

Symmetrien i krystaller

Matematisk krystallografi
Speciale

7. juni 2018

• Anne-Marie Landbo •



Institut for Matematiske Fag

Skjernvej 4A • 9220 Aalborg Ø • <http://math.aau.dk>



AALBORG UNIVERSITY
STUDENT REPORT

Institut for Matematiske Fag

Matematik

Skjernvej 4A

9220 Aalborg Ø

<http://math.aau.dk>

Titel:

Symmetrien i krystaller

Tema:

Matematisk krystallografi

Projektperiode:

Forår 2018

Studerende:

Anne-Marie Landbo

Vejleder:

Martin Raussen

Oplagstal:

2

Sider:

39

Afleverings dato:

7. juni 2018

Synopsis:

Formålet med dette speciale er at klassificere krystallografiske grupper og bestemme dem. For at kunne gøre dette betragtes isometrier, det euklidiske vektorrum og symmetrier deri. For at kunne klassificere de krystallografiske grupper betragtes først punktgrupper. En punktgruppe består af symmetrier, såsom ortogonale afbildninger, der bevarer et gitter. Derfor betragter vi endelige undergrupper af den ortogonale gruppe i rummet, og finder at der er 32 krystallografiske undergrupper klassificeret op til konjugation, vi får altså 32 geometriske punktgrupper.

Hvis vi betragter et gitter, som er genereret, via translationer, af en enhedscelle udspændt af tre lineært uafhængige vektorer, så får vi at der eksisterer 14 forskellige gitter, dem kan vi opdele i 7 krystalsystemer. Punktgrupperne opdeles også efter hvilket krystalsystem de tilhører, og en punktgruppe virker kun på et gitter fra samme krystalsystem. Det giver 73 aritmetiske krystalklasser.

Afslutningsvis er metoden for at klassificere affine krystalklasser skitseret, der er i alt 219 affine krystalklasser eller 230 egentlig affine krystalklasser.

Abstract

This master's thesis aims to give a classification of crystallographic groups and a description of how to find them. In doing so, we examine isometries, the three-dimensional Euclidean space and its symmetries. Furthermore, we look into point systems and Dirichlet domains, which is needed to prove the first theorem of Bieberbach.

In Chapter 2, we look into point groups. A point group consists of symmetries, such as orthogonal maps, that fix a point in a lattice. Therefore, we determine the subgroups of the three-dimensional special orthogonal group which enables us to discover that there is 11 crystallographic subgroups. We then expand our search to the orthogonal group and establishes that in total it has 32 crystallographic subgroups classified up to conjugation in the orthogonal group, which means that we have found 32 geometric point groups.

In Chapter 3, we refine our classification by taking the lattice into account as well. A lattice is generated, by translations, from the three linear independent vectors that span the unit cell of a crystal. We divide the lattices into 7 crystal systems, and discover that there is 14 different lattices in total. The 32 geometric point groups are also categorised into a crystal system, and a pointgroup only acts on a lattice from the same crystal system. This gives us a total of 73 arithmetic crystal classes.

In Chapter 4, we refine our classification once again. Here we classify space groups. In order to do this, we use the second theorem of Bieberbach which simplifies the classification. Bieberbach's result tells us that we can classify the space groups up to isomorphism, which gives us 219 affine crystal classes, or 230 if we distinguish between mirror images.

The main focus of this master's thesis is the detection of the 32 point groups, where the steps are described thoroughly, and the classification of the 73 arithmetic crystal classes, which are described in an exemplary fashion. Lastly, the method to classify the affine crystal classes is only outlined.

Forord

Dette speciale er udarbejdet i forårssemesteret 2018 på Matematisk Institut på Aalborg Universitet af Anne-Marie Landbo i perioden 1. februar til den 7. juni 2018.

Jeg vil gerne takke min vejleder Martin Raussen for konstruktiv kritik og god vejledning undervejs i forløbet.

Læsevejledning

Teorien i dette speciale bygger på kurset Algebra 1 på Aalborg Universitet, og det anbefales at læseren har kendskab til gruppeteori og de specielle egenskaber ved gruppen $O(3, \mathbb{R})$.

Igennem specialet følger definitioner, sætninger, eksempler og lignende samme nummerering, hvor det første tal indikerer kapitlet og det næste afsnittet. Ligninger nummereres separat, hvor første tal indikerer kapitlet. Figurer og tabeller nummereres separat og med et enkelt tal. Definitioner, sætninger, propositioner og lignende skrives med kursiv for at tydeliggøre enden på disse. Beviser afsluttes med ■, og eksempler med ◀.

Indhold

Abstract	i
Forord	iii
Læsevejledning	iii
Indledning	vii
1 Grundlæggende teori	1
1.1 Isometrier	1
1.2 Euklidisk vektorrum	3
1.3 Symmetrier	5
1.4 Punktsystemer	5
1.5 Dirichletområder	6
1.6 Gitterbasis	11
2 Krystallografiske punktgrupper	13
2.1 Undergrupper af $SO(3, \mathbb{R})$	14
2.2 Undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$	19
2.3 Krystallografiske undergrupper	21
3 Aritmetiske krystalklasser	26
4 Affine krystalklasser	33
Konklusion	38
Bibliografi	39

Indledning

Krystaller er overalt, mange stoffer har krystalstruktur eller er krystaline, men hvad er krystalstruktur egentlig, hvor mange forskellige er der, og hvordan skelner man mellem dem?

Baggrunden for dette speciale bunder i interessen for kemi, indenfor kemi lægges der stor vægt på hvilket krystalsystem stoffet er i, og hvilket gitter et stof har, da dette kan have stor indflydelse på et stofs egenskaber. Krystalsystemer er opdelt efter hvilken struktur der er i krystallet, er det f.eks. kun muligt at bevare krystalgitteret via en rotation med orden 2, eller via en spejling, så er krystallet i det monokline krystalsystem. Der er bl.a. en speciel type glas under udvikling, bestående af et lag af Vanadiumoxid, som er transparent. Ved stuetemperatur har Vanadiumoxid monoklin struktur, men ved en bestemt overgangstemperatur, hvor Vanadiumoxid går fra at være metal til at være en halvleder, sker der det, at strukturen ændrer sig til at være det der hedder tetragonal, hvor gitteret kun kan bevares ved en rotation med orden 4. Dette gør at glasset får den egenskab at det kan reflektere infrarøde stråler, og på den måde undgå at temperaturen inde i et rum vil stige yderligere, men der vil stadig komme lys ind i rummet (Parkin m.fl. 2006).

Dette speciale vil undersøge krystaller ud fra deres symmetrier. En symmetri er en afbildning der bevarer afstande og orientering, med andre ord, den overfører et krystal i sig selv. Men først betragtes en mindre del af et krystal, nemlig enhedscellen. En enhedscelle er en 3-dimensionel kasse der vælges mindst mulig, således at hele krystallet består af translationer af enhedscellen, man kan betragte den som et krystals byggesten. Enhedscellen er udspændt af tre vektorer, og de vektorer man får frembragt via translationer af cellen, der frembringer krystallet, danner et gitter. De forskellige gitre kan deles op i krystalsystemer. Man opdeler dem efter forholdet mellem længderne på de tre udspændende vektorer, samt deres indbyrdes vinkler. En punktgruppe består af symmetrier der bevarer gitteret, man opdeler også punktgrupper i krystalsystemer, og for at en punktgruppe virker på et gitter skal de være i samme krystalsystem. Punktgrupper er endelige grupper der består af ortogonale afbildninger og skal bevare de geometriske egenskaber af krystallet og dermed gitret, derfor klassificerer vi dem op til konjugation med ortogonale afbildninger. Dvs. kan man komme fra én punktgruppe til en anden via konjugation med en ortogonal afbildning, så anses de for geometrisk ækvivalente. Efter punktgrupperne er klassificeret kan man nu kombinere dem med gitrene inden for det samme krystalsystem. Man anser en punktgruppe og et gitter som punktgruppen virker på, som et par. Hvis man kan finde en isomorfi der overfører et gitter over i et andet, samtidig

med at den via konjugation overfører den tilhørende punktgruppe over i det andet gitters tilhørende punktgruppe, så anses de to par for aritmetisk ækvivalente. Hvis man betragter både en punktgruppe, et gitter, samt hvordan punktgruppen virker på gitteret får man det man kan kalde en symmetrigruppe af et krystal, i dette speciale kaldet en rumgruppe.

Men hvordan klassificerer vi rumgrupper? Først betragtes det der kaldes affin ækvivalens, hvor to rumgrupper anses for affin ækvivalente hvis der eksisterer en affin afbildning der via konjugation fører den ene rumgruppe over i den anden. Heldigvis har Bieberbach bevist at to rumgrupper er affint ækvivalente hvis og kun hvis de er isomorfe (Bieberbach 1912).

I dette speciale vil der blive fokuseret på de første dele, nemlig klassifikation af punktgrupper, de forskellige gitre, og punktgruppers virkning på gitre. Den sidste del omkring klassificering af rumgrupper vil kun blive skitseret.

Grundlæggende teori

KAPITEL 1

I dette kapitel vil der blive gennemgået nogle grundlæggende ting som vil blive brugt senere. Dette kapitel er baseret på (Klemm 1982) og (Engel 1986).

1.1 Isometrier

I dette afsnit vil begrebet isometri blive indført, og isometriers egenskaber undersøgt.

Vi betragter det n -dimensionelle euklidiske rum i et kartesisk koordinatsystem. Punktet $(x_1, \dots, x_n)$ kan fortolkes som et element i et reelt vektorrum med positiv definit skalarprodukt $v \cdot w$. Vi har altså et Hilbertrum, og for to punkter $v = (x_1, \dots, x_n)$ og $w = (y_1, \dots, y_n)$ så definerer vi afstanden mellem dem således

$$d(v, w) = \|v - w\| = \sqrt{(v - w) \cdot (v - w)} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}. \quad (1.1)$$

1.1.1 Definition:

Lad V være et n -dimensionelt Euklidisk rum. En afbildning $f: V \mapsto V$ hvor

$$d(f(v), f(w)) = d(v, w) \text{ for alle } v, w \in V$$

kaldes en isometri i V .

Igennem dette speciale vil der blive brugt notationen (u, ϕ) hvor $u \in V$ og ϕ er en ortogonal afbildning. (u, ϕ) er så en sammensætning af disse to. Vi har altså at $(u, \phi)(x) = \phi \cdot x + u$, hvor $x \in V$.

1.1.2 Eksempel:

Nogle eksempler på isometrier er følgende:

- For alle $u \in V$ er translationen $(u, I) : V \mapsto V$, hvor I er en $n \times n$ identitetsmatrix, og hvor $(u, I)(v) = u + v$, $v \in V$, er en isometri. Den inverse afbildning af (u, I) er $(u, I)^{-1} = (-u, I)$, og $(0, I)$ er identiteten. Derudover har vi også at $(u, I)(u', I) = (u + u', I)$.
- Lad $(0, \phi)$ være en ortogonal afbildning, dvs. en bijektiv, lineær afbildning i V , hvor 0 er nul-vektoren, og hvor $(0, \phi)(v) \cdot (0, \phi)(w) = \phi(v) \cdot \phi(w) = v \cdot w$ for alle $v, w \in V$.

Så er $(0, \phi)$ en isometri. Den inverse afbildning af $(0, \phi)$ er $(0, \phi)^{-1} = (0, \phi^{-1})$.

c) Hvis en isometri f har en invers afbildning f^{-1} så er den inverse også en isometri.

d) Hvis f_1 og f_2 er isometrier, så er sammensætningen $f_1 f_2$ også en isometri. ◀

Vi får altså at isometrier i $\mathbb{R}^n$ danner en gruppe som indeholder translationer og ortogonale afbildninger. Isometrier har en række egenskaber, som beskrives i følgende sætning.

1.1.3 Sætning:

- a) Lad f være en isometri hvor $f(0) = 0$, så er f en ortogonal afbildning.
- b) Lad f være en isometri hvor $f(u) = u$ for et $u \in V$, så eksisterer der en ortogonal afbildning $(0, \phi)$ hvor $f = (u, I)(0, \phi)(u, I)^{-1}$.
- c) Lad f være en isometri. Så eksisterer der en translation (u, I) og en ortogonal afbildning $(0, \phi)$ og $f = (u, \phi)$, hvor u og ϕ er entydige.
- d) For alle $u, u' \in V$ og alle lineære afbildninger $\phi, \phi': V \rightarrow V$ gælder der at

$$(u, \phi)(u', \phi') = (u + \phi(u'), \phi\phi'),$$

og hvis $\det(\phi) \neq 0$ har vi ydermere at $(u, \phi)^{-1} = (-\phi^{-1}(u), \phi^{-1})$.

Bevis:

Først bevises a):

Vi har at f er en isometri, og det gælder derfor at $\|f(v) - f(w)\| = \|v - w\|$ og $\|f(v)\| = \|v\|$ for alle $v, w \in V$. Hvis vi anvender (1.1) har vi at

$$\begin{aligned} v \cdot w &= \frac{1}{2} \left(-\|v - w\|^2 + \|v\|^2 + \|w\|^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(-\|f(v) - f(w)\|^2 + \|f(v)\|^2 + \|f(w)\|^2 \right) \\ &= f(v) \cdot f(w). \end{aligned}$$

Lad $e_1, \dots, e_n$ være en ortonormal basis for V . Så har vi at $f(e_i) \cdot f(e_j) = e_i \cdot e_j = 0$ eller 1, og $f(e_1), \dots, f(e_n)$ er også en ortonormal basis for V . For alle $v = \sum_1^n x_i e_i \in V$ har vi yderligere at $x_i = v \cdot e_i = f(v) \cdot f(e_i)$ og $f(v) = \sum_1^n x_i (f(e_i))$. Lad $w = \sum_1^n y_i e_i$, så får vi at

$$f(v+w) = f\left(\sum_1^n (x_i + y_i) e_i\right) = \sum_1^n (x_i + y_i) f(e_i) = \sum_1^n x_i f(e_i) + \sum_1^n y_i f(e_i) = f(v) + f(w).$$

På samme måde vises det at

$$f(av) = f\left(a \sum_1^n x_i e_i\right) = f\left(\sum_1^n a x_i e_i\right) = \sum_1^n a x_i f(e_i) = a \sum_1^n x_i f(e_i) = a f(v),$$

hvor $a \in \mathbb{R}$, dermed følger det at f er lineær. For $f(v) = 0$ er $\|v\| = \|f(v)\| = 0$, altså er $v = 0$. Derfor er f injektiv og da dimensionen af V er endelig er f endda bijektiv, dermed har vi altså at f er en ortogonal afbildning.

Nu bevises b):

Lad $(0, \phi) = (-u, I)f(u, I)$, så er $(0, \phi)$ en isometri i følge punkt d) i Eksempel 1.1.2. Så gælder det, at $(0, \phi)(0) = 0$. I følge a) har vi så at $(0, \phi)$ er ortogonal og $f = (u, I)(0, \phi)(u, I)^{-1}$.

Nu beviser vi c):

Lad $(0, \phi) = (-f(0), I)f$ så er $(0, \phi)$ ortogonal i følge a) da $(0, \phi)(0) = (-f(0), I)f(0) = -f(0) + f(0) = 0$, og det gælder at $f = (f(0), \phi)$. Omvendt har vi at $f = (u, \phi)$, hvor $(0, \phi)(0) = 0$, så må vi have at $u = f(0)$ og $(0, \phi) = (-f(0), I)f$.

Til sidst bevises d):

For alle $v \in V$ har vi at

$$(0, \phi)(u', I)(0, \phi)^{-1}(v) = (0, \phi)(u', \phi^{-1})(v) = (\phi(u'), I)(v).$$

Vi får altså at $(0, \phi)(u', I)(0, \phi)^{-1} = (\phi(u'), I)$ og

$$\begin{aligned} (u, \phi)(u', \phi') &= (u, I)(0, \phi)(u', I)(0, \phi') \\ &= (u, I)(0, \phi)(u, I)(0, \phi)^{-1}(0, \phi)(0, \phi') \\ &= (u, I)(\phi(u'), I)(0, \phi\phi') \\ &= (u, I)(\phi(u'), \phi\phi') \\ &= (u + \phi(u'), \phi\phi'). \end{aligned}$$

Hvis $\det(\phi) \neq 0$, så er $(0, \phi)$ og (u, ϕ) bijektiv. Vi lader $u' = -\phi^{-1}(u)$ og $\phi' = \phi^{-1}$ og får dermed

$$(u, \phi)(u', \phi') = (u + \phi(-\phi^{-1}(u)), \phi\phi^{-1}) = (0, I).$$

Vi har dermed at $(u', \phi') = (-\phi^{-1}(u), \phi^{-1}) = (u, \phi)^{-1}$. ■

Vi får altså at en sammensætning af translationer og ortogonale afbildninger er isometrier, Sætning 1.1.3 giver os faktisk at $\text{Iso}(\mathbb{R}^n) = \mathbb{R}^n \rtimes O(n, \mathbb{R})$.

Indtil videre har vi kun set på $\mathbb{R}^n$ som vektorrum, nu vil vi gerne beskæftige os med Euklidiske vektorrum.

1.2 Euklidisk vektorrum

For at kunne beskrive egenskaberne for en punktmængde X i et n -dimensionelt Euklidisk rum $\mathbb{E}^n$, hvor n er endelig, så skal vi bruge konceptet for et reelt vektorrum. Som origo vælger vi et punkt $O \in \mathbb{E}^n$, punktet behøver ikke at ligge i X . Så betragter vi translationen som bringer O til et andet punkt x . Denne translation kan betragtes som vektoren x fra origo til x . Vælger vi n lineært uafhængige vektorer $a_1, \dots, a_n$ som basisvektorer, så er enhver vektor x entydigt repræsenteret ved dens komponenter $\xi_1, \dots, \xi_n$ i forhold til denne basis, $x = \xi_1 a_1 + \dots + \xi_n a_n$. Komponenterne $\xi_1, \dots, \xi_n$ kan også betragtes som koordinaterne for punktet x . Dimensionen n er defineret som det maksimale antal af lineært uafhængige basisvektorer. Som udgangspunkt er en vektor en søjlevektor og summen af to vektorer og multiplikation med en skalar er ligesom standard vektorregning.

Vektorrummet V^n kaldes euklidisk hvis vi definerer skalarproduktet i forhold til koordinatsystemet $a_1, \dots, a_n$, som følgende

$$x \cdot y := (\xi_1, \dots, \xi_n) \begin{bmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ c_{n1} & \cdots & c_{nn} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \vdots \\ \zeta_n \end{pmatrix} = x^t C y,$$

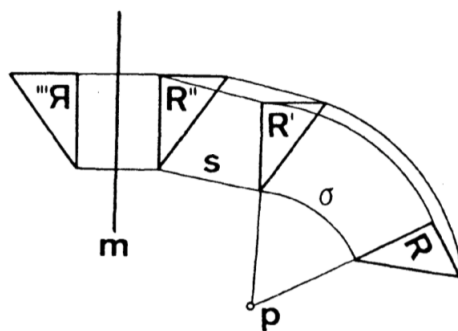
og længden af en vektor er $|x| := +\sqrt{x^t C x}$.

For en isometri kræver vi at længden af vektoren $xy = y - x$ er bevaret:

$$|y - x|^2 = (y - x)^t C (y - x) = |y' - x'|^2 = |\phi y - \phi x|^2 = (y - x)^t \phi^t C \phi (y - x).$$

Denne ligning skal være gyldig for alle $x, y \in \mathbb{E}^n$ derfor må vi altså have at $C = \phi^t C \phi$. Hvis man tager standardbasis, så ville man have at $C = I$ og $\phi^t \phi = I$. Da $\det(C) = \det(\phi^t C \phi) = \det(C) \det(\phi)^2$, må vi have at $\det(\phi) = \pm 1$. Det at $\det(\phi)$ kan have værdierne -1 og 1 hænger sammen med kiraliteten af isometrien. For at forstå kiraliteten af en isometri (u, ϕ) tager vi en delmængde $M \subset \mathbb{E}^n$ indeholdende mindst $n + 1$ punkter som ikke alle ligger på et hyperplan. I det to-dimensionelle tilfælde tager vi tre punkter som danner en trekant R i planet som vist i Figur 1. Helt generelt danner $n + 1$ punkter et simplex i $\mathbb{E}^n$. Det er altid muligt at bestemme et simplex som udviser kiralitet, hvilket betyder at et spejlbillede ikke er direkte kongruent med det originale simplex. Et simplex og dets spejlbillede kaldes enantiomorfe. I Figur 1 er de to trekanter R'' og R''' enantiomorfe. Hvis $\det(\phi) = +1$ så fører isometrien (u, ϕ) simpleksen over i en direkte kongruent kopi. Sådant en isometri er kaldet egentlig. ϕ kaldes så en egentlig rotation, og hvis I er identiteten så er (u, I) blot en translation.

Omvendt, hvis $\det(\phi) = -1$ så fører (u, ϕ) simpleksen over i en spejlet kopi. Sådant en isometri kaldes uegentlig.



Figur 1: Isometrier af et simplex R , (Engel 1986).

1.2.1 Eksempel:

En trekant R i planet $\mathbb{E}^2$ er vist i Figur 1. Rotationsdelen S roterer trekanten over i R' gennem rotationsvinklen σ omkring punktet p . Translationsdelen u flytter R' over i R'' . Begge flytninger er egentlige isometrier. Trekanten R'' er enantiomorf med trekanten R''' , altså eksisterer der ingen egentlig isometri i planet som afbilder R'' til R''' . Dette kan derimod opnås med en reflektion i aksen m , som er en uegentlig isometri. ◀

Hvis sådan en isometri fører f.eks. et simplex over i sig selv, kaldes det en symmetri.

1.3 Symmetrier

1.3.1 Definition:

Lad M være en delmængde af $\mathbb{E}^n$. En symmetri der virker på en mængde M er en isometri der afbilder M over i sig selv.

Da en symmetri er en isometri der afbilder en mængde på sig selv, har en symmetri samme egenskaber som en isometri. Vi ved derfor, at sammensætningen af to symmetrier igen er en symmetri. Derudover har en symmetri en invers, den inverse er også en symmetrioperation, og sat sammen giver de identiteten $(u, \phi)(u, \phi)^{-1} = (0, I)$. Hvilket betyder at symmetrier på en mængde M danner en undergruppe af $\text{Iso}(\mathbb{R}^n)$.

Symmetrigrupper svarer til lineære repræsentationer af abstrakte grupper i euklidiske vektorrum. Så vi betragter (u, ϕ) som en repræsentation i $\mathbb{E}^n$.

1.3.2 Definition (Punktgruppe):

En gruppe G_0 bestående af symmetrier der virker på en mængde M , kaldes en punktgruppe.

Inden vi kan gå videre med punktgrupper skal vi kigge på punktsystemer og deres egenskaber.

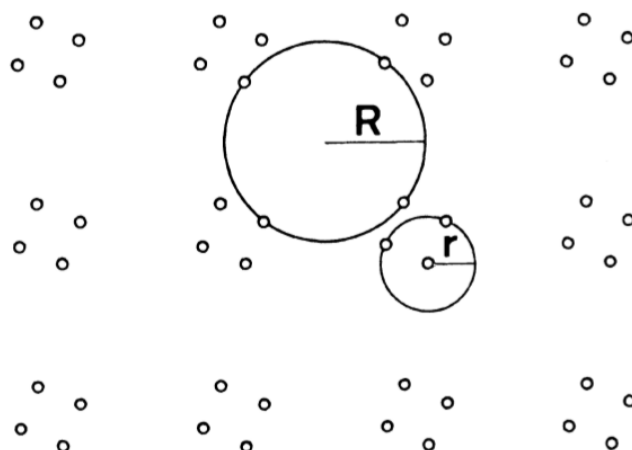
1.4 Punktsystemer

1.4.1 Definition (Aksiomer for geometrisk krystallografi):

Lad punktmængden X være et n -dimensionelt Euklidisk rum, $\mathbb{E}^n$, som opfylder følgende betingelser:

- 1. Punktmængden X er diskret, det betyder, at man kan tegne en åben kugle med fikseret radius $r > 0$ omkring ethvert punkt i X , som ikke indeholder andre punkter i X . Se Figur 2.*
- 2. Enhver mellemliggende kugle, altså enhver åben kugle som kan indlægges i $\mathbb{E}^n$ sådan at den undgår alle punkter i X , har en radius mindre end eller lig med et fikseret endeligt R . Se Figur 2.*
- 3. Punktmængden X ser ens ud fra alle punkter i X .*

En punktmængde X som opfylder alle tre betingelser kaldes et regulært punktsystem.



Figur 2: En del af et regulært punktsystem. (Engel 1986).

Betingelse nr. 2 sikrer at punkterne er uniformt fordelt over rummet. De kan f.eks. ikke alle ligge i den ene side af et hyperplan. Dette betyder at antallet af punkter i en kugle med radius $L > R$ stiger når n bliver større.

Den tredje betingelse kan formuleres mere præcis. Hvis vi betragter en mængde af rette linjer, tegnet fra et punkt i X til alle de resterende punkter i X . Så giver den tredje betingelse, at linjesystemet for to punkter i X er direkte kongruente eller kongruente op til spejling. Det betyder at for ethvert par af punkter i X kan vi finde en isometri af rummet som bringer de to linjesystemer, og dermed hele punktmængden X , over i sig selv.

Den tredje betingelse sikrer også at en største mellemliggende kugle med radius R eksisterer. I et (r, R) -system er radien R supremum af radier af alle mellemliggende kugler og dermed eksisterer der ikke nødvendigvis en kugle med radius R .

Vi betragter nu symmetrier af et regulært punktsystem X . Fra aksiom 1 i Definition 1.4.1 eksisterer der, for ethvert par $x, y \in X$, en symmetri (u, ϕ) der fører x over i y og dermed afbilder X på sig selv. Vi har altså, at hvis $x, y \in X$ og g er en symmetri i X , så er $g \cdot x = y$.

Det følger at alle $x \in X$ er forbundet gennem symmetrier der virker på X . Hvis dette er opfyldt siger vi at gruppen af symmetrier virker transitivt på X .

1.4.2 Definition (Rumgruppe):

Enhver gruppe G af symmetrier der virker transitivt på et regulært punktsystem i $\mathbb{E}^n$ er en n -dimensionel rumgruppe.

Inden vi kan gå videre med et af Bieberbachs resultater betragter vi Dirichletområder.

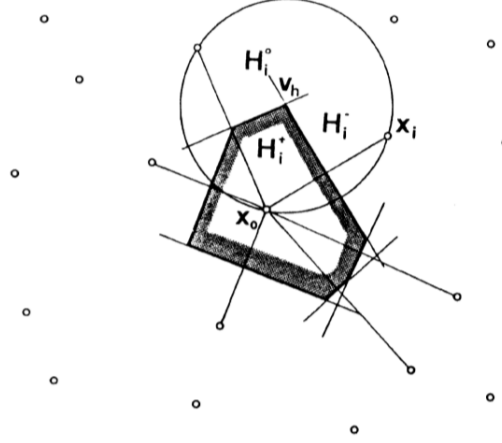
1.5 Dirichletområder

De metriske og topologiske egenskaber af en punktmængde $X \in \mathbb{E}^n$ ses bedst ud fra Dirichletområder.

1.5.1 Definition:

Et Dirichletområde, $D(x_0) \in \mathbb{E}^n$, er den del af rummet indeholdende alle punkter i $\mathbb{E}^n$ som er tættere på $x_0 \in X$ end noget andet punkt $x_i \in X$. x_0 kaldes referencepunktet for Dirichletområdet $D(x_0)$.

Referencepunktet x_0 anvender vi som origo. Vi tager nu et andet punkt $x_i \in X$ og bestemmer det hyperplan H_i° som opdeler området mellem x_0 og x_i . Hyperplanet H_i° er normal til linjestykket $x_0x_i = x_i$.



Figur 3: Dirichletområde, (Engel 1986).

Via konstruktion har vi, at alle punkter $p \in H_i^\circ$ har samme afstand til x_0 som til x_i . Hyperplanet H_i° opdeler rummet i to halv-rum H_i^+ og H_i^- . Vi antager at H_i^+ indeholder x_0 . Det følger altså deraf, at alle punkter $p \in H_i^+$ er tættere på x_0 end x_i som vist i Figur 3. Vi fortsætter med at bestemme de åbne halv-rum for hvert punkt $x_i \in X \setminus x_0$. Dermed opnår vi det åbne Dirichletområde $D(x_0)$ som fællesmængden af alle halv-rum H_i^+ ,

$$D(x_0) = \bigcap_{x_i \in X \setminus x_0} H_i^+.$$

De åbne halv-rum H_i^+ er konvekse, dermed er $D(x_0)$ også konveks.

For ethvert punkt $p \in D(x_0)$ betragter vi den åbne kugle $B(p, |p|)$ med centrum i p og radius $|p|$, og opnår området

$$Q_0 = \bigcup_{p \in D(x_0)} B(p, |p|).$$

1.5.2 Sætning:

Alle punkter $x_i \in X$, som frembringer en facet af Dirichletområdet $D(x_0)$, ligger på randen af Q_0 .

Bevis:

Antag at der eksisterer et punkt $x_j \in X$ som er inden i en kugle $B(p, |p|)$. Så må punktet p være tættere på x_j end x_0 . Men så har vi at $p \notin D(x_0)$ hvilket er en modstrid. Et punkt x_j

udenfor Q_0 ligger altså udenfor enhver kugle $B(p, |p|) \in Q_0$ for et $p \in D(x_0)$. Det følger deraf, at $|x_j p| > |x_0 p|$ og derfor har vi at hyperplanet H_j° , som opdeler $x_0 x_j$, altså ikke skærer $D(x_0)$. Dermed får vi, at x_j må ligge på randen af Q_0 . ■

1.5.3 Sætning:

I et (r, R) -system X er ethvert Dirichletområde $D(x_i)$, $x_i \in X$ en begrænset konveks polytop med et endeligt antal af randfacetter. $D(x_i)$ er konstrueret via alle punkter indenfor en kugle med radius $2R$ og centrum i x_i .

Bevis:

I følge Sætning 1.5.2 har vi, at alle punkter i X som frembringer en facet af Dirichletområdet $D(x_i)$ ligger på randen af Q_i . Ud fra betingelse 2 i Definition 1.4.1 er radien R supremum af alle radier af de mellemliggende kugler. Derfor må Q_i være indeholdt i en kugle $B(x_i, 2R)$. Ud fra betingelse 1 i Definition 1.4.1 er der kun et endeligt antal af punkter i kuglen $B(x_i, 2R)$. Dermed får vi, at der er et endeligt antal af randfacetter. ■

Afslutningen af $D(x_i)$ noteres som $\overline{D(x_i)}$.

1.5.4 Sætning:

I et (r, R) -system X er området Q_i for et Dirichletområde, $D(x_i)$, $x_i \in X$, bestemt ved foreningen af alle kugler ved punkterne v_j af $\overline{D(x_i)}$,

$$Q_i = \bigcup_{v_j \in \overline{D(x_i)}} B(v_j, |x_i v_j|).$$

Bevis:

For bevis se side 15 i (Engel 1986). ■

1.5.5 Sætning:

I et (r, R) -system X er Dirichletområdet $D(x_i)$ for et punkt $x_i \in X$ indeholdt i en kugle med radius R og centrum i x_i .

Bevis:

I følge betingelse 2 i Definition 1.4.1 er radius R supremum af radier for alle mellemliggende kugler. Alle punkter i $D(x_i)$ ligger altså i det indre af kuglen $B(x_i, R)$. Dermed må $D(x_i) \subset B(x_i, R)$. ■

1.5.6 Definition:

Vi konstruerer Dirichletområdet $D(x_i)$ for ethvert punkt $x_i \in X$. Dette resulterer i en opdeling af rum som har følgende egenskaber:

1. Foreningen af alle afsluttede Dirichletområder $\overline{D(x_i)}$ dækker rummet,

$$\bigcup_{x_i \in X} \overline{D(x_i)} = \mathbb{E}^n.$$

2. Fællesmængden af det indre af to Dirichletområder er tom,

$$\text{int}(D(x_i)) \cap \text{int}(D(x_j)) = \emptyset, \quad i \neq j.$$

3. Fællesmængden af to afsluttede Dirichletområder er enten tom eller en d -facet af hver.

For et regulært punktsystem $X \subset \mathbb{E}^n$ konstruerer vi en opdeling τ af Dirichletområder. Vi vælger $x_0 \in X$ som origo. Fra betingelse 3 i Definition 1.4.1 og Sætning 1.5.2 har vi, at enhver $D(x_i) \in \tau$ er kongruent med $D(x_0)$. Fra Sætning 1.5.3 har vi at $D(x_0)$ har et endeligt antal facetter, og dermed eksisterer der en punktgruppe G_0 med endelig orden, der afbilder τ over i sig selv og dermed $D(x_0)$ over i sig selv.

$$G_0 := \{W_i \mid W_i: \tau \mapsto \tau, D(x_0) \mapsto D(x_0)\}.$$

Ud fra betingelse 3 i Definition 1.4.1 skal der være en rumgruppe G der virker transitivt på X , dermed virker G også transitivt på τ , det betyder at for ethvert par $D(x_i), D(x_j) \in \tau$ eksisterer der en isometri $(u, \phi) \in G$ der fører $D(x_i)$ over i $D(x_j)$ og dermed afbilder τ over i sig selv.

1.5.7 Sætning:

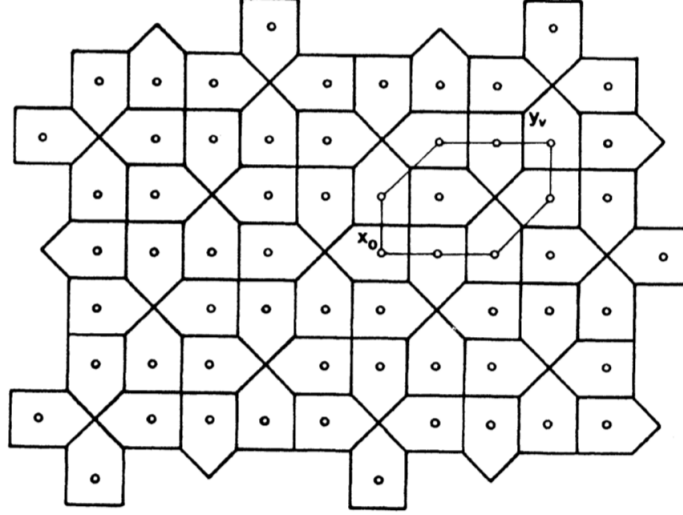
Rotationsdelen af isometrien $(u, \phi) \in G$ frembringer en punktgruppe med endelig orden.

Bevis:

Vi ved at $D(x_0)$ har et endeligt antal af facetter, vi noterer dem F_i . Deraf følger det, at der eksisterer en endelig mængde M af isometrier $(u_i, \phi_i) \in G$, som afbilder $D(x_0)$ over i et $D(x_i)$, som har en fælles facet med $D(x_0)$,

$$M := \left\{ (u_i, \phi_i) \mid (u_i, \phi_i): D(x_0) \mapsto D(x_i), \overline{D(x_0)} \cap \overline{D(x_i)} = F_i \right\}.$$

Hvis $(u_i, \phi_i) \in M$ så er $(u_i, \phi_i)W_j \in M$, for ethvert $W_j \in P(x_0)$. For hvert $D(y_v) \in \tau$ eksisterer der et uendeligt antal af følger $D(x_0), \dots, D(y_v)$ af Dirichletområder der har en fælles facet. For en bestemt følge $D(x_0), D(y_1), \dots, D(y_v)$ bestemmer vi en isometri (r_v, R_v) der via gentagen anvendelse af konjugerede udgaver af $(u_i, \phi_i) \in M$ afbilder $D(x_0)$ over i $D(y_v)$, som vist i Figur 4.



Figur 4: Udsnit af en opdeling i Dirichletområder, (Engel 1986).

$$\begin{aligned}
 D(y_1) &= (u_h, \phi_h)D(x_0) & &:= (r_1, R_1)D(x_0) \\
 D(y_2) &= (r_1, R_1)(u_j, \phi_j)(r_1, R_1)^{-1}D(y_1) = (u_h, \phi_h)(u_j, \phi_j)D(x_0) & &:= (r_2, R_2)D(x_0) \\
 &\vdots & &\vdots \\
 D(y_v) &= (u_h, \phi_h) \cdots (u_k, \phi_k)D(x_0) & &:= (r_v, R_v)D(x_0)
 \end{aligned}$$

Da sådan en følge kan konstrueres for ethvert $D(x) \in \tau$ følger det at M frembringer G . For en anden følge $D(x_0), \dots, D(y_v)$ med den resulterende isometri

$$(r_v, R_v) = (u_m, \phi_m) \cdots (u_s, \phi_s),$$

afviger isometrien med en symmetrioperation $W_j \in P(x_0)$. For rotationsdelen får vi at $R_v = \phi_m \cdots \phi_s = \phi_h \cdots \phi_k W_j$. Ud fra dette får vi at

$$W_j^{-1} \phi_k^{-1} \cdots \phi_h^{-1} \phi_m \cdots \phi_s = I.$$

Dette kan vi gøre for enhver følge. Da M og G_0 er endelige mængder, og antallet af facetter af $D(x_0)$ er endeligt og mindst $n + 1$, følger det at $\phi_i \in M$ frembringer en gruppe med endelig orden. ■

1.5.8 Sætning (Bieberbachs første sætning):

Enhver gruppe af isometrier i $\mathbb{E}^n$, der virker transitivt på et regulært punktsystem X , indeholder n lineært uafhængige translationer.

Bevis:

Rumgruppen G indeholder et uendeligt antal af isometrier. Ud fra Sætning 1.5.7 frembringer rotationsdelen en punktgruppe med endelig orden, og derfor må der eksistere mindst to isometrier $(v, \phi), (u, \phi) \in G$ der har den samme rotationsdel ϕ . Det følger at

$$(v, \phi)(u, \phi)^{-1} = (v, \phi)(-\phi^{-1}u, \phi^{-1}) = (v - \phi\phi^{-1}u, \phi\phi^{-1}) = (t, I),$$

hvor $t = v - u$ er en translation. Lad (t_1, I) være den mindste af sådan en translation. Det frembringer en undergruppe med uendelig orden,

$$T^1 := \{(t, I) \mid t = m_1 t_1, m_1 \in \mathbb{Z}\}.$$

Hvis vi anvender T^1 på $D(x_0)$ frembringes en lineær række af Dirichletområder. Vi bestemmer den højre sideklasse $T^1(v, \phi)$. Den frembringer en parallel række af Dirichletområder. Antallet af sådanne rækker er uendelig, og dermed eksisterer der et uendeligt antal af sideklasser. Yderligere følger det, at der eksisterer to isometrier der tilhører forskellige sideklasser, men som har den samme rotationsdel.

På samme måde som før kan vi finde en anden translation (t, I) , som er lineært uafhængig med (t_1, I) . Lad (t_2, I) være den korteste af sådan en translation. Translationsvektorerne t_1, t_2 frembringer en undergruppe med uendelig orden,

$$T^2 := \{(t, I) \mid t = m_1 t_1 + m_2 t_2, m_1, m_2 \in \mathbb{Z}\}.$$

Lignende argumenter viser, at der kan findes n lineært uafhængige translationsvektorer, hvilket beviser sætningen. ■

Bieberbachs første sætning giver, at enhver rumgruppe indeholder en undergruppe med uendelig orden,

$$T^n := \{(t, I) \mid t = m_1 t_1 + \cdots + m_n t_n, m_1, \dots, m_n \in \mathbb{Z}\}.$$

Hver sideklasse $T^n(v_i, \phi_i)$ frembringer et kongruent gitter. Vi repræsenterer enhver gittervektor $t \in T^n$ gennem dets slutpunkt og opnår dermed et gitter. Det følger at et regulært punktsystem kan repræsenteres som en mængde af kongruente punktgitre, alle parallelt placeret i rummet.

1.6 Gitterbasis

Vi arbejder i $\mathbb{E}^n$ og betragter gitteret $T^n := \{t \mid t = m_1 a_1 + \cdots + m_n a_n, m_i \in \mathbb{Z}\}$, hvor $a_1, \dots, a_n$ er n lineært uafhængige gittervektorer.

1.6.1 Definition:

En gitterbasis i $\mathbb{E}^n$ består af n lineært uafhængige gittervektorer $a_1, \dots, a_n$, og hver gittervektor $t \in T^n$ kan skrives som en linearkombination $t = m_1 a_1 + \cdots + m_n a_n$, hvor $m_i \in \mathbb{Z}$.

Metrikken af gitteret med basisvektorer $a_1, \dots, a_n$ er beskrevet af den "metriske tensor" C , som er beskrevet i Afsnit 1.2. Det kvadrerede volumen af parallelepipedet P , udspændt af basisvektorerne, er givet ved determinanten af C , $\text{vol}^2(P) = \det(C)$.

En ny gitterbasis, $a'_1, \dots, a'_n$, opnås ved en lineær transformation af den gamle basis. Til det anvender vi en transformationsmatrix $A := (a_{ij})$, hvor $a_{ij} \in \mathbb{Z}$,

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ \vdots \\ a'_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}.$$

For at $a'_1, \dots, a'_n$ også er en gitterbasis skal det nye parallellepipedum P' have samme volumen som P . Dermed får vi, at $\det(A) = \pm 1$. Antallet af sådanne matricer A er uendeligt, hvilket betyder at i $\mathbb{E}^n$, hvor $n > 1$, eksisterer der et uendeligt antal af gitterbaser for et gitter. Vi vælger en passende basis iblandt disse, og alt beregnes ud fra denne.

Vi kan nu skrive en gittervektor t med hensyn til denne basis $a_1, \dots, a_n$, som

$$t = m_1 a_1 + \dots + m_n a_n,$$

hvor $m_i \in \mathbb{Z}$. Den kvadrerede længde af t er

$$|t|^2 = t^t C t = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_{ij} m_i m_j \quad := f(m_1, \dots, m_n). \quad (1.2)$$

Funktionen $f(m_1, \dots, m_n)$ er en positiv-definit n -ær kvadratisk form, hvilket betyder at funktionen er positiv, og kun antager værdien nul hvis $m_1 = \dots = m_n = 0$.

I forhold til en ny gitterbasis $a'_1, \dots, a'_n$ bliver gittervektoren $t = m'_1 a'_1 + \dots + m'_n a'_n$. De nye koefficienter $m'_1, \dots, m'_n$ er transformeret med den kontragrediente matrix $A^\circ := (A^{-1})^t$, hvor A er transformationsmatricen for basisvektorerne, og $t' = A^\circ t$.

Vi kræver at længden af t bevares under transformationen af gitterbasen:

$$|t|^2 = t^t C t = (t')^t A C A^t t' = (t')^t C' t' = |t'|^2.$$

Derfor er $C' = A C A^t$. Dette er en ækvivalensrelation. Det siges at C' er ækvivalent med C . Forskellige gitterbaser for det samme gitter har ækvivalente metriske tensorer, og den tilsvarende kvadratiske form siges også at være ækvivalent. Vi kan nu beregne hvilken transformation der sker med isometrien (v, ϕ) under basisskifte. I forhold til basen $a_1, \dots, a_n$ har vi $y = (v, \phi)x$. Anvendes en transformationsmatrix A , så vi får en ny basis $a'_1, \dots, a'_n$ bliver koordinaterne x og y transformeret via den kontragrediente matrix A° , og vi får at $x' = A^\circ x$ og $y' = A^\circ y$. Det følger at $A^t y' = (v, \phi) A^t x'$ og

$$y' = A^\circ (v, \phi) A^t x' = (u, \psi) x',$$

hvor $(u, \psi) = (A^\circ v, A^\circ \phi A^t)$.

Nu har vi det grundlæggende teori på plads, og kan begynde med første trin i klassificeringen, nemlig klassificering af punktgrupper.

KAPITEL 2

Krystallografiske punktgrupper

I dette kapitel vil der blive defineret hvad en krystallografisk gruppe er, og derefter vil punktgrupperne blive klassificeret. Dette kapitel er baseret på (Strebel 2010).

2.0.1 Definition (Krystallografisk gruppe):

En krystallografisk gruppe $G \in \mathbb{E}^n$ er en undergruppe af isometrigruppen $\text{Iso}(\mathbb{E}^n)$, og gruppen

$$\Gamma(G) = \{v \in \mathbb{E}^n \mid (v, I) \in T(G)\}$$

er et gitter i $\mathbb{E}^n$. Er $n = 3$ kaldes det en rumgruppe.

Er G en krystallografisk gruppe i $\mathbb{E}^n$, så er G_0 dens punktgruppe, $T(G)$ er en undergruppe af G , bestående af translationsdelene i G , og $\Gamma(G)$ er gitteret for translationsvektorer fra $T(G)$.

2.0.2 Sætning:

Translationsundergruppen $T(G)$ er normal i G , og den er den største abelske undergruppe af G .

Bevis:

For bevis se side 49 i (Strebel 2010). ■

For hver delmængde $S \subset \mathbb{E}^3$ eksisterer der en symmetrigruppe for S , som defineres ved

$$\text{Sym}(S) = \{\psi \in \text{Iso}(\mathbb{E}^3) \mid \psi(S) = S\}.$$

Da strukturen af en ideel krystal er invariant i tre lineært uafhængige retninger, udgør vektorerne for translationer i $\text{Sym}(S)$ et gitter $\Gamma(\text{Sym}(S))$ i $\mathbb{E}^3$, symmetrigruppen er en rumgruppe og dermed en krystallografisk gruppe i det tre-dimensionelle rum.

2.0.3 Sætning:

Lad $f: G \xrightarrow{\sim} G'$ være en isomorfi mellem to krystallografiske grupper G, G' . Så afbilder f translationsgruppen $T(G)$ over i $T(G')$ og inducerer en isomorfi f_* der afbilder punktgruppen G_0 over i G'_0 .

Bevis:

For bevis se side 50 i (Strebel 2010). ■

2.0.4 Korollar:

Lad G og G' være krystallografiske grupper. Er G og G' isomorfe, så er deres punktgrupper G_0 og G'_0 det også.

Da vi ved at punktgrupper består af symmetrier der afbilder en mængde på sig selv, kan vi starte med at finde de endelige undergrupper af $SO(3, \mathbb{R})$, da de netop består af sådanne afbildninger, og vi vil betragte det tre-dimensionelle tilfælde.

2.1 Undergrupper af $SO(3, \mathbb{R})$

I dette afsnit vil de endelige undergrupper af $SO(3, \mathbb{R})$ blive bestemt og beskrevet.

Følgende sætning er baseret på (Devisscher 2011).

2.1.1 Sætning:

Lad G være en endelig undergruppe af $SO(3, \mathbb{R})$. Så er G isomorf til præcis én af de følgende grupper:

C_n , ($n \geq 1$): rotations symmetrigruppe af en n -pyramide.

D_n , ($n \geq 2$): rotations symmetrigruppe af en n -prisme.

A_4 : rotations symmetrigruppe af en regulær tetraeder, noteret som T .

S_4 : rotations symmetrigruppe af en terning, eller en regulær octaeder, noteret som O .

A_5 : rotations symmetrigruppe af en regulær dodekaeder, eller en regulær ikosaeder, noteret som Y .

Bevis:

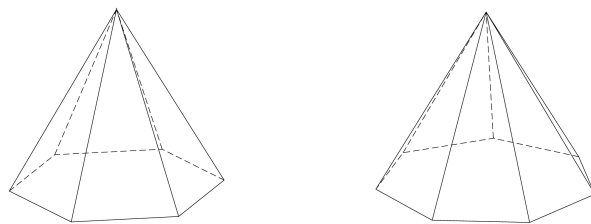
For bevis se (Devisscher 2011). ■

Nu vil vi beskrive de forskellige symmetrigrupper.

Den cykliske gruppe C_n :

Vi bruger notationen C_n for den cykliske gruppe af orden n . En repræsentation af den cykliske gruppe kunne være symmetrigruppen af en n -pyramide, bestående af en n -gon som bund og n ligebenede trekanter som sider, for eksempel se Figur 5. En cyklisk gruppe har den egenskab at hele gruppen kan genereres af et enkelt element. I dette tilfælde en rotation om den akse der går fra pyramidens "spids" og så ned til centrum af "bunden". Hvis vi har en n -pyramide, ville vores element svare til en rotation med vinklen $\phi = \frac{2\pi}{n}$, lad os kalde denne rotation g . Vi ville altså have at $C_n = \langle g \rangle$. For de to pyramider i Figur 5 ville vi have at

$$C_6 = \{e, g, g^2, g^3, g^4, g^5\} \quad \text{og} \quad C_7 = \{e, g, g^2, g^3, g^4, g^5, g^6\}.$$

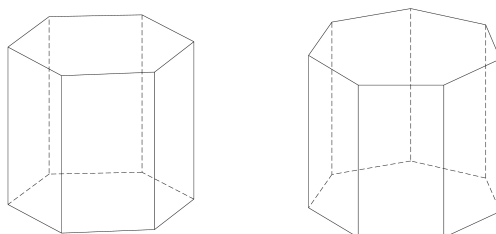


Figur 5: Til venstre en sekskantet pyramide, C_6 , til højre en syvkantet pyramide, C_7 .

Diedergruppen D_n :

Vi bruger notationen D_n for diedergruppen af orden $2n$, og en repræsentation kunne være symmetrigruppen af en n -prisme. Diedergruppen indeholder også en rotation med vinklen $\frac{2\pi}{n}$ rundt om akse der går fra midten af bunden til midten af toppen af en n -prisme, men derudover kan man også rotere i flere andre akser, som er ortogonale på den første akse. Denne type akse er der n af. Hvis n er et lige tal så er der $\frac{n}{2}$ akser der går fra midte til midte af to modstående sideflader, og $\frac{n}{2}$ akser der går fra midte til midte af to modstående kanter. Hvis n er ulige er der n akser der går fra midten af en kant til midten af den modstående flade. I disse akser kan man kun rotere med π , sådan et element har altså orden 2. For de to prismer i Figur 6 har vi at

$$D_6 = \{e, u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6, g, g^2, g^3, g^4, g^5\} \quad \text{og} \\ D_7 = \{e, u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6, u_7, g, g^2, g^3, g^4, g^5, g^6\}.$$



Figur 6: Til venstre en sekskantet prisme, D_6 , til højre en syvkantet prisme, D_7 .

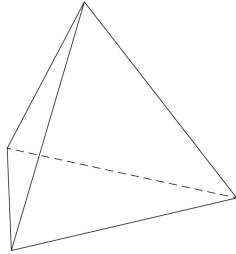
Det ses at grupperne har orden $2n$. Da $u_i^2 = e$ for $i = 1, \dots, n$ ved vi at $(gu_1)^2 = e$ og $gu_1 = (gu_1)^{-1} = u_1^{-1}g^{-1} = u_1g^{-1}$. Vi får altså at $gu_1 = u_1g^{-1}$. Derudover har vi også at $u_{k+1} = g^k u_1$ for $k = 1, \dots, n-1$.

Den alternerende gruppe A_4 :

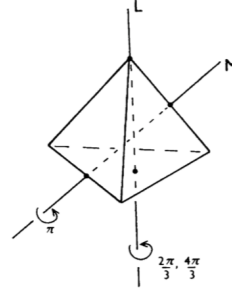
En tetraeder har to slags akser, en der går fra et hjørne og så gennem midten af den modstående side. Den anden går gennem midten af to modstående kanter. Den første type akse, lad os kalde den L , kan vi rotere omkring med vinklerne $\frac{2\pi}{3}$ og $\frac{4\pi}{3}$. Den anden type akse, lad os kalde den M kan vi kun rotere omkring med vinklen π . Da en tetraeder har fire sideflader er der fire akser som L med to rotationer om hver, og vi kan finde tre akser

som M , med én rotation om hver, det giver 11 rotationer i alt, gruppen må altså have orden 12. Vi ville altså have at

$$A_4 = \{e, m_1, m_2, m_3, l_1, l_1^2, l_2, l_2^2, l_3, l_3^2, l_4, l_4^2\}.$$

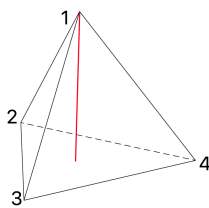


Figur 7: En tetraeder.

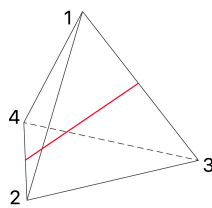


Figur 8: En tetraeder med akser på.
(Armstrong 1988).

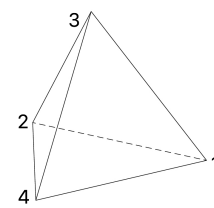
Disse rotationer svarer hver især til en permutation af hjørnekanterne. Hvis vi nummererer de fire hjørner fra 1 til 4 kan hver rotation beskrives som lige permutationer. Hvis vi betragter den tetraeder som ses i Figur 9a, har vi kaldt "toppen" 1, og de tre hjørner i "bunden" for 2, 3 og 4. Hvis vi så vælger at rotere om akse L , illustreret med rød, med vinklen $\frac{2\pi}{3}$ bliver resultatet den tetraeder som ses i Figur 9b, og denne rotation svarer til permutationen $l = (234)(1)$. Hvis vi så nu vælger at rotere om M , illustreret med rød, med vinklen π , så får vi den tetraeder som ses i Figur 9c, og denne rotation svarer til permutationen $m = (13)(24)$. De to rotationer sammen svarer til permutationen $ml = (143)(2)$. Hvis vi derimod vælger at lave de to rotationer i omvendt rækkefølge, så først om M og derefter L , som ses i Figur 9d, 9e og 9f ses det, at slutresultatet er forskellig alt efter hvilken rækkefølge der anvendes, vi har at $ml \neq lm$. Gruppen er altså ikke-abelsk.



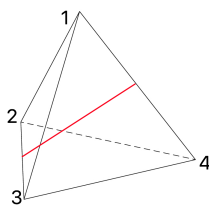
(a) $l = (234)(1)$



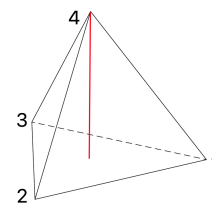
(b) $m = (13)(24)$



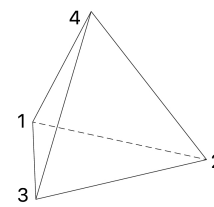
(c) $ml = (143)(2)$



(d) $m = (14)(23)$



(e) $l = (132)(4)$

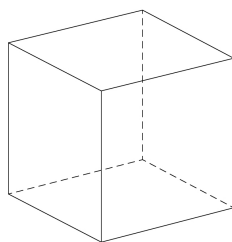


(f) $lm = (124)(3)$

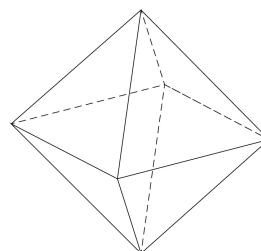
Figur 9: Permutationer af en tetraeder.

Symmetrigruppen S_4 :

En terning og en regulær oktaeder er hinandens duale, det betyder hvis man f.eks. forbandt midtpunktet af hver flade i en terning med de nærmeste 4 midtpunkter, så ville man ende med en oktaeder. Omvendt hvis man forbandt midtpunktet af hver flade i en oktaeder med de 4 nærmeste, så ville man ende med en terning. Dette resulterer i at deres symmetrigrupper er isomorfe, og derfor nøjes vi med at betragte en terning.

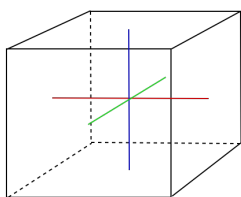


Figur 10: En terning.

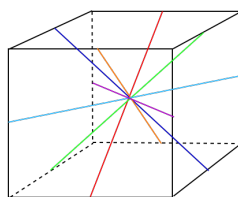


Figur 11: En regulær oktaeder.

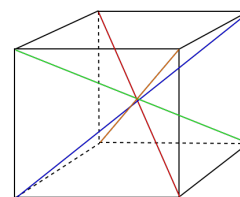
En terning har i alt 13 rotationsakser. Der er tre akser som går fra midte til midte af to modstående sideflader, se Figur 12, lad os kalde disse akser for F . Der er seks akser som går fra midten af en kant til midten af den modstående kant, se Figur 13, vi kalder dem K . Til sidst er der fire akser som går fra et hjørne til et modstående hjørne, se Figur 14, dem noterer vi H .



Figur 12: Fladeakser.



Figur 13: Kantakser.



Figur 14: Hjørneakser.

Hvis vi anvender akserne fra Figur 12, kan vi rotere med $\frac{\pi}{2}$, π og $\frac{3\pi}{2}$. Hvis vi anvender akserne fra Figur 13 kan vi rotere med π . Betragter vi til sidst akserne i Figur 14 ses det, at vi kan rotere med $\frac{2\pi}{3}$ eller $\frac{4\pi}{3}$. Vi får altså at der er $3 \cdot 3 + 6 \cdot 1 + 4 \cdot 2 = 23$ mulige rotationer, derudover har vi også identiteten, vi får altså at gruppen har orden 24.

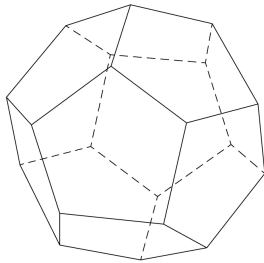
Gruppestrukturen af en terning kan betragtes som permutationer af hjørneakserne. Så hvis de fire hjørneakser nummereres fra 1 til 4, svarer enhver rotation til en permutation af hjørneakserne, se Tabel 1.

Symmetri	Permutationer	Orden
Identitet	e	1
Rotation om en fladeakse, f .	$(1, 2, 3, 4)$, $(1, 4, 3, 2)$, $(1, 2, 4, 3)$, $(1, 3, 4, 2)$, $(1, 3, 2, 4)$ og $(1, 4, 2, 3)$.	4
Kvadreret rotation om en fladeakse, f^2 .	$(1, 3)(2, 4)$, $(1, 4)(2, 3)$ og $(1, 2)(3, 4)$.	2
Rotation om en kantakse, k .	$(1, 2)$, $(1, 3)$, $(1, 4)$, $(2, 3)$, $(2, 4)$ og $(3, 4)$.	2
Rotation om en hjørneakse, h .	$(1, 2, 3)$, $(1, 3, 2)$, $(1, 2, 4)$, $(1, 4, 2)$, $(1, 3, 4)$, $(1, 4, 3)$, $(2, 3, 4)$ og $(2, 4, 3)$.	3

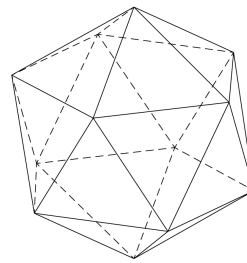
Tabel 1: Permutationer af en terning.

Den alternerende gruppe A_5 :

En regulær dodekaeder, se Figur 15, og en regulær ikosaeder, se Figur 16, er hinandens duale ligesom terningen og en oktaeder, og derfor betragter vi kun en regulær dodekaeder.

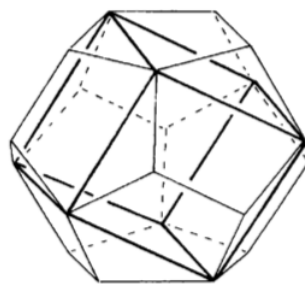


Figur 15: En regulær dodekaeder.



Figur 16: En regulær ikosaeder.

På samme måde som terningen kan vi opdele en dodekaeder i fladeakser, kantakser og hjørneakser. Da en dodekaeder har 12 flader må den have seks fladeakser, og om hver fladeakse kan vi rotere med $\frac{2\pi}{5}$, $\frac{4\pi}{5}$, $\frac{6\pi}{5}$ og $\frac{8\pi}{5}$. En dodekaeder indeholder 30 kanter, og vi må derfor have 15 kantakser, om hver kantakse kan vi rotere med π . Tilsidst er der 20 hjørner, og vi har derfor 10 hjørneakser, om hver hjørneakse kan vi rotere med $\frac{2\pi}{3}$ og $\frac{4\pi}{3}$. Vi får altså $6 \cdot 4 + 15 \cdot 1 + 10 \cdot 2 = 59$ mulige rotationer. Derfor må gruppen have orden 60. Som i Figur 17 kan vi konstruere en terning indeni en dodekaeder, alle hjørnerne i terningen er også et hjørne i dodekaederen, og hver kant i terningen svarer til en diagonal i en af de femkantede flader.



Figur 17: Terning indeni en dodekaeder, (Armstrong 1988).

Vi kan konstruere 5 forskellige terninger, og nummererer dem 1 til 5. Så kan vi, på samme måde som med hjørneakserne i terningen, betragte hvordan disse fem konstruerede terninger flytter sig, når vi laver en rotation om en symmetriakse i vores dodekaeder. Hvis vi betragter dette som permutationer af de fem konstruerede terninger, vil vi opnå at enhver rotation svarer til et element i S_5 . Hvis man betragter hjørneakserne vil man få, at en rotation om en hjørneakse vil give en 3-cykel, og alle rotationer om en hjørneakse vil tilsammen give alle 3-cykler i S_5 . Netop alle 3-cykler i S_5 generer tilsammen A_5 , og A_5 har også orden 60, dermed har vi at symmetrigruppen for en dodekaeder er isomorf med A_5 .

Nu da vi har styr på alle de endelige undergrupper af $SO(3, \mathbb{R})$ kan vi gå videre til de endelige undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$.

2.2 Undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$

Helt generelt for undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$ må vi have tre tilfælde. Første tilfælde er, at undergruppen er en undergruppe af $SO(3, \mathbb{R})$. Andet tilfælde er en gruppe der indeholder elementer hvor $\det = -1$, og $-I$ er et element i gruppen. Hvorimod en gruppe af tredje tilfælde, også vil indeholde elementer hvor $\det = -1$, men $-I$ er ikke et element i denne type gruppe.

Det er klart at alle undergrupper af $SO(3, \mathbb{R})$ også er undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$. Da $SO(3, \mathbb{R}) \subseteq O(3, \mathbb{R})$. Vi kalder disse undergrupper for type 1, og anvender notationen T_1 for mængden af undergrupper af type 1, yderligere noterer vi sådan en undergruppe som G_+ .

Lad os nu betragte dem vi vil kalde for type 2, noteret som T_2 . Det åbenlyse ville være at tage alle matricer fra $SO(3, \mathbb{R})$ og så lave en inversion, det betyder at $g \cdot (-I) \in T_2$ for enhver $g \in G_+$, hvor $G_+ \in T_1$ og I er identitetsmatricen. Men denne undergruppe vil ikke være lukket under multiplikation. Derfor bliver vi nødt til at tilføje noget mere til undergruppen. Vi lader

$$T_2 := \{G_+ \times \{-I, I\} \mid G_+ \in T_1\}$$

og noterer en undergruppe af type 2 som G_- og tjekker nu om det er en undergruppe af $O(3, \mathbb{R})$. Først tjekkes om $I \in G_-$, hvilket er tilfældet da I er det neutrale element i G_+ og $I \cdot I = I$, så dermed har vi $I \in T_2$. Vi ved at alle elementer i G_+ er invertible, da $G_+ \subseteq SO(3, \mathbb{R})$, vi ved også at både $-I$ og I er invertible. Vi kan altså gøre følgende $(g_1 \cdot (\pm I))^{-1} = (\pm I)^{-1} \cdot g_1^{-1} = (\pm I) \cdot g_1^{-1}$, hvor $g_1 \in G_+$. Da I og $-I$ kommuterer med alle elementer i G_+ har vi at $(g_1 \cdot (\pm I))^{-1} = g_1^{-1} \cdot (\pm I)$, hvilket er et element i G_- .

Til sidst tjekkes om G_- er lukket under multiplikation. Lad $g_1, g_2 \in G_+$, så har vi at

$$\begin{aligned} (g_1 \cdot (\pm I)) \cdot (g_2 \cdot (\pm I)) &= g_1 \cdot g_2 \cdot (\pm I) \cdot (\pm I) = g_1 \cdot g_2 \cdot I \in G_- \quad \text{eller} \\ (g_1 \cdot (\pm I)) \cdot (g_2 \cdot (\mp I)) &= g_1 \cdot g_2 \cdot (\pm I) \cdot (\mp I) = g_1 \cdot g_2 \cdot (-I) \in G_-. \end{aligned}$$

Dermed får vi at G_- er lukket under multiplikation. Vi har altså at $G_- \subseteq O(3, \mathbb{R})$.

Til sidst konstrueres den sidste type undergruppe. Vi lader $G \not\leq SO(3, \mathbb{R})$. Betragt $\det: G \mapsto \{\pm 1\}$. Dette er en surjektiv homomorfi, dvs. vi kan sætte $G_1 = \ker(\det)$, så er G_1 en normal undergruppe i G med indeks 2, $[G : G_1] = 2$. Da G er en undergruppe af type 3, ved vi at $-I \notin G$. Idet $[G : G_1] = 2$ er $G = G_1 \cup (G \setminus G_1)$. Vi konstruerer nu en gruppe $G_2 \leq SO(3, \mathbb{R})$ ved at sætte

$$G_2 = G_1 \cup (-I) \cdot (G \setminus G_1).$$

Inden vi går videre, tjekkes om det er en undergruppe.

Først tjekkes om $I \in G_2$. Da $G_1 = \ker(\det)$ må $I \in G_1$, og dermed er $I \in G_2$. Nu tjekkes om gruppen er lukket under invers. Vi har to muligheder. For $g_1 \in G_1$ er g_1 invertibel og $g_1^{-1} \in G_1$ og dermed har vi at $g_1^{-1} \in G_2$. Den anden mulighed er hvis vi har et element $g_3 \in G \setminus G_1$. Så skal $(-I) \cdot g_3$ være invertibel og ligge i G_2 . Vi ved at $(-I)$ er invertibel, vi ved også at g_3 er invertibel da $g_3 \in O(3, \mathbb{R})$. Dermed får vi at $((-I) \cdot g_3)^{-1} = g_3^{-1} \cdot (-I)$, da vi ved at $-I$ kommuterer med alle elementer i $O(3, \mathbb{R})$ har vi at $((-I) \cdot g_3)^{-1} = (-I) \cdot g_3^{-1}$, og $g_3^{-1} \in G \setminus G_1$, da $\det(g_3^{-1}) = -1$. Vi har altså at $(-I) \cdot g_3^{-1} \in G_2$ og G_2 er dermed lukket under invers.

Nu tjekkes om G_2 er lukket under multiplikation. Vi lader $g_1, g_2 \in G_1$ og $g_3, g_4 \in G \setminus G_1$. Så har vi tre tilfælde. Første tilfælde:

$g_1 \cdot g_2 \in G_1$ og dermed har vi at $g_1 \cdot g_2 \in G_2$.

Andet tilfælde:

$$((-I) \cdot g_3) \cdot ((-I) \cdot g_4) = g_3 \cdot g_4$$

Vi ved at $\det(g_3) = -1 = \det(g_4)$ og har derfor at $\det(g_3 \cdot g_4) = 1$ hvilket giver at $g_3 \cdot g_4 \in G \cap SO(3, \mathbb{R}) = G_1$ og dermed at $g_3 \cdot g_4 \in G_2$.

Tredje tilfælde:

$$g_1 \cdot ((-I) \cdot g_3) = (-I) \cdot g_1 \cdot g_3$$

Vi ved at $\det(g_1) = 1$ og $\det(g_3) = -1$, det medfører at $\det(g_1 \cdot g_3) = -1$ og dermed at $g_1 \cdot g_3 \in G \setminus G_1$. Hvilket giver at $(-I) \cdot g_1 \cdot g_3 \in G_2$. Dermed er G_2 lukket under multiplikation, og vi har at $G_2 \leq SO(3, \mathbb{R})$. Dette giver også at $[G_2 : G_1] = 2$. Omvendt gælder så at

$$G = G_1 \cup (-I) \cdot (-I) \cdot (G \setminus G_1) = G_1 \cup (-I) \cdot (G_2 \setminus G_1) \in T_3.$$

Dette beskriver undergrupper af type 3, denne type noteres som T_3 . Dette leder til følgende sætning som kun er gældende for $O(n, \mathbb{R})$ når vi arbejder i ulige dimensioner.

2.2.1 Sætning:

Lad G være en gruppe, med en normal undergruppe G^+ , hvor $[G : G^+] = 2$. Lad $z \in G \setminus G^+$ være et element med orden 2, og z kommuterer med alle elementer i G^+ . Så er der tre typer af undergrupper U af G :

1. U er en undergruppe af G^+ .
2. Hvis $z \in U$, så er U det direkte produkt mellem $U^+ = U \cap G^+$ og den cykliske gruppe $\langle z \rangle$.
3. Hvis $z \notin U$ og $U \not\leq G^+$ så gælder følgende:

$$\tilde{U} = U^+ \cup (U \setminus U^+) \cdot z$$

er en undergruppe af G og $f: U \mapsto \tilde{U}$,

$$f: g \mapsto \begin{cases} g, & \text{hvis } g \in U^+ = U \cap G^+, \\ g \cdot z, & \text{hvis } g \in U \setminus U^+, \end{cases}.$$

er en bijektiv homomorfi. Ydermere er $[\tilde{U} : U^+] = 2$.

Bevis:

Sætningen følger af det ovenstående, pånær at f er en bijektiv homomorfi. f er en homomorfi pga. følgende udregning:

$$\begin{aligned} f(g_1) \cdot f(g_2) &= \begin{cases} g_1 \cdot g_2, & \text{hvis } g_1, g_2 \in U^+, \\ (g_1 \cdot z) \cdot g_2 = (g_1 \cdot g_2) \cdot z, & \text{hvis } g_1 \in U \setminus U^+, g_2 \in U^+, \\ g_1 \cdot (g_2 \cdot z) = (g_1 \cdot g_2) \cdot z, & \text{hvis } g_1 \in U^+, g_2 \in U \setminus U^+, \\ (g_1 \cdot z) \cdot (g_2 \cdot z) = (g_1 \cdot g_2) \cdot z^2 = g_1 \cdot g_2, & \text{hvis } g_1, g_2 \in U \setminus U^+, \end{cases} \\ &= f(g_1 \cdot g_2). \end{aligned}$$

For at f skal være injektiv skal vi have at $\text{Ker}(f) = I$. Vi starter med at antage for et element $g \in U$ at $f(g) = i$. Hvis $g \in U^+$, så har vi at $g = I$, og hvis $g \in U \setminus U^+$ skal vi have at $g \cdot z = I$, men for at det kan lade sig gøre skal vi have at $g = z^{-1} = z$ hvilket er en modstrid da $z \notin U$, så intet element fra $U \setminus U^+$ kan ligge i $\text{Ker}(f)$. Dermed har vi at $\text{Ker}(f) = I$ og f er injektiv.

Nu vises det at f er surjektiv. For at f skal være surjektiv skal ethvert element i $\tilde{U}$ kunne skrives som $f(g)$ hvor $g \in U$. Vi har to tilfælde. For $h \in \tilde{U}$ har vi enten at $h \in U^+$, hvilket giver at $h = f(h)$, eller at $h \in (U \setminus U^+) \cdot z$, så har vi at $h = g \cdot z$ for et $g \in U \setminus U^+$ således at $h = f(g)$, og dermed er f surjektiv og dermed bijektiv. ■

Nu vil vi gerne finde de endelige undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$, som er punktgrupper, men vi er kun interesseret i en bestemt type af dem, nemlig de krystallografiske.

2.3 Krystallografiske undergrupper

I dette afsnit vil de krystallografiske undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$ blive klassificeret op til konjugation.

2.3.1 Sætning (Krystallografisk restriktion):

Hvis G er en endelig undergruppe af $O(3, \mathbb{R})$ og G er en symmetrigruppe, så vil en rotation i undergruppen have orden 1, 2, 3, 4 eller 6.

Bevis:

Hvis vi betragter en basis $\{u_1, u_2, u_3\}$ hvor u_1 er rotationsaksen og $u_2, u_3 \perp u_1$ og $u_3 = u_1 \times u_2$. Så kan vi beskrive rotationer ved en matrix

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

hvor $\text{Spor}(\phi) = 1 + 2 \cos(\theta)$ og $\theta = \frac{2\pi}{n}$. Da G er en symmetrigruppe vil den bevare et gitter, og dermed føre en gittervektor over i en gittervektor, vi kan derfor finde en gitterbasis $\{v_1, v_2, v_3\}$ og en matrix der beskriver samme rotation som ϕ , bare med den nye basis

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix},$$

hvor $a_{ij} \in \mathbb{Z}$. Dvs. at $\text{Spor}(A) \in \mathbb{Z}$. Vi ved, at det karakteristiske polynomium er det samme for de to matricer, da de beskriver den samme lineære afbildning, bare med to forskellige baser, derfor har vi at $\text{Spor}(A) = \text{Spor}(\phi)$, og dermed at $1 + 2 \cos(\theta) \in \mathbb{Z}$. Vi skal altså have at $2 \cos(\theta)$ skal være et heltal, de eneste muligheder der er for det, er hvis $\theta = \{0, \pm \frac{\pi}{3}, \pm \frac{\pi}{2}, \pm \frac{2\pi}{3}, \pi\}$. Hvilket svarer til $n = \{1, 2, 3, 4, 6\}$. ■

Det er nu muligt at bestemme de krystallografiske undergrupper af de tre typer.

Type 1:

Fra Sætning 2.1.1 ved vi hvilke undergrupper der ligger i $\text{SO}(3, \mathbb{R})$. Hvilket er C_n, D_n, T, O, Y . Kombineret med den krystallografiske restriktion fra Sætning 2.3.1 får vi følgende 11 krystallografiske undergrupper af type 1:

$$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, D_2, D_3, D_4, D_6, T \text{ og } O. \quad (2.1)$$

Ingen af disse 11 undergrupper er indbyrdes isomorfe, og dermed heller ikke konjugerede. Selvom Y er en endelig undergruppe af $\text{SO}(3, \mathbb{R})$ er den ikke krystallografisk, da den indeholder drejninger med orden 5.

Type 2:

Inden vi går igang med at bestemme de krystallografiske undergrupper af type 2 definerer vi forskellige typer af notation.

Lad G_n være en symmetrigruppe indeholdende rotationer med orden n , akse med egentlig rotationer af højeste orden kaldes for den primære akse, og andre akser betegnes i forhold til den. Hvis gruppen har et inversionscentrum noteres det som G_{ni} . Hvis gruppen indeholder spejlinger i en plan som er vinkelret på den primære akse noteres det som G_{nh} , er spejlingsplanen derimod parallel i forhold til den primære akse noteres det som G_{nv} . Hvis intet parallelt spejlingsplan "indeholder" en af de rotationssakser der står vinkelret på den primære akse, men derimod ligger mellem dem, giver vi dem notationen G_{nd} , hvor d står for "diagonal", dette er gældende for netop D_{3d} .

Da to grupper G og G' indeholdende $-I$ er konjugerede hvis og kun hvis deres undergrupper $G^+ = G \cap \text{SO}(3, \mathbb{R})$ og $G'^+ = G' \cap \text{SO}(3, \mathbb{R})$ er konjugeret i $\text{SO}(3, \mathbb{R})$ eller $O(3, \mathbb{R})$, giver hver undergruppe af type 1 grupperne nøjagtig én undergruppe af type 2. Vi husker at $T_2 = T_1 \times \{-I, I\}$, så for at bestemme de krystallografiske undergrupper af type 2 skal vi finde det direkte produkt mellem undergrupperne i (2.1) og $\{-I, I\}$. Yderligere er det vigtigt at hvis ϕ er en rotation, så er $-\phi = (-I) \cdot \phi$ en spejling, dvs. der

er en spejlingsplan. Vi opnår dermed de følgende krystallografiske undergrupper af type 2, listet i samme rækkefølge som undergrupperne i (2.1):

$$C_{1i}, C_{2h}, C_{3i}, C_{4h}, C_{6h}, D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h}, T_h \text{ og } O_h. \quad (2.2)$$

Vi bemærker dog at nogle af disse er isomorfe med nogen af undergrupperne i (2.1), men de er altså ikke konjugerede da elementer fra undergrupperne i (2.1) har $\det = 1$, hvor elementer fra undergrupperne i (2.2) kan have $\det = -1$. Vi kan altså ikke via konjugation komme fra sådan et element over i et element fra en undergruppe af type 1.

Type 3:

En undergruppe G er af type 3 hvis $-I \notin G$, og gruppen ikke udelukkende består af rotationer, da den så ville være af type 1. Hvis vi udvælger alle isometrier $\psi \in G$, som ikke er rotationer, så med $(-I) \cdot \psi = -\psi$ opnår vi en mængde bestående af rotationer. Fra Sætning 2.2.1 ved vi at denne mængde må være en undergruppe af $SO(3, \mathbb{R})$, og det må nødvendigvis være én af grupperne benævnt i Sætning 2.1.1. Ydermere er $G^+ = G \cap SO(3, \mathbb{R})$ en undergruppe i G hvor det gælder at $[G : G^+] = 2$. Gruppen G kan bestemmes ud fra par af undergrupper $(\tilde{G}, G^+)$ ved at tilføje isometrier $-\phi$ til G^+ , hvor $\phi \in \tilde{G} \setminus G^+$.

Vi søger først blandt grupperne fra (2.1). Det vi søger efter, er par af undergrupper $(\tilde{G}, G^+)$, hvor $[\tilde{G}, G^+] = 2$. Så er $G = G^+ \cup \{-\phi \mid \phi \in \tilde{G} \setminus G^+\}$ af type 3. Ved søgning får vi listen

$$(C_2, C_1), (C_4, C_2), (C_6, C_3), (D_4, D_2), (D_6, D_3), \\ (D_2, C_2), (D_3, C_3), (D_4, C_4), (D_6, C_6) \text{ og } (O, T).$$

Her gennemgår vi ikke alle parrene, men starter med at udvælge parrene $(D_4, D_2), (D_6, D_3)$, disse kan skrives som $(D_k, D_{k/2})$ for $k = 4, 6$.

Diedergrupperne D_k er frembragt af to rotationer ψ_k og φ ,

$$\psi_k = \begin{bmatrix} \cos(\frac{2\pi}{k}) & -\sin(\frac{2\pi}{k}) & 0 \\ \sin(\frac{2\pi}{k}) & \cos(\frac{2\pi}{k}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \varphi = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Undergrupperne $D_{k/2}$ er kan frembringes på to måder, enten via $(\psi_k)^2 = \psi_{k/2}$ og φ , eller via $\varphi \cdot \psi_k$ og $\psi_{k/2}$. Vi har altså to undergrupper, vi noterer dem

$$G_1^+ = \langle \varphi, \psi_k^2 \rangle = \{I, \psi_k^{2i}, \varphi \cdot \psi_k^{2i}\}, \\ G_2^+ = \langle \varphi \cdot \psi_k, \psi_k^2 \rangle = \{I, \psi_k^{2i}, \varphi \cdot \psi_k^{2i+1}\}.$$

Dette giver to undergrupper af type 3 per par $(D_k, D_{k/2})$.

Vi husker at $D_k = \langle \varphi, \psi_k \rangle = \{\psi_k^i, \varphi \cdot \psi_k^i\}$, og får altså at

$$G_1 = \{I, \psi_k^{2i}, \varphi \cdot \psi_k^{2i}, -\psi_k^{2i+1}, -\varphi \cdot \psi_k^{2i+1}\}, \\ G_2 = \{I, \psi_k^{2i}, \varphi \cdot \psi_k^{2i+1}, -\psi_k^{2i+1}, -\varphi \cdot \psi_k^{2i+1}\}.$$

Da vi søger efter undergrupper op til konjugation vil vi nu undersøge om vi kan komme fra den ene undergruppe til den anden via konjugation. Dette bruger vi normalisatoren til

$$N_{O(E^3)}(D_k) = \{\phi \in O(E^3) \mid \phi \cdot D_k \cdot \phi^{-1} = D_k\}.$$

Normalisatoren indeholder drejningen ψ_{2k} , og den kommuterer med drejningen ψ_k .

$$\begin{aligned} \psi_{2k} \cdot \varphi \cdot \psi_{2k}^{-1} &= \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{k}) & -\sin(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ \sin(\frac{\pi}{k}) & \cos(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{k}) & \sin(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ -\sin(\frac{\pi}{k}) & \cos(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{k}) & \sin(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ \sin(\frac{\pi}{k}) & -\cos(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{k}) & \sin(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ -\sin(\frac{\pi}{k}) & \cos(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos^2(\frac{\pi}{k}) - \sin^2(\frac{\pi}{k}) & 2 \cdot \cos(\frac{\pi}{k}) \cdot \sin(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ 2 \cdot \cos(\frac{\pi}{k}) \cdot \sin(\frac{\pi}{k}) & \sin^2(\frac{\pi}{k}) - \cos^2(\frac{\pi}{k}) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\frac{2\pi}{k}) & \sin(\frac{2\pi}{k}) & 0 \\ \sin(\frac{2\pi}{k}) & -\cos(\frac{2\pi}{k}) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = (\varphi \cdot (\psi_k)^{-1}) \in D_k. \end{aligned}$$

Vi får altså at konjugation med ψ_{2k} overfører G_1 i G_2 . Vi kan derfor nøjes med at betragte den ene af G_1 og G_2 da vi søger efter undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$ op til konjugation.

Vi starter med $k = 4$, vi har at

$$D_4 = \{I, \psi_4, \psi_4^2, \psi_4^3, \varphi, \varphi \cdot \psi_4, \varphi \cdot \psi_4^2, \varphi \cdot \psi_4^3\}, \quad D_2 = \{I, \psi_4^2, \varphi, \varphi \cdot \psi_4^2\}.$$

Vi får dermed at $D_4 \setminus D_2 = \{\psi_4, \psi_4^3, \varphi \cdot \psi_4, \varphi \cdot \psi_4^3\}$, derfor har vi at den nye undergruppe bliver

$$D_{2d} = \{I, \psi_4^2, \varphi, \varphi \cdot \psi_4^2, -\psi_4, -\psi_4^3, -\varphi \cdot \psi_4, -\varphi \cdot \psi_4^3\},$$

hvor $-\psi_4$ og $-\psi_4^3$ er drejespejlinger, og $-\varphi \cdot \psi_4$ og $-\varphi \cdot \psi_4^3$ er spejlinger.

For $k = 6$ har vi at

$$\begin{aligned} D_6 &= \{I, \psi_6, \psi_6^2, \psi_6^3, \psi_6^4, \psi_6^5, \varphi, \varphi \cdot \psi_6, \varphi \cdot \psi_6^2, \varphi \cdot \psi_6^3, \varphi \cdot \psi_6^4, \varphi \cdot \psi_6^5\}, \\ D_3 &= \{I, \psi_6^2, \psi_6^4, \varphi, \varphi \cdot \psi_6^2, \varphi \cdot \psi_6^4\}. \end{aligned}$$

Vi har altså at $D_6 \setminus D_3 = \{\psi_6, \psi_6^3, \psi_6^5, \varphi \cdot \psi_6, \varphi \cdot \psi_6^3, \varphi \cdot \psi_6^5\}$, og får derfor den nye undergruppe

$$D_{3h} = \{I, \psi_6^2, \psi_6^4, \varphi, \varphi \cdot \psi_6^2, \varphi \cdot \psi_6^4, -\psi_6, -\psi_6^3, -\psi_6^5, -\varphi \cdot \psi_6, -\varphi \cdot \psi_6^3, -\varphi \cdot \psi_6^5\},$$

hvor $-\psi_6, -\psi_6^3, -\psi_6^5$ er drejespejlinger og $-\varphi \cdot \psi_6, -\varphi \cdot \psi_6^3, -\varphi \cdot \psi_6^5$ er spejlinger.

Nu betragtes parrene (D_2, C_2) , (D_3, C_3) , (D_4, C_4) og (D_6, C_6) . Generelt kan disse skrives som (D_k, C_k) , hvor $k = 2, 3, 4, 6$, og D_k er frembragt af ψ_k og φ som beskrevet før, og C_k er frembragt af ψ_k . Vi har altså at $\varphi \in D_k \setminus C_k$. Derfor sætter vi $G = C_k \cup ((-\varphi) \cdot C_k)$. Da $-\varphi$ giver et vertikalt refleksionsplan, og $|C_k|$ af dem, får vi følgende fire krystallografiske undergrupper af type 3:

$$C_{2v}, C_{3v}, C_{4v} \text{ og } C_{6v}.$$

Vi kan udlede de resterende undergrupper af type 3 på lignende måde. Det samlede resultat ses i Tabel 2.

$(\tilde{G}, G^+)$	Undergruppe	$(\tilde{G}, G^+)$	Undergruppe
(C_2, C_1)	C_s	(D_2, C_2)	C_{2v}
(C_4, C_2)	S_4	(D_3, C_3)	C_{3v}
(C_6, C_3)	C_{3h}	(D_4, C_4)	C_{4v}
(D_4, D_2)	D_{2d}	(D_6, C_6)	C_{6v}
(D_6, D_3)	D_{3h}	(O, T)	T_d

Tabel 2: De fundne par af $(\tilde{G}, G^+)$ og de tilhørende udledte undergrupper af type 3.

Der er altså 11 undergrupper af type 1, 11 undergrupper af type 2, og 10 undergrupper af type 3, vi har derfor i alt 32 krystallografiske undergrupper klassificeret op til konjugation i $O(3, \mathbb{R})$.

2.3.2 Definition (Geometrisk ækvivalens):

Lad G og G' være undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$. Hvis der eksisterer et $\varphi \in O(3, \mathbb{R})$ hvor

$$G' = \varphi \cdot G \cdot \varphi^{-1}$$

så er G og G' geometrisk ækvivalente, noteret som $G \trianglelefteq G'$.

Da vi netop har, at de 32 grupper er ækvivalente op til konjugation, så har vi at de er geometrisk ækvivalente, og vi kalder dem for geometriske krystalklasser. Geometrisk ækvivalente grupper er isomorfe, men to isomorfe grupper er ikke nødvendigvis geometrisk ækvivalente.

2.3.3 Eksempel:

Vi har fra afsnit 2.3, at C_{2h} og D_2 ikke er geometrisk ækvivalente, men de er derimod isomorfe, da de begge har orden 4, og de tre elementer som ikke er identiteten har orden 2. C_4 har også orden 4, men da C_4 indeholder et element med orden 4, er den ikke isomorf med de andre, og ej heller geometrisk ækvivalent.

Omvendt, hvis vi betragter C_2 og D_1 , så har begge grupper orden 2, og består af identiteten og en rotation med orden 2, derfor er C_2 og D_1 ikke bare isomorfe, men også konjugerede, og dermed geometrisk ækvivalente. ◀

Ved geometrisk ækvivalens har vi kun kigget på rotationsdelen af grupperne, med andre ord kun punktgrupperne. For at kunne kvalificere rumgrupperne mere præcist betragter vi nu også translationsdelen via gitre.

KAPITEL 3

Aritmetiske krystalklasser

I dette kapitel vil vi betragte gitter, og hvilke punktgrupper der virker på hvert gitter, og dermed bestemme de aritmetiske krystalklasser. Følgende kapitel er baseret på (Klemm 1982).

3.0.1 Definition (Aritmetisk ækvivalens):

Lad Γ og Γ' være to gitter i $\mathbb{R}^3$, og $H \leq \text{Sym}(\Gamma)$, $H' \leq \text{Sym}(\Gamma')$. Hvis der eksisterer en lineær isomorfi $L: \mathbb{E}^3 \mapsto \mathbb{E}^3$, hvor det gælder at

$$\Gamma' = L \cdot \Gamma \quad \text{og} \quad H' = L \cdot H \cdot L^{-1}.$$

Så kaldes H og H' aritmetisk ækvivalente, noteret som $H(\Gamma) \sim H'(\Gamma')$. (Klemm 1982).

Vi har altså at hvis to grupper er aritmetisk ækvivalente, så er de også geometrisk ækvivalente i følge (Klemm 1982, s. 143).

Inden vi begynder på at bestemme de aritmetiske krystalklasser, definerer vi gittertyper, og hvilke punktgrupper der virker på de gittertyper.

Hvilke gittertyper som punktgrupperne virker på, afhænger af hvilket krystalsystem som punktgruppen tilhører.

3.0.2 Definition (Krystalsystemer):

Triklin, Σ_1 :

- Ingen restriktioner.

Monoklin, Σ_2 :

- Én rotationsakse med orden 2 eller et spejlplan.

Orthorhombisk, Σ_{22} :

- Tre rotationsakser med orden 2 eller én rotationsakse med orden 2 og to spejlplaner.

Tetragonal, Σ_4 :

- Én rotationsakse med orden 4.

Trigonal, Σ_3 :

- Én rotationsakse med orden 3.

Hexagonal, Σ_6 :

- Én rotationsakse med orden 6.

Kubisk, Σ_c :

- Fire rotationsakser med orden 3.

Vi kan nu opdele de 32 punktgrupper vi fandt frem til i Afsnit 2.3 ind i de forskellige krystalsystemer.

Krystalsystem	Punktgrupper
Triklin, Σ_1	C_{1i}, C_1
Monoklin, Σ_2	C_2, C_{2h}, C_s
Orthorhombisk, Σ_{22}	D_2, D_{2h}, C_{2v}
Tetragonal, Σ_4	$C_4, D_4, C_{4h}, D_{4h}, S_4, C_{4v}, D_{2d}$
Trigonal, Σ_3	$C_3, D_3, C_{3i}, D_{3d}, C_{3v}$
Hexagonal, Σ_6	$C_6, D_6, C_{6h}, D_{6h}, C_{3h}, C_{6v}, D_{3h}$
Kubisk, Σ_c	T, O, T_h, O_h, T_d

Tabel 3: Krystalsystemer med deres tilhørende punktgrupper.

Alt efter hvilket krystalsystem punktgruppen ligger i, vælges forskellige gitterbaser.

3.0.3 Sætning:

Lad Γ være et gitter i det 3-dimensionelle rum, og lad $G \leq \text{Sym}(\Gamma)$. Vi noterer $\bar{G} = \langle G, -I \rangle$. Så eksisterer der lineært uafhængige vektorer $e_1, e_2, e_3 \in \Gamma$ som afhænger af krystalsystemet i G . Som kan vælges på følgende måde:

- Hvis $G \in \Sigma_1$, så danner e_1, e_2, e_3 en gitterbasis.
- Hvis $G \in \Sigma_2$, så findes en rotation i $\bar{G}$ med orden 2, og e_3 er en korteste gittervektor $\neq 0$ på den akse som rotationen definerer. Ydermere danner e_1, e_2 en plangitterbasis for $\Gamma \cap \langle e_3 \rangle^\perp$.
- Hvis $G \in \Sigma_{22}$, så findes tre rotationer i $\bar{G}$ med orden 2, og e_1, e_2, e_3 er korteste gittervektorer $\neq 0$ på akserne som rotationerne definerer.
- Hvis $G \in \Sigma_4$, så findes en rotation i $\bar{G}$ med orden 4, og e_3 er en korteste gittervektor på akse defineret af rotationen. Ydermere danner e_1, e_2 en plangitterbasis for $\Gamma \cap \langle e_3 \rangle^\perp$, hvor $\|e_1\| = \|e_2\|$ og $\angle(e_1, e_2) = 90^\circ$.
- Hvis $G \in \Sigma_3$ eller $G \in \Sigma_6$, så findes en rotation med hhv. orden 3 eller orden 6 i G , og e_3 er en korteste gittervektor på akse defineret af rotationen. Ydermere danner e_1, e_2 en plangitterbasis for $\Gamma \cap \langle e_3 \rangle^\perp$ hvor $\|e_1\| = \|e_2\|$ og $\angle(e_1, e_2) = 120^\circ$.
- Hvis $G \in \Sigma_c$, så er e_1, e_2, e_3 korteste gittervektorer $\neq 0$ på de tre rotationer med orden 2 i N , hvor N består af rotationer af orden 2 i tre ortogonale akser ($N \triangleq D_2$). Ydermere er $\|e_1\| = \|e_2\| = \|e_3\|$.

Bevis:

Ad a):

Vi vælger e_1, e_2, e_3 som $\mathbb{Z}$ -basis for Γ .

Ad b)-f):

Næste trin er at vise, at en rotationsakse altid indeholder gittervektorer $\neq 0$, og at man blandt disse kan vælge en korteste, og at det plan, der er ortogonal med rotationsaksen gennem nulpunktet, er et plan i gitteret Γ . Vi vælger en rotation $g \neq I$, $g \in \text{Sym}(\Gamma)$ og $g \cdot v = v$ for en vektor $v \neq 0$. Ydermere skal $g^m = I$.

Vi vælger et $w \in \Gamma$ hvor $w \neq \langle v \rangle^\perp$. Så er $(I + g + \dots + g^{m-1})w$ en gittervektor $\neq 0$ på akse $\langle v \rangle$ for g , da vi har at

$$(I - g)(I + g + \dots + g^{m-1})w = (I - g^m)w = 0 \cdot w = 0.$$

Dette medfører at $(I + g + \dots + g^{m-1}) \in \ker(I - g)$. Vi har at

$$\begin{aligned} \ker(I - g) &= \ker \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \\ &= \ker \left(\begin{bmatrix} I - A & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) = \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ t \end{bmatrix} \mid t \in \mathbb{R} \right\} = \langle v \rangle. \end{aligned}$$

Derudover har vi at hvis $w \in \mathbb{R}^3$ så er

$$(I - g)(w \cdot v) = w \cdot v - g(w \cdot v) = w \cdot v - gw \cdot gv = 0,$$

da g er en isometri. Dette medfører at $(I - g)\Gamma \subseteq \langle v \rangle^\perp \cap \Gamma$. Hvis $w \in \langle v \rangle^\perp \cap \Gamma$ så er $w \cdot v = 0$ og $g(w \cdot v) = gw \cdot gv = 0$ hvilket giver at $gw \in \langle v \rangle^\perp \cap \Gamma$.

Vi vælger v, w_1, w_2 som lineært uafhængige gittervektorer i Γ . Så har vi at $(I - g)\bar{w}_1, (I - g)\bar{w}_2$ er lineært uafhængige gittervektorer i $\langle v \rangle^\perp \cap \Gamma$. Hvilket giver at $\langle v \rangle^\perp \cap \Gamma$ er et gitter af dimension 2, hvori vi kan vælge en 2d-basis.

Ad d):

Lad e_1 være en korteste vektor $\neq 0$ for $N := \Gamma \cap \langle e_3 \rangle^\perp$. Hvis $A \in G$ er en rotation med orden 4, så er $e_1, A \cdot e_1$ en basis for det kvadratiske 2D-gitter N , i følge (Klemm 1982, s. 95), og $\angle(e_1, A \cdot e_1) = 90^\circ$.

Ad e):

På samme måde som i d) konkluderer vi at $e_1, D \cdot e_1$ er en basis for det hexagonale 2D-gitter $\Gamma \cap \langle e_3 \rangle^\perp$, hvor $D \in G$ er en rotation med orden 3 og $\angle(e_1, D \cdot e_1) = 120^\circ$.

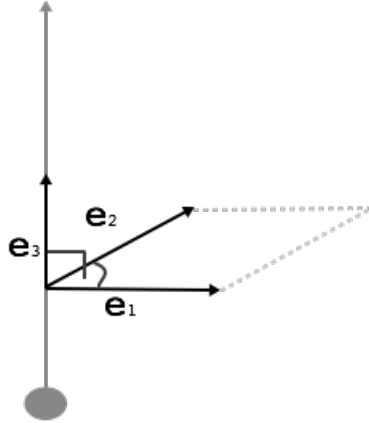
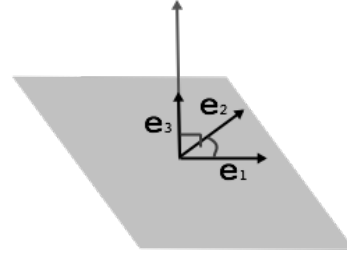
Ad f):

I G er der en cyklisk permutation R om akse $\langle e_k \rangle$. Det følger at $R \cdot e_k = \pm e_{k'}$ og $\|e_1\| = \|e_2\| = \|e_3\|$. ■

3.0.4 Eksempel:

Vi betragter gruppen C_2 , indeholdende rotationen $\psi = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$, vi har at $C_2 \in \Sigma_2$,

derfor skal vi finde en korteste gittervektor på akse defineret af ψ . Denne vektor noterer vi som e_3 , se Figur 18. Ydermere skal e_1 og e_2 danne en plangitterbasis for $\Gamma \cap \langle e_3 \rangle^\perp$, dette ses også i Figur 18.


 Figur 18: Eksempel på valg af gitter i C_2 .

 Figur 19: Eksempel på valg af gitter i C_s .

Hvis vi derimod betragter gruppen C_s , indeholdende en spejling $\varphi = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$, og $C_s \in \Sigma_2$. Denne gruppe indeholder altså ingen rotation med orden 2. Så husker vi, at e_3 skulle være på akse defineret af en rotation med orden 2 i $\bar{G} = \langle G, -I \rangle$, vi får altså at e_3 skal ligge på akse defineret af $\varphi \cdot (-I)$, som netop svarer til ψ , og akse defineret af ψ er normalvektor til spejlplanet defineret af φ . e_1 og e_2 danner dermed et plan der enten ligger i spejlplanen, eller er parallel med denne. Se Figur 19. ◀

3.0.5 Definition (Primitivt undergitter):

Gittervektorer e_1, e_2, e_3 bestemmes på samme måde som i Sætning 3.0.3, så har vi at

$$\Gamma\{G\} = \langle e_1, e_2, e_3 \rangle_{\mathbb{Z}},$$

hvor $\Gamma\{G\}$ kaldes det primitive undergitter af Γ tilhørende G .

Hvis $\Gamma\{G\} = \Gamma$ kalder vi Γ et primitivt gitter med hensyn til G , hvis $\Gamma\{G\} \subsetneq \Gamma$ kaldes Γ et centreret gitter med hensyn til G .

3.0.6 Bemærkning:

Ved et andet valg af e_1, e_2, e_3 , som i Sætning 3.0.3, fås det samme $\Gamma\{G\}$. Ydermere hvis $G(\Gamma)$ og $G'(\Gamma')$ er aritmetisk ækvivalente med en afbildning $U: \Gamma \mapsto \Gamma'$, så er $U \cdot \Gamma\{G\} = \Gamma'\{G'\}$.

Gittertyper:

Lad $\Gamma = \Gamma\{G\} = \langle e_1, e_2, e_3 \rangle_{\mathbb{Z}}$ være et primitivt gitter med hensyn til G , hvor $G \leq \text{Sym}^+(\Gamma)$ og

$$\text{Sym}^+(\Gamma) := \{G \in \text{Sym}(\Gamma) \mid \det(G) = 1\}.$$

Vi lader $a = \|e_1\|$, $b = \|e_2\|$, $c = \|e_3\|$, $\alpha = \angle(e_2, e_3)$, $\beta = \angle(e_1, e_3)$ og $\gamma = \angle(e_1, e_2)$ og betragter følgende heltalsmatricer:

$$E_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad E_2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad E_3 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$E' = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ og}$$

$$D = B^2 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Ydermere er $S = -E$, $S' = -E'$ og $S_j = -E_j$, hvor $j = 1, 2, 3$. Bemærk at E_j , hvor $j = 1, 2, 3$ er rotationer med 180° om hhv. x -aksen, y -aksen og z -aksen, og S_j , hvor $j = 1, 2, 3$ er spejlinger i hhv. yz -planen, xz -planen og xy -planen. E , S , E' og S' er drejninger om 180° , A er en rotation om z -aksen med orden 4. R er en rotation med orden 3 om linjen $x = y = z$. B og D er rotationer om z -aksen med hhv. orden 6 og 3.

Kombinerer vi disse heltalsmatricer med Sætning 3.0.3 og noterer gittertyper som F_i når en gruppe i Σ_i virker på gitteret, får vi følgende gittertyper:

- F_1 -gitter: ingen begrænsninger, $\text{Sym}^+(\Gamma) \supseteq C_1 = \{I\}$.
- F_2 -gitter: $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\text{Sym}^+(\Gamma) \supseteq \langle E_3 \rangle \triangleq C_2$.
- F_{22} -gitter: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $\text{Sym}^+(\Gamma) \supseteq \{I, E_1, E_2, E_3\} \triangleq D_2$.
- F_4 -gitter: $a = b$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $\text{Sym}^+(\Gamma) \supseteq \langle A, E_1 \rangle \triangleq D_4$.
- F_6 -gitter: $a = b$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, $\text{Sym}^+(\Gamma) = \langle B, E_1 \rangle \triangleq D_6$.
- F_c -gitter: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $\text{Sym}^+(\Gamma) = \langle R, A \rangle \triangleq O$.

For gittertyperne F_6 og F_c kan vi angive $\text{Sym}^+(\Gamma)$ præcist, da der ikke eksisterer en større endelig rotationsgruppe i de dertilhørende rumgrupper. Disse gitter kaldes hhv. hexagonalt og primitivt kubisk.

3.0.7 Sætning:

Lad e_1, e_2, e_3 være en gitterbasis valgt efter metoden beskrevet i Sætning 3.0.3, og klassificeret efter ovenstående gitterrestriktioner.

- a) Lad $\Gamma_0 = \langle e_1, e_2, e_3 \rangle_{\mathbb{Z}} \in F_2$. Hvis $v_1 = e_1$, $v_2 = e_2$, $v_3 = \frac{1}{2}(e_1 + e_2 + e_3)$ og $\Gamma = \langle v_1, v_2, v_3 \rangle_{\mathbb{Z}}$ så er $\Gamma = \Gamma_0 \cup (v_3 + \Gamma_0)$ et rumcentreret eller F_2^M -gitter. På samme måde defineres F_{22}^M -gitter, F_4^M -gitter og F_c^M -gitter.
- b) Lad $\Gamma_0 = \langle e_1, e_2, e_3 \rangle_{\mathbb{Z}} \in F_{22}$. Hvis $v_1 = \frac{1}{2}(e_2 + e_3)$, $v_2 = \frac{1}{2}(e_1 + e_3)$, $v_3 = \frac{1}{2}(e_1 + e_2)$ og $\Gamma = \langle v_1, v_2, v_3 \rangle_{\mathbb{Z}}$ så er $\Gamma = \Gamma_0 \cup \bigcup_{k=1}^3 (v_k + \Gamma_0)$ et fladecentreret eller F_{22}^F -gitter.
- c) Lad $\Gamma_0 = \langle e_1, e_2, e_3 \rangle_{\mathbb{Z}} \in F_{22}$. Hvis $v_1 = \frac{1}{2}(e_1 + e_2)$, $v_2 = \frac{1}{2}(e_1 - e_2)$, $v_3 = e_3$ og $\Gamma = \langle v_1, v_2, v_3 \rangle_{\mathbb{Z}}$ så er $\Gamma = \Gamma_0 \cup (v_1 + \Gamma_0)$ et endecentreret eller F_{22}^C -gitter.
- d) Lad $\Gamma_0 = \langle e_1, e_2, e_3 \rangle_{\mathbb{Z}} \in F_6$. Hvis $v = \frac{1}{3}(e_2 - e_1 + e_3)$ og $\Gamma = \langle e_1, e_2, v \rangle_{\mathbb{Z}}$ så er $\Gamma = \Gamma_0 \cup (v + \Gamma_0) \cup (-v + \Gamma_0)$ et 3-centreret eller F_3 -gitter. Ydermere danner vektorerne $v_1 = v - e_2$, $v_2 = v + e_1$, $v_3 = v$ en $\mathbb{Z}$ -basis for Γ , $\|v_1\| = \|v_2\| = \|v_3\|$, er alle lige lange, og to og to har de samme vinkel.

Bevis:

For bevis se (Klemm 1982) side 149. ■

Vi får altså følgende muligheder for centrerede gitre i krystalsystemerne fra Definition 3.0.2.

3.0.8 Sætning:

Lad $G \leq \text{Sym}(\Gamma)$ for et gitter Γ og lad $\Gamma \neq \Gamma\{G\}$.

- a) Hvis $G \in \Sigma_2$, så er $\Gamma \in F_2^M$.
- b) Hvis $G \in \Sigma_{22}$, så er $\Gamma \in F_{22}^C, F_{22}^F$ eller F_{22}^M .
- c) Hvis $G \in \Sigma_4$, så er $\Gamma \in F_4^M$.
- d) Hvis $G \in \Sigma_3 \cup \Sigma_6$, så er $\Gamma \in F_3$ og $G \notin \Sigma_6$.
- e) Hvis $G \in \Sigma_c$, så er $\Gamma \in F_C^F$ eller F_C^M .

Bevis:

Vi vælger kun at bevise d). For resten se side 151-152 i (Klemm 1982).

Da $G \in \Sigma_3 \cup \Sigma_6$ indeholder G en undergruppe $C_3 = \langle D \rangle$, og lad $v = z \cdot e_3 + u \in \Gamma - \Gamma_0$ hvor $z \neq 0$ og $u = -x \cdot e_1 + y \cdot e_2 \neq 0$. Vi kan antage at $|x|, |y|, |z| \leq \frac{1}{2}$. Ydermere har vi at

$$D \cdot e_1 = e_2, D \cdot e_2 = -e_1 - e_2, \text{ og } D^2 \cdot v - D \cdot v = D^2 \cdot u - D \cdot u \text{ da } D = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ og}$$

dermed fastholder $z \cdot e_3$, og flytter kun u . Derudover har vi at

$$\begin{aligned} D^2 \cdot u - D \cdot u &= \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -x \\ y \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -x \\ y \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x+y \\ x \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -y \\ -x-y \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x+2y \\ 2x+y \\ 0 \end{bmatrix} \in \Gamma, \end{aligned}$$

dvs. at $x+2y, 2x+y \in \mathbb{Z}$. Vi har altså at $3y = 2(x+2y) - (2x+y) \in \mathbb{Z}$ og dermed også $3x \in \mathbb{Z}$. Det følger at $x = y = \pm \frac{1}{3}$, de må nødvendigvis have samme fortegn for at $x+2y$ og $2x+y$ skal give et heltal. Vi har at $(E + D + D^2)v = 3z \cdot e_3 \in \Gamma$, og $z = \pm \frac{1}{3}$.

Vi får altså følgende muligheder

$$\begin{aligned} z = +\frac{1}{3} &\Rightarrow \frac{1}{3}(-e_1 + e_2 + e_3) \\ z = -\frac{1}{3} &\Rightarrow \frac{1}{3}(-e_1 + e_2 - e_3) \Rightarrow \frac{1}{3}(e_1 - e_2 + e_3). \end{aligned}$$

Hvis vi antager at $\frac{1}{3}(e_2 - e_1 + e_3), \frac{1}{3}(e_1 - e_2 + e_3) \in \Gamma$ så skal summen af dem også ligge i Γ , men summen af de to er $\frac{2}{3}e_3$ som ikke ligger i Γ og derfor må vi altså have at kun $\frac{1}{3}(e_2 - e_1 + e_3) \in \Gamma$, og at $\Gamma \in F_3$.

$$\text{Da } B = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \notin \text{Sym}(\Gamma) \text{ må vi have at } G \notin \Sigma_6. \quad \blacksquare$$

3.0.9 Bemærkning:

Vi får altså i alt 14 forskellige gitter ud fra de primitive gitter fra Sætning 3.0.3 og de centrerede gitter fra Sætning 3.0.8.

Bevis:

Vi har 6 primitive gitter, og 8 centrerede gitter. Vi viser nu at det ikke er muligt at et primitivt gitter er aritmetisk ækvivalent med et centreret gitter. Vi husker at volumen af en enhedscelle svarer til determinanten, determinanten ved Γ , i dette tilfælde, ligger i $GL(3, \mathbb{Z})$.

Det åbenlyse valg af en isomorfi, der måske ville kunne bringe os fra et centreret gitter til et primitivt gitter, ligger i $GL(3, \mathbb{R})$ med determinant ± 1 , og altså ikke i $GL(3, \mathbb{Z})$. Men er det muligt at finde en anden?

Hvis vi antager at vi har en isomorfi A hvor $A \cdot \Gamma = \Gamma'$ for to gitter Γ, Γ' med hensyn til en rumgruppe G . Så vælger vi en isomorfi $B \in GL(3, \mathbb{Z})$ hvor $B \cdot \Gamma = \Gamma'$. Men så har vi at $A \cdot \Gamma = B \cdot \Gamma$, og dermed at $(B^{-1}A) \cdot \Gamma = \Gamma$ og $(A^{-1}B) \cdot \Gamma = \Gamma$. Hvilket medfører at $B^{-1}A \in GL(3, \mathbb{Z})$ og dermed også $A \in GL(3, \mathbb{Z})$. Det er altså ikke muligt at komme fra et centreret gitter over i et primitivt, eller omvendt, via konjugation, og dermed får vi at der netop er 14 forskellige gitter. ■

Vi husker fra Definition 3.0.1 at aritmetisk ækvivalens bedømmes ud fra par af punktgrupper og et dertilhørende gitter. Vi har altså, at en punktgruppe kun virker på et gitter i samme krystalsystem. Dette giver i alt 73 aritmetiske krystalklasser. De 73 klasser og hvordan man kommer frem til dem er beskrevet i (Klemm 1982) side 152 og 153.

Affine krystalklasser

KAPITEL 4

I dette kapitel vil vi skitsere metoden til at klassificere affine krystallasser. Følgene kapitel er baseret på (Strebel 2010) og (Hiller 1986).

4.0.1 Definition (Affin ækvivalens):

Rumgrupperne G og G' i $\text{Iso}(\mathbb{E}^3)$ siges at være affint ækvivalente hvis der eksisterer en bijektiv affin afbildning $\alpha: \mathbb{E}^3 \mapsto \mathbb{E}^3$, hvor det gælder at

$$G' = \alpha \cdot G \cdot \alpha^{-1} = \{\alpha \cdot \psi \cdot \alpha^{-1} \mid \psi \in G\}.$$

Hvis det er muligt at vælge en orienteringsbevarende α , kaldes G og G' egentlig affin ækvivalente.

4.0.2 Bemærkning:

Hvis G og G' er affint ækvivalente, er G og G' isomorfe.

En affin afbildning $\alpha: \mathbb{E}^n \mapsto \mathbb{E}^n$ er en sammensætning af en lineær afbildning L og en translation v , en rumgruppe består derimod af isometrier.

Hvis $\alpha = (u, L)$ er en bijektiv affin afbildning, vil $\alpha \cdot G \cdot \alpha^{-1}$ ikke altid være en rumgruppe, men hvis det er en rumgruppe, så får vi at

$$\begin{aligned}(u, L) \cdot (v, \psi) \cdot (u, L)^{-1} &= (u + L(v), L\psi) \cdot (-L^{-1}(u), L^{-1}) \\ &= (u + L(v) - L\psi L^{-1}(u), L\psi L^{-1}),\end{aligned}$$

og $L\psi L^{-1}$ skal være ortogonalt for enhver ortogonal afbildning $\psi \in G_0$. Hvilket giver at $LG_0L^{-1} \leq O(3, \mathbb{R})$.

4.0.3 Sætning (Bieberbachs anden sætning):

Lad G og G' være krystallografiske grupper. G og G' er affint ækvivalente hvis og kun hvis de er isomorfe.

(Bieberbach 1912).

Vi har altså nu, at hvis to grupper er isomorfe så er de affin ækvivalente, hvilket medfører at de også er aritmetisk ækvivalente, og derudover er deres punktgrupper geometrisk ækvivalente.

Hvis G er en rumgruppe, har vi at G er med i en eksakt følge af homomorfier

$$1 \rightarrow \Gamma \xrightarrow{i} G \xrightarrow{f} G_0 \rightarrow 1,$$

hvor Γ er en translationsgruppe og dermed en fri abelsk gruppe, G_0 er en punktgruppe, og er en endelig gruppe, og G_0 virker på Γ . Det at Γ , G og G_0 passer ind i en eksakt følge giver en metode til at klassificere rumgrupper i en given krystalklasse. Gitteret Γ sammen med G_0 og virkningen af G_0 på Γ danner rumgrupper i en given krystalklasse, noteret som (G_0, Γ) . Vi ønsker at klassificere rumgrupper op til affin ækvivalens.

Ud fra Sætning 1.5.8 kan vi antage at $G \subset \mathbb{R}^3 \rtimes O(3, \mathbb{R})$ og at afbildningen $f: G \mapsto G_0$ er en projektion på $O(3, \mathbb{R})$. Antag at $\tau: G_0 \mapsto G$ er et snit til afbildningen f . Dette betyder at for ethvert element g i G_0 , så er $f(\tau(g)) = g$. Så har vi at $\tau(g) = (\sigma(g), g)$ for et snit $\sigma: G_0 \mapsto \mathbb{R}^3$.

Det er muligt at vælge $\sigma(g)$ til ethvert element i Γ , men for nogle elementer $g \in G$ vil $\sigma(g)$ ikke give et element i Γ , f.eks. hvis g er en glidespejling. Sådan et snit σ er ikke entydigt, vi kan løse dette ved at lave en komposition med den naturlige projektion $\pi: \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3/\Gamma$, så får vi en afbildning $s = \pi \circ \sigma$ hvor $s: G_0 \mapsto \mathbb{R}^3/\Gamma$ og s er veldefineret, hvilket ses ved følgende:

Hvis vi antager at $\sigma': G_0 \mapsto \mathbb{R}^3$ er et andet snit, så har vi at

$$\begin{aligned} (\sigma'(g), g) \cdot (\sigma(g), g)^{-1} &= (\sigma'(g), g) \cdot (-g^{-1}(\sigma(g)), g^{-1}) \\ &= (\sigma'(g) - gg^{-1}\sigma(g), gg^{-1}) \\ &= (\sigma'(g) - \sigma(g), I) \in G. \end{aligned}$$

Vi må have at $\sigma'(g) - \sigma(g) \in \Gamma$ og at $\pi(\sigma'(g) - \sigma(g)) = 0$ og dermed at $\pi(\sigma'(g)) = \pi(\sigma(g))$. Dermed er s veldefineret.

Vi har altså at s er uafhængig af valget af σ . Vi får følgende resultat.

4.0.4 Proposition:

Lad $s: G_0 \mapsto \mathbb{R}^3/\Gamma$, så opfylder s følgende betingelser:

- (i) $s(I) = 0$, hvor 0 betegner nulsideklassen.
- (ii) $s(xy) = s(x) + x \cdot s(y)$.

Bevis:

Betingelse (i) sikrer at identitetselementet $(0, I)$ ligger i G . For at vise (ii) bemærker vi at G_0 virker på $\mathbb{R}^3/\Gamma$ da Γ er invariant under G_0 , dermed får vi at

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

De to betingelser (i) og (ii) kaldes for cocykel betingelser og s er en 1-cocykel. De to betingelser leder til følgende.

4.0.5 Korollar:

Lad s være en cocykel der opfylder de to betingelser i Proposition 4.0.4, og $g \in G_0$, så er

$$s(g^{-1}) = -g^{-1}s(g).$$

Bevis:

Vi anvender betingelse (i) og (ii) fra Proposition 4.0.4 og får at

$$0 = s(I) = s(gg^{-1}) = s(g) + g \cdot s(g^{-1}).$$

For at $s(g) + g \cdot s(g^{-1}) = 0$ må vi have at $s(g^{-1}) = -g^{-1} \cdot s(g)$, da vi så har at

$$s(g) + g \cdot s(g^{-1}) = s(g) - gg^{-1} \cdot s(g) = 0. \quad \blacksquare$$

Mængden af alle 1-cocykler danner en abelsk gruppe, da $\mathbb{R}^3/\Gamma$ er abelsk, og noteres $Z^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$.

Proceduren med at finde en 1-cocykel ud fra en gruppe G er reversibel, dvs. vi kan konstruere G ud fra en 1-cocykel ved at anvende følgende

$$G = \{(\sigma(g) + m, g) \mid g \in G_0, m \in \Gamma\},$$

hvor $\sigma: G_0 \mapsto \mathbb{R}^3$ er et vilkårligt snit således at $\pi \circ \sigma = s$. Inden vi går videre tjekker vi om G er en gruppe. Da $G \leq \text{Iso}(\mathbb{E}^n)$ tjekkes om identitetsselementet $(0, I) \in \text{Iso}(\mathbb{E}^n)$ også ligger i G .

Vi har fra cocykel betingelserne at $s(I) = 0$, da 0 er identitetsselementet i Γ må der gælde at $\sigma(I) \in \Gamma$, og dermed at $(0, I) = (\sigma(I) + (-\sigma(I)), I) \in G$.

Nu tjekkes om G er lukket under invers. Vi antager at $(\sigma(g) + m, g) \in G$. g er invertibel da $g \in G_0$, og $\sigma(g) + m \in \Gamma$ er også invertibel, dermed er $(\sigma(g) + m, g)$ invertibel i $\text{Iso}(\mathbb{E}^3)$ med invers $(-g^{-1}(\sigma(g) + m), g^{-1}) = (\sigma(g^{-1}) + n, g^{-1})$, hvor $n \in \Gamma$.

Nu tjekkes om G er lukket under multiplikation.

Vi antager at $(\sigma(g_1) + m_1, g_1), (\sigma(g_2) + m_2, g_2) \in G$. Så har vi at

$$\begin{aligned} (\sigma(g_1) + m_1, g_1) \cdot (\sigma(g_2) + m_2, g_2) &= (\sigma(g_1) + m_1 + g_1(\sigma(g_2) + m_2), g_1g_2) \\ &= (\sigma(g_1) + g_1(\sigma(g_2)) + m_1 + g_1m_2, g_1g_2) \\ &= (\sigma(g_1g_2) + m_1 + g_1m_2, g_1g_2). \end{aligned}$$

Vi har at $m_1 \in \Gamma$ og $g_1m_2 \in \Gamma$, derfor er venstresiden på formen $\sigma(g) + m$. Vi har ydermere at $g_1g_2 \in G_0$, og dermed har vi at $(\sigma(g_1g_2) + m_1 + g_1m_2, g_1g_2) \in G$. Vi får altså at $G \leq \text{Iso}(\mathbb{E}^3)$.

Så fremfor at klassificere rumgrupper kan vi nøjes med at klassificere 1-cocykler, dvs. funktioner der opfylder cocykel betingelserne.

Ifølge Sætning 4.0.3 kan isomorfi blandt rumgrupper findes via konjugation med en affin afbildning. Vi vil nu undersøge hvad der sker med en 1-cocykel under sådan en konjugation. En affin afbildning består af en sammensætning af en translation (a, I) , hvor $a \in \mathbb{R}^3$, og en lineær afbildning $(0, L)$, hvor $L \in \text{GL}(\mathbb{R}^3)$. Dermed kan vi betragte hvordan konjugation med dem separat ændrer en 1-cocykel.

Vi starter med at antage, at $a \in \mathbb{R}^3$ og at 1-cocyklen s er frembragt fra $\sigma: \mathbb{R}^3 \mapsto \Gamma$. Så har

vi at

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

Vi har altså fået tilføjet en ekstra 1-cocykel på formen $b_a(g) = \alpha - g(\alpha)$, hvor $\alpha = a \pmod{\Gamma}$. Vi tjekker nu at b_a opfylder cocykel betingelserne fra Proposition 4.0.4:

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

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

1-cocykler af denne form kaldes 1-cocycle, de danner en undergruppe af $Z^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$, noteret som $B^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$. Da både $Z^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$ og $B^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$ er abelske, er det klart at $B^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$ er en normal undergruppe til $Z^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$.

Vi har nu at alle rumgrupper svarende til en 1-cocykel s samt $s + t$, hvor t er en vilkårlig 1-cocycle, er isomorfe og dermed ækvivalente ifølge Sætning 4.0.3. Elementer i kvotientgruppen $Z^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)/B^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$ svarer derfor til rumgrupper som kan overføres i hinanden ved en translation. Kvotientgruppen noteres $H^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$ og kaldes den 1-dimensionelle cohomologigruppe for G_0 med koefficienter i $\mathbb{R}^3/\Gamma$.

Vi mangler nu bare at tjekke effekten af konjugation med en lineær afbildning $(0, L)$ hvor $L \in \text{GL}(\mathbb{R}^3)$. Vi får udregningen:

$$\begin{aligned}
(0, L) \cdot (\sigma(g), g) \cdot (0, L)^{-1} &= (0, L) \cdot (\sigma(g), g) \cdot (0, L^{-1}) \\
&= (L(\sigma(g)), Lg) \cdot (0, L^{-1}) \\
&= (L(\sigma(g)), LgL^{-1}).
\end{aligned}$$

For at dette kan svare til en 1-cocykel i krystalklassen (G_0, Γ) , skal L bevare både Γ og G_0 , vi skal altså have at $L \cdot G_0 \cdot L^{-1} = G_0$ og $L(\Gamma) = \Gamma$. Det betyder at $L \in N(G_0, \Gamma)$, og $N(G_0, \Gamma)$ virker på $H^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$. Hvis det er tilfældet at $L \in N(G_0, \Gamma)$ så giver udregningen en cocykel $s_L: G_0 \mapsto \mathbb{R}^3/\Gamma$ hvor $s_L(g)$ er givet ved venstresiden af $(L(\sigma(g')), Lg'L^{-1})$ med $Lg'L^{-1} = g$, hvilket giver at $g' = L^{-1}gL$. Vi har altså at $s_L(g) = L(s(L^{-1}gL))$, og s og s_L bestemmer affint ækvivalente rumgrupper, da banerne svarer til isomorfiklasser af rumgrupper i krystalklassen (G_0, Γ) . Hvilket leder til følgende resultat.

4.0.6 Sætning (Hovedsætning i Matematisk Krystallografi):

Der er en én-til-én korrespondance mellem rumgrupper i de aritmetiske krystalklasser (G_0, Γ) og banerne af normalisatoren $N(G_0, \Gamma)$ der virker på $H^1(G_0, \mathbb{R}^3/\Gamma)$.

Sætning 4.0.6 viser sig at være meget brugbar til at klassificere krystalstrukturer, og til at finde ud af hvor mange forskellige der er. Man vil finde, at for rumgrupper er der 219 affine krystalklasser eller 230 egentlig affine krystalklasser. Se kapitel 14 i (Klemm 1982).

Næste trin ville være at give et eksempel på metoden for at klassificere de affine krystalklasser.

Konklusion

Formålet med dette speciale var at undersøge krystaller ud fra deres symmetrier, og ved hjælp af dette klassificere rumgrupper.

Vi startede ud med at bestemme de endelige undergrupper af $O(3, \mathbb{R})$, vi fandt at der i alt var 32 krystallografiske undergrupper, som var klassificeret op til konjugation, og vi fandt dermed at der var 32 geometriske punktgrupper. Derefter giv vi videre til at betragte gitter og fandt at der var 6 primitive gitter og 8 centrerede gitter, og det var ikke muligt at komme fra et primitivt gitter til et centreret gitter via konjugation, vi fandt altså i alt 14 gitter. Derefter opdelte vi gitterne og punktgrupperne i krystalsystemer, og en punktgruppe virker kun på et gitter fra samme krystalsystem, ud fra dette fandt vi at der er 73 aritmetiske krystalklasser. Derefter skitserede vi metoden til klassificering af rumgrupper, hvis to rumgrupper er affint ækvivalente sige de at være i samme krystalklasse. Vi fandt at man kunne klassificere rumgrupper op til isomorfi, da Bieberbach har vist at to rumgrupper er affint ækvivalente hvis og kun hvis de er isomorfe. Dette giver 219 affine krystalklasser eller 230 egentlig affine krystalklasser.

Bibliografi

- Armstrong, M. A. (1988). *Groups and Symmetry*. Springer-Verlag New York.
- Bieberbach, Ludwig (1912). „Über die Bewegungsgruppen der Euklidischen Räume - Zweite Abhandlung“. I: *Mathematische Annalen* 72, s. 400–412.
- Devisscher, Maud (2011). *Classification of finite rotation groups*. Sidst tjekket 27. februar 2018. URL: http://www.staff.city.ac.uk/maud.devisscher.1/GS/classif_rotation.pdf.
- Engel, Peter (1986). *Geometric Crystallography - An Axiomatic Introduction to Crystallography*. First. D. Reidel Publishing Company - Dordrecht.
- Hiller, Howard (1986). „Crystallography and Cohomology of Groups“. I: *The American Mathematical Monthly* 93.10, s. 765–779.
- Klemm, Michael (1982). *Symmetrien von Ornamenten und Kristallen*. Springer-Verlag Berlin.
- Parkin, Ivan P. og Troy D. Manning (2006). „Intelligent Thermochromic Windows“. I: *Journal of Chemical Education* 83.3, s. 393–400.
- Strebel, Ralph (2010). *Vorlesung über Kristallographische Gruppen*. Sidst besøgt 11. april 2018. URL: <http://www2.math.uni-wuppertal.de/~volkert/Kristallographische%20Gruppen.pdf>.