrykke en ækvivalensklasse $[x] = \{y \in X \mid y \sim x\} = \{y \in X \mid y = gx, g \in G\} = \{gx \mid g \in G\}$, for et givet $x \in X$. Vi har således at ækvivalensklassen $[x]$, med hensyn til ækvivalens relationen \sim , kan $[x]$ anses som banen Gx for x , hvorfor X/G kan forstås som mængden af banerne.

Når vi opdeler et topologisk rum, identificerer vi delmængder eller baner og betragter deres elementer som ens. En abstrakt måde at arbejde med kvotientrummet, er ved at betragte handlingen med at lime delmængder sammen. For eksempel, hvis vi betragter en lige linje med endepunkter p_1 og p_2 og en ækvivalens relation $x \sim y$, hvis og kun hvis $x = y$ eller $x = p_1$ og $y = p_2$. Hvorfor p_1 og p_2 er samme punkt, vi kan således anse det som at lime endepunkterne sammen til en cirkel.

Følgende definition er grundlæggende inden for krystallografiske grupper

4.0.6 Definition:

En diskret undergruppe G af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ er en krystallografisk gruppe hvis kvotientrummet \mathbb{E}^n/G er kompakt.

Betingelsen med at være diskret betyder at hvis $x \in \mathbb{E}^n$, så eksisterer der intet fortætningspunkt i banen $Gx = \{g \cdot x \mid g \in G\}$. Ved at betragte det abstrakte argument om limning, kan vi se at kompaktheden af kvotientrummet svarer til kompaktheden af lukningen af det fundamentale område af G som virker på \mathbb{E}^n . Formelt kan vi se på en afbildning $\bar{D} \rightarrow \mathbb{E}^n$, hvorfor vi har mulighed for også at betragte kvotientrummene $\bar{D}/G \rightarrow \mathbb{E}^n/G$, hvilket er surjektiv ud fra betingelse (i) i Definition 4.0.1, der følger derfra at når \bar{D} er kompakt så er $\bar{D}/G = \mathbb{E}^n/G$ også kompakt.

Studiet omkring diskrete og kokompakte grupper bestående af isometrier af \mathbb{E}^n blev motiveret af første part af *Hilbert's attende problem*. Svaret til problemet blev givet af den tyske matematiker L. Bieberbach. I første part af *Hilbert's attende problem* spurgte Hilbert om, der eksisterede kun endelig mange ikke-isomorfe krystallografiske grupper, med endelig fundamental område, i det n -dimensionselle euklidiske rum \mathbb{E}^n . Hvilket Bieberbach i 1910 beviste var sandt for enhver dimension. Vi vil nu se på nogle af de resultater Bieberbach kom frem med.

4.1 Bieberbachs resultater

I dette afsnit vil der bliver præsenteret begrebet affine krystallografiske grupper og postuleret Bieberbachs første og anden sætning omkring klassificering af krystallografiske grupper, hvilket spiller en vigtig rolle i Kapitel 5. Vi starter ud med Bieberbachs første sætning.

4.1.1 Sætning (Bieberbachs første sætning):

En undergruppe G af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ er en krystallografisk gruppe hvis og kun hvis G indeholder n lineært uafhængige translationer.

For bevis henvises til (Szczepanski 2012, Kapitel 2, s. 11).

Bieberbachs karakterisering af en krystallografisk gruppe, i forbindelse med hans første sætning, er ikke tilstrækkelig til at finde og klassificere krystallografiske grupper. Det vil derfor være at foretrække, at have en fuldstændig algebraisk karakterisering af klassen bestående af krystallografiske grupper, uafhængige af deres indlejring i $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$. Denne retning påbegyndes ved først at vise, at G kan indlejres i en eksakt følge

$$\Gamma \rightarrow G \rightarrow G_0,$$

hvor Γ betegner den frie abelske gruppe, der er frembragt af translationerne givet ved Bieberbachs første sætning. Vi ønsker at forklare ovenstående eksakte følge, men først skal vi lave nogle notations ændringer.

I Kapitel 1 betegnede vi en affin afbildning i \mathbb{E}^n ved $\mathbf{a} \mapsto A\mathbf{x} + \mathbf{b}$, i følgende ændres notationen af denne. Lad σ være en affin afbildning af \mathbb{E}^n på formen $\sigma = (a, \phi)$, hvor a beskriver en translation t_a langs en vektor $a \in \mathbb{E}^n$, og $\phi \in \text{Gl}_n(\mathbb{E})$ er en lineær invertibel afbildning af \mathbb{E} . Afbildningen $\phi \in \text{Gl}_n(\mathbb{E})$ er entydigt bestemt ud fra σ og kaldes for linearisering af σ . Vi har at de affine afbildninger af \mathbb{E}^n danner en gruppe $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$. Ud fra dette kan der formaliseres en eksakt følge

$$0 \rightarrow \mathbb{E}^n \rightarrow \text{Aff}(\mathbb{E}^n) \rightarrow \text{Gl}_n(\mathbb{E}) \rightarrow 0.$$

Vi vender nu opmærksomheden hen på en arbitrær gruppe G bestående af affine afbildninger af \mathbb{E}^n . Translationsområdet af G , danner en undergruppe $\Gamma(G) = \{a \in \mathbb{E}^n \mid t_a \in G\}$ af \mathbb{E}^n . Billedet af G udtrykt af lineariseringen $\text{Aff}(\mathbb{E}^n) \rightarrow \text{Gl}_n(\mathbb{R})$ defineres som punktgruppen G_0 af G . Dette sættes på formen af en eksakt følge

$$0 \rightarrow \Gamma(G) \rightarrow G \rightarrow G_0 \rightarrow 0.$$

Herfra kan defineres hvornår en sådan gruppe anses at være krystallografisk.

4.1.2 Definition:

En undergruppe G af $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$ kaldes krystallografisk hvis punktgruppen G_0 er endelig og translationsområdet $\Gamma(G)$ er et gitter i \mathbb{E}^n .

Betragt en krystallografisk undergruppe G af $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$ og bemærk at enhver konjugeret gruppe $\phi G \phi^{-1} \in \text{Aff}(\mathbb{E}^n)$, er igen en krystallografisk gruppe. Ydermere kan observeres at en undergruppe G af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ er en krystallografisk undergruppe af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$, hvis og kun hvis G er en krystallografisk undergruppe af $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$. Dette følger fra følgende lemma

4.1.3 Lemma:

Enhver krystallografisk undergruppe af $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$ er konjugerede med en krystallografisk undergruppe af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$.

For bevis af ovenstående lemma henvises til (Iversen 1995, Kapitel 1.6, s. 18).

Vi har nu defineret en krystallografisk gruppe, og som nævnt i starten af kapitlet kan krystallografiske grupper anses at være ækvivalente, under bestemte betingelser. I 1910 anså Bieberbach to grupper at være ens hvis de var abstrakte isomorfe som grupper. Et år efter foreslog Frobenius en mere restriktiv betingelse. Frobenius anså to krystallografiske grupper at være ækvivalente når de, som undergrupper af $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$, var konjugerede med et element fra den affine gruppe $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$. De var således affine ækvivalente. Kort herefter offentliggjorde Bieberbach sin anden grundlæggende artikel omkring ækvivalens af krystallografiske grupper, hvor han beviste at begge metoder førte til den samme ækvivalens relation;

4.1.4 Sætning (Bieberbachs anden sætning):

To krystallografiske grupper G og H er konjugerede i $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$ hvis og kun hvis G og H er isomorfe som abstrakte grupper.

For bevis af Bieberbachs anden sætning henvises til (Iversen 1995, Kapitel 1.6, s. 18).

Bieberbachs anden sætningen er et vigtigt redskab i nærværende projekt. Denne gør at vi kan betragte to krystallografiske grupper for at være ækvivalente, hvis de er konjugerede i $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$. Denne detalje spiller en stor rolle for hvorledes vi begiver os ud i at finde en metode til at finde krystallografiske grupper, og ser hvornår to krystallografiske grupper anses at være isomorf.

Vi har nu defineret en krystallografisk gruppe og fået præsenteret aritmetiske krystalklasser, som spiller en stor rolle for at klassificere krystallografiske punkter.

Gruppe kohomologi

KAPITEL 5

Givet en krystallografisk gruppe G , har vi en abelsk normal undergruppe Γ bestående af translationer, en kvotient gruppe $G/V \cong G_0$ og en virkning af punktgruppen G_0 på gitteret Γ . For at bestemme en krystallografisk gruppe G er det ikke nok med kun kendskab til punktgruppen G_0 og gitteret Γ . Derfor kræves, for at forstå den krystallografiske gruppe G , information om hvorledes G er konstrueret ud fra Γ og G_0 . I dette afsnit vil vi se, givet Γ og G_0 , at en abelsk gruppe beskriver de mulige grupper, der kan konstrueres ud fra disse to givne grupper. Denne kaldes for kohomologi gruppen $H^1(G_0, V/\Gamma)$, hvor V er translations gruppen. I dette kapitel beskrives opbygningen af kohomologi gruppen ud fra en undergruppe og en kvotient gruppe. Kapitlet er baseret på (Hiller 1986), (Strebel 2004) samt (Edvardsson 2014).

Formålet med kapitlet er at finde frem til hvornår to krystallografiske grupper anses at være ens, som nævnt i Kapitel 4 affin ækvivalens. For at nå dette formål arbejder vi os igennem tre trin. Første trin er at se, at ved brug af en kocykel konstruere vi en krystallografisk gruppe, med de rette elementer. Her ser vi at givet en punktgruppe G_0 og en virkning på gitteret Γ af G_0 vil en afbildning $c : G_0 \rightarrow V/\Gamma$, konstruerer en krystallografisk gruppe, hvis og kun hvis c opfylder kocykel betingelserne. I andet trin ser vi at to kohomologi kocykler tilhørende samme kohomologi klasse førere til translationsækvivalente krystallografiske grupper. I sidste trin vil en virkning af en passende undergruppe af $\text{Gl}_n(\mathbb{E})$ på kohomologi gruppen førere til affint ækvivalente krystallografiske grupper. I sammenhæng med dette kommer her nogle definitioner, som klarlægger nogle begreber der benyttes.

5.0.1 Definition (Affin ækvivalens):

To krystallografiske grupper, $G, G' \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$, er affint ækvivalente, $G \cong G'$, hvis der eksisterer en afbildning $\phi \in \text{Aff}(\mathbb{E}^n)$, så der gælder $G' = \phi G \phi^{-1}$.

5.0.2 Definition (Translationsækvivalens):

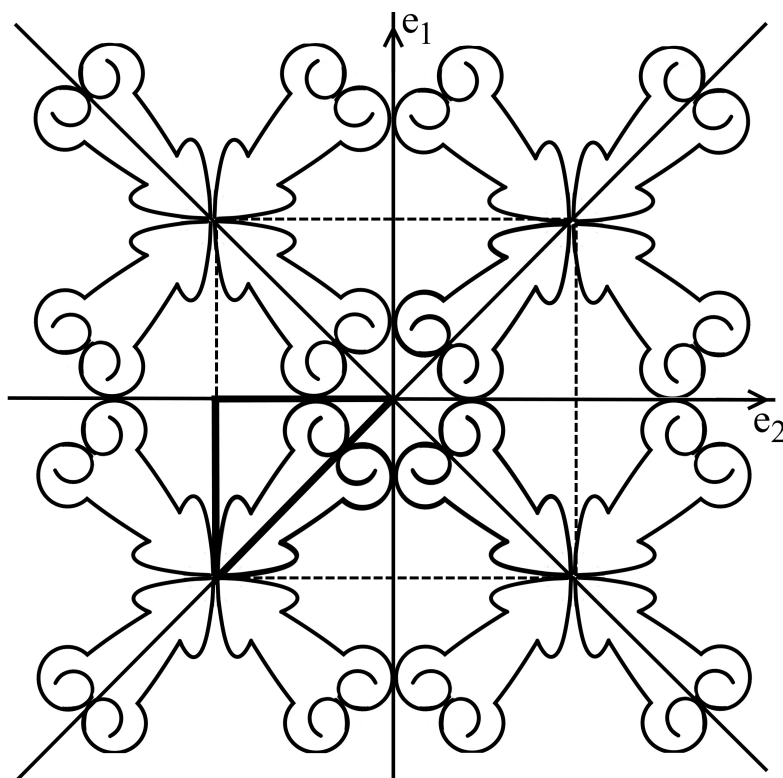
To krystallografiske grupper, $G, G' \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$, med $G_0 = G'_0$ og $\Gamma(G) = \Gamma(G')$ er translationsækvivalente, $G \parallel G'$, hvis der eksisterer en translation $t_a \in V$ således $G' = t_a G t_a^{-1}$.

Forinden for at finde kohomologi gruppen $H^1(G_0, V/\Gamma)$, må vi identificere en gruppe bestående af 1-kocykler og en gruppe bestående af 1-korande. Vi starter med at se på

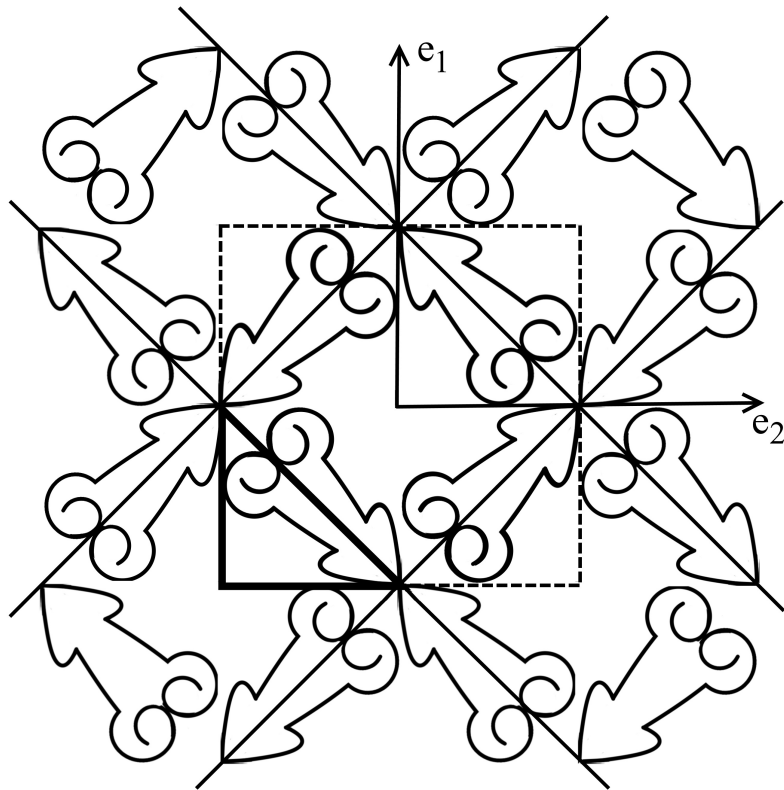
konceptet af gruppeudvidelse. En krystallografisk gruppe konstrueres ud fra en abelsk normal undergruppe Γ af translationer, og G/Γ , som er en endelig gruppe, isomorf til punktgruppen G_0 . Hvis G er en krystallografisk gruppe, passer G ind i en kort eksakt følge

$$1 \rightarrow \Gamma \rightarrow G \xrightarrow{p} G_0 \rightarrow 1, \quad (5.1)$$

hvor Γ er abelsk, G_0 endelig, og G_0 virker på Γ . Ud fra Bieberbachs første sætning gælder at enhver krystallografisk gruppe G konstrueres af n lineæret uafhængige translationer, som frembringer en fri abelsk translations gruppe Γ . Lad G_0 være en krystallografisk punktgruppe som afbilder Γ ind i sig selv. Her vil de ordnede par (G_0, Γ) bestemme en aritmetisk krystalklasse, som blev præsenteret i Afsnit 3.1. Herfra spørger vi efter de mulige krystallografiske grupper indeholdt i den aritmetiske krystalklasse (G_0, Γ) . Selv om en mulighed er at betragte G som værende det semidirekte produkt, så er der ingen a priori grund til at antage, at G i sig selv er det semidirekte produkt af G_0 , der virker på Γ , da der eksisterer mange krystallografiske grupper, som ikke er det semidirekte produkt. Hovedformålet i forbindelse med klassificeringen af en krystallografisk gruppe, er netop at se hvor meget grupperne adskiller sig fra det semidirekte produkt, ved brug af kohomologi gruppen. Vi skal se at følgende eksempel i to-dimension, som er en håndgribelig geometrisk eksempel, er et eksempel på dette fænomen.



Figur 15. G .

Figur 16. G' .

5.0.3 Eksempel:

Betragt Figur 15 og Figur 16¹. Her ses symmetri grupperne G og G' , som indeholder translationer i retningerne af e_1 og e_2 , hvilket er enhedsvektorer. De fremhævede linjer indikere refleksionerne, der er i symmetri gruppen. Som fundamental område er de ekstra fremhævede trekanter nær centrum valgt for symmetri gruppen. Fundamentalområdet for gitteret, der frembringes af translationerne i retningerne e_1 og e_2 , er den centrerede stiplede firkant. Ydermere eksisterer der en rotation på $i \cdot 90$ grader rundt om centrum i symmetri gruppen, for $i = \{1, 2, 3\}$. Ved begge tilfælde er punktgruppen G_0 lig D_4 , dvs. symmetri gruppen af en firkant af ordre 8. Dog bemærkes at disse to fliser ikke er ens. Ser man på de fremhævede linjer i figurerne, som repræsenterer refleksions linjerne, ses at gruppen G har et centrum med 90 graders rotationer, hvilket ligger på skæringen af to refleksions linjer, mens G' mangler en sådan centrum. Eksemplet bliver betragtet igen i Eksempel 5.0.11 ved brug af kohomologi gruppen, hvor vi vil vise at G og G' er henholdsvis $p4m$, som er det semidirekte produkt af D_4 og V , og $p4g$, som indeholder glidespejlinger. ◀

Antag at $G \subset V \rtimes O(n) = \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ og afbildningen $\rho : G \rightarrow G_0$, med $(a, \phi) \mapsto \phi$, er en projektion ind på den anden faktor. Antag at $\tau : G_0 \rightarrow G$ er et snit til afbildningen $\rho : G \rightarrow G_0$, dvs. en afbildning hvor vi har kompositionen $\rho \circ \tau : G_0 \rightarrow G_0$. Dette betyder at for ethvert element $\phi \in G_0$ gælder $\rho(\tau(\phi)) = \phi$. Ved denne definition gælder, at τ generelt ikke er en homomorfi. Vi har således at $\tau(\phi) = (\sigma(\phi), \phi)$ for en afbildning $\sigma : G_0 \rightarrow V$.

¹Illustrationerne er inspireret af (Hiller 1986).

Det er muligt at vælge $\sigma(\phi)$ til at være ethvert element i Γ . Dog eksisterer nogle elementer $\sigma(\phi)$, som ikke kan vælges tilhørende Γ . Dette kan for eksempel være en glidespejling, her kommer et eksempel for at tydeliggøre begrundelsen.

5.0.4 Eksempel:

Betragt punktgruppen $G_0 = C_4$ i \mathbb{R}^3 . Her gælder at elementerne i punktgruppen er $\{1, \delta, \delta^2, \delta^3\}$, hvor δ er en rotation omkring en akse $\mathbf{t} \in \Gamma$. Vi får at elementerne i $G = \{(k + \frac{i}{4})\mathbf{t}, \delta^i\}$, hvor $k \in \mathbb{Z}$ og $i = 1, \dots, 4$. Betragt afbildningen $\tau : G_0 \rightarrow G$, her får vi $\tau(1) = (\sigma(1), 1) = (\Gamma, 1)$, da $\sigma(1)$, angiver en vilkårlig translation tilhørende gitret Γ . Yderligere kan angives at $\tau(\delta) = (\sigma(\delta), \delta) = (\frac{1}{4}\mathbf{t} + \Gamma, \delta)$, $\tau(\delta^2) = (\sigma(\delta^2), \delta^2) = (\frac{2}{4}\mathbf{t} + \Gamma, \delta^2)$ og sidst $\tau(\delta^3) = (\sigma(\delta^3), \delta^3) = (\frac{3}{4}\mathbf{t} + \Gamma, \delta^3)$, hvilket giver de nævnte elementer af G . Vi ser at $(k + \frac{i}{4})\mathbf{t} + \Gamma$ ikke er elementer i gitret Γ , da elementerne får en tilføjelse $(k + \frac{i}{4})\mathbf{t}$.

Bemærk det logiske valg af $\frac{1}{4}\mathbf{t}$, dette skyldes da vil arbejder med C_4 . Et mod argument her vil være, at hvis vi vælger $\frac{1}{3}\mathbf{t}$ vil $\tau(\delta^4)$ ikke angive $\tau(1)$. Da C_4 har orden 4, gælder at $\delta^4 = 1$, vi får $\tau(\delta^4) = ((1 + \frac{1}{3})\mathbf{t} + \Gamma, \delta^4) \neq (\frac{4}{4}\mathbf{t} + \Gamma, \delta^4) = (\Gamma, 1) = \tau(1)$. ◀

Hvis τ vælges til at være en gruppe homomorfi, så er G det semidirekte produkt af G_0 , som virker på Γ . Dette stammer fra udtrykket for en kort eksakt følge i Kapitel 1 hvor vi har $G = \Gamma \rtimes G_0$, hvor i dette tilfælde, snittet er givet ved en homomorfi.

Bemærk at et snit som σ ikke er entydig, hvilket kan ses i Eksempel 5.0.4. Vi har at hver ϕ tillader $\sigma(\phi)$ at være en ud af mange elementer i Γ . Vi kan dog nemt afhjælpe denne situation ved at sammensætte σ med den naturlige projektion $\pi : V \rightarrow V/\Gamma$, således vi får en afbildning $c = \pi \circ \sigma : G_0 \rightarrow V/\Gamma$.

5.0.5 Proposition:

Afbildning $c : G_0 \rightarrow V/\Gamma$ er veldefineret.

Bevis:

Lad σ og σ' være to snit tilhørende den eksakte følge angivet i Ligning (5.1) og lad $\pi : V \rightarrow V/\Gamma$ være den naturlige projektion. Lad $c = \pi \circ \sigma$ og $c' = \pi \circ \sigma'$. Antag at $c(\phi) \neq c'(\phi)$, for $\phi \in G_0$. Vi betragter nu følgende produkt

$$\begin{aligned} (\sigma'(\phi), \phi)(\sigma(\phi), \phi)^{-1} &= (\sigma'(\phi), \phi)(-\phi^{-1}(\sigma(\phi)), \phi^{-1}) \\ &= (\sigma'(\phi) - \phi\phi^{-1}\sigma(\phi), \phi\phi^{-1}) \\ &= (\sigma'(\phi) - \sigma(\phi), I). \end{aligned}$$

For at dette skal give mening må $\sigma'(\phi) - \sigma(\phi)$ tilhøre Γ . Ved at sammensætte denne med den naturlige projektion, har vi $\pi(\sigma'(\phi) - \sigma(\phi)) = 0$, da π er en homomorfi, kan vi udtrykke $\pi(\sigma'(\phi)) = \pi(\sigma(\phi))$. Dette viser at vores antagelse at $c(\phi) \neq c'(\phi)$ er en modstrid. Vi har derfor at $c(\phi) = c'(\phi)$, hvorfor c er veldefineret. ■

Ud fra overstående bevis ses at differensen af to forskellige snit ligger i Γ , og sammensætningen med c er derfor uafhængig af valget af σ . Vi får således følgende resultat:

5.0.6 Proposition:

Lad $c : G_0 \rightarrow V/\Gamma$ være en afbildning, konstrueret ved hjælp af et snit fra G_0 ind i G , som tilfredsstiller følgende betingelser

- (i) $c(I) = 0$, hvor 0 betegner nul sideklassen af Γ i V/Γ ,
- (ii) $c(xy) = c(x) + x \cdot c(y)$.

Bevis:

Vi bemærker først at G_0 virker på V/Γ da Γ er invariant under G_0 . Denne virkning benytter vi os af på højre side af ligning (ii). Ligning (i) beror på at identitets-elementet, $(0, I)$ eksistere i G . Til sidst for at vise (ii) observere vi ved brug af det semidirekte produkt, at

$$(c(x), x)(c(y), y) = (c(x) + x \cdot c(y), xy) = (c(xy), xy). \quad \blacksquare$$

Betingelserne (i) og (ii) kaldes for kocykel betingelserne, og en afbildning c som opfylder betingelserne kaldes for en 1-kocykel. Mængden af alle 1-kocykler defineres som $Z^1(G_0, V/\Gamma)$, og er en abelsk gruppe, vi får således at ved to 1-kocykler $c_1 : G_0 \rightarrow V \rightarrow V/\Gamma$ og $c_2 : G_0 \rightarrow V \rightarrow V/\Gamma$ kan skrives $(c_1 + c_2)(\phi) = c_1(\phi) + c_2(\phi)$, for $\phi \in G_0$, hvilken også er en 1-kocykel.

Metoden for at finde en 1-kocykel c ud fra G fungerer også omvendt. Derfor kan gruppen G nemt konstrueres ud fra en 1-kocykel c ved at definere

$$G = \{(t, \phi) \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n) \mid \phi \in G_0, \quad t \in c(\phi)\},$$

hvor $c(\phi)$ er alle repræsentanterne for $\sigma(\phi)$, vi bemærker derfor at $c(\phi)$ er en sideklasse af Γ i V . Vi kan sige, at for hvert $\phi \in G_0$ eksistere en vektor $\sigma(\phi) \in V$, således parrene $(\sigma(\phi), \phi) \in G$. En vektor $\sigma(\phi)$ er ikke entydig ud fra ϕ , derfor gælder, at hver anden vektor har formen $\sigma(\phi) + a$ for $a \in \Gamma$. Vi kan herfra igen skrive G på formen

$$G = \bigcup_{\phi \in G_0} (\Gamma + \sigma(\phi), \phi).$$

At G er en gruppe, som kan konstrueres fra 1-kocykel udledes af følgende sætning:

5.0.7 Sætning:

Lad Γ være et translationsområde og G_0 være en punktgruppe, der virker på Γ således $\phi(a) \in \Gamma$, for $\phi \in G_0$ og $a \in \Gamma$. Ydermere lad $\sigma : G_0 \rightarrow V$ således $\sigma(\phi) \in V$ og opfylder kocykel betingelsen $\sigma(\phi\psi) = \sigma(\phi) + \phi\sigma(\psi)$ for $\phi, \psi \in G_0$ og $V = \{(a, I) \mid a \in \Gamma\}$. Herfra er G en gruppe bestående af isometrier, med punktgruppe G_0 og translationsområde Γ .

Bevis:

Da vi ved at gruppen $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$, bestående af isometrier er en gruppen, vil bevise følge at bevise G er en undergruppe.

- (i) Stabilitet: Lad $\phi, \psi \in G_0 \setminus \{0\}$. Så følger

$$\begin{aligned} ((\Gamma + \sigma(\phi), \phi)(\Gamma + \sigma(\psi), \psi) &= (\Gamma + \sigma(\phi) + \phi\sigma(\psi), \phi\psi) \\ &= (\Gamma + \sigma(\phi\psi), \phi\psi). \end{aligned}$$

Dette gælder grundet $\Gamma + \Gamma = \Gamma$, $\phi\Gamma \in \Gamma$ og kocykel betingelsen.

- (ii) Vi tjekker nu at identitets-elementet $(0, I) \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ eksisterer i undergruppen G :
 Formålet vil være at vise, at $\sigma(I) \in \Gamma$. Denne betingelse følger fra kocykel betingelsen, hvor $\sigma(I) = 0$, da 0 er identitets-elementet i Γ , må der gælde at $\sigma(I) \in \Gamma$.
- (ii) Vi tjekker at invers elementet $(-\phi^{-1}(a), \phi^{-1}) \in \text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ eksistere i undergruppen G med $a = \Gamma + \sigma(\phi)$:

$$\begin{aligned} (\Gamma + \sigma(\phi), \phi)(-\phi^{-1}(\Gamma + \sigma(\phi)), \phi^{-1}) &= (\Gamma + \sigma(\phi) + \phi(-\phi^{-1}(\Gamma + \sigma(\phi))), \phi\phi^{-1}) \\ &= (\Gamma - \phi\phi^{-1}(\Gamma) + \sigma(\phi) - \phi\phi^{-1}(\sigma(\phi)), I) \\ &= (\Gamma - \Gamma + \sigma(\phi) - \sigma(\phi), I) = (0, I). \quad \blacksquare \end{aligned}$$

I forbindelse med at konstruere G klassificerer vi 1-kocykler c i stedet for at klassificere krystalgrupper, hvilket er en mere håndgribelig opgave.

Vi begiver os nu ud i andet trin, nævnt i starten af kapitlet, og gør brug af Bieberbachs anden sætning. Her gælder at isomorfier af krystalgrupperne findes ved at konjugere krystalgrupperne i den affine gruppe $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$. Derfor, for at klassificere elementerne af $Z^1(G_0, V/\Gamma)$, er vi nødt til at undersøge hvad det sker med 1-kocykler under sådan en konjugation og bestemme hvilke 1-kocykler, som giver den samme krystallografiske gruppe. Bemærk at den affine gruppe på \mathbb{E}^n er givet ved $\text{Aff}(\mathbb{E}^n) = V \rtimes \text{Gl}_n(\mathbb{E})$, hvor ethvert element er en komposition bestående af en translation $(a, 1)$, for $a \in V$, og en lineær afbildning $(0, g)$, for $g \in \text{Gl}_n(\mathbb{E})$. Det er herfra nødvendigt at tjekke konjugation af en krystallografisk gruppe med hver af disse elementer. Hvorfor anden trin ser vi på translationsækvivalent, da vi her ser på konjugation med translationen. Antag $a \in \mathbb{E}^n$ og at 1-kocyklen c er fremkaldt af afbildningen $\sigma : G_0 \rightarrow \Gamma$. Så kan vi udregne ved at konjugere med (a, I) , hvor I er identitets matricen:

$$\begin{aligned} (a, I)(\sigma(\phi), \phi)(a, I)^{-1} &= (a, I)(\sigma(\phi), \phi)(-a, I) \\ &= (a + \sigma(\phi), \phi)(-a, I) \\ &= (a + \sigma(\phi) - \phi(a), \phi). \end{aligned}$$

Vi ser, at ved konjugation med (a, I) ændres 1-kocyklen c ved tilføjelse af en anden 1-kocykel på formen $b_a(\phi) = \alpha - \phi(\alpha)$, hvor α betegner $a \pmod{\Gamma}$. For at bevise at b_a er en 1-kocykel tjekkes betingelserne fra Proposition 5.0.6.

$$(i) \quad b_a(I) = \alpha - I(\alpha) = \alpha - \alpha = 0,$$

$$\begin{aligned} (ii) \quad b_a(\phi\phi') &= \alpha - \phi\phi'(\alpha) \\ &= \alpha - \phi(\alpha) + \phi(\alpha) - \phi\phi'(\alpha) \\ &= b_a(\phi) + \phi(\alpha - \phi'(\alpha)) \\ &= b_a(\phi) + \phi(b_a(\phi')). \end{aligned}$$

Betingelserne er således påfyldt. 1-kocykler, der udtrykkes på overstående form kaldes for 1-korande og danner en undergruppe af $Z^1(G_0, V/\Gamma)$ benævnt som $B^1(G_0, V/\Gamma)$. Vi har nu at krystallografiske grupper, svarende til afbildninger c samt en vilkårlig 1-korand, er

isomorf, og således translationsækvivalente. Betragt vi kvotientgruppen, bestående af en gruppe af kocykler og en gruppe af korande, kan vi undgå disse translationsækvivalente krystallografiske grupper. Denne kvotientgruppe betegnes ofte som $H^1(G_0, V/\Gamma)$. Vi har derfor $H^1(G_0, V/\Gamma) = Z^1(G_0, V/\Gamma)/B^1(G_0, V/\Gamma)$, hvilket er den 1-dimensionelle kohomologi gruppe af G_0 med koefficienter i V/Γ .

Vi vender os nu mod at se på hvorledes en normal undergruppe virker på gruppen $H^1(G_0, V/\Gamma)$. Til dette definerer vi en delmængde af $Gl_n(\Gamma)$.

5.0.8 Definition:

Lad G_0 være en undergruppe af symmetrigruppen af Γ , $S(\Gamma)$. Så definerer vi undergruppen

$$N(G_0, \Gamma) = \{g \in Gl_n(\mathbb{E}) \mid gG_0g^{-1} = G_0\}$$

af $Gl_n(\Gamma)$.

Undergruppen defineres til at være en normalisator af G_0 . Betragt en lineær operator g tilhørende $Gl_n(V)$, gruppen bestående af alle lineære operator g af V , og et element $(\sigma(\phi), \phi) \in G$. Ved konjugering med $(0, g)$ får vi

$$\begin{aligned} (0, g)(\sigma(\phi), \phi)(0, g)^{-1} &= (0, g)(\sigma(\phi), \phi)(0, g^{-1}) \\ &= (g(\sigma(\phi)), g\phi)(0, g^{-1}) \\ &= (g(\sigma(\phi)), g\phi g^{-1}). \end{aligned}$$

Overstående udregning viser, at den konjugerede gruppe $G' = gGg^{-1}$ er tilhørende mængden bestående af alle krystallografiske grupper, hvis der gælder at g afbilder gitteret Γ ind i sig selv og $G'_0 = gG_0g^{-1} = G_0$. Herfra vil gælde at g tilhører normalisatoren $N(G_0, \Gamma)$ af G_0 i $Aut(\Gamma)$ ud fra Definition 5.0.8. $g \in N(G_0, \Gamma)$ virker på en 1-kocykel $c \in Z^1(G_0, V/\Gamma)$ ved

$$(g \cdot c)(\phi) = gc(g^{-1}\phi g). \quad (5.2)$$

Vi kan herfra udtrykke

$$(0, g)(\sigma(\phi), \phi)(0, g)^{-1} = gc(g^{-1}\phi g)$$

Denne form angiver en virkning af den normale undergruppe $N(G_0, \Gamma)$ på kohomologi gruppen $H^1(G_0, V/\Gamma)$. Vi betragter derfor ved konjugation af en krystallografisk gruppe med $(0, g)$ en ændring af 1-kocyklen til gs . Ud fra dette får vi følgende hovedresultat:

5.0.9 Sætning (Hovedsætning af matematisk krystallografi):

Der eksisterer en bijektion mellem de krystallografiske grupper i den aritmetiske krystalklasse (G_0, Γ) og banen af normalisatoren $N(G_0, \Gamma)$ ved virkning på kohomologi gruppen $H^1(G_0, V/\Gamma)$.

Overstående sætning giver en håndgribelig metode til hvorledes det er muligt at klassificere krystalgrupper. Vi vender os derfor mod to eksempler, først en i to-dimension og derefter en i tre-dimension. Eksemplet i to-dimension arbejder videre med Eksempel 5.0.3, hvor vi

viser at disse de to forskellige fliser kan adskilles ud fra brugen af kohomologi gruppen. Forinden starter vi med et lemma, som vil gøre det nemmere at udregne kocykler af elementer opløftet i potens.

5.0.10 Lemma:

Hvis $c : G_0 \rightarrow V/\Gamma$ er en 1-kocykel og $\phi \in G_0$, så gælder

$$c(\phi^k) = (I + \phi + \phi^2 \cdots + \phi^{k-1})c(\phi).$$

Bevis:

Ud fra Proposition 5.0.6 kan vi udtrykke $c(I\phi) = c(I) + Ic(\phi)$, hvorfor der gælder $c(\phi) = Ic(\phi)$. Ydermere på samme måde kan skrives

$$\begin{aligned} c(\phi\phi) &= c(\phi) + \phi c(\phi) \\ &= Ic(\phi) + \phi c(\phi) \\ &= (I + \phi)c(\phi). \end{aligned}$$

Vi har således, for $k = 1, 2$, at antagelsen $c(\phi^k) = (I + \phi + \phi^2 \cdots + \phi^{k-1})c(\phi)$ er sandt. Vi antager, det er sandt for $k = n - 1$, og viser det gælder for $k = n$. Vi har

$$\begin{aligned} c(\phi^n) &= c(\phi^{-1} \cdot \phi) = c(\phi^{n-1}) + \phi^{n-1}c(\phi) \\ &= (I + \phi + \cdots + \phi^{n-2})c(\phi) + \phi^{n-1}c(\phi) \\ &= (I + \phi + \cdots + \phi^{n-1})c(\phi). \end{aligned} \quad \blacksquare$$

5.0.11 Eksempel:

Vi konkludere at punktgruppen for Figur 15 og Figur 16 var diedergruppen D_4 . Vi ved at D_4 er frembragt af elementerne R og S underlagt relationerne

$$S^4 = I, \quad R^2 = I, \quad RSR = S^{-1}.$$

Den sidste relation betragtes ofte som $(SR)^2 = I$, da vi kan udtrykke $SRSR = SS^{-1}$. Gruppen D_4 skabes fra en unik aritmetisk krystalklasse $(D_4, \mathbb{Z}_{e_1} \otimes \mathbb{Z}_{e_2})$, hvor $\{e_1, e_2\}$ er en basis bestående af enhedsvektorer og virkningen $D_4 \rightarrow \text{Aut}(\mathbb{Z}_{e_1} \otimes \mathbb{Z}_{e_2}) = \text{Gl}_2(\mathbb{Z})$ gives ved

$$S \mapsto \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad R \mapsto \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Geometrisk har vi at S er en rotation med en vinkel på $\pi/2$, samt R er en refleksion ved y -aksen. Vi vil nu gøre brug af Hovedsætningen af matematisk krystallografi på den aritmetiske krystalklasse (G_0, Γ) for at finde de to-dimensionelle krystalgrupper med punktgruppen D_4 .

For at udtrykke kohomologi gruppen, skal vi starte med at identificere 1-kocyklerne $c : D_4 \rightarrow \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$. Vi ved at c bestemmes ud fra dens værdier på S og R . Vi antager

$$c(S) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad c(R) = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

hvor vi udtrykker elementerne i kvotient gruppen $\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$ som søjle vektorer. Ved brug af første betingelse af kocykel betingelserne, får vi at c sender enhver relation ind i \mathbb{Z}^2 . Derfor ved brug af Lemma 5.0.10 kan beregnes,

$$\begin{aligned} c(R^2) &= (I + R)s(R) \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2b_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Vi har derfor at $(0, 2b_2)^T \in \mathbb{Z}^2$ hvilket udleder til at $2b_2 \in \mathbb{Z}$, derfor må der gælde at b_2 både kan være et heltal n og $n + 1/2$, hvorfra det gælder $(n + 1/2)2$ er lig et heltal. Herfra har vi at der gælder $b_2 \in (1/2)\mathbb{Z}$. På lignende måde kan vi beregne

$$\begin{aligned} c((SR)^2) &= (I + SR)c(SR) \\ &= \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) c(RS) \\ &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} (c(S) + Sc(R)) \\ &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \left(\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \right) \\ &= \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 - b_2 \\ a_2 + b_1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

tilhørende \mathbb{Z}^2 , hvilket er ækvivalent med $a_1 - b_2 \equiv a_2 + b_1 \pmod{\mathbb{Z}}$, da vi har at matricen er lineær afhængig og $a_1 - b_2 - a_2 - b_1 \equiv 0 \pmod{\mathbb{Z}}$. Betingelsen $c(S^4) \in \mathbb{Z}^2$ giver ingen begrænsninger, da vi har at $I + S + S^2 + S^3 = 0$ hvorfor $c(S^4) = \mathbf{0}$.

Vi vil nu bestemme korandende. Hvis

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2,$$

så gælder at 1-koranden b_v er givet ved $b_v(g) = v - gv = (I - g)v$. Vi beregner b_v , ved frembringerne S og R .

$$\begin{aligned} b_v(S) &= (I - S)\mathbf{v} = \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 + v_2 \\ v_2 - v_1 \end{pmatrix}, \\ b_v(R) &= (I - R)\mathbf{v} = \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2v_1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Vi har nu fundet kocykler og korande, men ønsker nu at begrænse vores muligheder, som nævnt tidligere sker dette ved kvotientgruppen $Z^1(D_4, \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2)/B^1(D_4, \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2)$. For at beregne $H^1(D_4, \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2)$, begynder vi nu med at simplificere vores givne 1-kocykel c ved at tilføje passende b_v 'er. Hvis vi lader

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a_1 - a_2) \\ \frac{1}{2}(a_1 + a_2) \end{pmatrix},$$

så er det tydeligt at $c(S) = b_v(S)$ hvorfor vi har at $(c - b_v)(S) = 0$ og

$$(c - b_v)(R) = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2v_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 - a_1 + a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

Vi har fra tidligere, at kocykel betingelserne giver os at $b_2 \in (1/2)\mathbb{Z}$ og $b_1 + b_2 \equiv a_1 - a_2 \pmod{\mathbb{Z}}$. Da der gælder at $c - b_v$ også er en kocykel hvor $a_1 = a_2 = 0$, får vi

$$b_1 + b_2 \equiv 0 \pmod{\mathbb{Z}}.$$

Da vi arbejder i $\pmod{\mathbb{Z}}$ får vi kun to mulige situationer:

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{eller} \quad \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Vi får således at $H^1(D_4, \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2) \cong \mathbb{Z}_2$, den cykliske gruppe med to elementer. Vi har således at $H^1(D_4, \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2)$ må have orden 2. Vi kan konkludere at vi ved første kohomologi klasse kan skrive $c_1(S^i) = \mathbf{0}$ samt $c_1(S^i R) = \mathbf{0}$, hvorfor vi kan skrive

$$D_4^0 = (\mathbb{Z}^2, I) \cup (\mathbb{Z}^2, S) \cup (\mathbb{Z}^2, S^2) \cup (\mathbb{Z}^2, S^3) \\ \cup (\mathbb{Z}^2, R) \cup (\mathbb{Z}^2, SR) \cup (\mathbb{Z}^2, S^2 R) \cup (\mathbb{Z}^2, S^3 R),$$

hvilket er det semidirekte produkt $\mathbb{Z}^2 \rtimes D_4$, benævnt som $p4m$. Yderligere har vi ved den anden kohomologi klasse $c_2(S^i) = 0$, $c_2(R) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T = \mathbf{v}$ samt $c_2(S^i R) = S^i \mathbf{v}$, hvorfor vi kan skrive

$$D_4^1 = (\mathbb{Z}^2, I) \cup (\mathbb{Z}^2, S) \cup (\mathbb{Z}^2, S^2) \cup (\mathbb{Z}^2, S^3) \\ \cup (\mathbb{Z}^2 + \mathbf{v}, R) \cup (\mathbb{Z}^2 + \mathbf{v}, SR) \cup (\mathbb{Z}^2 + \mathbf{v}, S^2 R) \cup (\mathbb{Z}^2 + \mathbf{v}, S^3 R).$$

Vi får her denne gruppe indeholder glidespejlinger, hvorfor den er $p4g$. De to krystallografiske grupper $G = D_4^0$ og $G' = D_4^1$ i Eksempel 5.0.3 svarer således til grupperne $p4m$ og $p4g$. ◀

Vi begiver os nu ud i et tre-dimensional eksempel.

5.0.12 Eksempel:

Vi betragter den aritmetiske krystalklasse $P4$ med parrene (G_0, \mathbb{Z}^3) . Lad $\rho : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ være en rotation givet ved $(x_1, x_2, x_3)^T \mapsto (-x_2, x_1, x_3)^T$ og punktgruppen G_0 være frembragt af ρ , $G_0 = \langle \rho \rangle$. G_0 er altså en cyklisk gruppe med orden 4, idet $\rho^4 = I$. I forhold til basen $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ svarer ρ til en matrix på formen

$$\rho = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

For at bestemme kohomologigruppen $H^1(G_0, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)$ skal vi identificere alle 1-kocykler $c : G_0 \rightarrow \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$. Vi ved at c kan bestemmes ud fra dens værdier på ρ . Vi antager derfor

$$c(\rho) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix},$$

hvor vi vil udtrykke elementerne i kvotientgruppen $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ som søjle vektorer. Vi bruger første betingelse for en kocykel, hvor der gælder $c(1) = 0$. Ved brug af Lemma 5.0.10 beregner vi,

$$\begin{aligned} 0 = c(1) &= (I + \rho + \rho^2 + \rho^3) = c(\rho^4) \\ &= \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 4a_3 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

og derfor $(0, 0, 4a_3) \in \mathbb{Z}^3$. Vi får at $4a_3 \in \mathbb{Z}$, hvorfor vi kan konkludere at $a_3 \in (1/4)\mathbb{Z}$. $c(s)$ er derfor på formen

$$c(\rho) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \frac{1}{4}\mathbb{Z} \end{pmatrix}.$$

Vi ønsker nu at finde korandene. Lad

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3,$$

så er 1-koranden b_v givet ved $b_v(g) = \mathbf{v} - g\mathbf{v} = (I - g)\mathbf{v}$. Vi beregner derfor nu b_v på frembringeren ρ .

$$\begin{aligned} b_v(\rho) = (I - \rho)\mathbf{v} &= \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} v_1 + v_2 \\ v_2 - v_1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Vi betragter nu lignings systemet

$$\begin{aligned} v_1 + v_2 &= a_1 \\ v_2 - v_1 &= a_2. \end{aligned}$$

Ved beregning får vi løsningen

$$\begin{aligned} v_1 &= \frac{1}{2}(a_1 - a_2) \\ v_2 &= \frac{1}{2}(a_1 + a_2). \end{aligned}$$

Med disse værdier for $\mathbf{v} = (v_1, v_2, 0)^T$ bliver $b_v(\rho) = (a_1, a_2, 0)^T$. Ud fra dette kan vi argumentere for at $H^1(C_4, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)$ er isomorf med $\frac{1}{4}\mathbb{Z}/\mathbb{Z}$. Vi har at gruppen bestående af 1-kocykler

$$Z^1(C_4, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3) \cong \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \Gamma \mid \begin{array}{l} x \in \mathbb{R} \\ y \in \mathbb{R} \\ z \in \frac{1}{4}\mathbb{Z} \end{array} \right\}.$$

Og gruppen bestående af 1-korande

$$B^1(C_4, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3) \cong \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix} + \Gamma \mid \begin{array}{l} x \in \mathbb{R} \\ y \in \mathbb{R} \end{array} \right\}.$$

Betragter vi homomorfien $H^1(C_4, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3) = Z^1(C_4, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)/B^1(C_4, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3) \rightarrow \frac{1}{4}\mathbb{Z}/\mathbb{Z}$ kan vi betragte en isomorfi hvis homomorfien er bijektiv. Vi ønsker således at vise dette. Vi har at alle kocyklerne er på formen $\mathbf{v}(\rho) = (x, y, \frac{k}{4})^T + \Gamma$, for en vektor \mathbf{v} , og $k \in \mathbb{Z}$. To kocykler er ækvivalente hvis $k \equiv k' \pmod{4}$. For at vise homomorfien er injektiv og surjektiv er det nok at betragte kocyklen c med $c(\rho) = (0, 0, \frac{k}{4}) \mapsto \bar{k}$, hvor \bar{k} repræsenterer restklassen af $k \pmod{4}$. Homomorfien er injektiv, da $\bar{k} = 0$ hvis og kun hvis $\frac{k}{4} + \mathbb{Z} = \mathbb{Z}$. Ydermere har vi at homomorfien er surjektiv, da \bar{k} kommer fra kocyklen $(0, 0, \frac{k}{4})^T + \Gamma$. $H^1(G_0, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3) \cong \frac{1}{4}\mathbb{Z}/\mathbb{Z}$. Vi får således at $H^1(G_0, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)$ har orden 4 og er frembragt af kocyklen $c : G_0 \rightarrow \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$, hvor vi kan skrive

$$c(\rho^k) = k \cdot \frac{1}{4}\mathbf{u} + \mathbb{Z}^3,$$

med $\mathbf{u} = (0, 0, 1)^T$ og $k = 0, 1, 2, 3$.

Vi ser nu på affin ækvivalens af krystallografiske grupper. Kohomologiklasserne c_0, c_1, c_2, c_3 svarer til gruppeelementerne $(\mathbf{0}, \rho)$, $(\frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho)$, $(\frac{1}{2}\mathbf{u}, \rho)$ og $(\frac{3}{4}\mathbf{u}, \rho)$. Disse repræsenterer følgende fire grupper

$$C_4^l = (\mathbb{Z}^3, 1) \cup (\mathbb{Z}^3 + l \cdot \frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho) \cup (\mathbb{Z}^3 + l \cdot \frac{1}{2}\mathbf{u}, \rho^2) \cup (\mathbb{Z}^3 + l \cdot \frac{3}{4}\mathbf{u}, \rho^3).$$

for $l = 0, 1, 2, 3$. Lad $l = 0$ så har vi den krystallografiske gruppe

$$C_4^0 = (\mathbb{Z}^3, 1) \cup (\mathbb{Z}^3, \rho) \cup (\mathbb{Z}^3, \rho^2) \cup (\mathbb{Z}^3, \rho^3),$$

hvilket er det semidirekte produkt $\mathbb{Z}^3 \rtimes G_0$, denne gruppe indeholder elementer af endelig orden. Lad nu $l = 1$ så får vi den krystallografiske gruppe

$$C_4^1 = (\mathbb{Z}^3, 1) \cup (\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho) \cup (\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{2}\mathbf{u}, \rho^2) \cup (\mathbb{Z}^3 + \frac{3}{4}\mathbf{u}, \rho^3).$$

Denne gruppe er frembragt af translationer med translationsvektorer tilhørende \mathbb{Z}^3 og skruningen $x \mapsto \rho(x) + (0, 0, \frac{1}{4})^T$ omkring x_3 -aksen. Vi har derfor at isometrierne er enten translationer eller skruringer, hvorfor alle elementerne har uendelig orden, undtagen identitets elementet I . For $l = 2$ har vi den krystallografiske gruppe

$$C_4^2 = (\mathbb{Z}^3, 1) \cup (\mathbb{Z}^3 + 2\frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho) \cup (\mathbb{Z}^3 + \mathbf{u}, \rho^2) \cup (\mathbb{Z}^3 + 6\frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho^3).$$

Her eksisterer ingen rotationer af orden 4, men dog en rotation af orden 2 nemlig $((0, 0, -1)^t + 2 \cdot 2 \cdot \frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho^2) = ((0, 0, 0)^T, \rho^2)$. Til sidst for $l = 3$ har vi den krystallografiske gruppe

$$C_4^3 = (\mathbb{Z}^3, 1) \cup (\mathbb{Z}^3 + 3\frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho) \cup (\mathbb{Z}^3 + 6\frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho^2) \cup (\mathbb{Z}^3 + 9\frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho^3),$$

hvilket kun indeholde translationer og skruringer ligesom C_4^1 .

De nævnte betingelser for grupperne C_4^0 , C_4^1 og C_4^2 garanterer at de ikke er isomorfe, for eksempel, har vi at ingen elementer med endelig orden kan overføres over i elementer med uendelig orden, samt da C_4^2 har rent translation ved ρ^2 , hvor C_4^1 har skruringer kan disse ikke være isomorfe heller. Vi har derfor $C_4^0 \not\cong C_4^1$, $C_4^0 \not\cong C_4^2$ og $C_4^1 \not\cong C_4^2$. Da de ikke er isomorfe kan de heller ikke være affint ækvivalente. Vi ønsker derfor at se nærmere på C_4^1 og C_4^3 . Vi betragter inversafbildningen $-\mathbb{I}$, som afbilder elementer over i deres invers, og ser at beregningen $(0, -\mathbb{I})(v, \rho^k)(0, -\mathbb{I}) = (-v, \rho^k)$ viser at ved konjugation med $(0, -\mathbb{I})$ overføres elementet $(\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho)$ over i $(\mathbb{Z}^3 - \frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho) = (\mathbb{Z}^3 + \frac{3}{4}\mathbf{u}, \rho)$, $(\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{2}\mathbf{u}, \rho^2)$ over i $(\mathbb{Z}^3 - \frac{1}{2}\mathbf{u}, \rho^2) = (\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{2}\mathbf{u}, \rho^2)$, samt $(\mathbb{Z}^3 + \frac{3}{4}\mathbf{u}, \rho^3)$ over i $(\mathbb{Z}^3 - \frac{3}{4}\mathbf{u}, \rho^3) = (\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho^3)$. Dette medfører at ved konjugation med $(0, -\mathbb{I})$ overføres C_4^1 over i C_4^3 , hvorfor de må være affine ækvivalente.

Vi kan derfor konkludere, at der eksisterer tre affine typer af krystallografiske grupper i den aritmetiske krystalklasse $P4$. Vi refererer til dem som $P4$ for C_4^0 , $P4_1$ for C_4^1 og $P4_2$ for C_4^2 . Det skal senere vise sig, at der faktisk eksisterer fire affine typer af krystallografiske grupper i den aritmetiske krystalklasse $P4$. For at vise dette, mangler vi indformation omkring begrebet egentligt affin ækvivalens. ◀

I Kapitel 1 blev nævnt at der eksisterer 219 rumlige krystallografiske grupper. Yderligere gælder at hvis vi arbejder med orienterings bevarende affine afbildninger, så bliver der tale om 230 rumlige krystallografiske grupper. For at gøre dette mulig lader vi gruppen $\text{Aff}^+(\mathbb{E}^n)$, bestå af orienterings bevarende affine afbildninger. Vi kan udtrykke en finere klassificering af krystallografiske grupper.

5.0.13 Sætning:

Givet en endelig undergruppe $G_0 \subset \text{Gl}_n(\mathbb{E})$ og et gitter Γ . Så eksisterer der en bijektion mellem konjugationsklasser af krystallografiske grupper, under gruppen $\text{Aff}^+(\mathbb{E}^n)$ i den aritmetiske krystal klasse (G_0, Γ) , og banen af normalisatoren $N^+(G_0, \Gamma) = \{g \in \text{Sl}_n(\mathbb{E}) \mid gG_0g^{-1} = G_0\}$ ved deres virkning på kohomologi gruppen $H^1(G_0, V/\Gamma)$.

Overstående sætning ligner meget Hovedsætningen af matematisk krystallografi, her ses dog, at den normale undergruppe konstrueres ud fra elementer fra $\text{Sl}_n(\mathbb{E})$, som definerer den specielle lineære gruppe, bestående af $n \times n$ matricer med determinant 1, hvilket er en undergruppe af $\text{Gl}_n(\mathbb{E})$. Ydermere er den nævnte virkning lignende Ligning (5.2), hvor blot $g \in N^+(G_0, \Gamma)$. Ved brug af ovenstående sætning vil vi vise at, de krystallografiske grupper C_4^1 og C_4^3 fra Eksempel 5.0.12, som er affin ækvivalent, ikke er egentligt affine ækvivalent. Vi forsætter derfor på Eksempel 5.0.12

5.0.14 Eksempel:

Grupperne C_4^1 og C_4^3 vil være egentligt affine ækvivalente, hvis en automorfi er frembragt på $H^1(G_0, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)$ ved et element af $N^+ = N^+(G_0, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)$. Desværre gælder at $-\mathbb{I}$ ikke tilhører N^+ , hvorfor vi skal finde et andet element tilhørende N^+ . N^+ indeholder dog diedergruppen D_4 frembragt af rotationen ρ og rotationen ρ' , af orden 2, givet ved

$$\rho' : x \mapsto (x_1, -x_2, -x_3)^T.$$

Vi vil argumentere for dette til sidst i eksemplet. Umiddelbart, kan ρ' betragtes som en rotation omkring x -aksen med orden 2 beskrevet ved matricen

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Vi kan nu bestemme virkningen af ρ på frembringeren $(\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho)$ ved

$$(0, \rho')(\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{4}\mathbf{u}, \rho)(0, \rho') = (\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{4}\rho'\mathbf{u}, \rho'\rho\rho') = (\mathbb{Z}^3 + \frac{1}{4}\rho'\mathbf{u}, \rho^{-1}) = (\mathbb{Z}^3 - \frac{1}{4}\rho\mathbf{u}, \rho^3),$$

for $\mathbf{u} = (0, 0, 1)$, udtrykt i Eksempel 5.0.12. Vi har $(\mathbb{Z}^3 - \frac{1}{4}\rho\mathbf{u}, \rho^3) \in C_4^1$.

Vi kan således konkludere, at nok er C_4^1 og C_4^3 affine ækvivalente, men de er ikke egentligt affine ækvivalent, hvorfor der eksisterer fire affine typer af krystallografiske grupper i den aritmetiske krystalklasse $P4$. Vi refererer den sidste krystallografiske gruppe som $P4_3$ for C_4^3 .

Som det sidste mangler vi at argumentere for at $N^+ = D_4$. Som det første, skal der gælde at den har determinant 1, da ud fra Korollar 5.0.13 gælder at elementerne tilhører $Sl_n(\mathbb{E})$. Ydermere gælder, at det element vi tager fra normalisatoren skal bevare de samme akser som punktgruppen. Vi har at punktgruppen C_4 bevare xy -planen, som den eneste ligeledes z -aksen som den eneste. Vi har således at normalisatoren N^+ også skal bevare dette. Derfor gælder

$$\phi^{-1}\rho\phi \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ 0 \end{pmatrix},$$

hvilket også kan udtrykkes

$$\rho\phi \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix} = \phi \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Betragter vi $\phi(x, y, 0)^T$ som et plan, vil planen være invariant under ρ . Vi skal nu se hvilke elementer i $Gl_n(\mathbb{Z})$, som bevare disse.

$$\phi \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{13}x \\ a_{23}x \\ a_{33}x \end{pmatrix}.$$

Hvis z -aksen skal bevares medfører dette at $a_{13} = a_{23} = 0$. Ydermere da xy -planen bevares må $a_{31} = a_{32} = 0$. Da vi har matricen yderligere skal tilhører $Sl_n(\mathbb{E})$ må determinanten være lig 1. Derfor

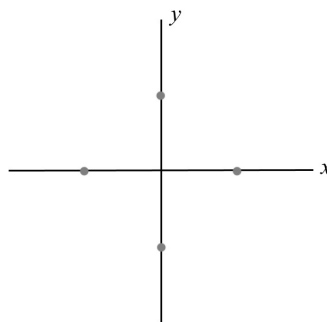
$$1 = \det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{bmatrix},$$

vil medfører at $a_{33} = \pm 1$. Vi ser nu på undermatricen

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \in Gl_n(\mathbb{Z}).$$

Undermatricen behandler nu xy -planet og vi ser på hvorledes C_4 bevarer punkter på x - og y -aksen. Betragt Figur 17, så ser vi fire punkter fordelt på x - og y -akserne. Normalisatorer N^+ må også have dette. Mere præcis udtryk, så skal vi se hvilke $O(2)$ matricer, som ligger i normalisatoren for C_4 . Her får vi at undermatricen kan udtrykkes som

$$\begin{bmatrix} \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 \end{bmatrix}, \quad \text{eller} \quad \begin{bmatrix} 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 \end{bmatrix}.$$



Figur 17. Punkter placeret på x - og y -akserne

Ved at sammensætte tilbage til 3×3 matricen kan vi udtrykke

$$\begin{bmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \det \end{bmatrix}, \quad \text{eller} \quad \begin{bmatrix} 0 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \det \end{bmatrix}.$$

det betyder at $a_{33} = \mp 1$ bestemmes ud fra determinanten af den tidligere benyttede undermatrix. Vi skaber således otte matricer, som består i at være matricerne som generer D_4 . Vi har således argumenteret for hvorfor $N^+ = D_4$. ◀

Vi har nu betragtet en metode til at finde de 230 krystallografiske grupper. Dette sker ved brug af den 1-dimensionelle kohomologi gruppe $H^1(G_0, V/\Gamma)$ af G_0 med koefficienter i V/Γ . Kort sagt bruger vi gruppen til at finde de krystallografiske grupper, der er indeholdt i en aritmetisk krystalklasse (G_0, Γ) . En aritmetisk krystalklasse består af de krystallografiske

gruppe, der har samme gitter Γ samt samme krystallografiske punktgruppe G_0 . Ser vi på Eksempel 5.0.11, Eksempel 5.0.12 samt Eksempel 5.0.14, får vi to krystallografiske grupper tilhørende den to-dimensionelle aritmetiske krystalklasse $(D_4, \mathbb{Z}_{e_1} \oplus \mathbb{Z}_{e_2})$ og fire krystallografiske grupper tilhørende den tre-dimensionelle aritmetiske krystalklasse $P4$ med parrede (C_4, \mathbb{Z}^3) . At komme fra den aritmetiske krystalklasse til de henholdsvis to og fire grupper, begiver sig i at finde kohomologi gruppen. Dette sker ved først at finde en gruppe $Z^1(G_0, \Gamma)$, bestående af 1-kocykler, og herefter en gruppe $B^1(G_0, \Gamma)$, bestående af 1-korande. Dette stammer fra de to første trin nævnt i slutningen af kapitlet.

Givet en punktgruppe G_0 og en virkning på gitteret Γ af G_0 vil en afbildning $c : G_0 \rightarrow V/\Gamma$, konstruerer en krystallografisk gruppe, hvis og kun hvis c opfylder kocykel betingelserne angivet i Proposition 5.0.6. Bagefter ser vi at, to kohomologi kocykler tilhørende samme kohomologi klasse fører til translationsækvivalente krystallografiske grupper.

Efterfølgende benytter vi os af hovedsætningen af matematisk krystallografi, hvor vi ser på virkningen af en passende undergruppe af $GL_n(\mathbb{E})$ på kohomologi gruppen, således vi finde de affine ækvivalente krystallografiske grupper. Finder vi to eller flere grupper som er affine ækvivalenter benytter vi os af Sætning 5.0.13, hvor vi betragter orienterings bevarende affine afbildninger, og virkningen af en passende undergruppe af $SL_n(\mathbb{E})$ på kohomologi gruppen. Vi finder her de egentligt affine ækvivalente krystallografiske grupper.

Formålet med specialet er udledt fra problemformuleringen

Hvad er en Krystallografisk gruppe og hvordan kan man klassificere dem, samt hvor mange forskellige krystallografiske grupper findes der?

I Kapitel 4 definerede vi en krystallografisk gruppe G som værende en diskret undergruppe af $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$, hvis kvotientrum \mathbb{E}^n/G er kompakt. For at forstå hvilke elementer G indeholder, har vi arbejdet med gruppen $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ af det n -dimensionelle euklidiske rum i Kapitel 1. $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ består af isometrier, hvorfor vi herunder introducerede translationer og ortogonale lineære afbildninger og definerede disse som isometrier. Ydermere har vi bevist, at en isometri kan skrives entydigt som en sammensætning af en ortogonal lineær afbildning og en translation. Vi så derfor, at gruppen $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$ kan beskrives som det semidirekte produkt af gruppen V , bestående af translationer, og $O(n)$, bestående af ortogonale lineære afbildninger udtrykt som matricer. Vi har fundet ud af at givet en krystallografisk gruppe G , har vi en abelsk normal undergruppe Γ , bestående af translationer, en kvotient gruppe G/V , der er isomorf til den krystallografiske punktgruppe G_0 og en virkning G_0 på gitteret Γ .

I Kapitel 2 har vi leget med punktgrupper G_0 og introduceret endelige rotationsgrupper. Vi har i denne sammenhæng fundet, at en punktgruppe må være isomorf med C_n , D_n , T , O eller I . Ydermere har vi begivet os ud i endelige undergrupper af $O(3)$, her så vi at $O(3)$ kan skrives som det direkte produkt $SO(3) \times \{\pm\mathbb{I}\}$. Vi finder her to yderligere typer undergrupper en punktgruppe må være isomorf til. Den første er hvor $-\mathbb{I} \in G_0$ og en punktgruppe må være isomorf med det direkte produkt $G_0^+ \times \{\pm\mathbb{I}\}$, hvor G_0^+ er en af rotationsgrupperne. Den anden er hvor $-\mathbb{I} \notin G_0$ og hvor G_0 ikke er en rotationsgruppe. Ved brug af den krystallografiske restriktion får vi at en krystallografisk punktgruppe må være isomorf med de 32 geometriske krystalklasser.

I Kapitel 3 blev en abelsk normal undergruppe Γ , bestående af translationer, benævnt som et gitter, introduceret. Ydermere definerede vi en symmetrigruppe af gitteret, som består af ortogonale afbildninger som afbilder gitteret ind i sig selv. I forbindelse med dette så vi at G_0 kan antages at være en undergruppe af symmetrigruppen, hvis der eksisterer et gitter af rang 3. Endvidere så vi på et eksempel hvor vi betragtede det kubiske gittersystem og fandt tre geometrisk ækvivalente gitre, det primitive kubiske gitter, det indrecenterede kubiske gitter og det sidecenterede kubiske gitter. Ved at betragte andre gittersystemer er det muligt at finde fjorten forskellige gittertyper, som

inddels i de syv forskellige gittersystemer. Vi skrev at hver gittertype har en krystallografisk punktgrupper, der indeholder alle isometrierne, som afbilder gitteret over i sig selv. De syv krystallografiske punktgrupper kaldes for en bravais punktgruppe. I forbindelse med at se på virkningen af en punktgruppe på et gitter begik vi os ind i at introducere aritmetiske krystalklasser. En aritmetiske krystalklasser består af de krystallografiske grupper, som har samme punktgruppe samt samme gitter. Vi sagde her at der eksisterer 73 aritmetiske krystalklasser.

I Kapitel 4 definerede vi ikke kun en krystallografisk gruppe, men så også på nogle af Bieberbachs resultater, der have en vigtig betydning i forbindelse med krystallografiske grupper. Som det første beviste Bieberbach, at der eksisterer endeligt mange ikke-isomorfe krystallografiske grupper, med endelig fundamentalområde, i det n -dimensionelle euklidiske rum i 1910. Ydermere havde vi Bieberbachs anden sætning, som henledte og til at se at to krystallografiske grupper anses som ens hvis de er konjugerede i $\text{Aff}(\mathbb{E}^n)$. Hvilket spillede en stor rolle i Kapitel 5.

I Kapitel 5 så vi hvorledes vi klassificerer krystallografiske grupper. Vi så at en krystallografisk gruppe passer ind i en ekskat følge.

$$1 \rightarrow \Gamma \rightarrow G \xrightarrow{p} G_0 \rightarrow 1,$$

Vi så herefter på hvorledes G blev konstrueret ud fra G_0 og Γ . Vi betragtede derfor en aritmetisk krystalklasse med ordnede par (G_0, Γ) , og så hvilke krystallografiske grupper, der var indeholdt i den specifikke klasse. Vi så på et eksempel hvor vi betragtede den aritmetiske krystalklasse $P4$, fandt en kohomologi gruppe $H^1(G_0, \Gamma)$, som er en kvotiengruppe der består af en gruppe med 1-kocykler og en gruppe med 1-korande. Vi fandt her fire krystallografiske grupper som var translationsækvivalente. Ved at se på en virkning af en passende undergruppe af $\text{Gl}_n(\mathbb{E})$ fandt vi at to af grupperne var affine ækvivalente, men ved at se på en virkning af en passende undergruppe af $\text{Sl}_n(\mathbb{E})$ fandt vi at de to grupper ikke var egentligt affine ækvivalente. Hvorfor den aritmetiske krystalklasse $P4$ indeholder fire affine typer af krystallografiske grupper. Ved at betragte hver aritmetiske krystalklasse på denne måde finder vi 230 forskellige krystallografiske grupper.

For at finde de 230 krystallografiske grupper, er der, i denne metode, forskellige trin. Først finder vi de 32 geometriske krystalklasser, herefter sammenkobler vi disse med et gitter og finder de 73 aritmetiske krystalklasser. Derfra ser vi på translationsækvivalens, hvilket er en meget fin inddeling af de krystallografiske grupper. Bagefter ser vi på affine ækvivalens og ser nogle grupper kan anses at være ens, hvorfor der er mulighed for at de krystallografiske grupper falder i antal. Herefter ser vi på egentligt affine ækvivalens hvorfor nogle af de affine ækvivalens krystallografiske grupper igen kan anses som værende forskellige. Dette skyldes vi ser på orienterings bevarende affine afbildninger.

En naturlig udvidelse af projektet kunne være at behandle de emner, som er blev frasorteret i afgrænsningen. Her henvises til at uddybe krystalfamilier, som bestemmes af gitre og punktgrupper. Disse dannes ved at kombinere krystalsystemer, som har krystallografiske grupper tildelt til et fælles gittersystem. Der eksisterer i alt seks krystalfamilier: trikliniske, monoklinisk, ortorombisk, tetragonalt, hexagonal og kubisk. Ydermere kan krystalsystemer også uddybes. I et krystalsystem er et sæt af punktgrupper, samt deres tilsvarende krystallografiske grupper tildelt et gittersystem. Derfor ud af de 32 geometriske krystalklasser er de fleste kun tildelt et gittersystem, hvorfor disse krystalsystemer og gittersystemer har samme navn. Dog er fem geometriske krystalklasse tildelt to gittersystemer, rhomboedrisk og hexagonal, da begge viser 3-fold rotationssymmetrier. Disse grupper er tildelt det trigonale krystalsystem. Der eksistere derfor syv krystalsystemer: trikliniske, monoklinisk, ortorombisk, tetragonalt, trigonal, hexagonal og kubisk. Herfra kan igen uddybes et gittersystem, som er en klasse af gitre med samme sæt af gitter punktgrupper, hvilket er undergrupper af aritmetiske krystalklasser.

Ydermere kan vi gå mere i dybde med Kapitel 3. Vi kan beskrive alle fjorten forskellige gittertyper, da specialet kun har benævnt de tre forskellige kubiske gitre og de to tretragonale gittertyper. Yderligere kan indrages teori og metode til hvorledes vi finder de syv nævnte Bravais punktgrupper, samt eksempler på dette. Endvidere komme mere ind på virkningen af en punktgruppe på et gitter, da specialet kun behandler dette overfladisk.

I Kapitel 1 nævnes at M. Escher benyttede sig af teknikker, i sine kunstværker, der vækkede opsigt for krystallografer. Dog rakte Eschers teknikker sig kun til et to-dimensionalt materialitet. Et skridt viderer kunne være, at betragte kunsten inden for det tre-dimensionelle aspekt i forbindelse med krystallografi. Ofte betragter vi kunst og videnskab som hinandens antipol, men de senere år har kunsten inddraget mere fra den naturvidenskabelige verden. Dette skyldes mange ting, men et middel, der åbner muligheder er teknologiens bidrag. Teknologien har skubbet kunstens grænser til noget større, for eksempel adoptionen af videoinstallationer, der udtrykker noget sublimt. På ARoS finder vi videoinstallationen af Bill Viola *Five Angels for the Millennium* (2011). Her bliver man omgivet og opslugt af et ulmende, dunkelt hav. Referencen til denne videoinstallation er, at kunne bruge idéen om at blive opslugt, til at blive opslugt af en sublim verden indenfor matematikkens krystallografi. At opleve krystallografien på et

mikroskopisk niveau. Skabe sammenspil mellem kunsten og den matematiske aspekt af krystallografi.

Bibliografi

- Abhyankar, Shreeram S. og Chris Christensen (2002). „Semidirect Products: $x \mapsto ax + b$ as a First Example“. I: *Mathematics Magazine* 74.4, s. 284–289.
- Armstrong, M.A. (1988). *Groups and Symmetry*. Springer-Verlag. ISBN: 0-387-96675-7.
- Djao (2013). *Semidirect product og groups*. <http://bit.ly/217fGTv>. Sidst besøgt 27-12-2017.
- Edvardsson, Elisabet (2014). *Space groups and crystallography*. <http://bit.ly/2AYzoqq>. Sidst besøgt 19-12-2017.
- Engel, Peter (1986). *Geometric Crystallography. An Axiomatic Introduction to Crystallography*. D. Reidel Publishing Company. ISBN: 90-277-2339-7.
- Greuel, Gert-Martin (2015). „Crystals and Matematics“. I: *FIZ Karlsruhe*, s. 37–43.
- Hiller, Howard (1986). „Crystallography and Cohomology of groups“. I: *The American Mathematical Monthly* 93.10, s. 765–779.
- Iversen, Birger (1995). *Lectures on Chrystallographic Groups*. 1. udg. Aarhus Universitetl.
- Jackson, Martin (2006). *Linear algebra and the geometry of quadratic equations*. <http://bit.ly/2kkYLwd>. Sidst besøgt 19-12-2017.
- Klemm, Michael (1982). *Symmetrien von Ornamenten und Kristallen*. Springer. ISBN: 3-540-11644-3.
- Koswara, Ivan, Patrick Corn og Samir Khan (0000). *Burnside’s Lemma*. <http://bit.ly/2D4bQ1x>. Sidst besøgt 19-12-2017.
- Lauritzen, Niels (2003). *Concrete Abstract Algebra. From Numbers to Gröbner Bases*. 1. udg. Cambridge University Press. ISBN: 978-0-521-53410-9.
- Morandi, Patric J. (2007). *Symmetry Group: The Calssification of Wallpaper*. <http://bit.ly/2zyZxPD>. Sidst besøgt.
- Necefoglu, Hacali (2003). „Crystallographic patterns in nature and Turkish art“. I: *Crystal Engineering* 6, s. 153–166.
- Rowland, Todd (2017). *Exact Sequence*. <http://bit.ly/2D3FEib>. Sidst besøgt.
- Strebel, Ralph (2003). „Burckhardtsche Bestimmung der Raumgruppen I“. I: *Elemente der Mathematik* 58, s. 141–155.
- Strebel, Ralph (2004). „Burckhardtsche Bestimmung der Raumgruppen II“. I: *Elemente der Mathematik* 59, s. 1–18.
- Strebel, Ralph (2010). *Vorlesung über kristallographische Gruppen*. <http://bit.ly/2BAceHU>. Sidst besøgt 19-12-2017.

- Szczepanski, Andrzej (2012). *Geometry of Crystallographic Groups*. World Scientific. ISBN: 978-981-4412-25-4.
- Vinberg, E.B. (2016). *Crystallographic group*. <http://bit.ly/2zxPJR8>. Sidst besøgt 26-12-2017.
- Virk, Rahbar (0000). *Orbit-Stabilizer Theorem*. <http://bit.ly/2AZ0Wud>. Sidst besøgt 19-12-2017.
- Visscher, Maud De (0000). *Classification of finite rotations groups*. <http://bit.ly/2kmj4K2>. Sidst besøgt 19-12-2017.
- Woodward, Patrick (0000). *Crystal Systems and Bravais Lattices*. <http://bit.ly/2B0GVFp>. Sidst besøgt 19-12-2017.

Indeks

- $-\mathbb{I}$: Inversafbildningen, 24
- $B^1(G_0, V/\Gamma)$: Gruppe bestående af 1-korander, 48
- C_n : Cyklisk Gruppe, 15
- D_{2n} : Diedergruppe, 15
- G_0 : Krystallografisk punktgruppe, 10
- $H^1(G_0, T/\Gamma)$: Kohomologi Gruppe, 43
- $H^1(G_0, V/\Gamma)$: Kohomologi Gruppe, 49
- $N(G_0, \Gamma)$: Normalisator af G_0 , 49
- $N^+(G_0, \Gamma)$: Orienterings bevarende Normalisator af G_0 , 55
- O : Rotationssymmetrigruppe af en Reguler Oktaeder, 15
- $Orb_G(x_i)$: Mængden af poler på den i 'te bane, 18
- $S(\Gamma)$: Symmetrigruppe, 29
- T : Rotationssymmetrigruppe af en Reguler Tetraeder, 15
- V : Gruppe indeholdende Translationer, 3
- Y : Rotationssymmetrigruppe af en Reguler Ikosaeder, 15
- $Z^1(G_0, V/\Gamma)$: Gruppe bestående af 1-kocykler, 47
- $\text{Aff}(\mathbb{R}^n)$: Den Affine Gruppe, 1, 3, 4
- $\text{Aut}(-)$: Automorfier af gruppen $-$, 2
- Γ : Gitter, 29
- $\text{GL}_n(\mathbb{R})$: Generelle Lineære Gruppe, 2
- Im : Billedet af en afbildning, 8
- $\text{Isom}(\mathbb{E}^n)$: Isometri gruppen, 3, 6
- Ker : Gruppe kernen af en afbildning, 8
- $O(n)$: Ortogonal Gruppen, 5
- $\text{SO}(3)$: Specielle ortogonale gruppe, 13
- $\|\mathbf{v}\|$: Norm af en vektor \mathbf{v} , 3
- \cong : Affint Ækvivalens, 43
- \cong : Isomorf, 8
- $\langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle$: Indre Produkt, 3
- \mathbb{E}^n : n -dimensionelle Euklidiske rum, 3
- \mathbb{I} : Identitetsafbildningen, 24
- \parallel : Translationsækvivalens, 43
- \rtimes : Semidirekte Produkt, 2
- \sim : Ækvivalens Relation, 39
- $\hat{=}$: Geometrisk Ækvivalent, 27
- $d(\mathbf{v}, \mathbf{w})$: Metrik, 3
- t_a : Translation, 2