

Ralph Strebel

---

**Vorlesung über  
Kristallographische Gruppen**

---

Feldis im September 2010



---

## Vorwort

---

Im Herbst des Jahres 2004 führte die Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Universität Freiburg im Üechtland neue Studienpläne im Rahmen der Bologna-Reform ein. Diese Studienreform betraf auch die Ausbildung der Lehramtskandidaten der SI, für deren Mathematik-Ausbildung ich verantwortlich war. Der neue Studienplan bewirkte, dass ich im Studienjahr 2004/5 keine Vorlesungen für Lehramtskandidaten hielt und statt dessen eine 4-stündige Vorlesung mit Übungen für Studentinnen und Studenten der Mathematik anbieten konnte. Als Gegenstand wählte ich die Theorie der Kristallographischen Gruppen, ein Thema, über das ich schon viele Jahre zuvor vorgetragen hatte: im Wintersemester 1984/5 als Privat-Dozent in Heidelberg und im anschließenden Sommersemester als Vertreter von Herrn Prof. Dr. Urs Stambach an der ETH in Zürich.

Für meine Vorlesung schrieb ich ein Skript, das ich im Sommersemester 2005, einem Weiterbildungssemester, etwas vervollständigte. In den vergangenen Tagen habe ich den  $\LaTeX$ -Code dieses vervollständigten Skripts überarbeitet, eine Titelseite und ein Vorwort dem Skript vorangestellt, Tippfehler korrigiert und unaufgelöste Verweise, die mir der Rechner meldete, berichtigt.

Feldis, 27. September 2010



---

# Inhaltsverzeichnis

---

<b>Vorwort</b>	<b>iii</b>
<b>A Einleitung</b>	<b>1</b>
A1 Kristallstrukturen und ihre Symmetriegruppen . . . . .	1
1.1 Beispiele von Kristallstrukturen . . . . .	1
1.1a Kristallstrukturen vom Typ CsCl . . . . .	1
1.1b Kristallstrukturen vom Typ NaCl . . . . .	2
1.1c Kristallstruktur des Minerals <i>Carnegieit</i> . . . . .	3
1.2 Symmetriegruppen von Kristallstrukturen . . . . .	3
1.2a Symmetrien von Ornamenten – eine Illustration . . . . .	3
1.2b Begriff der Raumgruppe . . . . .	4
1.2c Raumgruppe der Kristallstruktur von Rutil . . . . .	6
1.3 Affine Äquivalenz von Symmetriegruppen . . . . .	7
1.3a Ähnlich äquivalente Teilmengen . . . . .	8
1.3b Affin äquivalente Raumgruppen . . . . .	9
A2 Inhalt und Aufbau der Vorlesung . . . . .	9
2.1 Bemerkungen zu den Grundlagen . . . . .	10
2.2 Bemerkungen zu den Hauptresultaten . . . . .	10
2.3 Bemerkungen zu den Klassifikationen . . . . .	10
<b>B Grundlagen</b>	<b>11</b>
B3 Isometrien eines Euklidischen Vektorraumes . . . . .	11
3.1 Begriff der Isometrie . . . . .	11
3.1a Die Gruppe der Isometrien $\text{Iso}(\mathbb{E})$ . . . . .	11
3.1b Einige Beispiele . . . . .	12
3.1c Isometrien und orthogonale Abbildungen . . . . .	13
3.2 Algebraische Eigenschaften der Gruppe $\text{Iso}(\mathbb{E})$ . . . . .	13
3.2a Formelsammlung . . . . .	13
3.2b Parametrisierung der Gruppe $\text{Iso}(\mathbb{E})$ . . . . .	15
3.2c Begriff der Punktgruppe . . . . .	15
3.3 Isometrien und Spiegelungen . . . . .	16
3.3a Hauptresultat . . . . .	16
B4 Gitter in Euklidischen Räumen . . . . .	19
4.1 Begriff des Gitters und seiner Automorphismengruppe . . . . .	19
4.1a Kennzeichnung der Gitter . . . . .	19
4.1b Endlichkeit der Automorphismengruppe . . . . .	22
4.1c Minimalmenge eines Gitters . . . . .	22
4.2 Kubische Gitter . . . . .	23
4.2a Minimalmenge . . . . .	23
4.2b Automorphismengruppe . . . . .	24
4.2c Spiegelungsgruppen vom Typus $B$ . . . . .	24

4.3	Minimalfolgen . . . . .	25
4.3a	Begriff der Minimalfolge . . . . .	25
4.3b	Allgemeine Eigenschaften . . . . .	26
4.3c	Zusätzliche Eigenschaften für $n \leq 4$ . . . . .	27
4.4	Innenzentrierte kubische Gitter . . . . .	28
4.4a	Minimalmenge . . . . .	29
4.4b	Automorphismengruppe . . . . .	30
4.5	Anhang: Die Hurwitzschen ganzen Quaternionen . . . . .	31
4.5a	Einige Definitionen . . . . .	32
4.5b	Die Unteralgebra $\mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$ und ihr Teiltring $\mathbb{H}_{\mathbb{Z}}$ . . . . .	32
4.5c	Hurwitzscher Begriff der ganzen Quaternion . . . . .	33
4.5d	Zahlentheorie des Ringes der ganzen Quaternionen . . . . .	36
B5	Kristallographische Gruppen . . . . .	47
5.1	Begriff der kristallographischen Gruppe . . . . .	47
5.1a	Definition und erste Beispiele . . . . .	47
5.1b	Endlichkeit der Punktgruppe . . . . .	48
5.1c	Kennzeichnung der Translationsuntergruppe . . . . .	49
5.2	Affine Äquivalenz von kristallographischen Gruppen . . . . .	50
5.2a	Anforderungen aus der Kristallographie . . . . .	51
5.2b	Begriff der affinen Äquivalenz . . . . .	52
5.2c	Arithmetische und geometrische Äquivalenz . . . . .	52
5.3	Anzahl der affinen Äquivalenzklassen . . . . .	54
5.3a	Das Ergebnis von Schoenflies . . . . .	54
5.3b	Das 18. Problem von Hilbert . . . . .	57
5.3c	Resultate von Bieberbach . . . . .	58
5.4	Anhang: Enantiomorphe Klassen . . . . .	58
5.4a	Aufspaltung von geometrischen Kristallklassen – Resultate . . . . .	59
5.4b	Beispiele von enantiomorphen geometrischen Klassen . . . . .	62
5.4c	Aufspaltung von arithmetischen Kristallklassen – Resultate . . . . .	64
5.4d	Beispiele von enantiomorphen arithmetischen Klassen . . . . .	65
5.4e	Aufspaltung der affinen Äquivalenzklassen – Resultate . . . . .	68
5.4f	Aufspaltung der affinen Äquivalenzklassen – Beispiele . . . . .	68
<b>C</b>	<b>Allgemeine Resultate</b> . . . . .	<b>69</b>
C6	Kennzeichnungen . . . . .	69
6.1	Kennzeichnung der arithmetischen Kristallklassen . . . . .	69
6.1a	Konstruktion einer Hilfsabbildung . . . . .	70
6.1b	Formulierung und Beweis der Kennzeichnung . . . . .	71
6.1c	Konstruktion eines invarianten Skalarproduktes . . . . .	72
6.2	Erste Kennzeichnung der geometrischen Kristallklassen . . . . .	74
6.2a	Konjugation von orthogonalen Untergruppen . . . . .	74
6.2b	Folgerung für die geometrische Klassen . . . . .	75
6.2c	Geometrische Kristallklassen des $\mathbb{R}^3$ . . . . .	76
6.3	Zweite Kennzeichnung der geometrischen Kristallklassen . . . . .	77
6.3a	Formulierung und Beweis der Kennzeichnung . . . . .	77
6.3b	Arithmetische versus geometrische Äquivalenz . . . . .	78
6.4	Erster Satz von Bieberbach . . . . .	79
6.4a	Metrisierung der Gruppe $\text{Iso}(\mathbb{E})$ . . . . .	79

	6.4b	Beweis des ersten Satzes von Bieberbach . . . . .	81
	6.4c	Bemerkung zur Strategie des Beweises . . . . .	86
C7		Endlichkeitssätze . . . . .	92
	7.1	Endlichkeit der Menge der geometrischen Kristallklassen . . . . .	92
	7.1a	Uniforme Schranken der Ordnungen von Punktgruppen . . . . .	92
	7.1b	Endlichkeit der Menge der geometrischen Kristallklassen . . . . .	94
	7.2	Endlichkeit der arithmetischen Kristallklassen . . . . .	95
	7.2a	Normalisierung von Gittern . . . . .	95
	7.2b	Normen der Vektoren einer $\mathbb{Z}$ -Basis eines normalisier- ten Gitters . . . . .	97
	7.2c	Abschätzung der Koeffizienten der Automorphismen eines normalisierten Gitters . . . . .	98
	7.2d	Endlichkeit der Anzahl der arithmetischen Kristall- klassen . . . . .	101
	7.3	Endlichkeit der Menge der affinen Äquivalenzklassen . . . . .	101
	7.3a	Algebraische Vorbemerkungen . . . . .	102
	7.3b	Frobeniussche Kongruenzen . . . . .	102
	7.3c	Beweis der Endlichkeit der Menge der affinen Äquiva- lenzklassen . . . . .	104
	7.3d	Explizite Schranken der Anzahl der affinen Klassen . . . . .	105
	7.4	Dritter Bieberbachscher Satz . . . . .	107
	7.5	Anhang: Elemente der Darstellungstheorie . . . . .	109
	7.5a	Grundbegriffe der Theorie . . . . .	110
	7.5b	Äquivalente rationale Darstellungen und geometrische Kristallklassen . . . . .	111
	7.5c	Darstellungen der symmetrischen Gruppe $S_4$ . . . . .	112
C8		Konstruktion von kristallographischen Gruppen . . . . .	115
	8.1	Aufspaltung der geometrischen Kristallklassen . . . . .	115
	8.1a	Prinzip des geometrischen Verfahrens . . . . .	116
	8.1b	Parametrisierung der arithmetischen Klassen . . . . .	116
	8.1c	Klassifikation der arithmetischen Klassen . . . . .	118
	8.2	Algebraisierung des Lösens der Kongruenzen von Frobenius . . . . .	121
	8.2a	Derivationen und die Kohomologiegruppe $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ . . . . .	121
	8.2b	Wirkung des Normalisators auf $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ . . . . .	122
	8.2c	Berechnung der Gruppen $\text{Der}(H, M)$ und $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ . . . . .	123
	8.3	Anwendung auf zyklische Punktgruppen . . . . .	126
	8.3a	Spezialfall, in dem 1 nicht Eigenwert der erzeugenden Abbildung ist . . . . .	126
	8.3b	Zyklische Gruppen – allgemeiner Fall . . . . .	128
	8.4	Anwendung auf orthogonale Punktgruppen . . . . .	133
	8.4a	Berechnung der Cohomologiegruppe . . . . .	133
	8.4b	Wirkung des Normalisators . . . . .	134
	8.4c	Graphentheoretische Interpretation der affinen Äqui- valenzklassen . . . . .	136
	8.4d	Bestimmung der affinen Äquivalenzklassen für $n = 3$ . . . . .	137
	8.4e	Illustration durch Kristallstrukturen . . . . .	137
<b>D Ausgewählte Klassifikationen</b>			<b>139</b>
D9		Klassifikation der Ornamentgruppen . . . . .	140
	9.1	Bestimmung der Kristallklassen der Ebene . . . . .	140

	9.1a	Ähnlichkeitsklassen der ebenen Gitter . . . . .	140
	9.1b	Geometrische Klassen der Ebene . . . . .	140
	9.1c	Arithmetische Klassen der Ebene . . . . .	143
	9.2	Bestimmung der Ornamentgruppen . . . . .	145
	9.2a	Punktgruppen ohne Spiegelungen . . . . .	145
	9.2b	Punktgruppen mit Spiegelungen . . . . .	145
	9.2c	Liste der affinen Typen von Ornamentgruppen . . . . .	145
	9.3	Anwendung auf Ornamente . . . . .	145
	9.4	Anwendung auf Pflasterungen . . . . .	145
	9.5	Anhang: Verallgemeinerung der ebenen Gittertypen . . . . .	145
D10		Geometrische Kristallklassen des $\mathbb{E}^3$ . . . . .	121
	10.1	Endliche Untergruppen der Gruppe $SO(\mathbb{E}^3)$ . . . . .	121
	10.1a	Herleitung einer numerischen Beziehung . . . . .	122
	10.1b	Gruppen, deren Polmenge zwei Bahnen hat . . . . .	122
	10.1c	Gruppen, deren Polmenge aus drei Bahnen besteht . . . . .	122
	10.1d	Gruppen mit Parametern $(n_1, n_2, n_3) = (2, 2, 2)$ . . . . .	124
	10.1e	Gruppen mit Parametern $(n_1, n_2) = (2, 2)$ und $n_3 > 2$ . . . . .	124
	10.1f	Gruppen mit Parametern $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 3)$ . . . . .	125
	10.1g	Gruppen mit Parametern $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 4)$ . . . . .	125
	10.1h	Gruppen mit Parametern $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 5)$ . . . . .	126
	10.1i	Liste der geometrischen Kristallklassen in $SO(\mathbb{E}^3)$ . . . . .	126
	10.2	Endliche Untergruppen der orthogonalen Gruppe $O(E^3)$ . . . . .	128
	10.2a	Endliche Untergruppen von $O(\mathbb{E})$ bei ungerader Dimension des Raumes . . . . .	129
	10.2b	Endliche Untergruppen der zweiten Art . . . . .	130
	10.2c	Endliche Untergruppen der dritten Art . . . . .	131
	10.2d	Liste der 32 geometrischen Kristallklassen . . . . .	134
	10.3	Diskussion der Liste der geometrischen Kristallklassen . . . . .	135
	10.3a	Verband der Untergruppen eines Vertreters der Klasse $O_h$ . . . . .	136
	10.3b	Verband der Untergruppen eines Vertreters der Klasse $D_{6h}$ . . . . .	137
	10.3c	Bravais'sche arithmetische Klassen und Holoedrien . . . . .	138
	10.4	Begriff des Kristallsystems . . . . .	139
	10.5	Begriff der Kristallform . . . . .	139
D11		Arithmetische Kristallklassen des $\mathbb{E}^3$ und $\mathbb{E}^4$ . . . . .	140
	11.1	Bestimmung der maximalen arithmetischen Kristallklassen . . . . .	140
	11.1a	Bestimmung der maximalen arithmetischen Klassen – Strategie . . . . .	140
	11.1b	Maximale Untergruppen von $GL(3, \mathbb{Z})$ . . . . .	143
	11.2	Bestimmung der arithmetischen Klassen des $\mathbb{E}^3$ . . . . .	143
	11.3	Maximale Untergruppen von $GL(4, \mathbb{Z})$ . . . . .	143
	11.3a	Graphische Teilmengen . . . . .	143
	11.3b	Eine Liste von Graphen . . . . .	143
	11.4	Liste der maximalen Untergruppen . . . . .	143
	11.5	Bestimmung der arithmetischen Klassen des $\mathbb{E}^4$ . . . . .	143
D12		Interessante Gitter . . . . .	144
	12.1	Gitter vom Typus $D_n$ . . . . .	144
	12.1a	Minimalmenge eines Gitters vom Typus $D_n$ . . . . .	144

---

12.1b	Automorphismengruppe eines Gitters vom Typus $D_n$	145
12.1c	Gleichheit der Automorphismengruppen für $n \neq 4$	147
12.1d	Der Ausnahmefall $n = 4$	149
12.1e	Wurzelsystem vom Typus $D_n$	150
12.2	Wurzelsystem des Typs $A_\ell$	150
12.3	Wurzelsystem des Typs $E_8$	150
Literaturangaben		151



---

# A Einleitung

---

Die *Geometrische Kristallographie* hat zum Ziel, die räumliche Verteilung der Atome, Ionen oder Moleküle eines Kristalls nach ihren Symmetrien zu klassifizieren. Um diese Klassifikation eindeutig zu machen, muss man festlegen, welche räumlichen Verteilungen und welche Isometrien des Raumes zugelassen sind, und wann die Symmetriegruppen von zwei Kristallstrukturen als gleichwertig zu betrachten sind. Der Mathematiker A. M. SCHOENFLIES (1853–1928) traf in seinem 1891 erschienenen Buch *Krystallsysteme und Krystallstruktur* die Festsetzungen, die heute noch in der Kristallographie üblich sind: als Anordnung wird jedes *regelmässige* Punktsystem  $\mathcal{P}$  zugelassen, also jede endliche Vereinigung von Punktgittern; jede Isometrie des Raumes, die  $\mathcal{P}$  auf sich abbildet, gilt als Symmetrie von  $\mathcal{P}$ ; zwei Symmetriegruppen  $G, G'$  sind gleichberechtigt, wenn sie *eigentlich-affin äquivalent* sind, das heisst, wenn es eine *orientierungserhaltende affine* Transformation  $\alpha$  des Raumes gibt, derart dass  $G'$  gleich  $\alpha \circ G \circ \alpha^{-1}$  ist.

## A1 Kristallstrukturen und ihre Symmetriegruppen

In diesem Abschnitt werden die Begriffe der Kristallstruktur und der Symmetriegruppe einer Kristallstruktur eingeführt und durch Beispiele veranschaulicht.

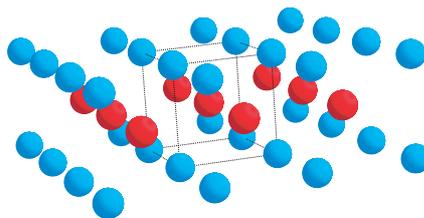
DEFINITION A1.1 Die räumliche Anordnung der Atome oder Ionen eines (idealisierten) Kristalles bezeichnet man als *Struktur* des Kristalles.

### 1.1 Beispiele von Kristallstrukturen

Ein Kristall besteht im einfachsten Fall aus gleichartigen Atomen, deren Positionen ein *Punktgitter* bilden. Im allgemeinen aber ist seine Struktur komplizierter; dies werden die folgenden Beispiele klar machen.

#### 1.1a Kristallstrukturen vom Typ CsCl

Die erste Figur zeigt einen sehr kleinen Ausschnitt der Anordnung der Ionen in einem Kristall der Verbindung *Caesiumchlorid*.

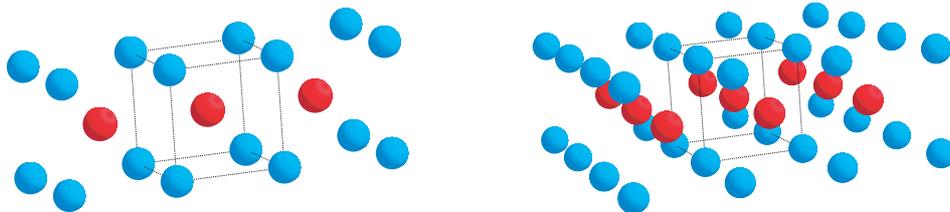


Das perspektivische Bild lässt eine grosse Regelmässigkeit erahnen; es erlaubt es aber nicht, die genaue Anordnung der Ionen abzulesen. Wir betrachten daher die Ionen einer Einheitszelle:



Bei der im Bild gewählten Einheitszelle bilden die Chlor-Ionen die Ecken eines Würfels und das Caesium-Ion besetzt dessen Mittelpunkt.

Der Kristall entsteht aus der Einheitszelle durch Translationen in drei paarweise orthogonale Richtungen. Die Chlor-Ionen bilden deshalb ein kubisches Punktgitter; ebenso ergeben die Caesium-Ionen ein kubisches Punktgitter. Diese Einsicht verdeutlicht die folgende Abbildung:



### 1.1b Kristallstrukturen vom Typ NaCl

Ich beginne die Diskussion der Kristallstruktur des Steinsalzes mit der Anordnung der Chlor-Ionen in einer Elementarzelle; sie ist im linken Teil des folgenden Bildes zu sehen:



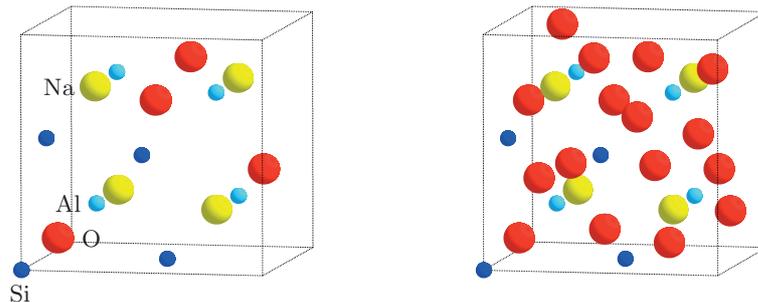
Die Einheitszelle ist ein Würfel; er kann so gewählt werden, dass die Chlor-Ionen die Ecken und die Mittelpunkte der 6 Seitenflächen des Würfels besetzen; die Kristallographen nennen diese Anordnung *flächenzentriertes kubisches Gitter*.

Die Natrium-Ionen befinden sich in den Mittelpunkten der 12 Kanten und im Mittelpunkt des Würfels. Sie bilden ihrerseits ein flächenzentriertes kubisches Gitter.

**BEMERKUNG A1.2** Die Kristallstrukturen der Verbindungen CsCl und CaCl sind insofern sehr einfach, als die Ionen jeder Sorte ein Punktgitter bilden, also die Bahn eines Ions unter einem Translationsgitter. Wie die nächste Nummer klar macht, gibt es aber Verbindungen, deren Kristallstrukturen weit komplizierter sind.

### 1.1c Kristallstruktur des Minerals Carnegieit

Beim Mineral *Carnegieit* handelt es sich um die Verbindung  $\text{NaAlSiO}_4$ . Die Silizium-Ionen bilden ein flächenzentriertes kubisches Gitter; bei geeigneter Wahl einer Einheitszelle besetzen sie also die Ecken und die Flächenmittelpunkte eines Würfels. Diese Situation wird im linken Teil der folgenden Figur dargestellt. In ihm sind noch die Natrium- und Aluminium-Ionen sowie ein Teil der Sauerstoff-Ionen eingezeichnet worden. Diese drei Ionen-Arten tetraeder-förmig angeordnet.



Im rechten Teil der Figur sind die restlichen Sauerstoff-Ionen hinzugefügt worden. Dieser Teil macht deutlich, dass die Kristallstruktur des Minerals Carnegieit bereits so kompliziert ist, dass sich die Anordnung der Ionen aus einem perspektivischen Bild einer Einheitszelle nicht mehr genau erkennen lässt. Wie wir noch sehen werden, wird die rechnerische Beschreibung der Kristallstruktur aber einfach, wenn man die *Symmetriegruppe* der Kristallstruktur heranzieht.

## 1.2 Symmetriegruppen von Kristallstrukturen

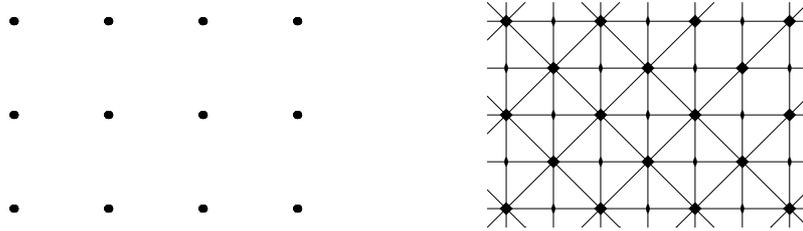
DEFINITION A1.3 Die Symmetriegruppe  $\text{Sym}(\mathcal{K})$  einer Kristallstruktur  $\mathcal{K}$  besteht aus allen Isometrien des Euklidischen 3-dimensionalen Raumes, welche die Struktur auf sich abbilden.

Unter einer Isometrie versteht man dabei eine Abbildung des Raumes, welche die Distanzen beibehält, etwa eine Translation oder eine Spiegelung an einer Ebene.

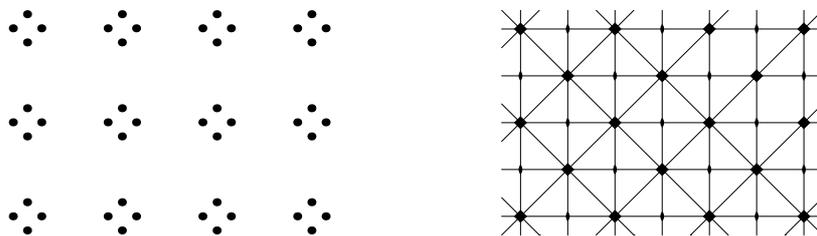
### 1.2a Symmetrien von Ornamenten – eine Illustration

Die folgenden Beispiele verdeutlichen obige Definition. In ihnen geht es allerdings nicht um Kristallstrukturen, sondern um periodische *Ornamente* – die einprägsameren 2-dimensionalen Analoga der Kristallstrukturen und die Symmetriegruppen dieser Analoga.

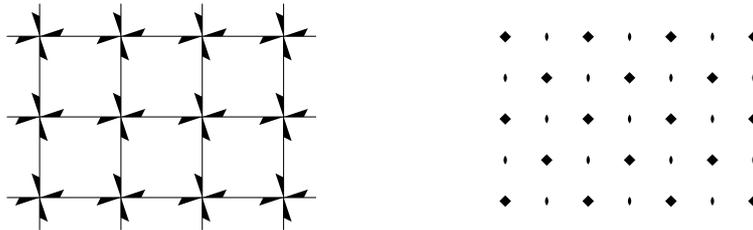
Ich beginne mit einem *quadratischen Punktgitter*. Es entsteht aus einem seiner Punkte durch Anwenden der Translationen mit Vektoren eines quadratischen Gitters. Jede dieser Translationen gehört zur Symmetriegruppe des Ornaments, aber keine weitere Translation. Ebenso liegen die Drehungen um  $90^\circ$  in der Symmetriegruppe, wenn das Zentrum der Drehung ein Gitterpunkt ist. Ferner enthält die Symmetriegruppe die Spiegelungen an den gezeichneten Achsen.



Im zweiten Bild wird jeder Punkt des obigen Punktgitters durch 4 quadratisch angeordnete Punkte ersetzt. Die Symmetriegruppe des entstehenden Ornaments ist dann identisch mit jener des ersten Ornaments.

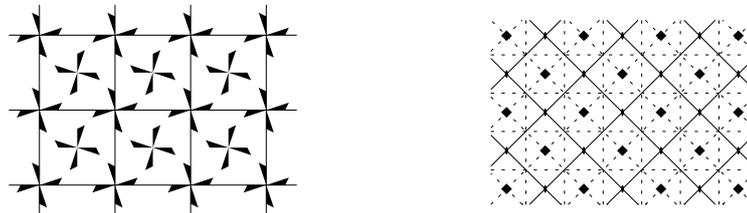


Der Fall liegt anders, wenn jeder Punkt des quadratischen Gitters durch einen kleinen Propeller ersetzt wird.



Die Symmetriegruppe enthält dann zwar die 4-zähligen und 2-zähligen Drehungen der vorangehenden Ornamente, nicht aber die Spiegelungen dieser Ornamente.

Fügt man weitere, geeignete kleine Propeller hinzu, so sind ein Teil der Spiegelungen des ersten Ornaments wieder Symmetrien des neuen Ornaments; auch treten Geraden auf, die Achsen von Gleitspiegelungen, nicht aber Achsen von Spiegelungen sind.



### 1.2b Begriff der Raumgruppe

Eine Kristallstruktur kann durch eine Teilmenge  $\mathcal{S}$  des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^3$  beschrieben werden, etwa indem man die Positionen von Atomen und Ionen durch

die Mittelpunkte kleiner Kugeln angibt und verschiedene Atom- oder Ionen-Sorten durch Kugeln unterschiedlicher Radien kennzeichnet. Die Symmetriegruppe  $\text{Sym}(\mathcal{S})$  einer Teilmenge  $\mathcal{S}$  der Raumes ist allgemein so definiert:

$$\text{Sym}(\mathcal{S}) = \{\psi \in \text{Iso}(\mathbb{E}^3) \mid \psi(\mathcal{S}) = \mathcal{S}\}. \quad (\text{A1.1})$$

Nun zum Begriff der Raumgruppe. Sei zunächst  $G$  eine beliebige Untergruppe der Gruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E}^3)$  aller Isometrien des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^3$ . Die Translationen in  $G$  bilden einen Normalteiler  $T(G)$  von  $G$ . Das Bild der Gruppe  $G$  unter der Projektion  $\tau_v \circ \varphi \mapsto \varphi$  ist eine Untergruppe  $G_0$  der orthogonalen Gruppe  $\text{O}(\mathbb{E}^3)$ ; sie wird *Punktgruppe* von  $G$  genannt. Sei schliesslich  $\Gamma(G)$  die Menge der Vektoren  $v \in \mathbb{E}^3$  der Translationen in  $T(G)$ . Die Definition einer Raumgruppe lässt sich nun so aussprechen:

**DEFINITION A1.4** Eine Untergruppe  $G$  von  $\text{Iso}(\mathbb{E}^3)$  wird *Raumgruppe* genannt, wenn die Menge  $\Gamma(G)$  ein Gitter von  $\mathbb{E}^3$  ist.

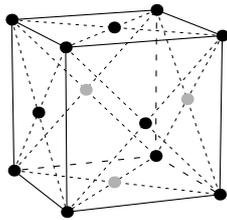
**BEISPIEL A1.5** *Raumgruppe eines Gitters.* Seien  $\Gamma \subset \mathbb{E}^3$  ein Gitter. Die Symmetriegruppe  $\text{Sym}(\Gamma)$  der Teilmenge  $\Gamma$  enthält dann die Translationen  $\tau_w$  mit  $w \in \Gamma$  und die orthogonalen Abbildungen  $\varphi \in \text{Sym}(\Gamma)$ , und sie wird von ihnen erzeugt; genauer ist die Symmetriegruppe des Gitters das semi-direkte Produkt der Translationsgruppe  $T = \{\tau_w \mid w \in \Gamma\}$  und der Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  der Automorphismen von  $\Gamma$ , das heisst der Symmetrien, welche linear sind.

**BEISPIEL A1.6** *Raumgruppe einer Struktur vom Typ Cu.* Die Atome des Metalls Kupfer bilden ein flächenzentriertes kubisches Punktgitter; es ist dem Gitter

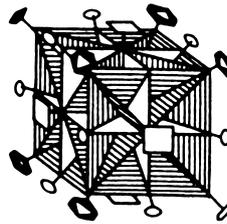
$$\Gamma'_3 = \{x \in \mathbb{Z}^3 \mid x_1 + x_2 + x_3 \text{ gerade}\}$$

ähnlich. Bei geeigneter Wahl des Koordinatensystems ist die Raumgruppe einer Struktur vom Kupfertyp gerade die Symmetriegruppe  $G$  des Gitters  $\Gamma'_3$ .

Die Punktgruppe  $G_0$  der Raumgruppe  $G$  ist gerade die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma'_3)$  des Gitters  $\Gamma'_3$ ; sie ist identisch mit der Symmetriegruppe des Würfels  $W = \{x \text{ in } \mathbb{R}^3 \mid -1 \leq x_j \leq 1\}$  und hat 48 Elemente.



Einheitszelle von Cu



Symmetrien eines Würfels

Die Kristallstrukturen der Metalle Al, Ag, Au, und Pb sind jener des Kupfers ähnlich; ihre Raumgruppen sind daher vom gleichen Typ.

**BEISPIEL A1.7** *Raumgruppe einer Struktur vom Typ NaCl.* Beim Steinsalz bilden die Natrium-Ionen  $\text{Na}^+$  ein flächenzentriertes kubisches Punktgitter  $F^+$ , die Chlor-Ionen  $\text{Cl}^-$  ein zu  $F^+$  kongruentes Punktgitter  $F^-$ . Diese Anordnung ist dem Paar

$$(\Gamma'_3, \Gamma'_3 + (1, 1, 1)^t)$$

ähnlich und wird in der nächsten Abbildung dargestellt: sie zeigt links die Anordnung der Ionen einer horizontalen Schicht von  $(\Gamma'_3, \Gamma'_3 + (1, 1, 1)^t)$  mit  $x_3 \in 2\mathbb{Z}$ , rechts die Anordnung der Ionen einer anderen Schicht.

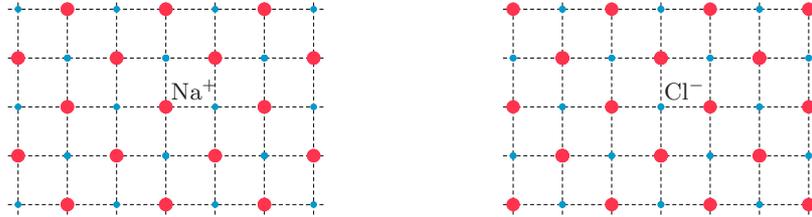


Abbildung A.1: Aufeinander folgende horizontale Schichten von Steinsalz

### 1.2c Raumgruppe der Kristallstruktur von Rutil

Ich beschliesse Unterabschnitt 1.2 mit einer etwas ausführlicheren Diskussion der Symmetriegruppe der Struktur von Rutil. Sie liefert ein Beispiel einer Raumgruppe  $G$ , die keine Untergruppe enthält, die zur Punktgruppe  $G_0$  isomorph ist.

Die chemische Verbindung  $\text{TiO}_2$  ist *polymorph*, sie kristallisiert also in verschiedenen Formen; eine dieser Formen wird *Rutil* genannt. Die Titan-Atome der Kristallstruktur von Rutil bilden ein *innenzentriertes tetragonales* Punktgitter; es wird auf der linken Seite der nächsten Abbildung veranschaulicht. Auf der rechten Seite sind die Sauerstoff-Atome der Einheitszelle hinzugefügt worden.

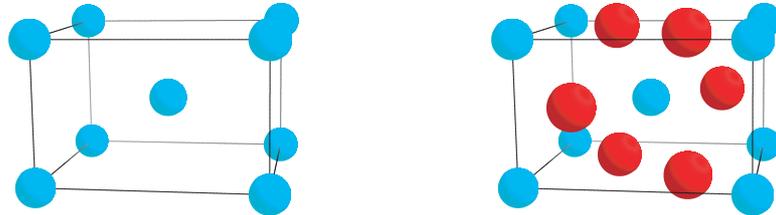


Abbildung A.2: Ti-Atome (links) sowie alle Atome einer Einheitszelle

Die Sauerstoff-Atome in aufeinander folgenden, horizontalen Schichten haben unterschiedliche Anordnungen: in Abbildung A.3 sind links die Atome einer horizontalen Schicht mit vertikaler Komponente in  $\mathbb{Z} \cdot b_3$  dargestellt und rechts jene Atome, deren vertikale Komponente in  $(\frac{1}{2}\mathbb{Z} \setminus \mathbb{Z}) \cdot b_3$  liegen. Dabei bezeichnet  $b_3$  einen vertikalen Vektor, dessen Länge gleich dem kleinsten Abstand zwischen zwei gleich besetzten horizontalen Schichten ist.

Nun zur Symmetriegruppe  $G = \text{Sym}(\mathcal{K}_{\text{TiO}_2})$  der Kristallstruktur  $\mathcal{K}_{\text{TiO}_2}$  von Rutil. Wir legen das Koordinatensystem so fest, dass das in Abbildung A.3 mit  $O$  bezeichnete Titan-Atom im Ursprung liegt. Seien  $b_1 = \overrightarrow{OB_1}$  und  $b_2 = \overrightarrow{OB_2}$ , und sei  $b_3$  der zuvor definierte senkrechte Vektor; es ist dann  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$  eine Basis des Vektorraumes  $\mathbb{E}^3$ . Diese Basis erzeugt das Gitter  $\Gamma = \Gamma(G)$  der Translationsvektoren: einerseits gibt nämlich jeder der 3 Vektoren Anlass zu einer Translation in  $G$ , und andererseits muss jede Translation von  $G$  Titan-Atome auf Titan-Atome abbilden und die Anordnun-

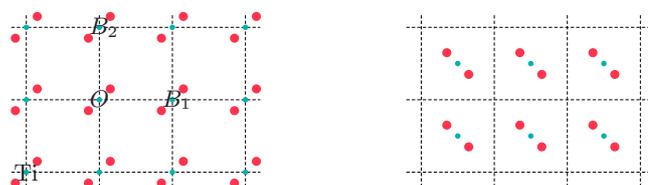


Abbildung A.3: Aufeinander folgende horizontale Schichten von Rutil

gen der Sauerstoff-Atome um die Titan-Atome beibehalten. In der Sprechweise der Kristallographen ist das Translationsgitter ein *primitives tetragonales* Gitter.

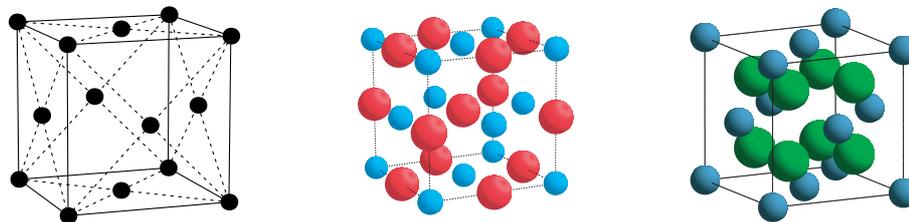
Die Symmetriegruppe  $G$  enthält neben den Translationen noch weitere Elemente, insbesondere die Spiegelungen an der horizontalen Ebene  $x_3 = 0$ , sowie an den vertikalen Ebenen, welche die horizontale Koordinatenebene in den Geraden mit den Gleichungen  $x_2 = x_1$ , beziehungsweise  $x_2 = -x_1$ , schneiden. Diese 3 Spiegelungen halten den Ursprung  $O$  fest und erzeugen eine Untergruppe  $H_1$  der Symmetriegruppe  $G$ , welche die Ordnung 8 hat. Die Gruppe  $G$  besteht aber nicht nur aus den Kompositionen der Form  $\tau_w \circ \varphi$  mit  $w \in \Gamma$  und  $\varphi \in H_1$ . Sie enthält auch Schraubungen, deren Rotationsanteile die Ordnung 4 haben. Die Schraubungsachse einer dieser Schraubungen ist die senkrechte Gerade mit der Gleichung  $x_1 = 0, x_2 = 1/2$ ; die Schraubung selbst ist die Abbildung

$$\psi: x \mapsto \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot x + \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^t.$$

Wie man zeigen kann, wird die Symmetriegruppe  $G$  erzeugt von den Translationen mit Vektoren in  $\Gamma = \mathbb{Z} \cdot b_1 + \mathbb{Z} \cdot b_2 + \mathbb{Z} \cdot b_3$ , den beschriebenen 3 Spiegelungen und der Schraubung  $\psi$ .

### 1.3 Affine Äquivalenz von Symmetriegruppen

Die Symmetriegruppe einer Kristallstruktur soll wesentliche Eigenschaften der Struktur sichtbar machen, unwesentliche aber unterdrücken. Sie unterdrückt gewisse Einzelheiten von Natur aus: so haben bei geeigneter Wahl der Koordinaten die folgenden Strukturen die gleichen Gruppen:



Andere unwichtige Unterschiede berücksichtigt die Symmetriegruppe aber, zum Beispiel die genaue Lage des Zentrums einer Drehspiegelung. Wenn die Symmetriegruppen der Kristallstrukturen zu einer übersichtlichen Klassifikation der Kristallstrukturen führen sollen, muss man daher festlegen, welche Kristallstrukturen als nur *unwesentlich verschieden* angesehen werden sollen.

### 1.3a Ähnlich äquivalente Teilmengen

Zu Beginn der Nummer 1.2b wurde erwähnt, dass Kristallstrukturen durch Teilmengen beschrieben werden können. Überlegen wir uns also, wann zwei Teilmengen  $\mathcal{S}$  und  $\mathcal{S}'$  als im wesentlichen gleich gelten sollen. Zunächst wird man  $\mathcal{S}$  und jede verschobene Menge  $\mathcal{S} + v$  als im wesentlichen gleich ansehen. Ebenso sind  $\mathcal{S}$  und das Bild von  $\mathcal{K}$  unter einer Drehung noch im wesentlichen gleich. Sollen  $\mathcal{S}$  und die gestreckte Menge  $\lambda \cdot \mathcal{S}$  mit  $\lambda \neq 0$  ebenfalls als gleichwertig betrachtet werden?

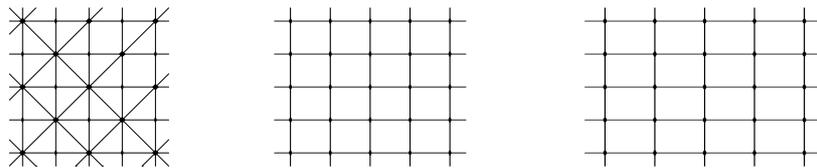
In der Kristallographie treten Strukturen auf, die *chiral*, das heisst, nicht spiegelbildlich sind. In einem solchen Fall können die Struktur und ihr Spiegelbild, sofern sie in der Natur vorkommt, unterschiedliche makroskopische Eigenschaften aufweisen. Die Kristallographen betrachten eine chirale Struktur und ihr Spiegelbild deshalb als echt verschieden; dem gemäss lassen sie nur Streckungen mit positivem Faktor  $\lambda$  zu, nicht aber die Rauminversion  $-\mathbb{1}$ . Dieser Sichtweise entspricht die folgende Definition:

**DEFINITION A1.8** Zwei Teilmengen  $\mathcal{S}$  und  $\mathcal{S}'$  werden *eigentlich-ähnlich* genannt, falls es eine orientierungs-erhaltende Ähnlichkeitsabbildung  $\sigma$  gibt, die  $\mathcal{S}$  auf  $\mathcal{S}'$  abbildet.

Die Symmetriegruppen der Teilmengen erfüllen dann die Beziehung

$$\text{Sym}(\mathcal{S}') = \sigma \circ \text{Sym}(\mathcal{S}) \circ \sigma^{-1}. \quad (\text{A1.2})$$

Obige Definition führt zu einer Äquivalenzrelation auf der Menge der Teilmengen von  $\mathbb{E}^3$ ; die Äquivalenzrelation hat aber unendlich viele Klassen. Einen Grund legen die folgenden Ornamente nahe:



Die Punktgruppen der rechteckigen Netze sind gleich; sie enthalten keine Drehungen der Ordnung 4 und sind daher kleiner als die Punktgruppe des quadratischen Netzes links. Keine zwei der drei Netze sind ähnlich äquivalent, denn das Verhältnis der kleinsten positiven Norm eines Vektors des Gitters zur kleinsten Norm eines darauf senkrecht stehenden Vektors bleibt bei einer Ähnlichkeitsabbildung erhalten. Auf Grund der gleichen Punktgruppen, sollten aber die Ornamentgruppen des mittleren und rechten Netzes als stärker verwandt angesehen werden als jede von ihnen mit der Ornamentgruppe des quadratischen Netzes verwandt ist.

Die bisherigen Einsichten lassen sich so zusammenfassen:

1. Zwei Teilmengen  $\mathcal{S}$  und  $\mathcal{S}'$  sollten als im wesentlichen gleich betrachtet werden, wenn es eine orientierungs-erhaltende Ähnlichkeitsabbildung  $\sigma: \mathbb{E}^3 \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}^3$  gibt, die  $\mathcal{S}$  auf  $\mathcal{S}'$  abbildet. Die Symmetriegruppen erfüllen dann die Beziehung  $\text{Sym}(\mathcal{S}') = \sigma \circ \text{Sym}(\mathcal{S}) \circ \sigma^{-1}$ .
2. Analog sollten mindestens dann zwei Raumgruppen  $G_1$  und  $G_2$  als im wesentlichen gleich betrachtet werden, wenn es eine orientierungs-erhaltende Ähnlichkeitsabbildung  $\sigma: \mathbb{E}^3 \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}^3$  gibt, welche die Beziehung

$$G_2 = \sigma \circ G_1 \circ \sigma^{-1} \quad (\text{A1.3})$$

erfüllt.

3. In gewissen Fällen sollten für  $\sigma$  in obiger Gleichung (A1.3) nicht nur Ähnlichkeitsabbildungen, sondern (bijektive) affine Abbildungen zugelassen werden.<sup>1</sup>

### 1.3b Affin äquivalente Raumgruppen

Die Relationen, welche die zuvor formulierten Wünsche erfüllen und heute allgemein verwendet werden, sind die *eigentlich-affine Äquivalenz* und die *affine Äquivalenz*:

DEFINITION A1.9 Zwei Raumgruppen  $G_1$  und  $G_2$  werden *eigentlich affin äquivalent* genannt, wenn es eine orientierungserhaltende affine Bijektion  $\alpha: \mathbb{E}^3 \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}^3$  gibt, welche die Bedingung

$$G_2 = \alpha \circ G_1 \circ \alpha^{-1} \quad (\text{A1.4})$$

erfüllt. Sie sind *affin äquivalent*, wenn es eine affine Bijektion  $\alpha: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, welche die Bedingung (A1.4) richtig macht.

Beide Relationen führen zu Einteilungen der Menge der Raumgruppen mit endlich vielen Klassen. Genauer gilt das folgende Resultat, das Arthur SCHOENFLIES und E. S. FEDOROV um 1890 durch Vergleich ihrer Listen gefunden haben:

HAUPTSATZ A1.10 (KLASSIFIKATION DER RAUMGRUPPEN) *Es gibt 230 eigentlich-affine und 219 affine Klassen von Raumgruppen des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^3$ .*

## A2 Inhalt und Aufbau der Vorlesung

Das Hauptthema der Vorlesung sind die Raumgruppen des 3-dimensionalen Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^3$  und ihre Verallgemeinerungen auf höher-dimensionale Euklidische Räume, die *Kristallographischen Gruppen*. Als erstes werden dazu die grundlegenden Begriffe erörtert – Isometrien, Gitter, Kristallographische Gruppen und affine Äquivalenz von Kristallographischen Gruppen. Diese Untersuchungen sind Gegenstand von Kapitel A.

Darauf folgt ein Kapitel, in dem die *Hauptresultate über Kristallographische Gruppen* dargestellt werden. Diese Ergebnisse gehen in drei Richtungen: die Resultate der ersten Art sind *Kennzeichnungen*: der Begriff der Kristallographischen Gruppe wie auch verschiedene Hilfsbegriffe – insbesondere Gitter und arithmetische Kristallklassen – lassen sich auf recht unterschiedliche Arten festlegen; es stellt sich dann jedes Mal die Frage, ob die verschiedenen Definitionen äquivalent sind. Die alternativen Definitionen sind Thema des Abschnittes C6.

Die nächste Gruppe von grundlegenden Ergebnissen sind *Endlichkeitssätze*. Die Theorie der Kristallographischen Gruppen erwuchs aus dem Wunsch, einer empirischen Wissenschaft, der *Kristallographie*, eine Einteilungsschema zur Verfügung zu stellen, das sich auf die Symmetrien des inneren Aufbaus der Kristalle bezog. Ein solches Schema musste explizit vorliegen, bevor man es anwenden konnte, und es sollte endlich sein. Sowohl Schoenflies wie Fedorow erarbeiteten explizite Listen; die Endlichkeit der Liste war eher ein Nebenprodukt als ein Ergebnis, das bereits zu einem frühen Zeitpunkt der Untersuchung bekannt war. Insbesondere lieferte weder die Vorgehensweise von Schoenflies noch jene von Fedorov einen Hinweis, ob die Untersuchung der Kristallographischen Gruppen eines höher-dimensionalen Euklidischen

<sup>1</sup>Eine affine Abbildung ist die Zusammensetzung einer *linearen* Abbildung mit einer Translation.

Raumes zu endlich oder unendlichvielen affinen Klassen führen würde. Die Endlichkeit der Menge der affinen Klassen wurde von L. BIEBERBACH (1886–1982) bewiesen.<sup>2</sup>

Der Endlichkeitssatz von Bieberbach, aber auch andere Endlichkeitssätze, etwa jener über die Endlichkeit der Menge der *arithmetischen Kristallklassen*, liefern bereits in niedrigen Dimensionen nur astronomisch grosse Anzahl-Abschätzungen. Insbesondere erhält man so keine Einsicht, wie man die Liste der Klassen je erstellen könnte, selbst wenn sie sich als nicht allzu lang herausstellen sollte. Was man in der Anwendungen neben den Endlichkeitssätzen daher braucht, sind Konstruktionsmethoden, die es erlauben, die Liste – oder wenigstens Ausschnitte der Liste – explizit aufzustellen. Eine dieser Konstruktionen ist das Hauptthema des Abschnittes C8.

In Kapitel D werden verschiedene explizite Klassifikationen erarbeitet und kommentiert.

## **2.1 Bemerkungen zu den Grundlagen**

## **2.2 Bemerkungen zu den Hauptresultaten**

## **2.3 Bemerkungen zu den Klassifikationen**

---

<sup>2</sup>So genannter *zweiter Bieberbachscher Satz*, erstmals bewiesen von G. FROBENIUS (1849–1917) in [Fr11b] und wenig später von Bieberbach in [Bi12] aus einem um 1910 angekündigten Ergebnis abgeleitet.

---

## B Grundlagen

---

Eine kristallographische Gruppe ist, grob gesprochen, die Symmetriegruppe  $\text{Sym}(\mathcal{S})$  eines periodischen Musters  $\mathcal{S}$ . Das Muster  $\mathcal{S}$  wiederum ist dabei eine Teilmenge eines Euklidischen Raumes  $\mathbb{E} = (V, d_2)$  und die Symmetriegruppe  $\text{Sym}(\mathcal{S})$  besteht aus Isometrien des Raumes  $\mathbb{E}$ , die  $\mathcal{S}$  auf sich abbildet; da  $\mathcal{S}$  periodisch ist, bilden die Translationsvektoren der Translationen von  $\text{Sym}(\mathcal{S})$  ein Gitter im Euklidischen Vektorraum  $\mathbb{E}$ .

Dieses vorbereitende Kapitel beginnt mit einem Abschnitt über Isometrien. Ihm folgt ein Abschnitt, in welchem der Begriff des Gitters untersucht wird. Im dritten Abschnitt geht es dann um Kristallographische Gruppen und um die affine Äquivalenz solcher Gruppen.

\*\*\*

*Im Folgenden bezeichnen  $(V, \langle -, - \rangle)$  einen Euklidischen Vektorraum der Dimension  $n \geq 1$ ,  $d_2$  die vom Skalarprodukt auf  $V$  induzierte Metrik und  $\mathbb{E}$  den Euklidischen metrischen Raum  $(V, d_2)$ . Wird von  $\mathbb{R}^n$  als Euklidischem Vektorraum gesprochen, so ist vorausgesetzt, dass  $\mathbb{R}^n$  mit dem Standard-Skalarprodukt versehen ist. Die Vektoren der Standard-Basis von  $\mathbb{R}^n$  werden  $e_1, \dots, e_n$  genannt.*

### B3 Isometrien eines Euklidischen Vektorraumes

In diesem Abschnitt werden die Isometrien eines Euklidischen metrischen Raumes  $\mathbb{E} = (V, d_2)$  mit Hilfe der Linearen Algebra untersucht und beschrieben.

#### 3.1 Begriff der Isometrie

Es werden die Begriffe der Isometrie eines Euklidischen metrischen Raumes  $\mathbb{E}$  und die Gruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  aller Isometrien von  $\mathbb{E}$  eingeführt.

DEFINITION B3.1 Eine *Isometrie* von  $\mathbb{E}$  ist eine bijektive Abbildung  $\varphi: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$ , welche alle Abstände beibehält, d. h. die Gleichung

$$d_2(\varphi(x), \varphi(y)) = d_2(x, y) \tag{B3.1}$$

für jedes Paar  $(x, y) \in \mathbb{E} \times \mathbb{E}$  richtig macht.

Die Menge aller Isometrien von  $\mathbb{E}$  wird mit  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  bezeichnet.

##### 3.1a Die Gruppe der Isometrien $\text{Iso}(\mathbb{E})$

Seien  $\varphi$  und  $\psi$  Isometrien von  $\mathbb{E}$ . Die Zusammensetzung  $\psi \circ \varphi: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$ ,  $x \mapsto \psi(\varphi(x))$  ist eine bijektive Abbildung; wie die Rechnung

$$d_2((\psi \circ \varphi)(x), (\psi \circ \varphi)(y)) = d_2(\psi(\varphi(x)), \psi(\varphi(y))) = d_2(\varphi(x), \varphi(y)) = d_2(x, y)$$

zeigt, ist sie eine Isometrie. Folglich liefert die Zusammensetzung  $\circ$  eine innere Verknüpfung auf der Menge  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ . Sie ist assoziativ, wie man leicht überprüft, und besitzt die Identität  $\mathbb{1}$  als neutrales Element. Da die Umkehrabbildung  $\varphi^{-1}$  einer Isometrie ebenfalls eine Isometrie ist – denn

$$d_2((\varphi^{-1}(x), \varphi^{-1}(y))) = d_2(\varphi(\varphi^{-1}(x)), \varphi(\varphi^{-1}(y))) = d_2(x, y),$$

ist das Paar  $(\text{Iso}(\mathbb{E}), \circ)$  eine Gruppe mit neutralem Element  $\mathbb{1}$ . Dies beweist den

**HILFSSATZ B3.2** *Die Zusammensetzung von Abbildungen induziert eine innere Verknüpfung auf  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ . Versieht man  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  mit dieser Verknüpfung, erhält man eine Gruppe mit der Identität als neutralem Element.*

**BEMERKUNG B3.3** Ein Ziel des Abschnittes B3 ist es, eine Übersicht über die Menge  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  zu bekommen. Der Umstand, dass  $(\text{Iso}(\mathbb{E}), \circ)$  eine Gruppe ist, erlaubt es, dieses Ziel durch den Nachweis zu gewinnen, dass jede Isometrie aus gut bekannten Isometrien aufgebaut werden kann. Genauer gesagt werden wir zu folgenden Ergebnissen gelangen:

- Jede Isometrie ist die Zusammensetzung  $\tau \circ \varphi_0$  einer Isometrie  $\varphi_0$ , die den Ursprung festhält, und einer Translation  $\tau$ .
- Jede Isometrie, die den Ursprung festhält, ist *linear* und *orthogonal*.
- Jede Isometrie ist die Zusammensetzung von höchstens  $\dim(\mathbb{E}) + 1$  Spiegelungen an affinen Hyperebenen.

### 3.1b Einige Beispiele

1) *Translationen.* Jeder Vektor  $v \in \mathbb{E}$  gibt Anlass zu einer Abbildung  $\tau: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$ , die  $x$  auf  $x + v$  abbildet. Diese Abbildung ist bijektiv und erhält die Distanzen, denn

$$d_2(\tau_v(x), \tau_v(y)) = \|(x + v) - (y + v)\| = \|x - y\| = d_2(x, y).$$

Somit ist  $\tau_v$  eine Isometrie; man nennt sie die *Translation mit Translationsvektor  $v$* .

2) *Spiegelung an einer vektoriiellen Hyperebene.* Jeder Vektor  $a \in \mathbb{E} \setminus \{0\}$  gibt Anlass zu einer vektoriiellen Hyperebene  $H_a = \{y \in \mathbb{E} \mid \langle a, y \rangle = 0\}$  und einer Abbildung

$$\rho_a: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}, \quad x \mapsto x - 2 \frac{\langle x, a \rangle}{\|a\|^2} \cdot a. \quad (\text{B3.2})$$

Diese Abbildung ist linear, hält alle Punkte der Hyperebene  $H_a$  punktweise fest und bildet  $a$  auf  $-a$  ab. Sie ist eine Isometrie, genannt *Spiegelung an der Hyperebene  $H_a$* . Ersetzt man  $a$  durch  $\lambda \cdot a$  mit  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ , so ist  $H_{\lambda \cdot a} = H_a$  und  $\rho_{\lambda \cdot a} = \rho_a$ . Falls es für eine Rechnung günstig ist, kann man also annehmen,  $a$  sei ein Einheitsvektor.

3) *Spiegelung an einer affinen Hyperebene.* Seien  $H_a$  eine vektorielle Hyperebene und  $\rho_a$  die Spiegelung an  $H_a$ . Ist  $v \in \mathbb{E}$ , so bildet  $\tau_v$  die Hyperebene  $H_a$  auf die Lösungsmenge der Gleichung  $\langle a, y - v \rangle = 0$  ab; diese lässt sich auch so schreiben

$$\langle a, y \rangle = \langle a, v \rangle.$$

Die Lösungsmenge dieser zweiten Gleichung enthält den Punkt  $v$  und ist eine *affine* Hyperebene. Die Komposition  $\rho_{a,v} = \tau_v \circ \rho_a \circ \tau_v^{-1}$  ist daher eine Isometrie, welche

$\tau_v(H_a)$  punktweise festhält und  $a + v$  auf  $-a + v$  abbildet; diese Isometrie wird Spiegelung an der affinen Hyperebene  $\tau_v(H_a)$  genannt. Sie wird durch die Formel

$$(\tau_v \circ \rho_a \circ \tau_v^{-1})(x) = (x - v) - 2 \frac{\langle x - v, a \rangle}{\|a\|^2} \cdot a + v = x - 2 \frac{\langle x - v, a \rangle}{\|a\|^2} \cdot a \quad (\text{B3.3})$$

beschrieben.

### 3.1c Isometrien und orthogonale Abbildungen

Die Tatsache, dass die Translationen transitiv auf  $\mathbb{E}$  wirken und Isometrien sind, führt leicht zu einem ersten wichtigen Ergebnis über  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ :

**SATZ B3.4** *Jede Isometrie  $\varphi$  von  $\mathbb{E}$  ist die Zusammensetzung  $\tau \circ \varphi_0$  einer Isometrie  $\varphi_0$ , die den Ursprung festhält, und einer Translation  $\tau$ .*

*Jede Isometrie  $\psi$ , die 0 festhält, ist eine (lineare) orthogonale Abbildung.*

*Proof.* Seien  $v = \varphi(0)$  und  $\tau = (x \mapsto x + v)$ . Dann ist  $\varphi_0 = \tau^{-1} \circ \varphi$  eine Isometrie, die den Ursprung festhält, und  $\varphi = \tau \circ \varphi_0$ .

Sei nun  $\psi$  eine Isometrie mit  $\psi(0) = 0$ . Dann erfüllt  $\psi$  die Beziehung  $\langle \psi(x), \psi(y) \rangle = \langle x, y \rangle$  für jede Wahl von  $(x, y) \in \mathbb{E}^2$ . Dies folgt aus dem Umstand, dass sich das Skalarprodukt durch die Norm  $\| - \|$  ausdrücken lässt:

$$\begin{aligned} 2\langle \psi(x), \psi(y) \rangle &= \|\psi(x)\|^2 + \|\psi(y)\|^2 - \|\psi(x) - \psi(y)\|^2 \\ &= d_2(\psi(x), \psi(0))^2 + d_2(\psi(y), \psi(0))^2 - d_2(\psi(x), \psi(y))^2 \\ &= \|x\|^2 + \|y\|^2 - \|x - y\|^2 = 2\langle x, y \rangle. \end{aligned}$$

Es verbleibt der Nachweis, dass  $\psi$  *linear* ist. Ein sehr raffiniertes Argument geht auf die Arbeit [MU32] von S. Mazur und S. Ulam zurück; es gilt für jeden *reellen* linearen normierten Raum. Ein allgemeiner bekanntes Argument stützt sich auf die eben bewiesene Beziehung  $\langle \psi(x), \psi(y) \rangle = \langle x, y \rangle$ , zieht daraus den Schluss, dass jede Orthonormalbasis  $\mathcal{B} = (e_1, \dots, e_n)$  auf eine Orthonormalbasis abgebildet wird, und benützt dann Rechnung

$$x = \sum_j \langle x, e_j \rangle e_j \quad \text{und} \quad \psi(x) = \sum_j \langle \psi(x), \psi(e_j) \rangle \psi(e_j) = \sum_j \langle x, e_j \rangle \psi(e_j).$$

□

## 3.2 Algebraische Eigenschaften der Gruppe $\text{Iso}(\mathbb{E})$

In diesem Unterabschnitt werden einige Eigenschaften der Gruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  zusammengestellt. Ausgangspunkt der Überlegungen ist Satz B3.4.

### 3.2a Formelsammlung

Nach Satz B3.4 ist jede Isometrie  $\varphi$  die Zusammensetzung einer orthogonalen Abbildung  $L: V \rightarrow V$  und einer Translation  $\tau_v$ . Ist nun  $\varphi' = \tau_{v'} \circ L'$  eine zweite Isometrie, so gilt

$$\begin{aligned} (\varphi \circ \varphi')(x) &= \varphi(L'(x) + v') = L(L'(x) + v') + v \\ &= (L \circ L')(x) + L(v') + v. \end{aligned}$$

Diese Rechnung lässt sich so zusammenfassen:

$$(\tau_v \circ L) \circ (\tau_{v'} \circ L') = \tau_{v+L(v')} \circ (L \circ L'). \quad (\text{B3.4})$$

Die gewonnene Formel lehrt insbesondere, dass die Abbildung

$$\pi: \text{Iso}(\mathbb{E}) \rightarrow \text{O}(V, \langle - \rangle), \quad (\tau_v \circ L) \mapsto L \quad (\text{B3.5})$$

ein Gruppenhomomorphismus der Isometriegruppe von  $\mathbb{E}$  in die orthogonale Gruppe des Euklidischen Vektorraumes  $(V, \langle -, - \rangle)$  ist. Dieser Homomorphismus ist surjektiv, denn jede orthogonale Abbildung ist eine Isometrie von  $\mathbb{E}$ . Der Kern von  $\pi$  besteht aus allen Translationen des Vektorraumes  $\mathbb{E}$ .

Es bezeichne  $T(\mathbb{E})$  die Untergruppe der Translationen von  $\mathbb{E}$ ; als Kern eines Gruppenhomomorphismus ist  $T(\mathbb{E})$  ein *Normalteiler* der Gruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ . Die Wirkung von  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  auf  $T(\mathbb{E})$  lässt sich leicht beschreiben. Zunächst ist

$$(\tau_v \circ L)^{-1} = (\tau_{-L^{-1}(v)} \circ L^{-1}), \quad (\text{B3.6})$$

denn nach Gleichung (B3.4) gilt die Rechnung

$$(\tau_v \circ L) \circ (\tau_{-L^{-1}(v)} \circ L^{-1}) = \tau_{v-L(L^{-1}(v))} \circ L \circ L^{-1} = \mathbb{1}.$$

Also ist

$$(\tau_v \circ L) \circ \tau_u \circ (\tau_v \circ L)^{-1} = (\tau_{v+L(u)} \circ L) \circ (\tau_{-L^{-1}(v)} \circ L^{-1}) = \tau_w$$

mit  $w = v + L(u) - L(L^{-1}(v)) = L(u)$ . Das Resultat hängt also nicht vom Translationsteil  $\tau_v$  der Isometrie  $\tau_v \circ L$  ab, sondern nur von ihrem linearen Teil  $L$ .

Der nächste Satz fasst die erzielten Einsichten zusammen.

**SATZ B3.5** *Die Gruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  der Isometrien eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  hat die folgenden Eigenschaften:*

(i) *Jede Isometrie  $\varphi \in \text{Iso}(\mathbb{E})$  ist die Zusammensetzung einer orthogonalen Abbildung  $L$  und der Translation  $\tau_v$  mit  $v = \varphi(0)$ . Umgekehrt ist jede Translation und jede orthogonale Abbildung eine Isometrie.*

(ii) *Es gelten die Rechenregeln*

$$(\tau_v \circ L) \circ (\tau_{v'} \circ L') = \tau_{v+L(v')} \circ (L \circ L'), \quad (\text{B3.7})$$

$$(\tau_v \circ L)^{-1} = \tau_w \circ L^{-1} \quad \text{mit} \quad w = -L^{-1}(v), \quad (\text{B3.8})$$

$$(\tau_v \circ L) \circ \tau_u \circ (\tau_v \circ L)^{-1} = \tau_{L(u)}. \quad (\text{B3.9})$$

für alle Vektoren  $u$  und  $v$  aus  $V$ .

(iii) *Die Abbildung  $\pi: \text{Iso}(\mathbb{E}) \rightarrow \text{O}(\mathbb{E})$ , die der Isometrie  $\tau \circ L$  ihren linearen Teil zuordnet, ist ein surjektiver Gruppenhomomorphismus auf die Gruppe der orthogonalen Abbildung  $\text{O}(V, \langle -, - \rangle)$  des Euklidischen Vektorraumes  $(V, \langle -, - \rangle)$ . Sein Kern ist der Normalteiler  $T(\mathbb{E})$  der Translationen von  $\mathbb{E}$ .*

### 3.2b Parametrisierung der Gruppe $\text{Iso}(\mathbb{E})$

Aussage (iii) von Satz B3.5 lässt sich noch etwas handlicher formulieren. Zunächst sind der Translationsvektor  $v$  und der lineare Teil  $L$  einer Isometrie von  $\mathbb{E}$  eindeutig durch  $\varphi$  bestimmt sind; es ist ja  $v = \varphi(0)$  und  $L = \tau_v^{-1} \circ \varphi$ . Daher gibt es eine Abbildung

$$\vartheta: \text{Iso}(\mathbb{E}) \rightarrow \mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E}), \quad \varphi \mapsto (v = \varphi(0), L = \tau_v^{-1} \circ \varphi) \quad (\text{B3.10})$$

Sie wird zu einem Homomorphismus, wenn man auf  $\mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E})$  eine Multiplikation einführt, die im Einklang mit Formel (B3.4) ist:

$$(v, L) \cdot (v', L') = (v + L(v'), L \circ L'). \quad (\text{B3.11})$$

Der Kern dieses Gruppenhomomorphismus besteht nur aus der Identität  $\mathbb{1}$ ; die Abbildung ist also injektiv. Sie ist auch surjektiv, da die Zusammensetzung  $\tau_v \circ L$  für jeden Vektor  $v \in V$  und jede orthogonale Abbildung  $L \in \text{O}(\mathbb{E})$  eine Isometrie ist. Folglich ist  $\vartheta$  ein Gruppenisomorphismus. Er zeigt, wie sich die Gruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  auf übersichtliche Art parametrisieren lässt. Er erlaubt es ferner, die Gruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  mit einer Metrik zu versehen. Dies wird in Unterabschnitt 6.4 von Bedeutung sein.

Der Gruppenhomomorphismus  $\vartheta$  ist auch hilfreich, wenn man in  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  explizite Rechnungen durchführen möchte. Dann ist die folgende Formelsammlung von Nutzen:

**KOROLLAR B3.6** *Wird die Menge  $\mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E})$  mit der Multiplikation (B3.11) versehen, so erhält man eine Gruppe; sie wird semi-direktes Produkt von  $\mathbb{E}$  und  $\text{O}(\mathbb{E})$  genannt und mit  $\mathbb{E} \rtimes \text{O}(\mathbb{E})$  bezeichnet. In  $\mathbb{E} \rtimes \text{O}(\mathbb{E})$  gelten folgende Rechenregeln:*

$$(v, L)^{-1} = (-L^{-1}(v), L^{-1}) \quad (\text{B3.12})$$

$$(v, L) \cdot (v', \mathbb{1}) \cdot (v, L)^{-1} = (L(v'), \mathbb{1}) \quad (\text{B3.13})$$

$$(0, L) \cdot (v', L') \cdot (0, L)^{-1} = (L(v'), L \circ L' \circ L^{-1}) \quad (\text{B3.14})$$

$$(v, L) \cdot (v', L') \cdot (v, L)^{-1} = ((\mathbb{1} - L \circ L' \circ L^{-1})(v) + L(v'), L \circ L' \circ L^{-1}). \quad (\text{B3.15})$$

### 3.2c Begriff der Punktgruppe

Die kristallographischen Gruppen des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$  sind Untergruppen der Isometriegruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  mit speziellen Eigenschaften. Als Vorbereitung auf ihr Studium betrachte ich dieser Nummer allgemeine Untergruppen von  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ .

**DEFINITIONEN B3.7** Sei  $G$  eine Untergruppe von  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ . Schränkt man die Projektion  $\pi: \text{Iso}(\mathbb{E}) \rightarrow \text{O}(\mathbb{E})$  auf  $G$  ein, erhält man einen Homomorphismus  $\pi_*$ ; er bildet  $\tau \circ L$  auf  $L$  ab. Das Bild von  $\pi_*$  wird *Punktgruppe* von  $G$  genannt und mit  $G_0$  bezeichnet; der Kern von  $\pi_*$  ist der *Normalteiler*  $T(G)$  der *Translationen in*  $G$ . Die Untergruppe aller *Translationsvektoren* der Translationen  $\tau \in T(G)$  wird mit  $\Gamma(G)$  bezeichnet.

Falls  $G$  eine kristallographische Gruppe von  $\mathbb{E}$  ist, so ist ihre Untergruppe  $\Gamma(G)$  definitionsgemäss ein Gitter von  $\mathbb{E}$ . Dieser Umstand hat zur Folge, dass ihre Punktgruppe endlich ist (siehe Satz B4.7). Die Punktgruppe einer beliebigen Untergruppe von  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  braucht aber keineswegs endlich zu sein, und zwar auch dann nicht, wenn sie vergleichsweise klein, zum Beispiel unendlich zyklisch, ist. Dies lehrt das folgende

BEISPIEL B3.8 Seien  $n = 3$  und  $G$  die unendlich zyklische Gruppe, die von der Schraubung

$$\varphi: x \mapsto A \cdot x + e_3 \quad \text{mit} \quad A = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t & 0 \\ \sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B3.16})$$

erzeugt wird. Die Punktgruppe  $G_0$  von  $G$  wird von der Drehung  $x \mapsto A \cdot x$  erzeugt; sie ist genau dann endlich, wenn die reelle Zahl  $t$  ein rationalzahliges Vielfaches von  $\pi$  ist. Falls  $G_0$  unendlich ist, besteht  $\ker \pi_* = \Gamma(G)$  nur aus dem Nullvektor; andernfalls ist er unendlich zyklisch und wird von Vektor  $\text{card}(G_0) \cdot e_3$  erzeugt.

Wie wir oben gesehen haben, gibt jede Untergruppe  $G$  Anlass zu zwei Gruppen: der Punktgruppe  $G_0$ , einer Untergruppe der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$ , und der Untergruppe  $\Gamma(G)$  der additiven Gruppe von  $\mathbb{E}$ . Die Konjugation in  $G$  führt zu einer Wirkung von  $G_0$  auf  $\Gamma(G)$ . Genauer gilt:

HILFSSATZ B3.9 *Ist  $G$  eine Untergruppe von  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ , so ist die Untergruppe  $\Gamma(G)$  invariant unter der kanonischen Wirkung der Punktgruppe  $G_0$  auf  $\mathbb{E}$ .*

*Proof.* Der Kern  $T(G)$  der Projektion  $\pi_*$  von  $G$  auf  $G_0$  ist ein Normalteiler von  $G$ . Sei nun  $L' \in G_0$ . Nach Definition der Punktgruppe  $G_0$  gibt es dann eine Translation  $\tau'$ , so dass  $\tau' \circ L'$  in  $G$  liegt. Für jeden Vektor  $v \in \Gamma(G)$  ist die Isometrie  $(\tau' \circ L') \circ \tau_v (\tau' \circ L')^{-1}$  ein Element von  $G$ . Nach Gleichung (B3.9) von Satz B3.5 ist es die Translation mit Vektor  $L'(v)$ . Folglich gehört  $L'(v)$  nach Definition in  $\Gamma(G)$ .  $\square$

### 3.3 Isometrien und Spiegelungen

Es wird gezeigt, dass jede Isometrie die Komposition von Spiegelungen an Hyperebenen ist.

#### 3.3a Hauptresultat

HAUPTSATZ B3.10 *Sei  $\varphi$  eine Isometrie des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$ . Falls die Isometrie  $m$  affin unabhängige Punkte  $y_0, y_1, \dots, y_{m-1}$  festhält, so ist sie die Zusammensetzung von höchstens  $\dim(\mathbb{E}) + 1 - m$  Spiegelungen an Hyperebenen  $H$ , welche alle die Punkte  $y_0, y_1, \dots, y_{m-1}$  enthalten.*

*Insbesondere ist jede Isometrie die Zusammensetzung von höchstens  $\dim(\mathbb{E}) + 1$  Spiegelungen und die Identität ist die einzige Isometrie, welche  $\dim(\mathbb{E}) + 1$  affin unabhängige Punkte festhält*

*Proof.* Seien  $n = \dim(\mathbb{E})$  und  $y_0, y_1, \dots, y_{m-1}$  affin unabhängige Punkte, die von der Isometrie  $\varphi$  festgehalten werden. Nach Definition sind dann die Differenzvektoren  $y_1 - y_0, y_2 - y_0, \dots, y_m - y_0$  linear unabhängig. Also lässt sich die Folge  $y_0, y_1, \dots, y_{m-1}$  zu einer Folge von  $n + 1$  affin unabhängigen Vektoren vervollständigen, etwa

$$\mathcal{F} = (y_0, y_1, \dots, y_{m-1}, y_m, \dots, y_n).$$

Wir beweisen mit Induktion über  $\ell \in \{0, \dots, n\}$ , dass eine Isometrie, die  $\ell$  dieser Punkte bewegt, die Zusammensetzung von höchstens  $\ell$  Spiegelungen ist.

Sei zunächst  $\ell = 0$ . Dann hält  $\varphi$  jedes Element der Folge  $\mathcal{F}$  fest und wir haben zu beweisen, dass  $\varphi$  die Identität ist. Zu jedem Punkt  $y \in \mathbb{E}$  betrachten wir die Menge

$$H_y = \{x \in \mathbb{E} \mid d_2(x, y) = d_2(x, \varphi(y))\}.$$

Ist  $z$  ein Fixpunkt von  $\varphi$ , so zeigt die Rechnung

$$d_2(z, y) = d_2(\varphi(z), \varphi(y)) = d_2(z, \varphi(y)),$$

dass  $z$  zu  $H_y$  gehört. Insbesondere liegt also jeder Punkt der Folge  $\mathcal{F}$  in  $H_y$ . Falls  $\varphi(y) = y$  ist, ist  $H_y = \mathbb{E}$ ; andernfalls ist  $H$  eine Hyperebene (siehe Hilfssatz B3.11 unten). Da die Punkte der Folge  $\mathcal{F}$  affin unabhängig sind, kann der zweite Fall nicht eintreten, weshalb  $\varphi(y) = y$  ist. Da diese Überlegung für jeden Punkt  $y \in \mathbb{E}$  zutrifft, ist  $\varphi = \mathbb{1}$ .

Seien nun  $\ell > 0$  und  $y_k$  einer der Punkte der Folge, der von  $\varphi$  verschoben wird. Dann ist  $H_{y_k} = \{x \in V \mid d_2(x, y_k) = d_2(x, \varphi(y_k))\}$  ein affiner Hyperraum. Die Spiegelung  $\rho$  an  $H_{y_k}$  bildet  $p = y_k$  auf  $q = \varphi(y_k)$  ab, denn nach Hilfssatz B3.11 ist  $q - p$  ein Normalenvektor von  $H_{y_k}$  und  $(p + q)/2$  liegt in  $H_{y_k}$ , weshalb  $\rho$  den Punkt  $p = \frac{p+q}{2} - \frac{q-p}{2}$  auf  $\frac{p+q}{2} + \frac{q-p}{2} = q$  abbildet. Die Isometrie  $\psi = \rho^{-1} \circ \varphi$  bewegt dann höchstens  $\ell - 1$  Punkte der Folge  $\mathcal{F}$ . Nach Induktionsannahme ist sie deshalb die Zusammensetzung von höchstens  $\ell - 1$  Spiegelungen an Hyperebenen, von denen jede den Punkt  $p$  und die  $(n + 1) - \ell$  von  $\varphi$  festgehaltenen Punkte der Folge enthält. Ist  $\rho^{-1} \circ \varphi = \rho_r \circ \dots \circ \rho_2 \circ \rho_1$  mit  $r \leq \ell - 1$ , so ist daher  $\varphi$  die Zusammensetzung von höchstens  $\ell$  Spiegelungen.  $\square$

**HILFSSATZ B3.11** Sind  $p \neq q$  in  $\mathbb{E}$ , so ist  $H_{p,q} = \{x \in V \mid d_2(x, p) = d_2(x, q)\}$  eine affine Hyperebene, welche den Mittelpunkt  $\frac{1}{2}p + \frac{1}{2}q$  der Strecke  $[p, q]$  enthält und  $q - p$  zum Normalenvektor hat.

*Proof.* Ein Punkt  $x \in \mathbb{E}$  gehört genau dann zu  $H_{p,q}$ , wenn er die Bedingung  $d_2(x, p) = d_2(x, q)$  erfüllt. Diese ist äquivalent mit:

$$\begin{aligned} \|x - p\|^2 = \|x - q\|^2 &\Leftrightarrow \langle x - p, x - p \rangle = \langle x - q, x - q \rangle \\ \Leftrightarrow \|x\|^2 - 2\langle x, p \rangle + \|p\|^2 = \|x\|^2 - 2\langle x, q \rangle + \|q\|^2 &\Leftrightarrow 2\langle x, q - p \rangle = \|q\|^2 - \|p\|^2. \end{aligned}$$

Folglich ist  $H_{p,q}$  eine Hyperebene mit Normalenvektor  $q - p$ . Da  $H_{p,q}$  gewiss den Mittelpunkt  $\frac{1}{2}p + \frac{1}{2}q$  der Strecke  $[p, q]$  enthält, ist alles bewiesen.  $\square$

**BEMERKUNGEN B3.12** 1) Theorem B3.10 liefert einen neuen Beweis der Tatsache, dass eine Isometrie  $\psi$ , welchen den Ursprung festhält, eine lineare Abbildung ist. Gemäss ihm ist  $\psi$  nämlich die Zusammensetzung von höchstens  $\dim(\mathbb{E})$  Spiegelungen an affinen Hyperebenen, die den Ursprung enthalten, also an vektorialen Hyperebenen. Jede dieser Spiegelungen ist durch eine Formel der Bauart (B3.2) gegeben und daher linear.

2) Theorem B3.10 hat ein Analogon in der sphärischen Geometrie: *jede Isometrie der Einheitssphäre  $\mathbb{S} \subset \mathbb{R}^n$  ist die Zusammensetzung von höchstens  $n$  Spiegelungen, die von Spiegelungen des umgebenden Euklidischen Raumes  $\mathbb{R}^n$  (versehen mit dem Standard-Skalarprodukt) induziert sind.* Insbesondere ist jede Isometrie der Sphäre  $\mathbb{S}$  die Einschränkung einer orthogonalen Abbildung des umgebenden Euklidischen

Raumes. Dabei spielt es keine Rolle, ob man die Sphäre mit der von  $(\mathbb{R}^n, \langle -, - \rangle)$  induzierten Metrik oder mit der intrinsischen Metrik versieht.

Obiges Theorem hat auch ein Analogon in der hyperbolischen Geometrie: *jede Isometrie des  $n$ -dimensionalen hyperbolischen Raumes  $\mathbb{H}$  ist die Zusammensetzung von höchstens  $n + 1$  Spiegelungen an Hyperebenen.*

## B4 Gitter in Euklidischen Räumen

Das Hauptthema dieses Kapitels ist der Begriff der *kristallographischen Gruppe*. Jede derartige Gruppe besteht aus Isometrien eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$ . Ihr kennzeichnendes Merkmal ist es, dass der Normalteiler der Translationsvektoren ein *Gitter* von  $\mathbb{E}$  ist. Aus diesem Grunde geht dem Abschnitt B5, in dem die kristallographischen Gruppen eingeführt werden, ein Abschnitt über Gitter voran.

\*\*\*

*In diesem Abschnitt bezeichnen  $\Gamma$  ein Gitter des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  der Dimension  $n \geq 1$  und  $\text{Aut}(\Gamma)$  die Automorphismengruppe des Gitters, es sei denn, das Gegenteil werde ausdrücklich hervorgehoben.*

### 4.1 Begriff des Gitters und seiner Automorphismengruppe

Ich gebe zuerst die Definition der Gitter. Sie lässt auf verschiedene, aber äquivalente, Arten formulieren. Am besten eignet sich für uns

**DEFINITION B4.1** Eine Untergruppe  $\Gamma$  der additiven Gruppe von  $\mathbb{E}$  wird *Gitter* genannt, wenn sie von einer Basis des Vektorraumes  $\mathbb{E}$  erzeugt wird.

**DEFINITION B4.2** Ist  $\Gamma$  ein Gitter von  $\mathbb{E}$ , so wird jede Vektorraum-Basis von  $\mathbb{E}$ , welche das Gitter erzeugt, eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters genannt.

In Definition B4.1 wird die algebraische Form eines Gitter von  $\mathbb{E}$  betont: ein Gitter ist eine Teilmenge der Form  $\{x_1 \cdot b_1 + \dots + x_n \cdot b_n \mid (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^n\}$ , wobei  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, \dots, b_n)$  eine geordnete Vektorraum-Basis von  $\mathbb{E}$  bezeichnet.

Bei der Analyse der kristallographischen Gruppen  $G$  spielt neben dem Gitter der Translationsvektoren  $\Gamma(G)$  auch die so genannte *Punktgruppe*  $G_0$  eine wichtige Rolle. Diese Gruppe ist eine Untergruppe der Symmetriegruppe des Gitters  $\Gamma(G)$ . Unter der Symmetrie- oder Automorphismengruppe eines Gitter versteht man dabei folgendes:

**DEFINITION B4.3** Sei  $\Gamma$  ein Gitter in  $\mathbb{E}$ . Die Menge der orthogonalen Abbildungen  $\varphi: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$ , welche das Gitter  $\Gamma$  auf sich abbilden, ist eine Untergruppe der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$ ; sie wird *Automorphismengruppe* des Gitters genannt und mit  $\text{Aut}(\Gamma)$  bezeichnet.

Im Rest dieses Unterabschnittes erarbeite ich eine Kennzeichnung der Gitter als diskrete Untergruppen des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  mit kompaktem Fundamentalebene (Theorem B4.4) und beweise, dass die Automorphismengruppe jedes Gitters endlich ist (Satz B4.7).

#### 4.1a Kennzeichnung der Gitter

In Beispielen und Anwendungen treten oft additive Untergruppen eines Euklidischen Vektorraumes auf, von denen zwar *a priori* bekannt ist, dass sie eine Basis des umgebenden Vektorraumes enthalten, ohne dass unmittelbar einsichtig ist, dass die Untergruppen von einer Vektorraumbasis erzeugt werden können. In solchen Fällen ist die folgende Kennzeichnung hilfreich:

HAUPTSATZ B4.4 Für jede Untergruppe  $\Gamma$  des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  sind die folgenden Bedingungen gleichwertig:

- (i)  $\Gamma$  wird von einer Basis des Vektorraumes  $V$  erzeugt, d. h.  $\Gamma$  ist ein Gitter in  $\mathbb{E}$ .
- (ii)  $\Gamma$  ist eine diskrete Untergruppe des Raumes  $\mathbb{E}$ , welche eine Basis von  $\mathbb{E}$  enthält.

*Proof.* (i)  $\Rightarrow$  (ii). Ein Gitter  $\Gamma$  besteht nach Definition aus allen ganzzahligen Linearkombinationen  $x_1 \cdot b_1 + \dots + x_n \cdot b_n$  einer geordneten Basis  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, \dots, b_n)$  des umgebenden Raumes  $\mathbb{E}$ . Wir wollen zeigen, dass jede Kugel  $K_\rho = \{x \in \mathbb{E} \mid \|x\| \leq \rho\}$  nur endlich Vektoren des Gitters enthält.

Um dies zu begründen, wählen wir eine Orthonormalbasis  $\mathcal{U} = (u_1, \dots, u_n)$  in  $\mathbb{E}$ . Jeder Vektor  $v \in V$  wird dann durch die Fourier-Summe  $\sum_{k=1}^n \langle v, u_k \rangle \cdot u_k$  dargestellt. Da  $\mathcal{B}$  und  $\mathcal{U}$  geordnete Basis sind, gibt es andererseits eine  $n$ -reihige Matrix  $A = (a_{j,k})$ , derart dass die Beziehung  $u_k = \sum_j a_{j,k} \cdot b_j$  für jeden Index  $j \in \{1, 2, \dots, n\}$  richtig ist. Folglich lassen sich die Koeffizienten  $x_j$  des Vektors  $v$  bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  so ausdrücken:

$$v = \sum_k \langle v, u_k \rangle \cdot u_k = \sum_k \langle v, u_k \rangle \cdot \left( \sum_j a_{j,k} \cdot b_j \right) = \sum_j \left( \sum_k a_{j,k} \langle v, u_k \rangle \right) \cdot b_j.$$

Diese Beschreibung des Koeffizienten  $x_j$  ermöglicht die Abschätzung

$$|x_j| = \left| \sum_k a_{j,k} \langle v, u_k \rangle \right| \leq \sum_k |a_{j,k}| \cdot |\langle v, u_k \rangle| \leq \sum_k |a_{j,k}| \cdot \|v\|. \quad (\text{B4.1})$$

Sie lehrt, wie die Koeffizienten  $x_1, \dots, x_n$  aller Vektoren einer Kugel  $K_\rho$  durch den Radius  $\rho$  und die Koeffizienten der Matrix  $A$  beschränkt werden können. Insbesondere zeigt sie, dass die Menge  $\Gamma \cap K_\rho = \{x \in \mathbb{Z}^n \mid \|x_1 b_1 + \dots + x_n b_n\| \leq \rho\}$  für jeden Radius  $\rho$  endlich ist.

(ii)  $\Rightarrow$  (i). Nach Voraussetzung enthält die Gruppe  $\Gamma$  eine Basis  $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$  des Vektorraumes  $\mathbb{E}$ . Ordnet man diese Basis nach aufsteigendem Index, kommt man zu einer Fahne von Teilräumen

$$U_1 = \mathbb{R} \cdot v_1 < U_2 = \mathbb{R} \cdot v_1 + \mathbb{R} \cdot v_2 < U_3 < \dots < U_n = \mathbb{E};$$

dabei sei  $U_j$  der Unterraum, der von den Vektoren  $v_1, \dots, v_j$  aufgespannt wird. Mit Hilfe dieser Fahne konstruieren wir nun eine Folge  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ , von der wir anschliessend nachweisen, dass sie eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma$  ist.

Die Konstruktion der Folge  $\mathcal{B}$  erfolgt schrittweise. Als  $b_1$  nehmen wir einen Gitterpunkt von  $\Gamma \cap U_1$ , der minimale positive Norm hat. Ein solcher Vektor existiert, da  $\Gamma$  eine diskrete Teilmenge des Raumes  $\mathbb{E}$  ist. Als zweiten Vektor wählt man einen Vektor in  $\Gamma \cap U_2$ , der nicht in  $U_1$  liegt, aber von  $U_1$  minimalen Abstand aufweist; die Existenz eines solchen Punktes wird durch Hilfssatz B4.5, den eben bewiesenen Punkt (i) und den Umstand, dass  $U_1$  von Vektoren des Gitters aufgespannt wird, impliziert. Auf die gleiche Art findet man die Vektoren  $b_3, \dots, b_n$ .

Es ist klar, dass  $\mathcal{B}$  eine geordnete Basis des Vektorraumes  $\mathbb{E}$  ist. Um nach zu weisen, dass sie die Gruppe  $\Gamma$  erzeugt, gehen wir wieder schrittweise vor. Zunächst erzeugt  $b_1$  die Untergruppe  $\Gamma_1 = \Gamma \cap U_1$ , denn  $b_1$  ist ein Vektor aus  $\Gamma_1$  mit minimaler positiver Norm. (Man kann auch Hilfssatz B4.6 mit  $\mathbb{E} = U_1$  und  $U = \{0\}$  anwenden.) Hat man schon eingesehen, dass die Teilfolge  $\mathcal{B}' = (b_1, \dots, b_{n-1})$  die Untergruppe  $\Gamma \cap U_{n-1}$  erzeugt, so gewinnt man die behauptete Eigenschaft der Folge  $\mathcal{B}$ , indem man Hilfssatz B4.6 mit  $U = U_{n-1}$  anwendet.  $\square$

Im obigem Beweis sind zwei Resultate zitiert worden, die auch in anderen Zusammenhängen von Nutzen sind. Das erste lautet so:

**HILFSSATZ B4.5** *Seien  $\Gamma$  eine diskrete Untergruppe des Vektorraumes  $\mathbb{E}$ , die  $\mathbb{E}$  aufspannt, und  $U \subsetneq \mathbb{E}$  ein echter Unterraum, der vom Durchschnitt  $\Gamma \cap U$  erzeugt wird. Dann gibt es in der Menge  $\Gamma \setminus U$  einen Vektor, der kleinsten Abstand von  $U$  hat.*

*Proof.* Sei  $U^\perp$  das Orthogonalkomplement von  $U$  in  $\mathbb{E}$ . Jeder Vektor  $v \in \mathbb{E}$  hat eine eindeutige Darstellung  $v = v_\parallel + v_\perp$  mit  $v_\parallel \in U$  und  $v_\perp \in U^\perp$ . Die Länge von  $v_\perp$  ist gerade der orthogonale Abstand  $d_2(v, U)$  von  $v$  zu  $U$ .

Da  $\Gamma$  den Vektorraum  $\mathbb{E}$  erzeugt und  $U$  ein echter Teilraum dieses Vektorraumes ist, enthält die Differenz  $\Gamma \setminus U$  einen Vektor, etwa  $w$ . Dieser Vektor hat die Darstellung  $w = w_\parallel + w_\perp$  mit  $w_\parallel \in U$  und  $w_\perp \in U^\perp$ . Nach Annahme wird  $U$  vom Durchschnitt  $\Gamma \cap U$  aufgespannt. Somit gibt es eine Basis  $\mathcal{B}' = (b_1, \dots, b_m)$  von  $U$ , die aus Gitterpunkten besteht. Da die Parallelkomponente  $w_\parallel$  von  $w$  in  $U$  liegt, gibt es weiter reelle Zahlen  $\lambda_1, \dots, \lambda_m$  mit  $w_\parallel = \sum_j \lambda_j \cdot b_j$ . Seien  $x_1, \dots, x_m$  ganze Zahlen, derart dass die Beträge  $|\lambda_j - x_j|$  kleiner als 1 sind. Dann ist  $w' = w - \sum_{j=1}^{m-1} x_j \cdot b_j$  ein Vektor aus  $\Gamma \setminus U$ , für den die Abschätzung

$$\|w'\| = \left\| \sum_j (\lambda_j - x_j) \cdot b_j + w_\perp \right\| < \sum_j \|b_j\| + d_2(w, U)$$

gilt. Weiter ist  $d_2(w', U) = d_2(w, U)$ . Setze  $\rho = \sum_j \|b_j\| + d_2(w, U)$ . Falls es einen Vektor  $v \in \Gamma \setminus U$  gibt, der noch näher an  $U$  liegt als  $w$ , so kann man wie oben einen Vektor  $v'$  konstruieren, welcher der Kugel  $K_\rho$  angehört, und den gleichen Abstand von  $U$  wie  $v$  hat. Nun ist die Gruppe  $\Gamma$  nach Annahme eine diskrete Untergruppe von  $\mathbb{E}$ ; die Kugel  $K_\rho$  enthält daher nur endlich viele Punkte. Unter diesen wird es einen geben, der nicht in  $U$  enthalten ist, aber minimalen Abstand von  $U$  hat.  $\square$

Eine Anwendung des eben bewiesenen Hilfssatzes ist das nächste Resultat; es ist im Beweis von Theorem B4.4 ebenfalls verwendet worden.

**HILFSSATZ B4.6** *Seien  $\Gamma$  eine diskrete Untergruppe des Vektorraumes  $\mathbb{E}$ , die  $\mathbb{E}$  aufspannt, und  $U$  ein Unterraum der Kodimension 1, welcher vom Durchschnitt  $\Gamma \cap U$  erzeugt wird. Dann ist das Bild von  $\Gamma$  unter der Projektion von  $\mathbb{E}$  auf das orthogonale Komplement  $U^\perp$  von  $U$  eine unendlich zyklische Gruppe.*

*Weiter gilt: sind  $\mathcal{B}' = (b_1, b_2, \dots, b_{n-1})$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Durchschnittes  $\Gamma \cap U$ , und  $v$  ein Vektor in  $\Gamma \setminus U$ , so erzeugt die Folge  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_{n-1}, v)$  genau dann  $\Gamma$ , wenn  $v$  unter allen Punkten von  $\Gamma \setminus U$  minimalen Abstand von  $U$  hat.*

*Proof.* Nach Hilfssatz B4.5 enthält  $\Gamma \setminus U$  einen Vektor  $v_0$ , der von  $U$  minimalen Abstand hat. Wir zerlegen  $v$  gemäss der orthogonalen Zerlegung  $\mathbb{E} = U \oplus U^\perp$  des Raumes und bezeichnen die Orthogonalkomponente von  $v_0$  mit  $z$ .

Sei nun  $v$  ein beliebiger Vektor aus  $\Gamma$ . Dann ist  $v_\perp$  ein reelzahliges Vielfaches  $\lambda \cdot v_\perp$  von  $z$ . Ist  $m$  eine ganze Zahl mit  $|\lambda - m| < 1$ , so gehört der Differenzvektor  $v' = v - m \cdot v_0$  zu  $\Gamma$  und befindet sich näher an  $U$  als  $v$ , denn

$$(v - m \cdot v_0)_\perp = v_\perp - m \cdot z = (\lambda - m) \cdot z.$$

Auf Grund der Minimaleigenschaft von  $v_0$  liegt  $v'$  daher im Unterraum  $U$ . Da er auch im Gitter  $\Gamma$  liegt, ist er eine ganzzahlige Linearkombination der  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}' =$

$(b_1, b_2, \dots, b_{n-1})$  von  $\Gamma \cap U$ , etwa  $v' = m_1 \cdot b_1 + \dots + m_{n-1} \cdot b_{n-1}$ . Somit ist

$$v = m_1 \cdot b_1 + \dots + m_{n-1} \cdot b_{n-1} + m \cdot v_0. \quad (\text{B4.2})$$

Obige Überlegung beweist als erstes, dass  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_{n-1}, v_0)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma$  ist. Sodann zeigt sie, dass das Bild des Gitters unter der Projektion auf die Gerade  $U^\perp$  eine unendlich zyklische Gruppe ist, die vom Vektor  $z = (v_0)_\perp$  erzeugt wird. Da der Abstand  $d_2(w, U)$  gerade  $|m| \cdot d_2(v_0, U)$  beträgt, erkennt man weiter, dass  $\mathcal{B}'$  zusammen mit einem Vektor  $w \in \Gamma \setminus U$ , der  $d_2(w, U) > d_2(v_0, U)$  erfüllt, das Gitter nicht erzeugt. Ist hingegen,  $d_2(w, U) = d_2(v_0, U)$ , so ist der Koeffizient  $m$  in der Darstellung (B4.2) gleich  $\pm 1$ , weshalb man  $v_0$  als ganzzahlige Linearkombination von  $w$  und der Folge  $\mathcal{B}' = (b_1, \dots, b_{n-1})$  darstellen kann. Daher ist mit  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_{n-1}, v_0)$  auch  $(b_1, \dots, b_{n-1}, w)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ .  $\square$

#### 4.1b Endlichkeit der Automorphismengruppe eines Gitters

Das nächste Resultat ist eine Folge der Orthogonalität der Automorphismen eines Gitters und der inzwischen nachgewiesenen Diskretheit der Gitter.

**SATZ B4.7** Die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  jedes Gitters  $\Gamma$  ist endlich.

*Proof.* Die Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  besteht aus allen orthogonalen Abbildungen  $\varphi$  von  $\mathbb{E}$ , die  $\Gamma$  auf sich abbilden. Diese Abbildungen bilden jede Kugel  $K_\rho = \{x \in \mathbb{E} \mid \|x\| \leq \rho\}$  mit Mittelpunkt im Ursprung, also auch jeden Durchschnitt  $\Gamma \cap K_\rho$ , auf sich ab. Für jede positive reelle Zahl  $\rho$  erhält man daher durch Einschränken eine Abbildung

$$\eta_\rho: \text{Aut}(\Gamma) \longrightarrow \text{Perm}(\Gamma \cap K_\rho)$$

von  $\text{Aut}(\Gamma)$  in die Gruppe der Permutationen der Menge  $\Gamma \cap K_\rho$ . Sie ist ein Homomorphismus, dessen Kern aus allen orthogonalen Abbildungen  $\varphi \in \text{Aut}(\Gamma)$  besteht, die  $\Gamma \cap K_\rho$  punktweise festhalten. Wählt man  $\rho$  so gross, dass  $\Gamma \cap K_\rho$  ein Erzeugendensystem von  $\mathbb{E}$  enthält, wird  $\eta_\rho$  daher injektiv.

Nun ist aber  $\Gamma$  eine diskrete Untergruppe der additiven Gruppe von  $\mathbb{E}$  (siehe Theorem B4.4). Deshalb ist jede der Mengen  $\Gamma \cap K_\rho$  endlich. Insgesamt ergibt sich, dass  $\text{Aut}(\Gamma)$  isomorph einer Untergruppe der Gruppe aller Permutationen einer endlichen Menge und daher endlich ist.  $\square$

**BEMERKUNG B4.8** Der eben bewiesene Satz zeigt, dass die Automorphismengruppe jedes Gitters in  $\mathbb{E}$  endlich ist; er lässt aber die Frage offen, ob es eine universelle Schranke der Ordnungen all dieser Automorphismengruppen gibt. Die Antwort ist positiv: nach Korollar C7.1 teilt nämlich die Ordnung der Automorphismengruppe jedes Gitters eines  $n$ -dimensionalen Euklidischen Raumes die Ordnung der Matrizen­gruppe  $\text{GL}(n, \mathbb{F}_3)$ . Deren Ordnung beträgt  $(3^n - 1) \cdot (3^n - 3) \cdot (3^n - 3^2) \cdot \dots \cdot (3^n - 3^{n-1})$ .

#### 4.1c Minimalmenge eines Gitters

Ein Gitter eines Euklidischen Vektorraumes ist eine unendliche Untergruppe und daher, *a priori*, schwierig zu überblicken. Will man zum Beispiel nachweisen, dass zwei Gitter echt verschieden, etwa nicht ähnlich, sind, können endliche Teilmengen, welche den Gittern kanonisch zugeordnet sind, hilfreich sein. Die Minimalmenge ist ein Beispiel einer solchen Teilmenge:

DEFINITION B4.9 Ist  $\Gamma$  ein Gitter eines Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$ , so bezeichne  $\mathcal{M}(\Gamma)$  die Menge der Vektoren minimaler positiver Länge von  $\Gamma$  und  $m(\Gamma)$  die gemeinsame Länge der Vektoren von  $\mathcal{M}(\Gamma)$ . Man nennt  $\mathcal{M}(\Gamma)$  die *Minimalmenge* des Gitters  $\Gamma$ .

Die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma)$  existiert und ist endlich, denn  $\Gamma$  ist eine diskrete Untergruppe von  $\mathbb{E}$  (Theorem B4.4). Da  $\text{Aut}(\Gamma)$  aus orthogonalen Abbildungen besteht, ist die Minimalmenge invariant unter der Automorphismengruppe des Gitters. Sie liefert daher einen Homomorphismus

$$\eta_*: \text{Aut}(\Gamma) \longrightarrow \text{Perm}(\mathcal{M}(\Gamma)). \tag{B4.3}$$

Er ist injektiv, wenn  $\mathcal{M}(\Gamma)$  den Vektorraum  $\mathbb{E}$  aufspannt.

### 4.2 Kubische Gitter

In diesem Unterabschnitt illustriere ich die Begriffe des vorangehenden Unterabschnittes durch eine wichtige Klassen von Gittern. Im 3-dimensionalen Raum sind die Gitter dieser Klasse dem Standard-Gitters  $\mathbb{Z}^3$  ähnlich und werden *primitive kubische Gitter* genannt. Ihre Verallgemeinerung auf beliebige Euklidische Räume lautet:

DEFINITION B4.10 Ein Gitter  $\Gamma$  des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$  wird *kubisch* genannt, wenn es eine  $\mathbb{Z}$ -Basis besitzt, die aus gleich langen, paarweise orthogonalen Vektoren besteht.

#### 4.2a Minimalmenge eines kubisches Gitters

Um die Automorphismengruppen der Gitter zu berechnen, ziehen wir die Minimalmenge der Gitter heran (siehe Definition 4.1c). Deren Bestimmung ist leicht: ist  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, \dots, b_n)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des kubischen Gitters  $\Gamma$ , die aus paarweise orthogonalen Vektoren gleicher Länge besteht, so ist

$$\mathcal{M}(\Gamma_n) = \{\pm b_1, \pm b_2, \dots, \pm b_n\}; \tag{B4.4}$$

denn gemäss der Formel  $\|\sum x_j \cdot b_j\|^2 = (\sum_j x_j^2) \cdot \|b_1\|^2$  ist die kleinste positive Länge der Gitterelemente gleich  $\|b_1\|$ .

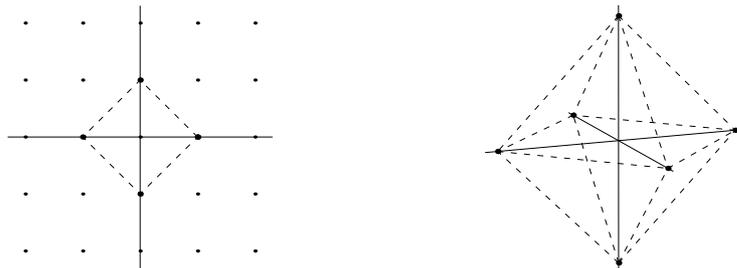


Abbildung B.1: Minimalmengen eines quadratischen Netzes und eines kubischen Gitters

In den Dimensionen 2 und 3 sind die Minimalmengen die Eckenmenge eines Quadrates, beziehungsweise jene eines regelmässigen Oktaeders (siehe Abbildung (B.1)); für  $n \geq 4$  ist die Minimalmenge die Eckenmenge eines regelmässigen Polytops, das *Kreuz-Polytop* genannt wird.

#### 4.2b Automorphismengruppe eines kubischen Gitters

Da die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma_n)$  eines kubischen Gitters den umgebenden Raum  $\mathbb{E}^n$  erzeugt, ist der Homomorphismus (B4.3) injektiv. Dieser Umstand macht die Bestimmung der Automorphismen des Gitters leicht: jeder Automorphismus permutiert die Vektoren der Basis  $(b_1, \dots, b_n)$  und ändert darauf einige der Vorzeichen der permutierten Basisvektoren. Die Automorphismengruppe enthält folglich die Untergruppe  $N$  der Ordnung  $2^n$ , die von allen Vorzeichenwechseln

$$b_1 \mapsto \pm b_1, \quad b_2 \mapsto \pm b_2, \dots, b_n \mapsto \pm b_n$$

gebildet wird, und die Untergruppe  $P$ , die aus allen Permutationsabbildungen

$$b_1 \mapsto b_{\pi(1)}, \quad b_2 \mapsto b_{\pi(2)}, \dots, b_n \mapsto b_{\pi(n)}$$

besteht. Die Untergruppe  $N$  ist ein Normalteiler der Automorphismengruppe, ist sie doch der Kern des offensichtlichen Homomorphismus

$$\text{Aut}(\Gamma_n) \rightarrow \text{Perm}(\{b_j, -b_j \mid 1 \leq j \leq n\}).$$

Die Ordnung der Automorphismengruppe beträgt daher  $2^n \cdot n!$ .

**BEMERKUNG B4.11** Die Minimalfolgen des Gitters  $\Gamma_n$  haben alle die Form  $\mathcal{F} = (\pm b_{\pi(1)}, \pm b_{\pi(2)}, \dots, \pm b_{\pi(n)})$ ; die Automorphismengruppe des Gitters wirkt auf ihnen also transitiv.

#### 4.2c Zusammenhang mit den Spiegelungsgruppen vom Typus B

Die kubischen Gitter werden auch *Gitter vom Typus B* genannt. Dieser Name erklärt sich aus dem Umstand, dass die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma_n)$  eines kubischen Gitters eine Spiegelungsgruppe vom Typus  $B_n$  ist und dass das Wurzelsystem  $\mathcal{R}$  der Gruppe das Gitter  $\Gamma_n$  erzeugt.

Um das Gesagte verständlich, bestimmen wir die Spiegelungen, die in  $\text{Aut}(\Gamma_n)$  liegen. Jede Spiegelung  $\varphi: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  an einem vektoriiellen Hyperraum hat die Form

$$\varphi(x) = x - 2 \frac{\langle x, a \rangle}{\|a\|^2} \cdot a \text{ mit } a \neq 0.$$

Liegt sie in  $\text{Aut}(\Gamma_n)$ , so permutiert sie die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma_n) = \{\pm b_1, \dots, \pm b_n\}$ . Ist  $j$  ein Index mit  $\varphi(b_j) \neq b_j$ , so gibt es für das Bild  $\varphi(b_j)$  daher nur drei Möglichkeiten

$$\varphi(b_j) = -b_j, \quad \varphi(b_j) = b_k \text{ mit } k \neq j, \text{ und } \varphi(b_j) = -b_k \text{ mit } k \neq j.$$

Nun ist aber  $\varphi(b_j) - b_j = -2\langle b_j, a \rangle / \|a\|^2 \cdot a$ , also ein Vielfaches des Normalenvektors  $a$ . Im Fall  $\varphi(b_j) = -b_j$  ist die Spiegelung  $\varphi$  also der Vorzeichenwechsel der  $j$ -ten Koordinate; im Falle  $\varphi(b_j) = b_k$  handelt es sich um die Permutationsabbildung  $\pi_{j,k}$ , die  $b_j$  und  $b_k$  austauscht und alle anderen Vektoren der Basis  $\{b_1, \dots, b_n\}$  festhält. Im Fall  $\varphi(b_j) = -b_k$  ist  $\varphi$  die Zusammensetzung der Permutationsabbildung  $\pi_{j,k}$  mit dem Vorzeichenwechsel der  $j$ -ten und der  $k$ -ten Koordinate.

In der Theorie der Spiegelungsgruppen beschreibt man das System der Spiegelungen, die in der Gruppe liegen, durch das System der Orthogonalkomplemente der

Spiegel der Spiegelungen, also durch ein System von Geraden, und jede dieser Geraden durch ein Paar  $\{u, -u\}$  von Vektoren der Gerade.<sup>1</sup> Man erhält so eine Menge von Vektoren positiver Länge, die unter der Abbildung  $x \mapsto -x$  abgeschlossen ist und *Wurzelsystem* genannt wird. Im vorliegenden Falle kommt man zum Wurzelsystem

$$\mathcal{R}(\Gamma_n) = \{\pm b_i, \pm b_j \pm b_k \mid 1 \leq i \leq n \text{ und } 1 \leq j < k \leq n\}. \quad (\text{B4.5})$$

Es enthält  $2n + 4\binom{n}{2} = 2n + 2n(n-1) = 2n^2$  Vektoren, genannt *Wurzeln*.

Fassen wir zusammen:

**SATZ B4.12** Die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma_n)$  eines kubischen Gitters  $\Gamma_n$  wird erzeugt von den Spiegelungen, die zum Wurzelsystem (B4.5) gehören. Sie enthält genau  $n^2$  Spiegelungen, und wird als Spiegelungsgruppe vom Typus  $B_n$  bezeichnet.

### 4.3 Minimalfolgen

Sind  $\Gamma$  ein Gitter und  $\mathcal{F} = (v_1, v_2, \dots, v_n)$  eine Folge linear unabhängiger Vektoren aus  $\Gamma$ , so zeigt der Beweis der Implikation (ii)  $\Rightarrow$  (i) von Theorem B4.4, wie man eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma$  finden kann, die der Fahne

$$U_1 = \mathbb{R} \cdot v_1 < U_2 = \mathbb{R} \cdot v_1 + \mathbb{R} \cdot v_2 < U_3 = \mathbb{R} \cdot v_1 + \mathbb{R} \cdot v_2 + \mathbb{R} \cdot v_3 < \dots < U_n = \mathbb{E}$$

angepasst ist. Häufig braucht man aber Erzeugendensysteme, die vorhandene Besonderheiten des Gitters berücksichtigen. Dabei können Minimalfolgen von Nutzen sein.

#### 4.3a Begriff der Minimalfolge

**DEFINITION B4.13** Eine Folge  $\mathcal{F} = (u_1, \dots, u_n)$  von Vektoren eines Gitters  $\Gamma$  wird *Minimalfolge* des Gitters genannt, wenn sie die folgenden Bedingungen erfüllt:

$$\begin{aligned} \|u_1\| &= \min \{ \|v\| \mid v \in \Gamma \setminus \{0\} \}, \\ \|u_2\| &= \min \{ \|v\| \mid v \in \Gamma \setminus \mathbb{R} \cdot u_1 \}, \\ \|u_3\| &= \min \{ \|v\| \mid v \in \Gamma \setminus (\mathbb{R} \cdot u_1 + \mathbb{R} \cdot u_2) \}, \\ &\vdots \\ \|u_n\| &= \min \{ \|v\| \mid v \in \Gamma \setminus (\mathbb{R} \cdot u_1 + \dots + \mathbb{R} \cdot u_{n-1}) \}. \end{aligned}$$

Aus der Definition einer Minimalfolge ergibt sich unmittelbar, dass sie linear unabhängig ist und dass ihre Elemente dem Gitter angehören. Eine Minimalfolge braucht aber das Gitter nicht zu erzeugen. Dies zeigt

**BEISPIEL B4.14** Sei  $\Gamma_n = \mathbb{Z}^n$  das kubische Standard-Gitter und  $\Gamma'_n$  das zugeordnete *innenzentrierte* kubische Gitter; er wird von den Vektoren

$$e_1, e_2, \dots, e_{n-1} \text{ und } u = \frac{1}{2}(e_1 + e_2 + \dots + e_n)$$

erzeugt. Die Vektoren  $(\pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}, \dots, \pm \frac{1}{2})^t$  haben alle die Norm  $\sqrt{n}/2$ . Ist  $n < 4$ , bilden sie gerade die Minimalmenge von  $\Gamma'_n$ : jede Minimalfolge von  $\Gamma'_n$  besteht nur aus solchen Vektoren und sie erzeugt das Gitter, wie man leicht bestätigt. Ist  $n \geq 4$ , liefert die Standard-Basis eine Minimalfolge; sie erzeugt das Teilgitter  $\mathbb{Z}^n$ , nicht aber  $\Gamma'_n$ .

<sup>1</sup>Die Länge dieser Vektoren ist nicht durch die Gruppe gegeben, daher nicht eindeutig; man kann sie als Einheitsvektoren nehmen, manchmal sind aber andere Wahlen praktischer.

### 4.3b Allgemeine Eigenschaften

Im folgenden Hilfssatz sind einige Eigenschaften der Minimalfolgen zusammengestellt, die für alle Gitter gelten:

**HILFSSATZ B4.15** *Auf jedes Gitter  $\Gamma$  eines Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$  der Dimension  $n$  treffen die folgenden Aussagen zu:*

(i)  $\Gamma$  besitzt eine Minimalfolge.

(ii) Ist  $\mathcal{F} = (u_1, \dots, u_n)$  eine Minimalfolge von  $\Gamma$ , so gilt  $\|u_1\| \leq \|u_2\| \leq \dots \leq \|u_n\|$ .

(iii) Sind  $\mathcal{F} = (u_1, \dots, u_n)$  und  $\mathcal{F}' = (u'_1, \dots, u'_n)$  Minimalfolgen, so gilt  $\|u_j\| = \|u'_j\|$  für jeden Index  $j \in \{1, \dots, n\}$ .

(iv) Jede Minimalfolge  $\mathcal{F} = (u_1, \dots, u_n)$  erfüllt die Ungleichungen

$$2|\langle u_i, u_j \rangle| \leq \|u_i\|^2 \quad (\text{B4.6})$$

für jedes Paar von Indizes  $(i, j)$  mit  $i < j$ .

*Proof.* (i) Sei Kugel  $K_\rho$  eine Kugel mit Mittelpunkt im Ursprung, die so gross ist, dass  $\mathcal{X} = \Gamma \cap K_\rho$  den Vektorraum  $\mathbb{E}$  erzeugt. Dann ist  $\mathcal{X}$  eine endliche Menge, die einen Vektor  $u_1$  kleinster positiver Norm enthält, dann ausserhalb der Geraden  $\mathbb{R} \cdot u_1$  einen Vektor kleinster Norm, und so weiter.

(ii) Es ist offensichtlich, dass  $\|u_1\| \leq \|u_2\|$  ist. Sei nun  $j$  ein Index mit  $1 < j < n$ , für den die Ungleichungen  $\|u_1\| \leq \|u_2\| \leq \dots \leq \|u_j\|$  bereits nachgewiesen sind. Dann liegen sowohl  $u_j$ , wie auch  $u_{j+1}$ , ausserhalb des Unterraumes  $\mathbb{R} \cdot u_1 + \dots + \mathbb{R} \cdot u_{j-1}$ ; nach Wahl von  $u_j$  ist daher  $\|u_j\| \leq \|u_{j+1}\|$ .

(iii) Es ist klar, dass  $\|u_1\| = \|u'_1\|$  ist. Sei nun  $j$  ein Index mit  $1 < j < n$ , für den schon feststeht, dass die Gleichungen  $\|u_i\| = \|u'_i\|$  für  $i \leq j$  richtig sind. Sei  $U$  der von den Vektoren  $u_1, \dots, u_j$  aufgespannte Unterraum und sei  $U'$  der von den Vektoren  $u'_1, \dots, u'_j$  erzeugte Unterraum. Stimmen diese Unterräume überein, so ist offensichtlich, dass  $u_{j+1}$  und  $u'_{j+1}$  die gleiche Norm haben müssen. Sei also  $U \neq U'$ . Dann gibt es einen Vektor  $u'_k$  mit  $k \leq j$ , der nicht in  $U$  drin liegt. Bei der Wahl von  $u_{j+1}$  steht dann neben  $u_{j+1}$  auch  $u'_k$  zur Diskussion. Also muss  $\|u_{j+1}\| \leq \|u'_k\|$  sein; im Hinblick auf die schon bewiesene Aussage (ii) gelten daher die Ungleichungen

$$\|u'_k\| = \|u_k\| \leq \|u_{k+1}\| \leq \dots \leq \|u_{j+1}\| \leq \|u'_k\|.$$

Sie impliziert die Kette von Gleichungen  $\|u_k\| = \dots = \|u_j\| = \|u_{j+1}\|$ . Ebenso gibt es einen Index  $\ell \leq j$ , so dass der Vektor  $u_\ell$  ausserhalb von  $U'$  liegt. Wie zuvor sieht man dann, dass die Kette von Gleichungen  $\|u_\ell\| = \dots = \|u'_j\| = \|u'_{j+1}\|$  richtig ist. Insbesondere gelten deshalb die Gleichungen

$$\|u_{j+1}\| = \|u_j\| = \|u'_j\| = \|u'_{j+1}\|.$$

(iv) Da der Vektor  $u_j$  ausserhalb des Unterraumes  $\mathbb{R} \cdot u_1 + \dots + \mathbb{R} \cdot u_{j-1}$  liegt, gilt dies auch für die Differenzvektoren  $u_j \pm u_i$  mit  $i < j$ . Bei der Wahl von  $u_j$  sind also auch diese Differenzvektoren zu berücksichtigen. Daher gelten die Ungleichungen

$$\|u_j\|^2 \leq \|u_j \pm u_i\|^2 = \|u_j\|^2 \pm 2\langle u_j, u_i \rangle + \|u_i\|^2.$$

Daher ist keine der beiden Zahlen  $\pm 2\langle u_i, u_j \rangle + \|u_i\|^2$  negativ.  $\square$

Ich gebe noch ein zweites, etwas spezielleres Resultat. Es wird in der folgenden Nummer, aber auch im Beweis von Hilfssatz C7.8, zum Zuge kommen.

HILFSSATZ B4.16 Seien  $\Gamma$  ein Gitter von  $\mathbb{E}$  und  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine Basis von  $\mathbb{E}$ , welche das Gitter erzeugt. Dann gibt es zu jedem Vektor  $v \in \mathbb{E}$  einen Vektor  $w \in \Gamma$ , der die Abschätzung

$$\|v - w\|^2 \leq \frac{1}{4} (\|b_1\|^2 + \dots + \|b_n\|^2) \quad (\text{B4.7})$$

erfüllt. Durch geeignete Wahl von  $w$  kann man sogar erreichen, dass die Gleichheit in dieser Beziehung nicht eintritt, es sei denn, der folgende Ausnahmefall liege vor: die Vektoren der Basis  $\mathcal{B}$  sind paarweise orthogonal und jeder Koeffizient der Linearkombination  $v = \sum_j \lambda_j \cdot b_j$  ist halb-ganzzahlig.<sup>2</sup>

*Proof.* Ist  $n = 1$ , so ist  $v = \lambda \cdot b_1$  und es gibt eine ganze Zahl  $m$  mit  $|\lambda - m| \leq 1/2$ . Dann gilt:

$$\|v - m \cdot b_1\|^2 = \|(\lambda - m) \cdot b_1\|^2 = (\lambda - m)^2 \cdot \|b_1\|^2 \leq \frac{1}{4} \|b_1\|^2.$$

Wenn  $\lambda$  nicht halb-ganzzahlig ist, tritt die Gleichheit nicht ein.

Seien nun  $n > 1$  und  $\mathcal{F}'$  die Teilfolge  $(b_1, \dots, b_{n-1})$  von  $\mathcal{F}$ . Diese Teilfolge erzeugt einen Unterraum  $U$  und die Untergruppe  $\Gamma' = \Gamma \cap U$ . Der gegebene Vektor  $v$  kann als Summe  $v = v_{\parallel} + v_{\perp}$  mit  $v_{\parallel} \in U$  und  $v_{\perp} \in U^{\perp}$  geschrieben werden. Es ist  $v_{\perp}$  ein Vielfaches von  $(b_n)_{\perp}$ , etwa  $v_{\perp} = \lambda \cdot (b_n)_{\perp}$ , und es gibt daher eine ganze Zahl  $m \in \mathbb{Z}$  mit  $|\lambda - m| \leq \frac{1}{2}$ . Andererseits gibt es nach Induktionsannahme einen Gitterpunkt  $w' \in \Gamma \cap U$ , der die Ungleichung

$$\|(v - m \cdot b_n)_{\parallel} - w'\|^2 \leq \frac{1}{4} (\|b_1\|^2 + \dots + \|b_{n-1}\|^2)$$

erfüllt; man kann  $w$  sogar so wählen, dass die Gleichheit nicht eintritt, es sei den die Vektoren der Basis  $\mathcal{B}'$  seien paarweise orthogonal und  $(v - m \cdot b_n)_{\parallel}$  sei eine halb-ganzzahlige Linearkombination dieser Vektoren. Die Rechnung

$$\begin{aligned} \|v - (w' + m \cdot b_n)\|^2 &= \|(v - w' - m \cdot b_n)_{\parallel}\|^2 + \|(v - w' - m \cdot b_n)_{\perp}\|^2 \\ &= \|(v - m \cdot b_n)_{\parallel} - w'\|^2 + \|(v - m \cdot b_n)_{\perp}\|^2 \\ &\leq \frac{1}{4} (\|b_1\|^2 + \dots + \|b_{n-1}\|^2) + (\lambda - m)^2 \cdot \|(b_n)_{\parallel}\|^2 \\ &\leq \frac{1}{4} (\|b_1\|^2 + \dots + \|b_{n-1}\|^2 + \|b_n\|^2) \end{aligned}$$

zeigt,  $\|v - (w' + m \cdot b_n)\|^2$  höchstens gleich  $\frac{1}{4} (\sum \|b_j\|^2)$  ist, und dass diese Schranke nur erreicht wird, wenn für  $w_{\parallel} - (w' + m \cdot b_n)_{\parallel}$  die Ausnahmesituation vorliegt, wenn  $b_n$  auf dem Unterraum  $U$  senkrecht steht und  $|\lambda - m| = \pm \frac{1}{2}$  ist. Ist  $v$  die Linearkombination  $\lambda_1 \cdot b_1 + \dots + \lambda_{n-1} \cdot b_{n-1} + \lambda \cdot b_n$ , so folgt dann, dass  $v_{\parallel} = \lambda_1 \cdot b_1 + \dots + \lambda_{n-1} \cdot b_{n-1}$  ist. Nach dem Ausnahmefall für  $n - 1$  sind die Koeffizienten  $\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}$  deshalb alle halb-ganzzahlig und die Vektoren  $b_1, \dots, b_{n-1}$  paarweise orthogonal. Damit ist alles bewiesen.  $\square$

#### 4.3c Zusätzliche Eigenschaften für $n \leq 4$

Ist die Dimension  $n \leq 4$ , so liefern Minimalfolgen Erzeugendensysteme, es sei denn,  $\Gamma$  habe eine sehr spezielle Form. Dies ist der Inhalt von

<sup>2</sup>Eine reelle Zahl heisse halb-ganzzahlig, wenn sie die Hälfte einer ungeraden ganzen Zahl ist.

HAUPTSATZ B4.17 Sei  $\mathcal{F} = (u_1, u_2, \dots, u_n)$  eine Minimalfolge des Gitters  $\Gamma$  des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$ . Ist  $n \leq 4$ , so erzeugt  $\mathcal{F}$  das Gitter  $\Gamma$ , es sei denn, die Dimension  $n$  sei gleich 4, die Minimalfolge bestehe aus gleich langen, paarweise orthogonalen Vektoren und  $\Gamma$  entstehe aus dem von  $\mathcal{F}$  erzeugten kubischen Gitter durch Innenzentrierung.

*Proof.* Ist  $n = 1$ , so erzeugt  $b_1$  das Gitter nach Hilfssatz B4.6. Seien nun  $n > 1$  und  $U$  der von den ersten  $n - 1$  Vektoren  $u_1, \dots, u_{n-1}$  der Minimalfolge  $\mathcal{F}$  aufgespannte Unterraum. Dann ist  $\mathcal{F}' = (b_1, \dots, b_{n-1})$  eine Minimalfolge des Gitters  $\Gamma \cap U$ ; nach Induktionsannahme erzeugt  $\mathcal{F}'$  also das Gitter  $\Gamma \cap U$ . Wir wenden nun Hilfssatz B4.16 auf das von der Minimalfolge  $\mathcal{F}$  erzeugte Gitter  $\Gamma'$  von  $\mathbb{E}$  an; es ist ein Teilgitter von  $\Gamma$ . Ist  $v \in \Gamma$ , so gibt es danach einen Vektor  $w \in \Gamma'$ , der die strikte Ungleichung

$$\|v - w\|^2 < \frac{1}{4} (\|u_1\|^2 + \dots + \|u_n\|^2) \leq \frac{n}{4} \|u_n\|^2$$

erfüllt, es sei denn die Ausnahmesituation liege vor.<sup>3</sup>

Betrachten wir erst den Normalfall. Da  $n \leq 4$  ist, hat der Differenzvektor  $v - w$  kleinere Norm als  $u_n$ , er muss also in  $U$  liegen. Die Induktionsannahme garantiert dann, dass  $v - w$  eine Linearkombination der ersten  $n - 1$  Vektoren der Folge  $\mathcal{F}$  ist, weshalb  $v$  im Teilgitter  $\Gamma'$  liegt. Nehmen wir nun an, es sei  $v$  ein Vektor von  $\Gamma \setminus \Gamma'$ . Dann muss die Gleichheit

$$\|v - w\|^2 = \frac{1}{4} (\|u_1\|^2 + \dots + \|u_n\|^2)$$

gelten. Da  $v - w$  nicht in  $\Gamma \cap U$  liegt, ist  $\|u_n\| \leq \|v - w\|$ ; obige Gleichheit kann also nur gelten, wenn  $n = 4$  ist, alle Vektoren der Folge  $\mathcal{F}$  gleichlang sind und die Ausnahmesituation von Hilfssatz B4.16 vorliegt. Im gegenwärtigen Fall läuft sie darauf hinaus, dass  $\Gamma'$  ein kubisches Gitter ist und  $v$  zusammen mit  $\Gamma'$  das innenzentrierte kubische Gitter  $\Gamma$  erzeugt.  $\square$

#### 4.4 Innenzentrierte kubische Gitter

In diesem Unterabschnitt behandle ich eine zweite wichtige Klassen von Gittern, die *innenzentrierten kubischen* Gitter. Wie der Name andeutet, entsteht ein solches Gitter aus einem kubischen Gitter durch das Hinzufügen von „Mittelpunkten“. Die innenzentrierten kubischen Gitter unterscheiden sich in verschiedener Hinsicht von den vertrauteren, kubischen Gittern: so sind die innenzentrierten Gitter der Dimension 4 gerade die Ausnahmegitter in Theorem B4.17 und ihre Automorphismengruppen haben gleichfalls eine Ausnahmeeigenschaft (siehe Satz B4.20). Ferner sind diese Gitter in Dimensionen oberhalb von 5 Beispiele von Gittern, deren Minimalmenge zwar den umliegenden Vektorraum, nicht aber das Gitter, erzeugen (siehe Nummer 7.2b).

Die innenzentrierten kubischen Gitter sind so definiert:

DEFINITION B4.18 Seien  $\Gamma_n$  ein kubisches Gitter des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^n$  und  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ , die aus gleich langen, paarweise orthogonalen Vektoren besteht. Dann wird die Gruppe

$$\Gamma'_n = \Gamma_n + \mathbb{Z} \cdot \frac{1}{2}(b_1 + \dots + b_n) \tag{B4.8}$$

das  $\Gamma$  zugeordnete, *innenzentrierte kubische* Gitter genannt.

<sup>3</sup>Nach Punkt (i) des Hilfssatzes B4.15 gelten die Ungleichungen  $\|u_1\| \leq \|u_2\| \leq \dots \leq \|u_n\|$ .

Das Gitter  $\Gamma'_n$  enthält das Teilgitter  $\Gamma_n$  und die Nebenklasse  $\Gamma_n + \frac{1}{2} \cdot (b_1 + \dots + b_n)$ , aber keine weiteren Nebenklassen. Die Vektoren des innenzentrierten Gitters sind daher Linearkombinationen der Basisvektoren  $b_j$ , deren Koeffizienten entweder alle ganzzahlig oder alle *halb-ganzzahlig* sind.<sup>4</sup> Jedes innenzentrierte Gitter von  $\mathbb{E}$  ist ähnlich dem Gitter des  $\mathbb{R}^n$ , das aus dem Standardgitter  $\mathbb{Z}^n$  und der verschobenen Kopie  $\mathbb{Z}^n + \frac{1}{2} \cdot (1, 1, \dots, 1)$  besteht.

4.4a *Minimalmenge eines innenzentrierten kubisches Gitters*

Wie das nächste Resultat zeigt, ändert sich die Form der Minimalmenge eines innenzentrierten kubischen Gitters, wenn Dimension von 3 zu 4 oder von 4 zu 5 wechselt:

HILFSSATZ B4.19 *Wie oben seien  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine Orthogonalbasis, gebildet von Vektoren gleicher Länge, und  $\Gamma_n$  sowie  $\Gamma'_n$  das durch  $\mathcal{B}$  definierte kubische, beziehungsweise, innenzentrierte kubische, Gitter, Dann ist*

$$\mathcal{M}(\Gamma'_n) = \begin{cases} \{\frac{1}{2}(x_1 \cdot b_1 + \dots + x_n \cdot b_n) \mid x_j \in \{1, -1\}\}, & \text{falls } n < 4, \\ \{\frac{1}{2}(x_1 \cdot b_1 + \dots + x_n \cdot b_n) \mid x_j \in \{1, -1\}\} \cup \mathcal{M}(\Gamma_n), & \text{falls } n = 4, \\ \mathcal{M}(\Gamma_n), & \text{falls } n > 4. \end{cases} \tag{B4.9}$$

Die Anzahl der Elemente der Minimalmenge beträgt also  $2^n$  für  $n < 4$  und  $2 \cdot n$  für  $n > 4$ , während sie in der Dimension 4 gleich  $2^4 + 2 \cdot 4 = 24$  ist.

*Proof.* Die Vektoren der Form  $\frac{1}{2}(\pm b_1 + \pm b_2 + \dots + \pm b_n)$  haben die Norm  $\frac{1}{2}\sqrt{n}$ , während die Norm jedes anderen Vektors von  $\Gamma'_n \setminus \Gamma_n$  mindestens  $\frac{3}{2}\|b_1\|$  beträgt. Die Behauptungen des Hilfssatzes sind einfache Folgerungen dieses Sachverhalte.  $\square$

Die Minimalmengen der Netze  $\Gamma_2$  und  $\Gamma'_2$  sind beide Quadrate, also ähnlich. In der Tat sind die Gitter selbst ähnlich, wie die Abbildung B.2 erkennen lässt. In den

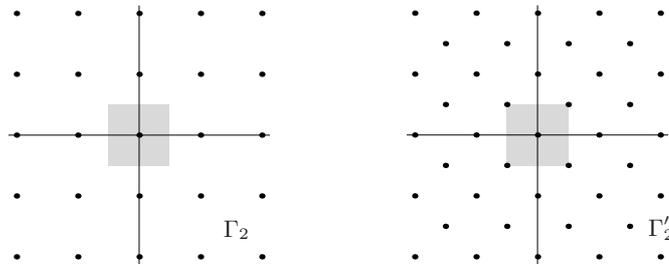
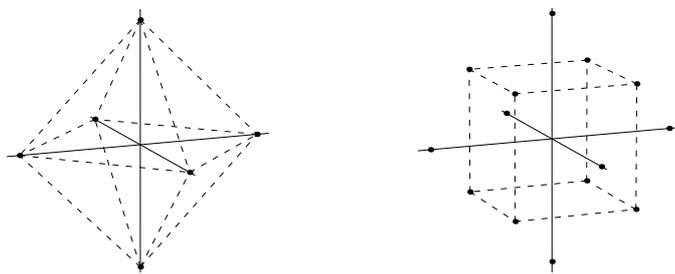


Abbildung B.2: Quadratisches Netz und innenzentriertes quadratisches Netz

höheren Dimensionen sind die beiden Gitter nicht mehr ähnlich: in den Dimensionen 3 und 4 ergibt sich dies aus dem Umstand, dass die Minimalmengen der beiden Typen von Gittern verschiedene Anzahlen haben. Ist hingegen  $n > 4$ , so sind die Minimalmengen der Gitter  $\Gamma_n$  und  $\Gamma'_n$  gleich: eine Ähnlichkeitsabbildung  $\sigma: \mathbb{E}^n \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}^n$ , die  $\Gamma_n$  auf  $\Gamma'_n$  abbildete, wäre also eine Isometrie und würde daher jede Sphäre  $\mathbb{S}_{\sqrt{\ell}}^{n-1} \cap \Gamma_n$  mit  $\ell \in \mathbb{N}$  auf die Sphäre  $\mathbb{S}_{\sqrt{\ell}}^{n-1} \cap \Gamma'_n$  abbilden, weshalb  $\Gamma_n$  und  $\Gamma'_n$  zusammenfallen müssten.

<sup>4</sup>Nach Definition heiße eine Zahl *halbzahlig*, wenn sie zur Menge  $\frac{1}{2}\mathbb{Z} \setminus \mathbb{Z}$  gehört.

Abbildung B.3: Vergleich der Minimalmengen  $\mathcal{M}(\Gamma_3)$  und  $\mathcal{M}(\Gamma'_3)$ 

#### 4.4b Automorphismengruppe eines innenzentrierten kubischen Gitters

Das folgende Resultat vergleicht die Automorphismengruppe eines kubischen Gitters mit jener des zugeordneten innenzentrierten kubischen Gitters:

**SATZ B4.20** *Seien  $\Gamma_n$  ein kubisches Gitter und  $\Gamma'_n$  das zugeordnete innenzentrierte kubische Gitter. Ist  $n \neq 4$ , so fallen die Gruppen  $\text{Aut}(\Gamma_n)$  und  $\text{Aut}(\Gamma'_n)$  zusammen; für  $n = 4$  aber ist  $\text{Aut}(\Gamma_n)$  eine Untergruppe von  $\text{Aut}(\Gamma'_n)$  mit Index 3.*

*Proof.* Sei  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ , die aus paarweise orthogonalen, gleich langen Vektoren besteht. Nach Nummer 4.2b hat jeder Automorphismus  $\varphi$  des Gitters  $\Gamma_n$  die Form

$$b_1 \mapsto \pm b_{\pi(1)}, \quad b_2 \mapsto \pm b_{\pi(2)}, \dots, b_n \mapsto \pm b_{\pi(n)}.$$

Das Bild des Vektors  $\alpha = \frac{1}{2}(b_1 + \dots + b_n)$  unter  $\varphi$  ist daher eine Linearkombination der Vektoren  $b_1, \dots, b_n$ , deren Koeffizienten alle  $\frac{1}{2}$  oder  $-\frac{1}{2}$  betragen, weshalb  $\varphi(\Gamma'_n) = \Gamma'_n$  ist und  $\varphi$  zu  $\text{Aut}(\Gamma'_n)$  gehört. Es folgt, dass die Inklusion

$$\text{Aut}(\Gamma_n) \subseteq \text{Aut}(\Gamma'_n) \tag{B4.10}$$

für jeden Wert von  $n \geq 2$  richtig ist.

In den Dimensionen  $n \neq 4$  gilt auch die umgekehrte Inklusion. Für  $n > 4$  ergibt sich diese Behauptung aus dem Umstand, dass die Minimalmenge von  $\Gamma'_n$  mit jener von  $\Gamma_n$  zusammenfällt: da jeder Automorphismus von  $\Gamma'_n$  eine orthogonale Abbildung ist, bildet er  $\mathcal{M}(\Gamma'_n) = \mathcal{M}(\Gamma_n)$  auf sich ab, also auch das von der Minimalmenge erzeugte Gitter  $\Gamma_n$ . Ist  $n = 2$ , so ist das Netz  $\Gamma'_2$  quadratisch, weshalb die Gruppen  $\text{Aut}(\Gamma_2)$  und  $\text{Aut}(\Gamma'_2)$  konjugiert sind, insbesondere also die gleiche Ordnung haben; dank der Inklusion (B4.10) fallen sie daher zusammen. Ist  $n = 3$ , so ist die  $\mathcal{M}(\Gamma'_3)$  die Eckenmenge eines Würfels; auf ihr wirkt die Untergruppe  $\text{Aut}(\Gamma_3)$  von  $\text{Aut}(\Gamma'_3)$  transitiv. Die Standuntergruppe in  $\text{Aut}(\Gamma'_3)$  einer der 8 Ecken permutiert die drei Kanten, die von der betrachteten Ecke ausgehen, und hat daher höchstens 6 Elemente, weshalb  $\text{Aut}(\Gamma'_3)$  höchstens  $8 \cdot 6 = 48 = 2^3 \cdot (3!) = |\text{Aut}(\Gamma_3)|$  Elemente aufweist.

Die *Transitivität* der Wirkung der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  auf der Menge  $\mathcal{M}(\Gamma'_4)$  lässt sich auf verschiedene Weisen begründen. Die gleich anschliessend gegebene Rechtfertigung stützt sich auf die Existenz einer Spiegelung  $\rho \in \text{Aut}(\Gamma'_4)$ , die nicht in  $\text{Aut}(\Gamma_4)$  enthalten ist; diese Rechtfertigung nützt letztlich aus, dass  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  eine Spiegelungsgruppe vom Ausnahme-Typus  $F_4$  ist. Eine andere Begründung<sup>5</sup> ergibt sich aus dem Umstand, dass die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_4)$  als Gruppe

<sup>5</sup>Siehe Satz B4.23.

der Einheiten der *ganzen Hurwitzschen Quaternionen* interpretiert werden kann. Seien  $\alpha_4 = \frac{1}{2} \cdot (b_1 - b_2 - b_3 - b_4)$  und  $\rho: \mathbb{E}^4 \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}^4$  die Spiegelung am Hyperraum  $(\mathbb{R} \cot \alpha_4)^\perp$ . Dann ist

$$\rho(x) = x - 2 \frac{\langle \alpha, x \rangle}{\|\alpha\|^2} \cdot \alpha = x - \frac{b_1 - b_2 - b_3 - b_4, x}{\|b_1\|^2} \cdot \alpha_4.$$

Die Matrix, welche  $\rho$  bezüglich der Orthogonalbasis  $\mathcal{B}$  darstellt, berechnet sich daher zu

$$R = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B4.11})$$

Die Spalten dieser Matrix zeigen, dass das Bild  $\rho(b_j)$  jedes Basisvektors  $b_j$  in  $\Gamma'_4$  liegt und dass  $\rho(\alpha) = \rho(\frac{1}{2} \cdot (b_1 + b_2 + b_3 + b_4)) = b_1$  ist. Die Abbildung  $\rho$  ist also eine Automorphismus des innenzentrierten Gitters  $\Gamma'_4$ . Nun wirkt aber die Automorphismengruppe von  $\Gamma'_4$  auf der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_4) = \Omega_1 \cup \Omega_2$ . Weil jede der Teilmengen  $\Omega_1$  und  $\Omega_2$  eine Bahn unter der Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma_4)$  ist und  $\rho$  die Menge  $\Omega_1$  in die Menge  $\Omega_2$  hinein abbildet, erkennt man aus dem Vorangehenden, dass  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  auf  $\mathcal{M}(\Gamma'_4)$  transitiv wirkt.  $\square$

## 4.5 Anhang: Die Hurwitzschen ganzen Quaternionen

A. HURWITZ (1859–1919) veröffentlichte 1896 einen Aufsatz über die *Zahlentheorie der Quaternionen*, den er später im Buch [Hu19] mit dem gleichen Titel vervollständigte. Das Hauptthema des Buches ist die Primfaktorzerlegung der ganzen Quaternionen. Wie R. Dedekind und andere Mathematiker der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts bereits bemerkt hatten, ist es bei diesem Thema entscheidend, welche Zahlen als *ganz* bezeichnet werden. Hurwitz schreibt in seinem Buche <sup>6</sup>

Die Zahlentheorie im Körper  $R$  der rationalen Quaternionen ist wesentlich abhängig von der Festsetzung darüber, was man unter einem *ganzen* Quaternion verstehen will. Denn erst nach der Definition des Begriffes „*ganzes Quaternion*“ kann man von der „*Teilbarkeit*“ sprechen. Das Nächstliegende würde nun offenbar sein, ein rationales Quaternion dann als „*ganz*“ zu bezeichnen, wenn seine Komponenten *ganze Zahlen* sind <sup>7</sup>. Indessen stellte es sich heraus – und dies war von vornherein nach Analogie zu der Theorie der endlichen Zahlkörper zu vermuten –, daß man zu viel einfacheren Gesetzen geführt wird, wenn der Begriff des ganzen Quaternionen in umfassenderweise festgelegt wird.

Das Ziel dieses Anhangs ist es, einen Zusammenhang zwischen dem Ring der Hurwitzschen ganzen Quaternionen und dem innenzentrierten kubischen Gittern  $\Gamma'_4$  zu beschreiben, der es offensichtlich macht, dass die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  auf der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_4)$  transitiv wirkt.

<sup>6</sup>Vorlesung 4, Seite 17.

<sup>7</sup>Dies ist der Begriff der *ganzen* Quaternion bei Lipschitz. Die Theorie von Lipschitz wird infolgedessen bedeutend verwickelter als die meinige. [...]

#### 4.5a Einige Definitionen

Sei  $\mathcal{B} = (e_0, e_1, e_2, e_3)$  eine Orthonormalbasis des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^4$ . Die Festsetzungen

$$\begin{aligned} e_0 \cdot e_j &= e_j = e_j \cdot e_0 && \text{für } j = 1, 2, 3, \\ e_j \cdot e_j &= -e_0 && \text{für } j = 1, 2, 3, \\ e_1 \cdot e_2 &= e_3, && e_2 \cdot e_3 = e_1, && e_3 \cdot e_1 = e_2 \end{aligned}$$

induzieren ein bilineares Produkt auf dem Vektorraum  $\mathbb{E}^4$ ; dieses Produkt ist assoziativ. Die Abbildung

$$\bar{\phantom{x}} : x_0 \cdot e_0 + x_1 \cdot e_1 + x_2 \cdot e_2 + x_3 \cdot e_3 \longmapsto x_0 \cdot e_0 - x_1 \cdot e_1 - x_2 \cdot e_2 - x_3 \cdot e_3$$

ist orthogonal und ihr Quadrat ist die Identität; man nennt sie die *Konjugationsabbildung*. Die Konjugationsabbildung gibt Anlass zur (algebraischen) Normabbildung  $N : \mathbb{E}^4 \rightarrow \mathbb{E}^4$ ; sie ordnet dem Vektor  $x$  das Produkt  $x \cdot \bar{x}$  zu und erfüllt die Beziehungen

$$N(x) = \|x\|^2 \cdot e_0 \quad \text{und} \quad N(x \cdot y) = N(x) \cdot N(y). \quad (\text{B4.12})$$

Die erste dieser Eigenschaften impliziert insbesondere, dass jeder Vektor  $x \neq 0$  ein Inverses besitzt, nämlich  $\|x\|^{-2} \cdot \bar{x}$ , denn

$$x \cdot \bar{x} = \|x\|^2 \cdot e_0 = \bar{x} \cdot x.$$

Das Tripel  $(\mathbb{E}^4, \cdot, \bar{\phantom{x}})$  ist daher nichts anderes als die *Divisionalgebra der Quaternionen*  $\mathbb{H}$  versehen mit der kanonischen Struktur eines Euklidischen Vektorraumes.

#### 4.5b Die Unteralgebra $\mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$ und ihr Teilring $\mathbb{H}_{\mathbb{Z}}$

Wir gehen nun zur Unteralgebra  $\mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$  der *rationalen Quaternionen* über; ihre Elemente sind die rationalen Linearkombinationen der Basisvektoren  $e_0, e_1, e_2$  und  $e_3$ . Die Hurwitzschen ganzen Quaternionen – unser Fernziel – bilden einen Teilring dieser Unteralgebra. Vorerst aber betrachten wir einen anderen Unterring, jenen der ganzzahligen Quaternionen

$$\mathbb{H}_{\mathbb{Z}} = \mathbb{Z} \cdot e_0 + \mathbb{Z} \cdot e_1 + \mathbb{Z} \cdot e_2 + \mathbb{Z} \cdot e_3.$$

Die additive Gruppe dieses Ringes ist ein kubisches Gitter  $\Gamma_4$  von  $\mathbb{E}^4$ . Seine Einheiten sind gerade die Vektoren kleinster positiver Norm des Gitters  $\Gamma_4$ : die Norm  $N(X)$  jedes Ringelements ist nämlich eine natürliche Zahl; ist nun  $x$  eine Einheit, etwa  $x \cdot x^{-1} = e_0$ , so folgt aus der zweiten der Eigenschaften (B4.12) die Kette von Gleichungen

$$N(x) \cdot N(x^{-1}) = N(x \cdot x^{-1}) = N(e_0) = 1,$$

weshalb  $\|x\|^2 = N(x) = 1$  ist. Umgekehrt garantiert die erste der Eigenschaften (B4.12), dass jedes Element der Norm 1 eine Einheit des Ringes ist. Es gilt also

$$\mathcal{M}(\Gamma_4) = U(\mathbb{H}_{\mathbb{Z}}) = \{e_0, -e_0, e_1, -e_1, e_2, -e_2, e_3, -e_3\}.^8 \quad (\text{B4.13})$$

<sup>8</sup>Die Einheiten bilden eine Gruppe; sie wird *Quaternionengruppe* der Ordnung 8 genannt und oft mit  $Q_8$  bezeichnet.

Jedes Element des Ringes  $\mathbb{H}_{\mathbb{Z}}$  ist ein Produkt von unzerlegbaren Elementen; die Zerlegung ist aber alles andere als eindeutig. So hat etwa die Zahl  $2 \cdot e_0$  drei Zerlegungen

$$2 \cdot e_0 = (e_0 + e_1) \cdot (e_0 - e_1) = (e_0 + e_2) \cdot (e_0 - e_2) = (e_0 + e_3) \cdot (e_0 - e_3)$$

als Produkte von zwei Faktoren. Die hier auftretenden 6 Faktoren sind alle unzerlegbar, denn  $N(e_0 \pm e_j) = 2$  für  $j \in \{1, 2, 3\}$ . Die Faktoren  $e_0 + e_1$  und  $e_0 + e_2$  sind echt verschieden; denn die Gleichung  $e_0 + e_2 = (e_0 + e_1) \cdot x$  hat die Lösung

$$x = (e_0 + e_1)^{-1} \cdot (e_0 + e_2) = \frac{1}{2}(e_0 - e_1 + e_2 - e_3), \quad (\text{B4.14})$$

welche nicht in  $\mathbb{H}_{\mathbb{Z}}$  liegt. Wenn man eine grössere Eindeutigkeit erreichen will, sollte man also dafür sorgen, dass die Quaternion  $\frac{1}{2}(e_0 - e_1 + e_2 - e_3)$  und andere derartige Quaternionen Einheiten eines grösseren Teilrings von  $\mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$  werden.

#### 4.5c Hurwitzscher Begriff der ganzen Quaternion

In dieser Nummer wird erklärt, wie Hurwitz zu den nach ihm benannten ganzen Quaternionen geführt wurde.<sup>9</sup> Ich erinnere zuerst an zwei Grundbegriffe aus der Zahlentheorie. Ein Element  $a \in \mathbb{C}$  wird *algebraisch* genannt, falls Nullstelle eines nicht-konstanten normierten Polynoms  $p(X) = X^m + c_{m-1}X^{m-1} + \dots$  mit *rationalen* Koeffizienten ist; falls man hierbei die Koeffizienten sogar *ganzzahlig* wählen kann, ist  $a$  eine ganze algebraische Zahl. Diese Definitionen kann man in Bedingungen übersetzen, welche die von  $a$  erzeugte Unter algebra  $\mathbb{Q}[a]$ , beziehungsweise der von  $a$  erzeugte Teilring  $\mathbb{Z}[a]$  aufzuweisen hat:  $a$  ist algebraisch, falls die Algebra  $\mathbb{Q}[a]$  endlich-dimensional (über  $\mathbb{Q}$ ) ist und ganz-algebraisch, falls die additive Gruppe des Ringes  $\mathbb{Z}[a]$  endlich erzeugt ist.

Diese Übersetzungen lassen sich nun leicht auf die Divisionsalgebra  $\mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$  übertragen: dem gemäss ist eine Quaternion *ganz*, falls die additive Gruppe des von ihr erzeugten Unterrings  $\mathbb{Z}[a]$  endlich erzeugt ist. Hurwitz sucht nun direkt einen Unterring von  $\mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$ , dessen sämtliche Elemente ganz sind; und zwar definiert er:<sup>10</sup>

Wir wollen nun weiter unter einem *Integritätsbereich* des Körpers  $R$  einen solchen endlichen Modul<sup>11</sup> verstehen, innerhalb dessen außer den Operationen der Addition und der Subtraktion auch die der Multiplikation unbeschränkt ausführbar ist, und es soll sich jetzt darum handeln, *alle Integritätsbereiche zu bestimmen, welche die vier Einheiten  $1, i_1, i_2, i_3$  enthalten.*

Auf Seite 22 spricht dann Hurwitz einen Satz aus, der sich in unserer Terminologie so formulieren lässt:

**SATZ B4.21** *Sei  $R$  ein Teilring der Quaternionenalgebra  $\mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$ , welcher den Teilring  $\mathbb{H}_{\mathbb{Z}} = \mathbb{Z}[e_0, e_1, e_2, e_3]$  umfasst und dessen additive Gruppe endlich erzeugbar ist. Dann ist  $R$  entweder gleich  $J_0 = \mathbb{H}_{\mathbb{Z}}$  oder gleich dem grösseren Ring  $J\mathbb{H}_{\mathbb{Z}} + \mathbb{Z} \cdot \frac{1}{2} \cdot (e_0 + e_1 + e_2 + e_3)$ . Die additive Gruppe des ersten Ringes  $J_0$  ist ein kubisches Gitter  $\Gamma_4$  von  $\mathbb{E}^4$ ; jene des grösseren Teilrings  $J$  das entsprechende innen zentrierte kubische Gitter  $\Gamma'_4$ .*

<sup>9</sup>Siehe [Hu19], Seiten 18 bis 23.

<sup>10</sup>[Hu19], p. 19.

<sup>11</sup>D. h. eine endlich erzeugte Untergruppe von  $R = \mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$ .

*Proof.* Unser erstes Ziel ist es, Theorem B4.17 ins Spiel zu bringen. Die additive Gruppe des Ringes  $J_0 = \mathbb{Z}[e_0, e_1, e_2, e_3]$  ist ein kubisches  $\Gamma_4$  ist ein Gitter des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}_4$ . Die additive Gruppe  $R_{\text{add}}$  des Ringes  $R$  umfasst nach Voraussetzung das Gitter  $\Gamma_4$  und sie ist endlich erzeugbar. Es gibt daher eine natürliche Zahl  $m \geq 1$ , sodass  $R_{\text{add}}$  in der Untergruppe  $\frac{1}{m}J_0$  enthalten ist und daher eine diskrete Untergruppe des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^4$  ist. Nach Theorem B4.4) ist  $R_{\text{add}}$  daher ein Gitter. Andererseits folgt aus der Diskretheit des Ringes  $R$  und der Rechenregel  $N(x^\ell) = N(x)^\ell$ , dass die Norm jedes Elementes  $a$  von  $R \setminus \{0\}$  mindestens 1 beträgt, weshalb die orthonormierte Folge  $\mathcal{F} = (e_0, e_1, e_2, e_3)$  eine Minimalfolge des Gitters  $J_{\text{add}}$  ist. Falls sie das Gitter erzeugt, ist  $R = J_0$ . Anderenfalls garantiert Theorem B4.17, dass  $R_{\text{add}}$  von  $\mathbb{Z}[e_0, e_1, e_2, e_3]$  und dem Element  $\alpha = \frac{1}{2} \cdot (e_0 + e_1 + e_2 + e_3)$  erzeugt wird. In diesem Fall ist die additive Gruppe von  $R$  ist also das innenzentriertes kubisches Gitter  $J_{\text{add}}$ .

Es bleibt noch zu zeigen, dass das Gitter  $J_{\text{add}}$  unter Produkten abgeschlossen ist. Dies ist der Fall, wenn alle Produkte von je zwei Elementen aus  $\mathcal{X} = \{e_0, e_1, e_2, e_3, \alpha\}$  in  $\Gamma'_4$  liegen. Dies ist klar für die 16 Produkte zwischen je zwei Elementen  $e_0, e_1, e_2$  und  $e_3$  von  $\mathbb{H}$ . Ferner gehören die Produkte  $e_0 \cdot \alpha = \alpha = \alpha \cdot e_0$  zu  $\Gamma'_4$ . Die Produkte  $e_j \cdot \alpha$  berechnen sich zu

$$e_1 \cdot \alpha = \frac{1}{2} (e_1 e_0 + e_1 e_1 + e_1 e_2 + e_1 e_3) = \frac{1}{2} (e_1 - e_0 + e_3 - e_2) \quad (\text{B4.15})$$

$$e_2 \cdot \alpha = \frac{1}{2} (e_2 e_0 + e_2 e_1 + e_2 e_2 + e_2 e_3) = \frac{1}{2} (e_2 - e_3 - e_0 + e_1) \quad (\text{B4.16})$$

$$e_3 \cdot \alpha = \frac{1}{2} (e_3 e_0 + e_3 e_1 + e_3 e_2 + e_3 e_3) = \frac{1}{2} (e_3 + e_2 - e_1 - e_0) \quad (\text{B4.17})$$

Sie liegen also auch in  $J_{\text{add}}$ ; ebenso steht es mit den Produkten  $\alpha \cdot e_j$ . Aus den vorangehenden Formeln folgt dann noch

$$\begin{aligned} 4\alpha \cdot \alpha &= 2(e_0 + e_1 + e_2 + e_3)\alpha \\ &= 2\alpha + (e_1 - e_0 + e_3 - e_2) + (e_2 - e_3 - e_0 + e_1) + (e_3 + e_2 + e_1 - e_0) \\ &= 2\alpha + (-3e_0 + e_1 + e_2 + e_3) = 4\alpha - 4e_0. \end{aligned}$$

Also liegt auch  $\alpha^2 = \alpha - e_0$  in  $\Gamma'_4$ . Damit ist nun nachgewiesen, dass das Gitter  $\Gamma'_4$  die additive Gruppe eines Teilrings von  $\mathbb{H}_{\mathbb{Q}}$  ist.  $\square$

**BEMERKUNG B4.22** R. LIPSCHITZ (1832–1903) untersuchte in der Arbeit [Li86] die Zahlentheorie des Ringes  $J_0 = H_{\mathbb{Z}}$ ; man nennt diesen Ring daher Ring der *Lipschitzschen* ganzen Quaternionen. Der grössere Ring  $J = \mathbb{H}_{\mathbb{Z}} + \mathbb{Z} \cdot \alpha$  wird dagegen als Ring der *Hurwitzschen* ganzen Quaternionen bezeichnet. In der folgenden Nummer 4.5d werde ich zeigen, dass seine Zahlentheorie einfacher als jene des Ringes  $J_0$  ist. Zuvor aber gebe ich eine Anwendung auf die *Automorphismengruppe des innenzentrierten kubischen Gitters*.

**SATZ B4.23** Sei  $\mathcal{B} = (e_0, e_1, e_2, e_3)$  eine Orthonormalbasis des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^4$ . Seien  $\Gamma_4$  das kubische Gitter  $\mathbb{Z} \cdot e_0 + \mathbb{Z} \cdot e_1 + \mathbb{Z} \cdot e_2 + \mathbb{Z} \cdot e_3$  und  $\Gamma'_4$  das entsprechende innenzentrierte kubische Gitter; es ist  $\Gamma'_4$  die additive Gruppe  $J_{\text{add}}$  des Ringes der Hurwitzschen ganzen Quaternionen  $J$ . Dann gelten die folgenden Aussagen:

(i) Die Einheitengruppe  $U(J)$  besteht aus den 24 Quaternionen

$$\pm e_0, \pm e_1, \pm e_2, \pm e_3 \text{ sowie } \frac{1}{2} (\pm e_0 + \pm e_1 + \pm e_2 + \pm e_3). \quad (\text{B4.18})$$

Diese Elemente bilden auch die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_4)$  des Gitters  $\Gamma'_4$ .

(ii) Jedes Paar von Einheitsquaternionen  $(p, q)$  gibt Anlass zu einer Abbildung  $\varphi_{a,b}: J_{\text{add}} = \Gamma'_4 \rightarrow \Gamma'_4$ , die  $x \in J$  auf das Produkt  $a \cdot x \cdot b^{-1}$  abbildet. Es ist  $\varphi_{a,b}$  ein Automorphismus des Gitters  $\Gamma'_4$ .

(iii) Die Zuordnung  $(a, b) \mapsto \varphi_{a,b}$  definiert einen Homomorphismus

$$\vartheta: U(J) \times U(J) \rightarrow \text{Aut}(J_{\text{add}}). \quad (\text{B4.19})$$

Sein Kern besteht aus den zwei Paaren  $\pm(e_0, e_0)$ ; sein Bild ist eine Untergruppe  $H$  der Automorphismengruppe der Ordnung  $288 = \frac{1}{2} \cdot (24 \cdot 24)$ .

(iv) Die Ordnung der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  ist  $4 \cdot 288 = 2^7 \cdot 3^2$ .

*Proof.* (i) Nach Hilfssatz B4.9 bilden die Elemente der Liste B4.18 gerade die Minimalmenge des Gitters  $J_{\text{add}}$ . Als Niveaumenge der Funktion  $x \mapsto \|x\|$  mit Wert 1 ist die Minimalmenge unter der Spiegelung

$$\bar{\cdot}: x_0 \cdot e_0 + x_1 \cdot e_2 + x_2 \cdot e_2 + x_3 \cdot e_3 \mapsto x_0 \cdot e_0 - x_1 \cdot e_2 - x_2 \cdot e_2 - x_3 \cdot e_3$$

abgeschlossen und besteht aus Einheiten. Andererseits hat auf Grund der Diskretheit des Ringes  $J$  und der Produkteigenschaft  $N(a \cdot b) = N(a) \cdot N(b)$  der algebraischen Normabbildung jede Einheit von  $J$  die Norm 1.

(ii) Seien zunachst  $p$  und  $q$  reelle Quaternionen vom Betrag 1. Dann definiert die Formel  $x \mapsto a \cdot x \cdot b^{-1}$  eine additive Abbildung  $\varphi_{a,b}$ , die mit allen Skalaren  $\lambda \cdot e_0$  kommutiert und daher linear ist. Die Rechnung

$$\langle a \cdot x \cdot b^{-1}, a \cdot x \cdot b^{-1} \rangle = N(a \cdot x \cdot b^{-1}) = N(a) \cdot N(x) \cdot N(b^{-1}) = n(x) = \langle x, x \rangle,$$

zeigt weiter, dass sie uberdies normerhaltend und daher orthogonal ist. Falls nun  $a$  und  $b$  Einheiten des Ringes  $J$  sind, liegt mit  $x$  auch das Bild  $\varphi_{a,b}(x) = a \cdot x \cdot b^{-1}$  im Ring  $J$ ; die orthogonale Abbildung  $\varphi_{a,b}$  ist daher ein Endomorphismus des Gitters  $J_{\text{add}}$ . Die Bijektivitat dieses Endomorphismus wird in Punkt (iii) bewiesen werden.

(iii) Die Rechnung

$$\begin{aligned} (\varphi_{a,b} \circ \varphi_{a',b'})(x) &= \varphi_{a,b}(\varphi_{a',b'}(x)) = \varphi_{a,b}(a' \cdot x \cdot (b')^{-1}) \\ &= a \cdot a' \cdot x \cdot (b')^{-1} \cdot b^{-1} = (a \cdot a') \cdot x \cdot (b \cdot b')^{-1} = \varphi_{a \cdot a', b \cdot b'}(x) \end{aligned}$$

zeigt, dass  $\vartheta$  eine homomorphe Abbildung der Gruppe  $U(J) \times U(J)$  in das multiplikative Monoid des Endomorphismenrings  $\text{End}(J_{\text{add}})$  ist. Da  $\varphi_{e_0, e_0}$  die Identitat ist, liegt das Bild von  $\vartheta$  sogar in der multiplikativen Gruppe des Endomorphismenrings; im Hinblick auf den zuvor bewiesenen Punkt (ii) besteht das Bild sogar aus Automorphismen des Gitters  $\Gamma'_4$ .

Da  $(-e_0 \cdot x \cdot (-e_0))^{-1} = x$  ist, gehoren die Paare  $\pm(e_0, e_0)$  zum Kern von  $\vartheta$ . Ist umgekehrt  $(a, b)$  ein beliebiges Element dieses Kernes, so halt  $\varphi_{a,b}$  insbesondere den Vektor  $e_0$  fest, weshalb  $b = a$  sein muss. Es gilt nun  $\varphi_{a,a}(x) = x$  genau dann, wenn  $a \cdot x = x \cdot a$  ist. Setzen wir  $a = \sum_h a_h \cdot e_h$  und  $x$  erst gleich  $e_1$ , dann gleich  $e_2$ , so erhalten wir

$$\begin{aligned} a \cdot e_1 &= a_0 \cdot e_1 - a_1 \cdot e_0 - a_2 \cdot e_3 + a_3 \cdot e_2, \\ e_1 \cdot a &= a_0 \cdot e_1 - a_1 \cdot e_0 + a_2 \cdot e_3 - a_3 \cdot e_2, \\ a \cdot e_2 &= a_0 \cdot e_2 + a_1 \cdot e_3 - a_2 \cdot e_0 - a_3 \cdot e_1, \\ e_2 \cdot a &= a_0 \cdot e_2 - a_1 \cdot e_3 - a_2 \cdot e_0 + a_3 \cdot e_1. \end{aligned}$$

Diese Gleichungen zeigen, dass  $\varphi_{a,a}$  nur dann die Identität sein kann, wenn  $a$  ein Vielfaches des Vektors  $e_0$  ist. Da  $a$  eine Einheit des Ringes  $J$  ist, somit die Norm 1 hat, ist  $a$  entweder  $e_0$  oder  $-e_0$ . Das Bild des Homomorphismus  $\vartheta$  hat folglich die Ordnung  $|U(J)|^2/2 = \frac{1}{2} \cdot 24^2 = 288$ .

(iv) Die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  wirkt auf den 24 Elementen der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_4) = U(J)$ . Da bereits die Bilder der Untergruppen  $\vartheta(U(L) \times \{\mathbb{1}\})$  und  $\vartheta(\{\mathbb{1}\} \times U(L))$  auf der Minimalmenge transitiv wirken, ist die Wirkung der Automorphismengruppe transitiv; ihre Ordnung ist daher das 24-fache der Ordnung des Stabilisators  $\text{St}_{\text{Aut}(\Gamma'_4)}(e_0)$  des Punktes  $e_0 \in \mathcal{M}(\Gamma'_4)$ . Jeder Automorphismus des Stabilisators hält die Gerade  $\mathbb{R} \cdot e_0$  punktweise fest und bildet deren Orthogonalkomplement, also auch den Durchschnitt  $\mathcal{M}(\Gamma'_4) \cap (\mathbb{R} \cdot e_0)^\perp$ , auf sich ab. Dieser Durchschnitt besteht aus den 6 Elementen  $\pm e_1, \pm e_2$  und  $\pm e_3$ ; sie bilden die Ecken eines regelmäßigen Oktaeders. Dessen Symmetriegruppe ist die Automorphismengruppe des kubischen Gitters  $\Gamma_3 = \mathbb{Z} \cdot e_1 + \mathbb{Z} \cdot e_2 + \mathbb{Z} \cdot e_3$  und hat daher die Ordnung 48; da sich jeder Automorphismus des Gitters  $\Gamma_3 \subset (\mathbb{R} \cdot e_0)^\perp$  auf genau eine Art zu einem Automorphismus fortsetzen lässt, der den Vektor  $e_0$  festhält, also in der Standgruppe liegt, hat auch die Standuntergruppe die Ordnung 48, weshalb die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  die Ordnung  $48 \cdot 24 = 1152 = 4 \cdot 288$  aufweist.  $\square$

#### 4.5d Aus der Zahlentheorie des Ringes der ganzen Quaternionen

In dieser Nummer geht es um einen Zusammenhang zwischen zahlentheoretischen Eigenschaften des Ringes  $J$  und geometrischen Eigenschaften der additiven Gruppe dieses Ringes.

SATZ B4.24 *Der Ring  $J$  der Hurwitzschen ganzen Zahlen hat folgende Eigenschaften:*

(i) *Für jedes Paar von Elementen  $a, d$  aus  $J$  mit  $d \neq 0$  gibt es einen links stehenden Quotienten  $q_l \in J$ , derart dass*

$$\|a - q_l \cdot d\| < \|d\|. \quad (\text{B4.20})$$

(ii) *Jedes Linksideal von  $J$  ist ein Hauptideal.*

(iii) *Zu zwei Elementen  $a$  und  $b \neq 0$  von  $J$  gibt es einen „grössten“ gemeinsamen Teiler rechts stehenden  $d_r$  mit den Eigenschaften:*

a)  $a \in J \cdot d_r$  und  $b \in J \cdot d_r$ ;

b) *ist  $d \in J$  mit  $a \in J \cdot d$  sowie  $b \in J \cdot d$ , so ist  $d \in J \cdot d_r$ .*

*Proof.* (i) Sei  $q \in J$ . Auf Grund der Multiplikationseigenschaft der algebraischen Norm  $N: J \rightarrow \mathbb{N}$  gilt die Rechnung

$$N(a - q \cdot d) = N((a \cdot d^{-1} - q) \cdot d) = N(a \cdot d^{-1} - q) \cdot N(d)$$

für jedes Element  $q \in J$ . Sie zeigt, dass die Ungleichung  $\|a - q \cdot d\| < \|d\|$  genau dann gilt, wenn die Norm der Differenz  $a \cdot d^{-1} - q$  kleiner als 1 ist. Das innenzentrierte kubische Gitter  $J_{\text{add}}$  hat nun die Eigenschaft, dass es zu jedem Vektor  $x \in \mathbb{E}^4 = \mathbb{H}_{\mathbb{R}}$  einen Vektor  $q_l$  im  $J_{\text{add}}$  gibt, dessen Abstand von  $x$  kleiner als 1 ist (siehe Hilfssatz B4.16): die reellen Komponenten  $x_h$  der Quaternion  $x$  können nämlich durch ganze

Zahlen  $q_h$  so approximiert werden, dass der Betrag der Differenz höchstens  $\frac{1}{2}$  beträgt. Dann ist  $\|x - \sum_h q_h \cdot e_h\| < 1$ , es sei denn alle Komponenten  $x_h$  seien halb-ganzzahlig. Im Ausnahmefall ist  $x$  zwar keine Lipschitzsche, wohl aber eine Hurwitzsche ganze Quaternion. Approximiert man auf diese Weise  $x = a \cdot d^{-1}$ , findet man  $q_l \in J$ .

(ii) Sei  $I$  ein Linksideal des Ringes  $J$ . Besteht das Ideal nur aus dem Nullvektor, ist  $I = J \cdot 0$ ; andernfalls enthält  $I$  ein Element  $d$  kleinster positiver Norm, denn  $I$  ist eine diskrete Untergruppe von  $\mathbb{E}^4$ . Ist  $x$  ein beliebiges Element des Ideales  $I$ , so gibt es gemäss Punkt (i) ein Element  $q_l$ , so dass die Differenz  $x - q_l \cdot d$  kleinere Norm als  $b$  hat; da diese Differenz aber im Linksideal  $I$  liegt, muss sie der Nullvektor sein. Jedes Element von  $I$  ist also ein Vielfaches von  $b$ ; da umgekehrt  $J \cdot d \subseteq I$  gilt, stimmen  $I$  und  $J \cdot b$  überein.

(iii) Sei  $I = J \cdot a + J \cdot b$  das von den Elementen  $a$  und  $b$  erzeugte Linksideal; da  $b \neq 0$  ist, ist es nicht das Nullideal. Nach Punkt (ii) wird es von einem Element  $d_r \neq 0$  erzeugt. Nach Definition sind dann  $a$  und  $b$  gemeinsame Vielfache von  $d_r$ .

Als Element von  $I = J \cdot a + J \cdot b$  besitzt  $d_r$  eine Darstellung der Form  $d_r = q_a \cdot a + q_b \cdot b$ . Ist nun  $d$  ein beliebiges rechts stehendes gemeinsames Vielfaches von  $a$  und  $b$ , so gibt es Elemente  $c_a$  und  $c_b$  mit  $a = c_a \cdot d$  und  $b = c_b \cdot d$ . Die Umformung

$$d_r = q_a \cdot a + q_b \cdot b = q_a \cdot (c_a \cdot d) + q_b \cdot (c_b \cdot d) = (q_a \cdot c_a + q_b \cdot c_b) \cdot d$$

zeigt dann, dass der gemeinsame Teiler  $d_r$  ein Vielfaches des beliebigen gemeinsamen Teilers  $d$  ist.  $\square$

**BEMERKUNGEN B4.25** 1) Der eben bewiesene Satz hat ein Analogon für Rechtsideale und gemeinsame, links stehende Teiler; man kann es analog begründen oder mit Hilfe der Konjugationsabbildung aus dem Satz gewinnen; die Konjugationsabbildung erfüllt nämlich die Rechenregel  $\overline{x \cdot y} = \overline{y} \cdot \overline{x}$ .

(ii) Das erzeugende Element eines Linksideals ist bis auf eine Einheit bestimmt. Dies ergibt sich entweder aus der Minimaleigenschaft der Norm der erzeugenden Elemente und dem Umstand, dass jedes Element der Norm 1 eine Einheit ist, oder aus der folgenden, allgemeiner anwendbaren Überlegung: sind  $d'$  und  $d''$  Erzeugende eines Linksideals  $I \neq \{0\}$ , so gibt es Elemente  $u'$  und  $u''$  mit  $d'' = u' \cdot d'$  und  $d' = u'' \cdot d''$ . Es folgt, dass

$$d' = u'' \cdot d'' = u'' \cdot (u' \cdot d') = (u'' \cdot u') \cdot d',$$

also  $(u'' \cdot u' - e_0) \cdot d' = 0$ , ist. Ebenso sieht man, dass die Gleichung  $(u' \cdot u'' - e_0) \cdot d' = 0$  gilt.

3) In Nummer 4.5b wurde erwähnt, dass die Zahl  $2 \cdot e_0$  im Ring der Lipschitzschen ganzen Quaternionen  $J_0$  die Darstellungen

$$2 \cdot e_0 = (e_0 + e_1) \cdot (e_0 - e_1) = (e_0 + e_2) \cdot (e_0 - e_2) = (e_0 + e_3) \cdot (e_0 - e_3)$$

als Produkte von zwei unzerlegbaren Elementen hat. Im Ring  $J_0$  erzeugen die Faktoren  $e_0 - e_1$  und  $e_0 - e_2$  verschiedene Linksideale, denn der Quotient

$$(e_0 - e_2)^{-1} \cdot (e_0 - e_1) = \frac{1}{2}(e_0 + e_1) \cdot (e_0 - e_2) = \frac{1}{2}(e_0 + e_1 - e_2 - e_3)$$

ist keine Einheit von  $J_0$ . Hingegen enthält  $J$  diese Einheit. Dies deutet darauf hin, dass die Eigenschaften der Zerlegung in Primfaktoren des Ringes  $J$  einfacher als jene des Ringes  $J_0$  sind. Dies ist in der Tat so; Einzelheiten findet man in Buch von Hurwitz [Hu19] (Vorlesungen 7 bis 10) oder in [CS04] (pp. 55–63)

## B5 Kristallographische Gruppen

In diesem Abschnitt, dem dritten des Kapitels über die Grundlagen der Theorie der kristallographischen Gruppen, geht es um die kristallographischen Gruppen selbst. Ihre Definition macht keine Schwierigkeit; sie stützt sich auf den Begriff des Gitters eines Euklidischen Vektorraumes. Entscheidend für den weiteren Verlauf der Theorie und die Klassifikation der kristallographischen Gruppen ist dann die Wahl geeigneter Äquivalenzrelationen auf der Menge  $\mathcal{CG}(\mathbb{E})$  aller kristallographischen Gruppen des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$ . Die feinste dieser Äquivalenzrelationen, die so genannte *eigentlich-affine* Äquivalenz, gibt Anlass zu einer endlichen Klasseneinteilung, welche die in der Kristallographie übliche Klasseneinteilung der Raumgruppen verallgemeinert. Am Ende dieses Abschnittes gehe ich noch kurz auf die historischen Anfänge der Theorie der kristallographischen Gruppen ein.

\*\*\*

Wie zuvor bezeichnet  $\mathbb{E}$  einen Euklidischen Vektorraum  $(V, \langle -, - \rangle)$  der Dimension  $n \geq 1$ . Wird von  $\mathbb{R}^n$  als Euklidischem Vektorraum gesprochen, so ist vorausgesetzt, dass der Vektorraum mit dem Standard-Skalarprodukt versehen worden ist. Die Vektoren der Standard-Basis von  $\mathbb{R}^n$  werden mit  $e_1, \dots, e_n$  bezeichnet.

Ist  $G$  eine kristallographische Gruppe von  $\mathbb{E}$ , so sei  $G_0$  ihre Punktgruppe,  $T(G)$  ihr Translationsnormalteiler und  $\Gamma(G)$  das Gitter der Translationsvektoren von  $T(G)$ .

### 5.1 Begriff der kristallographischen Gruppe

Definition B5.1 stützt sich auf den Begriff des *Gitters*; sie betont jene Eigenschaft der kristallographischen Gruppen, die in dieser Vorlesung im Vordergrund steht. In Unterabschnitt 6.4 wird aber nachgewiesen werden, dass eine kristallographische Gruppe von  $\mathbb{E}$  nichts anderes als eine diskrete Untergruppe  $G$  der Isometriengruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  ist, die einen kompakten Bahnenraum  $G \backslash \text{Iso}(\mathbb{E})$  besitzt.

#### 5.1a Definition und erste Beispiele

DEFINITION B5.1 Eine *kristallographische Gruppe*  $G$  des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$  ist eine Untergruppe  $G$  der Isometriengruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ , derart dass die Gruppe

$$\Gamma(G) = \{v \in \mathbb{E} \mid \tau_v \in T(G)\}$$

ein Gitter des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$  ist.

Ist die Dimension von  $\mathbb{E}$  gleich 2, nennt man die kristallographischen Gruppen auch *Ornamentgruppen*, ist die Dimension 3, so bezeichnet man sie auch als *Raumgruppen*.

BEISPIELE B5.2 1) Jedes Gitter  $\Gamma$  von  $\mathbb{E}$  liefert zunächst eine kristallographische Gruppe, die nur aus Translationen besteht, nämlich  $\{\tau_v \mid v \in \Gamma\}$ .

2) Jedes Gitter gibt sodann Anlass zu einer zweiten kristallographischen Gruppe, der Symmetriegruppe

$$\text{Sym}(\Gamma) = \{\psi \in \text{Iso}(\mathbb{E}) \mid \psi(\Gamma) = \Gamma\}$$

des Gitters. Nach Beispiel A1.5 besteht diese Gruppe aus allen Zusammensetzungen  $\tau_w \circ \varphi$  mit  $w \in \Gamma$  und  $\varphi \in \text{Aut}(\Gamma)$ ; sie ist also das (offensichtliche) *semi-direkte Produkt*  $\Gamma \rtimes \text{Aut}(\Gamma)$  des Gitters  $\Gamma$  und der Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$ .

3) Ein Beispiel einer kristallographischen Gruppe der in 2) genannten Form ist die Ornamentgruppe  $G = \mathbb{Z}^2 \rtimes \text{Aut}(\mathbb{Z}^2)$ ; dabei bezeichnet  $\mathbb{Z}^2$  das quadratische Standard-Netz der Euklidischen Ebene  $\mathbb{R}^2$ . Die Automorphismengruppe von  $\mathbb{Z}^2$  ist eine Diedergruppe der Ordnung 8; sie besteht aus den acht Abbildungen

$$\begin{aligned} \mathbb{1}, \quad \varphi_4: x = (x_1, x_2)^t &\mapsto (-x_2, x_1)^t, \quad -\mathbb{1}, \quad -\varphi_4, \\ \rho_h: x = (x_1, x_2)^t &\mapsto (x_1, -x_2)^t, \quad \rho_v: x = (x_1, x_2)^t \mapsto (-x_1, x_2)^t, \\ \rho_d: x = (x_1, x_2)^t &\mapsto (x_2, x_1)^t, \quad \rho_{d'}: x = (x_1, x_2)^t \mapsto (-x_2, -x_1)^t. \end{aligned}$$

Die Punktgruppe  $G_0 = \text{Aut}(\mathbb{Z}^2)$  enthält 3 Untergruppen der Ordnung 4 und 5 Untergruppen der Ordnung 2. Sie sind in Abbildung D.3 zusammengestellt.

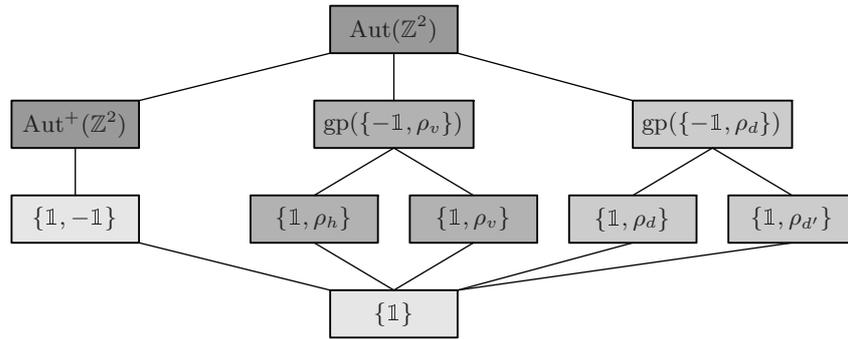


Abbildung B.4: Verband der Untergruppen von  $\text{Aut}(\mathbb{Z}^2)$

Vier dieser Untergruppen werden von einer Spiegelung erzeugt, nämlich

$$H_6 = \{1, \rho_h\}, \quad H_7 = \{1, \rho_v\}, \quad H_8 = \{1, \rho_d\}, \quad H_9 = \{1, \rho_{d'}\}.$$

Die Untergruppen  $H_6$  und  $H_7$  sind in  $\text{GL}(\mathbb{Z}^2)$  konjugiert, etwa durch die Basistransformation  $e_1 \mapsto e_2, \quad e_2 \mapsto e_1$ ; ebenso sind  $H_7$  und  $H_8$  konjugiert, zum Beispiel durch  $e_1 \mapsto e_1, \quad e_2 \mapsto -e_2$ .

4) Jede der 10 Untergruppen  $H$  von  $\text{Aut}(\mathbb{Z}^2)$  gibt Anlass zu einer Ornamentgruppe der Form  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H$ . Man kann beweisen, dass – abgesehen von den Paaren  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_6$  und  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_7$ , sowie  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_8$  und  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_9$  – keine zwei dieser Gruppen isomorph sind. Die Gesamtzahl der paarweise nicht isomorphen Ornamentgruppen ist aber nicht 8, sondern 17. Die restlichen 9 Typen von Gruppen sind von zweierlei Art. Neben dem quadratischen Netz gibt es noch das *hexagonale* Netz  $\Gamma_{\text{hexa}}$ , das zu neuen Gruppen der Form  $\Gamma_{\text{hexa}} \rtimes H$  Anlass gibt. Weiter gibt es Ornamentgruppen, die eine Gleitspiegelung  $\tau \circ \rho$  enthalten, deren linearer Anteil  $\rho$  aber nicht zu  $G$  gehört. Ein Beispiel einer solchen Gruppe ist die Untergruppe  $\mathbb{Z}^2 \times \{1\} \cup (\mathbb{Z}^2 + (1/2, 0)^t) \times \{\rho_h\}$  der Isometriegruppe  $\mathbb{R}^2 \rtimes \text{O}(\mathbb{R}^2)$ . Es ist insbesondere die Existenz von Gruppen dieser Art, welche die Klassifikation der kristallographischen Gruppen der Dimension 2, vor allem aber der Dimensionen 3 und 4 sehr aufwendig macht.

### 5.1b Endlichkeit der Punktgruppe

In Definition B5.1 werden die kristallographischen Gruppen eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  unter den Untergruppen der Isometriegruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  durch eine Forderung an den Translationsnormalteiler  $T(G)$  ausgesondert. Diese Forderung hat eine einschneidende Auswirkung auf die Punktgruppen der kristallographischen Gruppen:

SATZ B5.3 *Die Punktgruppe einer kristallographischen Gruppe  $G$  ist eine Untergruppe der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma(G))$  des Gitters  $\Gamma(G)$  und deshalb endlich.*

*Proof.* Nach Hilfssatz B3.9 ist die Untergruppe  $\Gamma(G)$  von  $\mathbb{E}$  unter der kanonischen Wirkung der Punktgruppe  $G_0 \subset \text{O}(\mathbb{E})$  auf  $\mathbb{E}$  invariant; nach Definition der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma(G))$  ist also  $G_0$  eine Untergruppe von  $\text{Aut}(\Gamma(G))$ . Die Endlichkeit von  $G_0$  ergibt sich nun aus dem Umstand, dass die Automorphismengruppe jedes Gitters endlich ist (Satz B4.7).  $\square$

### 5.1c Kennzeichnung der Translationsuntergruppe

In jeder Untergruppe  $G$  der Isometriegruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  gibt es einen Normalteiler, der aus allen Translationen der Gruppe  $G$  besteht. Er ist *abelsch* und der Kern der Einschränkung des geometrisch definierten Epimorphismus  $\pi: \text{Iso}(\mathbb{E}) \rightarrow \text{O}(\mathbb{E})$  auf  $G$  (siehe Satz B3.5). Falls  $G$  eine kristallographische Gruppe ist, besitzt  $T(G)$  auch eine algebraische Kennzeichnung:

SATZ B5.4 *Die Translationsuntergruppe  $T(G)$  einer kristallographischen Gruppe ist ein abelscher Normalteiler, der alle abelschen Normalteiler umfasst. Er ist also der eindeutig bestimmte, grösste abelsche Normalteiler von  $G$ .*

*Proof.* Der Beweis beruht auf einer Rechnung mit Elementen von  $G$ ; um sie leichter lesbar zu machen, gehe ich von  $G$  zur isomorphen Gruppe  $G' = \vartheta(G)$  in  $\mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E})$  über (siehe Nummer 3.2b). Seien nun  $N$  ein abelscher Normalteiler von  $G'$  und  $\psi = (w, L)$  ein Element von  $N$ . Für jede Translation  $\tau = (v, \mathbb{1}) \in T(G')$  gehört dann das Produkt  $\tau \cdot \psi \cdot \tau^{-1}$  zu  $N$ , denn  $N$  ist ein Normalteiler. Des weiteren stimmen die beiden Produkte  $(\tau \cdot \psi \cdot \tau^{-1}) \cdot \psi$  und  $\psi \cdot (\tau \cdot \psi \cdot \tau^{-1})$  überein, denn  $N$  ist kommutativ. Andererseits sind

$$\begin{aligned} \tau \cdot \psi \cdot \tau^{-1} &= (v, \mathbb{1}) \cdot (w, L) \cdot (-v, \mathbb{1}) = (v + w - L(v), L), \\ (\tau \cdot \psi \cdot \tau^{-1}) \cdot \psi &= (v - L(v) + w, L) \cdot (w, L) = (v - L(v) + w + L(w), L^2), \\ \psi \cdot (\tau \cdot \psi \cdot \tau^{-1}) &= (w, L) \cdot (v - L(v) + w, L) = (w + L(v) - L^2(v) + L(w), L^2). \end{aligned}$$

Die Gleichheit von  $(\tau \cdot \psi \cdot \tau^{-1}) \cdot \psi$  und  $\psi \cdot (\tau \cdot \psi \cdot \tau^{-1})$  bedeutet also gerade die Gleichheit der Vektoren  $v - L(v)$  und  $L(v) - L^2(v)$ . Folglich liegt  $v$  im Kern der linearen Abbildung  $\mathbb{1} - 2L + L^2 = (L - \mathbb{1})^2$ .

Obiges Argument gilt insbesondere für die Vektoren einer Basis von  $\mathbb{E}$ . Es impliziert, dass  $(L - \mathbb{1})^2$  die Nullabbildung ist; insbesondere besteht der Kern der Abbildung  $L - \mathbb{1}$ , also der Eigenraum  $E_1$  der orthogonalen Abbildung  $L$ , nicht nur aus dem Nullvektor. Da  $E_1$  invariant unter  $L$  ist, ist es auch sein Orthogonalkomplement  $E_1^\perp$  von  $E_1$  in  $\mathbb{E}$ . In diesem Komplement kann kein Eigenvektor zum Eigenwert 1 liegen; somit ist  $L - \mathbb{1}$  auf ihm injektiv. Da andererseits  $(L - \mathbb{1})^2$  die Nullabbildung auf  $\mathbb{E}$  ist, ist dies alles nur möglich, wenn  $E_1^\perp$  der Nullraum,  $E_1 = \mathbb{E}$  und folglich  $L = \mathbb{1}$  sind. Das Element  $\psi = (w, \mathbb{1}) \in N$  liegt also in der Translationsuntergruppe  $\Gamma(G) \times \{\mathbb{1}\}$  von  $G'$ .  $\square$

Obiges Resultat hat mehrere nützliche Folgerungen. Eine erste ist

KOROLLAR B5.5 *Sei  $f: G \xrightarrow{\sim} G'$  ein Isomorphismus zwischen zwei kristallographischen Gruppen  $G, G'$  von  $\mathbb{E}$ . Dann bildet  $f$  die Translationsuntergruppe  $T(G)$  von  $G$  auf die Translationsuntergruppe  $T(G')$  von  $G'$  ab und induziert einen Isomorphismus  $f_*$  der Punktgruppe  $G_0$  auf die Punktgruppe  $G'_0$ .*

*Proof.* Das Bild  $f(T(G))$  von  $T(G)$  unter  $f$  ist ein abelscher Normalteiler, denn  $T(G)$  hat diese Eigenschaften und  $f$  ist ein Isomorphismus. Nach obigem Satz ist  $f(T(G))$  also in der Translationsgruppe  $T(G')$  von  $G'$  enthalten. Da mit  $f$  auch  $f^{-1}$  ein Isomorphismus von Gruppen ist, sieht man analog, dass  $f^{-1}(T(G')) \subseteq T(G)$ . Daraus folgt die Inklusion  $T(G') \subseteq f(T(G))$ .

Diese Inklusion und die zuvor bewiesene umgekehrte Inklusion  $T(G') \supseteq f(T(G))$  zeigen, dass  $f$  den Normalteiler  $T(G)$  von  $G$  auf  $T(G')$  von  $G'$  abbildet. Folglich induziert  $f$  einen Isomorphismus von der Quotientengruppe  $Q = G/T(G)$  auf die Gruppe  $Q' = G'/T(G')$ . Die erste dieser Quotientengruppen ist isomorph zur Punktgruppe  $G_0$  von  $G$ , der zweite isomorph zu  $G'_0$ . Damit ist alles bewiesen.  $\square$

**KOROLLAR B5.6** *Seien  $G$  und  $G'$  kristallographische Gruppen des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$ . Sind  $G$  und  $G'$  isomorph, so sind es auch ihre Punktgruppen  $G_0, G'_0$ .*

**BEISPIEL B5.7** Im dritten der Beispiele B5.2 sind 10 Ornamentgruppen beschrieben worden. Es wurde behauptet, sie seien paarweise nicht isomorph, mit Ausnahme der Gruppen  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_6$  und  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_7$ , sowie  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_8$  und  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_9$ . Korollar B5.6 erlaubt einem, diese Behauptung zu überprüfen. Danach genügt es nachzuweisen, dass gewisse Paare von Punktgruppen, also *endliche* Gruppen, nicht isomorph sind. Dies ist gewiss dann der Fall, wenn die Gruppen verschiedene Ordnung haben. Nun haben aber 3 der Untergruppen von  $\text{Aut}(\mathbb{Z}^2)$  die Ordnung 4, die Untergruppe der orientierungserhaltenden Abbildungen

$$H_2 = \text{Aut}^+(\mathbb{Z}^2) = \{\mathbb{1}, \varphi_4: x \mapsto (-x_2, x_2), id, \varphi_4\},$$

sowie die beiden Untergruppen mit je zwei Spiegelungen

$$H_3 = \{\pm \mathbb{1}, \rho_h, \rho_v\} \text{ und } H_4 = \{\pm \mathbb{1}, \rho_d, \rho_{d'}\}.$$

Die erste Gruppe ist zyklisch, die beiden anders sind hingegen direkte Produkte von zwei zyklischen Gruppen der Ordnung zwei und daher isomorph. Mit Korollar B5.6 kann man also nicht ausschliessen dass die Gruppen  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_3$  und  $\mathbb{Z}^2 \rtimes H_4$  isomorph sind. Wir werden dies aber mit feineren Hilfsmitteln in Unterabschnitt 9.1 erreichen.

## 5.2 Affine Äquivalenz von kristallographischen Gruppen

In diesem Unterabschnitt geht es um die Frage, welche Klasseneinteilung auf der Menge  $\mathcal{CG}(\mathbb{E})$  der kristallographischen Gruppen gewählt werden soll. Auf diese Fragen gibt es mehrere Antworten; wohl bekannt sind die folgenden:

**DEFINITIONEN B5.8** Seien  $G$  und  $G'$  kristallographische Gruppen des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$ . Die Gruppen werden *eigentlich affin äquivalent* genannt, wenn es eine orientierungserhaltende affine Bijektion  $\alpha: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, welche die Bedingung

$$G' = \alpha \circ G \circ \alpha^{-1} \tag{B5.1}$$

erfüllt. Sie sind *affin äquivalent*, wenn es eine affine Bijektion  $\alpha: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, welche die Bedingung (B5.1) richtig macht.

Sie sind *isomorph*, falls sie als abstrakte Gruppen isomorph sind.

Diese Definitionen werfen einige Fragen auf. Es ist klar, dass eigentlich-affin äquivalente Gruppen auch affin äquivalent und affin äquivalente Gruppen isomorph sind. Offen bleibt aber zunächst, ob diese Implikationen umkehrbar sind und ob sie den Bedürfnissen der Kristallographen Rechnung tragen. Die erste dieser Fragen wird in den Unterabschnitten 5.4 und 7.4 behandelt werden; in diesem Unterabschnitt geht es dagegen um Anforderungen aus der Kristallographie.

### 5.2a Anforderungen aus der Kristallographie

Wie in Nummer 1.2b der Einleitung erwähnt wurde, kann man die Struktur eines idealisierten Kristalles durch eine Teilmenge  $\mathcal{S} \subset \mathbb{E}^3$  beschreiben, etwa indem man die Positionen der Atome und Ionen durch die Mittelpunkte kleiner Kugeln angibt und verschiedene Atom- oder Ionen-Sorten durch Kugeln unterschiedlicher Radien kennzeichnet. Jeder Teilmenge  $\mathcal{S}$  eines Euklidischen Raumes ist eine Symmetriegruppe  $\text{Sym}(\mathcal{S})$  zugeordnet; sie wird durch die Formel

$$\text{Sym}(\mathcal{S}) = \{\psi \in \text{Iso}(\mathbb{E}) \mid \psi(\mathcal{S}) = \mathcal{S}\}. \quad (\text{B5.2})$$

festgelegt. Da die Struktur eines idealisierten Kristalles invariant unter Translationen in drei linear unabhängigen Richtungen ist, bilden die Translationsvektoren der Translationen in  $\text{Sym}(\mathcal{S})$  ein Gitter  $\Gamma(\text{Sym}(\mathcal{S}))$  des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^3$ , die Symmetriegruppe ist also eine *Raumgruppe*, d. h. eine kristallographische Gruppe des 3-dimensionalen Raumes.

Die Symmetriegruppe einer beliebigen Teilmenge  $\mathcal{S}$  besteht häufig nur aus der Identität. Daher die

**DEFINITION B5.9** Eine Teilmenge  $\mathcal{S}$  von  $\mathbb{E}^n$  wird *n-fach periodisch* genannt, wenn die Vektoren der Translationsgruppe von  $\text{Sym}(\mathcal{S})$  ein Gitter  $\Gamma(\text{Sym}(\mathcal{S}))$  von  $\mathbb{E}$  bilden.

Man beachte, dass die Symmetriegruppe einer *n-fach periodischen* Teilmenge nach Definition eine kristallographische Gruppe ist.

Nun zur Präzisierung der intuitiven *Idee der im wesentlichen gleichen Teilmengen*  $\mathcal{S}$  eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$ . Ist  $\mathbb{E}$  der 3-dimensionale Raum, so wird man die Menge  $\mathcal{S}$  und die verschobene Menge  $\mathcal{S}+v$  üblicherweise als im wesentlichen gleich ansehen. Ebenso sind  $\mathcal{S}$  und  $\lambda \cdot \mathcal{S}$  für jeden Skalar  $\lambda \neq 0$  nicht stark unterschiedlich. Die Inversion  $x \mapsto (-1) \cdot x$  ist eine Isometrie, welche die Orientierung des Raumes ändert. Soll man nun auch die Mengen  $\mathcal{S}$  und  $-\mathcal{S}$  auch als im wesentlichen gleich ansehen?

Die Antwort der Kristallographen ist negativ: sie kennen Strukturen  $\mathcal{S}$ , bei denen sowohl  $\mathcal{S}$  wie auch  $-\mathcal{S}$  in der Natur vorkommen, aber mit verschiedenen makroskopischen Eigenschaften. Die Kristallographen arbeiten daher mit der folgenden Präzisierung des intuitiven Begriffes der im wesentlichen gleichen Teilmengen des  $\mathbb{E}^3$ :

**DEFINITION B5.10** Zwei Teilmengen  $\mathcal{S}$  und  $\mathcal{S}'$  werden *eigentlich ähnlich* genannt, falls es eine orientierungs-erhaltende Ähnlichkeitsabbildung  $\sigma: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, die  $\mathcal{S}$  auf  $\mathcal{S}'$  abbildet.

Wie man leicht nachrechnet, erfüllen die Symmetriegruppen von  $\mathcal{S}$  und  $\mathcal{S}'$  dann die Beziehung

$$\text{Sym}(\mathcal{S}') = \sigma \circ \text{Sym}(\mathcal{S}) \circ \sigma^{-1}. \quad (\text{B5.3})$$

### 5.2b Begriff der affinen Äquivalenz

Die Relation der eigentlich-ähnlichen Äquivalenz führt zu einer Einteilung der Raumgruppen; diese Einteilung besitzt aber unendlich viele Klassen. Die Abbildung B.5 deutet einen Grund für die Unendlichkeit der Anzahl der Klassen an: die Punktgrup-

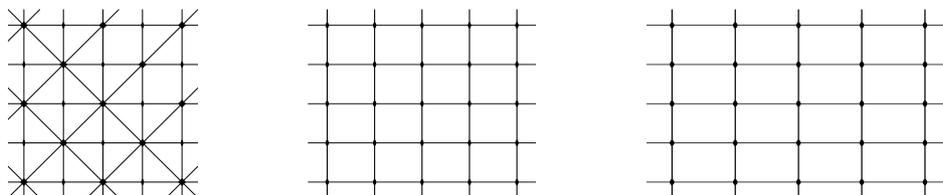


Abbildung B.5: Rechteckige Gitter, von denen keine zwei ähnlich sind

pen der beiden rechteckigen Netze sind gleich; ihre Ordnungen sind aber kleiner als jene der Punktgruppe des quadratischen Netzes. Es sind aber keine zwei der drei Netze ähnlich. Auf Grund der gleichen Punktgruppen sollten aber die Ornamentgruppen des mittleren und des rechten Netzes – und natürlich aller Mitglieder einer unendlichen Schar von rechteckigen Netzen – untereinander stärker verwandt sein als jede von ihnen mit der Ornamentgruppe des quadratischen Netzes verwandt ist.

Es gibt Beziehungen, welche die Relation der eigentlich-ähnlichen Äquivalenz verfeinert, und den oben ausgesprochenen Wunsch erfüllt. Man gewinnt sie, indem man in Definition B5.10 die Ähnlichkeitsabbildungen durch bijektive affine Abbildungen ersetzt, zusätzlich aber das Vorliegen des Analogon der Gleichheit (B5.3) fordert:

DEFINITION B5.11 Zwei Raumgruppen  $G$  und  $G'$  in  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  werden *affin äquivalent* genannt, falls es eine bijektive affine Abbildung  $\alpha = \tau \circ L: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$  gibt, welche die Beziehung

$$G' = \alpha \cdot G \cdot \alpha^{-1} = \{\alpha \circ \psi \circ \alpha^{-1} \mid \psi \in G\} \quad (\text{B5.4})$$

erfüllt. Falls man in dieser Beziehung  $\alpha$  *orientierungs-erhaltend* wählen kann, werden  $G$  und  $G'$  als *eigentlich-affin äquivalent* bezeichnet.

BEMERKUNG B5.12 Eine *affine Abbildung*  $\alpha: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$  ist die Zusammensetzung einer *linearen* Abbildung  $L$  mit einer Translation  $\tau_v$ ; eine Raumgruppe  $G$  besteht dagegen aus Isometrien. Ist nun  $\alpha: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$  eine bijektive affine Abbildung, so wird  $\alpha \circ G \circ \alpha^{-1}$  im allgemeinen keine Raumgruppe sein. Ist sie es, so zeigt die Rechnung

$$\begin{aligned} (\tau_u \circ L) \circ (\tau_v \circ \varphi) \circ (\tau \circ L)^{-1} &= (\tau_{u+L(v)} \circ (L \circ \varphi) \circ (\tau_{-L^{-1}(u)} \circ L^{-1})) \\ &= \tau_{u+L(v)-(L \circ \varphi \circ L^{-1})(u)} \circ (L \circ \varphi \circ L^{-1}) \end{aligned} \quad (\text{B5.5})$$

dass  $L \circ \varphi \circ L^{-1}$  für jede orthogonale Abbildung  $\varphi \in G_0$  wiederum orthogonal sein muss. Dies bedingt, dass  $L$  der Gruppe  $G_0$  angepasst ist; in Nummer 6.2a wird untersucht werden, was dies genau heisst.

### 5.2c Arithmetische und geometrische Äquivalenz

Die Relation der affinen Äquivalenz ist eine Äquivalenzrelation auf der Menge  $\mathcal{CG}(\mathbb{E})$  der kristallographischen Gruppen von  $\mathbb{E}$ ; sie führt daher zu einer Klasseneinteilung.

Ein Ziel der Theorie der kristallographischen Gruppen ist es, diese Einteilung zu verstehen. Erstaunlicherweise kann man ohne grossen Aufwand nachweisen, dass die

Anzahl der Klassen endlich ist (siehe etwa P. Buser [Bu85]). Die obere Schranke der Anzahl der Klassen, die dieser Beweis liefert, ist allerdings unbrauchbar, wenn es um die praktische Bestimmung eines Vertretersystems geht. In diesem Fall ist die Vorgehensweise der Kristallographen des 19. Jahrhunderts angemessener. *Sie besteht darin, dass man die Relation der affinen Äquivalenz vergrößert und zwar so, dass man erstens für die neuen, grösseren Äquivalenzklassen ein Vertretersystem konstruieren kann und es zweitens verhältnismässig leicht fällt, herauszufinden, aus welchen kleineren Klassen eine der neuen, grösseren Klassen zusammengesetzt ist.*

Es ist nicht schwierig, praktisch brauchbare, gröbere Äquivalenzrelationen zu beschreiben. Ich erkläre im Folgenden die Relation der *arithmetischen* Äquivalenz und der noch grösseren *geometrischen* Äquivalenz. Jede kristallographische Gruppe von  $\mathbb{E}$  gibt Anlass zu einem Paar  $(\Gamma(G), G_0)$ , bestehend aus dem Gitter  $\Gamma(G)$  und der Punktgruppe  $G_0$ . Nach Satz B5.3 ist die Punktgruppe  $G_0$  eine Untergruppe der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma(G))$ . Die beschriebene Zuordnung hat also die Form

$$\vartheta: \mathcal{CG}(\mathbb{E}) \longrightarrow \mathcal{P} = \{(\Gamma, H) \mid H \text{ Untergruppe von } \text{Aut}(\Gamma)\}. \quad (\text{B5.6})$$

Die Zuordnung ist surjektiv – denn das semi-direkte Produkt  $\{\tau_v \circ \varphi \mid v \in \Gamma, \varphi \in H\}$  ist ein Urbild des Paares  $(\Gamma, H)$ . Auf  $\mathcal{P}$  definiert man nun zwei Relationen:

DEFINITION B5.13 Zwei Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$  in  $\mathcal{P}$  werden *arithmetisch* äquivalent genannt, falls es eine lineare bijektive Abbildung  $L: E \xrightarrow{\sim} E$  gibt, welche die Bedingung

$$\Gamma' = L(\Gamma) \quad \text{und} \quad H' = L \circ H \circ L^{-1} \quad (\text{B5.7})$$

erfüllt. Die Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$  in  $\mathcal{P}$  werden *geometrisch* äquivalent genannt, falls es eine lineare bijektive Abbildung  $L: E \xrightarrow{\sim} E$  gibt, welche die schwächere Bedingung  $H' = L \circ H \circ L^{-1}$  erfüllt.<sup>12</sup>

Die oben definierten Relationen sind Äquivalenzrelationen; ihre Klassen werden *arithmetische*, beziehungsweise *geometrische* Klassen (oder Kristallklassen) genannt. Wichtig ist nun

HILFSSATZ B5.14 *Sind  $G$  und  $G'$  affin-äquivalent, so sind die Paare  $(\Gamma(G), G_0)$  und  $(\Gamma(G'), G'_0)$  arithmetisch äquivalent.*

*Proof.* Sei  $\alpha = \tau_u \circ L$  eine affine Bijektion, welche zeigt, dass  $G$  und  $G'$  affin äquivalent sind. Es ist dann  $G' = \alpha \circ G \circ \alpha^{-1}$ . Ist nun  $\tau_v \circ \varphi \in G$ , so berechnet sich die Komposition  $\alpha \circ \tau_v \circ \varphi \circ \alpha^{-1}$  nach Gleichung (B5.5) zu

$$\tau_{u+L(v)-(L \circ \varphi \circ L^{-1})(u)} \circ (L \circ \varphi \circ L^{-1}).$$

Dies zeigt zunächst, dass Konjugation mit  $L$  die Punktgruppe  $G_0$  in die Punktgruppe  $(G')_0$  hinein abbildet. Ist  $\varphi = \mathbb{1}$ , also  $\tau_v \circ \varphi \in T(G)$ , so sieht man weiter, dass  $\alpha \circ \tau_v \circ \alpha^{-1} = \tau_{L(v)}$  ist. Da diese Komposition nach Voraussetzung in  $G'$  liegt, heisst dies, dass  $L$  das Gitter  $\Gamma(G)$  in das Gitter  $\Gamma(G')$  hinein abbildet. Vertauscht man die Rollen von  $G$  und  $G'$ , und ersetzt  $\alpha$  durch  $\alpha^{-1}$  so erkennt man schliesslich, dass in den Beziehungen  $L(\Gamma(G)) \subseteq \Gamma(G')$  und  $L \circ G_0 \circ L^{-1} \subseteq G'_0$  die Gleichheit gilt.  $\square$

<sup>12</sup>Analog werden die Relationen der eigentlich arithmetischen (bzw. geometrischen) Äquivalenz definiert. Diese Relationen spielen in der allgemeinen Theorie eine untergeordnete Rolle. Ich erwähne sie daher nur dann, wenn sie überraschende Einsichten liefern, insbesondere in Unterabschnitt 5.4.

Aus Hilfssatz B5.14 folgt, dass die (eigentlich) arithmetische Äquivalenz eine Vergrößerung der (eigentlich) affinen Äquivalenz ist. Um diese Tatsache hervorzuheben, führen wir die arithmetische Äquivalenz von kristallographischen Gruppen ein:

**DEFINITION B5.15** Zwei kristallographische Gruppen  $G$  und  $G'$  werden (eigentlich) *arithmetisch äquivalent* genannt, falls die Paare  $\vartheta(G) = (\Gamma(G), G_0)$  und  $\vartheta(G') = (\Gamma(G'), G'_0)$  (eigentlich) arithmetisch äquivalent sind.

Die nachstehende Tabelle B.1 führt vor Augen, dass die Mächtigkeit der Menge  $\mathcal{A}$  der arithmetischen Klassen und jene der Menge  $\mathcal{G}$  der geometrischen Klassen deutlich kleiner als die Anzahl der affinen Klassen von Raumgruppen ist.<sup>13</sup> Die Bezeichnung *Vergrößerung* ist also angebracht.

dim $\mathbb{E}$	Affine Klassen	card( $\mathcal{A}$ )	card( $\mathcal{G}$ )
2	17	13	10
3	219	73	32
4	4783	710	227
5	222 018	6079	955
6	28 927 922	85 311	7014

Tabelle B.1: Vergleich der Anzahl verschiedener Klassen in den Dimensionen 2 bis 6

Natürlich sieht man den neuen Äquivalenzrelationen nicht ohne Weiteres an, dass sie die Bestimmung der affinen Äquivalenzklassen praktisch durchführbar machen. Darum nur noch folgende Ankündigung: in Unterabschnitt 6.1 werden wir sehen, dass die Menge  $\mathcal{A}_n$  der arithmetischen Kristallklassen des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^n$  bijektiv auf die Menge der Konjugationsklassen der endlichen Untergruppen der Gruppe  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$  abgebildet werden kann. Dies ist erstaunlich, da in die Beschreibung eines Paares  $(\Gamma, H)$  die reellen Zahlen eingehen, nicht aber in die Beschreibung eines Elementes von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$ , einer ganzzahligen,  $n$ -reihigen Matrix mit Determinante  $\pm 1$ .

### 5.3 Anzahl der affinen Äquivalenzklassen

Die eigentlich-affinen Klassen der kristallographischen Gruppen des  $\mathbb{R}^3$  sind um 1890 vom russischen Kristallographen E. S. von FEDOROV (1853–1919) und vom deutschen Mathematiker Arthur SCHOENFLIESS (1853–1928) bestimmt worden. Sie taten dies, in dem sie in jeder Äquivalenzklasse einen Vertreter konstruierten und so – nach einigen Berichtigungen – zum Ergebnis kamen, es gebe 230 (eigentlich-affine) Klassen. In diesem Unterabschnitt zeige ich, wie das Schlussergebnis bei Schoenflies aussieht und was es an weiteren Entwicklungen angeregt hat. Die Beweise der ausgesprochenen allgemeinen Behauptungen werden Gegenstand des Abschnittes C7 sein.

#### 5.3a Das Ergebnis von Schoenflies

Schoenflies veröffentlichte seine Klassifikation der Raumgruppen in einem Buch mit dem Titel *Krystallsysteme und Krystalstruktur*. Sein Titelblatt ist oben auf Seite 55 wiedergegeben. Auf Seite 396 seines Buches beginnt Schoenflies, nach langen Vorbereitungen, die Bestimmung der Raumgruppen. Er benutzt dabei die Einteilung der

<sup>13</sup>Die Zahlen stammen für  $n \leq 4$  aus [BBal], p. 52. und für  $n \in \{5, 6\}$  aus [PS00], Tabelle 2.

# KRYSTALLSYSTEME

UND

# KRYSTALLSTRUCTUR

VON

**DR. ARTHUR SCHOENFLIES,**  
PRIVATDOCENT DER MATHEMATIK AN DER UNIVERSITÄT GÖTTINGEN.

---

MIT 73 IN DEN TEXT GEDRUCKTEN FIGUREN.



LEIPZIG,  
DRUCK UND VERLAG VON B. G. TEUBNER.  
1891.

Abbildung B.7: Titelblatt des Schoenfliesschen Buches

Raumgruppen in die 32 geometrischen Kristallklassen, die er nach den 7 Kristallsystemen anordnet. Anfangend mit dem Kristallsystem mit den geringsten Symmetrien, schreitet er zu symmetrischeren Kristallsystemen voran, und gelangt schliesslich auf Seite 534 zum *regulären System*; die Gitter der Raumgruppen dieses Systems sind nach Definition *kubisch*, entweder primitiv kubisch, flächenzentriert kubisch oder innenzentriert kubisch. Auf den Seiten 555 und 556 gibt er dann eine Tabelle, welche die Liste der 230 Klassen zusammenfasst; sie ist auf den Seiten 56 und 57 wiedergegeben und wird durch folgende Zeilen eingeleitet:

**§ 8. Tabelle aller Raumgruppen.** Die folgende Tabelle giebt die Zahl der einer jeden Kristallklasse entsprechenden Raumgruppen nebst der zugehörigen Translationsgruppe an. Wir ordnen die Gruppen nach den Kristallsystemen.

— 555 —

<b>Triklines System.</b>		$\Gamma_\tau$ .			
$S_2$ .	Holoedrie.	1			
$C_1$ .	Hemiedrie.	1			
<b>Monoklines System.</b>		$\Gamma_m, \Gamma_m'$ .			
$C_2^h$ .	Holoedrie.	4	2		
$S$ .	Hemiedrie.	2	2		
$C_2$ .	Hemimorphie.	2	1		
<b>Rhombisches System.</b>		$\Gamma_v, \Gamma_v', \Gamma_v'', \Gamma_v'''$ .			
$V^h$ .	Holoedrie.	16	6	2	4
$V$ .	Hemiedrie.	4	2	1	2
$C_2^v$ .	Hemimorphie.	10	7	2	3
<b>Rhomboedrisches System.</b>		$\Gamma_{rh}, \Gamma_h$ .			
$D_3^d$ .	Holoedrie.	2	4		
$D_3$ .	Enantiomorphe Hemiedrie.	1	6		
$C_3^v$ .	Hemimorphe Hemiedrie.	2	4		
$C_3^i$ .	Paramorphe Hemiedrie.	1	1		
$C_3$ .	Tetartoedrie.	1	3		
<b>Tetragonales System.</b>		$\Gamma_q, \Gamma_q'$ .			
$D_4^h$ .	Holoedrie.	16	4		
$D_4$ .	Enantiomorphe Hemiedrie.	8	2		
$C_4^v$ .	Hemimorphe Hemiedrie.	8	4		
$C_4^h$ .	Paramorphe Hemiedrie.	4	2		
$C_4$ .	Tetartoedrie.	4	2		
$S_4^u$ .	Hemiedrie mit Axe zweiter Art.	8	4		
$S_4$ .	Tetartoedrie mit Axe zweiter Art.	1	1		
<b>Hexagonales System.</b>		$\Gamma_h$ .			
$D_6^h$ .	Holoedrie.	4			
$D_6$ .	Enantiomorphe Hemiedrie.	6			
$C_6^v$ .	Hemimorphe Hemiedrie.	4			
$C_6^h$ .	Paramorphe Hemiedrie.	2			
$C_6$ .	Tetartoedrie.	6			
$D_3^h$ .	Hemiedrie mit dreizähliger Axe.	4			
$C_3^h$ .	Tetartoedrie mit dreizähliger Axe.	1			

Tabelle B.2: Anfang der Tabelle der 230 Typen von Raumgruppen

— 556 —

	<b>Reguläres System.</b>	$\Gamma_c$ ,	$\Gamma'_c$ ,	$\Gamma''_c$ .
$O^h$ .	Holoedrie.	4	4	2
$O$ .	Enantiomorphe Hemiedrie.	4	2	2
$T^d$ .	Hemimorphe Hemiedrie.	2	2	2
$T^h$ .	Paramorphe Hemiedrie.	3	2	2
$T$ .	Tetartoedrie.	2	1	2

Wir schliessen mit folgendem

**Hauptsatz.** *Es giebt im Ganzen 230 kristallographisch verwendbare Raumgruppen.*

Tabelle B.3: Ende der Tabelle der 230 Typen von Raumgruppen

### 5.3b Das 18. Problem von Hilbert

Die in Definition B5.11 festgelegten Relationen der affinen und der eigentlich-affinen Äquivalenz führen im Falle des 3-dimensionalen Raumes zu endlich vielen Klassen. Die grosse Anzahl der Klassen macht es schwierig, vorherzusagen, wie das Ergebnis für höherdimensionale Räume lautet. D. Hilbert griff diese Frage in der Ausarbeitung seines Pariser Vortrages von 1900 auf ([Hi00], Problem 18). Er schreibt:

#### 18. Aufbau des Raumes aus kongruenten Polyedern.

Wenn man nach denjenigen Gruppen von Bewegungen in der Ebene fragt, für die ein Fundamentalbereich existiert, so fällt bekanntlich die Antwort sehr verschieden aus, je nachdem die betrachtete Ebene die Riemannsche (elliptische), euklidische oder Lobatschewskysche (hyperbolische) ist. Im Falle der elliptischen Ebene gibt es eine *endliche* Anzahl wesentlich verschiedener Arten von Fundamentalbereichen, und es reicht eine *endliche* Anzahl von Exemplaren kongruenter Bereiche zur lückenlosen Überdeckung der ganzen Ebene aus: Die Gruppe besteht eben nur aus einer endlichen Anzahl von Bewegungen. Im Falle der hyperbolischen Ebene gibt es eine *unendliche* Anzahl wesentlich verschiedener Arten von Fundamentalbereichen, nämlich die bekannten Poincaréschen Polygone; zur lückenlosen Überdeckung der Ebene ist eine *unendliche* Anzahl von Exemplaren kongruenter Bereiche notwendig. Der Fall der euklidischen Ebene steht in der Mitte; denn in diesem Falle gibt es nur eine *endliche* Anzahl von wesentlich verschiedenen Arten von Bewegungsgruppen mit Fundamentalbereich; aber zur lückenlosen Überdeckung der ganzen Ebene ist eine *unendliche* Anzahl von Exemplaren kongruenter Bereiche notwendig.

Genau die entsprechenden Tatsachen gelten auch im drei-dimensionalen Raume. Die Tatsache der Endlichkeit der Bewegungsgruppen im elliptischen Raume ist eine unmittelbare Folge eines fundamentalen Satzes von C. JORDAN<sup>14</sup>, wonach die Anzahl der wesentlich verschiedenen Arten von *endlichen* Gruppen linearer Substitutionen mit  $n$  Veränderlichen eine gewisse endliche, von  $n$  abhängige Grenze nicht überschreitet. Die Bewegungsgruppen mit Fundamentalbereich im hyperbolischen Raume sind von FRICKE und KLEIN in den Vorlesungen über automorphe Funktionen<sup>15</sup> untersucht worden, und endlich haben FEDOROW<sup>16</sup>,

<sup>14</sup>J. de Math. Bd 84, (1878) und Atti della Reale Accademia di Napoli 1880.

<sup>15</sup>Liepzig 1897. Vgl. insbesondere Abschnitt I, Kap. 2–4.

<sup>16</sup>Symmetrie der regelmäßigen Systeme von Figuren 1890.

SCHOENFLIES<sup>17</sup> und neuerdings ROHN<sup>18</sup> den Beweis dafür erbracht, daß es im euklidischen Raume nur eine endliche Zahl wesentlich verschiedener Arten von Bewegungsgruppen mit Fundamentalbereich gibt. Während nun die den elliptischen und hyperbolischen Raum betreffenden Resultate und Beweismethoden unmittelbar auch für den  $n$ -dimensionalen Raum Geltung haben, so scheint die Verallgemeinerung des den Euklidischen Raum betreffenden Satzes erhebliche Schwierigkeiten zu bieten, und es ist daher die Untersuchung der Frage wünschenswert, ob *es auch im  $n$ -dimensionalen euklidischen Raume nur eine endliche Anzahl wesentlich verschiedener Arten von Bewegungsgruppen mit Fundamentalbereich gibt.*

Ein Fundamentalbereich einer jeden Bewegungsgruppe zusammen mit den kongruenten, aus der Gruppe entspringenden Bereichen liefert offenbar eine lückenlose Überdeckung des Raumes. Es erhebt sich die Frage, ob ferner auch *solche Polyeder existieren, die nicht als Fundamentalbereiche von Bewegungsgruppen auftreten, und mittels derer eine lückenlose Erfüllung des ganzen Raumes möglich ist.* Ich weise auf die hiermit in Zusammenhänge stehende, für die Zahlentheorie wichtige und vielleicht in der Physik und Chemie einmal Nutzen bringende Frage hin, wie man unendlich viele Körper von der gleichen vorgeschriebenen Gestalt, etwa Kugeln mit gegebenem Radius oder reguläre Tetraeder mit gegebener Kante (bzw. in vorgeschriebener Stellung), im Raume am dichtesten einbetten, d. h. so lagern kann, daß das Verhältnis des erfüllten Raumes zum nicht erfüllten Raume möglichst gross ausfällt.

### 5.3c Resultate von Bieberbach

Der erste Teil des 18. Problems von Hilbert stellt die Frage

... es ist daher die Untersuchung der Frage wünschenswert, ob *es auch im  $n$ -dimensionalen euklidischen Raume nur eine endliche Anzahl wesentlich verschiedener Arten von Bewegungsgruppen mit Fundamentalbereich gibt.*

1910 schon konnte L. Bieberbach seine Antwort ankündigen; er begründete sie in den Arbeiten [Bi11a] und [Bi12]:

HAUPTSATZ B5.16 *Für jeden Euklidischen metrischen Raum  $\mathbb{E}$  enthält  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  nur endlich eigentlich-affine Klassen von Raumgruppen.*

## 5.4 Anhang: Enantiomorphe Klassen

In den Nummern 5.2a und 5.2b sind die Begriffe der affinen und der eigentlich affinen Äquivalenz von kristallographischen Gruppen eingeführt und motiviert worden; die Unterschiede zwischen der Einteilung in affine Typen und jener in eigentlich affine Typen kamen bisher aber noch nicht zur Sprache. Ebenso wenig wurde diskutiert, wie sich die arithmetischen von den eigentlich arithmetischen Kristallklassen, die geometrischen von den eigentlich geometrischen Kristallklassen unterscheiden. Diese Untersuchung soll in diesem Unterabschnitt nachgeholt werden.

Der Unterabschnitt besteht aus einigen allgemeinen Resultaten und einer Reihe von Beispielen. In den Resultaten geht es um drei Themen, die Aufspaltung einer geometrischen Kristallklasse in eigentlich-geometrische Kristallklassen, die Aufspaltung einer arithmetischen in eigentlich-arithmetische Kristallklassen sowie der Zerfall einer affinen Äquivalenzklasse in eigentlich-affine Äquivalenzklassen. Wie bald klar werden wird besteht jede der (grösseren) Klassen aus höchstens zwei eigentlichen Klassen

<sup>17</sup>Krystallsysteme und Krystallstruktur, Leipzig 1891.

<sup>18</sup>Mathematische Annalen, Bd. 53, (1900) S. 440–449.

und die Aufspaltung findet genau dann statt, wenn ein gewisser Normalisator nur orientierungs-erhaltende Abbildungen enthält.

#### 5.4a Aufspaltung von geometrischen Kristallklassen – Resultate

Seien  $\Gamma$  ein Gitter von  $\mathbb{E}$  und  $H$  eine Untergruppe der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  des Gitters. Das Paar  $(\Gamma, H)$  und ein zweites  $(\Gamma', H')$  sind nach Definition B5.13 *geometrisch* äquivalent, falls es eine lineare Bijektion  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, welche die Bedingung

$$H' = L \circ H \circ L^{-1} \quad (\text{B5.8})$$

erfüllt. Die Gitter  $\Gamma$  und  $\Gamma'$  kommen in dieser Definition nicht vor; sie sorgen aber dafür, dass  $H$  und  $H'$  endliche Untergruppen der orthogonalen Gruppe sind (Satz B4.7). Und natürlich müssen sowohl  $H$  wie  $H'$  auf einem Gitter operieren, was eine weitere, starke Einschränkung ist.<sup>19</sup> Die Untergruppen  $H'$ , die in einem zu  $(\Gamma, H)$  äquivalenten Paar auftreten, bilden daher die Familie

$$\{L \circ H \circ L^{-1} \mid L \in \text{GL}(\mathbb{E}) \text{ und } L \circ H \circ L^{-1} \subset O(\mathbb{E})\}.$$

Mit Satz C6.6 kann diese Beschreibung vereinfacht werden und zwar zu

$$\{H' \in \text{geom. Klasse von } (\Gamma, H)\} = \{\varphi \circ H \circ \varphi^{-1} \mid \varphi \in O(\mathbb{E})\}. \quad (\text{B5.9})$$

Verfeinert man nun die geometrische Äquivalenz zur eigentlichen geometrischen Äquivalenz – bei ihr wird in Definition B5.13 zusätzlich gefordert, dass die Determinante von  $L$  positiv ist –, so sieht man analog, dass die Gruppen  $H'$  in den Paaren, die zu  $(\Gamma, H)$  eigentlich geometrisch äquivalent sind, gerade die Konjugationsklasse

$$\{H' \in \text{eigentlich geom. Klasse von } (\Gamma, H)\} = \{\varphi \circ H \circ \varphi^{-1} \mid \varphi \in \text{SO}(\mathbb{E})\}. \quad (\text{B5.10})$$

bilden. Die Beschreibungen (B5.9) und (B5.10) zeigen nun, wann die eigentlich-geometrische Klasse von  $(\Gamma, H)$  mit der geometrischen Klasse von  $(\Gamma, H)$  zusammenfällt. Sei nämlich  $\varphi_-$  eine orthogonale Abbildung mit Determinante  $-1$ . Die beiden Klassen sind gleich, falls  $\varphi_- \circ H \circ \varphi_-$  in der Konjugationsklasse  $^{\text{SO}(\mathbb{E})}H$  liegt, das heisst, falls es eine orthogonale Abbildung  $\varphi_+$  mit Determinante 1 gibt, welche die Bedingung  $\varphi_- \circ H \circ \varphi_- = \varphi_+ \circ H \circ \varphi_+$  oder

$$N_{O(\mathbb{E})}(H) \not\subseteq \text{SO}(\mathbb{E}) \quad (\text{B5.11})$$

erfüllt. Durchgeht man das gegebene Argument von hinten nach vorne, sieht man, dass Bedingung (B5.11) auch hinreichend ist.

In den Anwendungen hilft es manchmal, wenn die Gruppe  $O(\mathbb{E})$ , in der der Normalisator zu bilden ist, durch eine andere Gruppe ersetzt werden kann. Nach Satz C6.6 kann man von der Bedingung (B5.11) zur Bedingung  $N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \not\subseteq \text{GL}^+(\mathbb{E})$  übergehen, denn die Determinante eines positiven, selbstadjungierten Operators ist positiv. Sei nun  $\mathcal{B}$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma$  und  $H_{\mathcal{B}}$  die Matrizendarstellung von  $H$  in dieser Basis. Dann ist Bedingung (B5.11) gleichwertig mit der Bedingung

$$N_{\text{GL}(n, \mathbb{R})}(H_{\mathcal{B}}) \not\subseteq \text{GL}^+(n, \mathbb{R}). \quad (\text{B5.12})$$

Das Beweis von Theorem C6.9 zeigt dann noch, dass man in obiger Bedingung die reellen Gruppen  $\text{GL}(n, \mathbb{R})$  und  $\text{GL}^+(n, \mathbb{R})$  durch die entsprechenden rationalen Gruppen ersetzen darf. Zusammengefasst haben wir das folgende Resultat erzielt:

<sup>19</sup>Siehe insbesondere Korollar C7.2, aber auch Satz C6.20.

SATZ B5.17 Die geometrische Kristallklasse eines Paares  $(\Gamma, H)$  besteht aus höchstens zwei eigentlich-geometrischen Teilklassen. Eine echte Aufspaltung findet genau dann statt, falls eine der folgenden, äquivalenten Bedingungen erfüllt ist:

- (i)  $N_{\mathbb{O}(\mathbb{E})}(H) \subseteq \text{SO}(\mathbb{E});$
- (ii)  $N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \subseteq \text{GL}^+(\mathbb{E});$
- (iii)  $N_{\text{GL}(n, \mathbb{Q})}(H_{\mathcal{B}}) \subseteq \text{GL}^+(n, \mathbb{Q}).$

In Bedingung (iii) bezeichnet  $\mathcal{B}$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma$ .

BEMERKUNG B5.18 Da eine geometrische Kristallklasse dank obigem Satz aus höchstens zwei eigentlich-geometrischen Klassen zusammengesetzt ist, entsteht bei einem Zerfall einer geometrischen Klasse ein Paar von eigentlich-geometrischen Klassen. Jede dieser Klassen wird *enantiomorph*<sup>20</sup> genannt; man sagt auch, die geometrische Kristallklasse sei enantiomorph.

Die lineare Abbildung  $-\mathbb{1}$  ist eine orthogonale Abbildung, die im Normalisator jeder Gruppe  $H$  liegt; falls die Dimension des Raumes  $\mathbb{E}$  ungerade ist, ist  $\det(-\mathbb{1}) = -1$ . Diese Beobachtung und der Umstand, dass die Gruppe  $H$  in ihrem Normalisator enthalten sind, liefern dann ein erstes konkretes Ergebnis, das

KOROLLAR B5.19 Die geometrische Klasse von  $(\Gamma, H)$  ist nicht enantiomorph, wenn eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:

- die Dimension von  $\mathbb{E}$  ist ungerade;
- die Gruppe  $H$  enthält ein Element mit negativer Determinante.

Die in Korollar B5.19 genannten Bedingungen lassen sich zu einer hinreichenden und notwendigen Bedingung für das Vorliegen der Inklusion  $N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \subseteq \text{GL}^+(\mathbb{E})$  ausbauen. Dazu betrachtet man den Gruppenhomomorphismus

$$\eta: N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \rightarrow \text{Aut}(H), \quad (\text{B5.13})$$

der durch die Zuordnung  $N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \ni L \rightarrow (\phi \mapsto L \circ \phi \circ L^{-1}) \in \text{Aut}(H)$  induziert wird. Sein Kern ist der Zentralisator  $C_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H)$  von  $H$  in  $\text{GL}(\mathbb{E})$ . Dieser besteht gerade aus den invertierbaren Elementen der Endomorphismenalgebra  $\text{End}_{\mathbb{R}H}(\mathbb{E})$  jenes  $\mathbb{R}H$ -Moduls  $\mathbb{E}$ , dessen  $H$ -Struktur durch die Einbettung  $\mathbb{H} \subset \text{GL}(\mathbb{E})$  gegeben wird. Falls die geometrische Klasse von  $(\Gamma, H)$  enantiomorph ist, so darf der Zentralisator  $C_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \subseteq N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \subseteq \text{GL}^+(\mathbb{E})$  nach Satz B5.17 kein Element negativer Determinante enthalten. Die Darstellungstheorie der endlichen Gruppen erlaubt es, ein Kriterium für diese notwendige Bedingung anzugeben, das vergleichsweise leicht nachprüfbar ist:

HILFSSATZ B5.20 Für jede Untergruppe  $H \subseteq \text{Aut}(\Gamma)$  sind die folgenden Aussagen gleichwertig:

- (ia)  $C_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \subseteq \text{GL}^+(\mathbb{E});$

<sup>20</sup>Das Adjektiv *enantiomorph* ist in der Kristallographie und der Chemie sehr gebräuchlich; es stammt aus dem Griechischen (*enantios* und *morphe*) und bedeutet *von entgegengesetzten Formen*.

(ib)  $\mathbb{E}$  enthält keinen  $H$ -invarianten (reellen) Unterraum ungerader Dimension.

*Proof.* Der endlich-dimensionale Modul  $\mathbb{R}H$ -Modul  $\mathbb{E}$  ist eine direkte Summe von einfachen Modulen; insbesondere lässt er sich also in der Form

$$V = W_1^{f_1} \oplus W_2^{f_2} \oplus \dots \oplus W_\ell^{f_\ell} \oplus U$$

schreiben. Dabei bezeichnen  $W_1, \dots, W_\ell$  paarweise nicht isomorphe, absolut einfache  $\mathbb{R}H$ -Moduln und  $U$  eine Summe von einfachen  $\mathbb{R}H$ -Moduln  $U_k$ , deren Endomorphismenalgebra  $\text{End}_{\mathbb{R}H}(U_k)$  grösser als  $\mathbb{R} \cdot \mathbb{1}$  ist. Die Endomorphismenalgebra  $\text{End}_{\mathbb{R}H}(\mathbb{E})$  ist deshalb das direkte Produkt der Endomorphismenalgebren der Teilmoduln  $W_1^{f_1}, \dots, W_\ell^{f_\ell}$  und  $U$ .<sup>21</sup> Nun ist die Endomorphismenalgebra jedes einfachen Summanden  $W_j$  gleich  $\mathbb{R}\mathbb{1}$ ; die Endomorphismenalgebra jedes Teilmoduls  $W_j^{f_j}$  ist daher die volle Matrizenalgebra  $M(f_j, \mathbb{R} \cdot \mathbb{1}_{W_j})$ ; diese hat genau dann ein Element negativer Determinante, wenn  $W_j$  ungerade Dimension hat. Die einfachen Moduln, die in  $U$  enthalten sind, haben dagegen alle einen Endomorphismenring, der einen Teilkörper isomorph zu  $\mathbb{C}$  enthält.<sup>22</sup> Nach Wahl einer  $\mathbb{C}$ -Struktur auf  $U$  ist dann jeder Endomorphismus  $L$  von  $U$  eine  $\mathbb{C}$ -lineare Abbildung; ihre Determinante ist daher auf Grund der Formel  $\det_{\mathbb{R}}(L) = |\det_{\mathbb{C}}|^2$  nicht negativ.

Die bisherigen Überlegungen zeigen, dass es in  $\text{End}_{\mathbb{R}H}(\mathbb{E})$  genau dann invertierbare Abbildungen mit negativer Determinante gibt, wenn der  $\mathbb{R}H$ -Modul  $\mathbb{E}$  einen absolut einfachen Teilmodul ungerader Dimension aufweist. Besitzt  $\mathbb{E}$  einen solchen Teilmodul, enthält  $\mathbb{E}$  offensichtlich einen Teilmodul ungerader Dimension. Besitzt umgekehrt  $\mathbb{E}$  einen Teilmodul  $W$  ungerader Dimension, so ist dieser nach dem Satz von Maschke ein direkter Summand von  $\mathbb{E}$ ; sei  $W'$  eines seiner Komplemente. Zerlegt man  $W$  und  $W'$  in einfache Summanden, so wird ein einfacher Summand von  $W$  ungerade Dimension haben, und daher absolut einfach sein.  $\square$

Zurück zum Gruppenhomomorphismus  $\eta$ , deren Kern wir eben untersucht haben. Sein Bild ist eine gewisse Untergruppe der Automorphismengruppe von  $H$ . Die Identifikation dieses Bildes kann aufwendig sein; die Tatsache, dass  $\text{im}(\eta)$  den Normalteiler  $\text{Inn}(H)$  der inneren Automorphismen enthält, macht einem die Lösung der Aufgabe aber immer dann leicht, wenn die Quotientengruppe  $\text{Aut}(H)/\text{Inn}(H)$  von sehr wenigen Elementen erzeugt wird.

Der folgende Satz fasst unsere bisherigen Ergebnisse über die Enantiomorphie einer vorgelegten eigentlich-geometrischen Klasse zusammen:

**SATZ B5.21** *Das Paar  $(\Gamma, H)$  vertritt genau dann eine enantiomorphe geometrische Klasse, wenn die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind:*

- (i) *der  $\mathbb{R}H$ -Modul  $V$  enthält keinen Teilmodul ungerader Dimension;*
- (ii) *die Gruppe  $H$  enthält kein Element mit negativer Determinante;*
- (iii) *es gibt lineare Abbildungen  $L_1, \dots, L_k$  in  $N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H)$ , deren Determinanten positiv sind und deren Bilder  $\eta(L_1), \dots, \eta(L_k)$  zusammen mit  $\text{Inn}(H)$  das Bild von  $\eta$  in  $\text{Aut}(H)$  erzeugen.*

<sup>21</sup>Siehe etwa

<sup>22</sup>Siehe etwa

*Proof.* Aus Satz B5.17 wissen wir, dass die geometrische Klasse von  $(\Gamma, H)$  genau dann enantiomorph ist, wenn der Normalisator  $N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H)$  der Gruppe  $H$  kein Element negativer Determinante enthält. Gemäss Hilfssatz B5.20 besagt Bedingung (i) gerade, dass der Zentralisator von  $H$  in  $\text{GL}^+(\mathbb{E})$  enthalten ist. Bedingung (i) ist also notwendig. Ist sie erfüllt, so ist das Vorzeichen der Determinantenfunktion auf jeder Nebenklasse  $C_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \circ H \circ L$  des Normalteilers  $C_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \circ H$  von  $N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \circ H$  konstant; der Normalisator ist deshalb genau dann in  $\text{GL}^+(\mathbb{E})$  enthalten, wenn die Bedingungen (ii) und (iii) erfüllt sind.  $\square$

#### 5.4b Beispiele von enantiomorphen geometrischen Kristallklassen

Satz B5.21 macht den Nachweis, dass ein gegebenes Paar  $(\Gamma, H)$  eine enantiomorphe eigentlich-geometrische Klasse vertritt, vergleichsweise einfach. Die Dimension des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$ , in dem  $\Gamma$  liegt, muss gerade sein (Bedingung (i) von Satz B5.21 oder Korollar B5.19); auch muss sie grösser als 2 sein, da jede Untergruppe von  $\text{O}(\mathbb{E}^2)$  Spiegelungen enthält, weshalb in Dimension 2 mindestens eine der Bedingungen (ii) oder (iii) des zitierten Satzes verletzt ist. Die kleinste Dimension, in der enantiomorphe geometrische Kristallklassen auftreten können, ist also 4. In dieser Dimension kommen sie auch tatsächlich vor; sie sind sogar recht zahlreich: 44 von den 227 geometrischen Klassen zerfallen in zwei eigentlich-geometrische Klassen.<sup>23</sup>

In dieser Nummer werden 2 dieser 44 Klassen vorgestellt. Dabei identifiziere ich die Gruppe  $\text{O}(\mathbb{R}^4)$  der orthogonalen Abbildungen von  $\mathbb{R}^4$  mit der Gruppe  $\text{O}(4, \mathbb{R})$  der orthogonalen 4-reihigen Matrizen.

BEISPIEL B5.22 Sei  $H \subset \text{O}(4, \mathbb{R})$  die zyklische Gruppe, die von der orthogonalen Matrix

$$A = A_{10/01} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B5.14})$$

erzeugt wird.<sup>24</sup> Diese Gruppe ist zyklisch von der Ordnung 4, weshalb ihre Automorphismengruppe 2 Elemente hat,  $\mathbb{1}$  und den Automorphismus  $\beta_{-1}$ , der  $A$  auf  $A^3 = A^{-1}$  abbildet. Sei  $V$  der  $\mathbb{R}H$ -Modul, dessen Vektorraum  $\mathbb{R}^4$  ist und dessen  $H$ -Wirkung durch Matrizenmultiplikation gegeben wird. Dieser Modul ist offensichtlich die direkte Summe von zwei 2-dimensionalen Teilmoduln  $U_1$  und  $U_2$ . Auf jedem dieser Teilmoduln bewirkt  $A$  eine Drehung der Ordnung 4, die sich im Komplexen als Multiplikation mit der Zahl  $i$  interpretieren lässt. Die Endomorphismenalgebra  $\text{End}_{\mathbb{R}H}(V)$  ist daher isomorph mit der Algebra der 2-reihigen komplexen Matrizen  $M(2, \mathbb{C})$ . Auf ihr nimmt die Determinantenfunktion nur nicht-negative Werte an, denn es gilt die Formel

$$\det \begin{pmatrix} a_1 & -b_1 & a_2 & -b_2 \\ b_1 & a_1 & b_2 & a_2 \\ a_1 & -b_1 & a_2 & -b_2 \\ b_1 & a_1 & b_2 & a_2 \end{pmatrix} = \det \left| \begin{pmatrix} a_1 + i \cdot b_1 & a_2 + i \cdot b_2 \\ a_3 + i \cdot b_3 & a_4 + i \cdot b_4 \end{pmatrix} \right|^2.$$

<sup>23</sup>Siehe [BBal], p. 52 und p. 405, oder [Sou03], p. 217, Table 1.

<sup>24</sup>Das Paar  $(\mathbb{Z}^4, H)$  vertritt die geometrische Kristallklasse, die im Buch [BBal] auf Seite 122 definiert und mit 10/01 bezeichnet wird.

(Vergleiche Anhang.) Die Determinante der Matrix  $A$  ist 1, und der Automorphismus  $\beta_{-1}: A \mapsto A^{-1}$  wird durch Konjugation mit der Matrix

$$B_{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

induziert. Diese Matrix beschreibt die Zusammensetzung von zwei Spiegelungen (an Hyperräumen); ihre Determinante ist daher ebenfalls 1.

Die vorangehenden Rechnungen zeigen, dass die Bedingungen (i), (ii) und (iii) von Satz B5.21 erfüllt sind, weshalb der Normalisator von  $H$  in der Gruppe  $GL(4, \mathbb{R})$  enthalten ist und das Paar  $(\mathbb{Z}^4, \{I_4, A, A^2, A^3\})$  eine enantiomorphe Klasse vertritt. Sie lehren weiter, dass der Zentralisator von  $H$  und die Matrizen­gruppe  $GL(2, \mathbb{C})$  isomorph sind; der Normalisator ist also sehr gross. Die Beschreibung des Normalisators wird sprechender, wenn man, wie dies in Nummer 5.4c geschehen wird, den Zentralisator von  $H$  in der Matrizen­gruppe  $GL(4, \mathbb{Z})$  betrachtet; die Rechnung besagen dann, dass  $N_{GL(4; \mathbb{Z})}(H)$  isomorph der Gruppe  $GL(2, \mathbb{Z}[i])$  ist.

BEISPIEL B5.23 Sei  $H \subset O(4, \mathbb{R})$  die zyklische Gruppe, die von der Matrix

$$A = A_{26/01} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B5.15})$$

erzeugt wird.<sup>25</sup> Die Matrix  $A$  ist orthogonal, hat die Ordnung 8 und ihr charakteristisches Polynom ist gleich  $\chi_A(\lambda) = \lambda^4 + 1$ . Die Nullstellen dieses Polynoms sind die 8-ten primitiven Einheitswurzeln, also

$$\zeta_8 = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot (1 + i), \quad \zeta_8^3, \quad \zeta_8^5, \quad \zeta_8^7 = \zeta_8^{-1}.$$

Da kein Eigenwert reell ist, hat  $V = \mathbb{R}^4$  keinen  $H$ -invarianten Unterraum, also auch keinen  $H$ -invarianten Unterraum ungerader Dimension. Die Bedingung (i), wie auch die Bedingung (ii), von Satz B5.21 sind daher erfüllt. Es fällt auch leicht, die Endomorphismenalgebra des  $\mathbb{R}H$ -Moduls  $V$  zu bestimmen: die Matrix  $A$  ist in  $O(4, \mathbb{R})$  konjugiert zu einer Matrix  $\tilde{A}$  in Kästchenform; im Hinblick auf die Eigenwerte von  $A$  kann man

$$\tilde{A} = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

wählen. Jede reelle Matrix, die mit  $\tilde{A}$  kommutiert, hat dann die Form

$$\begin{pmatrix} a_1 & -b_1 & 0 & 0 \\ b_1 & a_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_4 & -b_4 \\ 0 & 0 & b_4 & a_4 \end{pmatrix};$$

dies zeigt, dass der Zentralisator  $C_{GL(4, \mathbb{R})}(H)$  isomorph zu  $\mathbb{C}^* \times \mathbb{C}^*$  ist.

<sup>25</sup>Die geometrische Klasse des Paares  $(\mathbb{Z}^4, H)$  wird in [BBal], p. 232, mit 26/01 bezeichnet.

Die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(H)$  der zyklischen Gruppe ist das direkte Produkt von zwei Gruppen der Ordnung 2; sie wird von den beiden Automorphismen  $\beta_{-1}: A \mapsto A^{-1}$  und  $\beta_5: A \mapsto A^5$  erzeugt. Es sind  $A^{-1} = A^t$  und  $A^5 = A^4 \cdot A = -A$ ; die Automorphismen werden durch Konjugation mit den Matrizen

$$B_{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

induziert. Da beide die Determinante 1 haben, ist auch die dritte Bedingung von Satz B5.21 erfüllt. Daher ist auch geometrische Klasse von  $(\mathbb{Z}^4, \text{gp}(A_{26/10}))$  enantiomorph.

#### 5.4c Aufspaltung von arithmetischen Kristallklassen – Resultate

Zwei Paare  $(\Gamma, H \subseteq \text{Aut}(\Gamma))$  und  $(\Gamma', H' \subseteq \text{Aut}(\Gamma'))$  werden *arithmetisch* äquivalent genannt, falls es eine lineare Bijektion  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, welche die Bedingungen

$$\Gamma' = L(\Gamma) \quad \text{und} \quad H' = L \circ H \circ L^{-1} \quad (\text{B5.16})$$

erfüllt (Definition B5.13). Die arithmetische Kristallklasse des Paares  $(\Gamma, H)$  ist also das Bild von  $(\Gamma, H)$  unter der Wirkung der Menge

$$\mathcal{L} = \{L \in \text{GL}(\mathbb{E}) \mid |L \circ H L^{-1} \subset \text{O}(\mathbb{E})\}. \quad (\text{B5.17})$$

Verfeinert man die arithmetische zur eigentlich-arithmetischen Äquivalenz, ergibt sich analog, dass die eigentlich-arithmetische Kristallklasse des Paares  $(\Gamma, H)$  das Bild dieses Paares unter der Wirkung der Menge

$$\mathcal{L}^+ = \{L \in \text{GL}(\mathbb{E}) \mid |L \circ H L^{-1} \subset \text{GL}^+(\mathbb{E})\}. \quad (\text{B5.18})$$

ist. Sei nun  $L_- \in \text{GL}(\mathbb{E}) \setminus \text{GL}^+(\mathbb{E})$ . Dann liegt  $L_-(\Gamma, H)$  genau dann in der eigentlich-arithmetischen Klasse von  $(\Gamma, H)$ , wenn es eine lineare Bijektion  $L^+ \in \text{GL}^+(\mathbb{E})$  gibt, derart dass  $L_-(\Gamma, H)$  und  $L^+(\Gamma, H)$  übereinstimmen, das heisst dass die Abbildung  $L = L_-^{-1} \circ L^+$  das Paar  $(\Gamma, H)$  festhält. Nun hält aber eine bijektive lineare Abbildung das Paar  $(\Gamma, H)$  genau dann fest, wenn  $L$  das Gitter  $\Gamma$  auf sich abbildet – das heisst zu  $\text{GL}(\Gamma)$  gehört – und  $L$  die Gruppe  $H$  normalisiert. Daher ist die arithmetische Kristallklasse von  $(\Gamma, H)$  genau dann enantiomorph, wenn der Normalisator  $N_{\text{GL}(\Gamma)}(H)$  in der Untergruppe  $\text{SL}(\Gamma)$  enthalten ist.

Für explizite Rechnungen wird man die gefundene Bedingung mit Matrizenformulieren; ist  $\mathcal{B}$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ , lautet die Bedingung  $N_{\text{GL}(n, \mathbb{Z})}(H) \subseteq \text{SL}(n, \mathbb{Z})$ . Alles in allem ergibt sich der

**SATZ B5.24** *Die arithmetische Kristallklasse eines Paares  $(\Gamma, H)$  besteht aus höchstens zwei eigentlich-arithmetischen Teilklassen. Eine echte Aufspaltung findet genau dann statt, falls eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:*

(ii)  $N_{\text{GL}(\Gamma)}(H) \subseteq \text{GL}^+(\Gamma)$ ;

(iii)  $N_{\text{GL}(n, \mathbb{Z})}(H_{\mathcal{B}}) \subseteq \text{SL}(n, \mathbb{Z})$ .

In Bedingung (iii) bezeichnet  $\mathcal{B}$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma$ .

Wie in Nummer 5.4c fließen aus dem erhaltenen Resultat einige nützliche Folgerungen, die sich leicht überprüfen lassen, insbesondere die folgenden:

**KOROLLAR B5.25** *Die arithmetische Klasse von  $(\Gamma, H)$  ist nicht enantiomorph, falls eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:*

- die Dimension von  $\mathbb{E}$  ist ungerade;
- die Gruppe  $H$  enthält ein Element mit negativer Determinante.

**KOROLLAR B5.26** *Falls die geometrische Klasse von  $(\Gamma, H)$  enantiomorph ist, sind alle in ihr enthaltenen arithmetischen Klassen enantiomorph.*

Sei nun  $\eta_*: N_{\text{GL}(\Gamma)}(H) \rightarrow \text{Aut}(H)$  der Gruppenhomomorphismus, welcher  $L \in N_{\text{GL}(\Gamma)}(H)$  auf den Automorphismus  $(\phi \mapsto L \circ \phi \circ L^{-1}) \in \text{Aut}(H)$  von  $H$  abbildet. Sein Kern ist der Zentralisator  $C_{\text{GL}(\Gamma)}(H)$  von  $H$  in  $\text{GL}(\Gamma)$ ; er besteht gerade aus den invertierbaren Elementen des Endomorphismenrings  $\text{End}_{\mathbb{Z}H}(\Gamma)$  von  $\Gamma$ .

Falls die arithmetische Klasse von  $(\Gamma, H)$  enantiomorph ist, enthält der Zentralisator  $C_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \subseteq N_{\text{GL}(\mathbb{E})}(H) \subseteq \text{GL}^+(\mathbb{E})$  nach Satz B5.24 kein Element negativer Determinante. Das Bild von  $\eta_*$  ist eine gewisse Untergruppe der Automorphismengruppe von  $H$ ; sie enthält stets den Normalteiler  $\text{Inn}(H)$  der inneren Automorphismen.

Der folgende Satz fasst die gewonnenen Einsichten über die Enantiomorphie einer vorgelegten eigentlich-arithmetischen Klasse zusammen:

**SATZ B5.27** *Das Paar  $(\Gamma, H)$  vertritt genau dann eine enantiomorphe arithmetische Klasse, wenn die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind:*

- (i)  $C_{\text{GL}(\Gamma)}(H) \subseteq \text{SL}(\Gamma)$ ;
- (ii)  $H$  enthält kein Element mit negativer Determinante;
- (iii) es Automorphismen  $\alpha_1, \dots, \alpha_k$  in  $N_{\text{GL}(\Gamma)}(H)$ , deren Determinanten positiv sind und deren Bilder  $\eta(\alpha_1), \dots, \eta(\alpha_k)$  zusammen mit  $\text{Inn}(H)$  das Bild von  $\eta$  in  $\text{Aut}(H)$  erzeugen.

#### 5.4d Beispiele von enantiomorphen arithmetischen Kristallklassen

Nach Korollar B5.26 sind die arithmetischen Klassen, welche in einer *enantiomorphen* geometrischen Kristallklasse liegen, ebenfalls enantiomorph. Hingegen kann es vorkommen, dass eine geometrische Klasse nicht enantiomorph ist, obwohl eine oder mehrere der in ihr enthaltenen arithmetischen Klassen enantiomorph sind. Dieses Phänomen wird durch die Beispiele B5.28 und B5.29 dieser Nummer illustriert.

Durchgeht man die Liste der 227 geometrischen Klassen  $[(\text{lat}, H)]_g$  von  $\mathbb{E}^4$ , so stellt man fest, dass eine geometrische Klasse genau dann enantiomorph ist, wenn alle in ihr enthaltenen arithmetischen Klassen enantiomorph sind. In [BBal], p. 15, weisen die Autoren auf diesen Umstand hin; sie fügen hinzu, sie wüssten nicht, ob dieser Sachverhalt auch in anderen Dimensionen richtig sei. Wie B. Souvignier entdeckt hat, gibt es schon in der Dimension 6 Gegenbeispiele.<sup>26</sup>

<sup>26</sup>[Sou03], p. 216.

BEISPIEL B5.28 Sei  $H \subset \text{GL}(4, \mathbb{Z})$  die Gruppe, die von den 3 Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

erzeugt wird. Man bestätigt leicht, dass die Matrizen  $A$ ,  $B$  und  $C$  die Ordnungen 3, 6 und 2 haben; hingegen ist unklar, ob die Gruppe endlich und, falls endlich, welches ihre Struktur ist. Die Antwort auf beide Fragen wird leicht, wenn man ein geschicktes neues System von Erzeugenden einführt. Hier ist eines: <sup>27</sup>

$$A_1 = A^2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad B_1 = B^3 \cdot A^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B5.19})$$

$$A_2 = B^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad B_2 = B^3 \cdot A \cdot C \cdot B^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B5.20})$$

Auf Grund der Beziehungen

$$A_1^2 = A, \quad A_2^{-1} \cdot B_1 \cdot A^{-2} = B, \quad \text{und} \quad A^{-1} \cdot B^{-3} \cdot B_2 \cdot B^{-2} = C$$

erzeugen die 4 Matrizen  $A_1$ ,  $B_1$ ,  $A_2$  und  $B_2$  die Gruppe  $H$ . Die Ordnungen dieser 4 Matrizen sind 3, 2, 3 und 2 und sie erfüllen die Relationen  $B_j \cdot A_j B_j^{-1} = A_j^{-1}$  für  $j = 1, 2$ . Die Untergruppen  $H_1 = \text{gp}(A_1, B_1)$  und  $H_2 = \text{gp}(A_2, B_2)$  sind daher beide Diedergruppen der Ordnung 6; man bestätigt leicht, dass sie miteinander kommutieren, weshalb sie in  $H$  ihr direktes Produkt erzeugen. Da die Gruppe  $H$  nun als endlich nachgewiesen ist, entspricht ihre Konjugationsklasse in  $\text{GL}(4, \mathbb{Z})$  einer eindeutig bestimmten arithmetischen Kristallklasse (nach Theorem C6.3); sie wird in [BBa], p. 235, mit 29/01/01 bezeichnet.

Das nächste Ziel ist es, den Zentralisator von  $H$  in  $\text{GL}(4, \mathbb{Q})$  zu finden; um die verwende ich Ergebnisse der Darstellungstheorie. Als  $\mathbb{Q}H_1$ -Modul ist der Vektorraum  $\mathbb{Q}^4$  die direkte Summe von zwei isomorphen, 2-dimensionalen Teilmoduln  $U_1$  und  $U_2$ ; diese sind absolut einfach, da eine direkte Summenzerlegung über  $\mathbb{C}$  implizierte, dass  $H_1$  abelsch ist. Folglich besteht die Endomorphismenalgebra  $\text{End}_{\mathbb{Q}H_1}(V)$  aus Matrizen der Form

$$X = \begin{pmatrix} x_1 & 0 & x_2 & 0 \\ 0 & x_1 & 0 & x_2 \\ x_3 & 0 & x_4 & 0 \\ 0 & x_3 & 0 & x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \cdot I_2 & x_2 \cdot I_2 \\ x_3 \cdot I_2 & x_4 \cdot I_2 \end{pmatrix}.$$

Da die Matrix  $B_2$  eine  $2 \times 2$ -Matrix mit Koeffizienten der Form  $c \cdot I_2$  ist, kann die Kommutatorbedingung  $0_4 = X \cdot B_2 - B_2 \cdot X$  wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} 0_4 &= X \cdot B_2 - B_2 \cdot X = \begin{pmatrix} x_1 I & x_2 I \\ x_3 I & x_4 I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 I & x_2 I \\ x_3 I & x_4 I \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -x_2 I & -x_1 I \\ -x_4 I & -x_3 I \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -x_3 I & -x_4 I \\ -x_1 I & -x_2 I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (x_3 - x_2) \cdot I & (x_4 - x_1) \cdot I \\ (x_1 - x_4) \cdot I & (x_2 - x_3) \cdot I \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

<sup>27</sup>Mitteilung von B. Souvignier vom 21. April 2005.

Die Kommutatorbedingung ist also gleichwertig mit  $x_1 = x_4$  und  $x_2 = x_3$ . Die Bedingung  $X \cdot A_2 - A_2 \cdot X = 0_4$  impliziert schliesslich, dass  $x_2$  und  $x_3$  gleich 0 sind:

$$\left( \begin{pmatrix} * & * \\ x_2 I & x_1 I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & * \\ I & * \end{pmatrix} \right)_{21} - \left( \begin{pmatrix} * & * \\ I & -I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 I & * \\ x_2 I & * \end{pmatrix} \right)_{21} = x_1 \cdot I - (x_1 - x_2) \cdot I.$$

Somit besteht die Endomorphismenalgebra  $\text{End}_{\mathbb{Q}H}(\mathbb{Q}^4)$  nur aus Vielfachen der Einheitsmatrix und der Zentralisator von  $H$  in  $\text{GL}(4, \mathbb{Z})$  reduziert sich auf  $\{\pm I_4\}$ .

Wir wissen nun, dass der Kern der Abbildung  $\eta_*: N_{\text{GL}(4, \mathbb{Z})}(H) \mapsto \text{Aut}(H)$  nur Elemente aus  $\text{SL}(4, \mathbb{Z})$  enthält, weshalb Bedingung (i) von Satz B5.27 erfüllt ist. Bedingung (ii) dieses Satzes ist ebenfalls richtig, da die Determinanten der Matrizen  $A_1, B_1$  und  $A_2, B_2$  alle gleich 1 sind. Bleibt Bedingung (iii), in der es um äussere Automorphismen geht, die von Elementen des Normalisators induziert werden.

Die Gruppe  $H$  ist direktes Produkt von zwei isomorphen Untergruppen  $H_1$  und  $H_2$ ; sie besitzt daher einen äusseren Automorphismus  $\sigma$ , der die beiden Faktoren vertauscht. Wie man durch Nachrechnen bestätigen kann, wird  $\sigma$  durch Konjugation mit der Matrix

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

induziert. Weil die Determinante dieser Matrix gleich  $-1$  ist, gilt Bedingung (iii) des Satzes B5.27 nicht. Die arithmetische Klasse 29/03/01, die der Konjugationsklasse der Gruppe  $H$  in  $\text{GL}(4, \mathbb{Z})$  entspricht, ist somit *nicht* enantiomorph.

**BEISPIEL B5.29** Die geometrische Kristallklasse, welche die eben besprochene arithmetische Klasse enthält, setzt sich aus mehreren arithmetischen Klassen zusammen.<sup>28</sup> Insbesondere enthält sie eine arithmetische Klasse, die mit 29/03/03 bezeichnet wird.<sup>29</sup> Diese Klasse ist enantiomorph und kann wie folgt gewonnen werden. Sei  $T$  die Matrix

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -2 & 0 \\ 1 & -1 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad T^{-1} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -2 & 0 \\ 1 & -1 & -2 & 2 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix  $T$  gehört nicht zu  $\text{GL}(4, \mathbb{Z})$ . Dennoch liegt die konjugierte Gruppe  $H = T \cdot H \cdot T^{-1}$  in  $\text{GL}(4, \mathbb{Z})$ :

$$A'_1 = T \cdot A_1 \cdot T^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B'_1 = T \cdot B_1 \cdot T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$A'_2 = T \cdot A_2 \cdot T^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B'_2 = T \cdot B_2 \cdot T^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

<sup>28</sup>Nach [BBal], pp. 235 und 236, sind es deren 5.

<sup>29</sup>[BBal], p. 236.

Die Gruppe  $H' = T \cdot H \cdot T^{-1}$  entspricht also auch einer arithmetischen Klasse; wie bald klar werden wird, ist sie von der zuvor besprochen Klasse verschieden. Sie wird mit 29/03/03 bezeichnet.

Da die Gruppen  $H$  und  $H'$  in  $\mathrm{GL}(4, \mathbb{Q})$  konjugiert sind, sind auch ihre Zentralisatoren in  $\mathrm{GL}(4, \mathbb{Q})$  konjugiert; im Hinblick auf die Rechnungen im vorangegangenen Beispiel, bestehen sie beide nur aus den Vielfachen der Identität. Es folgt, dass der Zentralisator  $C_{\mathrm{GL}(4, \mathbb{Z})}(H')$  nur aus  $\pm I_4$  besteht, weshalb die erste Bedingung von Satz B5.27 erfüllt ist. Bedingung (ii) gilt gleichfalls.

Es bleibt die Frage, ob der äussere Automorphismus  $\sigma'$ , der die beiden Faktoren  $H'_1 = \mathrm{gp}(A'_1, B'_1)$  und  $H'_2 = \mathrm{gp}(A'_2, B'_2)$  von  $H$  austauscht, von einer Matrix in  $\mathrm{GL}(4, \mathbb{Z})$  induziert wird. Die Rechnungen in Beispiel B5.28 implizieren, dass die Matrix  $S' = T \cdot S \cdot T^{-1}$  die beiden Faktoren austauscht. Diese Matrix ist nicht ganzzahlig:

$$S' = T \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot T^{-1} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -4 & 1 & -2 \\ -1 & 2 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Jede Matrix von  $\mathrm{GL}(4, \mathbb{Q})$ , die den gleichen Automorphismus von  $H'$  induziert, unterscheidet sich von  $S'$  durch eine Matrix im Zentralisator von  $H'$  in  $\mathrm{GL}(4, \mathbb{Q})$ , also um ein Vielfaches der Einheitsmatrix. Eine Matrix der Form  $c \cdot S'$  kann aber höchstens dann in  $\mathrm{GL}(4, \mathbb{Z})$  liegen, wenn  $\det(c \cdot S') = c^4 \cdot \det(S) = -c^4$  in  $\mathbb{Z}$  invertibel ist. Dies tritt nur ein, wenn  $c = \pm 1$  ist. Somit liegt der äussere Automorphismus  $\sigma'$  von  $H$  nicht im Bild der Abbildung  $\eta_* : N_{\mathrm{GL}(4, \mathbb{Z})}(H') \rightarrow \mathrm{Aut}(H')$ , weshalb Bedingung (iii) des Satzes B5.27 automatisch erfüllt ist. Die arithmetische Klasse 29/03/03, welche der Gruppe  $H'$  entspricht, ist daher enantiomorph. Da die zuvor behandelte Klasse 29/03/01 *nicht* enantiomorph ist, haben wir mitbewiesen, die arithmetischen Klassen 29/03/01 und 29/03/03 verschieden sind.

5.4e *Aufspaltung der affinen Äquivalenzklassen – Resultate*

5.4f *Aufspaltung der affinen Äquivalenzklassen – Beispiele*

---

## C Allgemeine Resultate

---

In Kapitel B sind die Grundbegriffe der Theorie der kristallographischen Gruppen eingeführt und durch Beispiele erläutert worden, insbesondere die Relationen der affinen, arithmetischen und geometrischen Äquivalenz. Diese Relationen führen zu den affinen Klassen der kristallographischen Gruppen  $G$  eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  sowie den arithmetischen und geometrischen Kristallklassen der Paare  $(\Gamma, H)$ . In diesem Kapitel werden die allgemeinen Ergebnisse über diese Klassen vorgestellt und begründet. In Abschnitt C6 geht es um Kennzeichnungen, also alternative Beschreibungen, der arithmetischen und der geometrischen Kristallklassen und um eine alternative Definition der kristallographischen Gruppen. Danach wird in Abschnitt C7 gezeigt, dass die Zahl der geometrischen Kristallklassen und jene der arithmetischen Kristallklassen beide endlich sind, und dass dies auch für die Anzahl der affinen Äquivalenzklassen zutrifft. In Abschnitt C8 schliesslich wird erklärt, wie man im Prinzip ein System von kristallographischen Gruppen finden kann, die alle affinen Äquivalenzklassen von kristallographischen Gruppen des Euklidischen Raumes vertreten.

### C6 Kennzeichnungen

Dieser Abschnitt beginnt mit alternativen Beschreibungen der geometrischen und der arithmetischen Kristallklassen. Diese Beschreibungen bringen ans Licht, dass die geometrischen Klassen mit linearen Darstellungen von endlichen Gruppen zusammenhängen und dass die arithmetischen Klassen den Konjugationsklassen der endlichen Untergruppen der Matrizen­gruppe  $GL(n, \mathbb{Z})$  entsprechen. Im vierten Teil des Abschnittes geht es um den ersten *Satz von Bieberbach*: er zeigt, wie sich die kristallographischen Gruppen in die Theorie der Lieschen Gruppen einordnen.

\*\*\*

*Wie zuvor bezeichnet  $\mathbb{E}$  einen Euklidischen Vektorraum  $(V, \langle -, - \rangle)$  der Dimension  $n$ . Wird von  $\mathbb{R}^n$  als Euklidischem Vektorraum gesprochen, so ist vorausgesetzt, dass der Vektorraum mit dem Standard-Skalarprodukt versehen worden ist, es sei denn, das Gegenteil werde ausdrücklich erwähnt. Die Vektoren der Standard-Basis von  $\mathbb{R}^n$  werden mit  $e_1, \dots, e_n$  bezeichnet.*

*Ist  $G$  eine kristallographische Gruppe von  $\mathbb{E}$ , so sei  $G_0$  ihre Punktgruppe,  $T(G)$  ihr Translationsnormalteiler und  $\Gamma(G)$  das Gitter der Translationsvektoren von  $T(G)$ .*

#### 6.1 Kennzeichnung der arithmetischen Kristallklassen

Die arithmetischen Kristallklassen sind in Nummer 5.2c eingeführt worden, und zwar mit dem Ziel, mehrere affine Klassen zu einer neuen Klasse zu vereinen. Der Gewinn dieser neuen Einteilung besteht unter anderem darin, dass die Menge der arithmetischen Klassen eine Beschreibung besitzt, in der die kristallographischen Gruppen selbst nicht mehr vorkommen.

### 6.1a Konstruktion einer Hilfsabbildung

Wie in Nummer 5.2c bezeichne  $\mathcal{P}$  die Menge der Paare  $(\Gamma, H)$ ; dabei durchlaufe  $\Gamma$  die Menge der Gitter von  $\mathbb{E}$  und  $H$  die Untergruppen der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  des Gitters  $\Gamma$ . Diese Paare werden zu Klassen zusammengefasst, den *arithmetischen Kristallklassen*, und zwar vermöge der Relation der arithmetischen Äquivalenz. In Definition B5.13 ist diese Relation so festgelegt worden:

DEFINITION C6.1 Zwei Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$  in  $\mathcal{P}$  werden *arithmetisch* äquivalent genannt, falls es eine linearen Isomorphismus  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, welcher die Bedingung

$$\Gamma' = L(\Gamma) \quad \text{und} \quad H' = L \circ H \circ L^{-1} \quad (\text{C6.1})$$

erfüllt.

Die arithmetischen Klassen können mit den Konjugationsklassen der endlichen Untergruppen der Matrizen­gruppe  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$  in Verbindung gebracht werden, und zwar so: Seien  $\Gamma$  ein Gitter und  $H$  eine Untergruppe von  $\text{Aut}(\Gamma)$ . Nach Definition eines Gitters gibt es eine geordnete Basis  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  des Vektorraumes  $\mathbb{E}$ , welche das Gitter  $\Gamma$  erzeugt. Zu jeder orthogonalen Abbildung  $\varphi$  gibt es dann eine  $n$ -reihige Matrix  $\varphi_{\mathcal{B}}$ , die  $\varphi$  bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  beschreibt. Diese Matrix ist im allgemeinen keine orthogonale Matrix, da  $\mathcal{B}$  keine Orthonormalbasis zu sein braucht. Hingegen sind ihre Koeffizienten alle ganzzahlig; in der  $j$ -ten Spalte von  $\varphi_{\mathcal{B}}$  stehen nämlich die Koeffizienten des Bildvektors  $\varphi(b_j)$  bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  und dieser Bildvektor liegt in  $\Gamma$ , da  $\varphi$  ein Automorphismus des Gitters ist.

Betrachten wir noch die Determinante der Matrix  $\varphi_{\mathcal{B}}$ . Da ihre Koeffizienten ganzzahlig sind, ist sie eine ganze Zahl. Da aber  $\varphi^{-1}$  ebenfalls in  $\text{Aut}(\Gamma)$  liegt und deshalb bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  auch durch eine ganzzahlige Matrix  $(\varphi^{-1})_{\mathcal{B}}$  beschrieben wird, muss die Determinante  $\det(\varphi_{\mathcal{B}})$  entweder 1 oder  $-1$  sein; die Rechnung

$$\det(\varphi_{\mathcal{B}}^{-1}) \cdot \det(\varphi_{\mathcal{B}}) = \det(\varphi_{\mathcal{B}}^{-1} \circ \varphi_{\mathcal{B}}) = \det(I_n) = 1$$

zeigt nämlich, dass die Zahl  $\det(\varphi_{\mathcal{B}})$  in  $\mathbb{Z}$  ein Inverses hat.

Bis jetzt wissen wir, dass jede geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}$  von  $\Gamma$  zu einer Abbildung

$$\kappa_{\mathcal{B}}: H \rightarrow \text{GL}(n, \mathbb{Z}), \quad \varphi \mapsto \varphi_{\mathcal{B}}.$$

führt. Diese Abbildung ist injektiv und ein Gruppenhomomorphismus. Das Bild  $\text{im}(\kappa_{\mathcal{B}})$  von  $H$  ist also eine Untergruppe von  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ ; sie ist endlich, da  $H$  als Untergruppe der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  endlich ist (Satz B4.7.)

Als nächstes untersuchen wir die Auswirkung eines Basiswechsels. Seien  $\mathcal{B}'$  eine zweite  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$  und  $T$  die Matrix, welche die Basisvektoren  $b'_k$  als Linearkombinationen der  $b_j$  ausdrückt; es ist dann

$$b'_k = \sum_j t_{j,k} \cdot b_j \quad \text{für } 1 \leq k \leq n.$$

Wie zuvor sieht man, dass die Matrix  $T$  in  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$  liegt. Die Matrix  $\varphi_{\mathcal{B}'}$  von  $\varphi$  bezüglich  $\mathcal{B}'$  ist das Produkt  $T \cdot \varphi_{\mathcal{B}} \cdot T^{-1}$ . Variiert man  $\varphi$  über  $H$ , enthält man die Untergruppe

$$\text{im}(\kappa_{\mathcal{B}'}) = \{T \circ \varphi_{\mathcal{B}} \circ T^{-1} \mid \varphi \in H\} = T \circ \text{im}(\kappa_{\mathcal{B}}) \circ T^{-1}.$$

Die neue Untergruppe  $\text{im}(\kappa_{\mathcal{B}'})$  bekommt man also aus der zuvor gefundenen Gruppe durch Konjugation mit  $T$ .

Sei schliesslich  $S$  eine beliebige Matrix aus  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ . Die Linearkombinationen

$$\left( \sum_j s_{j,1} b_j, \sum_j s_{j,2} b_j, \dots, \sum_j s_{j,n} b_j \right)$$

bilden dann eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}''$  von  $\Gamma_{\mathcal{B}''}$ , deren Bild die Gruppe  $S \circ \text{im}(\kappa_{\mathcal{B}}) \circ S^{-1}$  ist. Alles in allem erhalten wir daher das folgende Zwischenergebnis:

**HILFSSATZ C6.2** *Seien  $\Gamma$  ein Gitter von  $\mathbb{E}$  und  $H$  eine Untergruppe von  $\text{Aut}(\Gamma)$ . Jede geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}$  von  $\Gamma$  führt zu einer endlichen Untergruppe  $\overline{H}_{\mathcal{B}} = \text{im}(\kappa_{\mathcal{B}})$  von  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ ; wechselt man die  $\mathbb{Z}$ -Basis, gelangt man zu einer konjugierten Untergruppe. Weiter gibt es zu jeder Matrix  $S \in \text{GL}(n, \mathbb{Z})$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis, welche die konjugierte Gruppe  $S \cdot \overline{H}_{\mathcal{B}} \cdot S^{-1}$  liefert.*

Dieser Hilfssatz erlaubt es, einem Paar  $(\Gamma, H \subseteq \text{Aut}(\Gamma))$  eine wohl-definierte Konjugationsklasse zuzuordnen.

Sei nun  $(\tilde{\Gamma}, \tilde{H})$  ein zweites Paar, das arithmetisch äquivalent mit dem Paar  $(\Gamma, H)$  ist. Nach Definition gibt es einen linearen Isomorphismus  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$ , der  $\Gamma$  auf  $\tilde{\Gamma}$  abbildet und die Beziehung  $L \circ H \circ L^{-1} = \tilde{H}$  erfüllt. Sei  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma$ . Das Bild dieser Folge unter  $L$ , also  $\tilde{\mathcal{B}} = (L(b_1), \dots, L(b_n))$ , ist eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\tilde{\Gamma}$ . Ich behaupte, die Gruppen  $H_{\mathcal{B}} = \{\varphi_{\mathcal{B}} \mid \varphi \in H\}$  und  $\tilde{H}_{\tilde{\mathcal{B}}} = \{\psi_{\tilde{\mathcal{B}}} \mid \psi \in \tilde{H}\}$  seien gleich. Für  $\varphi \in H$  und  $\psi = L \circ \varphi \circ L^{-1} \in \tilde{H}$  gilt nämlich die Rechnung

$$\begin{aligned} \sum_j (\psi_{\tilde{\mathcal{B}}})_{j,k} L(b_j) &= \psi(L(b_k)) = (L \circ \varphi \circ L^{-1})(L(b_k)) \\ &= L(\varphi(b_k)) = L\left(\sum_j (\varphi_{\mathcal{B}})_{j,k} b_j\right) = \sum_j (\varphi_{\mathcal{B}})_{j,k} L(b_j). \end{aligned} \quad (\text{C6.2})$$

Sie zeigt, dass die Matrix  $\varphi$ , welche die orthogonale Abbildung  $\varphi$  bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  darstellt, mit der Matrix, die  $\psi$  bezüglich  $\tilde{\mathcal{B}}$  beschreibt, übereinstimmt. Dies impliziert, dass die beiden Konjugationsklassen

$${}^{\text{GL}(n, \mathbb{Z})} H_{\mathcal{B}} = \{T \cdot H_{\mathcal{B}} \cdot T^{-1} \mid T \in \text{GL}(n, \mathbb{Z})\} \subset \mathcal{P}(\text{GL}(n, \mathbb{Z})) \quad \text{und} \quad {}^{\text{GL}(n, \mathbb{Z})} \tilde{H}_{\tilde{\mathcal{B}}}$$

zusammen fallen.<sup>1</sup> Arithmetisch äquivalenten Paaren wird also die gleiche Konjugationsklasse zugeordnet.

### 6.1b Formulierung und Beweis der Kennzeichnung

Die bisherigen Überlegungen rechtfertigen den Grossteil des folgenden Resultates:

**HAUPTSATZ C6.3** *Seien  $\mathcal{A}_n$  die Menge der arithmetischen Kristallklassen des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^n$ . Dann gibt es eine Abbildung*

$$\kappa_n: \mathcal{A}_n \xrightarrow{\sim} \left\{ {}^{\text{GL}(n, \mathbb{Z})} F \mid F \text{ endliche Untergruppe von } \text{GL}(n, \mathbb{Z}) \right\}. \quad (\text{C6.3})$$

*Sie ordnet der arithmetischen Klasse  $[(\Gamma, H)]_a$  die Menge derjenigen Gruppen  $H_{\mathcal{B}}$  zu, die sich ergeben, wenn man die Gruppe  $H$  des Vertreters  $(\Gamma, H)$  bezüglich der sämtlichen  $\mathbb{Z}$ -Basen von  $\Gamma$  beschreibt; diese Menge ist eine volle Konjugationsklasse.*

*Die Abbildung  $\kappa$  ist bijektiv.*

<sup>1</sup>Mit  $\mathcal{P}(\text{GL}(n, \mathbb{Z}))$  bezeichne ich die Familie der Teilmengen der Menge  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ .

Es verbleibt der Nachweis der Bijektivität der Abbildung  $\kappa$ . Um die Injektivität zu rechtfertigen betrachten wir zwei Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$ , die arithmetische Klassen mit dem gleichen Bild vertreten. Ist  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ , so gibt es folglich eine  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}' = (b'_1, \dots, b'_n)$ , so dass die Matrizen  $H_{\mathcal{B}}$  und  $H'_{\mathcal{B}'}$  konjugiert sind. Ersetzt man die  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}'$  durch eine geeignetere Basis, kann man erreichen, dass die Matrizen  $H_{\mathcal{B}}$  und  $H'_{\mathcal{B}'}$  gleich werden. Im Folgenden nehme ich daher an, es sei  $H_{\mathcal{B}} = H'_{\mathcal{B}'}$ .

Da  $\mathcal{B}$  und  $\mathcal{B}'$  beide Vektorraum-Basen des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^n$  sind, gibt es eine lineare Abbildung  $L: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$ , welche die Basisvektoren  $b_1, \dots, b_n$  der Reihe nach auf die Basisvektoren  $b'_1, \dots, b'_n$  sendet. Diese Abbildung ist bijektiv und sie bildet das Gitter  $\Gamma$  auf das Gitter  $\Gamma'$  ab. Seien nun  $\varphi \in H$  ein Automorphismus des Gitters  $\Gamma$  und  $\psi$  derjenige Automorphismus von  $\Gamma'$ , der die Bedingung  $\varphi_{\mathcal{B}} = \psi_{\mathcal{B}'}$  erfüllt. Die Rechnung

$$(L \circ \varphi \circ L^{-1})(b'_j) = L(\varphi(b_j)) = L\left(\sum_k (\varphi_{\mathcal{B}})_{k,j} b_k\right) = \sum_k (\psi_{\mathcal{B}'})_{k,j} b'_k = \psi(b'_j)$$

zeigt dann, dass die konjugierte Abbildung  $L \circ \varphi \circ L^{-1}$  gleich  $\psi$  ist und dass  $L \circ \varphi \circ L^{-1}$  daher zu  $H'$  gehört. Folglich ist  $L \circ H \circ L^{-1} \subseteq H'$ ; vertauscht man die Rollen der beiden Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$ , erhält man analog die Inklusion  $L \circ H \circ L^{-1} \supseteq H'$ . Damit ist nachgewiesen, dass die Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$  arithmetisch äquivalent sind.

Nun zur Surjektivität der Abbildung  $\kappa$ . Ist  $F \subset \text{GL}(n, \mathbb{Z})$  eine endliche Untergruppe, so sei  $K$  die Gruppe der linearen Isomorphismen, die der Gruppe  $F$  bezüglich der Standard-Basis von  $\mathbb{R}^n$  entspricht. Nach Satz C6.4 gibt es ein Skalarprodukt  $\langle -, - \rangle_K$  auf  $V = \mathbb{R}^n$ , das unter der Gruppe  $K$  invariant ist. Dann ist  $(V, \langle -, - \rangle_K)$  ein Euklidischer Vektorraum, der die gleiche Dimension wie  $\mathbb{E}$  hat. Also gibt es einen linearen Isomorphismus  $L: (V, \langle -, - \rangle_K) \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$ , der die Beziehung  $\langle x, y \rangle_K = \langle L(x), L(y) \rangle$  erfüllt. Die Folge  $\mathcal{B} = (b_1 = L(e_1), \dots, b_n = L(e_n))$  ist dann eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma = L(\mathbb{Z}^n)$  und  $H = \{L^{-1} \circ \psi \circ L \mid \psi \in K\}$  ist eine Untergruppe der Automorphismen-Gruppe des Gitters  $\Gamma$ , deren zugeordnete Matrizen  $H_{\mathcal{B}}$  mit der Ausgangsgruppe  $F$  übereinstimmt.

### 6.1c Konstruktion eines invarianten Skalarproduktes

Das folgende Resultat ist im Beweis der Surjektivität verwendet worden:

**SATZ C6.4** Sei  $K \subset \text{GL}(V)$  eine endliche Gruppe von Automorphismen eines endlich-dimensionalen reellen Vektorraumes  $V$ . Dann gibt es ein Skalarprodukt  $\langle -, - \rangle_K$  auf  $V$ , das unter  $K$  invariant ist.

*Proof.* Da  $V$  endlich-dimensional ist, gibt es auf  $V$  ein Skalarprodukt, etwa  $\langle -, - \rangle$ . Durch Mittelbildung definiert man die Funktion

$$\langle -, - \rangle_K: V \times V \rightarrow \mathbb{R}, \quad \langle u, v \rangle_K = \sum_{\psi \in K} \langle \psi(u), \psi(v) \rangle. \quad (\text{C6.4})$$

Sie ist, wie man leicht nachprüft, bilinear, symmetrisch und positiv-definit, also ein Skalarprodukt auf  $V$ . Nun sei  $\varphi \in K$ . Die Rechnung

$$\begin{aligned} \langle \varphi(u), \varphi(v) \rangle_K &= \sum_{\psi \in K} \langle \psi(\varphi(u)), \psi(\varphi(v)) \rangle = \sum_{\psi \in K} \langle (\psi \circ \varphi)(u), (\psi \circ \varphi)(v) \rangle \\ &= \sum_{\psi \in K} \langle \psi(u), \psi(v) \rangle = \langle u, v \rangle_K \end{aligned}$$

zeigt, dass dieses Skalarprodukt unter  $\varphi$  invariant ist. (Beim Übergang von der ersten zur zweiten Zeile wurde benutzt, dass in einer Gruppe die Rechtsmultiplikation mit einem Element eine bijektive Abbildung ist.)  $\square$

BEISPIEL C6.5 Seien  $n = 2$  und  $A = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ . Die von  $A$  erzeugte Untergruppe  $K$  hat die Ordnung 3, denn

$$A^2 = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \text{ und } A^2 \cdot A = I_2.$$

Sind  $(e_1, e_2)$  die geordnete Standard-Basis von  $\mathbb{R}^2$  und  $\langle -, - \rangle$  das Standard-Skalarprodukt, so ist die Matrix  $M$  der Zahlen  $m_{\ell, k} = \langle e_\ell, e_k \rangle$  die Einheitsmatrix  $I_2$ . Ist  $B$  eine beliebige 2-reihige Matrix, so ist  $(Bx)^t \cdot (By) = x^t \cdot (B^t B) \cdot y$ . Die Matrix, die zum gemittelten Skalarprodukt  $\langle -, - \rangle_K$  mit  $K = \{1, \varphi_A: x \mapsto Ax, \varphi_A^2\}$  gehört, ist daher

$$\begin{aligned} & I_2 + A^t \cdot A + (A^2)^t \cdot A^2 \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1+2+1 & 0+1+1 \\ 0+1+1 & 1+1+2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Das  $K$ -invariante Skalarprodukt ist also gegeben durch

$$(x, y) \mapsto (x_1, x_2) \cdot \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = 4x_1y_1 + 2x_1y_2 + 2x_2y_1 + 4x_2y_2.$$

Die Funktion  $x \mapsto \|x\|_K^2$  bezeichnet man auch als *quadratische Form* des Skalarproduktes  $\langle -, - \rangle_K$ . Sie ist gegeben durch die Formel

$$4q(x) = 4(x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2). \quad (\text{C6.5})$$

Die Gruppe  $\mathbb{Z}^2$  ist ein Gitter  $\Gamma$  in der Euklidischen Ebene  $\mathbb{E}^2 = (\mathbb{R}^2, \langle -, - \rangle)$ . Wir wollen seine *Minimalmenge* und *Automorphismengruppe* bestimmen.

Die Werte der Form  $q_K: x \mapsto x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$  sind ganzzahlig und nicht negativ. Der kleinste angenommene positive Wert ist 1; er ist Wert der Vektoren  $\pm e_1, \pm e_2$ . Die Minimalmenge besteht aus allen ganzzahligen Lösungen der Gleichung  $x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2 = 1$ ; diese Gleichung kann auch in der Form

$$(x_1 + \frac{1}{2}x_2)^2 + \frac{3}{4}x_2^2 = 1$$

geschrieben werden. Diese alternative Form zeigt, dass  $|x_2| \leq 1$  ist. Für  $x_2 = 0$ , ist  $x_1 = \pm 1$ ; für  $x_2 = -1$ , beträgt  $x_1$  entweder 0 oder 1. Folglich ist

$$\mathcal{M}(\Gamma) = \{\pm e_1, \pm(e_1 - e_2), \pm e_2\}. \quad (\text{C6.6})$$

Nun zur Automorphismengruppe von  $\Gamma$ . Jeder Automorphismus  $\varphi$  induziert eine Permutation  $\eta_*(\varphi)$  der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma)$ ; da sie die Ebene aufspannt, ist die Zuordnung  $\eta_*: \varphi \mapsto \eta_*(\varphi)$  injektiv. Die Ordnung von  $\text{Aut}(\Gamma)$  kann daher so gefunden werden. Der Automorphismus  $\varphi_A: x \mapsto A \cdot x$  hat die Ordnung 3, weshalb  $-\varphi_A$  die Ordnung 6 aufweist. Da  $-A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$  ist, induziert  $\varphi_A$  auf  $\mathcal{M}(\Gamma)$  die zyklische Permutation

$$e_1 \mapsto e_1 - e_2 \mapsto (e_1 - e_2) - e_1 = -e_2 \mapsto -e_1 \mapsto -e_1 + e_2 \mapsto e_2 \mapsto e_1.$$

Sie impliziert, dass die Automorphismengruppe auf der Minimalmenge transitiv wirkt, weshalb ihre Ordnung gleich  $6 \cdot \text{card}(\text{St}_{\text{Aut}(\Gamma)}(e_1))$  ist. Sei nun  $\rho \in S = \text{St}_{\text{Aut}(\Gamma)}(e_1)$ . Dann hält  $\rho$  die Gerade  $\mathbb{R} \cdot e_1$  punktweise fest und bildet die zu  $e_1$  orthogonale Gerade auf sich ab. Die zu  $e_1$  bezüglich  $\langle -, - \rangle_K$  orthogonalen Vektoren erfüllen die Bedingung

$$0 = \langle e_1, y \rangle_K = 4 \cdot 1 \cdot y_1 + 2 \cdot 1 \cdot y_2 + 2 \cdot 0 \cdot y_1 + 4 \cdot 0 \cdot y_2 = 2(2y_1 + y_2);$$

sie sind also Vielfache des Vektors  $u = e_1 - 2e_2$ . Hält  $\rho$  den Vektor  $u$  fest, ist  $\rho$  die Identität; anderenfalls ist  $\rho(e_1 - 2e_2) = -e_1 + 2e_2$ . Da  $\rho(e_1) = e_1$  ist, bedeutet dies, dass  $e_1 - \rho(e_2) = -e_1 + 2e_2$  oder  $\rho(e_2) = e_1 - e_2$  ist. Man beachte, dass  $\det(\rho) = \det\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -1$  ist, weshalb  $\rho$  eine Spiegelung ist.

Die Automorphismengruppe des Gitters  $\mathbb{Z}^2$  in der Euklidischen Ebene  $(\mathbb{R}^2, \langle -, - \rangle_K)$  hat somit die Ordnung 12; sie besteht aus 6 Rotationen und 6 Spiegelungen.

## 6.2 Erste Kennzeichnung der geometrischen Kristallklassen

Nach Definition B5.13 (in Nummer 5.2c) sind zwei Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$  *geometrisch* äquivalent, falls es eine lineare Bijektion  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, welche die Beziehung

$$H' = L \circ H \circ L^{-1} \tag{C6.7}$$

erfüllt. Diese Definition wirft verschiedene Fragen auf:

- Die Gruppen  $H$  und  $H'$  sind Untergruppen der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$ , die Abbildung  $L$  aber berücksichtigt nur die Vektorraumstruktur des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$ . Welche zusätzlichen Eigenschaften muss  $L$  erfüllen, damit die konjugierte Gruppe  $L \circ H \circ L^{-1}$  in  $O(\mathbb{E})$  liegt?
- Da  $H$  das Gitter  $\Gamma$  invariant lässt, gibt es eine geordnete Vektorraumbasis  $\mathcal{B}$ , bezüglich der  $H$  durch ganzzahlige Matrizen dargestellt wird; ebenso gibt es eine geordnete Basis  $\mathcal{B}'$ , bezüglich der  $H'$  durch ganzzahlige Matrizen dargestellt wird. Die Abbildung  $L$  ist nur durch die Bedingung (C6.7) eingeschränkt. Kann man  $L$  durch eine geeignetere Abbildung  $\tilde{L}$  ersetzen, welche bezüglich der Basen  $\mathcal{B}$  und  $\mathcal{B}'$  durch eine ganzzahlige Matrix dargestellt wird?

In diesem Unterabschnitt wird die erste dieser Frage untersucht und beantwortet; die zweite ist Gegenstand des Unterabschnittes 6.3.

### 6.2a Konjugation von orthogonalen Untergruppen

Das folgende Resultat beantwortet die erste der Fragen:

**SATZ C6.6** *Seien  $\mathcal{U}$  und  $\mathcal{U}'$  Teilmengen der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$  eines Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$  und  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  eine lineare, bijektive Abbildung, welche die Bedingung  $L \circ \mathcal{U} \circ L^{-1} = \mathcal{U}'$  erfüllt. Dann gibt es eine selbst-adjungierte, positive Abbildung  $P$  und eine orthogonale Abbildung  $\varphi$  mit den folgenden Eigenschaften:*

- (i)  $L = \varphi \circ P$ ;
- (ii)  $P \circ \psi = \psi \circ P$  für jede Abbildung  $\psi \in \mathcal{U}$ ;
- (iii)  $\varphi \circ \mathcal{U} \circ \varphi^{-1} = \mathcal{U}'$ .

*Proof.* Die Abbildung  $L \circ \psi \circ L^{-1}$  ist nach Voraussetzung für jede Abbildung  $\psi \in \mathcal{U}$  orthogonal. Aus den Rechenregeln für die Inverse, beziehungsweise die Adjungierte, einer linearen Abbildung folgt daher:

$$L \circ \psi \circ L^{-1} = ((L \circ \psi \circ L^{-1})^{-1})^{\text{ad}} = (L \circ \psi^{-1} \circ L^{-1})^{\text{ad}} = (L^{-1})^{\text{ad}} \circ \psi \circ L^{\text{ad}}.$$

Schreibt man diese Beziehung in der Form

$$(L^{\text{ad}} \circ L) \circ \psi = \psi \circ (L^{\text{ad}} \circ L),$$

erkennt man, dass die selbst-adjungierte positive Abbildung  $Q = L^{\text{ad}} \circ L$  mit jeder orthogonalen Abbildung  $\psi \in \mathcal{U}$  kommutiert.

Die Eigenwerte der Abbildung  $Q$  sind positive reelle Zahlen  $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_k$  und  $\mathbb{E}$  ist die direkte Summe  $E_{\lambda_1} \oplus E_{\lambda_2} \oplus \dots \oplus E_{\lambda_k}$  der entsprechenden Eigenräume. Da jede Abbildung  $\psi \in \mathcal{U}$  mit  $Q$  kommutiert, bildet sie jeden Eigenraum  $E_{\lambda_j}$  auf sich ab: ist nämlich  $v \in E_{\lambda_j}$ , so zeigt die Rechnung

$$Q(\psi(v)) = (Q \circ \psi)(v) = (\psi \circ Q)(v) = \psi(Q(v)) = \psi(\lambda_j \cdot v) = \lambda_j \cdot \psi(v),$$

dass auch das Bild  $\psi(v)$  in  $E_{\lambda_j}$  liegt. Sei nun  $P$  die positive Quadratwurzel aus  $Q$ ; nach Definition bildet sie die Eigenräume  $E_{\lambda_j}$  auf sich ab und induziert auf  $E_{\lambda_j}$  die Abbildung  $v \mapsto \sqrt{\lambda_j} \cdot v$ . Die Abbildung  $P$  ist symmetrisch, positiv-definit, und sie kommutiert mit jeder Abbildung  $\psi \in \mathcal{U}$ , befriedigt also Aussage (ii).

Sei nun  $\varphi = L \circ P^{-1}$ . Dann ist  $\varphi$  eine bijektive Abbildung, welche Bedingung (i) und wegen der Eigenschaft (ii) von  $P$  auch die Bedingung (iii) erfüllt. Die Rechnung

$$\varphi^{\text{ad}} \circ \varphi = (L \circ P^{-1})^{\text{ad}} \circ (L \circ P^{-1}) = (P^{-1})^{\text{ad}} (L^{\text{ad}} \cdot L) \circ P^{-1} = P^{-1} \circ Q \circ P^{-1} = \mathbb{1}.$$

zeigt schliesslich, dass  $\varphi$  orthogonal ist.  $\square$

### 6.2b Folgerung für die geometrische Klassen

Wie schon in Unterabschnitt 6.1 bezeichne  $\mathcal{P}$  die Menge der Paare  $(\Gamma, H)$ , die aus einem Gitter  $\Gamma$  des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  und einer Untergruppe  $H$  der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  des Gitters  $\Gamma$  bestehen. Diese Paare werden zu verschiedenen Klassen zusammengefasst. In Unterabschnitt 6.1 ging es um die arithmetischen, hier nun um die *geometrischen Kristallklassen*, also die Äquivalenzklassen der Relation der geometrischen Äquivalenz. Das folgende Resultat liefert eine erste, alternative Beschreibung der Menge  $\mathcal{G}$  der geometrischen Kristallklassen:

**KOROLLAR C6.7** *Sei  $\mathcal{G}$  die Menge der geometrischen Kristallklassen des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$ . Dann induziert die Zuordnung  $(\Gamma, H) \mapsto H$  eine wohl-definierte, bijektive Abbildung*

$$\mu: \mathcal{G} \xrightarrow{\sim} \left\{ {}^{\text{O}(\mathbb{E})}H \mid \text{es gibt ein Gitter } \Gamma \text{ von } \mathbb{E} \text{ mit } H \subseteq \text{Aut}(\Gamma) \right\}. \quad (\text{C6.8})$$

*Proof.* *A priori* besteht eine geometrische Kristallklasse aus Untergruppen  $H$  der Automorphismengruppen von Gittern  $\Gamma$ , die durch Konjugation mit linearen Isomorphismen  $L$  in einander überführt werden können. Satz C6.6 garantiert aber, dass zwei solche Gruppen  $H$  und  $H'$  dann auch durch eine orthogonale Abbildung konjugiert sind. Dies beweist, dass die Abbildung  $\mu$  wohl-definiert und bijektiv ist.  $\square$

Obiges Resultat zeigt, dass die Bestimmung der geometrischen Kristallklassen als Klassifikation der endlichen Untergruppen der  $O(\mathbb{E})$  bis auf Konjugation interpretiert werden kann. Allerdings müssen nicht alle endlichen Untergruppen berücksichtigt werden, sondern nur jene, welche die so genannte *kristallographische Bedingung* erfüllen, das heisst nur jene, welche ein Gitter invariant lassen. Das Resultat erklärt auch das Adjektiv *geometrisch*: zwei Untergruppen von  $O(\mathbb{E})$  sind dann geometrisch gleich, wenn sie – ausgedrückt in geeigneten Orthonormalbasen – identisch sind.

### 6.2c Bemerkungen zu den geometrischen Kristallklassen des $\mathbb{R}^3$

Im Falle des 3-dimensionalen Raumes sind die geometrischen Kristallklassen, meistens einfach *Kristallklassen* genannt, schon in der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts gefunden worden, unter anderen von J. F. C. HESSEL (1829) und von A. BRAVAIS (1850). Wie der Name andeutet, ging es darum, die Kristalle nach ihren von aussen sichtbaren Symmetrien zu Klassen zusammenzufassen.

Makroskopischen Kristalle sind üblicherweise ziemlich unregelmässig. Sie werden aber durch Flächen begrenzt, die in guter Näherung eben sind; auch sind die Keilwinkel zwischen entsprechenden Begrenzungsflächen konstant (*Stenosches Gesetz der Winkelkonstanz*). Die erste Eigenschaft erlaubt es, einem Kristall ein System von Einheitsvektoren des  $\mathbb{R}^3$  zuzuordnen, und zwar wie folgt. Nach Wahl eines Ursprungs im Innern des Kristalles, gibt jede Seitenfläche Anlass zu einem Normalenvektor der Länge 1, welcher vom Ursprung auf die Fläche zeigt. Dieses System  $\mathcal{N}_1$  von Normalenvektoren ist schon etwas regelmässiger als der Kristall selber; typischerweise ist es aber unvollständig, da einige der Fläche ausgebildet sind und in  $\mathcal{N}_1$  repräsentiert werden, andere aber nicht. Fügt man die „fehlenden“ Einheitsvektoren dem System bei, erhält man ein symmetrischeres System  $\mathcal{N}$ . Dank der Konstanz der Winkel, sind die Symmetriegruppen  $\text{Sym}(\mathcal{N})$  von Kristallen der offensichtlich gleichen Sorte dann konjugiert. Dies erlaubt es die Kristalle zu Klassen zusammen zu fassen.

Strebt man eine Übersicht über die Kristallklassen an, sollte man die endlichen Untergruppen  $H$  der Gruppe  $O(3, \mathbb{R})$  kennen. Dass es schon in der Frühzeit der Gruppentheorie gelang, diese Gruppen zu finden, hängt an mehreren Eigenheiten der Gruppe  $O(3, \mathbb{R})$ . Die Bestimmung der endlichen Untergruppen  $H$  von  $SO(\mathbb{R}^3)$  wird erstens durch den Umstand erleichtert, dass jedes Element  $\varphi \in H \setminus \{1\}$  eine Drehung um eine Achse ist. Analysiert man das System der auftretenden Drehachsen, sieht man, dass nur die folgenden Fälle vorkommen können:

- (i) Alle Drehachsen von  $H \setminus \{1\}$  stimmen überein. Dann ist  $H$  zyklisch.
- (ii) Es gibt genau 3 Drehachsen; sie sind paarweise orthogonal und  $H$  ist isomorph der Gruppe  $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ .
- (iii) Es gibt mehr als 3 Drehachsen und auf einer unter ihnen stehen alle anderen senkrecht.  $H$  ist dann eine Diedergruppe der Ordnung  $2m$  mit  $m > 2$ .
- (iv) Es gibt mehrere 3-zählige Drehachsen. Dann ist  $H$  die Drehgruppe eines regelmässigen Tetraeders, eines Würfels oder eines regelmässigen Dodekaeders.

Die kristallographische Bedingung hat zur Folge, dass die Ordnung einer Drehung nur 1, 2, 3, 4 oder 6 sein kann. Durchgeht man obige Liste, sieht man leicht, dass es genau 11 Kristallklassen in  $SO(3, \mathbb{R}^3)$  gibt.

### 6.3 Zweite Kennzeichnung der geometrischen Kristallklassen

Diese Nummer wird eine Antwort auf die zweite der zu Beginn des Unterabschnittes 6.2 gestellten Fragen geben. Seien  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$  zwei Paare aus der Menge  $\mathcal{P}$ . Sie werden *arithmetisch*, beziehungsweise *geometrisch*, äquivalent genannt, falls es eine lineare Bijektion  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  gibt, welche die Bedingungen

$$\Gamma' = L(\Gamma) \text{ und } H' = L \circ H \circ L^{-1}, \quad (\text{C6.9})$$

beziehungsweise die zweite Bedingung, erfüllt (siehe Definition B5.13). Auf Grund dieser Definitionen ist klar, dass jede geometrische Kristallklasse eine Vereinigung von arithmetischen Kristallklassen ist. Theorem C6.3 ordnet jeder arithmetischen Klasse  $[(\Gamma, H)]$  eine Konjugationsklasse  $\kappa((\Gamma, H)) = {}^{\text{GL}(n, \mathbb{Z})}F$  einer endlichen Untergruppe  $F$  zu; dabei ist  $F$  eine Gruppe von Matrizen, welche  $H$  bezüglich eines  $\mathbb{Z}$ -Gitters von  $\Gamma$  darstellt.

#### 6.3a Formulierung und Beweis der zweiten Kennzeichnung

Wir suchen nun eine Beschreibung der geometrischen Kristallklassen, die es offensichtlich macht, dass jede geometrische Kristallklasse unter  $\kappa$  einer Vereinigung von Konjugationsklassen  ${}^{\text{GL}(n, \mathbb{Z})}F$  von endlichen Untergruppen  $F \subset \text{GL}(n, \mathbb{Z})$  entspricht.

DEFINITION C6.8 Seien  $F$  und  $F'$  endliche Untergruppen der Matrizengruppe  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ . Die Gruppen werden *rational* äquivalent genannt, falls es eine Matrix  $S \in \text{GL}(n, \mathbb{Q})$  gibt, welche die Beziehung  $S \cdot F \cdot S^{-1} = F'$  erfüllt.

Die Klassen der Relation der rationalen Äquivalenz werden  $\mathbb{Q}$ -Klassen genannt.

Das folgende Resultat vergleicht die Menge  $\mathcal{G}$  der geometrischen Kristallklassen mit der Menge  $\mathcal{R}$  der  $\mathbb{Q}$ -Klassen.

HAUPTSATZ C6.9 Seien  $\mathcal{G}_n$  die Menge der geometrischen Kristallklassen des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^n$  und  $\mathcal{R}_n$  die Menge der Klassen der Relation der rationalen Äquivalenz. Dann induziert die Zuordnung  $((\Gamma, H), \mathcal{B}) \mapsto H_{\mathcal{B}}$  eine bijektive Abbildung

$$\bar{\kappa}_n: \mathcal{G}_n \xrightarrow{\sim} \mathcal{R}_n. \quad (\text{C6.10})$$

*Proof.* Seien  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H')$  zwei Paare aus  $\mathcal{P}$ ; seien  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$  und  $\mathcal{B}' = (b'_1, \dots, b'_n)$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma'$ . Ist  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  eine lineare Bijektion, so sei  $T$  die Matrix  $L_{\mathcal{B}, \mathcal{B}'}$ , welche  $L$  bezüglich der Basen  $\mathcal{B}$  und  $\mathcal{B}'$  beschreibt; nach Definition ist dann  $L(b_j) = \sum_k t_{k,j} b'_k$ . Sind nun  $\varphi \in \text{Aut}(\Gamma)$  und  $\psi \in \text{Aut}(\Gamma')$ , so gilt die Beziehung  $L \circ \varphi \circ L^{-1} = \psi$  zwischen Abbildungen genau dann, wenn die Beziehung  $T \cdot \varphi_{\mathcal{B}} \cdot T^{-1} = \psi_{\mathcal{B}'}$  zwischen Matrizen richtig ist.<sup>2</sup> In der Sprache der Matrizen lautet die Behauptung des Theorems daher so: *ist  $T \in \text{GL}(n, \mathbb{R})$  eine reellwertige Matrix mit  $T \cdot H_{\mathcal{B}} \cdot T^{-1} = H'_{\mathcal{B}'}$ , so gibt es eine rational-zahlige Matrix  $S \in \text{GL}(n, \mathbb{Q})$  mit dieser Eigenschaft.*

Um die neue Behauptung zu beweisen, ordnen wir jeder Matrix  $A \in H_{\mathcal{B}}$  die Matrix  $f(A) = T \cdot A \cdot T^{-1}$  zu. Dann haben alle Matrizen  $A$  und  $f(A)$  ganze, insbesondere also rationale, Koeffizienten und  $T$  ist eine *reelle* Lösung des linearen Gleichungssystems

$$X \cdot A - f(A) \cdot X = 0 \text{ für } A \in H_{\mathcal{B}}. \quad (\text{C6.11})$$

<sup>2</sup>Der Zusammensetzung von linearen Abbildungen entspricht das Produkt der darstellenden Matrizen.

Jeder Koeffizient dieses linearen Gleichungssystems ist entweder ein Koeffizient der Matrix  $A$ , ein Koeffizient der Matrix  $f(A)$  oder die Differenz eines Koeffizienten von  $A$  und eines Koeffizienten von  $f(A)$ ; alle Koeffizienten des linearen Gleichungssystems sind also ganzzahlig.

Seien  $\mathcal{S}_{\mathbb{Q}}$  und  $\mathcal{S}_{\mathbb{R}}$  der Raum der *rationalen*, beziehungsweise der *reellen*, Lösungen des linearen Gleichungssystems (C6.11). Dann ist  $\mathcal{S}_{\mathbb{Q}}$  ein endlich-dimensionaler Vektorraum über  $\mathbb{Q}$ ; er hat also eine Basis  $(C_1, C_2, \dots, C_r)$ . Jede Lösung in  $\mathcal{S}_{\mathbb{Q}}$  ist eine Linearkombination der  $C_i$  mit rationalen Koeffizienten, und jede Lösung in  $\mathcal{S}_{\mathbb{R}}$  ist eine Linearkombination der  $C_i$  mit reellen Koeffizienten. Insbesondere kann die Lösung  $T$  als reelle Linearkombination der  $C_i$  geschrieben werden, etwa

$$T = c_1 \cdot C_1 + c_2 \cdot C_2 + \dots + c_r \cdot C_r.$$

Die Matrix  $T$  ist eine reguläre Matrix, die Matrizen  $C_i$  aber sind möglicherweise alle singular. Da aber die Funktion  $g: (x_1, \dots, x_n) \mapsto \det(x_1 \cdot C_1 + \dots + x_r \cdot C_r)$  stetig und in  $(c_1, \dots, c_r)$  von 0 verschieden ist, gibt es einen rationalen Punkt  $q = (q_1, \dots, q_r) \in \mathbb{Q}^r$  mit  $g(q) \neq 0$ . Die Matrix  $S = q_1 \cdot C_1 + \dots + q_r \cdot C_r$  ist dann eine rationale, reguläre Matrix, welche die Bedingung  $S \cdot H_B \cdot S^{-1} = H'_B$  erfüllt.  $\square$

### 6.3b Arithmetische versus geometrische Äquivalenz

Das folgende einfache Beispiel illustriert die Behauptung von Theorem C6.9 und zeigt, dass geometrisch äquivalente Paare nicht arithmetisch äquivalent zu sein brauchen.

Sei  $\Gamma = \Gamma'$  das Standard-Gitter  $\mathbb{Z}^2$  des Euklidischen Raumes  $\mathbb{R}^2$ . Die Gruppe  $H \subset \text{Aut}(\Gamma)$  werde erzeugt von den Spiegelungen

$$\rho_h: x = (x_1, x_2)^t \mapsto (x_1, -x_2)^t \text{ und } \rho_v: x = (x_1, x_2)^t \mapsto (-x_1, x_2)^t.$$

Dann hat  $H$  die Ordnung 4 und besteht aus den Abbildungen  $\mathbb{1}$ ,  $\rho_h$ ,  $\rho_v$  und  $\rho_h \circ \rho_v = -\mathbb{1}$ . Analog sei  $H'$  die Gruppe, welche von der Spiegelung  $\rho_d$  an der Diagonalen mit der Gleichung  $x_2 = x_1$ , und der Spiegelung  $\rho_{d'}$  an der Diagonalen mit der Gleichung  $x_2 = -x_1$  erzeugt wird.

Die Gruppen  $H$  und  $H'$  werden beide von Spiegelungen an orthogonalen Geraden erzeugt und sind daher geometrisch gleichwertig; genauer gesagt sind die Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma, H')$  geometrisch äquivalent. Die orthogonale Abbildung  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$ , die von der Matrix

$$T = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

induziert wird, bildet nämlich die Geraden mit den Gleichungen  $x_2 = 0$ , beziehungsweise  $x_1 = 0$ , auf die diagonalen Geraden mit den Gleichungen  $x_2 = -x_1$  oder  $x_2 = x_1$  ab, woraus sich die Beziehung

$$L \circ H \circ L^{-1} = H' \tag{C6.12}$$

ergibt. Sie zeigt, dass die beiden Paare  $(\mathbb{Z}^2, H)$  und  $(\mathbb{Z}^2, H')$  geometrisch äquivalent sind. Die Einträge der Matrix  $T$  sind nicht rational, da  $\sqrt{2}$  keine rationale Zahl ist. Die Beziehung C6.12 aber bestehen, wenn  $T$  durch ein Vielfaches  $S = \lambda \cdot T$  mit  $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  ersetzt wird; wählt man  $\lambda = \sqrt{2}$  erhält man eine ganzzahlige Matrix  $S$  mit rationalzahliger inverser Matrix.

Sei  $\mathcal{B} = (e_1, e_2)$  die Standard-Basis des Gitters  $\mathbb{Z}^2$ . Die Matrizen  $H_{\mathcal{B}}$  und  $H'_{\mathcal{B}}$  werden von den Matrizen

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ und } \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ beziehungsweise } \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ und } \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

erzeugt. Diese Darstellungen erlauben es einzusehen, dass die beiden Paare  $(\mathbb{Z}^2, H)$  und  $(\mathbb{Z}^2, H')$  nicht arithmetisch äquivalent sind. Sei nämlich  $S$  eine ganzzahlige Matrix mit  $S \cdot H_{\mathcal{B}} \cdot S^{-1} = H'_{\mathcal{B}}$ . Da beim Konjugieren Matrizen mit negativer Determinante auf Matrizen mit negativer Determinante abgebildet werden, muss

$$S \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot S^{-1} = \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \text{ also } S \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot S$$

mit  $\epsilon \in \{1, -1\}$  sein. Ist  $S = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ , so gilt also die Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} a & -b \\ c & -d \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} c & d \\ a & b \end{pmatrix}.$$

Sie ist gleichwertig mit den linearen Beziehungen  $c = \epsilon a$  und  $d = -\epsilon b$ , weshalb  $T$  die Form

$$S = \begin{pmatrix} a & b \\ \epsilon a & -\epsilon b \end{pmatrix} \text{ mit } \det(S) = -2\epsilon ab$$

hat. Die Determinante der ganzzahligen Matrix  $S$  ist also eine gerade Zahl, weshalb  $S$  nicht in  $\text{GL}(2, \mathbb{Z})$  liegt.

**BEMERKUNG C6.10** In Beispiel B5.7 des Unterabschnittes 5.1 wurde die Behauptung aufgestellt, die kristallographischen Gruppen  $G_3 = \mathbb{Z}^2 \rtimes H_3$  und  $G_4 = \mathbb{Z}^2 \rtimes H_4$  seien nicht isomorph; dabei sind  $H_3$  und  $H_4$  andere Namen für die zuvor betrachteten Gruppen  $H$  und  $H'$ . Wir wissen jetzt, dass die Paare  $(\mathbb{Z}^2, H_3)$  und  $(\mathbb{Z}^2, H_4)$  nicht arithmetisch äquivalent sind. Nach Hilfssatz B5.14 sind daher die kristallographischen Gruppen  $G_3$  und  $G_4$  nicht affin äquivalent, weshalb sie nach dem dritten Satz von Bieberbach (Theorem C7.19) auch nicht isomorph sind.

## 6.4 Erster Satz von Bieberbach

Die kristallographischen Gruppen eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  sind nach Definition B5.1 genau jene Untergruppen  $G$  der Isometriegruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ , deren Translationsnormalteiler  $T(G)$  die Eigenschaft aufweist, dass Vektoren der Translationen ein Gitter. In diesem Unterabschnitt wird nachgewiesen, dass jede kristallographische Gruppe eine *diskrete* Untergruppe der Isometriegruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  ist und dass ihre Wirkung auf  $\mathbb{E}$  einen *beschränkten Fundamentalbereich* hat. Weiter wird gezeigt, dass die genannten beiden Eigenschaften die kristallographischen Gruppen als Untergruppen der Isometriegruppe charakterisieren. Diese Kennzeichnung der kristallographischen Gruppen geht auf die Arbeit [Bi10] von L. Bieberbach zurück und wird als *erster Bieberbachscher Satz* bezeichnet.

### 6.4a Metrisierung der Gruppe $\text{Iso}(\mathbb{E})$

Jede Isometrie  $\varphi$  eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  ist die Zusammensetzung  $\tau_v \circ L$  einer orthogonalen Abbildung  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  und einer Translation  $\tau_v$  mit Vektor  $v$ . Die

Zuordnung  $\varphi \mapsto (v, L)$  definiert dann eine (wohl-definierte) Bijektion

$$\vartheta: \text{Iso}(\mathbb{E}) \xrightarrow{\sim} \mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E}) \quad (\text{C6.13})$$

(siehe Nummer 3.2b); sie wird zu einem Isomorphismus von Gruppen, wenn man das Produkt  $\mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E})$  mit dem kanonischen semi-direkten Produkt versteht (siehe Formel (B3.11)). Unser erstes Ziel ist es, *das Produkt  $\mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E})$  mit einer invarianten Metrik zu versehen, welche die Euklidische Metrik auf der Teilmenge  $\mathbb{E} \times \{\mathbb{1}\}$  fortsetzt.* Dazu fassen wir die Gruppe  $\text{O}(\mathbb{E})$  als Teilmenge der Algebra  $\text{End}(\mathbb{E}) = L(\mathbb{E}, \mathbb{E})$  der linearen Selbstabbildungen von  $\mathbb{E}$  auf, und versehen diese mit der so genannten Operatornorm

$$\|A\| = \sup\{\|Ax\|_2 \mid x \in \mathbb{S}(\mathbb{E}^2)\}; \quad (\text{C6.14})$$

dabei bezeichnet  $\mathbb{S}(\mathbb{E})$  die Einheitssphäre des Raumes  $\mathbb{E}$ . Da die Einheitssphäre – eine abgeschlossene und beschränkte Teilmenge des endlich-dimensionalen Raumes  $\mathbb{E}$  – kompakt ist, wird das Supremum angenommen.

Die Operatornorm hat nützliche Eigenschaften, insbesondere die folgenden:

**HILFSSATZ C6.11** *Für alle linearen Abbildungen  $A$  und  $B$  sowie alle orthogonalen Abbildungen  $L, L'$  von  $\mathbb{E}$  gelten die Aussagen (i) bis (iii):*

$$(i) \|A \circ B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|;$$

$$(ii) \|L \circ A \circ L'\| = \|A\|;$$

(iii) *die Menge  $E_A = \{x \in \mathbb{E} \mid \|Ax\| = \|A\| \cdot \|x\|\}$  ist ein Unterraum von  $\mathbb{E}$ , der unter allen orthogonalen Abbildungen, welche mit  $A$  kommutieren, invariant ist.*

*Proof.* Behauptung (i) ergibt sich aus der Rechnung

$$\|(A \circ B)(x)\| = \|A(B(x))\| \leq \|A\| \cdot \|B(x)\| \leq \|A\| \cdot \|B\| \cdot \|x\|.$$

Wendet man diese Rechnung auf das dreifache Produkt  $A' = L \circ A \circ L'$  an und berücksichtigt, dass  $L$  und  $L'$  die Norm 1 haben, kommt man zur Ungleichung  $\|A'\| \leq \|A\|$ . Da auch  $L^{-1}$  und  $(L')^{-1}$  orthogonal sind und  $A = L^{-1} \circ A' \circ (L')^{-1}$  ist, gilt auch die Ungleichung  $\|A\| \leq \|A'\|$ .

(iii) Zunächst enthält die Menge  $E_A$  den Nullvektor und sie ist unter Multiplikation mit Skalaren abgeschlossen. Mit Hilfe der Parallelogrammregel  $\|u+v\|^2 + \|u-v\|^2 = 2(\|u\|^2 + \|v\|^2)$  sieht man andererseits, dass die Rechnung

$$\begin{aligned} & \|A\|^2 \cdot (2(\|x\|^2 + 2\|y\|^2)) \\ &= 2(\|A\| \cdot \|x\|)^2 + 2(\|A\| \cdot \|y\|)^2 \\ &= 2(\|Ax\|^2 + \|Ay\|^2) = \|Ax + Ay\|^2 + \|Ax - Ay\|^2 \\ &\leq \|A\|^2 \cdot \|x+y\|^2 + \|A\|^2 \cdot \|x-y\|^2 = \|A\|^2 \cdot (2\|x\|^2 + 2\|y\|^2) \end{aligned}$$

für jedes Paar  $x, y$  von Elementen aus  $E_A$  richtig ist. Die einzige Ungleichung in dieser Kette von Beziehungen muss die Gleichheit sein; da aber die Ungleichungen

$$\|A(x+y)\| \leq \|A\| \cdot (\|x+y\|) \quad \text{und} \quad \|A(x-y)\| \leq \|A\| \cdot (\|x-y\|)$$

beide gelten, müssen auch beide Gleichungen

$$\|A(x+y)\| = \|A\| \cdot (\|x+y\|) \quad \text{und} \quad \|A(x-y)\| = \|A\| \cdot (\|x-y\|)$$

erfüllt sein. Insgesamt haben wir gezeigt, dass  $E_A$  ein Unterraum von  $\mathbb{E}$  ist.

Seien nun  $L$  eine orthogonale Abbildung, die mit  $A$  kommutiert, und  $x \in E_A$ . Wie die Rechnung

$$\|(A \circ L)(x)\| = \|(L(A(x)))\| = \|Ax\| = \|A\| \cdot \|x\| = \|A\| \cdot \|L(x)\|$$

klar macht, liegt dann auch  $L(x)$  im Unterraum  $E_A$ .  $\square$

**BEMERKUNGEN C6.12** 1) Aussage (iii) des Hilfssatzes besagt, dass  $A$  auf dem Unterraum  $E_A \neq \{0\}$  eine Ähnlichkeitsabbildung mit Vergrößerungsfaktor  $\|A\|$  ist.

2) In der nächsten Nummer wird der Hilfssatz auf die Differenz  $A = L - \mathbb{1}$  einer *orthogonalen* Abbildung  $L$  und der Identität angewandt. Die Norm  $\delta(L) = \|L - \mathbb{1}\|$  ist dann gerade der Abstand der Abbildung  $L$  vom neutralen Element der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$ .

Die Euklidische Norm  $\| - \|_2$  auf  $\mathbb{E}$  und die Operatornorm auf  $L(\mathbb{E}, \mathbb{E})$  erlauben es, auf dem Quadrat der Menge  $\mathbb{E} \times O(\mathbb{E})$  eine Funktion  $d$  festzulegen, nämlich

$$d((v, L_1), (w, L_2)) = \|v - w\|_2 + \|L_1 - L_2\| = \|v - w\|_2 + \delta(L_2^{-1} \circ L_1). \quad (\text{C6.15})$$

Diese Funktion  $d$  ist eine Metrik; sie setzt die Metrik auf  $\mathbb{E} \times \{\mathbb{1}\}$  fort. Die Rechnung

$$\begin{aligned} & d((u, L) \cdot (v, L_1), (u, L) \cdot (w, L_2)) \\ &= d((u + L(v), l \circ L_1), (u + L(w), l \circ L_2)) \\ &= \|(u + L(v)) - (u + L(w))\|_2 + \delta((L \circ L_1)^{-1} \circ (L \circ L_2)) \\ &= \|L(v) - L(w)\|_2 + \delta(L_1^{-1} \circ L^{-1} \circ L \circ L_2) \\ &= \|v - w\|_2 + \delta(L_1^{-1} \circ L_2) \\ &= d((v, L), (w, L)) \end{aligned}$$

lehrt dann, dass  $d$  invariant unter der Wirkung der Gruppe  $\mathbb{E} \times O(\mathbb{E})$  ist.

Die Metrik  $d$  induziert eine Metrik auf der Untergruppe  $\{0\} \times O(\mathbb{E})$ . Diese stimmt aber nicht mit jener überein, welche die Frobeniussche Norm  $\| - \|_F$  auf  $L(\mathbb{E}, \mathbb{E})$  induziert.<sup>3</sup> In den Betrachtungen der folgenden Nummer spielt dieser Umstand aber keine Rolle, da die beiden Normen äquivalent sind; es gelten nämlich die Abschätzungen

$$\|A\| \leq \|A\|_F \leq \sqrt{n} \cdot \|A\| \quad (\text{C6.16})$$

für jeden linearen Endomorphismus  $A$  des  $n$ -dimensionalen Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$ .

#### 6.4b Beweis des ersten Satzes von Bieberbach

Der Beweis, der in dieser Nummer gegeben wird, ist im wesentlichen der Beweis von P. Buser, den er 1985 in [Bu85] veröffentlicht hat. Er besteht aus zwei Teilen: in Satz

<sup>3</sup>Die Frobeniussche Norm der Abbildung  $A$  ist die Zahl  $(A^{\text{ad}} \circ A)$ . Berechnet man diese Spur mit Hilfe einer Orthonormalbasis  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$ , erhält man

$$\sum_j \langle b_j, A^{\text{ad}}(A(b_j)) \rangle = \sum_j \|A(b_j)\|^2 = \sum_{h,j} a_{h,j}^2.$$

In dieser Rechnung werden die Koeffizienten  $\langle b_h, A(b_j) \rangle$  der Abbildung  $A$  mit  $a_{h,j}$  bezeichnet.

C6.18 wird zuerst nachgewiesen, dass es in jeder Untergruppe  $G$  von  $\text{Iso}(\mathbb{E})$ , die einen beschränkten Fundamentalbereich besitzt, Isometrien

$$\tau_{v_1} \circ L_1, \quad \tau_{v_2} \circ L_2, \dots, \tau_{v_n} \circ L_n$$

gibt, welche so beschaffen sind, dass die Vektoren  $v_1, \dots, v_n$  linear unabhängig sind und die orthogonalen Abbildungen  $L_j$  die Bedingung  $\delta(L_j) \leq \frac{1}{2}$  erfüllen.

In einem zweiten Teil wird dann mit einem raffinierten Argument nachgewiesen, dass jede Isometrie  $\tau \circ L$  einer Untergruppe  $G \subset \text{Iso}(\mathbb{E})$  eine Translation sein muss, falls die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- (i)  $G$  ist diskret und besitzt einen beschränkten Fundamentalbereich;
- (ii)  $\delta(L) \leq \frac{1}{2}$ .

Als Vorbereitung auf die Beweise präzisiere ich die beiden Begriffe *diskrete Untergruppe* und *beschränkter Fundamentalbereich*.

**DEFINITION C6.13** Eine Untergruppe  $G$  der Isometriegruppe  $\mathbb{E} \rtimes \text{O} \mathbb{E}$  wird *diskret mit minimalem Abstand*  $\rho > 0$  genannt, falls das neutrale Element  $(0, \mathbb{1})$  das einzige Element  $\varphi \in G$  ist, das die Ungleichung  $d(\varphi, (0, \mathbb{1})) < \rho$  erfüllt.

Da die Metrik  $d$  links-invariant ist, hat die so definierte diskrete Untergruppe  $G$  dann auch die Eigenschaft, dass der Abstand zweier verschiedener Elemente von  $G$  mindestens  $\rho$  beträgt. Wichtig für die weiteren Überlegungen ist nun die folgende Endlichkeitseigenschaft:

**HILFSSATZ C6.14** *Ist  $G$  eine diskrete Untergruppe von  $\mathbb{E} \rtimes \text{O} \mathbb{E}$ , so enthält jeder beschränkte Teilmenge von  $G$  nur endlich viele Elemente.*

*Proof.* Die Normabschätzungen (C6.16) implizieren, dass jede Teilmenge der Gruppe  $\mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E})$ , welche bezüglich der Metrik  $d$  beschränkt ist, es auch bezüglich des Abstands

$$d_F((v, L_1), (w, L_2)) = \|v - w\|_2 + \|L_1 - L_2\|_F$$

ist und dass eine Teilmenge  $G$ , die bezüglich  $d$  diskret ist, auch bezüglich  $d_F$  diese Eigenschaft hat. Die Behauptung folgt dann aus dem bekannten Resultat, wonach eine diskrete und beschränkte Teilmenge von  $\mathbb{R}^m$  endlich ist.  $\square$

Nun zum Begriff der *Untergruppe  $G$  mit beschränktem Fundamentalbereich*. Wir brauchen nur die folgende, sehr schwache Fassung:

**DEFINITION C6.15** Eine Untergruppe  $G$  von  $\mathbb{E} \rtimes \text{O} \mathbb{E}$  besitzt einen *beschränkten Fundamentalbereich*, falls eine beschränkte Teilmenge  $F$  von  $\mathbb{E}$  gibt, so dass die mit den Isometrien  $\varphi$  der Gruppe  $G$  verschobenen Kopien  $\varphi(F)$  von  $F$  den ganzen Raum  $\mathbb{E}$  überdecken.

Da jede beschränkte Teilmenge in einem abgeschlossenen Ball  $B_\rho$  vom Radius  $\rho > 0$  enthalten ist, und diese Bälle unter orthogonalen Abbildungen invariant sind, lässt sich die Existenz eines beschränkten Fundamentalbereiches so kennzeichnen:

HILFSSATZ C6.16 *Eine Untergruppe von  $\mathbb{E} \rtimes \mathbb{O} \mathbb{E}$  ist genau dann diskret, falls es einen Radius  $\rho$  gibt, welcher die Implikation*

$$\text{für jeden Punkt } x \in \mathbb{E} \text{ gibt es } (v, L) \in G \text{ so, dass } \|x - v\| \leq \rho. \quad (\text{C6.17})$$

*richtig macht.*

Noch eine letzte Vorbemerkung: der erste Bieberbachsche Satz behauptet, jede diskrete Untergruppe von  $\mathbb{E} \rtimes \mathbb{O}(\mathbb{E})$ , mit einem beschränkten Fundamentalbereich sei eine kristallographische Gruppe. Es gilt auch die Umkehrung; sie ist aber viel einfacher zu begründen: ist  $G \subset \mathbb{E} \rtimes \mathbb{O}(\mathbb{E})$  eine kristallographische Gruppe, so hat der Translationsnormalteiler  $\Gamma(G) \times \{\mathbb{1}\}$  endlichen Index  $\text{card}(G_0)$  in  $G$ , weshalb mit  $\Gamma \times \{\mathbb{1}\}$  auch  $G$  eine diskrete Untergruppe ist; ferner gibt jede  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma(G)$  Anlass zu einem Parallelepipid  $\{x_1 \cdot b_1 + \dots + x_n \cdot b_n \mid 0 \leq x_j \leq 1\}$ , das ein beschränkter Fundamentalbereich der Wirkung von  $\Gamma \times \{\mathbb{1}\}$  auf  $\mathbb{E}$  ist.

Nach diesen Vorbemerkungen kommen wir zum eigentlichen Beweis. Sein erster Teil stützt sich auf den

HILFSSATZ C6.17 *Sei  $G$  eine Untergruppe von  $\mathbb{E} \times \mathbb{O} \mathbb{E}$  mit beschränktem Fundamentalbereich. Dann gibt es zu jedem Einheitsvektor  $u$  und jeder positiven Fehlerschranke  $\varepsilon$  eine Isometrie  $(v, L) \in G$  mit den folgenden Eigenschaften:*

$$v \neq 0, \quad \left\| u - \frac{v}{\|v\|_2} \right\|_2 \leq 2\varepsilon \quad \text{und} \quad \delta(L) \leq \varepsilon. \quad (\text{C6.18})$$

*Proof.* Sei  $\rho$  ein Radius, der so gross ist, dass die Implikation (C6.17) für die Gruppe  $G$  richtig wird. Auf Grund dieser Implikation gibt es dann für jede natürliche Zahl  $k \geq 1$  eine Isometrie  $(v_k, L_k) \in G$ , welche die Bedingung  $\|k \cdot u - v_k\| \leq \rho$  erfüllt. Da die Menge  $\mathbb{O}(\mathbb{E})$  in der Frobenius-Norm kompakt ist, gibt es weiter eine streng monoton wachsende Funktion  $\mu: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ , derart dass die Teilfolge  $j \mapsto L_{\mu(j)}$  gegen eine orthogonale Abbildung  $L$  konvergiert. Insbesondere gibt es also einen Index  $j_0$ , so dass die Ungleichung

$$\delta\left(L_{\mu(j_0)}^{-1} \circ L_{\mu(j)}\right) = \|L_{\mu(0)} - L_{\mu(j)}\| \leq \varepsilon$$

für jeden Index  $j \geq j_0$  richtig ist. Zur Vereinfachung der Schreibweise setze man nun

$$a_j = v_{\mu(j)}, \quad b = v_{\mu(j_0)}, \quad L_j = L_{\mu(j_0)} \quad \text{und} \quad L_0 = L_{\mu(j_0)}.$$

Die Isometrie

$$\varphi_j = (b, L_0)^{-1} \cdot (a_j, L_j) = (-L_0^{-1}(b), L_0^{-1}) \cdot (a_j, L_j) = (L_0^{-1}(a_j - b), L_0^{-1} \circ L_j)$$

liegt dann in  $G$  und es ist  $\delta(L_0^{-1} \circ L_j) \leq \varepsilon$  für jeden Index  $j \geq j_0$ . Für diese Indizes  $j$  hat die Isometrie  $\varphi_j$  also die dritte der Eigenschaften (C6.18). Für grosse  $j$  erfüllt aber auch der Vektor  $v_j = L_j^{-1} \left( \frac{a_j - b}{\|a_j - b\|} \right)$  die ersten zwei dieser Eigenschaften.

Diese Behauptung lässt sich so begründen: die Vektoren  $a_j$  und  $b$  haben die Form

$$a_j = \mu(j) \cdot u + r_j, \quad b = \mu(j_0) \cdot u + s$$

mit  $\|r_j\| \leq \rho$  und  $\|s\| \leq \rho$ . Setzt man zur Vereinfachung der Schreibweise  $m_j = \mu(j) - \mu(j_0)$ , so gilt daher

$$m - 2\rho \leq \|a_j - b\| = \|m \cdot u + r_j - s\| \leq m + 2\rho$$

für  $j \geq j_0$ . Man wähle nun  $j \geq j_0$  so gross, dass  $m - 2\rho$  positiv wird. Der Abstand von  $v_j = L_j^{-1} \left( \frac{a_j - b}{\|a_j - b\|} \right)$  zu  $u$  kann dann so umgeformt werden: zunächst ist

$$\left\| u - L^{-1} \left( \frac{a_j - b}{\|a_j - b\|} \right) \right\| \leq \|u - L^{-1}(u)\| + \left\| L^{-1} \left( u - \frac{a_j - b}{\|a_j - b\|} \right) \right\| \leq \varepsilon + \left\| u - \frac{a_j - b}{\|a_j - b\|} \right\|.$$

Der zweite Summand wird nun weiter abgeschätzt:

$$\begin{aligned} \left\| u - \frac{a_j - b}{\|a_j - b\|} \right\| &\leq \left\| u - \frac{a_j - b}{m_j} \right\| + \left\| \frac{a_j - b}{m_j} - \frac{a_j - b}{\|a_j - b\|} \right\| \\ &\leq \left\| u - \frac{m_j \cdot u + r_j - s}{m} \right\| + \left| \frac{1}{m_j} - \frac{1}{\|a_j - b\|} \right| \cdot \|a_j - b\| \\ &= \frac{2\rho}{m_j} + \frac{2\rho}{m_j \cdot (m_j - 2\rho)} \cdot (m_j + 2\rho) = \frac{2\rho}{m_j} \cdot \left( 1 + \frac{m_j + 2\rho}{m_j - 2\rho} \right). \end{aligned}$$

Durch geeignete Wahl von  $j$  kann die erzielte obere Schranke des zweiten Summanden daher kleiner als  $\varepsilon$  gemacht werden.  $\square$

Nun zum Hauptergebnis des ersten Teils:

**SATZ C6.18** *Jede Untergruppe  $G$  von  $\mathbb{E} \rtimes \text{O}(\mathbb{E})$ , die einen beschränkten Fundamentalbereich hat, enthält Isometrien  $\varphi_1 = \tau_{v_1} \circ L_1, \dots, \varphi_n = \tau_{v_n} \circ L_n$ , welche die Bedingungen*

- (i) *die Folge  $(v_1, \dots, v_n)$  ist linear unabhängig;*
- (ii) *die Ungleichung  $\delta(L_j) \leq \frac{1}{2}$  trifft für jeden Index  $j$  zu.*

*erfüllen,*

*Proof.* Sei  $(u_1, \dots, u_n)$  eine Basis von  $\mathbb{E}$ , die aus Einheitsvektoren besteht. Dann gibt es eine Fehlerschranke  $\varepsilon$ , so dass für jede Folge von Störungsvektoren  $s_1, \dots, s_n$ , deren Längen durch  $2\varepsilon$  beschränkt wird, die Folge der gestörten Vektoren  $(u_1 + s_1, \dots, u_n + s_n)$  linear unabhängig bleibt. Für diese Fehlerschranke  $\varepsilon$  und jeden der Vektoren  $u_j$  liefert Hilfssatz C6.17 dann einen Isometrie  $\varphi_j = (v_j, L_j) \in G$ , welche die Bedingungen (C6.18) befriedigt. Da man annehmen kann, dass  $\varepsilon \leq \frac{1}{2}$  ist, erfüllen die Isometrien  $\varphi_1, \dots, \varphi_n$  die Behauptung des Satzes.  $\square$

Sei nun  $G$  eine Untergruppe von  $\mathbb{E} \rtimes \text{O}(\mathbb{E})$ , die einen beschränkten Fundamentalbereich besitzt und überdies diskret ist. Dann kann man mit Satz C6.18 Vektoren  $v_1, \dots, v_n$  finden, die linear unabhängig und die ersten Komponenten von Isometrien  $\varphi_j$  sind, deren zweite Komponenten  $L_j$  sich von der Identität nur sehr wenig unterscheiden. Satz C6.19 zeigt dann, dass die zweiten Komponenten  $L_j$  gleich  $\mathbb{1}$  sein müssen. Somit enthält der Translationsnormalteiler  $\Gamma(G) \times \mathbb{1}$  von  $G$  eine Basis des Vektorraumes  $\mathbb{E}$ . Da dieser Normalteiler – eine Untergruppe der diskreten Gruppe  $G$  – diskret ist, garantiert Theorem B4.4 schliesslich, dass  $\Gamma(G)$  ein Gitter und  $G$  folglich eine kristallographische Gruppe von  $\mathbb{E}$  ist.

Es verbleibt und der Beweis der folgenden Behauptung:

**SATZ C6.19** *Für jede diskrete Untergruppe  $G$  von  $\mathbb{E} \rtimes \text{O}(\mathbb{E})$ , welche einen beschränkten Fundamentalbereich besitzt, gilt die Implikation*

$$(v, L) \in G \text{ und } \delta(L) \leq \frac{1}{2} \implies L = \mathbb{1}. \quad (\text{C6.19})$$

*Proof.* Wir werden zeigen, dass jede Verletzung der Implikation (C6.19) zu einem Widerspruch führt. Sei nämlich  $(v_0, L_0) \in G$  eine Isometrie mit  $\delta(L_0) \leq \frac{1}{2}$  und  $L \neq \mathbb{1}$ . Setze  $\rho = \|v_0\| + \max\{\delta(L) \mid L \in \mathcal{O}(\mathbb{E})\} = \|v_0\| + 2$  und betrachte die Menge

$$\mathcal{E}_0 = \{(v, L) \in G \mid \|v\| \leq \|v_0\|\}.$$

Diese Menge ist im Ball  $B_\rho((0, \mathbb{1}))$  enthalten und auf Grund der Diskretheit der Gruppe  $G$  daher endlich. Unter den Isometrien  $(v, L)$  von  $G$ , welche die Bedingungen  $\delta(L) \leq \frac{1}{2}$  und  $L \neq \mathbb{1}$  erfüllen, gibt es deshalb eine deren Vektor  $a$  minimale Länge hat. Ist  $(a, A)$  diese Isometrie, so bildet die orthogonale Abbildung  $A$  den Unterraum

$$E_{\parallel} = \{x \in \mathbb{E} \mid \|(A - \mathbb{1})(x)\| = \delta(A) \cdot \|x\|\}$$

nach Punkt (ii) des Hilfssatzes C6.11 auf sich ab und folglich auch das orthogonale Komplement  $E_{\perp}$  von  $E_{\parallel}$ . Sei  $\delta_{\perp}(A) < \delta(A)$  die Norm der Einschränkung von  $A - \mathbb{1}$  auf  $\mathbb{E}_{\perp}$ .<sup>4</sup> Wendet man Hilfssatz C6.18 auf einen Einheitsvektor  $u \in E_{\parallel}$  und  $\varepsilon = \frac{1}{8}(\delta(A) - \delta_{\perp}(A))$  an, kommt man zu einer Isometrie  $(v_1, L_1) \in G$ , welche die Bedingungen

$$v_1 \neq 0, \quad \left\|u - \frac{v_1}{\|v_1\|}\right\| \leq 2\varepsilon, \quad \delta(L_1) \leq \varepsilon = \frac{1}{8}(\delta(A) - \delta_{\perp}(A))$$

erfüllt. Schreibt man  $v$  als Summe  $v_{\parallel} + v_{\perp} \in E_{\parallel} \oplus E_{\perp}$ , erkennt man, dass  $\|v_{\perp}\| \leq \frac{1}{8}\|v\|$  sein muss; Das Paar gehört also zur Menge

$$\mathcal{E}_1 = \{(v, L) \in G \mid v \neq 0, \quad \|v_{\perp}\| \leq \|v_{\parallel}\|, \quad \|v\| \leq \|v_0\|, \quad \delta(L) \leq \frac{1}{8}(\delta(A) - \delta_{\perp}(A))\}.$$

Da diese Menge ebenfalls endlich ist, enthält sie ein Element  $(b, B)$ , dessen Vektor  $b$  minimale Länge hat. Da  $\delta(B)$  kleiner als  $\frac{1}{2}$  ist, impliziert die Minimaleigenschaft von  $a$  dann, dass  $\|a\| \leq \|b\|$ , es sei denn  $B = \mathbb{1}$ .

Wir vergleichen nun diese Isometrie  $(b, B)$  mit dem Kommutator

$$(\tilde{b}, \tilde{B}) = [(a, A), (b, B)] = (a, A) \cdot (b, B) \cdot (a, A)^{-1} \cdot (b, B)^{-1}.$$

Er gehört zu  $G$  und hat die Komponenten

$$\tilde{b} = (A - \mathbb{1})(b) + (\mathbb{1} - [A, B])(b) + (A \circ (\mathbb{1} - B) \circ A^{-1})(a)$$

sowie  $\tilde{B} = [A, B]$ . Der Abstand  $\delta(\tilde{B})$  kann mit Hilfe der Formel

$$[A, B] - \mathbb{1} = ((A - \mathbb{1}) \circ (B - \mathbb{1}) - (B - \mathbb{1}) \circ (A - \mathbb{1})) \circ A^{-1} \circ B^{-1}$$

abgeschätzt werden:

$$\delta(\tilde{B}) \leq \|(A - \mathbb{1}) \circ (B - \mathbb{1})\| + \|(B - \mathbb{1}) \circ (A - \mathbb{1})\| \leq 2\delta(A)n \cdot \delta(B) \leq \delta(B).$$

Der Vektor  $\tilde{b}$  ist die Summe von  $(A - \mathbb{1})(b) = (A - \mathbb{1})(b_{\parallel}) + (A - \mathbb{1})(b_{\perp})$  und

$$r = (\mathbb{1} - [A, B])(b) + (A \circ (\mathbb{1} - B) \circ A^{-1})(a).$$

Falls  $B \neq \mathbb{1}$  ist, gilt die Ungleichung  $\|a\| \leq \|b\|$ , was die Abschätzung

$$\|r\| = \delta(\tilde{B}) \cdot \|b\| + \delta(B)\|a\| = 2\delta(B) \cdot \|b\| \leq 2\delta(B) \cdot \sqrt{2} \cdot \|b\| \leq \frac{1}{2}(\delta(A) - \delta_{\perp}(A))\|b_{\parallel}\|$$

<sup>4</sup>Falls  $E_0$  nur aus dem Nullvektor besteht, setzt man  $\delta_{\perp}(A) = 0$ .

erlaubt. Das Ergebnis der Abschätzung bleibt auch im Ausnahmefall  $B = \mathbb{1}$  richtig, da  $r$  dann der Nullvektor ist. Die Abschätzung impliziert nun, dass auch die Isometrie  $(\tilde{b}, \tilde{B})$  in  $G$  liegt, aber  $\tilde{b} \leq \|b\|$  erfüllt, was der Minimalität von  $b$  widerspricht. Hier sind die Details: zuerst gilt:

$$\begin{aligned} \|\tilde{b}_\parallel\| &\geq \|(A - \mathbb{1})(b)\| - \|r_\parallel\| \\ &\geq \delta(A) \cdot \|b\| - \frac{1}{2}(\delta(A) - \delta_\perp(A))\|b_\parallel\| \\ &= \frac{1}{2}(\delta(A) + \delta_\perp(A)) \cdot \|b\| = \delta_\perp(A) + \frac{1}{2}(\delta(A) - \delta_\perp(A)) \cdot \|b\| \\ &\geq \|(A - \mathbb{1})(b_\perp)\| + \|r_\parallel\| \geq \|\tilde{b}_\perp\| \end{aligned}$$

Dies zeigt auch, dass  $\|\tilde{b}\| \geq \|\tilde{b}_\parallel\|$  positiv ist. Weiter ist

$$\begin{aligned} \|\tilde{b}\| &\leq \|(A - \mathbb{1})(b)_\perp\| + \|r\| = \delta(A) \cdot \|b\| + \frac{1}{2}(\delta(A) - \delta_\perp(A)) \cdot \|b\| \\ &= \frac{3}{2}\delta(A) \cdot \|b\| \leq \frac{3}{4} \cdot \|b\|. \end{aligned}$$

□

#### 6.4c Bemerkung zur Strategie des Beweises

Seien  $\Gamma$  ein Gitter des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  und  $G$  das semi-direkte Produkt  $\Gamma \rtimes \text{Aut}(\Gamma)$ . Es ist  $G$  eine diskrete Untergruppe der Isometriegruppe  $\mathbb{E} \rtimes \text{O}(\Gamma)$ , die einen beschränkten Fundamentalbereich besitzt; gemäss Satz C6.19 erfüllt daher jede Isometrie  $(v, L) \in G$  die Bedingung

$$L = \mathbb{1} \quad \text{oder} \quad \delta(L) = \|L - \mathbb{1}\| > \frac{1}{2}. \quad (\text{C6.20})$$

In der vorliegenden Situation bildet  $L$  ein Gitter auf sich ab; dies erlaubt es, obige Bedingung konkreter zu beschreiben und sie zu verschärfen:

**SATZ C6.20** *Sei  $L \neq \mathbb{1}$  eine lineare Abbildung, die ein Gitter invariant lässt, und sei  $m$  die Ordnung von  $L \in \text{O}(\mathbb{E})$ . Dann besitzt die Operatornorm  $\delta(L) = \|L - \mathbb{1}\|$  die folgenden unteren Schranken*

$$\delta(L) \begin{cases} = 2, & \text{falls } \det(L) = -1; \\ \geq \sqrt{2}, & \text{falls } \det(L) = 1, \text{ aber } m \neq 6, \\ \geq 1, & \text{falls } \det(L) = 1 \text{ und } m = 6. \end{cases} \quad (\text{C6.21})$$

*Proof.* Die Abbildung  $L$  ist orthogonal. Falls sie die Orientierung von  $\mathbb{E}$  nicht erhält, ist  $-1$  daher einer ihrer Eigenwerte und die Entfernung  $\delta(L)$  beträgt  $|(-1) - 1| = 2$ . Andernfalls ist  $L$  eine orthogonale Summe von Drehungen  $L_j \neq \mathbb{1}$  in Ebenen  $E_1, \dots, E_\ell$  und der Identität auf einem Unterraum  $F$ , der orthogonal zu den Ebenen  $E_j$  liegt. Bezüglich einer orthogonalen Basis  $\mathcal{B}_j = (b_{2j-1}, b_{2j})$  der Ebene  $E_j$  wird die Drehung  $L_j$  durch eine Matrix der Form

$$(L_j)_{\mathcal{B}_j} = \begin{pmatrix} \cos t_j & -\sin t_j \\ \sin t_j & \cos t_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & -s \\ c & c \end{pmatrix}$$

beschrieben. Ist  $x = x_1 \cdot b_{2j-1} + x_2 \cdot b_{2j}$ , so ergibt sich das Quadrat der Norm von  $(L - \mathbb{1})(x)$  zu

$$\begin{aligned} &(x_1 \cdot (c - 1) - x_2 \cdot s)^2 + (x_1 \cdot s + x_2 \cdot (c - 1))^2 = ((c - 1)^2 + s^2) \cdot (x_1^2 + x_2^2) \\ &= (c^2 + s^2 - 2c + 1) \cdot \|x\|^2 = 2 \cdot (1 - \cos(t_j)) \cdot \|x\|^2. \end{aligned}$$

Die Operatornorm von  $L - \mathbb{1}$  ist daher gleich

$$\delta(L) = \sqrt{2} \cdot \max\{\sqrt{1 - \cos(t_1)}, \dots, \sqrt{1 - \cos(t_\ell)}\}. \quad (\text{C6.22})$$

Die untere Schranke (C6.21) des Abstands  $\delta(L)$  ergibt sich aus dieser Formel durch Betrachtung der Minimalpolynome der komplexen Eigenwerte der Abbildung  $L$ .

Die komplexen Eigenwerte der orthogonalen Abbildung  $L$  sind die Zahlen

$$\exp(it_1), \quad \exp(-it_1), \dots, \exp(it_\ell), \quad \exp(-it_\ell)$$

und möglicherweise 1. Jeder Eigenwert ist Nullstelle des charakteristischen Polynoms  $\chi_L(\lambda)$  von  $L$ ; da  $L$  ein Gitter invariant lässt, sind die Koeffizienten dieses Polynoms ganzzahlig. Sei nun  $\zeta_j$  einer der komplexen Eigenwerte ungleich 1 und sei  $m_j$  die Ordnung der Drehung  $L_j$ . Das normierte Minimalpolynom von  $\zeta_j$  im Polynomring  $\mathbb{Z}[\lambda]$  ist das  $m_j$ -te Kreisteilungspolynom  $\Phi_{m_j}$ . Da  $\Phi_{m_j}$  das charakteristische Polynom teilt, sind alle Nullstellen von  $\Phi_{m_j}$  Eigenwerte der orthogonalen Abbildung. Die Nullstellen von  $\Phi_{m_j}$  sind nun aber gerade die primitiven  $m_j$ -ten Einheitswurzeln,<sup>5</sup> das heisst die komplexen Zahlen der Form

$$\exp(i \cdot k \cdot (2\pi/m_j)) \quad \text{mit GGT}(k, m_j) = 1.$$

Falls  $m_j$  weder 2 noch 6 ist, garantiert Hilfssatz C6.21 unten, dass es eine primitive  $m_j$ -te Einheitswurzel mit  $\pi/2 \leq k/m_j \leq 3\pi/2$  gibt; der Cosinus der Winkels  $t_{k(j)}$  der entsprechenden Drehung  $L_{k(j)}$  ist dann 0 oder negativ, der Abstand  $\sqrt{2 \cdot (1 - \cos(t_{k(j)}))}$  daher mindestens  $\sqrt{2}$ . Ist die Ordnung  $m_j = 6$ , so beträgt der Abstand nur  $\sqrt{2 \cdot (1 - \cos(\pi/3))} = 1$ , ist hingegen  $m_j = 2$ , so beträgt er sogar 2.

Die Ordnung  $m$  der Abbildung  $L$  ist das kleinste gemeinschaftliche Vielfache der Ordnungen  $m_j$ . Falls alle  $m_j = 6$  sind, ist  $m = 6$  und der Abstand  $\delta(L)$  beträgt 1; in allen anderen Fällen ist ein  $m_j \neq 6$  und  $\delta(L)$  ist mindestens  $\sqrt{2}$ .  $\square$

**HILFSSATZ C6.21** *Sei  $m \geq$  eine Zahl  $m \in \mathbb{N} \setminus \{2, 6\}$ . Dann gibt es eine natürliche Zahl  $k$ , die zu  $m$  relativ prim ist und die Bedingung  $\frac{1}{4}m \leq k \leq \frac{3}{4}m$  erfüllt.*

*Proof.* Wir nehmen erst an,  $m$  sei gerade. Falls 4 die Zahl  $m$  teilt, setze man  $k = \frac{1}{2}m + 1$ , andernfalls sei  $k = \frac{1}{2}m + 2$ . In beiden Fällen sind  $k$  und  $m$  teilerfremd; im ersten Fall ist nämlich jeder Primteiler von  $m$  auch ein Primteiler von  $\frac{1}{2}m$ , folglich keiner von  $k = \frac{1}{2}m + 1$ ; im zweiten Fall ist jeder Primteiler von  $m$  entweder ein Teiler des ersten oder des zweiten Summanden von  $k$ , aber nicht von beiden. Die Zahl  $k$  ist offensichtlich grösser als  $\frac{1}{2}m$ ; falls sie von 4 geteilt wird, sind  $m \geq 4$  und daher  $k = \frac{1}{2}m + 1 \leq \frac{1}{2}m + \frac{1}{4}m$ , andernfalls sind  $m \geq 10$  und  $k = \frac{1}{2}m + 2 \leq \frac{3}{4}m$ .

Ist  $m$  ungerade, so unterscheiden wir wieder zwei Fälle: falls es eine Primzahl  $p$  gibt, deren Quadrat  $m$  teilt, so setze man  $k = \frac{p+1}{2} \cdot \frac{m}{p} - 1$ . Dann sind  $k$  und  $m$  teilerfremd und  $\frac{m}{2} < k = \frac{m}{2} + \frac{m}{2p} - 1 < \frac{m}{2} + \frac{m}{4}$ . Im anderen Fall ist  $m$  ein Produkt von  $f$  paarweise verschiedenen Primzahlen. Ist  $f = 1$ , so ist  $k = \frac{m-1}{2}$  relativ fremd zu  $m = p$  und  $\frac{m}{4} < \frac{m}{4} + \left(\frac{m}{4} - \frac{1}{2}\right) = k < \frac{m}{2}$ . Ist hingegen  $f > 1$ , so sei  $p$  der kleinste Primteiler von  $m$ . Setzt man  $k = \frac{p-1}{2} \cdot \frac{m}{p}$ , so gelten wiederum die Abschätzungen  $\frac{m}{4} < \frac{m}{4} + \left(\frac{m}{4} - \frac{m}{2p}\right) = k < \frac{m}{2}$ .  $\square$

<sup>5</sup>Siehe zum Beispiel [Ku91], p.180, Satz 13.7.

## C7 Endlichkeitssätze

In diesem Abschnitt wird der *zweite Satz von Bieberbach* (1910) bewiesen. Er behauptet, für jeden Euklidischen Vektorraum  $\mathbb{E}$  gebe es nur endlich viele affine Äquivalenzklassen Kristallographischer Gruppen.

Wenn man ein vollständiges Vertretersystem dieser affinen Klassen konstruieren will, braucht man detaillierte Informationen. In Unterabschnitt 7.1 wird gezeigt, dass die Ordnungen der endlichen Untergruppen der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$  uniform beschränkt sind. Mit Hilfe der Darstellungstheorie endlicher Gruppen wird daraus gefolgert, dass die Menge der *geometrischen* Kristallklassen endlich ist. Im Unterabschnitt 7.2 wird mit einem ganz anderen, geometrischen Argument nachgewiesen, dass die Anzahl der *arithmetischen* Klassen endlich ist. Daraus ergibt sich dann leicht, dass auch die Menge der affinen Äquivalenzklassen endlich ist (siehe Unterabschnitt 7.3).

\*\*\*

Wie zuvor bezeichnet  $\mathbb{E}$  einen Euklidischen Vektorraum  $(V, \langle -, - \rangle)$  der Dimension  $n$ . Wird von  $\mathbb{R}^n$  als Euklidischem Vektorraum gesprochen, so ist vorausgesetzt, dass der Vektorraum mit dem Standard-Skalarprodukt versehen worden ist. Die Vektoren der Standard-Basis von  $\mathbb{R}^n$  werden mit  $e_1, \dots, e_n$  bezeichnet.

Ist  $G$  eine kristallographische Gruppe von  $\mathbb{E}$ , so sei  $G_0$  ihre Punktgruppe,  $T(G)$  ihr Translationsnormalteiler und  $\Gamma(G)$  das Gitter der Translationsvektoren von  $T(G)$ .

### 7.1 Endlichkeit der Menge der geometrischen Kristallklassen

Die Endlichkeit der Menge der geometrischen Kristallklassen wird in zwei Schritten nachgewiesen. Zunächst wird gezeigt, dass es – bis auf Isomorphie – nur endlich viele Untergruppen der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$  gibt, die ein Gitter auf sich abbilden. Im zweiten Schritt benützt man die Darstellungstheorie der endlichen Gruppen. Diese Theorie garantiert, dass eine gegebene endliche Untergruppe  $H$  nur auf endlich viele verschiedene Arten als Untergruppe der  $O(\mathbb{E})$  dargestellt werden kann.

#### 7.1a Uniforme Schranken der Ordnungen von Punktgruppen

Nach Satz B4.7 in Nummer 4.1b ist die Automorphismengruppe jedes Gitters endlich. In der abschliessenden Bemerkung B4.8 von Nummer 4.1b wurde darauf hingewiesen, dass die Ordnungen der Automorphismengruppen aller Gitter eines festen Euklidischen Raumes uniform beschränkt sind. Die Existenz einer solchen Schranke ergibt sich aus einem verblüffenden Resultat von Hermann MINKOWSKI (1864–1909) (siehe die Arbeiten [Mi87a] und [Mi87b]):

**HAUPTSATZ C7.1** Seien  $\ell \geq 2$ ,  $n \geq 2$  und  $\eta_\ell: GL(n, \mathbb{Z}) \rightarrow GL(n, \mathbb{Z}_\ell)$  der Gruppenhomomorphismus, der durch den kanonischen Ringhomomorphismus  $\text{can}: \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}_\ell$  induziert wird. Ist  $F$  eine endliche Untergruppe von  $GL(n, \mathbb{Z})$ , so ist die Einschränkung von  $\eta_\ell$  auf  $F$  injektiv, es sei denn  $\ell$  sei gleich 2. Im Ausnahmefall ist der Durchschnitt  $F \cap \ker(\eta_\ell)$  eine elementar-abelsche 2-Gruppe, deren Ordnung  $2^n$  teilt.

*Proof.* Sei zunächst  $A \in GL(n, \mathbb{Z}) \setminus \{I_n\}$  eine Matrix, deren Ordnung eine Primzahl  $q$  ist und die im Kern von  $\eta_\ell$  liegt. Wir wollen zeigen, dass dann  $q$  und  $\ell$  beide gleich 2 sein müssen. Sei  $p$  eine Primzahl, die  $\ell$  teilt. Da  $A \in \ker(\eta_\ell)$  liegt, sind die Koeffizienten von  $A - I_n$  Vielfache der ganzen Zahl  $\ell$ , also auch von  $p$ ; sei  $m \geq 1$  der

grösste Exponent, für den es eine ganzzahlige Matrix  $R$  gibt, welche die Bedingung  $A = I_n + p^m \cdot R$  erfüllt. Nach Annahme ist  $A^q = I_n$ ; andererseits ist

$$A^q = (I_n + p^m \cdot R)^q = I_n + q \cdot p^m R + \binom{q}{2} p^{2m} \cdot R^2 + \dots + \binom{q}{q} p^{qm} \cdot R^q.$$

Löst man die Beziehung  $I_n = A^q = (I_n + p^m \cdot R)^q$  nach  $q \cdot p^m \cdot R$  auf, erhält man

$$-q \cdot p^m \cdot R = p^{2m} \cdot M \text{ mit } M = \binom{q}{2} R^2 + \binom{q}{3} p^m R^3 + \dots + \binom{q}{q} p^{(q-2)m} \cdot R^q. \quad (\text{C7.1})$$

Auf Grund der Maximaleigenschaft von  $m$  gibt es einen Koeffizienten der Matrix  $R$ , etwa  $R_{i,j}$ , der kein Vielfaches der Primzahl  $p$ , insbesondere also von 0 verschieden ist. Die vorangehende Beziehung zwischen Matrizen impliziert dann die skalare Gleichung

$$-q \cdot p^m \cdot R_{i,j} = p^{2m} \cdot M_{i,j};$$

sie kann nur gelten, falls  $q = p$  und  $m = 1$  ist. Die Gleichung (C7.1) vereinfacht sich daher zu

$$-R = \binom{p}{2} R^2 + \binom{p}{3} p R^3 + \dots + \binom{p}{p} p^{(p-2)} \cdot R^p.$$

Ist  $p \geq 3$ , so ist der Binomialkoeffizient  $\binom{p}{2} = p \cdot (p-1)/2$  ein Vielfaches von  $p$ , weshalb alle Koeffizienten der rechten Seite Vielfache von  $p$  sind. Da  $-R_{i,j}$  kein Vielfaches von  $p$  ist, kann dieser Fall nicht eintreten. Die Primzahl  $p = q$  ist also gleich 2.

Seien nun  $k \geq 2$  und  $A \in \text{GL}(n, \mathbb{Z})$  eine Lösung der Gleichung  $X^k = I_n$ . Ist  $\ell \geq 3$ , so gibt es eine ungerade Primzahl, die  $\ell$  teilt, oder  $\ell$  ist eine Potenz von 2 und daher ein Vielfaches von 4. Die vorangehende Rechnung zeigt, dass  $A = I_n$  sein muss, falls  $k$  eine Primzahl ist. Da  $k$  aber in jedem Fall ein Produkt von Primzahlen ist, etwa  $k = p_1 \cdot \dots \cdot p_{h-1} p_h$ , und  $A^k$  in der Form  $(A^{p_1 \cdot \dots \cdot p_{h-1}})^{p_h}$  geschrieben werden kann, ergibt sich daraus mit Induktion über  $h$ , dass für beliebiges  $k \geq 2$  die Matrix  $A$  gleich  $I_n$  sein muss.

Sei nun  $F$  eine endliche Untergruppe von  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ . Falls  $\ell \geq 3$  ist, so zeigen die vorangehenden Überlegungen, dass der Durchschnitt  $F \cap \ker(\eta_\ell)$  nur aus der Matrix  $I_n$  besteht, die Einschränkung von  $\eta_\ell$  auf  $F$  also injektiv ist. Ist hingegen  $\ell = 2$ , so zeigen sie, dass jede Matrix im  $F \cap \ker(\eta_\ell)$  die Ordnung 1 oder 2. Da der Durchschnitt  $F \cap \ker(\eta_\ell)$  eine Untergruppe ist, so lehrt die Rechnung

$$A \cdot B = (A \cdot B)^{-1} = B^{-1} \cdot A^{-1} = B \cdot A,$$

dass der Durchschnitt kommutativ sein muss. Nun gilt ganz allgemein, dass eine endliche kommutative Gruppe, deren Elemente Ordnung 2 oder 1 haben, isomorph einer Gruppe der Form  $\{\pm 1\} \times \{\pm 1\} \cdot \dots \cdot \{\pm 1\} = \{\pm 1\}^h$  ist und daher eine Zweierpotenz als Ordnung hat.<sup>6</sup> Aus einer Betrachtung über Eigenwerte folgt schliesslich, dass der Exponent  $h$  höchstens gleich der Dimension  $n$  ist.  $\square$

**KOROLLAR C7.2** *Sei  $p$  eine ungerade Primzahl. Jede endliche Untergruppe  $F$  von  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$  ist isomorph einer Untergruppe der Matrizen­gruppe  $\text{GL}(n, \mathbb{Z}_p)$ , welche die Ordnung*

$$g(n, p) = p \binom{n}{2} \cdot (p-1) \cdot (p^2-1) \cdot \dots \cdot (p^n-1) \quad (\text{C7.2})$$

*hat. Die Ordnung der Gruppe  $F$  teilt daher die Zahl  $g(n, p)$  für jede Primzahl  $p \geq 3$ , also auch deren grössten gemeinsamen Teiler.*

<sup>6</sup>Zum Beweis kann man den Struktursatz für endlich erzeugte abelsche Gruppen verwenden oder die Bemerkung, dass eine solche Gruppe als Vektorraum über den Körper  $\mathbb{F}_2 = \mathbb{Z}_2$  aufgefasst werden kann, deshalb eine Basis besitzt und zu einem Vektorraum der Form  $\mathbb{F}_2^h$  isomorph ist.

*Proof.* Wir betrachten die zusammengesetzte Abbildung

$$\eta_p \circ \hookrightarrow: F \hookrightarrow \mathrm{GL}(n, \mathbb{Z}) \rightarrow \mathrm{GL}(n, \mathbb{Z}_p).$$

Sie ist ein Homomorphismus, der nach Theorem C7.1 injektiv ist. Somit ist  $F$  isomorph einer Untergruppe der endlichen Matrizen­gruppe  $G_p = \mathrm{GL}(n, \mathbb{Z}_p)$  und teilt daher deren Ordnung. Um die Ordnung der Gruppe  $G_p$  zu finden, interpretieren wir ihre Elemente als Basen des Vektorraumes  $V = (\mathbb{F}_p)^n$ : für den ersten Vektor einer Basis von  $V$  gibt es  $p^n - 1$  Möglichkeiten, denn nur der Nullvektor ist nicht zugelassen. Der zweite Basisvektor darf kein Vielfaches des ersten Vektors sein, er gibt für ihn also  $p^n - p$  Möglichkeiten. Mit Induktion über  $n$  sieht man, dass die Ordnung der Gruppe  $G_p$  gleich

$$(p^n - 1) \cdot (p^n - p) \cdot (p^n - p^2) \cdots (p^n - p^{n-1}) = p^{\binom{n}{2}} \cdot (p - 1) \cdot (p^2 - 1) \cdots (p^{n-1} - 1)$$

ist. □

BEISPIELE C7.3 Um zu erkennen, wie gut die obere Schranke des Korollars ist, betrachten wir die folgende Tabelle; sie listet die Zahlen  $2^n \cdot g(n, 2)$  und  $g(n, p)$  für die Dimensionen 2, 3, 4, 5 und die Primzahlen 3, 5, sowie 7 auf. (Die grössten gemeinsamen Teiler sind jene von  $2^n \cdot g(n, 2)$ ,  $g(n, 3)$ ,  $g(n, 5)$  sowie  $g(n, 7)$ .)

$n$	2	3	4	5
$2^n \cdot g(n, 2)$	$2^2 \cdot 2 \cdot 3$	$2^3 \cdot 2^3 \cdot 3 \cdot 7$	$2^4 \cdot 2^6 \cdot 3^2 \cdot 5 \cdot 7$	$2^5 \cdot 2^{10} \cdot 3^2 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 31$
$g(n, 3)$	$2^4 \cdot 3$	$2^5 \cdot 3^3 \cdot 13$	$2^9 \cdot 3^6 \cdot 5 \cdot 13$	$2^{10} \cdot 3^{10} \cdot 5 \cdot 11^2 \cdot 13$
$g(n, 5)$	$2^5 \cdot 3 \cdot 5$	$2^7 \cdot 3 \cdot 5^3 \cdot 31$	$2^{11} \cdot 3^2 \cdot 5^6 \cdot 13 \cdot 31$	$2^{13} \cdot 3^2 \cdot 5^{10} \cdot 11 \cdot 13 \cdot 31 \cdot 71$
$g(n, 7)$			$2^{11} \cdot 3^5 \cdot 5^2 \cdot 7^6 \cdot 19$	$2^{12} \cdot 3^6 \cdot 5^2 \cdot 7^{10} \cdot 19 \cdot 2801$
ggT	$2^3 \cdot 3 = 24$	$2^5 \cdot 3 = 96$	$2^9 \cdot 3^2 \cdot 5 = 23\,040$	$2^{10} \cdot 3^2 \cdot 5 = 46\,080$

Tabelle C.1: Obere Schranken für die Dimensionen 2, 3, 4 und 5

In Unterabschnitt 9.1 werden die Automorphismengruppen der Gitter der Ebene untersucht; insbesondere wird dort gezeigt, dass die Ordnungen der Automorphismengruppen gleich 2, 4, 8 und 12 sind. Das kleinste gemeinschaftliche Vielfache dieser Zahlen ist 24; die obere Schranke 24 ist also optimal. In Dimension 3 kennen wir die Automorphismengruppen des primitiven und des flächen-zentrierten Gitters; diese Gruppen sind konjugiert in  $O(\mathbb{R}^3)$  und haben die Ordnung 48. In Unterabschnitt 10.2 werden wir sehen, dass die Ordnung der Automorphismengruppe jedes Gitters des 3-dimensionalen Raumes die Zahl 48 teilt; die obere Schranke 96 ist also sehr gut.

Gestützt auf die Erfahrungen mit  $n = 2$  und  $n = 3$  scheint die obere Schranke für Dimension 4, also  $23\,040 = 2^9 \cdot 3^2 \cdot 5$ , viel zu gross zu sein. Dem ist aber nicht so: nach Satz B4.20 hat die Automorphismengruppe eines innen­zentrierten kubischen Gitters die Ordnung  $1152 = 2^7 \cdot 3^2$ ; in  $\mathbb{E}^4$  gibt es auch Gitter, deren Automorphismengruppen die Ordnung  $240 = 2^4 \cdot 3 \cdot 5$  haben (siehe etwa [BNWb, Figur 1, p. 526]). Da das kleinste gemeinschaftliche Vielfache von 1152 und 240 gleich  $1152 \cdot 5 = 2^7 \cdot 3^2 \cdot 5$  ist, ist die obere Schranke  $2^9 \cdot 3^2 \cdot 5$  ebenfalls gut.

### 7.1b Endlichkeit der Menge der geometrischen Kristallklassen

Der Nachweis, dass die Menge  $\mathcal{G}_n$  der geometrischen Kristallklassen eines  $n$ -dimensionalen Euklidischen Vektorraumes endlich ist, erfolgt in drei Schritten. Zuerst geht man von

der Menge  $\mathcal{G}_n$  zur Menge  $\mathcal{R}_n$  über. Die Menge  $\mathcal{R}_n$  besteht aus den rationalen Klassen von endlichen Untergruppen der Matrizen­gruppe  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$ ; dabei werden zwei endliche Untergruppen  $F$  und  $F'$  *rational äquivalent* genannt, falls sie in  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Q})$  konjugiert sind.<sup>7</sup> Der Übergang wird durch Theorem C6.9 gerechtfertigt, welches besagt, dass die Zuordnung  $((\Gamma, H), \mathcal{B}) \mapsto H_{\mathcal{B}}$  eine Bijektion von der Menge  $\mathcal{G}_n$  auf die Menge  $\mathcal{R}_n$  induziert.

Für den zweiten Schritt wählt man eine Primzahl  $p \geq 3$ . Nach Korollar C7.2 ist jede endliche Untergruppe von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$  isomorph einer Untergruppe der Gruppe  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z}_p)$ . Da die Gruppe  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z}_p)$  endlich ist, enthält sie nur endlich viele Untergruppen; insbesondere gibt es nur endlich viele Isomorphietypen von Untergruppen. Sei

$$F_1, F_2, \dots, F_\ell$$

ein System von Vertretern dieser Isomorphietypen. Ist  $j$  einer der Indizes  $1, 2, \dots, \ell$ , so kann  $F_j$  isomorph einer Untergruppe von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$  ist; trifft dies zu, interessiert man sich für die Anzahl der rationalen Äquivalenzklassen, die eine zu  $F_j$  isomorphe Gruppe enthalten. Diese Anzahl findet man im dritten Schritt mit Hilfe der Darstellungstheorie; sie lehrt insbesondere, dass die Anzahl *endlich* ist. Somit ist  $\mathcal{R}_n$  als Vereinigung von  $\ell$  endlichen Mengen selbst endlich.

## 7.2 Endlichkeit der arithmetischen Kristallklassen

In diesem Unterabschnitt soll die Endlichkeit der Menge der arithmetischen Kristallklassen eines Euklidischen Raumes bewiesen werden, und zwar mit einem geometrischen Argument, das sich nicht auf die bereits gezeigte Endlichkeit der Menge der geometrischen Kristallklassen stützt. Es beruht auf einer neuen Idee, jener der Normalisierung von Gittern.

Die geometrische Vorgehensweise hat eine Kehrseite: die gewonnenen oberen Schranken der Anzahl der arithmetischen Klassen eines Euklidischen Vektorraumes sind selbst in sehr kleinen Dimensionen riesig gross. Es ist aber möglich, mit Hilfe von Theorem C7.5 und genaueren Untersuchungen zu praktisch verwertbaren Ergebnissen zu gelangen. (siehe Abschnitt D11).

### 7.2a Normalisierung von Gittern

Ich zeige zunächst, dass jedes Paar  $(\Gamma, H \subseteq \mathrm{Aut}(\Gamma))$  einem Paar  $(\Gamma', H' \subseteq \mathrm{Aut}(\Gamma'))$  arithmetisch äquivalent ist, dessen Gitter  $\Gamma'$  *normalisiert* ist. Dabei sind normalisierte Gitter wie folgt festgelegt:

**DEFINITION C7.4** Ein Gitter  $\Gamma$  von  $\mathbb{E}$  wird *normalisiert* genannt, wenn die Menge  $\mathcal{M}(\Gamma)$  der Vektoren kleinster Norm den Vektorraum erzeugt und die Norm der Vektoren von  $\mathcal{M}(\Gamma)$  gleich 1 ist.

**HAUPTSATZ C7.5** Für jedes Gitter  $\Gamma$  von  $\mathbb{E}$  gibt es eine selbst-adjungierte, positive lineare Abbildung  $P: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$ , welche die folgenden Eigenschaften aufweist:

- (i) Das Bild  $P(\Gamma)$  von  $\Gamma$  ist normalisiert.
- (ii)  $P$  kommutiert mit jedem Automorphismus des Gitters  $\Gamma$ .

<sup>7</sup>Siehe Unterabschnitt 6.3 .

(iii)  $\text{Aut}(\Gamma) \subseteq \text{Aut}(P(\Gamma))$ .

*Proof.* Seien  $m_1 = m(\Gamma)$  die kleinste Norm eines Vektors in  $\Gamma \setminus \{0\}$  und  $P_1$  die Streckung mit  $\lambda_1 = m_1^{-1}$ . Dann beträgt die Norm der kleinsten Vektoren des Bildgitters  $\Gamma_1 = P_1(\Gamma)$  gerade 1. Falls die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma_1)$  den ganzen Vektorraum  $\mathbb{E}$  aufspannt, hat  $P = P_1$  die Eigenschaften (i) bis (iii).

Andernfalls sei  $U$  der von  $\mathcal{M}(\Gamma_1)$  aufgespannte Unterraum und  $U^\perp$  das orthogonale Komplement von  $U$ . Wir konstruieren schrittweise selbst-adjungierte, positive lineare Abbildungen  $P_2, P_3, \dots, P_k$ , derart dass  $P = P_k \circ \dots \circ P_2 \circ P_1$  die Eigenschaften (i) bis (iii) aufweist. Die Abbildung  $P_2$  wird auf  $U$  die Identität sein und das Orthogonalkomplement so strecken, dass 1 immer noch die Länge der kleinsten Vektoren ist, dass aber neu ein Vektor ausserhalb  $U$  ebenfalls die Länge 1 hat. Um  $P_2$  zu finden, betrachten wir eine Schar  $(Q_t)_{t \in [0,1]}$  von selbst-adjungierten, positiven Operatoren, nämlich

$$Q_t(x) = x_{\parallel} + t \cdot x_{\perp} \in U \oplus U^\perp.$$

Da die Menge  $\mathcal{M}(\Gamma_1)$  unter  $\text{Aut}(\Gamma)$  invariant ist, sind auch der von ihr aufgespannte Unterraum  $U$  und sein orthogonales Komplement  $U^\perp$  unter der Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  invariant. Die Rechnung

$$(\varphi \circ Q_t)(x) = \varphi(x_{\parallel} + t \cdot x_{\perp}) = \varphi(x_{\parallel}) + t \cdot \varphi(x_{\perp}) = \varphi(x)_{\parallel} + t \cdot \varphi(x)_{\perp} = (Q_t \circ \varphi)(x),$$

gilt für jeden Vektor  $x \in \mathbb{E}$ , jeden Automorphismus  $\varphi \in \text{Aut}(\Gamma_1)$  und jede positive Zahl  $t$  und zeigt, dass jeder Operator  $Q_t$  mit jedem Automorphismus  $\varphi \in \text{Aut}(\Gamma_1)$  kommutiert.

Die Abbildung  $P_2$  wird einer der Operatoren der Schar  $(Q_t)_{t \in [0,1]}$  sein; nennen wir ihn  $Q_{t_*}$ . Um den Parameter  $t_*$  zu finden, betrachten wir für jeden Vektor  $v \in \Gamma_1 \setminus U$  die Funktion

$$g_v : t \mapsto \|Q_t(v)\|^2 = \|v_{\parallel}\|^2 + t^2 \cdot \|v_{\perp}\|^2;$$

sie wächst für auf dem Intervall  $[0, 1]$  streng monoton. Falls  $\|v_{\parallel}\| \geq 1$  ist, sind alle Werte von  $g_v$  grösser als 1. Wir betrachten daher den Zylinder

$$\mathcal{C} = \{v \in \Gamma_1 \mid \|v_{\parallel}\| < 1\};$$

er enthält den Nullvektor, aber auch andere Vektoren. Diese Behauptung ist sicher richtig, wenn der Durchschnitt  $\Gamma_1 \cap U^\perp$  nicht nur aus dem Nullvektor besteht. Im anderen Fall bildet die Projektion  $\pi_1 : x = x_{\parallel} + x_{\perp} \mapsto x_{\parallel}$  die frei-abelsche Gruppe  $\Gamma_1$  vom Rang  $\dim(\mathbb{E})$  injektiv in den Unterraum  $U$  ab. Da  $\dim(U)$  kleiner als  $\dim(\mathbb{E})$  ist, kann  $\pi(\Gamma_1)$  keine diskrete Untergruppe von  $U$  sein,<sup>8</sup> ist daher überall dicht in  $U$ , weshalb der Zylinder  $\mathcal{C}$  auch in diesem Fall Vektoren positiver Länge enthält.

Sei nun  $v \in \mathcal{C} \setminus \{0\}$ . Die Gleichung  $\|Q_t(v)\|^2 = 1$ , also  $\|v_{\parallel}\|^2 + t^2 \cdot \|v_{\perp}\|^2 = 1$ , hat die eindeutig bestimmte Lösung  $t(v) = (1/\|v_{\perp}\|) \cdot \sqrt{1 - \|v_{\perp}\|^2}$ ; sie ist kleiner als 1, denn die Norm von  $v$  ist grösser als 1. Als nächstes betrachten wir die Menge  $\{t(v) \mid v \in \mathcal{C} \setminus \{0\}\}$  und weisen nach, dass sie ein *Maximum* hat.

Seien nämlich  $\hat{v} \in \mathcal{C} \setminus \{0\}$  und  $s = t(\hat{v})$ . Sind  $v \in \mathcal{C}$  und  $\|v\|^2 > 1 + s^{-2}$ , so gilt für  $t \geq s$  die Rechnung

$$\|Q_t(v)\|^2 = \|v_{\parallel}\|^2 + t^2 \cdot \|v_{\perp}\|^2 \geq \|v_{\parallel}\|^2 + s^2 \cdot s^{-2} > 1$$

<sup>8</sup>Die Basen einer frei-abelschen Gruppe haben alle die gleiche Anzahl, genannt *Rang*.

Das Maximum  $t_*$  existiert nun, weil der Zylinder  $\mathcal{C}$  nur endliche viele Vektoren enthält, die in einer Kugel mit Radius  $\sqrt{1+s^{-2}}$  liegen.

Wir setzen nun  $P_2 = Q_{t_*}$  und  $\Gamma_2 = P_2(\Gamma_1)$ . Dann sind

$$\mathcal{M}(\Gamma_1) \subsetneq \mathcal{M}(\Gamma_2) \quad \text{und} \quad \text{Aut}(\Gamma_1) = P_2 \circ \text{Aut}(\Gamma_1) \circ P_2^{-1} \subseteq \text{Aut}(\Gamma_2)$$

und der von  $\mathcal{M}(\Gamma_2)$  aufgespannte Unterraum ist grösser als  $U_1 = U$ .

Das gegebene Argument kann wiederholt werden. Es liefert in  $k \leq \dim(\mathbb{E})$  Schritten ein normalisiertes Gitter  $\Gamma_k$  und selbst-adjungierte, positive lineare Abbildungen  $P_1, P_2, \dots, P_k$ . Der gesuchte Operator  $P$  ist dann die Zusammensetzung  $P = P_k \circ \dots \circ P_2 \circ P_1$ .  $\square$

**KOROLLAR C7.6** *Jedes Paar  $(\Gamma, H \subseteq \text{Aut}(\Gamma))$  ist arithmetisch äquivalent einem Paar  $(\Gamma', H)$ , dessen Gitter  $\Gamma'$  normalisiert ist.*

*Proof.* Nach Theorem C7.5 gibt es eine selbst-adjungierte positive lineare Abbildung  $P$ , die das Gitter  $\Gamma$  auf ein normalisiertes Gitter  $\Gamma'$  abbildet, und mit jedem Automorphismus von  $\Gamma$  kommutiert. Dann ist insbesondere  $H = L \circ H \circ L^{-1}$  eine Untergruppe der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$ , weshalb  $(\Gamma, H)$  und  $(L(\Gamma), L \circ H \circ L^{-1}) = (\Gamma', H)$  nach Definition arithmetisch äquivalent sind.  $\square$

**BEISPIELE C7.7** 1) Sei  $\Gamma'_n$  das innenzentrierte kubische Gitter  $\mathbb{Z}^n + \mathbb{Z} \cdot (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2})$ . Ist  $n = 3$ , so haben die Vektoren der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_3)$  die Länge  $\frac{1}{2} \cdot \sqrt{3}$ ; das Normalisierungsverfahren liefert das Gitter  $(2/\sqrt{3}) \cdot \Gamma'_3$ . Ist hingegen,  $n \geq 4$ , so ist das Gitter normalisiert. Für  $n > 4$  ist es das Standardbeispiel eines Gitters, das nicht von seiner Minimalmenge erzeugt wird.

2) Sei  $\Gamma$  ein Gitter, das von paarweise orthogonalen Vektoren  $b_1, b_2, \dots, b_n$  erzeugt wird, deren Länge strikt zunimmt. Das Normalisierungsverfahren des eben geführten Beweises konstruiert dann schrittweise Gitter  $\Gamma_1, \dots, \Gamma_n$ , die von den folgenden Basen erzeugt werden:

$$\begin{aligned} \Gamma_1: & (b_1/\|b_1\|, b_2/\|b_1\|, b_3/\|b_1\|, \dots, b_n/\|b_1\|) \\ \Gamma_2: & (b_1/\|b_1\|, b_2/\|b_2\|, b_3/\|b_2\|, \dots, b_n/\|b_2\|) \\ \Gamma_3: & (b_1/\|b_1\|, b_2/\|b_2\|, b_3/\|b_3\|, \dots, b_n/\|b_3\|) \\ & \vdots \\ \Gamma_n: & (b_1/\|b_1\|, b_2/\|b_2\|, b_3/\|b_3\|, \dots, b_n/\|b_n\|) \end{aligned}$$

Das normalisierte Gitter ist kubisch; die Automorphismengruppe vergrößert sich bei jedem Schritt.

### 7.2b Normen der Vektoren einer $\mathbb{Z}$ -Basis eines normalisierten Gitters

Nach Korollar C7.6 gibt es in jeder arithmetischen Kristallklasse Paare  $(\Gamma, H)$  mit einem normalisierten Gitter  $\Gamma$ . Will man einen Überblick über diese Klassen bekommen, kann man sich also auf Vertreter  $(\Gamma, H)$  beschränken, deren Gitter normalisiert ist. Die Minimalmenge eines normalisierten Gitters braucht das Gitter nicht zu erzeugen; das nächste Resultat zeigt aber, dass normalisierte Gitter  $\mathbb{Z}$ -Basen besitzen, deren Vektoren uniform beschränkte Normen haben.

HILFSSATZ C7.8 Jedes normalisierte Gitter  $\Gamma$  besitzt eine  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ , deren Vektoren die Bedingungen

$$\|b_j\| \leq \max\{1, \frac{1}{2} \cdot \sqrt{j}\} \text{ f\"ur } 1 \leq j \leq n \quad (\text{C7.3})$$

erf\"ullen.

*Proof.* Wir kombinieren das Argument, mit dem Vektorraumbasen in Untergruppen von  $\mathbb{E}$ , die  $\mathbb{E}$  aufspannen und diskret sind, konstruiert werden, und das Approximationsergebnis von Hilfssatz B4.16. Seien  $\mathcal{B}' = (b'_1, b'_2, \dots, b'_n)$  eine Vektorraum-Basis mit Elementen aus der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma)$ . Die Vektoren  $b'_j$  haben dann alle die L\"ange 1. Mit Hilfe von  $\mathcal{B}'$  definieren wir die Fahne von Unterr\"aumen

$$U_1 \subset U_2 \subset \dots \subset U_n = \mathbb{E} \quad \text{mit} \quad U_j = \mathbb{R} \cdot b'_1 + \dots + \mathbb{R} \cdot b'_j$$

und die Folge von Gittern

$$\Gamma_1 \subset \Gamma_2 \subset \dots \subset \Gamma_n = \Gamma, \quad \text{mit} \quad \Gamma_j = \Gamma \cap U_j.$$

Das Gitter  $\Gamma_1$  wird von  $b'_1$  erzeugt; wir setzen deshalb  $b_1 = b'_1$ .

Seien nun  $j \in \{1, 2, \dots, n-1\}$  und  $(b_1, b_2, \dots, b_j)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma_j$  in  $U_j$ . Seien  $U_j^\perp$  das Orthogonalkomplement von  $U_j$  in  $U_{j+1}$  und  $v = v_\parallel + v_\perp$  die Zerlegung eines Vektors in  $U_{j+1} = U_j \oplus U_j^\perp$ . Nach dem Beweis der Implikation (ii)  $\Rightarrow$  (i) von Theorem B4.4 gibt es einen Vektor in  $u \in \Gamma_{j+1} \setminus U_j$ , dessen Orthogonalkomponente  $u_\parallel$  minimale Norm hat; jeder Vektor mit dieser Eigenschaft bildet dann, zusammen mit den Vektoren  $b_1, b_2, \dots, b_j$ , eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma_{j+1}$ . Da der Vektor  $b'_{j+1}$  nach Konstruktion zu  $\Gamma_{j+1} \setminus U_j$  geh\"ort, treten zwei F\"alle auf: falls die Orthogonalkomponente  $(b'_{j+1})_\perp$  selbst minimale L\"ange hat, kann  $b'_{j+1}$  als Basisvektor  $b_{j+1}$  gew\"ahlt werden; der neue Basisvektor hat dann die L\"ange 1. Ist hingegen die L\"ange von  $(b'_{j+1})_\perp$  nicht minimal, so gibt es einen Vektor  $u \in \Gamma_{j+1} \setminus U_j$ , dessen Orthogonalkomponente  $u_\perp$  h\"ochstens  $\frac{1}{2}\|u_\perp\| \leq \frac{1}{2}$  betr\"agt, denn die Orthogonalkomponenten der Vektoren von  $\Gamma_{j+1}$  bilden eine unendlich-zyklische Gruppe (siehe Hilfssatz B4.6). Als n\"achstes approximieren wir die Parallelkomponente  $u_\parallel$  durch einen Vektor des Teilgitters  $\Gamma'_j = \mathbb{Z} \cdot b'_1 + \dots + \mathbb{Z} \cdot b'_j$  von  $\Gamma_j$ . Gem\"ass Hilfssatz B4.16 enth\"alt  $\Gamma'_j$  einen Vektor  $w$ , so dass

$$\|u_\parallel - w\| \leq \frac{1}{4} \cdot (\|b'_1\|^2 + \|b'_2\|^2 + \dots + \|b'_j\|^2) = \frac{1}{4} \cdot j$$

betr\"agt. Da  $w$  in  $\Gamma'_j$  liegt und  $\Gamma'_j$  ein Teilgitter des von den Vektoren  $b_1, \dots, b_j$  erzeugten Gitters  $\Gamma_j$  ist, erzeugen die Vektoren  $b_1, \dots, b_j$ , zusammen mit  $b_j = v - w$ , das Gitter  $\Gamma_{j+1}$ . Der neue Basisvektor  $b_{j+1}$  hat h\"ochstens die L\"ange  $\frac{1}{2} \cdot \sqrt{j+1}$ , denn

$$\begin{aligned} \|b_{j+1}\|^2 &= \|v - w\|^2 = \|(v - w)_\parallel\|^2 + \|(v - w)_\perp\|^2 \\ &= \|v_\parallel - w\|^2 + \|v_\perp\|^2 \leq \frac{1}{4} \cdot j + \frac{1}{4} = \left(\frac{1}{2} \cdot \sqrt{j+1}\right)^2. \end{aligned}$$

So fortfahrend findet man so die angek\"undigte Basis  $\mathcal{B}$ . □

### 7.2c Absch\"atzung der Koeffizienten der Automorphismen eines normalisierten Gitters

Nach Theorem C6.3 induziert die Zuordnung  $((\Gamma, H), \mathcal{B}) \mapsto H_{\mathcal{B}}$  eine Bijektion von der Menge  $\mathcal{A}_n$  der arithmetischen Kristallklassen eines  $n$ -dimensionalen Euklidischen

Vektorraumes  $\mathbb{E}$  auf die Menge der Konjugationsklassen von endlichen Untergruppen  $F$  von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$ . Um nachzuweisen, dass  $\mathcal{A}_n$  endlich ist, genügt es also zu beweisen, dass es in  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$  nur endlich viele Konjugationsklassen von endlichen Untergruppen gibt. Nun garantiert Korollar C7.2 zwar, dass die Ordnung der endlichen Untergruppen von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$  uniform beschränkt ist, das beweist aber noch nicht, dass es nur endlich viele Konjugationsklassen gibt. Wenn diese Behauptung nämlich zutrifft, gibt es eine obere Schranke für die Koeffizienten von Vertretern der endlich vielen Konjugationsklassen.

Ein erster Schritt auf dem Weg zu einer oberen Schranke ist

**SATZ C7.9** *Seien  $\Gamma$  ein normalisiertes Gitter von  $\mathbb{E}^n$ , und  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ . Dann wird jeder Automorphismus  $\varphi$  des Gitters  $\Gamma$  bezüglich  $\mathcal{B}$  durch eine Matrix  $\varphi_{\mathcal{B}}$  dargestellt, deren Koeffizienten die Abschätzung*

$$|(\varphi_{\mathcal{B}})_{j,k}| \leq \frac{\|b_k\|}{\|b_j\|} \cdot \frac{\|b_1\| \cdot \|b_2\| \cdots \|b_n\|}{|\det(b_1, \dots, b_n)|} \quad (\text{C7.4})$$

erfüllen. Die im zweiten Faktor auftretende Determinante kann ihrerseits durch

$$|\det(b_1, \dots, b_n)| \geq 2^{-n} \cdot \nu_n \quad (\text{C7.5})$$

nach unten abgeschätzt werden. Dabei bezeichnet  $\nu_n$  das Volumen der Einheitskugel des  $n$ -dimensionalen Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^n$ .

*Proof.* Die Eigenschaften der Determinantenfunktion rechtfertigen die Rechnung

$$\begin{aligned} \det(b_1, \dots, b_{j-1}, \varphi(b_k), b_{j+1}, \dots) &= \det(b_1, \dots, b_{j-1}, \sum_h (\varphi_{\mathcal{B}})_{h,k} b_h, b_{j+1}, \dots, b_n) \\ &= (\varphi_{\mathcal{B}})_{j,k} \cdot \det(b_1, \dots, b_{j-1}, b_j, b_{j+1}, \dots, b_n). \end{aligned}$$

Aus ihr ergibt sich  $(\varphi_{\mathcal{B}})_{j,k}$  zu

$$(\varphi_{\mathcal{B}})_{j,k} = \frac{\det(b_1, \dots, b_{j-1}, \varphi(b_k), b_{j+1}, \dots, b_n)}{\det(b_1, \dots, b_{j-1}, b_j, b_{j+1}, \dots, b_n)}. \quad (\text{C7.6})$$

Weil  $\varphi$  eine orthogonale Abbildung ist, lässt sich der Betrag des Zählers auf der rechten Seite durch

$$\|b_1\| \cdots \|b_{j-1}\| \cdot \|\varphi(b_k)\| \cdot \|b_{j+1}\| \cdots \|b_n\| = \frac{\|b_k\|}{\|b_j\|} \cdot \prod_h \|b_h\|$$

nach oben beschränken. Dies beweist Abschätzung (C7.4).

Der Betrag des Nenners auf der rechten Seite der Gleichung (C7.6) ist das Volumen des Parallelepipedes  $P$ , das von den Vektoren der  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}$  aufgespannt wird. Dieses Parallelepiped ist ein Fundamentalbereich der Wirkung des Gitters  $\Gamma$  auf dem Euklidischen Raum  $\mathbb{E}$ . Nun ist  $\Gamma$  aber ein normalisiertes Gitter; der Abstand zwischen zwei verschiedenen Gittervektoren beträgt also mindestens 1; zwei Kugeln vom Radius  $\frac{1}{2}$ , deren Mittelpunkte in verschiedenen Gitterpunkten liegen, treffen sich daher höchstens in einem Randpunkt. Folglich ist das Volumen des Parallelepipedes  $P$  mindestens so gross wie das Volumen einer Kugel vom Radius  $\frac{1}{2}$ , also mindestens  $(1/2^n) \cdot \nu_n$ .  $\square$

Aus Hilfssatz C7.8 und Satz C7.9 ergibt sich die angekündigte universelle Abschätzung der Koeffizienten der Matrizen  $\varphi_{\mathcal{B}}$ , welche die Automorphismen  $\varphi \in \mathrm{Aut}(\Gamma)$  in einer geeigneten  $\mathbb{Z}$ -Basis beschreiben. In den Dimensionen  $n \leq 4$  lässt sich diese Abschätzung aber deutlich verschärfen, wenn man Theorem B4.17 heranzieht. Man bekommt so

**KOROLLAR C7.10** Sei  $\Gamma_n$  ein normalisiertes Gitter eines  $n$ -dimensionalen Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^n$ . Falls  $n \leq 4$  ist, besitzt  $\Gamma_n$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis, bezüglich der jeder Automorphismus des Gitters durch eine Matrix dargestellt wird, deren Koeffizienten in  $\{-1, 0, 1\}$  liegen, es sei denn, dass  $n = 4$  und  $\Gamma_4$  ein innenzentriertes kubisches Gitter ist. Im Ausnahmefall hat  $\Gamma_4$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis, bezüglich der die Automorphismen des Gitters durch Matrizen beschrieben werden, deren Koeffizienten in  $\{-2, -1, 0, 1, 2\}$  liegen.

*Proof.* Weil  $\Gamma$  ein normalisiertes Gitter ist, erzeugt die Minimalmenge des Gitters den Vektorraum  $E^n$ . Es gibt folglich eine Minimalfolge  $\mathcal{F}$ , deren Elemente die Norm 1 haben.<sup>9</sup> Wir nehmen nun an,  $\Gamma_n$  sei nicht eines der Ausnahmegeritter. Dank Theorem B4.17 ist dann jede Minimalfolge von  $\Gamma_n$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis, insbesondere die Minimalfolge  $\mathcal{F} = (u_1, \dots, u_n)$ . Seien nun  $\varphi \in \text{Aut}(\Gamma_n)$  und  $a_{j,k}$  ein Koeffizient der Matrix  $A = \varphi_{\mathcal{F}}$ . Wir wollen zeigen, dass der Betrag des Koeffizienten  $a_{j,k}$  entweder 0 oder 1 ist. Dies ist klar, falls  $a_{j,k} = 0$  ist. Andernfalls ist die Folge

$$\mathcal{F}' = (b_1, \dots, b_{j-1}, \varphi(b_k), b_{j+1}, \dots, b_n)$$

eine Folge von linear unabhängigen Elementen der Norm 1, also eine Minimalfolge und daher eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis. Da aber auch  $\mathcal{F} = (u_1, \dots, u_{j-1}, u_j, u_{j+1}, \dots, u_n)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters ist, muss der Koeffizient von  $b_j$  in  $\varphi(b_k)$ , also  $a_{j,k}$ , entweder 1 oder  $-1$  sein.

Seien nun  $n = 4$  und  $\Gamma_4$  ein innenzentriertes kubisches Gitter. Dann enthält  $\mathcal{M}(\Gamma_4)$  eine orthonormierte Basis  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3, b_4)$ , die eine Minimalfolge ist; die Vektoren

$$b'_1 = b_1, \quad b'_2 = b_2, \quad b'_3 = b_3, \quad \text{und} \quad b'_4 = \frac{1}{2}(b_1 + b_2 + b_3 + b_4)$$

bilden dann eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma_4$ . Da die Determinante dieser Basis gleich  $\frac{1}{2}$  ist, lehrt Ungleichung (C7.9) in diesem Fall, dass die Koeffizienten der ganzzahligen Matrizen, welche die Automorphismen bezüglich der Basis  $\mathcal{B}'$  beschreiben, im Intervall  $[-2, 2]$  liegen.  $\square$

Nun zu den Dimensionen oberhalb 4. Es gilt

**KOROLLAR C7.11** Seien  $n > 4$  und  $\Gamma$  ein normalisiertes Gitter eines  $n$ -dimensionalen Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^n$ . Dann besitzt  $\Gamma$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis, bezüglich der jeder Automorphismus des Gitters durch eine Matrix  $A$  dargestellt wird, deren Koeffizienten Beträge  $|A_{j,k}|$  haben, die unterhalb der folgenden, universellen Schranke  $s_n$  liegen:

$$s_n = \frac{2^3}{v_n} \cdot \left( \sqrt{5} \cdot \sqrt{6} \cdots \sqrt{n-1} \right) \cdot n. \quad (\text{C7.7})$$

*Proof.* Nach Hilfssatz C7.8 besitzt das Gitter  $\Gamma$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ , deren erste 4 Vektoren die minimale Länge 1 haben, während sich die Vektoren  $b_j$  für  $j > 4$  durch  $\frac{1}{2} \cdot \sqrt{j}$  beschränken lassen. Für die Matrix eines Automorphismus  $\varphi \in \text{Aut}(\Gamma)$  liefert die Abschätzung (C7.4) daher die obere Schranke

$$|(\varphi_{\mathcal{B}})_{j,k}| \leq \frac{\|b_k\|}{\|b_j\|} \cdot \frac{\sqrt{5}/2 \cdot \sqrt{6}/2 \cdots \sqrt{n}/2}{|\det(b_1, \dots, b_n)|} \leq \frac{\sqrt{n}}{2} \cdot \frac{\sqrt{5}/2 \cdot \sqrt{6}/2 \cdots \sqrt{n}/2}{|\det(b_1, \dots, b_n)|}.$$

Die Schranke  $s_n$  ergibt sich aus ihr, indem man das Volumen  $|\det(b_1, \dots, b_n)|$  nach unten mittels der Ungleichung (C7.5) abschätzt.  $\square$

<sup>9</sup>Nach Punkt (iii) des Hilfssatzes B4.15 liegen dann die Elemente jeder Minimalfolge in  $\mathcal{M}(\Gamma_n)$ .

BEMERKUNG C7.12 Die Volumina der Einheitskugeln der Euklidischen Räume lassen sich mit Hilfe der Kreiszahl  $\pi$  ausdrücken; sie sind

$$\nu_{2m} = \frac{\pi^m}{m!} \text{ für } m \geq 1 \quad \text{und} \quad \nu_{2m+1} = \frac{2^{m+1} \cdot \pi^m}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m+1)} \text{ für } m \geq 0. \quad (\text{C7.8})$$

Für  $n = 5$  und  $n = 6$  betragen die Werte der universellen Schranken daher

$$s_5 = 2^3 \cdot \left( \frac{2^3 \cdot \pi^2}{1 \cdot 3 \cdot 5} \right)^{-1} \cdot 5 = 75/\pi^2 \approx 7.59, \quad s_6 = 2^3 \cdot \left( \frac{\pi^3}{3!} \right)^{-1} \cdot \sqrt{5} \cdot 6 = 8 \cdot 36/\pi^2 \approx 20.77.$$

### 7.2d Endlichkeit der Anzahl der arithmetischen Kristallklassen

Die Korollare C7.10 und C7.11 liefern eine grobe obere Schranken der Anzahlen der arithmetischen Kristallklassen; insbesondere implizieren sie

HAUPTSATZ C7.13 *Die Anzahl der arithmetischen Klassen jedes Euklidischen Raumes ist endlich.*

*Proof.* Sei  $\mathbb{E}^n$  ein Euklidischer Raum der Dimension  $n$ . Jedes Paar  $(\Gamma, H)$  – bestehend aus einem Gitter  $\Gamma$  von  $\mathbb{E}^n$  und einer Untergruppe  $H$  der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma)$  – ist nach Korollar C7.6 arithmetisch äquivalent einem Paar  $(\Gamma', H')$ , dessen Gitter  $\Gamma'$  normalisiert ist. Nach Hilfssatz C7.8 besitzt das Gitter  $\Gamma'$  deshalb eine  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}' = (b'_1, \dots, b'_n)$ , deren Vektoren uniform beschränkte Normen haben; genauer gilt

$$\|b'_j\| \leq \max\{1, \frac{1}{2} \cdot \sqrt{j}\} \text{ für } 1 \leq j \leq n.$$

Wird ein Automorphismus  $\varphi \in H'$  in der  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}'$  beschrieben, erhält man eine Matrix  $\varphi_{\mathcal{B}'}$ , deren Koeffizienten in einem endlichen Intervall der Form  $[-s_n, s_n] \cap \mathbb{Z}$  liegen; einen expliziten Wert für  $s_n$  liefern die Korollare C7.10 und C7.11. Sei  $\mathcal{E}_n$  die Menge aller Matrizen von  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ , deren Koeffizienten im Intervall  $[-s_n, s_n] \cap \mathbb{Z}$  liegen. Diese Menge ist riesen gross, aber endlich. Es bezeichne nun  $\mathcal{U}_n$  die Menge aller Untergruppen von  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ , die in der Menge  $\mathcal{E}_n$  enthalten sind; auch diese Menge ist endlich. Ihre Mächtigkeit ist eine obere Schranke für die Anzahl der arithmetischen Klassen des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^n$ : nach dem zuvor Bewiesenen gibt es nämlich für das Gitter  $\Gamma$  des Paares  $(\Gamma, H)$  eine Basis  $\mathcal{B}$ , derart dass die Untergruppe  $H_{\mathcal{B}}$  in  $\mathcal{E}_n$  enthalten ist. Sind  $(\tilde{\Gamma}, \tilde{H})$  ein zweites Paar und  $\tilde{\mathcal{B}}$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\tilde{\Gamma}$  mit  $\tilde{H}_{\tilde{\mathcal{B}}} = H_{\mathcal{B}}$ , so sind die Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\tilde{\Gamma}, \tilde{H})$  arithmetisch äquivalent (siehe Beweis von Theorem C6.3 auf Seite 72).  $\square$

## 7.3 Endlichkeit der Menge der affinen Äquivalenzklassen

In diesem Unterabschnitt wird der *zweite Bieberbachschen Satz* bewiesen. Er behauptet, in jedem Euklidischen Vektorraum  $\mathbb{E}$  gebe es nur endlich viele Isomorphietypen von Raumgruppen. Der Nachweis wird aber nicht mit der ursprünglichen Methode von Bieberbach geführt, sondern mit jener, die G. Frobenius 1911 vorgeschlagen hat ([Fr11b]). Sie zeigt, dass es sogar nur endlich viele affine Äquivalenzklassen kristallographischer Gruppen gibt. Noch bedeutender ist, dass diese Methode zu einem Algorithmus verfeinert werden kann, der es erlaubt, für jedes Paar  $(\Gamma, H \subseteq \text{Aut}(\Gamma))$

Vertreter  $G$  aller affinen Äquivalenzklassen zu finden, deren Paare  $(\Gamma(G), G_0)$  dem Paar  $(\Gamma, H \subseteq \text{Aut}(\Gamma))$  arithmetisch äquivalent sind.<sup>10</sup>

### 7.3a Algebraische Vorbemerkungen

Eine kristallographische Gruppe  $G$  eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  ist nach Definition B5.1 eine Untergruppe der Isometriegruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  von  $\mathbb{E}$ , deren Translationsuntergruppe  $T(G)$  die Eigenschaft aufweist, dass die Vektoren der Translationen in  $T(G)$  ein Gitter  $\Gamma(G)$  von  $\mathbb{E}$  bilden.

Jede Isometrie  $\psi$  von  $\mathbb{E}$  ist die Zusammensetzung  $\psi = \tau_\psi \circ \varphi_\psi$  der Translation  $\tau_\psi : x \mapsto x + v_\psi$  und der orthogonalen Abbildung  $\varphi_\psi = \tau_\psi^{-1} \circ \psi$  (siehe Unterabschnitt 3.1). Die Zuordnung  $\psi \mapsto (\psi(0), \varphi_\psi)$  liefert dann eine Bijektion  $\vartheta$  der Gruppe  $\text{Iso}(\mathbb{E})$  auf die Produktmenge  $\mathbb{E} \times \text{O}(\mathbb{E})$ ; diese Bijektion wird zu einem Isomorphismus von Gruppen, falls man auf der Produktmenge die Multiplikation (B3.11), also

$$(v, \varphi) \cdot (v', \varphi') = (v + \varphi(v'), \varphi \circ \varphi'), \quad (\text{C7.9})$$

einführt. Unter  $\vartheta$  entspricht die Gruppe  $G$  der Untergruppe  $\vartheta(G)$  des semi-direkten Produktes  $\mathbb{E} \rtimes \text{O}(\mathbb{E})$ . Der Durchschnitt  $\vartheta(G) \cap (\mathbb{E} \times \{\mathbb{1}\})$  ist das Gitter  $\Gamma(G) \times \{\mathbb{1}\}$ . Die Punktgruppe  $G_0$  lässt sich mit Hilfe von  $\vartheta(G)$  so beschreiben:

$$G_0 = \{\varphi \in \text{O}(\mathbb{E}) \mid \text{es gibt } v_\varphi \in \mathbb{E} \text{ mit } (v_\varphi, \varphi) \in \vartheta(G)\}.$$

Die Zuordnung  $(v, \varphi) \mapsto \varphi$  induziert einen surjektiven Homomorphismus von  $\vartheta(G)$  auf  $G_0$ . Wählt man für jede Abbildung  $\varphi \in G_0$  ein Urbild  $(v_\varphi, \varphi) \in \vartheta(G)$  erhält man eine injektive Abbildung  $s : G_0 \rightarrow \vartheta(G)$ , einen so genannten *Schnitt* der Projektion  $\vartheta(G) \rightarrow G_0$ . Dieser Schnitt ist im allgemeinen kein Homomorphismus; es gilt aber

**HILFSSATZ C7.14** *Ist  $s : G_0 \rightarrow \vartheta(G)$  ein Schnitt, so ist die Gruppe  $\vartheta(G)$  gleich*

$$G_s = \{(w, \mathbb{1}) \cdot s(\varphi) \mid (w, \varphi) \in \Gamma(G) \times G_0\}. \quad (\text{C7.10})$$

*Proof.* Da  $G' = \vartheta(G)$  eine Untergruppe von  $\mathbb{E} \rtimes \text{O}(\mathbb{E})$  ist und sowohl  $\Gamma(G) \times \{\mathbb{1}\}$  wie auch die Werte des Schnittes  $s$  in  $G'$  liegen, ist  $G_s$  in  $G'$  enthalten.

Sei nun  $(w, \varphi) \in G'$ . Dann gehört  $\varphi$  zur Punktgruppe  $G_0$ , weshalb  $(w, \varphi) \cdot s(\vartheta)^{-1}$  ein Element von  $G'$  ist. Die Rechnung

$$(w, \varphi) \cdot s(\vartheta)^{-1} = (w, \varphi) \cdot (-\varphi^{-1}(u_\varphi), \varphi) = (w - u_\varphi, \mathbb{1})$$

zeigt dann, dass  $(w, \varphi) \cdot s(\vartheta)^{-1}$  in  $\Gamma \times \{\mathbb{1}\}$  und daher  $(w, \varphi)$  in  $G_s$  liegt.  $\square$

### 7.3b Frobeniussche Kongruenzen

Hilfssatz C7.14 erlaubt es zu erkennen, worauf die Behauptung, es gebe nur endlich viele affine Äquivalenzklassen, hinausläuft. Jede kristallographische Gruppe  $G$  gibt Anlass zu einem Paar  $(\Gamma(G), G_0)$ ; affin äquivalente Gruppen  $G$  und  $G'$  liefern nach Hilfssatz B5.14 arithmetisch äquivalente Paare  $(\Gamma(G), G_0)$  und  $(\Gamma(G'), (G')_0)$ . Ist schliesslich  $(\Gamma(G), G_0)$  arithmetisch äquivalent zu einem Paar  $(\Gamma, H \subseteq \text{Aut}(\Gamma))$  und ist  $L : \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  eine lineare Bijektion, welche die Bedingungen  $\Gamma = L(\Gamma(G))$  und

<sup>10</sup>Erste Schritte auf diesen Algorithmus hin machte J. J. Burckhardt in [Bu34] (siehe auch [Bu47]); ausformuliert wurde der Algorithmus aber erst von H. Zassenhaus in [Za48].

$H = L \circ G_0 \circ L^{-1}$  erfüllt, so ist  $G' = L \circ G \circ L^{-1}$  eine kristallographische Gruppe, die affin äquivalent zur Gruppe  $G$  ist. Es genügt folglich zu beweisen, dass alle Gruppen  $G$ , deren Paar  $(\Gamma(G), G_0)$  mit einem festen Paar  $(\Gamma, H)$  übereinstimmt, nur in endlich vielen affinen Klassen liegen. Diese Einsicht legt es nahe, die folgenden Familie von Gruppen zu betrachten:

$$\mathcal{G}_{(\Gamma, H)} = \{G \subset \mathbb{E} \rtimes \mathrm{O}(\mathbb{E}) \mid \Gamma(G) = \Gamma \text{ und } G_0 = H\}. \quad (\text{C7.11})$$

Das erste Ziel ist eine Parametrisierung dieser Familie.

Seien  $G \in \mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  und  $s: H \rightarrow \mathbb{E} \times \mathrm{O}(\mathbb{E})$  ein Schnitt der Projektion  $G \rightarrow H$  mit  $G = G_s$ . Der Vektor  $u_\varphi$  mit  $s(\varphi) = (u_\varphi, \varphi)$  ist durch  $G$  nicht eindeutig festgelegt; die Gleichung  $G = G_s$ , also

$$G = \{(w + u_\varphi, \varphi) \mid (u, \varphi) \in \Gamma \times H\},$$

zeigt aber, dass jeder andere Vektor die Form  $w + u_\varphi$  mit  $w \in \Gamma$  hat. Da  $G$  nicht nur eine Teilmenge von  $\mathrm{Iso}(\mathbb{E})$ , sondern eine Untergruppe ist, gehört mit den Paaren  $(u_\varphi, \varphi)$  und  $(u_{\varphi'}, \varphi')$  auch ihr Produkt

$$(u_\varphi, \varphi) \cdot (u_{\varphi'}, \varphi') = (u_\varphi + \varphi(u_{\varphi'}), \varphi \circ \varphi')$$

zu  $G$ . Dieses Produkt ist nun aber genau dann ein Element von  $G$ , wenn der Vektor  $u_\varphi + \varphi(u_{\varphi'})$  in der Nebenklasse  $\Gamma + u_{\varphi \circ \varphi'}$  liegt. Folglich muss die Funktion  $\varphi \mapsto u_\varphi$  die Kongruenzen

$$u_\varphi + \varphi(u_{\varphi'}) \equiv u_{\varphi \circ \varphi'} \pmod{\Gamma} \quad (\text{C7.12})$$

für alle Paare  $(\varphi, \varphi') \in H^2$  erfüllen. Diese Kongruenzen untersuchte Frobenius in der Arbeit [Fr11b]; man nennt sie deshalb *Frobeniussche Kongruenzen*.

Seien umgekehrt  $\varphi \mapsto u_\varphi$  eine Funktion von  $H$  mit Werten in  $\mathbb{E}$ , welche die Frobeniusschen Kongruenzen erfüllt, und

$$G' = \{(w + u_\varphi, \varphi) \mid (u, \varphi) \in \Gamma \times H\}. \quad (\text{C7.13})$$

Aus den Frobeniusschen Kongruenzen folgt dann als erstes, dass  $G'$  unter Produkten abgeschlossen. Wählt man in den Kongruenzen (C7.12) die Abbildungen  $\varphi$  und  $\varphi'$  als Identität, erkennt man weiter, dass  $u_{\mathbb{1}}$  in  $\Gamma$  liegt, weshalb  $G'$  das neutrale Element  $(0, \mathbb{1})$  der Gruppe  $\mathbb{E} \rtimes \mathrm{O}(\mathbb{E})$  enthält. Wählt man in den Kongruenzen  $\varphi = (\varphi')^{-1}$ , sieht man, dass die Vektoren  $u_{(\varphi')^{-1}}$  und  $-(\varphi')^{-1}(u_{\varphi'})$  kongruent sind. Dies impliziert, dass mit  $(w + u_{\varphi'}, \varphi')$  auch das inverse Element

$$(w + u_{\varphi'}, \varphi')^{-1} = (-(\varphi')^{-1}(w) - (\varphi')^{-1}(u_{\varphi'}), \varphi'^{-1})$$

in  $G'$  liegt. Somit ist  $G'$  eine Untergruppe von  $\mathbb{E} \rtimes \mathrm{O}(\mathbb{E})$ . Da, wie wir soeben gesehen haben,  $u_{\mathbb{1}}$  in  $\Gamma$  liegt, ist  $\Gamma(G')$  gleich dem Gitter  $\Gamma$ . Da auch die Gleichung  $(G')_0 = H$  richtig ist, gehört  $G'$  zur Familie  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$ . Insgesamt gilt deshalb der

**HILFSSATZ C7.15** *Die Konstruktion (C7.13) definiert eine Parametrisierung der Familie  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  durch die Lösungen  $\varphi \mapsto u_\varphi$  der Frobeniusschen Kongruenzen (C7.12). Zwei Lösungen  $\varphi \mapsto u_\varphi$  und  $\psi \mapsto u'_\psi$  sind dabei als gleich zu betrachten, wenn  $u_\varphi$  und  $u'_\psi$  für jedes Element  $\varphi \in H$  kongruent modulo  $\Gamma$  sind.*

## 7.3c Beweis der Endlichkeit der Menge der affinen Äquivalenzklassen

Hilfssatz C7.15 parametrisiert die Familie  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$ ; wir interessieren uns aber nicht so sehr für diese Familie sondern für die Menge der affinen Klassen von kristallographischen Gruppen, die  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  schneiden, das heisst, mit ihr einen nicht-leeren Durchschnitt haben. Diese Klassen findet man am Besten in zwei Schritten. Im ersten konjugiert man die Gruppen  $G \in \mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  nur mit Translationen; dies führt auf eine Äquivalenzrelation, welche die affine Äquivalenz verfeinert und *Translationsäquivalenz* genannt wird. Danach untersucht man die Auswirkung des Konjugierens der Gruppen in  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  unter linearen Transformationen.

Die Rechnung  $(w, \mathbb{1}) \cdot (v, \varphi) \cdot (w, \mathbb{1})^{-1} = (v + (\mathbb{1} - \varphi)(w), \varphi)$  zeigt, dass Konjugation mit der Translation  $\tau_w: x \mapsto x + w$  die Menge  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  in sich abbildet, und dass die Gruppe  $G \in \mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  mit der Parametrisierung  $\varphi \mapsto u_\varphi$  dabei übergeht in die Gruppe  $G'$  mit der Parametrisierung

$$\varphi \mapsto u'_\varphi = u_\varphi + (\mathbb{1} - \varphi)(w). \quad (\text{C7.14})$$

Frobenius gelang es aus dieser Transformationsformel zu folgern, dass  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  aus endlich vielen Translationsklassen zusammengesetzt ist. Sei nämlich  $\varphi \mapsto u_\varphi$  eine Funktion, welche die Kongruenzen (C7.12) erfüllt. Summiert man diese Kongruenzen für festes  $\varphi$  über alle  $\varphi' \in H$ , bekommt man die Kongruenz

$$\text{card}(H) \cdot u_\varphi + \varphi \left( \sum_{\varphi' \in H} u_{\varphi'} \right) \equiv \sum_{\varphi' \in H} u_{\varphi \circ \varphi'} \pmod{\Gamma}$$

Nun durchläuft mit  $\varphi'$  auch  $\varphi \circ \varphi'$  alle Elemente von  $H$ . Setzt man also  $h = \text{card}(H)$  und  $w = \frac{1}{h} \sum_{\varphi' \in H} u_{\varphi'}$ , so zeigt obige Summierung, dass der Vektor

$$h \cdot u'_\varphi = h \cdot v_\varphi - (\mathbb{1} - \varphi)(h \cdot w) = h \cdot (v_\varphi - (\mathbb{1} - \varphi)(w)) \quad (\text{C7.15})$$

für jedes  $\varphi \in H$  kongruent Null ist, d. h. in  $\Gamma$  liegt. Die Werte  $u'_\varphi$  selbst liegen folglich in  $\frac{1}{h}\Gamma = \{\frac{1}{h}v \mid v \in \Gamma\}$ . Sei nun  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ . Dann ist jeder Vektor  $u'_\varphi$  eine Linearkombination der Form  $\sum_\ell m_\ell/h \cdot b_\ell$  mit ganzzahligen Koeffizienten  $m_\ell$ . Da es bei der Parametrisierung der Menge  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  nur auf Werte modulo  $\Gamma$  ankommt, kann man die Zahlen  $m_\ell$  so abändern, dass sie alle in der endlichen Menge  $\{0, 1, 2, \dots, h-1\}$  liegen, die Frobeniusschen Kongruenzen aber weiterhin gelten.

Diese Überlegungen zeigen, dass es in jeder Translationsklasse von  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  eine Gruppe  $G'$  gibt, die durch eine Funktion  $\varphi \mapsto u'_\varphi$  parametrisiert wird, deren Werte in einer *a priori* bekannten Menge von  $h^n$  Elementen liegen, weshalb es höchstens  $(h^n)^h$  Translationsklassen geben kann. Diese Schranke lässt sich mit einer einfachen Zusatzüberlegung nochmals verbessern: die Wahlen der Vektoren

$$u'_\varphi \in \left\{ \left( \frac{\ell_1}{h} \cdot b_1 + \dots + \frac{\ell_n}{h} \cdot b_n \right) \mid 0 \leq \ell_j < h \right\}$$

sollen zu einer Funktion  $\varphi \mapsto u'_\varphi$  führen, welche die Frobeniusschen Kongruenzen erfüllt. Dann können aber nur die Werte auf einem Erzeugendensystem vorgegeben werden. Dies beweist

**SATZ C7.16** *Seien  $\Gamma$  ein Gitter von  $\mathbb{E}^n$  und  $H \subseteq \text{Aut}(\Gamma)$  eine Untergruppe, die von  $d$  Elementen erzeugt wird. Dann besteht  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  aus höchstens  $\text{card}(H)^{n \cdot d}$  Translationsklassen.*

Kombiniert man obigen Satz mit Theorem C7.13 erhält man ein Ergebnis, das G. Frobenius 1911 erstmals erzielte. Ein Jahr später zeigte dann Bieberbach, dass es eine Konsequenz des Resultates ist, das er in [Bi11a] bewiesen und in seiner Ankündigung [Bi10] von 1910 als zweiten Satz bezeichnet hatte.

**HAUPTSATZ C7.17** *Die Menge der affinen Äquivalenzklassen von kristallographischen Gruppen eines Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$  ist endlich.*

### 7.3d Explizite Schranken der Anzahl der affinen Klassen

In dieser Nummer wird eine explizite obere Schranke der Anzahl der affinen Äquivalenzklassen eines Euklidischen Vektorraumes der Dimension  $n$  erarbeitet, die nur von folgenden Parametern abhängt:

$h_n$ : obere Schranke der Ordnung einer endlichen Untergruppe von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z}_3)$

$\gamma_n$ : obere Schranke der minimalen Erzeugendenzahl einer endlichen Untergruppe von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z}_3)$

$\sigma_n$ : obere Schranke des Absolutbetrags  $|A_{j,k}|$  der Koeffizienten der Matrizen, welche die Automorphismen eines normalisierten Gitters in einer gut gewählten Basis beschreiben.

Die Existenz solcher Schranken ergibt sich aus Ergebnissen des Abschnittes C7: Korollar C7.2 sagt, dass die Ordnung jeder endlichen Untergruppe von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$  die Ordnung  $g(n, 3)$  der endlichen Gruppe  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z}_3)$  teilt; es ist

$$g(n, 3) = 3^{\binom{n}{2}} \cdot (3 - 1) \cdot (3^2 - 1) \cdots (3^{n-1} - 1).$$

Da die Ordnung einer endlichen Gruppe die minimale Anzahl der Erzeugenden nach oben beschränkt, ist die Existenz von  $\gamma_n$  durch jene von  $h_n$  gesichert. Eine bessere Schranke ergibt sich aus der Beobachtung, dass die Anzahl der Primfaktoren der Ordnung einer endlichen Gruppe  $F$  eine obere Schranke der minimalen Anzahl der Erzeugenden liefert: ist nämlich  $s_1, \dots, s_m$  ein minimales Erzeugendensystem von  $F$ , so ist die Ordnung der Untergruppe  $\mathrm{gp}(\{s_1, \dots, s_k\})$  ein echter Teiler der Ordnung der Untergruppe  $\mathrm{gp}(\{s_1, \dots, s_k, s_{k+1}\})$ . Insbesondere kann man für  $\gamma_n$  die Anzahl der Primfaktoren von  $g(n, 3)$  nehmen.

Der Beweis der Existenz von  $\sigma_n$  stützt sich auf die Resultate des Unterabschnittes 7.2, insbesondere auf Theorem C7.5 sowie die Korollare C7.10 und C7.11. Sei  $H$  eine Untergruppe der Automorphismen eines Gitters  $\Gamma$  von  $\mathbb{E}^n$ . Normalisiert man  $\Gamma$  mit dem Verfahren, das im Beweis von Theorem C7.5 angewandt wird, erhält man ein Gitter  $\Gamma'$ , dessen Automorphismengruppe  $\mathrm{Aut}(\Gamma')$  die Gruppe  $H$  umfasst. Nach den Korollaren C7.10 und C7.11 besitzt das Gitter  $\Gamma'$  dann eine  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}'$ , in der alle Automorphismen von  $\Gamma'$ , also auch jene der Untergruppe  $H$ , durch Matrizen beschrieben werden, deren Koeffizienten in einem uniform beschränkten Intervall  $[-s_n, s_n]$  liegen.

**BEISPIEL C7.18** In Tabelle C.2 sind obere Schranken  $h_n$ ,  $\gamma_n$  und  $\sigma_n$  für die Dimensionen 2, 3 und 4 zusammengestellt. Die oberen Schranken  $h_n$  sind aus Tabelle C.1 übernommen worden; die Primfaktorzerlegung dieser Schranken liefern dann die oberen Schranken  $\gamma_n$ . Die Werte für  $\sigma_n$  ergeben sich aus Korollar C7.10.

$n$	2	3	4
$h_n$	$2^3 \cdot 3 = 24$	$2^5 \cdot 3 = 96$	$2^9 \cdot 3^2 \cdot 5 = 23\,040$
$\gamma_n$	4	6	12
$\sigma_n$	1	1	2

Tabelle C.2: Obere Schranken für die Dimensionen 2, 3 und 4

Nach diesen Vorbereitungen macht das Auffinden einer expliziten Schranke für die Anzahl der affinen Äquivalenzklassen keine Schwierigkeiten mehr. Gemäss Theorem C6.3 induziert die Zuordnung  $((\Gamma, H), \mathcal{B}) \mapsto H_{\mathcal{B}}$  eine Bijektion von der Menge  $\mathcal{A}_n$  der arithmetischen Klassen auf die Menge der Konjugationsklassen der endlichen Untergruppen von  $\mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$ . Jede dieser Konjugationsklassen enthält einen Vertreter  $F$ , dessen Matrizen Koeffizienten haben, die im Intervall  $\mathbb{Z} \cap [-\sigma, \sigma]$  liegen. Weil höchstens  $(2\sigma_n + 1)^{n^2}$  Matrizen diese Bedingung erfüllen und  $F$  von höchstens  $\gamma_n$  Elementen erzeugt wird, gilt als erstes die Abschätzung

$$\mathrm{card}(\mathcal{A}_n) \leq \left( (2\sigma_n + 1)^{n^2} \right)^{\gamma_n} = (2\sigma_n + 1)^{n^2 \cdot \gamma_n}.$$

Multipliziert man die rechte Seite dieser Abschätzung mit der Schranke, welche der Satz C7.16 liefert, erhält man eine obere Schranke  $\alpha_n$  der Anzahl der affinen Äquivalenzklassen und zwar

$$\alpha_n = h_n^{n \cdot \gamma_n} \cdot (2\sigma_n + 1)^{n^2 \cdot \gamma_n} = (h_n \cdot (2\sigma_n + 1)^n)^{n \cdot \gamma_n}. \quad (\text{C7.16})$$

Setzt man in diese Formel die in Tabelle C.2 wiedergegebenen Werte der Parameter  $h_n$ ,  $\sigma_n$  und  $\gamma_n$  ein, kommt man zu den Zahlen

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= (24 \cdot 3^2)^{2 \cdot 4} \approx 4.7 \cdot 10^{18}, \\ \alpha_3 &= (96 \cdot 3^3)^{3 \cdot 6} \approx 2.8 \cdot 10^{61}, \\ \alpha_4 &= (5760 \cdot 5^4)^{4 \cdot 12} \approx 4.0 \cdot 10^{343}. \end{aligned}$$

Diese Zahlen sind unzweifelhaft explizite Schranken; verglichen mit den genauen Abzählen, also 17, 219 und 4783, sie sind aber alle irreführend, da viel zu gross.

## 7.4 Dritter Bieberbachscher Satz

Ludwig Bieberbach bewies in seiner Arbeit [Bi10] die Endlichkeit der Menge der affinen Äquivalenzklassen der kristallographischen Gruppen eines Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}$  nur in einer abgeschwächten Form: *er zeigte, dass die Anzahl der Isomorphietypen dieser Gruppen endlich ist.* Wenig später wies Georg Frobenius in [Fr11b] darauf hin, dass die Einteilung der kristallographischen Gruppen in affine Äquivalenzklassen der Problemstellung der Kristallographen besser angepasst ist als jene in Isomorphieklassen; er zeigte mit Hilfe der Überlegungen, die in den Nummern 7.3b und 7.3c ausgeführt wurden, dass auch die Menge der affinen Äquivalenzklassen endlich ist. Wieder ein Jahr später bewies Bieberbach in [Bi12] das überraschende Resultat, dass zwei isomorphe kristallographische Gruppen automatisch affin äquivalent sind <sup>11</sup>

**HAUPTSATZ C7.19** *Seien  $G_1$  eine kristallographische Gruppe in  $\text{Iso}(\mathbb{E}^1)$  und  $G_2$  eine kristallographische Gruppe in  $\text{Iso}(\mathbb{E}^2)$ , die (als abstrakte Gruppen) isomorph sind. Dann haben die Euklidischen Vektorräume  $\mathbb{E}^1$  und  $\mathbb{E}^2$  die gleiche Dimension und es gibt eine bijektive affine Abbildung  $\alpha: \mathbb{E}_1 \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}_2$ , welche die Gleichung*

$$G_2 = \alpha \circ G_1 \circ \alpha^{-1} \quad (\text{C7.17})$$

*richtig macht.*

*Proof.* Die affine Abbildung  $\alpha = \tau \circ L$  wird in zwei Schritten gewonnen.

*Konstruktion der linearen Abbildung  $L$ .* Nach Annahme sind die Gruppen  $G_1$  und  $G_2$  isomorph; sei  $f_1: G_1 \xrightarrow{\sim} G_2$  ein Isomorphismus von Gruppen. Nach Korollar B5.5 bildet  $f_1$  den Translationsnormalteiler  $T(G_1)$  von  $G_1$  auf den Translationsnormalteiler  $T(G_2)$  von  $G_2$  ab; seien  $\Gamma_1$  das Gitter der Translationsvektoren von  $G_1$  und  $\mu_1: \Gamma_1 \xrightarrow{\sim} T(G_1)$  die Abbildung, die dem Vektor  $v$  die Translation  $\tau_v$  zuordnet. Seien  $\Gamma_2$  und  $\mu_2$  analog definiert. dann gibt es Homomorphismen  $\lambda_1: \Gamma_1 \rightarrow \Gamma_2$  und  $\bar{f}_1: G_{1,0} \rightarrow G_{2,0}$ , die das Diagramm

$$\begin{array}{ccccccc} \Gamma_1 & \xrightarrow{\mu_1} & T(G_1) & \xrightarrow{\hookrightarrow} & G_1 & \longrightarrow & G_{1,0} \\ \downarrow \lambda & & \downarrow f_1|_{T(G_1)} & & \downarrow f_1 & & \downarrow \bar{f}_1 \\ \Gamma_2 & \xrightarrow{\mu_2} & T(G_2) & \xrightarrow{\hookrightarrow} & G_2 & \longrightarrow & G_{2,0} \end{array} \quad (\text{C7.18})$$

kommutativ machen. Ist  $\mathcal{B}_1$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma_1$ , so ist  $\mathcal{B}_1$  eine Basis des Vektorraumes  $E_1$ ; daher kann  $\lambda_1$  zu einer linearen Abbildung  $L_1: E_1 \rightarrow E_2$  fortgesetzt werden. Die lineare Abbildung  $L_1$  ist bijektiv; denn der Gruppenhomomorphismus  $f_1$  ist bijektiv, weshalb Einschränken von  $f_1|_{T(G_1)} = f_1|_{T(G_1)}$  auf den Translationsnormalteiler  $T(G_2)$  erst einen Homomorphismus  $f_1|_{T(G_2)}$  und dann einen Homomorphismus  $\lambda_2: \Gamma_2 \rightarrow \Gamma_1$  liefert. Da  $\Gamma_2$  eine Basis  $\mathcal{B}_2$  von  $E_2$  enthält, kann dieser Homomorphismus  $\lambda_2$  zu einer linearen Abbildung  $L_2: E_2 \rightarrow E_1$  fortgesetzt werden. Wie man dann leicht sieht, ist  $L_2$  die inverse Abbildung von  $L_1$ .

Wir ersetzen nun  $G_1$  durch die Gruppe  $G = L_1 \circ G_1 \circ L_1^{-1}$  und den Isomorphismus  $f_1$  durch die Zusammensetzung

$$f = (\varphi \mapsto f_1(L^{-1} \circ \varphi \circ L)).$$

<sup>11</sup>Die Umkehrung dieser Aussage gilt auch, ist aber offensichtlich.

Die Abbildung  $f$  ist ein Homomorphismus von der kristallographischen Gruppe  $G$  auf die kristallographische Gruppe  $G_2$ , welche auf dem Normalteiler  $T(G)$  die Identität ist. Folglich haben  $G$  und  $G_2$  den gleichen Translationsnormalteiler  $T(G)$  und das gleiche Gitter  $\Gamma = \Gamma_2$ . Daraus folgt, dass  $G$  und  $G_2$  die gleiche Punktgruppe haben: ist nämlich  $\varphi \in G_0$ , so gibt es einen Vektor  $u$ , so dass die Komposition  $\tau_u \circ \varphi$  in  $G$  liegt. Für jeden Translationsvektor  $v \in \Gamma$  gilt dann die Rechnung

$$\begin{aligned}\tau_{\varphi(v)} &= f(\tau_{\varphi(v)}) = f((\tau_u \circ \varphi) \circ \tau_v \circ (\tau_u \circ \varphi)^{-1}) \\ &= f(\tau_u \circ \varphi) \circ T(\tau_v) \circ f(\tau_u \circ \varphi)^{-1} = f\left(\tau_{\overline{f}(\varphi)(v)}\right) = \tau_{\overline{f}(\varphi)(v)}.\end{aligned}$$

Sie zeigt, dass  $\varphi$  und  $\overline{f}(\varphi)$  übereinstimmen. Das folgende kommutative Diagramm fasst den gegenwärtigen Erkenntnisstand zusammen:

$$\begin{array}{ccccccc} \Gamma & \xrightarrow{\mu} & T(G) & \xrightarrow{\hookrightarrow} & G & \longrightarrow & G_0 \\ \downarrow \mathbb{1}_\Gamma & & \downarrow \mathbb{1}_{T(G)} & & \downarrow f & & \downarrow \mathbb{1}_{G_0} \\ \Gamma_2 & \xrightarrow{\mu_2} & T(G_2) & \xrightarrow{\hookrightarrow} & G_2 & \longrightarrow & G_{2,0} \end{array} \quad (\text{C7.19})$$

*Konstruktion der Translation  $\tau$ .* Das Diagramm (C7.19) drückt insbesondere aus, dass die Gruppen  $G$  und  $G_2$  beide  $\Gamma$  als Translationsgitter und  $G_0$  als Punktgruppe haben. Nach Definition (C7.11) liegen ihre Bilder  $\eta(G)$  und  $\eta(G_2)$  daher beide in der Familie  $\mathcal{G}_{(\Gamma, G_0)}$ ; dabei bezeichnet  $\eta$  jenen Isomorphismus von  $\text{Iso}(\mathbb{E}_2)$  auf das semidirekte Produkt  $\mathbb{E}_2 \rtimes \text{O}(E_2)$ , der die Isometrie  $\tau_u \circ \varphi$  auf das Paar  $(u, \varphi)$  abbildet. Nach Hilfssatz C7.15 gibt die Gruppe  $\eta(G)$  Anlass zu einer Lösung der Frobeniusschen Kongruenzen (C7.12); es gibt also eine Funktion  $\gamma: G_0^2 \rightarrow \Gamma$ , welche die Gleichung

$$(\gamma(\varphi, \varphi'), \mathbb{1}) \cdot (u_{\varphi \circ \varphi'}, \varphi \circ \varphi') = (u_\varphi, \varphi) \cdot (u_{\varphi'}, \varphi') \quad (\text{C7.20})$$

für jedes Paar  $(\varphi, \varphi') \in G_0^2$  richtig macht. Der erste Faktor der linken Seite dieser Gleichungen liegt im Normalteiler  $\mathcal{V}(T(G))$ ; wendet man den Homomorphismus  $f$  auf diese Gleichungen an, ergeben sich deshalb Beziehungen der Form

$$(\gamma(\varphi, \varphi'), \mathbb{1}) \cdot (v_{\varphi \circ \varphi'}, \varphi \circ \varphi') = (v_\varphi, \varphi) \cdot (v_{\varphi'}, \varphi') \quad (\text{C7.21})$$

Die Funktion  $\varphi \mapsto v_\varphi$  ist eine Lösung der Frobeniusschen Kongruenzen, welche zur Gruppe  $G_2 \in \mathcal{G}_{(\Gamma, G_0)}$  gehört. Rechnet man die Produkte auf der rechten Seite der Gleichungen (C7.20) und (C7.21) aus, liefern die ersten Komponenten die Beziehungen

$$\gamma(\varphi, \varphi') + u_{\varphi \circ \varphi'} = u_\varphi + \varphi(u_{\varphi'}) \quad \text{und} \quad \gamma(\varphi, \varphi') + v_{\varphi \circ \varphi'} = v_\varphi + \varphi(v_{\varphi'}). \quad (\text{C7.22})$$

Sie drücken aus, dass die in den Frobeniusschen Kongruenzen auftretenden Korrekturen für die Gruppen  $G$  und  $G_2$  übereinstimmen; sie liefern den Schlüssel zur gesuchten Translation  $\tau$ . Sei nämlich  $D: G_0 \rightarrow \mathbb{E}_2$  die Funktion, welche durch die Bedingung

$$D(\varphi) = v_\varphi - u_\varphi$$

gegeben wird. Gleichung (C7.22) rechtfertigt dann die Umformung

$$\begin{aligned}D(\varphi \circ \varphi') &= v_{\varphi \circ \varphi'} - u_{\varphi \circ \varphi'} \\ &= (v_\varphi + \varphi(v_{\varphi'}) - \gamma(\varphi, \varphi')) - (u_\varphi + \varphi(u_{\varphi'}) - \gamma(\varphi, \varphi')) \\ &= (v_\varphi + \varphi(v_{\varphi'})) - (u_\varphi + \varphi(u_{\varphi'})) \\ &= (v_\varphi - u_\varphi) + \varphi(v_{\varphi'} - u_{\varphi'}) = D(\varphi) + \varphi(D(\varphi')).\end{aligned}$$

Es ist also  $D$  eine Derivation mit Werten im Vektorraum  $\mathbb{E}_2$ ; nach Hilfssatz C7.20 ist sie daher eine innere Derivation. Bezeichnet  $w \in \mathbb{E}_2$  einen Vektor mit  $D(\varphi) = (\mathbb{1} - \varphi)(w)$ , so beweist die Rechnung

$$\tau_w \circ (\tau_{u_\varphi} \circ \varphi) \tau_w^{-1} = (\tau_{u_w} \circ \tau_{u_\varphi} - \tau_{\varphi(w)}) \circ \varphi = \tau_{v_\varphi} \circ \varphi,$$

dass Konjugation mit  $\tau_w$  die Gruppe  $G$  auf die Gruppe  $G_2$  abbildet. Insgesamt ergibt sich daher das Ergebnis

$$(\tau_w \circ L) \circ G_1 \circ (\tau_w \circ L)^{-1} = \tau_w \circ G \circ \tau_w^{-1} = G_2.$$

Es zeigt, dass die affine Abbildung  $\alpha = \tau_w \circ L$  die behauptete Eigenschaft aufweist.  $\square$

**HILFSSATZ C7.20** *Seien  $H$  eine endliche Gruppe der Ordnung  $h$  und  $M$  ein  $H$ -Modul. Falls Multiplikation mit  $h$  auf  $M$  eine Bijektion induziert, so ist jede Derivation  $D: H \rightarrow M$  eine innere Derivation.*

*Proof.* Wir variieren das Summierungsargument von Frobenius (Nummer 7.3c). Da  $D$  eine Derivation ist, gilt die Beziehung

$$D(\varphi \circ \varphi') = D(\varphi) + \varphi(D(\varphi'))$$

für jedes Paar  $(\varphi, \varphi') \in H^2$ . Summiert man sie über alle  $\varphi' \in H$  und berücksichtigt, dass mit  $\varphi'$  auch  $\varphi \circ \varphi'$  die Gruppe  $H$  durchläuft, kommt man zur Gleichung

$$\sum_{\varphi'} D(\varphi') = \sum_{\varphi'} D(\varphi) + \sum_{\varphi'} \varphi(D(\varphi')) = h \cdot D(\varphi) + \varphi \left( \sum_{\varphi'} D(\varphi') \right),$$

die sich auch in der Form

$$h \cdot D(\varphi) = (\mathbb{1} - \varphi) \left( \sum_{\varphi'} D(\varphi') \right) \quad (\text{C7.23})$$

schreiben lässt. Ist nun  $v$  das eindeutig bestimmte Element von  $M$ , das die Gleichung  $h \cdot v = \left( \sum_{\varphi'} D(\varphi') \right)$  löst, lehrt Gleichung (C7.23), dass  $D$  mit der inneren Derivation  $\varphi \mapsto (\mathbb{1} - \varphi)(v)$  übereinstimmt.  $\square$

## 7.5 Anhang: Elemente der Darstellungstheorie

Die Darstellungstheorie (der endlichen Gruppen) geht aus von einer endlichen Gruppe  $H$  und untersucht die so genannten *Darstellungen*, das heisst die Homomorphismen der Form

$$\rho: H \rightarrow GL(m, K). \quad (\text{C7.24})$$

Dabei bezeichnet  $K$  einen (kommutativen) Körper; im Folgenden nehme ich an,  $K$  sei ein Teilkörper der komplexen Zahlen  $\mathbb{C}$ . Ein grundlegendes Ergebnis der Theorie besagt nun, *dass jede Darstellung einer direkten Summe von einfachen Darstellungen äquivalent ist; dass die Terme dieser Summe, abgesehen von ihrer Reihenfolge, eindeutig durch  $\rho$  bestimmt sind, und dass  $H$  nur endlich viele einfache Darstellungen besitzt.*

## 7.5a Grundbegriffe der Theorie

Um diese Behauptungen zu verstehen, muss man einige Definitionen kennen.

**DEFINITION C7.21** Eine Darstellung  $\rho: H \rightarrow \text{GL}(m, K)$  wird *reduzibel* genannt, falls es einen Teilraum  $U$  mit  $\{0\} \subsetneq U \subsetneq K^m$  gibt, der unter der Wirkung von  $H$  invariant ist. Ist  $\rho$  nicht reduzibel, nennt man die Darstellung irreduzibel oder *einfach*.

**BEISPIEL C7.22** Seien  $H$  die symmetrische Gruppe  $S_3$  der Menge  $\{1, 2, 3\}$  und  $\rho: H \rightarrow \text{GL}(3, K)$  die kanonische Darstellung; sie ordnet einer Permutation der Menge  $\{1, 2, 3\}$  die entsprechende Permutation der Basisvektoren  $e_1, e_2$  und  $e_3$  zu. Insbesondere hat  $\rho$  auf der zyklischen Permutation  $(123)$  den Wert

$$A = \rho_{(123)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Gerade  $U_1 = K \cdot (1, 1, 1)^t$  ist invariant unter der Wirkung von  $H = S_3$  und der Unterraum  $U_2' = K \cdot e_2 + K \cdot e_3$  ist ein Komplement von  $U_1$  in  $K^3$ . Die Basis

$$\mathcal{B}' = (b_1' = (1, 1, 1)^t, b_2' = e_2, b_3' = e_3)$$

ist der Zerlegung  $K^3 = U_1 \oplus U_2'$  angepasst. Bezüglich ihr wird die Drehung  $\rho_{(123)}$  durch die Matrix

$$(\rho_{(123)})_{\mathcal{B}'} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

dargestellt. Diese Matrix hat die Blockform  $\begin{pmatrix} B_{11} & B_{21} \\ 0 & B_{22} \end{pmatrix}$ .

Der Unterraum  $U_2'$  ist nicht invariant unter der Wirkung der Gruppe  $S_4$ , das orthogonale Komplement  $U_2$  von  $U_1$  ist es hingegen. Drückt man  $\rho_{(123)}$  in der Basis  $\mathcal{B} = (b_1 = (1, 1, 1)^t, \alpha_1 = e_1 - e_2, \alpha_2 = e_2 - e_3)$  aus, erhält man die Matrix

$$(\rho_{(123)})_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die neue Matrix hat die Blockform  $\begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ 0 & B_{22} \end{pmatrix}$ . Da der Unterraum  $U_2$  von allen Matrizen  $\rho_\pi$  mit  $\pi \in S_4$  auf sich abgebildet wird, ist  $\rho$  die direkte Summe der Teildarstellung  $\rho^1$  auf  $U_1$  und der Teildarstellung  $\rho^2$  auf  $U_2$ .

**DEFINITION C7.23** Eine Darstellung  $\rho$  wird *halb-einfach* (oder vollständig reduzibel) genannt, falls sie die direkte Summe  $\rho^1 \oplus \dots \oplus \rho^f$  von einfachen Teildarstellungen ist.

Ein erstes grundlegendes Ergebnis der Darstellungstheorie ist der Satz von Heinrich MASCHKE (1853–1908):

**SATZ C7.24** Jede Darstellung einer endlichen Gruppe über einem Teilkörper  $K \subseteq \mathbb{C}$  ist halb-einfach.

Als nächstes wollen wir abklären, wie weit die Terme einer direkten Summe von einfachen Teildarstellungen durch ihre Summe bestimmt sind. Dazu muss man erst festlegen, wann zwei Darstellungen *als im wesentlichen gleich* angesehen werden sollen. Die folgende Definition ist nahe liegend:

DEFINITION C7.25 Zwei Darstellungen  $\rho: H \rightarrow \text{GL}(m, K)$  und  $\rho': H \rightarrow \text{GL}(m, K)$  werden als *isomorph* (oder äquivalent) bezeichnet, falls es eine Matrix  $S \in \text{GL}(m, K)$  gibt, welche die Bedingungen  $S \cdot \rho_t \cdot S^{-1} = \rho'_t$  für jedes Element  $t \in H$  erfüllt.

Zwei Darstellungen sind also genau dann isomorph, falls die darstellenden Matrizen durch einen Basiswechsel auseinander hervorgehen. Es gibt nun das erfreuliche Ergebnis:

SATZ C7.26 Seien  $\rho^1, \rho^2, \dots, \rho^f$  und  $\bar{\rho}^1, \dots, \bar{\rho}^{\bar{f}}$  einfache Darstellungen der endlichen Gruppe  $H$ . Falls die Darstellungen

$$\rho^1 \oplus \rho^2 \oplus \dots \oplus \rho^f \quad \text{und} \quad \bar{\rho}^1 \oplus \dots \oplus \bar{\rho}^{\bar{f}}$$

isomorph sind, so stimmen  $f$  und  $\bar{f}$  überein und es gibt eine Permutation  $\pi$  der Menge  $\{1, 2, \dots, f\}$ , so dass die Darstellungen  $\bar{\rho}^j$  und  $\rho^{\pi(j)}$  für jeden Index  $j$  isomorph sind.

Die Sätze C7.24 und C7.26 weisen einen Weg, auf dem man eine Übersicht über die sämtlichen Darstellungen einer endlichen Gruppe  $H$  erlangen kann. Man sucht erst einfache Darstellungen  $\rho^1, \dots, \rho^f$  von  $H$ , die paarweise nicht isomorph sind und jeden Isomphietyp der einfachen Darstellungen von  $H$  vertreten. Dann ist jede Darstellung von  $H$  isomorph einer direkten Summe der Form

$$(\oplus_1^{\ell_1} \rho^1) \oplus (\oplus_1^{\ell_2} \rho^2) \oplus \dots \oplus (\oplus_1^{\ell_f} \rho^f).$$

Unterschiedliche Tupel  $(\ell_1, \dots, \ell_f)$  ergeben dabei nicht isomorphe Darstellungen.

Will man die einfachen Darstellungen einer endlichen Gruppe bestimmen, ist eine obere Schranke der Zahl  $f$  der paarweise nicht isomorphen einfachen Darstellungen nützlich. Eine solche liefert das nächste Resultat:

SATZ C7.27 Seien  $f$  die Anzahl der paarweise nicht isomorphen einfachen Darstellungen und  $h$  die Zahl der Konjugationsklassen der endlichen Gruppe  $H$ . Dann in  $f \leq h$ .

### 7.5b Äquivalente rationale Darstellungen und geometrische Kristallklassen

Wir wollen noch den genauen Zusammenhang zwischen den geometrischen Kristallklassen und den rationalen Darstellungen der endlichen Gruppen bestimmen. Nach Theorem C6.9 induziert die Zuordnung  $((\Gamma, H), \mathcal{B}) \mapsto H_{\mathcal{B}}$  eine bijektive Abbildung von der Menge der geometrischen Klassen  $\mathcal{G}_n$  eines Euklidischen Raumes der Dimension  $n$  auf die Menge  $\mathcal{R}_n$  der  $\mathbb{Q}$ -Klassen der endlichen Untergruppen  $F$  der Matrixgruppe  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$ . Definitionsgemäss liegen zwei endliche Untergruppen  $F$  und  $F'$  von  $\text{GL}(n, \mathbb{Q})$  dann in der gleichen  $\mathbb{Q}$ -Klasse, wenn sie in  $\text{GL}(n, \mathbb{Q})$  konjugiert sind; die Inklusion  $\text{GL}(n, \mathbb{Z}) \subset \text{GL}(n, \mathbb{Q})$  induziert daher eine injektive Abbildung

$$\mu_n: \mathcal{R}_n \longrightarrow \{\text{GL}(n, \mathbb{Q})F \mid F \text{ endliche Untergruppe von } \text{GL}(n, \mathbb{Q})\}. \quad (\text{C7.25})$$

Es gilt nun

SATZ C7.28 Die Abbildung  $\mu_n$  ist bijektiv.

*Proof.* Es verbleibt uns der Nachweis der Surjektivität der Abbildung  $\mu_n$ . Sie ist gleichbedeutend mit der Aussage, dass es in jeder Konjugationsklasse  ${}^{\text{GL}(n, \mathbb{Q})} F$  einer endlichen Gruppe  $F$  mit rationalen Einträgen einen ganzzahligen Vertreter gibt. Solche ganzzahligen Darstellungen liefert jedes unter  $F$  invariante Gitter  $\Gamma$  von  $\mathbb{R}^n$ ; man kann  $F$  wie folgt finden.

Sei  $\mathcal{X}$  die Menge aller Produkte  $A \cdot e_j$  der Matrizen  $A \in F$  und der Vektoren  $e_j$  der Standard-Basis. Dann ist  $\mathcal{X}$  eine endliche Menge des rationalen Vektorraumes  $\mathbb{Q}^n$ , die unter  $F$  invariant ist. Sei  $\Gamma$  die von  $\mathcal{X}$  in  $\mathbb{Q}^n$  erzeugte Untergruppe. Da die Standard-Basis in  $\mathcal{X}$  enthalten ist, umfasst  $\Gamma$  das Standard-Gitter  $\mathbb{Z}^n$  des Euklidischen Raumes  $\mathbb{R}^n$ ; da  $\mathcal{X}$  endlich ist, haben andererseits die Komponenten der Vektoren von  $\mathcal{X}$  einen gemeinsamen Nenner, etwa  $m$ , weshalb  $\Gamma$  in  $(\frac{1}{m}\mathbb{Z})^n$  enthalten ist. Da  $\mathbb{Z}^n$  in  $\Gamma$  enthalten ist, umfasst  $\Gamma$  eine Vektorraum-Basis; weil die Inklusion  $\Gamma \subseteq (\frac{1}{m}\mathbb{Z})^n$  gilt, ist  $\Gamma$  diskret; Theorem B4.4 garantiert dann, dass  $\Gamma$  ein Gitter von  $\mathbb{R}^n$  ist.  $\square$

### 7.5c Beispiel: Treue Darstellungen der symmetrischen Gruppe $S_4$

Im ersten Teil dieser Nummer sollen die einfachen Darstellungen der symmetrischen Gruppe  $S_4$  bestimmt werden, und zwar über dem Körper der rationalen Zahlen  $\mathbb{Q}$ .

Die Ordnung der Gruppe  $S_4$  ist 24; ihre Konjugationsklassen sind

- die Klasse bestehend aus der Identität,
- die Klasse der  $\binom{4}{2} = 6$  Transpositionen,
- die Klasse gebildet von den 3 Elementen der Form  $(\cdot\cdot)(\cdot\cdot)$ ,
- die Klasse der  $4 \cdot 2! = 8$  Zyklen der Länge 3, und
- die Klasse der  $3! = 6$  Zyklen der Länge 4.

Nach Satz C7.27 gibt es also höchstens 5 einfache, paarweise nicht isomorphe, Darstellungen. Zwei dieser Darstellungen sind leicht zu finden, nämlich

$$\rho^1: \pi \mapsto 1 \text{ und } \rho^2: \pi \mapsto \text{sgn}(\pi).$$

Eine dritte Darstellung ergibt sich aus der Darstellung der Gruppe  $S_3$  auf dem Unterraum  $U_2 = \mathbb{Q} \cdot (e_1 - e_2) + \mathbb{Q} \cdot (e_2 - e_3)$  – siehe Beispiel C7.22. Gemäss diesem Beispiel werden die Permutationen (12) und (123) durch die folgenden Matrizen dargestellt:

$$\bar{\rho}_{(12)}^3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \bar{\rho}_{(123)}^3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die Gruppe  $S_3$  ist ein homomorphes Bild von  $S_4$ ; es ist nämlich

$$N = \{ \mathbb{1}, (12)(34), (13)(24), (14)(23) \}$$

ein Normalteiler von  $S_4$  und  $S_3$  ist ein Komplement von  $N$  in  $S_4$ , denn  $N \cap S_1 = \{ \mathbb{1} \}$ , weshalb  $\text{card}(N \cdot S_3) = 24$  ist. Die Zuordnung  $N \cdot \pi \mapsto \pi$  mit  $\pi \in S_3$  induziert folglich einen Isomorphismus  $\nu: S_4/N \xrightarrow{\sim} S_3$ , also auch einen surjektiven Homomorphismus  $\nu \circ \text{can}: S_4 \rightarrow S_4/N \xrightarrow{\sim} S_3$ . Die angekündigte Darstellung der  $S_4$  ist dann die Zusammensetzung

$$\rho^3 = \bar{\rho}^3 \circ \nu \circ \text{can}: S_4 \rightarrow \text{GL}(2, \mathbb{Q}).$$

Das Bild  $\rho_{(1234)}^3$  findet man zum Beispiel wie folgt: es ist  $(1234) = (14)(23) \cdot (23)$ , also  $\rho_{(1234)}^3 = \bar{\rho}_{(23)}^3$ . Andererseits ist

$$\bar{\rho}_{(23)}^3(e_1 - e_2) = e_1 - e_3 = (e_1 - e_2) + (e_2 - e_3) \text{ und } \bar{\rho}_{(23)}^3(e_2 - e_3) = -(e_2 - e_3).$$

Daher ist

$$\rho_{(1234)}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die gefundene Darstellung  $\rho^3$  ist einfach, da  $\bar{\rho}^3$  einfach ist (leichte Verifikation).

Eine weitere einfache Darstellung der Gruppe  $S_4$  erhält man aus der kanonischen Wirkung von  $S_4$  auf der Menge  $\{1, 2, 3, 4\}$ . Sei  $\rho: H \rightarrow \text{GL}(4, \mathbb{Q})$  die entsprechende Darstellung; sie ordnet jeder Permutation der Menge  $\{1, 2, 3, 4\}$  die entsprechende Permutation der Basisvektoren  $e_1, e_2, e_3$  und  $e_4$  zu. Die Gerade  $U_1 = \mathbb{Q} \cdot (1, 1, 1, 1)^t$  ist unter  $H$  invariant; ihr Orthogonalkomplement  $U_3 = \{x \in \mathbb{Q}^4 \mid \sum_j x_j = 0\}$  ist ebenfalls invariant und die Folge

$$\mathcal{B} = (\alpha_1 = e_1 - e_2, \alpha_2 = e_2 - e_3, \alpha_3 = e_3 - e_4)$$

ist eine Basis von  $U_3$ .

Sei  $\rho^4: S_4 \rightarrow \text{GL}(3, \mathbb{Q})$  die Darstellung, welche die Permutationsdarstellung  $\rho$  auf dem Unterraum  $U_3$  bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  induziert; sie ist einfach. Sei nämlich  $V$  ein  $S_4$ -invarianter Unterraum von  $U_3$  und sei  $v = \sum_j x_j \cdot \alpha_j \in V$  ein von Null verschiedener Vektor. Wir wenden auf  $v$  die linearen Abbildungen  $\mathbb{1} - \rho_{(i,i+1)}^4$  mit  $i \in \{1, 2, 3\}$  an. Da  $\rho_{(12)}^4$  auf den Vektoren  $\alpha_j$  durch

$$\rho_{(12)}^4: \alpha_1 \mapsto -\alpha_1, \quad \alpha_2 \mapsto \alpha_1 + \alpha_2, \quad \alpha_3 \mapsto \alpha_3.$$

wirkt, ist  $(\mathbb{1} - \rho_{(12)}^4)(v) = (\sum x_j \alpha_j) - (x_1(-\alpha_1) + x_2(\alpha_1 + \alpha_2) + x_3 \alpha_3) = (2x_1 - x_2) \cdot \alpha_1$ . Analog findet man, dass  $(\mathbb{1} - \rho_{(23)}^4)(v) = (2x_2 - x_1 - x_3) \cdot \alpha_2$  und  $(\mathbb{1} - \rho_{(34)}^4)(v) = (2x_3 - x_2) \cdot \alpha_3$  sind. Jedes der berechneten Bilder ist ein Vielfaches eines Basisvektors  $\alpha_j$ . Da die Matrix

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

regulär ist, besitzt das lineare Gleichungssystem  $2x_1 - x_2 = 2x_2 - x_1 - x_3 = 2x_3 - x_2 = 0$  nur die Null-Lösung, was zur Folge hat, dass  $V$  einen der Basisvektoren  $\alpha_j$  enthält. Die Rechnungen

$$\rho_{(123)}^4(\alpha_1) = \alpha_2, \quad \rho_{(234)}^4(\alpha_2) = \alpha_3, \quad \rho_{(13)(24)}^4(\alpha_3) = \alpha_1$$

zeigen dann, dass  $V$  jeden der Basisvektoren  $\alpha_j$  enthält.

Die neue Darstellung  $\rho^4$  ist, im Gegensatz zu zuvor gefundenen Darstellungen  $\rho^1, \rho_2$  und  $\rho_3$ , *treu*, denn die Permutationsdarstellung  $\rho: S_4 \rightarrow \text{GL}(4, \mathbb{Q})$  ist offensichtlich injektiv und diese ist isomorph zur direkten Summe der Darstellung  $\rho^1$  mit  $\ker(\rho_1) = S_4$  und der neuen Darstellung  $\rho^4$ . Das Tensorprodukt  $\rho^5 = \rho^4 \otimes \rho^2$  ist eine weitere Darstellung von  $S_4$ ; sie ordnet der Permutation  $\pi \in S_4$  die Matrix  $\text{sgn}(\pi) \cdot (\rho^4)_\pi$  zu. Auch diese Darstellung ist einfach; sie ist aber nicht isomorph mit der Darstellung  $\rho^4$ , da ihre Werte alle in  $SL(3, \mathbb{Q})$  liegen, was auf die Werte von  $\rho^4$  nicht zutrifft. Bis auf Isomorphie haben wir damit alle einfachen Darstellungen der Gruppe  $S_4$  gefunden.

Die Sätze C7.24 und C7.26 machen es nun leicht, jene Klassen in der Menge  $\mathcal{G}_n$  zu bestimmen, die aus Untergruppen bestehen, welche zu  $S_4$  isomorph sind. Dazu brauchen wir bloss die Isomorphietypen der *treuen* Darstellungen von  $S_4$  für Dimension  $n$  zu bestimmen. Da der Kern der Darstellung  $\rho^3$  der Normalteiler  $N = \{\mathbb{1}, (12)(34), (13)(24), (14)(23)\}$  ist und  $N$  in der alternierenden Gruppe  $A_4$ , dem Kern der Darstellung  $\rho^2$ , enthalten ist, kommt in jeder treuen Darstellung von  $S_4$  eine der Darstellungen  $\rho^4$  oder  $\rho^5$  mindestens einmal vor.

Keine der endlichen Untergruppen von  $O(2, \mathbb{R})$  kann daher isomorph zu  $S_4$  sein. Hingegen gibt es genau 2 Konjugationsklassen in  $O(3, \mathbb{R})$ , die zu  $S_4$  isomorph sind. Es handelt sich dabei um die Symmetriegruppen der regulären Tetraeder – sie sind in  $GL(3, \mathbb{R})$  zu  $\rho^4$  konjugiert – und um die Drehgruppen der Würfel. In den Dimensionen 4 und 5 gibt es 4, beziehungsweise 8, geometrische Kristallklassen, deren Gruppen mit  $S_4$  isomorph sind; sie sind äquivalent den folgenden direkten Summen:

$$\begin{aligned} n = 4 : & \quad \rho^4 \oplus \rho^1, \quad \rho^4 \oplus \rho^2, \quad \rho^5 \oplus \rho^1, \quad \rho^5 \oplus \rho^2, \\ n = 5 : & \quad \rho^j \oplus \rho^1 \oplus \rho^1, \quad \rho^j \oplus \rho^1 \oplus \rho^2, \quad \rho^j \oplus \rho^2 \oplus \rho^2, \quad \rho^j \oplus \rho^3 \text{ für } j \in \{4, 5\}. \end{aligned}$$

## C8 Konstruktion von kristallographischen Gruppen

In diesem Abschnitt geht es um die Frage, wie eine vollständige Liste von Vertretern der affinen (oder eigentlich-affinen) Äquivalenzklassen von kristallographischen Gruppen eines  $n$ -dimensionalen Euklidischen Vektorraumes konstruiert werden kann. Im Falle der Dimension 3 ist diese Frage um 1890 beantwortet worden, und zwar von A. SCHOENFLIES und E. S. FEDOROW. Schoenflies stützte sich bei seiner Arbeit auf die damals gut bekannte Liste der 32 *geometrischen* Kristallklassen; zusätzlich zog er die Klassifikation der Gitter heran, die A. BRAVAIS in [Br50] erarbeitet hatte.<sup>12</sup> Fedorow benutzte die Liste der 73 *arithmetischen* Kristallklassen. Dieser zweite Zugang ist später von J. J. BURCKHARDT in seinen Arbeiten [Bu34], [Bu36] sowie seinem Lehrbuch [Bu47] zur Grundlage einer algebraischen Ableitung der affinen Äquivalenzklassen gemacht worden; auf ihm beruht auch der Algorithmus zur Herleitung der affinen Äquivalenzklassen, den H. ZASSENHAUS (1912–1991) in der Arbeit [Za48] veröffentlichte.

Dieser Abschnitt besteht aus zwei Teilen. Im ersten erkläre ich, wie eine Liste von Vertretern der geometrischen Kristallklassen zu einer Liste der arithmetischen Kristallklassen verfeinert werden kann. Im zweiten Teil algebraisiere ich zuerst das Verfahren des Lösens der Frobeniusschen Kongruenzen, einem wichtigen Teilschritt der Zassenhausschen Algorithmus, und wende es dann auf zwei Klassen von Punktgruppen an.

### 8.1 Aufspaltung der geometrischen Kristallklassen

Nach Nummer 7.1b ist die Anzahl der geometrischen Kristallklassen eines  $n$ -dimensionalen Euklidischen Vektorraumes endlich. In den Beweis dieser Behauptung gehen zwei Teilergebnisse ein: einerseits hat jede endliche Untergruppe der Gruppe  $O(\mathbb{E}^n)$ , welche ein Gitter invariant lässt, eine treue Darstellung in  $GL(n, \mathbb{Z})$  und ist daher nach Korollar C7.2 isomorph einer Untergruppe der endlichen Gruppe  $GL(n, \mathbb{Z}_3)$ . Insbesondere ist also die *Anzahl der Isomorphietypen der endlichen Untergruppen von  $O(\mathbb{E}^n)$ , die ein Gitter invariant lassen, endlich*. Die Darstellungstheorie lehrt andererseits, dass jede endliche Gruppe nur endlich viele, paarweise nicht isomorphe, rationale Darstellungen eines gegebenen Grades hat; insbesondere gibt es nur endlich viele paarweise nicht-isomorphe treue Darstellungen der Untergruppen von  $GL(n, \mathbb{Z}_3)$  in  $GL(n, \mathbb{Q})$ .

Die Darstellungstheorie der endlichen Gruppen ist ein ausserordentlich vielseitiges und starkes Werkzeug. Mit ihrer Hilfe kann man selbst in hohen Dimensionen interessante geometrische Kristallklassen finden. Hat man eine solche Klasse gefunden, stellt sich die Frage, wie man die algebraischen Kristallklassen, aus denen sich die geometrische Kristallklasse zusammensetzt, bestimmen kann. Auf diese Frage gibt es eine geometrische und eine algebraische Antwort. In diesem Unterabschnitt erkläre ich die geometrische Antwort an Hand eines lehrreichen Beispiels.

<sup>12</sup>Es handelt sich um die so genannten *Bravais-Gitter*, genauer die Bravaischen Gitter-Typen oder *Bravaischen arithmetischen Kristallklassen*.

### 8.1a Prinzip des geometrischen Verfahrens

Sei  $(\Gamma, H)$  ein Paar, das die geometrische Klasse  $[\Gamma, H]_g$  vertritt. Ist  $(\bar{\Gamma}, \bar{H})$  ein zweites Paar dieser Klasse, so gibt es nach Definition eine bijektive lineare Abbildung  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  mit  $H = L \circ \bar{H} \circ L^{-1}$ . Sei  $\Gamma' = L(\bar{\Gamma})$ . Dann ist das Paar  $(\bar{\Gamma}, \bar{H})$  arithmetisch äquivalent dem Paar  $(\Gamma', H)$ ; jede arithmetische Kristallklasse, die in der geometrischen Kristallklasse  $[\Gamma, H]_g$  enthalten ist, wird also durch ein Paar der Form  $(\Gamma', H)$  vertreten. *Das Aufspalten der geometrischen Kristallklasse  $[\Gamma, H]_g$  in ihre arithmetischen Unterklassen läuft also auf die Bestimmung der Gitter  $\Gamma'$ , deren Automorphismengruppe die gegebene Gruppe  $H$  enthält, und die daran anschließende Zusammenfassung der Paare  $(\Gamma', H)$  zu arithmetischen Klassen hinaus.*

Die Bestimmung der Gitter  $\Gamma'$  mit  $H \subseteq \text{Aut}(\Gamma')$  ist für gewisse Gruppen  $H$  recht einfach, insbesondere für alle Punktgruppen eines 3-dimensionalen Raumes. Ich illustriere das Verfahren in den Nummern 8.1b und 8.1c durch Gruppen  $H$ , die von den Spiegelungen an den Hyperräumen  $(\mathbb{R} \cdot b_j)^\perp$  einer geordneten, orthogonalen Basis  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  des  $\mathbb{E}^n$  erzeugt werden. Diese Gruppen haben die Ordnung  $2^n$ ; im Falle  $n = 3$  vertreten sie die Kristallklassen, welche die Kristallographen mit  $C_{2h}$  oder  $\frac{m}{2} \frac{m}{2} \frac{m}{2}$  bezeichnen.<sup>13</sup> R. L. E. Schwarzenberger hat diese geometrischen Kristallklassen in verschiedenen Arbeiten<sup>14</sup> behandelt und nennt sie, in Anlehnung an die Arbeit [BNWb], orthogonal.

### 8.1b Arithmetischen Klassen der orthogonalen geometrischen Klasse

Seien  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine geordnete Basis von  $\mathbb{E}^n$ , die aus paarweise orthogonalen Vektoren besteht, und  $H$  die Gruppe, die von den Spiegelungen  $\rho_j$  an den Hyperräumen  $(\mathbb{R} \cdot b_j)^\perp$  erzeugt wird. Die Gruppe  $H$  bildet das von der Basis  $\mathcal{B}$  aufgespannte Gitter  $\Gamma_p$  auf sich ab und gibt deshalb Anlass zu einer geometrischen Kristallklasse; sie wird im Folgenden *orthogonale geometrische Klasse* des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^n$  genannt.

Unser erstes Ziel ist es, eine Übersicht über jene Gitter gewinnen, die von der Gruppe  $H$  auf sich abgebildet werden. Ist  $\Gamma'$  ein solches Gitter, so gibt es für jeden Index  $j$  einen Vektor  $v = \sum_h v_h \cdot b_h \in \Gamma'$ , der nicht im Hyperraum  $(\mathbb{R} \cdot b_j)^\perp$  liegt. Mit  $v$  ist auch der Differenzvektor  $v - \rho(v) = 2v_j \cdot b_j$  ein Punkt von  $\Gamma'$ . Folglich enthält der Durchschnitt  $\Gamma' \cap (\mathbb{R} \cdot b_j)$  nicht nur den Nullvektor; da er diskret ist, besteht er also aus den Vielfachen eines Vektors der Form  $u_j = 2\lambda_j \cdot b_j$  mit  $\lambda_j > 0$ . Die Vektoren  $u_1, \dots, u_n$  erzeugen ein Gitter  $\bar{\Gamma}'$ ; nach Konstruktion ist es ein Teilgitter von  $\Gamma'$ . Andererseits ist aber jede Koordinate  $v_j$  eines Vektors  $v \in \Gamma'$  ein Vielfaches der Zahl  $\lambda_j$ , weshalb  $\Gamma'$  seinerseits im Gitter  $\frac{1}{2}\bar{\Gamma}' = \sum_h \mathbb{Z}\lambda_h \cdot b_h$  enthalten ist.

Die vorangehenden Überlegungen zeigen, dass es für jedes Gitter, das unter  $H$  invariant ist, ein einfach zu beschreibendes Gitter  $\bar{\Gamma}'$  gibt, das die Beziehung

$$\bar{\Gamma}' \subseteq \Gamma' \subseteq \frac{1}{2}\bar{\Gamma}'$$

erfüllt. Seien nun  $\Gamma_p$  das von der Basis  $\mathcal{B}$  erzeugte orthogonale Gitter und  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  die lineare Bijektion, welche den Basisvektor  $b_j$  auf den Vektor  $\lambda_j \cdot b_j$  abbildet. Dann ist  $L$  ein selbst-adjungierter, positiver Operator, der mit jeder der Spiegelungen  $\rho_j$  kommutiert. Daher sind die Paare  $(\Gamma', H)$  und  $(\Gamma = L^{-1}(\Gamma'), H)$ , aber auch die Paare

<sup>13</sup>Schoenflies bezeichnet die Klasse mit  $V^h$ ; man findet diese Bezeichnung im ersten Teil der Zusammenstellung der eigentlich-affinen Äquivalenzklassen, die auf Seite 56 wiedergegeben ist.

<sup>14</sup>Siehe insbesondere [Sch74], Abschnitt 3 und [Sch80], Abschnitte 4.5 und 5.5.

$(\frac{1}{2}\bar{\Gamma}', H)$  und  $(\Gamma_p, H)$ , arithmetisch äquivalent. Da wir uns für die arithmetischen Kristallklassen interessieren, die in der geometrischen Klasse  $[(\Gamma', H)]_g = [(\Gamma, H)]_g$  enthalten sind, genügt es, jene Gitter  $\Gamma$  weiter zu untersuchen, welche die Bedingung

$$2\Gamma_p \subseteq \Gamma \subset \Gamma_p \quad (\text{C8.1})$$

erfüllen.

Sei  $\Gamma$  ein Gitter, das diese Bedingung erfüllt. Ist  $v = \sum_h v_h \cdot b_h$  ein Vektor von  $\Gamma$ , so ist jeder Koeffizient  $v_j$  eine ganze Zahl und daher ist  $\rho_j(v) = v - 2v_j \cdot b_j \in \Gamma + 2\Gamma_p = \Gamma$ . Dies zeigt, dass  $\Gamma$  unter der Gruppe  $H$  invariant ist. Betrachten wir nun den Homomorphismus

$$\pi: \Gamma_p \rightarrow \mathbb{Z}_2^n, \quad \sum x_h \cdot b_h \mapsto (x_1 + 2\mathbb{Z}, \dots, x_n + 2\mathbb{Z}). \quad (\text{C8.2})$$

Der Kern der Projektion  $\pi$  ist das Gitter  $2\Gamma_p$  und ihr Bild ist ein  $n$ -dimensionaler Vektorraum über dem Körper  $\mathbb{Z}_2$ . Unter  $\pi$  entsprechen die Gitter  $\Gamma$ , welche die Bedingung (C8.1) erfüllen, bijektiv den echten Unterräumen  $U$  von  $V = \mathbb{Z}_2^n$ .

Eine Kleinigkeit bleibt noch nachzutragen. Bei der Wahl des Hilfsgitters  $\bar{\Gamma}'$  wurden die Zahlen  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  so gewählt, dass die Vektoren  $2\lambda_j \cdot h_j$ , nicht aber die Vektoren  $\lambda_j \cdot b_j$ , in  $\bar{\Gamma}'$  liegen. Wenn man eine Übersicht über alle Gitter erhalten will, die unter  $H$  invariant sind, kann man sich also auf jene Gitter  $\Gamma$  zu beschränken, die keinen Vektor  $b_j$  der Basis  $\mathcal{B}$  enthalten. Daher gilt

**SATZ C8.1** *Sei  $\Gamma'$  ein Gitter von  $\mathbb{E}^n$ , das unter der Gruppe  $H = \text{gp}(\{\rho_1, \dots, \rho_n\})$  invariant ist. Dann ist das Paar  $(\Gamma', H)$  arithmetisch äquivalent einem Paar der Form  $(\pi^{-1}(U), H)$ . Dabei bezeichnen  $\pi$  die Projektion (C8.2) und  $U \subset V = \mathbb{Z}_2^n$  einen Unterraum von  $V = \mathbb{Z}_2^n$ , der keinen der Standard-Basisvektoren von  $V$  enthält. Umgekehrt ist das Urbild  $\pi^{-1}(U)$  jedes Unterraumes  $U \subset V$  ein Gitter von  $\mathbb{E}^n$ , das unter der Gruppe  $H$  invariant ist.*

**BEISPIEL C8.2** Sei  $n = 2$ . Dann gibt es vier echte Unterräume  $U$  in  $V = (\mathbb{Z}_2)^2$ , nämlich  $\{(0, 0)\}$ ,  $\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 0)$ ,  $\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1)$  und  $\mathbb{Z}_2 \cdot (0, 1)$ . Nach Satz C8.1 ist also jedes Gitter von  $\mathbb{E}^2$ , das unter der Gruppe  $H = \text{gp}(\{\rho_1, \rho_2\})$  invariant ist, arithmetisch äquivalent einem der beiden Gitter

$$\pi^{-1}(\{0\}) = 2\Gamma_p \quad \text{und} \quad \pi^{-1}(\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1)) = 2\Gamma_p + \mathbb{Z} \cdot (b_1 + b_2).$$

Falls die Basisvektoren  $b_1$  und  $b_2$  verschiedene Längen haben, ist das Netz  $2\Gamma_p$  rechteckig, während das zweite Netz  $2\Gamma_p + \mathbb{Z} \cdot (b_1 + b_2)$  rhombisch ist. Die Wahl dieses Namens wird durch Abbildung C.3 erklärt.

**BEISPIEL C8.3** Sei  $n = 3$ . Dann besitzt  $V = (\mathbb{Z}_2)^3$  sieben 1-dimensionale Unterräume; sie werden von den Vektoren

$$(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1) \quad \text{und} \quad (1, 1, 1)$$

erzeugt. Die ersten drei Geraden werden von Standard-Basisvektoren aufgespannt, die nächsten drei gehen durch eine zyklische Vertauschung der Basisvektoren auseinander hervor. Weiter ist jeder 2-dimensionale Unterraum von  $V$  Lösungsraum einer linearen Gleichung der Form  $a_1 \cdot y_1 + a_2 \cdot y_2 + a_3 \cdot y_3 = 0$ . Er enthält genau dann keinen Standard-Basisvektor, wenn jeder der Koeffizienten  $a_j$  ungleich 0, also gleich 1, ist. Der Unterraum  $U = \{y \in \mathbb{Z}_2^3 \mid y_1 + y_2 + y_3 = 0\}$  liefert dann ein allseitig flächenzentriertes orthorhombisches Gitter; in Abbildung C.4 wird es mit dem Symbol  $F$  bezeichnet.

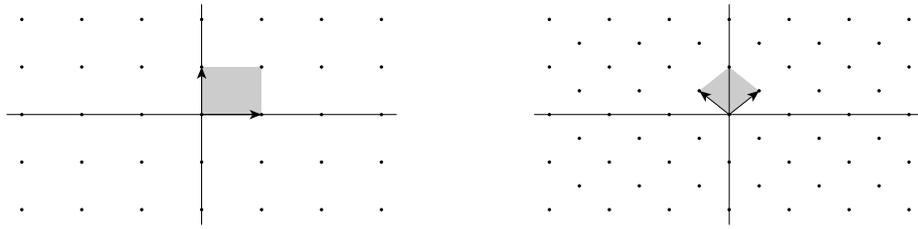
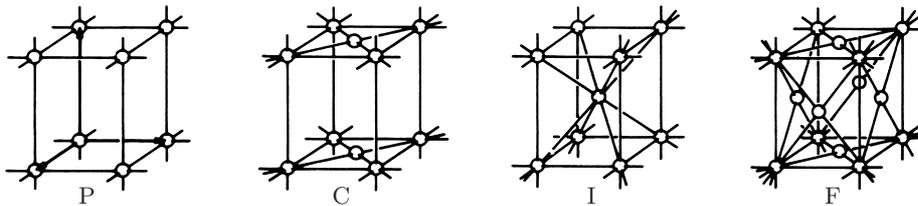


Abbildung C.3: Rechteckiges und entsprechendes rhombisches Netz

Abbildung C.4: Vertreter der 4 arithmetischen Klassen der geometrischen Klasse  $D_{2h}$ 

BEMERKUNG C8.4 Ist  $n = 3$ , so nennen die Kristallographen die arithmetischen Klassen der Form  $[(\Gamma, \text{Aut}(\Gamma))_a]$  *Bravais-Gitter*; man sollte sie besser *Bravais'sche arithmetische Kristallklassen* oder Bravais-Typen nennen, da es sich nicht um Gitter, sondern um Klassen von Gittern handelt. Es gibt 14 derartige Klassen. Die Kristallographen bezeichnen einige dieser Klassen als *primativ*, da sie besonders einfach zu beschreiben sind. Die Gitter der anderen Klassen fassen sie als Obergitter der primitiven Gitter auf, welche durch *Zentrieren* aus den primitiven Gittern entstehen. In dieser Terminologie zeigt Abbildung C.4 ein primitives orthorhombisches Gitter (links) und drei Zentrierungen desselben: ein einseitig zentriertes Gitter, das innen-zentrierte und das allseitig flächen-zentrierte Gitter.

Vom Standpunkte der Mathematik aus ist eine Frage der Konvention, welche Gitter man als primitiv bezeichnet und welche man aus ihnen durch Zentrieren ableitet; ebenso ist es eine Frage der Konvention, ob man mit einem Untergitter, etwa  $2\Gamma_p$ , oder einem Obergitter, etwa  $\Gamma_p$ , anfängt.

### 8.1c Arithmetischen Klassen der orthogonalen geometrischen Klasse

Satz C8.1 lehrt, dass jedes Paar  $(\Gamma', H)$  einem Paar  $(\Gamma, H)$  arithmetisch äquivalent ist, dessen Gitter die Bedingung

$$2\Gamma_p \subseteq \Gamma \subset \Gamma_p \quad (\text{C8.3})$$

erfüllt; dabei bezeichnet  $\Gamma_p$  das Gitter, das von einer festgewählten orthogonalen Basis  $\mathcal{B}$  erzeugt wird. Dieses Resultat impliziert insbesondere, dass die Anzahl der Gitter  $\Gamma$ , welche die Bedingung (C8.3) befriedigen, die Zahl der arithmetischen Kristallklassen, aus denen sich die geometrische Kristallklasse  $[(\Gamma_p, H)]_g$  zusammensetzt, nach oben beschränkt. Um die genaue Anzahl berechnen zu können, muss man noch herausfinden, wann zwei Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H)$ , deren Gitter die Bedingung (C8.3) erfüllen, arithmetisch äquivalent sind. Die Antwort liefert

SATZ C8.5 Seien  $U$  und  $U'$  zwei Unterräume des Vektorraumes  $V = \mathbb{Z}_2^n$ , welche keinen Vektor der Standard-Basis von  $V$  enthalten. Dann sind die Paare  $(\Gamma = \pi^{-1}(U), H)$  und  $(\Gamma' = \pi^{-1}(U'), H)$  genau dann arithmetisch äquivalent, falls  $U'$  aus  $U$  durch eine Permutation der Koordinaten von  $V = \mathbb{Z}_2^n$  hervorgeht.

*Proof.* Die Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(\Gamma', H)$  sind genau dann arithmetisch äquivalent, falls es eine lineare Bijektion  $L: \mathbb{E}^n \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}^n$  gibt, welche die Bedingungen

$$\Gamma' = L(\Gamma) \quad \text{und} \quad H = L \circ H \circ L^{-1} \quad (\text{C8.4})$$

erfüllt (Definition B5.13). Die zweite dieser Bedingungen besagt, dass  $L$  im Normalisator  $N_{\text{GL}(\mathbb{E}^n)}(H)$  von  $H$  liegt. Einige Elemente dieses Normalisators sind leicht zu finden: für jede Permutation  $\sigma$  der Indexmenge  $\{1, 2, \dots, n\}$  bezeichne  $L_\sigma$  diejenige lineare Abbildung, die den Basisvektor  $b_j$  auf den Basisvektor  $b_{\sigma(j)}$  abbildet. Weil die Gleichung  $L \circ \rho_j \circ L^{-1} = \rho_{\sigma(j)}$  für jeden Index  $j$  gilt und da  $H$  von den Spiegelungen  $\rho_j$  erzeugt wird, normalisiert  $L_\sigma$  die Gruppe  $H$ . Da  $L_\sigma$  das Gitter  $\Gamma_p$  auf sich abbildet, ist  $\Gamma' = L_\sigma(\Gamma)$  ein Gitter, das die Bedingung (C8.3) ebenfalls erfüllt.

Sei nun  $L$  eine lineare Bijektion, welche die Bedingungen (C8.4) erfüllt. Ich behaupte, es gebe eine Permutation  $\sigma$  mit der Eigenschaft, dass die Zusammensetzung  $L_\sigma^{-1} \circ L$  mit jedem Element der Gruppe  $H$  kommutiert. Die Permutation findet man so: die Gruppe  $H$  wird von den Spiegelungen  $\rho_1, \dots, \rho_n$  erzeugt; da diese Spiegelungen miteinander kommutieren, ist jede Abbildung  $\varphi \in H$  eine Komposition der Form

$$\varphi = \rho_1^{\varepsilon_1} \circ \rho_2^{\varepsilon_2} \circ \dots \circ \rho_n^{\varepsilon_n};$$

dabei sind die Exponenten  $\varepsilon_j$  entweder 0 oder 1. Falls  $\varphi$  nicht die Identität ist, ist  $-1$  ein Eigenwert von  $\varphi$ ; die Vielfachheit dieses Eigenwerts ist gerade die Anzahl der Exponenten  $\varepsilon_j$ , die gleich 1 sind. Dies zeigt insbesondere, dass die Abbildungen  $\rho_j$  die einzigen Spiegelungen in  $H$  sind. Die Formel

$$\varphi(v) = \lambda \cdot v \Rightarrow (L \circ \varphi \circ L^{-1})(L(v)) = \lambda \cdot L(v)$$

lehrt andererseits, dass  $L$  den Eigenraum von  $\varphi$  zum Eigenwert  $\lambda$  in den Eigenraum von  $L \circ \varphi \circ L^{-1}$  zum gleichen Eigenwert abbildet. Folglich induziert Konjugation mit  $L$  eine Permutation der 1-dimensionalen Eigenräume  $E_{-1}(\rho_j) = \mathbb{R} \cdot b_j$  der Spiegelungen  $\rho_j$ ; sei  $\sigma$  die entsprechende Permutation der Indizes  $\{1, 2, \dots, n\}$ . Nach Konstruktion induzieren dann Konjugation mit  $L$  und Konjugation mit  $L_\sigma$  den gleichen Automorphismus auf  $H$ , weshalb die Komposition  $S = L_\sigma^{-1} \circ L$  mit jedem Element von  $H$  kommutiert. Daher bildet  $S$  jeden Eigenraum eines Elementes  $\varphi \in H$ , also insbesondere jede der Geraden  $\mathbb{R} \cdot b_1, \dots, \mathbb{R} \cdot b_n$ , auf sich ab. Bezüglich der geordneten Basis  $\mathcal{B}$  wird  $S$  also durch eine Diagonalmatrix dargestellt.

Die Gitter  $\Gamma = \pi^{-1}(U)$  und  $\Gamma' = \pi^{-1}(U')$  erfüllen beide die Bedingung (C8.3). Da das Gitter  $\Gamma_p$  von der Basis  $\mathcal{B}$  erzeugt und  $(L_\sigma)^{-1}$  von einer Permutation dieser Basisvektoren induziert wird, erfüllt auch das Gitter

$$S(\Gamma) = (L_\sigma^{-1} \circ L)(\Gamma) = L_\sigma^{-1}(\Gamma')$$

diese Bedingung. Für jeden Index  $j$  ist der Durchschnitt  $(\mathbb{R} \cdot b_j) \cap \Gamma$  die unendlich zyklische Gruppe erzeugt von  $2 \cdot b_j$ ; da die Durchschnitte  $(\mathbb{R} \cdot b_j) \cap S(\Gamma)$  ebenfalls diese Eigenschaft haben, sind alle Diagonalelemente der Matrix, die  $S$  darstellt, entweder 1 oder  $-1$ . Dann aber liegt  $S$  in der Gruppe und  $L$  besitzt die Form  $L_\sigma \circ \psi$  mit  $\psi \in H$ , weshalb  $\Gamma' = L(\Gamma)$  identisch mit  $L_\sigma(\Gamma)$  und der Unterraum  $U'$  das Bild von

$U$  unter der  $\mathbb{Z}_2$ -linearen Abbildung  $\sum_j x_j \cdot e_j \mapsto \sum_j x_j \cdot e_{\sigma(j)}$  ist. Damit ist Satz C8.5 bewiesen.  $\square$

Der gegebene Beweis von Satz C8.5 ist etwas lang und rechnerisch; das sollte einen aber nicht zur Annahme verleiten, der Satz habe keine konkreten, nützlichen Anwendungen. Die folgenden Beispiele liefern einfache Anwendungen.

BEISPIEL C8.6 Sei  $n = 3$ . Gemäss Beispiel C8.3 enthält  $V = \mathbb{Z}_2^3$  sechs Unterräume, die keinen Vektor der Standard-Basis enthalten, nämlich

$$\{(0, 0, 0)\}, \quad \mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 0), \quad \mathbb{Z}_2 \cdot (1, 0, 1), \quad \mathbb{Z}_2 \cdot (0, 1, 1), \quad \mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 1)$$

sowie  $\{(y_1, y_2, y_3) \mid y_1 + y_2 + y_3 = 0\}$ . Der dritte und vierte dieser Unterräume können durch eine Permutation von Koordinaten aus dem Unterraum  $\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 0)$  gewonnen werden. Nach Satz C8.5 zerfällt die orthogonale geometrische Kristallklasse daher in 4 arithmetische Kristallklassen.

Die Kristallographen nennen das Gitter  $2\Gamma_p = \pi^{-1}(\{(0, 0, 0)\})$  ein *primitives, orthorhombisches* Gitter und bezeichnen es mit oP. Das Gitter  $\Gamma''' = \pi^{-1}(\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 0))$  wird *einseitig orthorhombisch* genannt und mit oC bezeichnet.<sup>15</sup> Das Obergitter  $\pi^{-1}(\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 1)) = 2\Gamma_p + \mathbb{Z} \cdot (1, 1, 1)$  ist das *innenzentrierte orthorhombische* Gitter und wird mit oI bezeichnet. Schliesslich nennt man das Gitter

$$\{x_1 \cdot b_1 + x_2 \cdot b_2 + x_3 \cdot b_3 \mid x_1 + x_2 + x_3 \text{ gerade}\}$$

ein *allseitig-flächenzentriertes* Gitter (in Symbolen: oF). Die beschriebenen Gitter sind in Abbildung C.4 dargestellt.

BEISPIEL C8.7 Seien nun  $n = 4$  und  $\mathcal{U}_4$  die Menge der Unterräume von  $V = \mathbb{Z}_2^4$ , die kein Element der Standard-Basis enthalten. Die Dimension eines Unterraumes in  $\mathcal{U}_4$  ist 0, 1, 2 oder 3: zu  $\mathcal{U}_4$  gehören zuerst der Unterraum der Dimension 0 und ein einziger Unterraum der Dimension 3, nämlich  $\{(y_1, y_2, y_3, y_4) \mid \sum_j y_j = 0\}$ , er entspricht dem Gitter

$$\Gamma'_4 = \{x_1 \cdot b_1 + \cdots + x_4 \cdot b_4 \mid \sum_j x_j \text{ gerade}\}.$$

Weiter gibt es 3 Bahnen von 1-dimensionalen Unterräumen – sie werden vertreten durch  $\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 0, 0)$ ,  $\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 1, 0)$  und  $\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 1, 1)$ , und 3 Bahnen von 2-dimensionalen Unterräumen vertreten durch

$$\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 0, 0) + \mathbb{Z}_2 \cdot (0, 1, 1, 0), \quad \mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 0, 0) + \mathbb{Z}_2 \cdot (0, 0, 1, 1), \quad \mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 0, 0) + \mathbb{Z}_2 \cdot (0, 1, 1, 1).$$

Die geometrische Kristallklasse des Paares  $(\Gamma_p, \text{gp}(\{\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4\}))$  besteht folglich aus  $1 + 3 + 3 + 1 = 8 = 2^3$  arithmetischen Kristallklassen.

BEMERKUNG C8.8 In den Dimensionen 2, 3 und 4 besteht die orthogonale geometrische Kristallklasse aus genau  $2 = 2^1$ ,  $4 = 2^2$ , beziehungsweise  $8 = 2^3$  arithmetischen

<sup>15</sup>In der Kristallographie werden die Achsen des Koordinatensystems häufig mit  $a$ ,  $b$  und  $c$  (anstelle von  $x$ ,  $y$  und  $z$ ) bezeichnet. Im zentrierten Gitter

$$\Gamma''' = \pi^{-1}(\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 1, 0)) = 2\Gamma_p + \mathbb{Z} \cdot (b_1 + b_2)$$

steht der hinzugefügte Vektor  $b_1 + b_2$  dann senkrecht auf der  $c$ -Achse. Daher spricht man von  $\Gamma'''$  als einem orthorhombischen C-Gitter. Analog bezeichnet man das Gitter  $\pi^{-1}(\mathbb{Z}_2 \cdot (0, 1, 1))$  als A-Gitter, das Gitter  $\pi^{-1}(\mathbb{Z}_2 \cdot (1, 0, 1))$  als B-Gitter.

Klassen. Dieser Umstand veranlasste die Autoren Bülow, Neubüser und Wondratschek zur Frage, ob die Anzahl der arithmetischen Klassen für jedes  $n$  gleich  $2^{n-1}$  sei ([BNWb], p. 534). Nach Schwarzenberger ([Sch74], p.28) fällt die Antwort negativ aus: er findet für  $n \in \{5, 6, 7\}$  die Anzahlen  $16 = 2^{5-1}$ , 36 und 80.

## 8.2 Algebraisierung des Lösens der Kongruenzen von Frobenius

In der Arbeit [Bu34] verfeinerte J. J. Burckhardt die Rechnung von Frobenius<sup>16</sup> so, dass er die Translationsklassen in  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  explizit bestimmen konnte. In der Einleitung der Arbeit beschreibt er sein Vorhaben so:

Ich werde aus den Ansätzen von Frobenius heraus gewisse Sätze herleiten, die für zyklische Gruppen und Gruppen, die sich aus solchen zyklischen Gruppen zusammensetzen, diese Verzweigung der [arithmetischen] Klassen in die verschiedenen Bewegungsgruppen regeln. Dadurch ist dann zugleich die Aufgabe gelöst, die Bieberbach-Frobenius'sche Methode soweit durchzuführen, daß man zu gegebener Klasse die zugehörigen Gruppen angeben kann.

Das Berechnungsverfahren von Burckhardt ist später ausgebaut und verallgemeinert worden: in [Za48] gibt H. Zassenhaus eine algorithmische Version des Verfahrens – er fand sie unabhängig von den Arbeiten Burckhardts; andererseits ist das Verfahren heute Teil einer viel allgemeineren Theorie, der *Cohomologie-Theorie von Gruppen*. In diesem Unterabschnitt erkläre ich die Anfangsgründe des Berechnungsverfahrens. Beispiele folgen dann im Unterabschnitten 8.3 und 8.4 .

### 8.2a Derivationen und die Kohomologiegruppe $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$

Seien, wie üblich,  $\Gamma$  ein Gitter eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  und  $H$  eine Untergruppe der Automorphismengruppe des Gitters. Jede kristallographische Gruppe der Familie  $G \in \mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  gibt Anlass zu Funktionen  $\varphi \mapsto v_\varphi$ , deren Werte in  $\mathbb{E}$  liegen, aber nur *modulo*  $\Gamma$  eindeutig bestimmt sind. Setzt man diese Funktionen mit der kanonischen Projektion  $\mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}/\Gamma$  zusammen, erhält man eine einzige Funktion, nämlich

$$D_G: H \rightarrow \mathbb{E}/\Gamma, \quad \varphi \mapsto u_\varphi + \Gamma; \quad (\text{C8.5})$$

sie erfüllt die Gleichungen

$$D_G(\varphi \circ \varphi') = D_G(\varphi) + \overline{\varphi}(D_G(\varphi')). \quad (\text{C8.6})$$

In ihnen bezeichnet  $\overline{\varphi}$  den von  $\varphi$  auf  $\mathbb{E}/\Gamma$  induzierten Automorphismus von Gruppen. Er existiert, da  $\varphi$  das Gitter  $\Gamma$  auf sich abbildet; er ordnet der Klasse  $v + \Gamma$  die Klasse  $\varphi(v) + \Gamma$  zu.

Jede Funktion  $D: H \rightarrow \mathbb{E}/\Gamma$ , welche die Identitäten (C8.6) erfüllt, wird *Derivation* oder *verschränkter Homomorphismus* genannt. Die Menge der Derivationen von  $H$  mit Werten in  $\mathbb{E}/\Gamma$  bezeichne ich mit  $\text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ . Hilfssatz C7.15 besagt, dass die Vorschrift  $G \mapsto D_G$  eine Bijektion von der Menge der kristallographischen Gruppen  $\mathcal{M}_{(\Gamma, H)}$  auf die Menge der Derivationen  $\text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  liefert. Nun sind die Elemente von  $\text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  aber Funktionen, die auf die übliche Art addiert werden können. Wie

<sup>16</sup>Siehe Nummer 7.3c.

man leicht nachprüft, ist  $\text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  eine Untergruppe der Gruppe aller Funktionen  $f: H \rightarrow \mathbb{E}/\Gamma$ .

Die Konstruktion von Derivationen ist im allgemeinen mühsam; einige sind aber leicht zu finden. Jedes Element  $a \in \mathbb{E}/\Gamma$  gibt nämlich Anlass zu einer so genannten *inneren Derivation*  $D_a$ , definiert durch  $\varphi \mapsto (\mathbb{1} - \overline{\varphi})(a)$ ; die Rechnung

$$D_a(\varphi \circ \varphi') = (\mathbb{1} - \overline{\varphi \circ \varphi'})(a) = (\mathbb{1} - \overline{\varphi} + \overline{\varphi} \circ (\mathbb{1} - \overline{\varphi'}))(a) = D_a(\varphi) + \overline{\varphi}(D_a(\varphi'))$$

zeigt, dass  $D_a$  auch wirklich eine Derivation ist. Die inneren Derivationen von  $H$  mit Werten in  $\mathbb{E}/\Gamma$  bilden eine Untergruppe von  $\text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ ; ich bezeichne sie mit  $\text{IDer}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ . Die Formel (C7.14) lehrt dann, dass die Translationsklassen der kristallographischen Gruppen in  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  durch die Korrespondenz  $G \mapsto D_G$  auf die Nebenklassen von  $\text{IDer}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  in  $\text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  abgebildet werden. Führt man die Faktorgruppe

$$\mathbb{H}^1(H, \mathbb{E}/\Gamma) = \text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma) / \text{IDer}(H, \mathbb{E}/\Gamma) \quad (\text{C8.7})$$

ein, lässt sich diese Erkenntnis so aussprechen:

**SATZ C8.9** *Die Korrespondenz  $G \mapsto D_G$  induziert eine Bijektion  $\eta_{(\Gamma, H)}$  von der Menge der Translationsklassen in  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  auf die abelsche Gruppe  $\mathbb{H}^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ .*

Die Gruppe  $\mathbb{H}^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  wird *erste Kohomologiegruppe von  $H$  mit Koeffizienten in  $\mathbb{E}/\Gamma$*  genannt. Sie ist endlich, nach Satz C7.16 beträgt ihre Ordnung nämlich höchstens  $(\text{card } H)^{n \cdot d}$ . Dabei bezeichnet  $d$  eine obere Schranke der Erzeugendenzahl von  $H$ .

### 8.2b Wirkung des Normalisators auf $\mathbb{H}^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$

Sei  $[G]_{\text{aff}}$  die affine Äquivalenzklasse einer kristallographischen Gruppe in  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$ . Nach Nummer 7.3c ist  $[G]_{\text{aff}}$  eine Vereinigung von Translationsklassen; der Durchschnitt  $[G]_{\text{aff}} \cap \mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  besteht daher aus vollen Translationsklassen. Unter der Bijektion  $\eta_{(\Gamma, H)}$  entspricht dieser Menge von Translationsklassen eine Teilmenge  $B_G$  der Kohomologiegruppe  $\mathbb{H}^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ . Um die Gestalt dieser Teilmenge zu finden, betrachten wir eine lineare Transformation  $L: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  und ein Element  $(v, \varphi)$  von  $G$ . Die Rechnung

$$(0, L) \cdot (v, \varphi) \cdot (0, L)^{-1} = (L(v), L \circ \varphi) \cdot (0, L^{-1}) = (L(v), L \circ \varphi \circ L^{-1})$$

zeigt dann, dass die konjugierte Gruppe  $G' = (0, L) \cdot G \cdot (0, L)^{-1}$  genau dann in  $\mathcal{G}_{(\Gamma, H)}$  liegt, falls  $L$  das Gitter  $\Gamma$  auf sich abbildet und  $L \cdot H \cdot L^{-1}$  mit  $H$  übereinstimmt, das heisst, falls  $L$  zum Normalisator  $N = N_{\text{GL}(\Gamma)}(H)$  von  $H$  in der Gruppe aller linearer Transformationen  $L$  von  $\mathbb{E}$  gehört, die das Gitter  $\Gamma$  auf sich abbilden.

Seien nun  $\varphi \mapsto u_\varphi$  eine Funktion, die  $G$  beschreibt, und  $L \in N$ . Aus obiger Rechnung folgt, dass die konjugierte Gruppe  $G' = (0, L) \cdot G \cdot (0, L)^{-1}$  durch die Funktion  $L \circ \varphi \circ L^{-1} \mapsto L(u_\varphi)$  beschrieben wird; ihre Standardbeschreibung ist  $\psi \mapsto L(u_{L^{-1} \circ \psi \circ L})$ . Somit bildet die lineare Transformation  $L$  die Derivation  $D_G$  auf

$$D_{G'}: \varphi \mapsto \overline{L}(D(L^{-1} \circ \varphi \circ L)) \quad (\text{C8.8})$$

ab. Die Menge  $B_G$  ist also eine Bahn unter der Wirkung von  $N$  auf  $\mathbb{H}^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ .

Das folgende Resultat fasst das eben gesagte zusammen:

**HAUPTSATZ C8.10** *Die Menge der affinen Äquivalenzklassen von kristallographischen Gruppen, die zur arithmetischen Klasse  $[(\Gamma, H)]_a$  gehören, entspricht bijektiv den Bahnen des Normalisators  $N_{\text{GL}(\Gamma)}(H)$  auf der Kohomologiegruppe  $\mathbb{H}^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ .*

BEMERKUNG C8.11 Theorem C8.10 ist der Schlüssel zur Lösung der Aufgabe, die affinen Äquivalenzklassen zu konstruieren, die in einer gegebenen arithmetischen Kristallklasse  $[(\Gamma, H)]_a$  enthalten sind. Das Theorem liefert eine Antwort, falls es gelingt, die folgenden drei Informationen zu finden:

- die genaue algebraische Struktur der endlichen Gruppe  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ ;
- ein Erzeugendensystem des Normalisators  $N = N_{\text{GL}(\Gamma)}(H)$  oder wenigstens ein Erzeugendensystem des Bildes von  $N$  in der endlichen Gruppe  $\text{Aut}(H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma))$ , (Man beachte, dass  $N$  auf der (abelschen) Gruppe  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  durch Automorphismen wirkt.)
- ein System von Vertretern der Bahnen des Normalisators  $N$  auf  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ .

Der Umstand, dass die Kohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  eine Gruppe — und nicht nur eine Menge — ist, erlaubt es in einigen Fällen, die oben genannten Informationen mit mässigem Aufwand zu bekommen, insbesondere in folgenden Fällen:

- $\text{card}(H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)) = 1$ : dann besteht die arithmetische Kristallklasse  $[(\Gamma, H)]_a$  aus einer einzigen affinen Äquivalenzklasse.
- $\text{card}(H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)) = 2$ : die Kohomologiegruppe ist zyklisch von der Ordnung 2 und die Identität ist der einzige Automorphismus, weshalb  $[(\Gamma, H)]_a$  aus zwei affinen Äquivalenzklassen besteht.
- $\text{card}(H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)) = 3$ : die Kohomologiegruppe ist zyklisch von der Ordnung 3 und besitzt neben der Identität noch einen Automorphismus, der die beiden Elemente, die nicht neutral sind, austauscht. Folglich setzt sich  $[(\Gamma, H)]_a$  aus 2 oder 3 affinen Äquivalenzklassen zusammen.

### 8.2c Berechnung der Gruppen $\text{Der}(H, M)$ und $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$

Will man nachweisen, dass die Kohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  für ein Paar  $(\Gamma, H)$  nur aus einem Element besteht, genügt es, einige allgemeine Eigenschaften der Derivationen zu kennen. Schwieriger wird es, wenn man vermutet, die Gruppe habe mehr als ein Element und dann die genaue Struktur sucht. In einfachen Fällen helfen dann Hilfssatz C8.13 und Satz C8.16 weiter.

Hilfssatz C8.12 bringt einige allgemeine Eigenschaften von Derivationen. Da in der Folge Derivationen mit Werten in verschiedenen Moduln benützt werden, gehe ich vom  $H$ -Modul  $\mathbb{E}/\Gamma$  zu einem beliebigen  $H$ -Moduln  $M$  über; die Beweise werden dadurch nicht schwieriger, die Notation sogar einfacher.<sup>17</sup>

HILFSSATZ C8.12 Seien  $H$  eine Gruppe,  $M$  ein  $H$ -Modul und  $D: H \rightarrow M$  eine Derivation. Dann gelten die Aussagen:

$$(i) \quad D(\mathbb{1}) = 0,$$

$$(ii) \quad D(\varphi^{-1}) = -\varphi^{-1}(D(\varphi)) \text{ für } \varphi \in H,$$

$$(iii) \quad D(\varphi^k) = (\mathbb{1} + \varphi + \dots + \varphi^{k-1})(D(\varphi)) \text{ für } \varphi \in H \text{ und } k > 1.$$

<sup>17</sup>Ein  $H$ -Modul ist eine abelsche Gruppe, für welche ein Homomorphismus  $H \rightarrow \text{Aut}(M)$  festgelegt worden ist.

(iv) Erzeugt  $\mathcal{S}$  die Gruppe  $H$ , so wird  $D$  bereits durch die Werte auf  $\mathcal{S}$  festgelegt.

*Proof.* Alle Rechenregeln ergeben sich durch leichte Rechnungen. Aus der Gleichung  $\mathbb{1} \circ \mathbb{1} = \mathbb{1}$  und der definierenden Eigenschaft (C8.6) folgt erst einmal die Gleichung

$$D(\mathbb{1}) = D(\mathbb{1} \circ \mathbb{1}) = D(\mathbb{1}) + \mathbb{1}(D(\mathbb{1})) = 2D(\mathbb{1}).$$

Sie zeigt, dass  $D(\mathbb{1})$  das neutrale Element des Moduls  $M$  sein muss. Aus diesem Resultat und der definierenden Eigenschaft einer Derivation ergibt sich dann die Kette von Gleichungen

$$0 = D(\mathbb{1}) = D(\varphi^{-1} \circ \varphi) = D(\varphi^{-1}) + \varphi^{-1}(D(\varphi)).$$

Sie rechtfertigt Behauptung (ii). Aussage (iii) beweist man mit Induktion: sie ist offensichtlich für  $k = 1$  und für  $k > 1$  gilt die Rechnung

$$\begin{aligned} D(\varphi^k) &= D(\varphi^{k-1} \circ \varphi) = D(\varphi^{k-1}) + \varphi^{k-1}(D(\varphi)) \\ &= (\mathbb{1} + \varphi + \cdots + \varphi^{k-2})(D(\varphi)) + \varphi^{k-1}(D(\varphi)). \end{aligned}$$

Die letzte Behauptung (iv) ist eine direkte Folge der Rechenregeln (i), (ii) und (iii): sind die Werte von  $D$  auf dem Erzeugendensystem  $\mathcal{S}$  bekannt, so sind sie es dank (i) und (ii) auch auf  $\mathbb{1}$  und auf den Inversen der Elemente von  $\mathcal{S}$ . Mit Hilfe der definierenden Eigenschaft einer Derivation kann man daraus die Werte auf allen Gruppenelementen berechnen.  $\square$

Die Berechnung der Gruppe  $\text{Der}(H, M)$  ist einfach, wenn  $H$  zyklisch ist:

**HILFSSATZ C8.13** *Seien  $H$  eine zyklische Gruppe der Ordnung  $h > 1$  und  $M$  ein  $H$ -Modul. Falls  $\varphi_1$  die Gruppe  $H$  erzeugt, so liefert die Auswertung  $D \mapsto D(\varphi_1)$  einen Isomorphismus von  $\text{Der}(H, M)$  auf den Kern  $\ker \delta$  des Endomorphismus*

$$\delta = \mathbb{1} + \varphi_1 + \varphi_1^2 + \cdots + \varphi_1^{h-1}.$$

*Proof.* Ist  $D: H \rightarrow M$  eine Derivation, so gilt nach Hilfssatz C8.12 die Rechnung

$$0 = D(\mathbb{1}) = D(\varphi_1^h) = (\mathbb{1} + \varphi_1 + \cdots + \varphi_1^{h-1})(D(\varphi_1)) = \delta(D(\varphi_1)).$$

Sie zeigt, dass  $D(\varphi_1)$  im Kern von  $\delta$  liegt. Sei umgekehrt  $a \in \ker \delta$ . Die Vorschrift  $\varphi_1^k \mapsto (\mathbb{1} + \varphi_1 + \varphi_1^2 + \cdots + \varphi_1^{k-1})(a)$  definiert eine Funktion von  $H$  mit Werten in  $M$ ; eine kurze Rechnung zeigt, dass es sich bei ihr um eine Derivation  $D_1$  handelt; nach Punkt (iii) von Hilfssatz C8.12 ist sie die einzige Derivation  $D$  mit  $D(\varphi_1) = a$ .  $\square$

Intuitiv gesprochen besagt Hilfssatz C8.13, die Gruppe der Derivation von  $H$  mit Werten in einem gegebenen Modul  $M$  werde durch den Lösungsraum eines „linearen“ Gleichungssystems parametrisiert. Dieser Sachverhalt gilt für beliebige endliche Gruppen; um das Gleichungssystem aufstellen zu können braucht man dann aber eine *Präsentierung von  $H$  durch Erzeugende und Relationen*.

Die *algorithmische Berechnung* des Lösungsraumes kann nur durchgeführt werden, wenn man den Modul  $\mathbb{E}/\Gamma$  durch einen kleineren Modul ersetzt: die dem Modul  $\mathbb{E}/\Gamma$  unterliegende abelsche Gruppe ist nämlich riesig und  $\mathbb{E}/\Gamma$  ist kein reeller Vektorraum. Satz C8.16 nennt einen Ausweg: bei ihm werden zwei *endlich erzeugbare* abelsche Hilfsgruppen von Derivationen  $\text{Der}(H, \Gamma_h)$  und  $\text{Der}(H, \Gamma_h/\Gamma)$  berechnet und

daraus  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  als Kokern einer Abbildung  $\pi_*$  gewonnen. Ausgangspunkt ist die Frobeniussche Überlegung, die zu Satz C7.16 führte: gemäss ihr induziert die Inklusion  $\mu: \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma \hookrightarrow \mathbb{E}/\Gamma$  einen surjektiven Homomorphismus

$$\mu_{h,*}: \text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma) \rightarrow \text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma) \twoheadrightarrow H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma).$$

Es geht also nun darum, eine handliche Beschreibung des Kernes von  $\mu_{h,*}$  zu finden.

Von einem praktischen Standpunkt aus gesehen, braucht man allerdings eine Variante des angedeuteten Resultates: es kann durchaus sein, dass  $h$  eine riesig grosse Zahl ist, die Surjektivität von  $\mu_*$  aber auch dann erfüllt bleibt, wenn  $h$  durch einen kleinen Teiler  $e$  von  $h$  ersetzt wird. Der folgende Hilfssatz nennt eine konkrete Situation, in der ein solcher Teiler leicht angegeben werden kann:

**HILFSSATZ C8.14** *Besitzt  $H$  einen Normalteiler  $H_1$ , derart dass kein Vektor  $v \in \mathbb{E} \setminus \{0\}$  von allen Abbildungen  $\psi \in H_1$  festgehalten wird, und ist  $e = \text{card}(H_1)$ , so ist die offensichtliche Zusammensetzung*

$$\mu_{e,*}: \text{Der}(H, \frac{1}{e}\Gamma/\Gamma) \hookrightarrow \text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma) \twoheadrightarrow H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma) \quad (\text{C8.9})$$

surjektiv.

*Proof.* Sind  $\varphi \in H$  und  $\psi \in H_1$ , so gilt die Rechnung

$$\begin{aligned} D(\varphi) + \overline{\varphi}(D(\psi)) &= D(\varphi \circ \psi) = D((\varphi \circ \psi \circ \varphi^{-1}) \circ \varphi) \\ &= D(\varphi \circ \psi \circ \varphi^{-1}) + \overline{\varphi \circ \psi \circ \varphi^{-1}}(D(\varphi)). \end{aligned}$$

Summiert man das Ergebnis dieser Rechnung für alle  $\psi \in H_1$  und berücksichtigt, dass mit  $\psi$  auch  $\varphi \circ \psi \circ \varphi^{-1}$  den Normalteiler  $H_1$  durchläuft, erhält man die Beziehung

$$\text{card } H_1 \cdot D(\varphi) + \overline{\varphi} \left( \sum_{\psi} D(\psi) \right) = \sum_{\psi} D(\psi) + \overline{\varphi}(D(\varphi));$$

in ihr bezeichnet  $\sigma$  den Endomorphismus  $\sum_{\psi \in H_1} \psi$ . Dieser bildet jeden Vektor  $v \in V$  auf einen Vektor ab, der von allen Abbildungen  $\psi \in H_1$  festgehalten wird; nach Annahme ist  $\sigma$  also die Nullabbildung. Sei nun  $\sum_{\psi} D(\psi) = u + \Gamma$  und  $D'$  die Derivation gegeben durch

$$D'(\varphi) = D(\varphi) - (\mathbb{1} - \overline{\varphi})(\frac{1}{e}u + \Gamma).$$

Nach Definition der Cohomologiegruppe haben  $D$  und  $D'$  das gleiche Bild in  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$ ; andererseits ist  $e \cdot D'$  die Nullderivation, weshalb die Werte von  $D'$  in  $\frac{1}{e}\Gamma/\Gamma$  liegen.  $\square$

**BEMERKUNG C8.15** Dieser Hilfssatz ist insbesondere dann anwendbar, wenn  $H$  die Abbildung  $-\mathbb{1}$  enthält. Dann setzt man  $H_1 = \{\mathbb{1}, -\mathbb{1}\}$ .

Die angekündigte Beschreibung des Kernes von  $\mu_{e,*}$  lautet nun:

**SATZ C8.16** *Ist  $e > 1$  ein Teiler der Ordnung von  $H$ , so ist der Kern des Homomorphismus  $\mu_{e,*}$  gleich dem Bild des Homomorphismus*

$$\pi_{e,*}: \text{Der}(H, \frac{1}{e}\Gamma) \rightarrow \text{Der}(H, \frac{1}{e}\Gamma/\Gamma). \quad (\text{C8.10})$$

Dabei bezeichnet  $\pi_e$  die kanonische Projektion von  $\frac{1}{e}\Gamma$  auf  $\frac{1}{e}\Gamma/\Gamma$ .

*Proof.* Liegt  $D$  im Kern der Abbildung  $\mu_{e,*}$ , so ist die Zusammensetzung  $\mu_e \circ D$  in  $\text{IDer}(H, V/\Gamma)$ ; nach Definition gibt es also ein Element  $a = v + \Gamma \in \mathbb{E}/\Gamma$ , derart dass die Gleichung  $D(\varphi) = (\mathbb{1} - \varphi)(v) + \Gamma$  für jedes  $\varphi \in H$  erfüllt ist. Da  $D$  eine Derivation mit Werten in  $\frac{1}{e}\Gamma/\Gamma$  ist, sind die Vektoren  $(\mathbb{1} - \varphi)(v)$  Elemente von  $\frac{1}{e}\Gamma$ ; die Zuordnung  $\varphi \mapsto (\mathbb{1} - \varphi)(v)$  ist daher eine Derivation  $\tilde{D} \in \text{Der}(H, \frac{1}{e}\Gamma)$  mit  $\pi_e \circ \tilde{D} = D$ .

Liegt umgekehrt  $\tilde{D} \in \text{Der}(H, \frac{1}{e}\Gamma)$ , so wenden wir die Überlegung von Frobenius (siehe Nummer 7.3c) auf  $\tilde{D}$  an: aus der Gleichung  $\tilde{D}(\varphi \circ \varphi') = \tilde{D}(\varphi) + \varphi(\tilde{D}(\varphi'))$  ergibt sich durch Summation über  $\varphi'$  die Beziehung

$$\sum_{\varphi'} \tilde{D}(\varphi \circ \varphi') = \text{card}(H) \cdot \tilde{D}(\varphi) + \sum_{\varphi'} \varphi(\tilde{D}(\varphi'))$$

oder  $\text{card}(H) \cdot \tilde{D}(\varphi) = (\mathbb{1} - \varphi)(\sum_{\varphi'} \tilde{D}(\varphi'))$ . Das Neue gegenüber Nummer 7.3c ist dass es sich hier um eine Gleichung in einem reellen Vektorraum handelt, weshalb Division mit  $h = \text{card}(H)$  definiert ist. Setzt man  $w = \frac{1}{h} \sum_{\varphi'} \tilde{D}(\varphi')$ , so gilt also die Formel  $\tilde{D}(\varphi) = (\mathbb{1} - \varphi)(w)$  für jedes  $\varphi \in H$ ; sie zeigt, dass die Zusammensetzung

$$H \rightarrow \frac{1}{e}\Gamma/\Gamma \rightarrow \frac{1}{e}\Gamma/\Gamma \rightarrow \mathbb{E}/\Gamma$$

eine innere Derivation von  $H$  mit Werten in  $\mathbb{E}/\Gamma$  ist. □

### 8.3 Anwendung auf zyklische Punktgruppen

In diesem Unterabschnitt zeige ich, wie die Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  berechnet werden kann, wenn  $H$  eine zyklische Gruppe ist. Das Resultat list besonders einfach, wenn  $H$  von einer Abbildung erzeugt wird, die 1 nicht als Eigenwert hat. Dann besteht die Kohomologiegruppe nur aus einem Element, und zwar für jede der arithmetischen Klassen, aus denen sich die geometrische Klasse  $[(H, \Gamma)]_g$  zusammensetzt. Da der Beweis dieser Behauptung besonders einfach ist, beginne ich mit ihr.

#### 8.3a Spezialfall, in dem 1 nicht Eigenwert der erzeugenden Abbildung ist

Sei  $\varphi_1: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  eine orthogonale Abbildung (endlicher Ordnung), die ein Gitter  $\Gamma'$  invariant lässt, und sei  $H = \text{gp}(\{\varphi_1\})$ . Ich betrachte in dieser Nummer den Spezialfall, bei dem 1 kein Eigenwert von  $\varphi_1$  ist:

**HILFSSATZ C8.17** Falls 1 nicht Eigenwert von  $\varphi_1$  ist, so besteht die Kohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  für jedes unter  $\varphi_1$  invariante Gitter  $\Gamma$  aus einem einzigen Element.

*Proof.* Seien  $D: H \rightarrow \mathbb{E}/\Gamma$  eine Derivation und sei  $D(\varphi_1) = w + \Gamma$ . Nach Annahme ist der (lineare) Endomorphismus  $\mathbb{1} - \varphi_1: \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{E}$  injektiv, also auch surjektiv; insbesondere hat die Gleichung  $(\mathbb{1} - \varphi_1)(x) = w$  daher eine Lösung  $v$ . Die innere Derivation  $D_a$  mit  $a = v + \Gamma$  ist dann eine Derivation, die auf  $\varphi_1$  mit der Derivation  $D$  übereinstimmt, weshalb  $D$  nach Aussage (iv) von Hilfssatz C8.12 gleich der inneren Derivation  $D_a$  ist. □

**BEMERKUNGEN C8.18** 1) Der knappe Beweis zeigt, dass in einigen Fällen die Berechnung der Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  einfach bleiben kann, auch wenn man mit den grossen Gruppen  $\text{Der}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  und  $\text{IDer}(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  arbeitet.

2) Der Beweis ist insofern irreführend, als das Ergebnis auch ohne jede Theorie gerechtfertigt werden kann: nach Annahme ist  $G$  eine kristallographische Gruppe, die eine Isometrie der Form  $\tau_w \circ \varphi_1$  enthält. Die Voraussetzung über die Eigenwerte von  $\varphi$  impliziert dann, dass es einen Vektor  $v \in \mathbb{E}$  mit  $\tau_w \circ \varphi_1 = \tau_v \circ \varphi_1 \circ \tau_v^{-1}$  gibt. Daher enthält die konjugierte Gruppe  $G' = \tau_{-v} \circ G \circ \tau_{-v}^{-1}$  die orthogonale Abbildung  $\varphi_1$ , also auch die von ihr erzeugte Gruppe  $H = G_0$ .

Es lohnt sich, einige Spezialfälle genauer zu betrachten.

BEISPIEL C8.19 Sei  $n = 2$ . Dann ist  $\varphi_1$  eine *Drehung* einer der Ordnungen 2, 3, 4 oder 6. Ist die Ordnung gleich 2, so ist  $\varphi_1 = -\mathbb{1}$  und jedes beliebige Netz ist invariant unter  $\varphi_1$ . Ist die Ordnung hingegen 3 oder 6, ist jedes unter  $H$  invariante Netz notwendigerweise *hexagonal* und zwei verschiedene, unter  $H$  invariante Netze, sind ähnlich. Die Situation für  $h = 4$  ist ähnlich: das Netz muss dann quadratisch sein.

Abbildung C.5 gibt die sehr charakteristische Anordnung der Drehzentren wieder, die vorliegen muss, falls ein periodisches Ornament Drehung der Ordnung 3, 4 oder 6 zulässt.

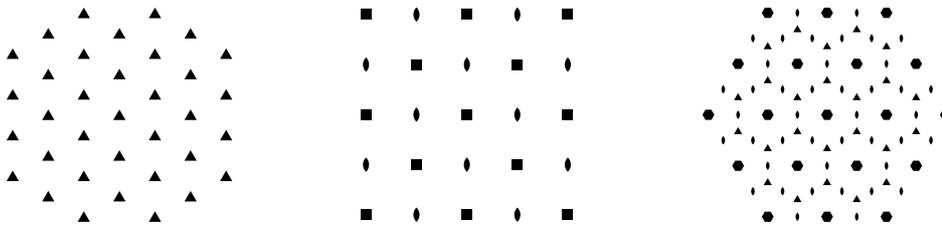


Abbildung C.5: Anordnung der Drehzentren

Die Anordnungen der Drehzentren sind in den folgenden periodischen Ornamenten gut zu erkennen.

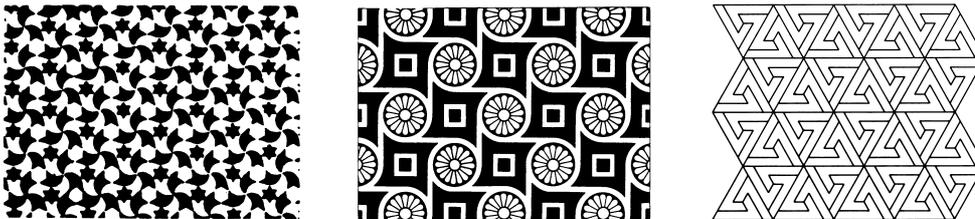


Abbildung C.6: Ornamente, die Drehungen, aber keine Spiegelungen, zulassen

BEISPIEL C8.20 Sei nun  $n = 3$ . Dann ist  $\varphi_1$  eine *Drehspiegelung* der Ordnung 2, 4 oder 6. Ist ihre Ordnung 2, so ist  $\varphi_1 = -\mathbb{1}$ ; jedes Gitter  $\Gamma$  von  $\mathbb{E}^3$  ist invariant unter  $\varphi_1 = -\mathbb{1}$ .

Interessanter sind Drehspiegelungen der Ordnung  $h = 4$ : sei  $\varphi_1$  eine solche Drehspiegelung und  $\Gamma'$  ein unter  $\varphi_1$  invariantes Gitter. Dann ist die geometrische Klasse  $[(\Gamma', H)]_g$  gerade jene Kristallklasse, die Schoenflies mit  $S_4$  und Hermann-Mauguin mit  $\bar{4}$  bezeichnen. Diese geometrische Kristallklasse setzt sich aus zwei arithmetischen

Klassen zusammen; bezeichnet  $\mathbb{R} \cdot b_3$  die Achse der Drehspiegelung  $\varphi_1$ , haben die Gitter  $\Gamma_p$  der ersten Klasse die folgende Beschreibung:  $\Gamma_p \cap (\mathbb{R} \cdot b_3)^\perp$  ist ein quadratisches Netz,  $\Gamma_p \cap (\mathbb{R} \cdot b_3)$  ist unendlich zyklisch und

$$\Gamma_p = \Gamma_p \cap (\mathbb{R} \cdot b_3)^\perp \oplus \Gamma_p \cap (\mathbb{R} \cdot b_3).$$

Die Gitter  $\Gamma_I$  der anderen arithmetischen Klasse entstehen aus diesem, primitiv genannten Gitter  $\Gamma_p$ , durch Innenzentrierung.

Nach Hilfssatz C8.17 besteht jede der beiden arithmetischen Klassen  $(\Gamma_p, H)_a$  und  $(\Gamma_I, H)_a$  aus je einer affinen Äquivalenzklasse von Raumgruppen, ein Resultat, das sich in der Schoenfiesschen Zusammenfassung<sup>18</sup> in jener Zeile wiedergegeben ist, die mit  $S_4$  anfängt. In den Internationalen Tabellen [IT] werden diese beiden affinen Äquivalenzklassen – sie sind gleichzeitig eigentlich-affine Äquivalenzklassen – mit  $P\bar{4}$  und  $I\bar{4}$  bezeichnet.

Ich illustriere die Raumgruppe durch ein 3-fach periodisches Muster. Zuerst eine Vorbemerkung. Sei  $G$  eine Raumgruppe, die ein semi-direktes Produkt ihres Translationsnormalteilers  $T(G)$  und ihrer Punktgruppe  $G_0$  ist, also die Form  $\Gamma \rtimes G_0$  hat.<sup>19</sup> Sei nun  $\mathcal{X} \subset \mathbb{E}^3$  eine (nicht-leere) Teilmenge, die  $G_0$ -invariant ist. Dann ist die Vereinigungsmenge  $\cup\{\mathcal{X} + w \mid w \in \Gamma\}$  unter dem semi-direkten Produkt  $\Gamma \rtimes G_0 = \{\tau_w \circ \varphi \mid w \in \Gamma, \varphi \in G_0\}$  invariant. Falls  $\mathcal{X}$  ein Polyeder mit Mittelpunkt im Ursprung ist und die Gleichung  $\text{Sym}(\mathcal{X}) = G_0$  gilt, so enthält die Symmetriegruppe der Vereinigungsmenge  $\cup\{\mathcal{X} + w \mid w \in \Gamma\}$  die Raumgruppe  $\Gamma \rtimes G_0$ ; im allgemeinen gilt sogar  $\text{Sym}(\cup\{\mathcal{X} + w \mid w \in \Gamma\}) = \Gamma \rtimes G_0$ .

Zurück zur Gruppe vom Typ  $P\bar{4}$ . Ein Polyeder, das die von der Drehspiegelung  $\varphi_1$  erzeugte Untergruppe als Symmetriegruppe hat, ist ein unregelmässiges Simplex mit einer Eckenmenge der Form  $\mathcal{S}_p = \{p, \varphi_1(p), \varphi_1^2(p), \varphi_1^3(p)\}$ ; dabei ist  $p \in \mathbb{E}^3$  ein geeignet zu wählender Parameter, der weder in der Drehspiegelungsebene noch auf der Drehspiegelungsachse liegt. Die Kristallographen nennen ein solches Simplex ein *tetragonales Disphenoid*.

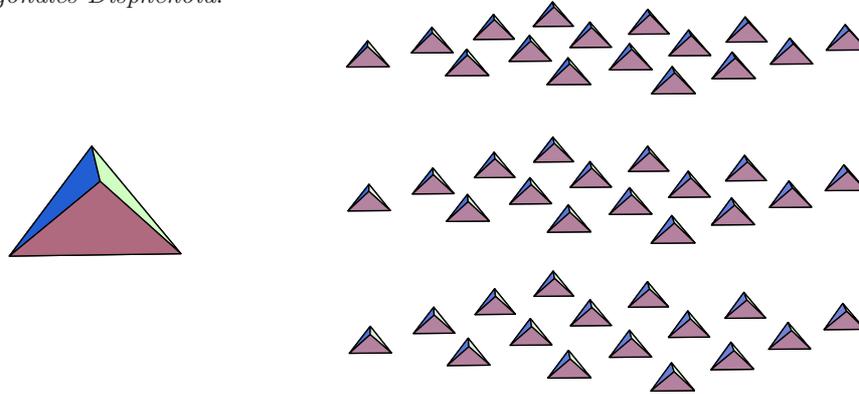


Abbildung C.7: 3-fach periodisches Muster mit Symmetriegruppe vom Typ  $P\bar{4}$

### 8.3b Zyklische Gruppen – allgemeiner Fall

Falls die orthogonale Abbildung  $\varphi_1: \mathbb{E} \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}$  die Zahl 1 als Eigenwert hat und ein Gitter auf sich abbildet, kann die Ordnung der Kohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}/\Gamma)$  vom

<sup>18</sup>Siehe Seite 56.

<sup>19</sup>Die Kristallographen bezeichnen solche Raumgruppen als *symmorph*.

Gitter  $\Gamma$  abhängen. Das Gitter muss daher in der Rechnung explizit eingehen. Dies kann man zum Beispiel dadurch erreichen, dass man mit Koordinaten bezüglich einer  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters arbeitet. Die Rechnungen werden besonders übersichtlich, wenn man algorithmisch vorgeht, das heisst die Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma)$  mit Hilfe von Satz C8.16 ausrechnet.

Die Rechnung sieht so aus. Sei  $\varphi_1: \mathbb{E}^n \xrightarrow{\sim} \mathbb{E}^n$  eine orthogonale Abbildung, die das Gitter  $\Gamma$  auf sich abbildet, und sei  $H$  die von  $\varphi_1$  erzeugte Gruppe. Denn Parameter  $e$  in Satz C8.16 wählen wir gleich  $h = \text{card } H$ ; der Homomorphismus

$$\mu_{h,*}: \text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma) \rightarrow H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma) = \frac{\text{Der}(H, \mathbb{E}^n/\Gamma)}{\text{IDer}(H, \mathbb{E}^n/\Gamma)}$$

ist dann surjektiv (siehe Nummer 7.3c). Nach Satz C8.16 ist sein Kern gleich den Bild des Homomorphismus

$$\pi_{h,*}: \text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma) \rightarrow \text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma).$$

Die Gruppen von Derivationen  $\text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma)$  und  $\text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma)$  können mit Hilfe von Hilfssatz C8.13 bestimmt werden. Bezeichnet  $\delta = 1 + \varphi_1 + \dots + \varphi_1^{h-1}$  den auf dem Gitter  $\frac{1}{h}\Gamma$  und  $\bar{\delta}$  den auf der Quotientengruppe  $\frac{1}{h}\Gamma/\Gamma$  induzierten Endomorphismus, ist die Cohomologiegruppe  $H^1(\mathbb{H}, \mathbb{E}^n/\Gamma)$  folglich isomorph dem Kokern der Abbildung

$$\ker(\delta: \frac{1}{h}\Gamma \rightarrow \frac{1}{h}\Gamma) \longrightarrow \ker(\bar{\delta}: \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma \rightarrow \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma).$$

Um diesen Kokern algorithmisch berechnen zu können, zieht man eine Basis des Gitters  $\Gamma$  heran; seien  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$  und  $A$  die Matrix, die  $\varphi_1$  bezüglich  $\mathcal{B}$  beschreibt. Berechne die ganzzahlige Matrix

$$\Delta = I_n + A + A^2 + \dots + A^{h-1}.$$

Dann ist  $H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma)$  isomorph dem Kokern des Homomorphismus

$$\{x \in (\frac{1}{h}\mathbb{Z})^n \mid \Delta \cdot x = 0\} \longrightarrow \{\bar{x} \in (\frac{1}{h}\mathbb{Z})^n \mid \bar{\Delta} \cdot \bar{x} = \bar{0}\}. \quad (\text{C8.11})$$

Diese Formel zeigt eine typische Schwäche eines Algorithmus gegenüber einer expliziten Aussage: es ist nicht zu erkennen, wie gross die Cohomologiegruppe ist. Um eine Vorstellung der Grösse zu bekommen, wenden wir die Formel auf eine spezielle Situation an: wir nehmen an, das Gitter  $\Gamma$  gestatte eine  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_m, b_{m+1}, \dots, b_n)$  mit den Eigenschaften

- (i) die letzten  $n - m$  Vektoren  $b_{m+1}, \dots, b_n$  erzeugen den Eigenraum  $E_1(\varphi_1)$  zum Eigenwert 1 der Abbildung  $\varphi_1$  und
- (ii) die ersten  $m$  Vektoren erzeugen das Orthogonalkomplement von  $E_1(\varphi_1)$ .

Dann haben  $A$  und  $\Delta$  die Kästchenform

$$A = \begin{pmatrix} A_m & 0 \\ 0 & I_{n-m} \end{pmatrix}, \quad \Delta = \begin{pmatrix} 0_m & 0 \\ 0 & h \cdot I_{n-m} \end{pmatrix}.$$

Die Gruppen  $\text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma)$  und  $\text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma)$  lassen sich dann explizit ausrechnen:

$$\begin{aligned} \text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma) &\xrightarrow{\sim} \{x \in (\frac{1}{h}\mathbb{Z})^n \mid \Delta x = 0\} = (\frac{1}{h}\mathbb{Z})^m \oplus \{0\}^{n-m}, \\ \text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma/\Gamma) &\xrightarrow{\sim} \{\bar{x} \in (\frac{1}{h}\mathbb{Z}/\mathbb{Z})^n \mid \bar{\Delta} \bar{x} = \bar{0}\} = (\frac{1}{h}\mathbb{Z}/\mathbb{Z})^m \oplus (\frac{1}{h}\mathbb{Z}/\mathbb{Z})^{m-n}. \end{aligned}$$

Folglich gilt

HILFSSATZ C8.21 Erfüllt das Gitter  $\Gamma$  die Bedingungen (i) und (ii), so ist die Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma)$  isomorph mit  $(\frac{1}{h}\mathbb{Z}/\mathbb{Z})^{m-n}$ .

BEISPIEL C8.22 Seien  $n = 2$  und  $\varphi_1 = \rho: \mathbb{R}^2 \xrightarrow{\sim} \mathbb{R}^2$  die Spiegelung an der horizontalen Achse, also  $\rho(x) = (x_1, -x_2)^t$ . Sei  $\Gamma = \Gamma_p$  ein rechteckiges Netz, erzeugt von Vektoren  $b_1 = (\lambda_1, 0)^t$  und  $b_2 = (0, \lambda_2)^t$  mit  $\lambda_1 > 0$  und  $\lambda_2 > 0$ . Im Folgenden arbeiten wir mit Koordinaten bezüglich der geordneten Basis  $\mathcal{B} = (b_1, b_2)$ . Die Matrizen  $A = (\varphi_1)_{\mathcal{B}}$  und  $\Delta = I_2 + A$  sind

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \Delta = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Gruppen von Derivationen sind daher

$$\begin{aligned} \text{Der}(H, \frac{1}{2}\Gamma) &\xrightarrow{\sim} \{x \in (\frac{1}{2}\mathbb{Z})^2 \mid \Delta x = 0\} = \{0\} \oplus \frac{1}{2}\mathbb{Z}, \\ \text{Der}(H, \frac{1}{2}\Gamma/\Gamma) &\xrightarrow{\sim} \{\bar{x} \in (\frac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z})^2 \mid \Delta \bar{x} = \bar{0}\} = \frac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z} \oplus \frac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z}. \end{aligned}$$

Die Cohomologiegruppe  $H^1(H, \frac{1}{2}\Gamma/\Gamma)$  ist somit isomorph mit  $\frac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z}$ , hat also 2 Elemente. Die arithmetische Kristallklasse  $[(\Gamma, \{\mathbb{1}, \rho\})]_a$  besteht daher aus zwei affinen Äquivalenzklassen; eine dieser Klassen wird durch das semi-direkte Produkt

$$G' = \{\tau_w \circ \varphi \mid w \in \Gamma_p, \varphi \in \text{gp}(\{\rho\})\} = \{\tau_w \mid w \in \Gamma_p\} \cup \{\tau_w \circ \rho \mid w \in \Gamma_p\}$$

vertreten, die andere durch  $G'' = \{\tau_w \mid w \in \Gamma_p\} \cup \{\tau_{w+1/2 \cdot b_1} \circ \rho \mid w \in \Gamma_p\}$ . Abbildung C.8 zeigt die Symmetriekarten der beiden Gruppen; in Abbildung C.9 sind dann entsprechende periodische Ornamente wiedergegeben.



Abbildung C.8: Symmetriekarten der Gruppen vom Typ  $p1m1$  (links) und Typ  $p1g1$

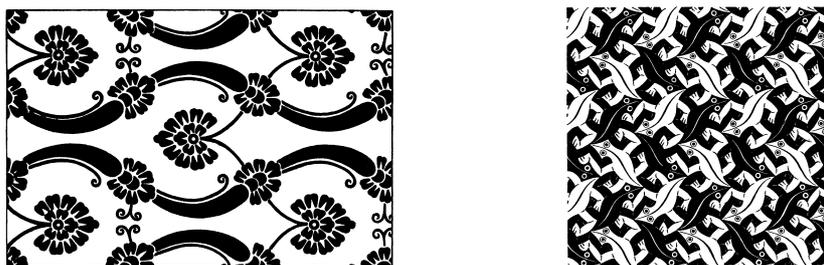


Abbildung C.9: Periodische Ornamente vom Typ  $p1m1$  (links) und Typ  $p1g1$

Vergleichen wir die Situation eines rechtwinkligen  $\Gamma_p$  Netzes mit jener eines rhombischen Netzes  $\Gamma_{rh}$ , erzeugt von Vektoren  $b'_1 = \frac{1}{2}(b_1 + b_2)$  und  $b'_2 = \frac{1}{2}(b_1 - b_2)$ . Diesmal rechnen wir mit Koordinaten bezüglich der geordneten Basis  $\mathcal{B}' = (b'_1, b'_2)$  und finden

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Delta = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

und weiter

$$\begin{aligned} \text{Der}(H, \tfrac{1}{2}\Gamma) &\xrightarrow{\sim} \{x \in (\tfrac{1}{2}\mathbb{Z})^2 \mid \Delta x = 0\} = \{(\lambda, -\lambda)^t \mid \lambda \in \tfrac{1}{2}\mathbb{Z}\} \\ \text{Der}(H, \tfrac{1}{2}\Gamma/\Gamma) &\xrightarrow{\sim} \{\bar{x} \in (\tfrac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z})^2 \mid \Delta \bar{x} = \bar{0}\} = \{(\bar{\lambda}, -\bar{\lambda})^t \mid \bar{\lambda} \in \tfrac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z}\}. \end{aligned}$$

Die Cohomologiegruppe  $H^1(H, \tfrac{1}{2}\Gamma_{rh}/\Gamma_{rh})$  besteht diesmal also nur aus dem neutralen Element; demgemäss enthält die arithmetische Kristallklasse  $[(\mathbb{Z}^2, \{1, \rho_d\})]_a$  nur eine einzige affine Äquivalenzklasse. Abbildung C.10 zeigt links die Symmetriekarte der neuen Gruppe und rechts ein periodisches Ornament, dessen Symmetriegruppe vom entsprechenden Typ  $c1m1$  ist.

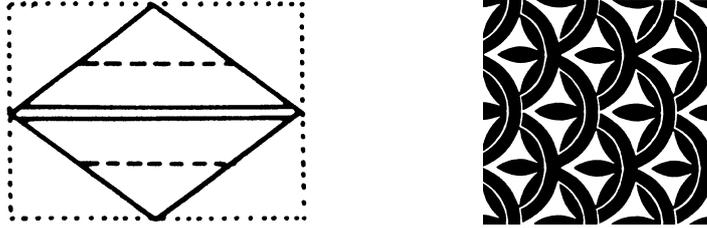


Abbildung C.10: Symmetriekarte und Illustration der Gruppe vom Typ  $c1m1$

BEISPIEL C8.23 Es sei  $n = 3$  und  $\varphi_1$  sei eine *Drehung* der Ordnung 4. Wir betrachten zunächst ein primitives tetragonales Gitter  $\Gamma_p$ , erzeugt von orthogonalen Vektoren  $b_1, b_2$  und  $b_3$  mit  $\|b_1\| = \|b_2\|$ . Wir nehmen an, dass  $\varphi_1$  und  $\delta$  durch die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \Delta = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

dargestellt werden. Hilfssatz C8.21 ist anwendbar und zeigt, dass die Cohomologiegruppe zyklisch von der Ordnung 4 ist, erzeugt vom Bild derjenigen Derivation  $D: H \rightarrow (\tfrac{1}{4}\mathbb{Z}/\mathbb{Z})^3$ , die  $\varphi_1$  auf die Restklasse  $\tfrac{1}{4} \cdot b_3 + \Gamma_p$  abbildet. Dieser Derivation die Gruppe  $G \in \mathcal{G}_{\Gamma_p, H}$ , die von den Translationen  $\tau_w$  mit  $w \in \Gamma_p$  und der Schraubung

$$\psi_1: v \mapsto \varphi_1(v) + \tfrac{1}{4}b_3 \tag{C8.12}$$

erzeugt wird.

Vergleichen wir das gewonnene Ergebnis mit jenem, das sich ergibt, wenn man das primitive tetragonale Gitter  $\Gamma_p$  durch das entsprechende innenzentrierte Gitter  $\Gamma_I$  ersetzt. Da wir mit Koordinaten arbeiten wollen, müssen wir  $\varphi_1$  in einer Basis des neuen Gitters  $\Gamma_I$  beschreiben. Seien

$$b'_1 = \tfrac{1}{2}(-b_1 + b_2 + b_3), \quad b'_2 = \tfrac{1}{2}(b_1 - b_2 + b_3), \quad b'_3 = \tfrac{1}{2}(b_1 + b_2 - b_3).$$

Die Rechnungen  $b'_1 + b'_2 = b_3$ ,  $b'_1 + b'_3 = b_2$  und  $b'_2 + b'_3 = b_1$  zeigen, dass die Vektoren  $b'_1, b'_2$  und  $b'_3$  linear unabhängig sind; da sie eine Minimalfolge des Gitters  $\Gamma_I$  bilden, erzeugen sie es (siehe Theorem B4.17). Die Rechnungen

$$\begin{aligned} \varphi(b'_1) &= \tfrac{1}{2}(-b_2 - b_1 + b_3) = -b'_3, \\ \varphi(b'_2) &= \tfrac{1}{2}(b_2 + b_1 + b_3) = b'_1 + b'_2 + b'_3, \\ \varphi(b'_3) &= \tfrac{1}{2}(b_2 - b_1 - b_3) = -b'_2 \end{aligned}$$

und einige Hilfsrechnungen zeigen dann, dass  $\varphi_1$  und  $\delta$  durch die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \Delta = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ -2 & -2 & 0 \end{pmatrix}$$

beschrieben werden. Die Gruppen der Derivationen sind daher

$$\begin{aligned} \text{Der}(H, \frac{1}{h}\Gamma) &\xrightarrow{\sim} \{x \in (\frac{1}{4}\mathbb{Z})^3 \mid \Delta x = 0\} = \{(\lambda, -\lambda, \nu) \mid \lambda \in \frac{1}{4}\mathbb{Z}, \nu \in \frac{1}{4}\mathbb{Z}\}, \\ \text{Der}(H, \frac{1}{4}\Gamma/\Gamma) &\xrightarrow{\sim} \{\bar{x} \in (\frac{1}{4}\mathbb{Z}/\mathbb{Z})^3 \mid \Delta \bar{x} = \bar{0}\} = \{(\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}, -\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}, \bar{\nu}) \mid \bar{\lambda}, \bar{\mu}, \bar{\nu} \in \frac{1}{4}\mathbb{Z}/\mathbb{Z}\} \end{aligned}$$

Der Kokern hat daher die Ordnung 2; er wird erzeugt vom Bild der Derivation  $D: H \rightarrow \frac{1}{4}\Gamma_I/\Gamma_I$  mit  $D(\varphi_1) = \frac{1}{2} \cdot b'_1 + \frac{1}{2} \cdot b'_2 + \Gamma_I = \frac{1}{2} \cdot b_3 + \Gamma_I$ ; ihr entspricht die Gruppe, welche von den Translationen  $\tau_w$  mit  $w \in \Gamma_I$  und der Schraubung

$$\psi_1: v \mapsto \varphi_1(v) + \frac{1}{2}b_3 \quad (\text{C8.13})$$

erzeugt wird.

**BEMERKUNGEN C8.24** 1) Wie wir oben gesehen haben, ist die Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}^3/\Gamma_p)$  zyklisch von der Ordnung 4. Diese Information legt die genaue Anzahl der affinen Äquivalenzklassen, aus denen sich die arithmetische Kristallklasse  $[(\Gamma_p, H)]_a$  zusammensetzt, nicht fest. Will man diese Anzahl kennen, muss man den Normalisator  $N = N_{\text{GL}(\Gamma_p)}(H)$  bestimmen. Wenn man, wie zuvor, mit Koordinaten bezüglich der orthogonalen Basis  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$  des Gitters  $\Gamma_p$  arbeitet, so ist

$$N = \{S \in \text{GL}(3, \mathbb{Z}) \mid S \cdot A \cdot S^{-1} = A^\pm\} = \{S \in \text{GL}(3, \mathbb{Z}) \mid S \cdot A = A^\pm \cdot S\}.$$

Eine leichte Rechnung zeigt dann, dass der Normalisator von der Drehung  $\varphi_1$  und der Spiegelung  $\rho$  an der Koordinatenebene mit der Gleichung  $x_3 = 0$  erzeugt wird. Bestimmen wir nun die Wirkung der Abbildungen  $\varphi_1$  und  $\rho$  auf die Derivation  $D$  mit  $D(\varphi_1) = \frac{1}{4}b_3 + \Gamma_p$ . Die Drehung  $\varphi_1$  wirkt durch die Identität, die Spiegelung  $\rho$  durch einen Vorzeichenwechsel:

$$\begin{aligned} (\varphi_{1*}(D))(\varphi_1) &= \overline{\varphi_1}(D(\varphi_1^{-1} \circ \varphi_1 \circ \varphi_1)) = \overline{\varphi_1}(D(\varphi_1)) = \overline{\varphi_1}(\frac{1}{4}b_3 + \Gamma_p) = \frac{1}{4}b_3 + \Gamma_p \\ &= D(\varphi_1), \\ (\rho_*(D))(\varphi_1) &= \overline{\rho}(D(\rho^{-1} \circ \varphi_1 \circ \rho)) = \overline{\rho}(D(\varphi_1)) = \overline{\rho}(\frac{1}{4}b_3 + \Gamma_p) = -\frac{1}{4}b_3 + \Gamma_p \\ &= -D(\varphi_1). \end{aligned}$$

Die Wirkung des Normalisators auf der Cohomologiegruppe ist also gleich jener der Gruppe, die von  $-1$  erzeugt wird. Es gibt folglich 3 Bahnen; sie werden vertreten durch die Bilder der Derivationen

$$D_0: \varphi_1^k \mapsto 0 + \Gamma_p, \quad D_1: \varphi_1^k \mapsto k \cdot \frac{1}{4}b_3 + \Gamma_p, \quad D_2: \varphi_1^k \mapsto k \cdot \frac{2}{4}b_3 + \Gamma_p.$$

2) Die Kristallographen interessieren sich nicht für affine, sondern für *eigentlich-affine* Äquivalenzklassen. In obiger Rechnung ersetzen sie daher den Normalisator  $N$  durch die Untergruppe  $N^+ = N \cap \text{SL}(\Gamma_p) = H$ . Sie wirkt auf der Cohomologiegruppe durch die Identität. Daher gibt es 4 eigentlich affine Äquivalenzklassen; die Kristallographen bezeichnen sie mit  $P_4, P_{4_1}, P_{4_2}$  und  $P_{4_3}$ . Das innenzentrierte Gitter  $\Gamma_I$

andererseits gibt Anlass zu zwei affinen (oder eigentlich-affinen) Äquivalenzklassen; sie tragen die Bezeichnungen  $I4$  und  $I4_1$ .<sup>20</sup>

3) Es scheint keine interessanten Kristallstrukturen zu geben, deren Raumgruppe einen der 6 Typen  $P4$ ,  $P4_1$ ,  $P4_2$ ,  $P4_3$ ,  $I4$  oder  $I4_1$  aufweist. Die Situation ändert sich, wenn man Obergruppen der Punktgruppe  $C_4$  ( $=4$ ) betrachtet, die noch zum tetragonalen Kristallsystem gehören, etwa  $D_4$  ( $=422$ ) oder  $C_{4h}$  ( $=\frac{4}{m}$ ).<sup>21</sup> Da die bisher entwickelten Techniken die bequeme Berechnung der Cohomologiegruppen  $H^1(H, \mathbb{E}^3(\Gamma))$  für nicht-zyklische Gruppen  $H$  aber nur in Ausnahmefällen – etwa den orthogonalen Punktgruppen des Unterabschnittes 8.4 – erlauben, illustriere ich 3 dieser 6 Klassen von Raumgruppen durch frei erfundene Muster.

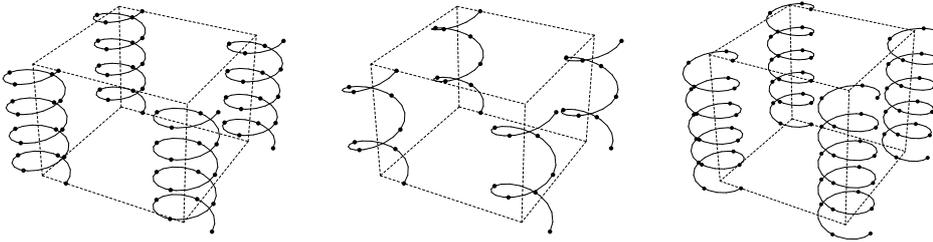


Abbildung C.11: Illustration der Raumgruppen der Typen  $P4_1$ ,  $P4_2$  und  $P4_3$

## 8.4 Anwendung auf orthogonale Punktgruppen

In diesem Unterabschnitt komme ich auf eine Klasse von Beispielen zurück, die ich in Unterabschnitt 8.1 aus einem anderen Grunde betrachtete. Sei  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  eine geordnete Basis des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^n$ , die aus paarweise orthogonalen Vektoren besteht, und sei  $H$  die endliche Gruppe, die von den Spiegelungen  $\rho_1, \dots, \rho_n$  an den Hyperräumen  $(\mathbb{R} \cdot b_j)^\perp$  erzeugt wird. Sei weiter  $\Gamma = \Gamma_p$  das Gitter, das von der Basis  $\mathcal{B}$  erzeugt wird.

### 8.4a Berechnung der Cohomologiegruppe

Die Resultate des Unterabschnittes 8.1 lehren, dass die geometrische Kristallklasse  $[(\Gamma_p, H)]_g$  aus mehreren arithmetischen Klassen zusammengesetzt ist (Sätze C8.1 und C8.5); für  $n = 3$  beträgt deren Anzahl 4, für  $n = 8$  bereits 8. In dieser Nummer wird die Cohomologiegruppe der arithmetischen Klasse des primitiven Gitters  $\Gamma_p$  berechnet.

Man kann dieses Ziel so erreichen: sei  $D: H \rightarrow \mathbb{E}^n/\Gamma_p$  eine Derivation. Für jeden Index  $j \in \{1, 2, \dots, n\}$  impliziert die Gleichung  $\rho_j^2 = \mathbb{1}$  dann die Beziehung

$$0 = D7\mathbb{1} = D(\rho_j \circ \rho_j) = D(\rho_j) + \overline{\rho_j}(D(\rho_j)) = (\mathbb{1} + \overline{\rho_j})(D(\rho_j)).$$

Ist  $D(\rho_j) = \sum_h x_{j,h} \cdot b_h + \Gamma_p$ , so sagt obige Beziehung, die Zahl  $2x_{j,h}$  sei für jeden Index  $h \neq j$  ganz. Da es nur auf Werte modulo  $\Gamma_p$  ankommt, können wir daher annehmen, jede der Zahlen  $x_{j,h}$  mit  $h \neq j$  sei entweder 0 oder  $\frac{1}{2}$ . Nun zu den inneren

<sup>20</sup>In der Schoenflieschen Zusammenfassung (Seite 56) werden die gefundenen Anzahlen in jener Zeile wiedergegeben, die mit  $C_4$  beginnt.

<sup>21</sup>Siehe <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/spcgrp/tetragonal.html>.

Derivationen. Ist  $a = \sum_h v_h \cdot b_h + \Gamma_p$ , so hat die innere Derivation  $D_a$  auf  $\rho_j$  den Wert

$$D_a(\rho_j) = (\mathbb{1} - \rho_j) \sum_h v_h \cdot b_h + \Gamma_p = 2v_j \cdot b_j.$$

Obige Rechnungen zeigen, dass es in jeder Nebenklasse von  $\text{IDer}(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$  in  $\text{Der}(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$  einen Vertreter der Form

$$D(\rho_j) = \frac{1}{2} (\iota_{j,1} \cdot b_1 + \cdots + \iota_{j,j-1} \cdot b_{j-1} + \iota_{j,j+1} \cdot b_{j+1} + \cdots + \iota_{j,n} \cdot b_n)$$

hat; dabei sind die Koeffizienten  $\iota_{j,h}$  alle entweder 0 oder 1. Setzt man noch  $\iota_{j,j} = 0$  für alle Indizes  $j$ , so lässt sich obige Formel knapper so schreiben

$$D(\rho_j) = \frac{1}{2} \left( \sum_h \iota_{j,h} b_h \right) + \Gamma_p. \quad (\text{C8.14})$$

Es bleibt abzuklären, welche Matrizen  $I = (\iota_{j,h})$  von einer Derivation herrühren. Die Antwort ergibt sich aus einer einfachen Beobachtung: die Gruppen  $H$  und  $\frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p$  sind beide abelsche Gruppen, die als Vektorräume über dem Körper  $\mathbb{Z}_2$  aufgefasst werden können; in dieser Interpretation bilden die Spiegelungen  $\rho_1, \dots, \rho_n$  eine Basis des Vektorraumes  $H$ . Folglich kann jede Zuordnung  $\rho_j \mapsto u_j \in \frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p$  zu einer eindeutig bestimmten Homomorphismus  $D_{u_1, \dots, u_n}$  fortgesetzt werden. Da nun aber die Gruppe  $H$  auf der Quotientengruppe  $\frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p$  durch die Identität wirkt, ist jeder Homomorphismus von  $H$  mit Werten in  $\frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p$  automatisch eine Derivation. Dies zeigt, dass obige Vorschrift für jede Matrix  $I$ , deren Elemente nur 0 oder 1 sind und deren Diagonale nur aus Nullen besteht, zu einer Derivation fortgesetzt werden kann. Dies beweist den

**SATZ C8.25** Sei  $\text{Der}_0(H, \frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p)$  die Untergruppe jener Derivationen  $D: H \rightarrow \frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p$ , welche die Bedingung

$$D(\rho_j) \in U_j = \frac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z} \cdot b_1 + \cdots + \frac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z} \cdot b_{j-1} + \frac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z} \cdot b_{j+1} + \cdots + \frac{1}{2}\mathbb{Z}/\mathbb{Z} \cdot b_n \quad (\text{C8.15})$$

für jeden Index  $j \in \{1, \dots, n\}$  erfüllen. Dann induziert die offensichtliche Abbildung

$$\text{Der}_0(H, \frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p) \hookrightarrow \text{Der}(H, \frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p) \rightarrow H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$$

einen Isomorphismus.

### 8.4b Wirkung des Normalisators auf der Cohomologiegruppe $H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$

Als nächstes bestimmen wir den Normalisator  $N = N_{\text{GL}(\Gamma_p)}(H)$  und seine Wirkung auf der Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$ . Beschreibt man die Abbildungen des Normalisators durch Matrizen bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  handelt es sich bei  $N$  um die Matrizenengruppe  $N_{\text{GL}(n, \mathbb{Z})}(H_{\mathcal{B}})$ . Man kann diese Gruppe mit der Methode finden, die im Beweis von Satz C8.5 angewandt wurde.

Die Gruppe  $H_{\mathcal{B}}$  besteht aus allen Diagonalmatrizen, die  $\pm 1$  auf der Diagonalen haben; unter diesen  $2^n$  Matrizen gibt es genau  $n$  Matrizen, die Spiegelungen an Hyperräumen beschreiben; sie werden dadurch charakterisiert, dass sie einen 1-dimensionalen Eigenraum zum Eigenwert  $-1$  haben. Jede Matrix  $S \in N$  muss diese Eigenräume, und daher die entsprechenden Spiegelungen, permutieren. Andererseits enthält  $N$  sicher die Gruppe  $P$  aller Matrizen, die Permutationen der Vektoren der Standard-Basis beschreiben. Ist nun  $S \in N$  eine beliebige Matrix, so gibt es eine

Matrix  $T \in P$ , derart dass Konjugation mit  $S$  und Konjugation mit  $T$  den gleichen Automorphismus von  $H_{\mathcal{B}}$  induzieren. Dann kommutiert  $S \cdot T^{-1}$  mit jeder Matrix aus  $H_{\mathcal{B}}$ ; wie man leicht nachrechnet, liegt daher  $S \cdot T^{-1} \in H_{\mathcal{B}}$ . Diese Überlegungen beweisen den

**SATZ C8.26** *Der Normalisator  $N$  der Gruppe  $H$ , die von  $n$  Spiegelungen an den Hyperräumen  $(\mathbb{R} \cdot b_j)^\perp$  erzeugt wird, ist das semi-direkte Produkt der Gruppe  $H$  und der Gruppe  $P$  jener linearen Abbildungen, die Permutationen der Vektoren  $b_1, \dots, b_n$  der Basis  $\mathcal{B}$  beschreiben.*

Die Sätze C8.25 und C8.26 führen zu einer ersten, überraschenden Einsicht:

**KOROLLAR C8.27** *Die arithmetische Klasse  $[(\Gamma_p, H)]_a$  besteht aus mindestens*

$$2^{n \cdot (n-1)} / (n!)$$

*affinen Äquivalenzklassen.*

*Proof.* Nach Theorem C8.10 entsprechen die affinen Äquivalenzklassen bijektiv den Bahnen, die der Normalisator  $N$  auf der Cohomologiegruppe  $H^1(\mathbb{H}, \mathbb{E}^n / \Gamma_p)$  induziert. Die Cohomologiegruppe hat die Ordnung  $2^{n \cdot (n-1)}$  (Satz C8.25). Der Normalisator  $N$  ist das semi-direkte Produkt  $H \rtimes P$  von  $H$  und einer Gruppe  $P$ , die isomorph der symmetrischen Gruppe  $S_n$  ist und daher  $n!$  Elemente hat. Da die Gruppe  $H$  auf der Cohomologiegruppe durch die Identität wirkt (siehe Hilfssatz C8.28), hat daher jede Bahn höchstens  $\text{card}(P) = n!$  Elemente.  $\square$

Die folgende Tabelle zeigt, dass die untere Schranke der Anzahl der affinen Äquivalenzklassen mit der Dimension  $n$  schnell wächst; sie belegt auch, dass die Schranke die tatsächliche Situation sehr gut approximiert.<sup>22</sup>

Dimension $n$	2	3	4	5	6	7
Schranke $2^{n(n-1)} / (n!)$	2.	10.67	170.67	8 738	$1.49 \cdot 10^6$	$873 \cdot 10^6$
Anzahl der affinen Klassen	3	16	218	9 608	1 540 944	882 033 440

Tabelle C.3: Untere Schranke und genaue Anzahl der affinen Klassen

Im Beweis von Korollar C8.27 wurde ein Resultat benützt, dass auch in anderen Zusammenhängen von Bedeutung ist, nämlich

**HILFSSATZ C8.28** *Seien  $H$  eine Gruppe und  $M$  ein  $H$ -Modul. Dann wirkt jedes Element  $\varphi \in H$  auf der Cohomologiegruppe  $H^1(H, M)$  durch die Identität.*

*Proof.* Seien  $D: H \rightarrow M$  eine Derivation mit Werten im Modul  $M$  und  $\psi$  ein Element der Gruppe  $H$ . Das Bild der Derivation  $D$  unter der Wirkung von  $\psi$  auf die Gruppe der Derivationen  $\text{Der}(H, M)$  ist die Derivation

$$\psi_*(D): \varphi \mapsto \psi(D(\psi^{-1} \circ \varphi \circ \psi)).$$

<sup>22</sup>Das Verfahren, mit dem die exakten Anzahlen berechnet werden können, wird in Nummer 8.4c erklärt.

Weil  $\psi^{-1}$  und  $\psi$  im Definitionsbereich  $H$  der Derivation  $D$  liegen, kann die transformierte Derivation  $\psi_*(D)$  auch so berechnet werden:

$$\begin{aligned} (\psi_*(D))(\varphi) &= \psi (D(\psi^{-1}) + \psi^{-1}(D(\varphi)) + \psi^{-1}(\varphi((D(\psi)))) \\ &= -D(\psi) + D(\varphi) + \varphi(D(\psi)) = D(\varphi) + (\mathbb{1} - \varphi)(-D(\psi)) \end{aligned}$$

Somit ist  $\psi_*(D)$  die Summe der Derivation  $D$  und der inneren Derivation  $D_a$  mit Parameter  $a = -D(\psi)$ . Diese Rechnung zeigt, dass  $\psi$  auf der Cohomologiegruppe  $H^1(H, M) = \text{Der}(H, M) / \text{IDer}(H, M)$  durch die Identität wirkt.  $\square$

### 8.4c Graphentheoretische Interpretation der affinen Äquivalenzklassen

In dieser Nummer wird erklärt, wie die Bahnen des Normalisators  $N$  auf der Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$  als Isomorphietypen von gerichteten Graphen interpretiert werden können und welchen Nutzen man aus dieser Interpretation ziehen kann.<sup>23</sup>

Sei  $\mathcal{I}_n$  die Menge der quadratischen  $n$ -reihigen Matrizen  $I$ , deren Koeffizienten entweder 0 oder 1 sind und deren Diagonalelemente alle 0 betragen. Jede dieser Matrizen gibt Anlass zu einer eindeutig bestimmten Derivation  $D_I: H \rightarrow \frac{1}{2}\Gamma_p/\Gamma_p$ , die auf den Spiegelungen  $\rho_j$  den Wert

$$D_I(\rho_j) = \frac{1}{2} \left( \sum_h \iota_{j,h} \cdot b_h \right) + \Gamma_p \quad (\text{C8.16})$$

hat (siehe Beweis von Satz C8.25). Die Vorschrift  $I \mapsto D_I + \text{IDer}(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$  induziert dann eine bijektive Abbildung von der Menge  $\mathcal{I}_n$  auf die Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$  (siehe Satz C8.25). Andererseits liefert jede Matrix  $I \in \mathcal{I}_n$  eine kristallographische Gruppe, die in der Familie  $\mathcal{G}_{(\Gamma_p, H)}$  liegt, nämlich

$$G_I = \text{gp} \left( \left\{ \tau_{w + \frac{1}{2}(\sum_h \iota_{j,h} b_h)} \circ \rho_j \mid w \in \Gamma_p, 1 \leq j \leq n \right\} \right). \quad (\text{C8.17})$$

Die Gruppe  $G_I$  zeichnet sich unter den Gruppen, der Translationsklasse von  $G_I$  dadurch aus, dass jede der Isometrien  $\psi_j = \tau_{(\sum_h \iota_{j,h} b_h)/2} \circ \rho_j$  eine Spiegelung oder eine Gleitspiegelung am Hyperraum  $\mathbb{R} \cdot b_j^\perp$ , und nicht etwa an einer dazu parallelen affinen Hyperebene ist.

Nach Satz C8.26 ist der Normalisator  $N$  der Gruppe  $H$  das semi-direkte Produkt von  $H$  und der Permutationsgruppe  $P$ . Wir wollen auf der Menge  $\mathcal{I}_n$  eine Wirkung der Gruppe  $P$  festlegen, dass die Abbildung  $I \mapsto D_I + \text{IDer}(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$  eine Bijektion von  $P$ -Mengen wird. Wenn uns das gelingt, entsprechen die Bahnen von  $N$  auf der Cohomologiegruppe  $H^1(H, \mathbb{E}^n/\Gamma_p)$  – also die affinen Äquivalenzklassen der arithmetischen Klasse  $[(H, \Gamma_p)]_a$  – gerade den Bahnen von  $P$  auf der Menge  $\mathcal{I}_n$ . Um die Wirkung zu finden, berechnen wir das Bild der Isometrie  $\psi_j$  unter der Konjugation mit der linearen Abbildung  $L$ , die durch die Permutation  $\pi$  der Basisvektoren  $b_1, \dots, b_n$  induziert wird. Wir bekommen

$$\begin{aligned} (0, L) \cdot \left( \frac{1}{2} \left( \sum_h \iota_{j,h} b_h, \varphi_j \right) \right) \cdot (0, L)^{-1} &= \left( \frac{1}{2} \left( \sum_h \iota_{j,h} L(b_h), L \circ \varphi_j \circ L^{-1} \right) \right) \\ &= \left( \frac{1}{2} \left( \sum_h \iota_{j,h} b_{\pi(h)}, \varphi_{\pi(j)} \right) \right). \end{aligned}$$

<sup>23</sup>Diese Interpretation veröffentlichte R. L. E. SCHWARZENBERGER in den 70er Jahren in den Arbeiten [Sch74], [Sch76], [Sch82] und seinem Lehrbuch [Sch80].

Wir müssen also die Wirkung von  $P$  auf  $\mathcal{I}_n$  wie folgt festsetzen: das Bild der Permutation auf der Matrix  $I$  ist jene Matrix, die man aus  $I$  erhält, wenn man die Zeilen und hernach die Spalten von  $I$  mit  $\pi$  permutiert.

BEISPIEL C8.29 Seien  $n = 3$  und  $\pi$  die zyklische Permutation  $1 \mapsto 2 \mapsto 3 \mapsto 1$ . Dann sieht die Zuordnung  $I \mapsto \pi_*(I)$  wie folgt aus:

$$I = \begin{pmatrix} 0 & \iota_{1,2} & \iota_{1,3} \\ \iota_{2,1} & 0 & \iota_{2,3} \\ \iota_{3,1} & \iota_{3,2} & 0 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \iota_{3,1} & \iota_{3,2} & 0 & \iota_{1,3} \\ 0 & \iota_{1,2} & 0 & \iota_{2,3} \\ \iota_{2,1} & 0 & \iota_{2,3} & \iota_{1,3} \end{pmatrix} \mapsto \pi_*(I) = \begin{pmatrix} 0 & \iota_{3,1} & \iota_{3,2} \\ \iota_{1,3} & 0 & \iota_{1,2} \\ \iota_{2,3} & \iota_{2,1} & 0 \end{pmatrix}.$$

8.4d *Bestimmung der affinen Äquivalenzklassen der arithmetischen Klasse  $Pmmm$*

8.4e *Illustration der gefundenen affinen Äquivalenzklassen durch Kristallstrukturen*



---

## **D Ausgewählte Klassifikationen**

---

PROLOG

## D9 Klassifikation der Ornamentgruppen

### PROLOG

#### 9.1 Bestimmung der Kristallklassen der Ebene

In diesem Unterabschnitt werden die geometrischen und arithmetischen Kristallklassen der Ebene bestimmt, und zwar mit Methoden, die in den Unterabschnitten 6.1, 6.2 und 6.3 erklärt wurden. Die Untersuchung beginnt mit der Klassifikation der Ähnlichkeitsklassen der ebenen Gitter. In höheren Dimensionen besitzt die analoge Klassifikation nur geringen Sinn, hier aber liefert sie eine lehrreiche Übersicht.

##### 9.1a Ähnlichkeitsklassen der ebenen Gitter

Seien  $\mathbb{E}$  die Euklidische Standard-Ebene  $\mathbb{R}^2$  und  $\Gamma$  ein Netz in  $\mathbb{E}$ . Sei  $(u_1, u_2)$  eine Minimalfolge von  $\Gamma$ ; eine solche existiert, weil  $\Gamma$  nach Theorem B4.4 eine diskrete Teilmenge der Ebene ist; auch ist sie nach Theorem B4.17 eine  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ . Es gibt eine eindeutig-bestimmte Drehstreckung  $\sigma$ , welche  $u_1$  auf den Vektor  $e_1 = (1, 0)^t$  abbildet. Dann liegt entweder  $\sigma(u_2)$  oder  $-\sigma(u_2)$  in der oberen Halbebene  $\{x \in \mathbb{R}^2 \mid x_2 > 0\}$ ; dieser Vektor wird im folgenden  $v$  genannt. Er hat die Eigenschaften

$$v_1^2 + v_2^2 \geq 1, \quad |v_1| \leq \frac{1}{2} \text{ und } v_2 > 0. \quad (\text{D9.1})$$

Die erste Eigenschaft gilt, da  $e_1$  nach Konstruktion ein Vektor kleinster positiver Länge ist, die dritte besagt, dass  $v$  in der oberen Halbebene liegt und die zweite ergibt sich aus dem Umstand, dass  $\|v\| \leq \|v \pm e_1\|$  sein muss (siehe Behauptung (iv) des Hilfssatzes B4.15). Abbildung D.1 stellt die noch zugelassenen Werte von  $v$  graphisch dar.

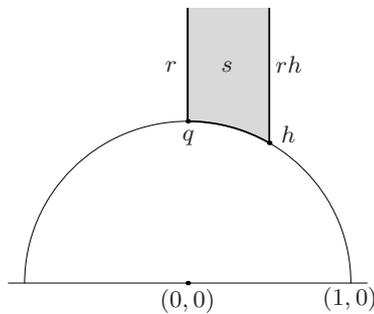


Abbildung D.1: Graphische Übersicht über die Gitter der Ebene

##### 9.1b Geometrische Klassen der Ebene

Figur D.1 legt eine erste Klassifizierung der Netze  $\Gamma$  nahe: es gibt einen allgemeinen Fall, bei dem  $v$  im Innern der Halbstreifens, nicht aber auf der Mittellinie liegt, und dann 5 speziellere Lagen, bei denen  $v$  ein Randpunkt des Streifens, ein Punkt auf der Mittellinie, ein Eckpunkt oder der Randpunkt des Mittellinie ist.

Wir untersuchen nun, wieweit die obige intuitive Einteilung mit der Einteilung in geometrische Klassen übereinstimmt. Dazu berechnen wir die Automorphismengruppen der Netze  $\Gamma_v$ .

Name	$v$	$\text{Aut}(\Gamma_v)$
quadratisch	$(0, 1)^t$	$D_4$
hexagonal	$\frac{1}{2}(\pm 1, \sqrt{3})$	$D_6$
rechteckig	$(0, v_2)$ mit $v_2 > 1$	$D_2$
rhombisch	$\ v\  = 1$ und $0 <  v_1  < \frac{1}{2}$	$D_2$
rhombisch	$\ v\  > 1$ und $ v_1  = \frac{1}{2}$	$D_2$
schief	$\ v\  > 1$ und $0 <  v_1  < \frac{1}{2}$	$\{\pm 1\}$

Tabelle D.1: Arithmetische Klassen der ebenen Gitter

Sei zunächst  $\|v\| > 1$ . Dann besteht die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma_v)$  aus den Vektoren  $e_1$  und  $-e_1$ . Die Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma_v)$  enthält  $-1$  und wirkt daher auf der Minimalmenge transitiv. Folglich ist die Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma_v)$  entweder die Untergruppe  $H_5 = \{1, -1\}$  mit 2 Elementen oder sie enthält die Spiegelung  $\rho_h$  an der horizontalen  $x_1$ -Achse und ist die Untergruppe

$$H_3 = \{1, \rho_h, \rho_v, -1\}.$$

Falls die Spiegelung  $\rho_h$  ein Automorphismus des Netzes  $\Gamma_v$  ist, muss  $\rho_h(v)$ , also auch  $v + \rho_h(v) = v + (v_1, -v_2)^t = (2v_1, 0)^t$  zum Netz gehören. Dies ist nur möglich, wenn  $v_1 = 0$ , das Netz also rechteckig, oder  $v_1 = \pm \frac{1}{2}$ , das Netz also rhombisch ist.<sup>1</sup> Man bestätigt leicht, dass die Automorphismengruppen des rechteckigen und des rhombischen Netzes beide gleich  $H_3$  sind.

Ist  $\|v\| = 1$ , so treten drei Fälle auf. Für  $v = (0, 1)^t$  ist das Netz gleich  $\mathbb{Z}^2$ , also *quadratisch*. Die Automorphismengruppe des quadratischen Netzes ist eine Diedergruppe der Ordnung 8; sie besteht aus 4 Drehungen und 4 Spiegelungen (siehe drittes Beispiel in Nummer 5.1a). Ist hingegen  $v = \frac{1}{2}(\pm 1, \sqrt{3})$ , so ist das Netz *hexagonal*. Seine Minimalmenge besteht aus den 6 Punkten  $\pm(1, 0)$ ,  $\pm\frac{1}{2}(1, \sqrt{3})$  und  $\frac{1}{2}(-1, \sqrt{3})$ ; diese Punkte sind die Ecken eines regelmässigen 6-Ecks. Die Matrix

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}$$

ist orthogonal und induziert eine orthogonale Abbildung  $\varphi_A$ ; diese permutiert die Elemente der Minimalmenge transitiv, denn

$$\varphi: e_1 \mapsto \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}^t \mapsto \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}^t \mapsto -e_1 \mapsto \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}^t \mapsto \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}^t \mapsto e_1.$$

Da das hexagonale Gitter von seiner Minimalmenge erzeugt wird, gehört  $\varphi_A$  zur Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\Gamma_{\text{hexa}})$ . Die volle Automorphismengruppe hat dann die Ordnung 12; sie ist das semi-direkte Produkt  $\text{gp}(\varphi_A) \rtimes \text{gp}(\rho_h)$  der Untergruppe, die von  $\varphi_A$  erzeugt wird, und der Gruppe der Ordnung 2, welche von der Spiegelung an der  $x_1$ -Achse erzeugt wird.

Es bleibt der Fall der Parameter  $v$  mit  $\|v\| = 1$  und  $0 < |v_1| < \frac{1}{2}$ ; er ist komplizierter als die zuvor besprochenen Fälle. Da die Vektoren  $e_1$  und  $v$  die gleiche Länge haben, stehen die Summe  $e_1 + v$  und die Differenz  $e_1 - v$  aufeinander senkrecht. Sie

<sup>1</sup>Der Name wird durch den Umstand gerechtfertigt, dass  $\Gamma_v$  dann durch die beiden Vektoren  $v$  und  $\rho_h(v)$  erzeugt wird und der Fundamentalbereich  $\{c_1 \cdot v + c_2 \cdot \rho_h(v) \mid 0 \leq c_i \leq 1\}$  deshalb ein Rhombus ist.

erzeugen ein rechtwinkliges Teilgitter  $\widehat{\Gamma}_v$  (wegen  $v_1 \neq 0$  haben  $e_1 + v$  und  $e_1 - v$  unterschiedliche Längen). Das Teilgitter  $\widehat{\Gamma}_v$  hat Index 2 in  $\Gamma_v$  und das Gitter  $\Gamma_v$  entsteht aus ihm durch Innenzentrierung. Jeder Automorphismus des Teilgitters ist daher ein Automorphismus des Ausgangsgitters  $\Gamma_v$ ; falls umgekehrt jeder Automorphismus von  $\Gamma_v$  das Teilgitter  $\widehat{\Gamma}_v$  invariant lässt, fallen  $\text{Aut}(\widehat{\Gamma}_v)$  und  $\text{Aut}(\Gamma_v)$  zusammen.

Um nachzuweisen, dass jeder Automorphismus von  $\Gamma_v$  das Teilgitter  $\widehat{\Gamma}_v$  auf sich abbildet, betrachten wir die quadratische Form des Gitters:

$$q_{\Gamma_v}(x_1, x_2) = \|x_1 \cdot e_1 + x_2 \cdot v\|^2 = x_1^2 + x_2^2 + 2x_1x_2v_1 = (x_1 + v_1x_2)^2 + (1 - v_1^2) \cdot x_2^2.$$

Der kleinste positive Wert ist 1. Falls der Wert kleiner als 3 sein soll, muss  $|x_2| < 2$  sein, denn  $1 - v_1^2 > \frac{3}{4}$ . Es folgt ohne grosse Mühe, dass die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma_v)$  aus den 4 Vektoren  $\pm e_1$  und  $\pm v$  besteht, dass der zweit-kleinste Wert auf  $\pm(v - e_1)$  und der dritt-kleinste Wert auf  $\pm(v + e_1)$  angenommen wird, falls  $v_1$  positiv ist, und sonst auf  $\pm(v + e_1)$ , beziehungsweise auf  $\pm(v - e_1)$ ; und dass die Werte auf allen anderen von Null verschiedenen Vektoren grösser als 3 sind. Jeder Automorphismus des Gitters  $\Gamma_v$  muss daher das Teilgitter  $\widehat{\Gamma}_v$  auf sich abbilden.

Wir haben damit folgendes Zwischenresultat erzielt:

**HILFSSATZ D9.1** *Es gibt 4 geometrische Kristallklassen. Ihre Automorphismengruppen sind Diedergruppen der Ordnungen 4, 8 und 12 sowie die zyklische Gruppe erzeugt durch  $-\mathbb{1}$ . Der Zusammenhang zwischen den Werten des Parameters  $v$  und den Konjugationsklassen der Gruppen  $\text{Aut}(\Gamma_v)$  ist wie in Tabelle D.1.*

Gestützt auf dieses Resultat kann man alle geometrischen Klassen dadurch erhalten, dass man die Untergruppen der gefundenen Automorphismengruppen bestimmt, dabei aber in  $O(2, \mathbb{R})$  konjugierte Untergruppen nur einmal zählt. Man findet zunächst 5 Untergruppen, die keine Spiegelung enthalten: sie haben die Ordnungen 1, 2, 3, 4 und 6; jede von ihnen ist zyklisch. Jede andere Untergruppe enthält eine Spiegelung, also eine orthogonale Matrix mit Determinante  $-1$ . Zu den zuvor gefundenen Diedergruppen der Ordnungen 4, 8 und 12 kommen noch die zyklische Gruppe erzeugt von einer Spiegelung und die Diedergruppe der Ordnung 6 hinzu. Dies beweist den

**SATZ D9.2** *Es gibt 10 geometrische Kristallklassen von Gittern der Ebene: die Konjugationsklassen von Drehungen der Ordnung 1, 2, 3, 4 und 6, die Konjugationsklasse der von einer Spiegelung erzeugten Gruppen sowie die Konjugationsklassen der von Spiegelungen erzeugten Diedergruppen der Ordnung 4, 6, 8 und 10.*

**BEMERKUNG D9.3** Die algebraische Struktur der orthogonalen Gruppe  $O(2, \mathbb{R})$  ist sehr einfach; insbesondere macht es keine Mühe, alle endlichen Untergruppen zu finden und in dieser Menge diejenigen Gruppen, die ein Netz invariant lassen, auszusondern.

Die Gruppe  $SO(2, \mathbb{R})$  ist abelsch und die Abbildung

$$p: \mathbb{R} \rightarrow SO(2, \mathbb{R}), \quad t \mapsto \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix}$$

induziert einen Isomorphismus  $p_*: \mathbb{R}/(\mathbb{Z} \cdot 2\pi) \xrightarrow{\sim} SO(2, \mathbb{R})$ . Dieser Isomorphismus erlaubt es nachzuweisen, dass jede endliche Untergruppe von  $SO(2, \mathbb{R})$  zyklisch ist und dass es für jede natürliche Zahl  $m \geq 1$  genau eine Untergruppe dieser Ordnung gibt. Jede Matrix in  $O(2, \mathbb{R}) \setminus SO(2, \mathbb{R})$  ist eine Spiegelung; jede endliche Untergruppe von  $O(2, \mathbb{R})$ , die nicht nur Drehungen besteht, hat gerade Ordnung, etwa  $2m$ , besteht

aus  $m$  Spiegelungen und eben so vielen Drehungen. Sie wird von 2 Spiegelungen erzeugt, ist also eine Diedergruppe der Ordnung  $2m$ .

Sei nun  $F$  eine endliche Untergruppe von  $O(2, \mathbb{R})$ , die ein Netz  $\Gamma$  invariant lässt. Dann wirkt  $F$  auf die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma)$ . Da jede Bahn der Drehuntergruppe  $F \cap SO(2, \mathbb{R})$  die Eckenmenge eines regelmässigen Vieleckes ist und  $\Gamma$  unter Differenzbildung angeschlossen ist, kann  $F \cap SO(2, \mathbb{R})$  höchstens 6 Elemente haben; durch direkte Rechnung überprüft man noch, dass  $F \cap SO(2, \mathbb{R})$  nicht Ordnung 5 aufweisen kann. Also gibt es für  $F$  nur die folgenden Fälle:

(i)  $F$  wird erzeugt von einer der 5 Matrizen

$$I_2, \quad -I_2, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1, & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1, & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}.$$

(ii)  $F$  ist konjugiert zu einer Gruppe, die von der Spiegelung  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  und einer der 5 oben aufgeführten Matrizen erzeugt wird.

Diese 10 Gruppen treten auch wirklich auf, denn jede von ihnen ist Untergruppe der Automorphismengruppe des quadratischen oder des hexagonalen Gitters.

### 9.1c Arithmetische Klassen der Ebene

Die arithmetischen Klassen der Ebene lassen sich leicht aus den Ergebnissen der vorangegangenen Nummern 9.1a und 9.1b herleiten. Ist  $(\Gamma', H')$  ein Paar, bestehend aus einem Netz und einer Untergruppe der Automorphismengruppe des Netzes, so gibt wie in Nummer 9.1b eine Ähnlichkeitsabbildung  $\sigma: \mathbb{R}^2 \xrightarrow{\sim} \mathbb{R}^2$ , derart dass das Bildnetz  $\Gamma = \sigma(\Gamma')$  eine Minimalfolge hat, deren erster Vektor  $e_1$  ist. Der zweite Vektor  $v$  kann dann so gewählt werden, dass er die Bedingungen

$$v_1^2 + v_2^2 \geq 1, \quad |v_1| \leq \frac{1}{2} \text{ und } v_2 > 0. \quad (\text{D9.2})$$

erfüllt. Man beachte, dass  $\sigma \circ H' \circ \sigma^{-1}$  in  $O(\mathbb{R}^2)$  liegt – denn  $\sigma$  ist eine Ähnlichkeitsabbildung – und dass das Paar

$$(\Gamma, H) = (\sigma(\Gamma'), \sigma \circ H' \circ \sigma^{-1})$$

daher arithmetisch äquivalent zum Paar  $(\Gamma', H')$  ist.

Wir nehmen erst an, die Norm von  $v$  sei grösser als 1. Da  $v_1^2 < 1$  ist, gibt es dann eine eindeutig bestimmte positive Zahl  $t < 1$ , welche die Gleichung

$$v_1^2 + t^2 \cdot v_2 = 1$$

erfüllt. Sei  $P: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  die lineare Abbildung, welche  $x$  auf  $(x_1, t \cdot x_2)^t$  abbildet; sie ist selbstadjungiert und positiv-definit. Aus Nummer 9.1b wissen wir, dass  $H$  in der Gruppe  $H_3 = \{\mathbb{1}, -\mathbb{1}, \rho_h, -\rho_d\}$  enthalten ist. Jede Abbildung in  $H_3$  kommutiert mit der Abbildung  $P$ : dies ist klar für  $\pm\mathbb{1}$  und folgt für  $\pm\rho_h$  aus der Rechnung:

$$\begin{aligned} P \circ \rho_h: x &\mapsto (x_1, -x_2)^t \mapsto (x_1, -t \cdot x_2)^t, \\ \rho_h \circ P: x &\mapsto (x_1, t \cdot x_2)^t \mapsto (x_1, -t \cdot x_2)^t. \end{aligned}$$

Es liegt also  $P \circ H \circ P^{-1} = H$  in  $O(\mathbb{R}^2)$ , weshalb die Paare  $(\Gamma, H)$  und  $(P(\Gamma), H)$  arithmetisch äquivalent sind.

Die bisherigen Überlegungen zeigen, dass das Ausgangspaar  $(\Gamma', H')$  arithmetisch äquivalent zu einem Paar  $(\Gamma_v, H \subseteq \text{Aut}(\Gamma_v))$  mit  $\|v\| = 1$  und  $|v_1| \leq \frac{1}{2}$  ist. Wenn  $|v_1|$  keiner der Grenzfälle, also weder 0 noch  $\frac{1}{2}$  ist, so haben  $e_1 + v$  und  $-e_1 + v$  unterschiedliche Längen; wie in Nummer 9.1b nachgewiesen wurde, entsteht dann das Gitter  $\Gamma_v$  aus dem rechteckigen Gitter  $\mathbb{Z} \cdot (e_1 + v) + \mathbb{Z} \cdot (-e_1 + v)$  durch Innenzentrierung und  $\text{Aut}(\Gamma_v)$  wird von der Spiegelung an den Geraden  $\mathbb{R} \cdot (e_1 + v)$  und  $\mathbb{R} \cdot (-e_1 + v)$  erzeugt. Sei  $L$  die lineare Abbildung, welche die geordnete Basis  $(e_1 + e_2, -e_1 + e_2)$  auf die geordnete Basis  $(e_1 + v, -e_1 + v)$  abbildet. Bezüglich der Standardbasis werden  $L$  und  $L^{-1}$  durch die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & v_1 \\ 0 & v_2 \end{pmatrix} \text{ und } A^{-1} = \frac{1}{v_2} \begin{pmatrix} v_2 & -v_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

beschrieben. Die Rechnung

$$A \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot A^{-1} = \frac{1}{v_2} \begin{pmatrix} v_1 & 1 \\ v_2 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_2 & -v_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{v_2} \begin{pmatrix} v_1 v_2 & 1 - v_1^2 \\ v_2^2 & -v_1 v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \\ v_2 & -v_1 \end{pmatrix}$$

zeigt dann, dass die Spiegelung  $\rho_d$  an der Geraden mit der Gleichung  $x_2 = x_1$  durch  $L$  in die Spiegelung an der Geraden  $\mathbb{R} \cdot (e_1 + v)$  konjugiert wird. Das Paar  $(\Gamma_v, \text{Aut}(\Gamma_v))$  ist somit arithmetisch äquivalent mit dem Paar  $(\mathbb{Z}^2, \text{gp}(\{-\mathbb{1}, \rho_d\}))$ . Da  $v_1 = 0$  das quadratische und  $|v_1| = \frac{1}{2}$  das hexagonale Gitter liefern, haben wir das folgende Zwischenergebnis erzielt:

**HILFSSATZ D9.4** *Jedes Paar  $(\Gamma', H' \subseteq \text{Aut}(\Gamma'))$  ist arithmetisch äquivalent einem Paar der Form*

$$(\mathbb{Z}^2, H \subseteq \text{Aut}(\mathbb{Z}^2)) \text{ oder } (\Gamma_{\text{hexa}}, H \subseteq \text{Aut}(\Gamma_{\text{hexa}})).$$

Was jetzt noch zu tun bleibt, ist leicht, wenn auch die vielen kleinen Verifikationen etwas umfangreich sind. Man bestimmt erst alle Untergruppen der Automorphismengruppen des quadratischen und des hexagonalen Gitters. Im Falle des quadratischen Gitters ist diese Aufgabe bereits in Nummer 5.1a, Beispiel 3, gelöst worden; ihr Ergebnis wird durch Abbildung D.3 zusammengefasst.

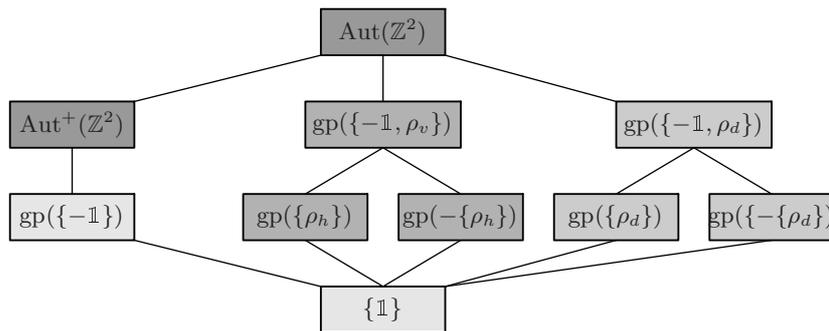


Abbildung D.3: Verband der Untergruppen der Diedergruppe der Ordnung 8

Als nächstes sollen die arithmetisch äquivalenten Paare der Form  $(\mathbb{Z}^2, H)$ ,  $(\mathbb{Z}^2, H')$  bestimmt werden. Haben zwei der Paare diese Eigenschaft, so sind  $H$  und  $H'$  konjugierte Untergruppen und insbesondere isomorph. Von den 3 Gruppen  $H$  der Ordnung

4 ist die erste zyklisch, die beiden anderen sind isomorph zu  $\mathbb{Z}_2 \oplus \mathbb{Z}_2$ ; die erste Gruppe ist also weder zur zweiten noch zur dritten Gruppe arithmetisch äquivalent. Gemäss Nummer 6.3b sind die zweite und dritte Gruppe nicht arithmetisch äquivalent.

Nun zu den Gruppen der Ordnung 2. Da eine Drehung und eine Spiegelung nicht konjugiert sind, ist die von  $-1$  erzeugte Gruppe zu keiner der 4 anderen Gruppen arithmetisch äquivalent. Die zweite und die dritte Gruppe sind es hingegen, denn die Drehung  $(x_1, x_2)^t \mapsto (-x_2, x_1)^t$  vertauscht die  $x_1$ - und die  $x_2$ -Achse. Analog sieht man, dass die vierte Gruppe arithmetisch äquivalent zur fünften Gruppe ist. Aus den Rechnungen in Nummer 6.3b folgt noch, dass die Gruppen  $\text{gp}(\{\rho_h\})$  und  $\text{gp}(\{\rho_d\})$  nicht arithmetisch äquivalent sind. Somit vertreten die Untergruppen der Automorphismengruppe  $\text{Aut}(\mathbb{Z}^2)$  des quadratischen Gitters 8 paarweise verschiedene arithmetische Kristallklassen.

Das hexagonale Gitters lässt sich ganz ähnlich untersuchen. Zunächst braucht man eine Liste der Untergruppen der Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma_{\text{hexa}})$ ; sie wird in Abbildung D.3 zusammengefasst.

## 9.2 Bestimmung der Ornamentgruppen

9.2a *Punktgruppen ohne Spiegelungen*

9.2b *Punktgruppen mit Spiegelungen*

9.2c *Liste der affinen Typen von Ornamentgruppen*

## 9.3 Anwendung auf Ornamente

## 9.4 Anwendung auf Pflasterungen

## 9.5 Anhang: Verallgemeinerung der ebenen Gittertypen

## D10 Geometrische Kristallklassen des $\mathbb{E}^3$

Die Bestimmung der *geometrischen* Kristallklassen eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}$  läuft nach Korollar C6.7 auf die Aufgabe hinaus, alle endlichen Untergruppen der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$ , die ein Gitter invariant lassen, zu finden und diese Untergruppen bezüglich Konjugation in  $O(\mathbb{E})$  zu klassifizieren.

Im Falle des 3-dimensionalen Raumes ist diese Aufgabe bereits in der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts gelöst worden. Dass dies schon so früh gelang, hängt an zwei Besonderheiten der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E}^3)$  und am Ergebnis der Klassifikation:

- Die orthogonale Gruppe  $O(\mathbb{E}^3)$  ist das direkte Produkt der Untergruppe  $SO(\mathbb{E}^3)$  und der zyklischen Gruppe  $\{\mathbb{1}, -\mathbb{1}\}$ .<sup>2</sup>
- Die Elemente der Gruppe  $SO(\mathbb{E}^3)$  sind alle von der gleichen Art, sie sind Rotationen  $\varphi$  um eine Achse  $\ell_\varphi$ .
- Die meisten der gefundenen Gruppen sind Symmetriegruppen von Polyedern, die den Kristallographen zu Beginn des 19. Jahrhunderts vertraut waren; alle sind Untergruppen entweder der Symmetriegruppe eines Würfels oder der Symmetriegruppe eines geraden Prismas, dessen Querschnitt ein regelmässiges Hexagon ist.

In diesem Abschnitt wird die Liste der geometrischen Kristallklassen erarbeitet, zuerst mit einer geometrischen Methode, danach mit einem algebraischen Verfahren, das auf die Arbeit [Fr11c] von G. Frobenius zurückgeht. Als Anwendung bespreche ich die (idealisierten) Formen der makroskopischen Kristalle.

### 10.1 Endliche Untergruppen der speziellen orthogonalen Gruppe $SO(\mathbb{E}^3)$

Sei  $H$  eine endliche Gruppe der speziellen orthogonalen Gruppe des 3-dimensionalen Raumes  $\mathbb{E}^3$ ; wir setzen im folgenden voraus,  $H$  bestehe nicht nur aus der Identität. Jedes Element  $\varphi \neq \mathbb{1}$  ist eine Drehung um eine vektorielle Gerade, nämlich den Eigenraum  $E_1(\varphi)$  von  $\varphi$  zum Eigenwert 1. Ist  $\psi$  eine zweite Drehung in  $H$ , so ist  $\psi \circ \varphi \circ \psi^{-1}$  eine Drehung, welche die Gerade  $\psi(E_1(\varphi))$  zum Eigenraum des Eigenwerts 1 hat. Da die Drehung  $\psi \circ \varphi \circ \psi^{-1}$  in  $H$  liegt, zeigt dieser Sachverhalt, dass die kanonische Wirkung der Gruppe  $H$  auf  $\mathbb{E}^3$  das System der Geraden  $\mathcal{L} = \{E_1(\varphi) \mid \varphi \in H \setminus \{\mathbb{1}\}\}$  permutiert. Jede Gerade dieses Systems durchstösst die Einheitssphäre  $\mathbb{S}^2$  in zwei antipodalen Punkten  $p$  und  $-p$ ; sie werden *Pole* der Drehung  $\varphi$  genannt.

Sei  $\mathcal{P}$  die Menge der Pole aller Elemente von  $H \setminus \{\mathbb{1}\}$ . Da die Gruppe  $H$  auf dem System der Geraden  $\mathcal{L}$  wirkt und die Einheitssphäre auf sich abbildet, wirkt sie auch auf der Menge der Pole. Unter ihrer Wirkung zerfällt  $\mathcal{P}$  in Bahnen; seien  $p_1, p_2, \dots, p_k$  Vertreter dieser Bahnen. Aus der Analyse der Wirkung von  $H$  erhält man eine numerische Beziehung zwischen der Anzahl  $m$  der Bahnen und den Ordnungen der Gruppe  $H$  sowie der Standuntergruppen  $St_H(p_i)$ ; mit ihrer Hilfe bestimmt man dann die endlichen Untergruppen der Gruppe  $SO(\mathbb{E}^3)$ .

<sup>2</sup>Eine analoge Aussage gilt für jeden Euklidischen Vektorraum ungerader Dimension.

### 10.1a Herleitung einer numerischen Beziehung

Die Summe  $s = \sum_{p \in \mathcal{P}} (|\text{St}_H(p)| - 1)$  lässt sich auf zwei Arten interpretieren: sie ist gleich  $2(|H| - 1)$ , denn jede Drehung  $\varphi \neq \mathbb{1}$  von  $H$  hat genau eine Achse und kommt daher in der Standuntergruppe von genau zwei Polen vor. Andererseits teilen sich die Pole von  $H$  auf  $m$  Bahnen der Länge  $|H|/|\text{St}_H(p_k)|$  auf; daher gilt auch

$$s = \sum_{1 \leq k \leq m} \frac{|H|}{|\text{St}_H(p_k)|} \cdot (|\text{St}_H(p_k)| - 1)$$

Durch Gleichsetzen der gefundenen Ausdrücke erhält man die Beziehung

$$2(|H| - 1) = \sum_k \frac{|H|}{|\text{St}_H(p_k)|} \cdot (|\text{St}_H(p_k)| - 1);$$

dividiert man sie durch die Ordnung von  $H$ , kommt man zur Gleichung

$$2 - \frac{2}{|H|} = \sum_{1 \leq k \leq m} \left(1 - \frac{1}{|\text{St}_H(p_k)|}\right). \quad (\text{D10.1})$$

Die linke Seite dieser Gleichung liegt im Intervall  $[1, 2[$ , die rechte im Intervall  $[m/2, m[$ , denn jeder Pol wird von mindestens einer Drehung festgehalten, welche nicht die Identität ist. Somit ist  $m = 2$  oder  $m = 3$ .

### 10.1b Gruppen, deren Polmenge zwei Bahnen hat

Gilt  $m = 2$ , so vereinfacht sich obige Gleichung (D10.1) zu

$$\frac{2}{|H|} = \frac{1}{|\text{St}_H(p_1)|} + \frac{1}{|\text{St}_H(p_2)|}.$$

Da die Standuntergruppen  $\text{St}_H(p_1)$  und  $\text{St}_H(p_2)$  in  $H$  enthalten sind, kann die Gleichung nur gelten, wenn  $\text{St}_H(p_1) = \text{St}_H(p_2) = H$  ist. Es gibt also insgesamt nur zwei Pole und daher eine einzige, gemeinsame Drehachse. Aus der Tatsache, dass die endlichen Untergruppen der  $\text{SO}(2, \mathbb{R})$  zyklisch sind, folgt weiter, dass  $H$  zyklisch ist. Da  $\text{SO}(\mathbb{E}^3)$  auf der Menge der vektoriellen Geraden transitiv operiert und es in  $\text{SO}(2, \mathbb{R})$  für jede natürliche Zahl  $h \geq 1$  genau eine Untergruppe der Ordnung  $h$  gibt, ergibt sich schliesslich das folgende Resultat:

**HILFSSATZ D10.1** *Jede Untergruppe  $H \subset \text{SO}(\mathbb{E}^3)$ , deren Elemente eine gemeinsame Drehachse haben, ist zyklisch; umgekehrt haben die Drehungen jeder zyklischen Untergruppe von  $\text{SO}(\mathbb{E}^3)$  eine gemeinsame Drehachse. Zwei zyklische Untergruppen gleicher endlicher Ordnung sind konjugiert und zu jeder natürlichen Zahl  $h \geq 1$  gibt es eine zyklische Untergruppe der Ordnung  $h$ .*

### 10.1c Gruppen, deren Polmenge aus drei Bahnen besteht

Für  $m = 3$  vereinfacht sich Gleichung (D10.1) zu

$$1 + \frac{2}{|H|} = \frac{1}{|\text{St}_H(p_1)|} + \frac{1}{|\text{St}_H(p_2)|} + \frac{1}{|\text{St}_H(p_3)|}. \quad (\text{D10.2})$$

Indem man, falls nötig, die Pole  $p_1, p_2$  und  $p_3$  neu nummeriert, kann man erreichen, dass die Ungleichungen

$$n_1 = |\text{St}_H(p_1)| \leq n_2 = |\text{St}_H(p_2)| \leq n_3 = |\text{St}_H(p_3)| \quad (\text{D10.3})$$

gelten. Da die linke Seite der Gleichung (D10.2) grösser als  $1 = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3}$  ist, muss  $n_1 = 2$  sein. Setzt man den gefundenen Wert von  $n_1$  in der Gleichung ein, kommt man zu

$$\frac{1}{2} + \frac{2}{|H|} = \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3}. \quad (\text{D10.4})$$

Da die linke Seite grösser als  $\frac{1}{2} = \frac{1}{4} + \frac{1}{4}$  ist, muss  $n_2$  entweder 2 oder 3 sein. Ist  $n_2 = 2$ , liefert Gleichung (D10.4) die Beziehung  $|H| = 2 \cdot n_3$ ; ist hingegen  $n_2 = 3$ , bekommt man die Beziehung

$$\frac{1}{6} + \frac{2}{|H|} = \frac{1}{n_3}, \text{ folglich } \frac{|H|}{2} = \left( \frac{1}{n_3} - \frac{1}{6} \right)^{-1} = \frac{6 \cdot n_3}{6 - n_3} \text{ und daher } |H| = \frac{12n_3}{6 - n_3}.$$

Diese Beziehung lehrt, dass  $n_3$  einen der Werte 3, 4 oder 5 haben muss; die entsprechenden Werte für die Ordnung von  $H$  sind dann 12, 24 und 60. Zusammengefasst haben wir das Ergebnis:

**HILFSSATZ D10.2** *Seien  $H$  eine endliche, nicht-zyklische Untergruppe der  $\text{SO}(\mathbb{E}^3)$  und  $\mathcal{P}$  die Menge der Pole der Drehungen in  $H \setminus \{1\}$ . Unter der kanonischen Wirkung von  $H$  auf  $\mathcal{P}$  zerfällt dann  $\mathcal{P}$  in drei Bahnen; seien  $p_1, p_2$  und  $p_3$  Vertreter dieser Bahnen, die so nummeriert sind, dass die Ungleichungen (D10.3) gelten. Dann erfüllen die Zahlen  $n_1, n_2, n_3$  und  $|H|$  eine der folgenden Bedingungen:*

- (i)  $n_1 = n_2 = 2$  und  $|H| = 2 \cdot n_3 \geq 4$ ;
- (ii)  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 3)$  und  $|H| = 12$ ;
- (iii)  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 4)$  und  $|H| = 24$ ;
- (iv)  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 5)$  und  $|H| = 60$ .

**BEMERKUNG D10.3** Multipliziert man Gleichung (D10.2) mit  $|H|$ , erhält man eine einfache Beziehung zwischen der Ordnung  $|H|$  der Gruppe und der Anzahl der Pole, nämlich

$$\text{card}(\mathcal{P}) = |H| + 2. \quad (\text{D10.5})$$

In der Tat:  $\mathcal{P}$  besteht aus den drei Bahnen  $H.p_1, H.p_2$  und  $H.p_3$  und die rechte Seite der mit  $H$  multiplizierten Gleichung (D10.2) ist die Summe der Längen dieser Bahnen.

In den folgenden Nummern 10.1d bis 10.1h wird gezeigt werden, dass es zu jedem System von Parametern  $(n_1, n_2, n_3)$ , das von obigem Hilfssatz zugelassen ist, endliche Untergruppen der  $\text{SO}(\mathbb{E}^3)$  gibt, die diese Parameter besitzen, und dass diese Gruppe untereinander konjugiert sind. Die Analyse wird in jedem Einzelfall so geführt werden, dass zuerst angenommen wird, eine Gruppe  $H$ , welche die Parameter erfülle, existiere. Aus dieser Annahme werden dann weitere Eigenschaften der Gruppe hergeleitet, die es einem erlauben, konkret zu sagen, wie die Gruppe  $H$  aussehen muss, falls es sie überhaupt gibt. Dann wird bewiesen, dass es eine Gruppe mit den gefundenen Eigenschaften gibt und dass sie bis auf Konjugation in  $\text{SO}(\mathbb{E}^3)$  eindeutig ist.

### 10.1d Gruppen mit Parametern $(n_1, n_2, n_3) = (2, 2, 2)$

Sei  $H \subset \text{SO}(\mathbb{E}^3)$  eine Gruppe mit Parametern  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 2, 2)$ . Dann hat  $H$  vier Elemente, also nach Gleichung (D10.5) genau 6 Pole; sie verteilen sich auf die drei Achsen der Drehungen  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$  und  $\varphi_3$ , welche die Standuntergruppen  $\text{St}_H(p_1)$ ,  $\text{St}_H(p_2)$  und  $\text{St}_H(p_3)$  erzeugen; diese Standuntergruppen haben alle drei die Ordnung 2. Da  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  Drehungen um verschiedene Achsen sind, ist Ihre Zusammensetzung nicht die Identität; es muss also die Beziehung  $\varphi_2 \circ \varphi_1 = \varphi_3$  gelten.

Sie impliziert, dass die Achse  $\mathbb{R} \cdot p_3$  der Drehung  $\varphi_3$  senkrecht auf der von  $p_1$  und  $p_2$  aufgespannten Ebene  $U$  steht. Seien nämlich  $w$  ein Vektor positiver Länge, der senkrecht auf  $U$  steht, und  $\rho_1$ ,  $\rho$  und  $\rho_2$  die Spiegelungen an den vektoriellen Ebenen  $\mathbb{R} \cdot w + \mathbb{R} \cdot p_1$ ,  $U$  und  $\mathbb{R} \cdot p_2 + \mathbb{R} \cdot w$ . Dann sind  $\varphi_1 = \rho \circ \rho_1$  und  $\varphi_2 = \rho_2 \circ \rho$ , und daher

$$\varphi_3 = \varphi_2 \circ \varphi_1 = (\rho_2 \circ \rho) \circ (\rho \circ \rho_1) = \rho_2 \circ \rho_1.$$

Es ist also  $\varphi$  eine Drehung um die Gerade  $\mathbb{R} \cdot w$ , die auf  $U$  senkrecht steht, weshalb  $p_3 \in \mathbb{R} \cdot w$  ebenfalls auf  $U$  senkrecht steht. Da  $\varphi_3$  die Ordnung 2 hat, folgt weiter, dass auch  $p_1$  und  $p_2$  orthogonal sind. Die Vektoren  $p_1$ ,  $p_2$  und  $p_3$  bilden also eine Orthonormal-Basis  $\mathcal{B}$  von  $\mathbb{E}^3$ .

Sind umgekehrt  $\mathcal{B}$  eine geordnete Orthonormal-Basis von  $\mathbb{E}^3$  und  $\varphi_1, \varphi_2$  und  $\varphi_3$  die Drehungen der Ordnung 2 um diese Achsen, so gelten die Relationen

$$\varphi_2 \circ \varphi_1 = \varphi_1 \circ \varphi_2 = \varphi_3.$$

Sie implizieren, dass die drei Drehungen eine Gruppe die Ordnung 4 erzeugen. Die Eindeutigkeit bis auf Konjugation ergibt sich schliesslich aus dem Umstand, dass die Gruppe  $O(\mathbb{E}^3)$  auf den Orthonormal-Basen von  $\mathbb{E}^3$  transitiv wirkt.

### 10.1e Gruppen mit Parametern $(n_1, n_2) = (2, 2)$ und $n_3 > 2$

Sei nun  $H \subset \text{SO}(\mathbb{E}^3)$  eine Gruppe mit Parametern  $(n_1, n_2) = (2, 2)$  und  $n_3 > 2$ . Die Ordnung der Gruppe ist dann  $2 \cdot n_3$ . Die Standuntergruppe  $N = \text{St}_H(p_3)$  besteht aus  $n_3$  Rotationen um die Achse  $\mathbb{R} \cdot p_3$ ; nach Hilfssatz D10.1 ist sie zyklisch, etwa erzeugt von  $\psi$ , und sie hat Index 2 in  $H$ , weshalb sie ein Normalteiler ist. Sei  $\varphi_1$  eine Drehung der Ordnung 2, welche die Standuntergruppe  $\text{St}_H(p_1)$  erzeugt. Diese Drehung bildet die Drehachse  $\mathbb{R} \cdot p_3$  von  $\psi$  auf die Drehachse der Drehung  $\varphi_1 \circ \psi \circ \varphi_1^{-1}$  ab; weil  $N$  ein Normalteiler ist, liegt diese Drehung in  $N$ . Es folgt, dass  $\varphi_1(p_3) = -p_3$  ist, denn  $p_3$  liegt nicht auf der Drehachse von  $\varphi_1$ , und dass  $p_1$  auf  $p_3$  senkrecht steht. Ebenso sieht man, dass  $p_2$  orthogonal zu  $p_3$  ist. Die Bahnen  $H.p_1$  und  $H.p_2$  enthalten je  $|H|/2 = n_3$  Punkte; andererseits liefern die Drehungen in  $N$  bereits  $n_3$  paarweise verschiedene Punkte. Somit sind  $H.p_1 = N.p_1$  und  $H.p_2 = N.p_2$ , weshalb diese Bahnen die Eckenmenge von regelmässigen Vielecken mit  $n_3$  Ecken sind, welche der Einheitskreislinie der Ebene  $U = (\mathbb{R} \cdot p_3)^\perp$  einbeschrieben sind. Falls  $n_3$  ungerade ist, liegt der Pol  $-p_1$  nicht auf der Bahn  $H.p_1$ , weshalb die Bahn  $H.p_1$  gleich  $-H.p_1$  ist. Ist hingegen  $n_3$  gerade, so ist  $-p_1$  ein Punkt der Bahn von  $H.p_1$ . Da die Bahn  $H.p_2$  aber durch die Drehung  $\varphi$  auf sich abgebildet wird, bildet die Vereinigung der Bahnen  $H.p_1$  und  $H.p_2$  die Eckenmenge eines regelmässigen  $2n_3$ -Ecks.

Diese genauen Informationen über die Lage der Bahnen  $H.p_1$ ,  $H.p_2$  und  $H.p_3 = \{p_3, -p_3\}$  erlauben umgekehrt den Nachweis, dass es eine Gruppe  $H \subset \text{SO}(\mathbb{E}^3)$  mit den Parametern  $(2, 2, n_3)$  gibt und dass sie bis auf Konjugation eindeutig ist.

10.1f Gruppen mit Parametern  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 3)$ 

Sei  $H \subset \text{SO}(\mathbb{E}^3)$  eine Gruppe mit den Parametern  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 3)$ ; ihre Ordnung ist 12. Da  $n_2 = 3$  ist, enthält  $H$  eine Drehung  $\varphi_2$  der Ordnung 3 mit Achse  $\mathbb{R} \cdot p_2$ . Die Länge der Bahn durch  $p_2$  ist  $|H|/3 = 4$ ; seien  $p_2$  und  $a, b, c$  die Punkte dieser Bahn. Ich behaupte, sie bilden die Ecken eines regelmässigen Tetraeders  $\mathcal{T}$ . Da auf der Achse  $\mathbb{R} \cdot p_2$  nur 2 Pole liegen, liegt einer der drei Punkte  $a, b$  und  $c$  nicht auf ihr; sei etwa  $a \notin \mathbb{R} \cdot p_2$ . dann sind  $a, \varphi_2(a)$  und  $\varphi_2^2(a)$  paarweise verschiedene Punkte der Menge  $\{a, b, c\}$ , weshalb die Menge  $\{a, b, c\}$  mit der Menge  $\{a, \varphi_2(a), \varphi_2^2(a)\}$  zusammenfällt. Wir können annehmen, es seien  $b = \varphi_2(a)$  und  $c = \varphi_2^2(a)$ . Dann aber ist

$$d_2(p_2, b) = d_2(\varphi(p_2), \varphi_2(a)) = d_2(p_2, a);$$

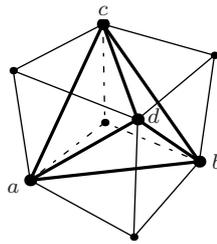
ebenso sieht man, dass die Distanz zwischen  $p_2$  und  $c$  gleich jener zwischen  $p_2$  und  $a$  ist. Da die Rolle, welche  $p_2$  in dieser Überlegung spielt, auch von den Polen  $a, b$  oder  $c$  übernommen werden kann, ergibt sich, dass die Distanzen zwischen je zwei der 4 Pole  $p_2, a, b$  und  $c$  gleich sind, weshalb diese Pole die Ecken eines regelmässigen Tetraeders  $\mathcal{T}$  bilden, das der Einheitskugel des Raumes  $\mathbb{E}^3$  einbeschrieben ist.

Da  $-p_2$  keine Ecke des Tetraeders  $\mathcal{T}$  ist, muss  $-p_2$  zur Bahn  $H.p_3$  gehören. Es folgt, dass  $H.p_3$  die Eckenmenge des Tetraeders  $-\mathcal{T}$  ist. Da  $n_1 = 2$  ist, enthält  $H$  eine Drehung der Ordnung 2; da  $|H|/2 = 6$  ist, gibt es genau 3 Drehungen der Ordnung 2. Ist  $\varphi$  eine solche Drehung, so permutiert sie die Ecken des Tetraeders  $\mathcal{T}$ ; da sie keine Ecken festhalten kann, ist sie ein Produkt von zweier Transpositionen. Geometrisch interpretiert heisst dies, dass die Achse von  $\varphi$  durch die Mittelpunkte von zwei Kanten des Tetraeders geht, die keinen Endpunkt gemeinsam haben.

Die Existenz einer Gruppe  $H$  mit den Parametern  $(2, 3, 3)$  ergibt sich nun aus dem Umstand, dass zwei regelmässige Tetraeder ähnlich sind, und dass die Drehgruppe des Tetraeders mit der Eckenmenge

$$a = e_1 - e_2 - e_3, \quad b = -e_1 + e_2 - e_3, \quad c = -e_1 - e_2 + e_3, \quad d = e_1 + e_2 + e_3$$

die Ordnung 12 hat, falls  $(e_1, e_2, e_3)$  eine Orthonormalbasis von  $\mathbb{E}^3$  ist. Die Eindeutigkeit bis auf Konjugation folgt aus der Tatsache, dass zwei regelmässige Tetraeder ähnlich sind.

10.1g Gruppen mit Parametern  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 4)$ 

Sei  $H \subset \text{SO}(\mathbb{E}^3)$  eine Gruppe mit den Parametern  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 4)$ ; ihre Ordnung ist dann 24. Da  $n_2 = 3$  ist, enthält  $H$  eine Drehung  $\varphi_2$  der Ordnung 3 mit Achse  $\mathbb{R} \cdot p_2$ . Die Bahn  $H.p_2$  durch  $p_2$  enthält dann  $|H|/3 = 8$  Pole. Da kein weiterer Pol eine Standuntergruppe der Ordnung 3 hat, verteilen sich die 8 Pole auf 4 Achsen. Diese Achsen spannen den ganzen Raum auf, denn die von zwei Achsen aufgespannte Ebene ist nicht invariant unter einer Drehung der Ordnung 3 um eine der zwei Achsen.

Da  $n_3 = 4$  ist, gibt es eine Drehung  $\psi_4$  der Ordnung 4. Da keiner der 8 Pole der Bahn  $H - p_2$  von  $\psi_4^2$  festgehalten wird, zerfällt die Bahn durch  $p_2$  unter der Wirkung der von  $\psi_4$  erzeugten Gruppe in zwei Teilbahnen der Länge 4. Jede dieser Teilbahnen liegt in einer Ebene senkrecht zur Achse  $\mathbb{R} \cdot p_3$ . Sei  $Q = \{a, b, c, d\}$  die erste dieser Teilbahnen; sie ist die Eckenmenge eines Quadrates. Dann ist  $-Q = \{-a, -b, -c, -d\}$  die andere Teilbahn. Die Bahn  $H.p_2$  ist daher die Eckenmenge eines geraden Prismas mit quadratischem Querschnitt. Weil das Prisma die Drehung der Ordnung 3 um die Ecke  $a$  zulässt, muss seine Höhe gleich der Seitenlänge des Quadrates mit der Eckenmenge  $Q$  sein; das Prisma ist also ein Würfel.

Die Existenz einer Gruppe  $H$  mit den Parametern  $(2, 3, 4)$ , sowie ihre Eindeutigkeit bis auf Konjugation, ist nun eine Folge der Tatsachen, dass zwei Würfel ähnlich sind und dass die Drehgruppe eines Würfels genau 24 Rotationen umfasst.

### 10.1h Gruppen mit Parametern $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 5)$

Sei schliesslich  $H$  eine Gruppe mit den Parametern  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 3, 5)$ . Da  $n_3 = 5$  ist, enthält sie eine Untergruppe der Ordnung 5, also auch eine Drehung der Ordnung 5. Die Bahn der des Poles  $p_3$  enthält dann  $|H|/5 = 12$  Punkte. Mit Überlegungen, die jenen der Nummern 10.1f und 10.1g ähnlich sind, kann man dann nachweisen, dass die Bahn  $H - p_3$  die Eckenmenge eines regelmässigen Ikosaeders ist.<sup>3</sup> Will man die Existenz einer solchen Gruppe und ihre Eindeutigkeit bis auf Konjugation zeigen, muss man erst die Existenz von regelmässigen Ikosaedern begründen und nachweisen, dass zwei derartige Polyeder ähnlich sind, falls ihre Ecken auf einer Kugel liegen, und dass die Drehgruppe eines regelmässigen Ikosaeders 60 Elemente hat.

Ich werde die Details des Beweises nicht ausführen, da die Drehgruppe eines regelmässigen Ikosaeders kein Gitter invariant lässt und daher kein Vertreter einer geometrischen Kristallklasse sein kann.

### 10.1i Liste der geometrischen Kristallklassen in $SO(\mathbb{E}^3)$

In den Nummern 10.1b bis 10.1h sind die endlichen Untergruppen von  $SO(\mathbb{E}^3)$  bestimmt worden. Das Ergebnis lässt sich so zusammenfassen:

**SATZ D10.4** Seien  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$  eine Orthonormalbasis des Euklidischen Raumes  $\mathbb{E}^3$  und  $\varphi_1, \varphi_2$  und  $\psi_k$  die Drehungen, die bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  durch die Matrizen

$$(\varphi_1)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\varphi_2)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{D10.6})$$

$$(\psi_k)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} \cos(2\pi/k) & -\sin(2\pi/k) & 0 \\ -\sin(2\pi/k) & \cos(2\pi/k) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ für } k \in \{0, 1, 2, \dots\} \quad (\text{D10.7})$$

dargestellt werden. Dann ist jede endliche Untergruppe von  $SO(\mathbb{E}^3)$  konjugiert zu einer der folgenden Gruppen:

- (i) zyklische Gruppe  $C_k$  der Ordnung  $k$  erzeugt von  $\psi_k$ ;
- (ii) Diedergruppe  $D_k$  der Ordnung  $2k$  erzeugt von  $\varphi_1$  und  $\psi_k$ ;

<sup>3</sup>Siehe etwa [NST94], Seiten 180 und 181.

(iii) Drehgruppe  $T$  des Tetraeders  $T$  mit den Ecken

$$b_1 - b_2 - b_3, \quad -b_1 + b_2 - b_3, \quad -b_1 - b_2 + b_3, \quad b_1 + b_2 + b_3;$$

die Gruppe wird erzeugt von den Drehungen  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  und hat Ordnung 12.

(iv) Drehgruppe  $O$  des Würfels  $W$  mit den Ecken  $\pm b_1 \pm b_2 \pm b_3$ ; sie wird erzeugt von den Drehungen  $\varphi_2$  und  $\psi_4$  und hat Ordnung 24.

(v) Drehgruppe eines regelmäßigen Dodekaeders; die Ordnung dieser Gruppe ist 60.

Als nächstes will ich jene endlichen Untergruppen der  $SO(\mathbb{E}^3)$  finden, die ein Gitter invariant lassen. Den Schlüssel liefert der

**HILFSSATZ D10.5** Die Ordnung  $k$  einer Drehung  $\psi$ , die ein Gitter von  $\mathbb{E}^3$  auf sich abbildet, ist 1, 2, 3, 4 oder 6.

*Proof.* Die Spur von  $\psi$  hängt nicht von der gewählten Basis ab. Berechnet man sie mit Hilfe einer  $\mathbb{Z}$ -Basis eines Gitters, welche die Drehung  $\psi$  auf sich abbildet, erhält man eine ganze Zahl; verwendet man hingegen eine Orthonormalbasis  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$ , deren erster Vektor auf der Drehachse  $U$  von  $\psi$  liegt, während die beiden anderen Vektoren das Orthogonalkomplement von  $U$  aufspannen, so die Spur gleich  $1 + 2 \cos t$ . Also ist  $\cos t \in \{1, -1, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\}$ ; dem gemäss besitzt  $\psi$  die Ordnung 1, 2, 3, 4, beziehungsweise 6.  $\square$

Satz D10.4 zählt alle Konjugationsklassen endlicher Untergruppen von  $SO(\mathbb{E}^3)$  auf. Eliminiert man aus dieser Liste alle Gruppen, die Drehungen enthalten, deren Ordnungen die Konklusion von Hilfssatz D10.5 nicht erfüllen, so verbleiben 11 Konjugationsklassen. Jeder Vertreter einer dieser Klassen lässt ein kubisches oder ein hexagonales Gitter invariant. Die folgende Abbildung D.4 stellt den Verband der 11 geometrischen Klassen dar, während Theorem D10.6 Vertreter dieser Klassen analytisch beschreibt.

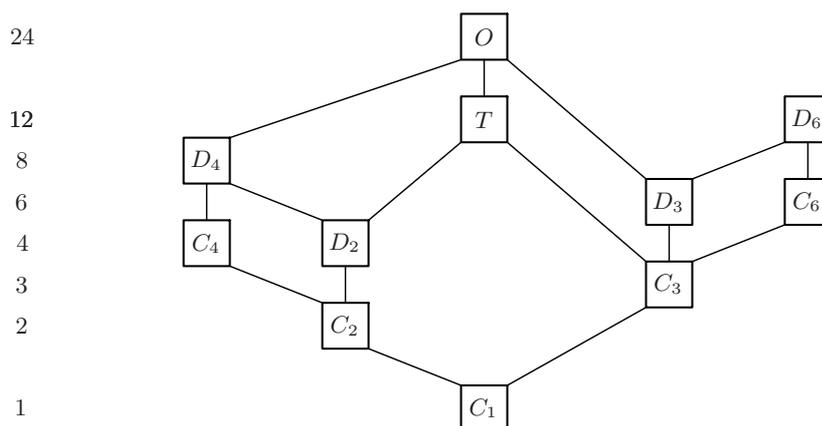


Abbildung D.4: Verband der geometrischen Kristallklassen der Gruppe  $SO(\mathbb{E}^3)$

HAUPTSATZ D10.6 In  $SO(\mathbb{E}^3)$  gibt es genau 11 geometrische Kristallklassen. Sind  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$  eine Orthonormalbasis und  $\varphi_1, \varphi_2$  sowie  $\psi_k$  mit  $k \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$  die Drehungen, welche bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  durch die Matrizen

$$(\varphi_1)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\varphi_2)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{D10.8})$$

$$(\psi_k)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} \cos(2\pi/k) & -\sin(2\pi/k) & 0 \\ -\sin(2\pi/k) & \cos(2\pi/k) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ für } k \in \{0, 1, 2, \dots\}. \quad (\text{D10.9})$$

dargestellt werden, so werden diese Klassen durch die folgenden 11 Gruppen vertreten:

- (i) zyklische Gruppe  $C_k$  der Ordnung  $k$  erzeugt von  $\psi_k$ ;
- (ii) Diedergruppe  $D_k$  der Ordnung  $2k$  erzeugt von  $\varphi_1$  und  $\psi_k$ ;
- (iii) Drehgruppe  $T$  eines Tetraeders, die von den Drehungen  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  erzeugt wird.
- (iv) Drehgruppe  $O$  eines Oktaeders oder Würfels, die von den Drehungen  $\varphi_2$  und  $\psi_4$  erzeugt wird.

Abbildung D.5 zeigt noch die Symmetrie-Elemente der 10 geometrische Kristallklassen mit mehr als einem Element.

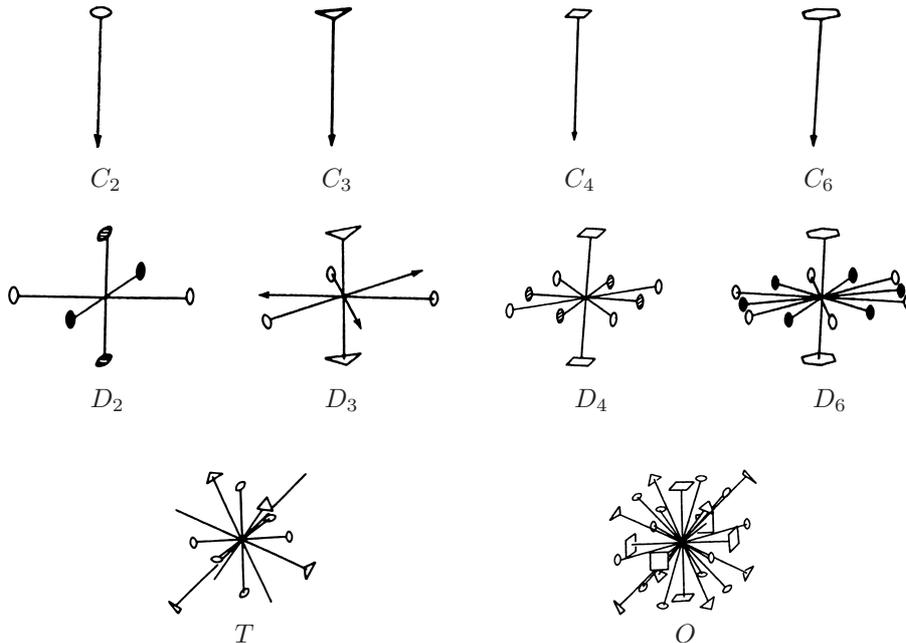


Abbildung D.5: Symmetrie-Elemente der geometrischen Kristallklassen in  $SO(\mathbb{E}^3)$

## 10.2 Endliche Untergruppen der orthogonalen Gruppe $O(E^3)$

Für jeden Euklidischen Vektorraum  $\mathbb{E}$  ist die spezielle orthogonale Gruppe  $SO(\mathbb{E})$  eine Untergruppe der orthogonalen Gruppe  $O(\mathbb{E})$  vom Index 2, denn  $SO(\mathbb{E})$  ist der Kern

des Homomorphismus  $\det: O(\mathbb{E}) \rightarrow \mathbb{R} \setminus \{0\}$ , die Determinante jedes Elementes von  $O(\mathbb{E}) \setminus SO(\mathbb{E})$  ist  $-1$  und die Determinante einer Spiegelung ist  $-1$ . Jede orthogonale Abbildung  $\psi$  der Ordnung 2, welche nicht in  $SO(\mathbb{E})$  liegt, erzeugt daher eine Komplement des Normalteilers  $SO(\mathbb{E})$  in  $O(\mathbb{E})$  und  $O(\mathbb{E})$  ist das (interne) *semi-direkte* Produkt von  $SO(\mathbb{E})$  und der Gruppe  $\text{gp}(\psi)$ .

### 10.2a Endliche Untergruppen von $O(\mathbb{E})$ bei ungerader Dimension des Raumes

Ist die Dimension  $n$  von  $\mathbb{E}$  *ungerade*, so ist  $\det(-\mathbb{1}) = -1^n = -1$ ; da  $-\mathbb{1}$  die Ordnung 2 hat und mit allen Abbildungen von  $SO(\mathbb{E})$  kommutiert, ist dann  $O(\mathbb{E})$  das (interne) *direkte* Produkt von  $SO(\mathbb{E})$  und der zyklischen Gruppe  $\text{gp}(-\mathbb{1})$ . Die Untergruppen eines solchen direkten Produktes stehen in engem Zusammenhang mit den Untergruppen des ersten Faktors; es gilt nämlich

**HILFSSATZ D10.7** *Seien  $G$  eine Gruppe,  $G^+ \triangleleft G$  ein Normalteiler vom Index 2 und  $z \in G \setminus G^+$  ein Element der Ordnung 2, das mit allen Elementen von  $G^+$  kommutiert. Dann gibt es drei Arten von Untergruppen  $U$  von  $G$ :*

1. *es ist  $U \subseteq G^+$ ;*
2. *es ist  $z \in U$ . Dann ist  $U$  das direkte Produkt von  $U^+ = U \cap G^+$  und der zyklischen Gruppe  $\text{gp}(z)$ ;*
3. *es sind  $z \notin U$  und  $U \not\subseteq G^+$ . Dann liefert die Zuordnung*

$$f: x \mapsto \begin{cases} x, & \text{falls } x \in U^+ = U \cap G^+, \\ x \cdot z, & \text{falls } x \in U \setminus U^+. \end{cases} \quad (\text{D10.10})$$

*einen injektiven Homomorphismus  $f$  von  $U$  auf eine Untergruppe  $\tilde{U}$  von  $G^+$ . Weiter ist  $U^+ = U \cap \tilde{U}$  eine Untergruppe vom Index 2 in  $\tilde{U}$ .*

*Proof.* Es ist klar, dass einer der 3 Fälle 1, 2 oder 3 vorliegen muss. In Fall 1 wird nichts behauptet. Sei nun  $z \in U$ . Ist  $u \in U \setminus U^+$ , so liegt  $u \cdot z \in G^+$ , denn  $G^+$  hat Index 2 in  $G$  und  $z \notin G^+$ . Es folgt, dass  $U^+$  Index 2 in  $U$  hat und  $U$  das interne direkte Produkt von  $U^+$  und der zyklischen Gruppe erzeugt von  $z$  ist.

Seien schliesslich  $z \notin U$  und  $U \not\subseteq G^+$ . Die folgende Rechnung zeigt, dass die Abbildung  $f: U \rightarrow G$  ein Homomorphismus ist:

$$\begin{aligned} f(u_1) \cdot f(u_2) &= \begin{cases} u_1 \cdot u_2, & \text{falls } u_1 \in U^+ \text{ und } u_2 \in U^+, \\ (u_1 \cdot z) \cdot u_2 = (u_1 \cdot u_2) \cdot z, & \text{falls } u_1 \notin U^+ \text{ und } u_2 \in U^+, \\ u_1 \cdot (u_2 \cdot z) = (u_1 \cdot u_2) \cdot z, & \text{falls } u_1 \in U^+ \text{ und } u_2 \notin U^+, \\ (u_1 \cdot z) \cdot (u_2 \cdot z) = (u_1 \cdot u_2), & \text{falls } u_1 \notin U^+ \text{ und } u_2 \notin U^+, \end{cases} \\ &= f(u_1 \cdot u_2). \end{aligned}$$

Sie ist injektiv, denn die Einschränkung von  $f$  auf  $U^+$  ist die Identität auf  $U^+$ , daher injektiv, und  $z = z^{-1}$  liegt nicht in  $U$ , weshalb kein Element von  $U \setminus U^+$  im Kern von  $f$  liegen kann. Sei  $y \in H \setminus U^+$ . Dann sind  $U = U^+ \cup U^+ \cdot y$  und  $\tilde{U} = U^+ \cup (U^+ \cdot (y \cdot z))$ ; dies zeigt insbesondere, dass  $U^+$  Index 2 in  $U$  hat und  $U^+ = U \cap \tilde{U}$  ist.  $\square$

## 10.2b Endliche Untergruppen der zweiten Art

Dank obigem Hilfssatz D10.7 ist es nun leicht, die Liste der endlichen Untergruppen  $H$  von  $O(\mathbb{E}^3)$  aufzustellen. Wie im Hilfssatz treten 3 Fälle auf. Eine Untergruppe ist von der *ersten Art*, falls sie in  $SO(\mathbb{E}^3)$  enthalten ist; sie gehört dann zu den Gruppen, die in Satz D10.4 aufgezählt sind. Sie ist von der *zweiten Art*, falls sie die Raumumkehrung  $-1$  enthält; in diesem Fall ist sie das direkte Produkt von  $H^+ = H \cap SO(\mathbb{E}^3)$  und der zyklischen Gruppe  $Z = \{1, -1\}$ . Dabei ist  $H^+$  eine der in Satz D10.4 aufgezählten Gruppen. Weil zwei Gruppen  $H$  und  $H'$ , die  $-1$  enthalten, genau dann konjugiert sind, falls die Untergruppen  $H^+$  und  $(H')^+$  in  $SO(\mathbb{E}^3)$  oder in  $O(\mathbb{E}^3)$  konjugiert sind,<sup>4</sup> gibt jede Konjugationsklasse von endlichen Untergruppen der ersten Art Anlass zu genau einer Konjugationsklasse von endlichen Untergruppen der zweiten Art in  $O(\mathbb{E}^3)$ .

Insbesondere folgt aus Theorem D10.6, dass es 11 geometrische Kristallklassen zweiter Art gibt. Abbildung D.6 zählt 10 dieser Konjugationsklassen auf.

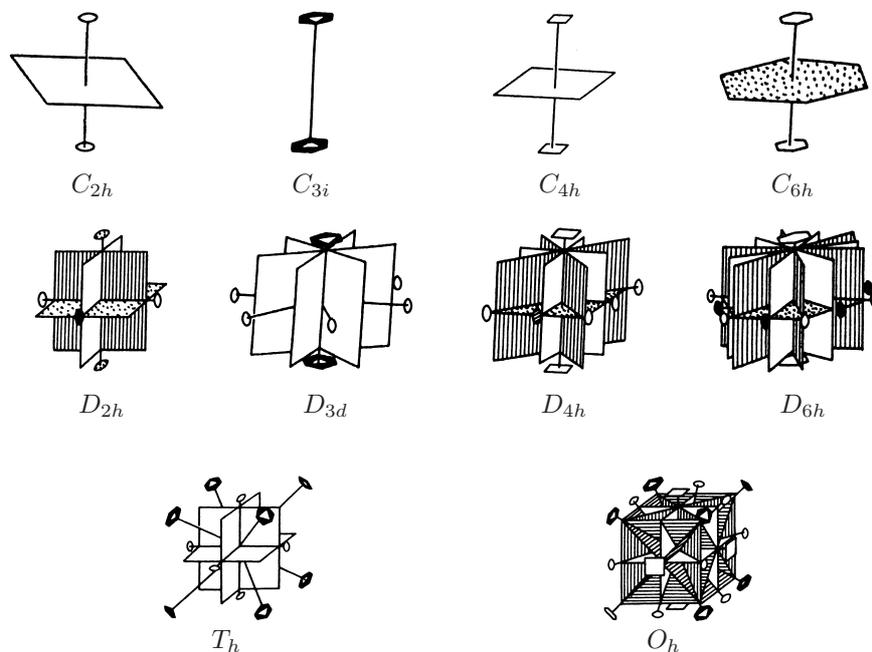


Abbildung D.6: Symmetrie-Elemente der geometrischen Kristallklassen zweiter Art

**BEMERKUNG D10.8** Die Kristallographen bezeichnen die geometrischen Kristallklassen auf zwei Weisen. Die erste geht auf Arthur SCHOENFLIES (1853–1928) zurück und entspricht in etwa den noch heute in der Gruppentheorie verwendeten Bezeichnungen. Die andere Bezeichnungsweise, die so genannte *Internationale Notation*, stammt von den Kristallographen Carl HERMANN (1898–1961) und Charles-Victor MAUGUIN (1878–1958); sie ist sprechender, aber gewöhnungsbedürftig.

Die *geometrischen Kristallklassen der ersten Art* sind zyklisch, Diedergruppen oder die Drehgruppen eines Tetraeders oder eines Oktaeders; Schoenflies verwendet für sie

<sup>4</sup>Man beachte, dass  $O(\mathbb{E}^3)$  von  $SO(\mathbb{E}^3)$  und  $-1$  erzeugt wird und dass Konjugation mit  $-1$  die Identität auf  $O(\mathbb{E}^3)$  induziert.

Bezeichnungen, die man heute so schreibt:

$$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6, \quad D_2, D_3, D_4, D_6 \text{ und } T, O.$$

Die Internationalen Symbole dieser Klassen sind

$$1, 2, 3, 4, 6, \quad 222, 32, 422, 622, \text{ und } 23, 432.$$

Bei den Diedergruppen wird die Anzahl der Drehungen um die (senkrechte) Hauptachse als erste genannt; bei den Klassen des kubischen Systems zuerst die Anzahl der Drehungen um die Koordinatenachsen, dann jene um die Raumdiagonalen, endlich jene um weitere Achsen (nur im Fall der Oktaedergruppe).

Nun zu den *geometrischen Kristallklassen der zweiten Art*. Schoenflies verwendet für die Inversion  $-\mathbb{1}$  das Symbol  $J$ , das man später durch  $i$  ersetzt hat. Demgemäss sollte man die Gruppen  $D_k \times \{\mathbb{1}, -\mathbb{1}\}$  mit  $D_{ki}$  bezeichnen. Nun sind aber für Schoenflies, ebenso wie für die praktischen Kristallographen von heute, nicht so sehr *die Symmetrie-Operationen* als die *Symmetrie-Elemente*, also Drehachsen, Spiegelebenen und Drehspiegelebenen, von Bedeutung. Ist  $\varphi$  eine Drehung der Ordnung 2, so ist  $-\varphi = (-\mathbb{1}) \circ \varphi$  eine Spiegelung, besitzt also eine Spiegelebene, welche man zeichnen kann. Falls die Drehachse vertikal ist, ist die Spiegelebene horizontal, was Schoenflies mit dem Exponenten  $h$  bezeichnet; man schreibt ihn heute als Index. Die modernisierten Schoenflies'schen Symbole der geometrischen Kristallklassen zweiter Art sind daher

$$C_i, C_{2h}, C_{3i}, C_{4h}, C_{6h}, \quad D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h} \text{ und } T_h, O_h.$$

Die Bezeichnung  $D_{3d}$  für  $D_3 \times \text{gp}(-\mathbb{1})$  erklärt sich so:  $D_3$  enthält die 2-zählige Drehung um die vertikale Achse nicht; daher enthält das Produkt  $D_3 \times \text{gp}(-\mathbb{1})$  die Spiegelung an der horizontalen Ebene nicht. Hingegen gibt es in  $D_3$  Drehungen der Ordnung 2 um horizontale Achsen. Für jede dieser  $\varphi$  Drehungen ist dann  $-\varphi$  eine Spiegelung an einer vertikalen Ebene; normalerweise bezeichnet man eine solche Ebene mit dem Index  $v$ . Nun enthält aber keiner der vertikalen Spiegel eine der horizontalen Drehachsen, vielmehr sind diese Spiegel Mittelebenen von horizontalen Drehachsen; auf das Vorliegen dieser Mittelebenen weist der Index  $d$  (für „diagonal“) hin.

Die internationalen Symbole der geometrischen Klassen zweiter Art sind:

$$\begin{aligned} \bar{1}, \quad \frac{2}{m} &= 2/m, \quad \bar{3}, \quad \frac{4}{m} = 4/m, \quad \frac{6}{m} = 6/m, \\ \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} &= mmm, \quad \bar{3} \frac{2}{m} = \bar{3}m, \quad \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = 4/mmm, \quad \frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} = 6/mmm, \\ \frac{2}{m} \bar{3} &= m\bar{3}, \quad \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m} = m\bar{3}m. \end{aligned}$$

Man beachte, dass es vollständige und verkürzte Symbole für viele dieser Klassen gibt.

### 10.2c Endliche Untergruppen der dritten Art

Eine Untergruppe  $H \subset O(\mathbb{E}^3)$  ist von der dritten Art, falls die Rauminversion  $-\mathbb{1}$  nicht zu  $H$  gehört und  $H$  nicht nur aus Rotationen besteht. Ersetzt man in ihr jede orthogonale Abbildung, die keine Rotation ist, durch  $-\mathbb{1} \circ \psi = -\psi$ , so erhält man eine Menge  $\tilde{U}$  von Rotationen; nach Hilfssatz D10.7 ist diese Menge eine Untergruppe von  $SO(\mathbb{E}^3)$ , also eine der in Satz D10.4 ausgezählten Gruppen. Weiter ist  $H^+ = H \cap SO(\mathbb{E}^3)$  eine Untergruppe vom Index 2 in  $H$ . Die Gruppe  $H$  kann man aus  $\tilde{H}$  zurückgewinnen, indem man jede Abbildung  $\varphi \in \tilde{H} \setminus H^+$  durch  $\varphi$  ersetzt.

Auf Grund dieser Überlegungen kann man die endlichen Untergruppen der dritten Art so finden. Man sucht in der Liste von Satz D10.4 Paare von Untergruppen  $(\tilde{H}, H^+)$ , bei denen  $H^+$  eine Untergruppe von  $\tilde{H}$  vom Index 2 ist. Ist  $\varphi \in \tilde{H} \setminus H^+$ , so ist dann  $H = H^+ \cup (H^+ \circ (-\varphi))$  eine Gruppe der dritten Art. Wie in Satz D10.4 treten Fälle (i) bis (v) auf.

(i)  $\tilde{H}$  ist *zyklisch* mit Ordnung  $k$ . Die Gruppe hat genau dann eine Untergruppe vom Index 2, falls  $k$  gerade ist. Ist  $k$  gerade und bezeichnet  $\psi_k$  die Drehung, die bezüglich einer Orthonormalbasis  $\mathcal{B}$  durch die Matrix (D10.7) beschrieben wird, so erzeugt  $-\psi_k$  eine zyklische Untergruppe der dritten Art; bezüglich der Basis  $\mathcal{B}$  wird  $-\psi$  durch die Matrix

$$(-\psi_k)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} -\cos(2\pi/k) & \sin(2\pi/k) & 0 \\ -\sin(2\pi/k) & -\cos(2\pi/k) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{D10.11})$$

dargestellt. Es ist  $-\psi_k$  eine Spiegelung, falls  $k = 2$  ist, und sonst eine Drehspiegelung.

Fall (i) gibt Anlass zu 3 geometrischen Kristallklassen dritter Art. Sie sind in der nächsten Abbildung dargestellt.

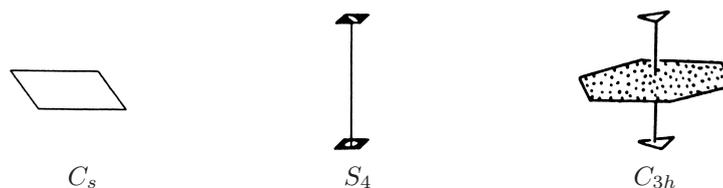


Abbildung D.7: Geometrische Kristallklassen dritter Art – Fall (i)

**BEMERKUNG D10.9** Die modernisierten Schoenflieschen Bezeichnungen sind recht verwirrend. Das Symbol  $C_s$  bedeutet, dass es sich um eine zyklische Gruppe handelt, welche von einer Spiegelung erzeugt wird. Die anderen zwei Gruppen sind beide von einer Drehspiegelung erzeugt: das Symbol  $S_4$  bezeichnet eine Drehspiegelung der Ordnung 4, das Symbol  $C_{3h}$  weist daraufhin, dass die Gruppe von einer 3-zählige Drehung um die (senkrechte) Hauptachse und einer Spiegelung an einer horizontalen Ebene erzeugt wird. Die internationalen Bezeichnungen der drei Gruppen sind  $m$ ,  $\bar{4}$  und  $\bar{6}$ .

(ii)  $\tilde{H}$  ist eine *Diedergruppe*  $D_k$  mit Ordnung  $2k$ , erzeugt von den Drehungen  $\varphi_1$  und  $\psi_k$ . Diese Gruppe enthält eine offensichtliche Untergruppe vom Index 2, nämlich die zyklische Untergruppe  $H_+$  erzeugt von  $\psi_k$ ; falls  $k$  *ungerade* ist, so ist sie die einzige Untergruppe vom Index 2. Die entsprechende Gruppe dritter Art wird dann von  $-\varphi_1$  und  $\psi_k$  erzeugt. Dieser Unterfall führt zu 4 neuen geometrischen Kristallklassen. Das typische an ihnen sind die Scharen von Spiegelungsebenen, welche die „vertikale“ Achse  $\mathbb{R} \cdot b_3$  gemeinsam haben.

**BEMERKUNG D10.10** Die modernisierten Schoenflieschen Bezeichnungen sind selbstredend, die entsprechenden internationalen Symbole lauten

$$2mm, \quad 3m, \quad 4mm, \quad 6mm.$$

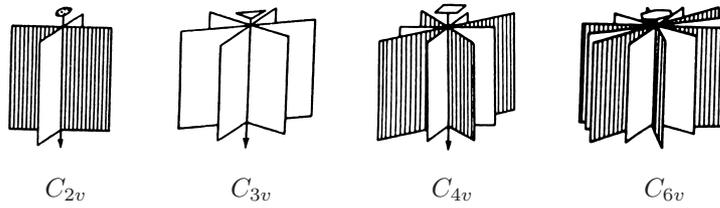


Abbildung D.8: Geometrische Kristallklassen dritter Art – Fall (ii), Teil 1

Ist  $k$  gerade, so enthält  $\tilde{H}$  auch Diedergruppen vom Index 2. Eine solche Diedergruppe wird erzeugt von der Drehung  $(\psi_k)^2 = \psi_{k/2}$  und von einer der Drehungen  $\varphi_1 \circ \psi_k^\ell \in \tilde{H}$ . Da wir uns für eine Liste der Untergruppen dritter Art bis auf Konjugation interessieren, müssen wir herausfinden, wie viele Konjugationsklassen die Paare

$$(\tilde{H} = \text{gp}(\{\varphi_1, \psi_k\}), H^+ - \ell = \text{gp}(\{\varphi - 1 \circ \psi_k^\ell, (\psi_k)^2\}) \text{ mit } \ell \in \{0, 1, 2, k - 1\})$$

vertreten. Es ist eine einzige Klasse. Der Normalisator

$$N_{O(\mathbb{E}^3)}(\tilde{H}) = \{\varphi \in O(\mathbb{E}^3) \mid \varphi \circ \tilde{H} \circ \varphi^{-1} = \tilde{H}\}$$

enthält nämlich die Drehung  $\psi = \psi_{2k}$ : zunächst kommutiert  $\psi$  mit der Drehung  $\psi_k$ . Die Rechnung

$$\begin{aligned} (\psi_{2k} \circ \varphi_1 \circ \psi_{2k}^{-1})_{\mathcal{B}} &= \begin{pmatrix} \cos(\pi/k) & -\sin(\pi/k) & 0 \\ \sin(\pi/k) & \cos(\pi/k) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot (\psi_{2k}^{-1})_{\mathcal{B}} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\pi/k) & \sin(\pi/k) & 0 \\ \sin(\pi/k) & -\cos(\pi/k) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos(\pi/k) & \sin(\pi/k) & 0 \\ -\sin(\pi/k) & \cos(\pi/k) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(2\pi/k) & -\sin(2\pi/k) & 0 \\ \sin(2\pi/k) & -\cos(2\pi/k) & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (\varphi_1 \circ (\psi_k)^{-1})_{\mathcal{B}} \end{aligned}$$

impliziert dann, dass erstens  $\psi \circ \tilde{H} \psi^{-1} = \tilde{H}$  ist und dass Konjugation mit  $\psi$  die Untergruppe  $H_{\ell+1}$  auf  $H_\ell$  abbildet.

Man kommt so zu 2 neuen geometrischen Kristallklassen. Das typische an ihnen ist das Miteinander von vertikalen Spiegeln und horizontalen 2-zähligen Drehachsen. Ihre internationalen Bezeichnungen sind  $\bar{4}2m$  und  $\bar{6}2m$ .

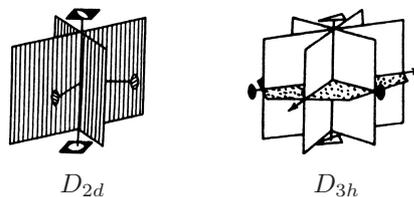


Abbildung D.9: Geometrische Kristallklassen dritter Art – Fall (ii), Teil 2

Die Fälle (iii), (iv) und (v) sind schnell behandelt: die Oktaedergruppe hat Ordnung 24; sie ist isomorph mit der symmetrischen Gruppe  $S_4$  und hat die Tetraedergruppe  $T$  als einzigen Normalteiler vom Index 2. Hingegen haben weder  $T$  noch die

Drehgruppe des Ikosaeders eine Untergruppe vom Index 2: eine solche Gruppe wäre eine endliche Untergruppe von  $\text{SO}(\mathbb{E}^3)$ , also auf Grund von Satz D10.4 entweder zyklisch oder eine Diedergruppe, enthielte folglich eine zyklische Gruppe der Ordnung 3, beziehungsweise 15. Nun hat zwar  $T$  Untergruppen der Ordnung 3; aber jede dieser Untergruppen erzeugt zusammen mit einer der drei Untergruppen der Ordnung 2 die ganze Untergruppe. Das Ikosaeder seinerseits lässt sicher keine Drehung der Ordnung 15 zu.

Diese drei Fälle führen also zu einer einzigen Konjugationsklasse von Untergruppen der dritten Art; sie ist eine weitere geometrische Kristallklasse der dritten Art. Sie ist in Abbildung D.10 dargestellt; ihre internationale Bezeichnung ist  $43m$

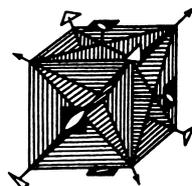


Abbildung D.10: Geometrische Kristallklasse  $T_d$

### 10.2d Liste der 32 geometrischen Kristallklassen

Jede der gefundenen 32 geometrischen Kristallklassen besteht aus Gruppen, die entweder ein kubisches oder ein hexagonales Gitter invariant lassen. Um solche Gitter zu beschreiben, führen wir zwei Basen  $\mathcal{B}$  und  $\mathcal{B}_{\text{hexa}}$ . Seien  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$  eine Orthonormalbasis von  $\mathbb{E}^3$  und

$$\mathcal{B}_{\text{hexa}} = (b'_1 = b_1, b'_2 = -\frac{1}{2}b_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}b_3, b'_3 = b_3).$$

Dann ist  $\Gamma_c = \sum_j \mathbb{Z} \cdot b_j$  nach Definition ein (primitives) kubisches und  $\Gamma_h = \sum_j \mathbb{Z} \cdot b'_j$  ein hexagonales Gitter.

Die Automorphismengruppe des kubischen Gitters  $\Gamma_c$  enthält die Drehungen  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_4$  und die Spiegelung  $\rho_1$ , die durch die Matrizen

$$(\varphi_1)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\varphi_2)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\varphi_4)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{D10.12})$$

$$(\rho_1)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = -(\varphi_1)_{\mathcal{B}}, \quad (\rho_3)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{D10.13})$$

dargestellt werden.

Die Automorphismengruppe des hexagonalen Gitters  $\Gamma_{\text{hexa}}$  enthält die Drehungen  $\varphi_1, \varphi_2$  und die Spiegelung  $\rho_1$ , welche bezüglich der Basis  $\mathcal{B}_{\text{hexa}}$  durch die Matrizen (D10.12) und (D10.13) gegeben sind, sowie die Drehung  $\psi_6$ , die durch die Matrix

$$(\psi_6)_{\mathcal{B}_{\text{hexa}}} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{D10.14})$$

festgelegt ist. Die Erkenntnisse der Unterabschnitte 10.1 und 10.2 lassen sich dann so zusammenfassen:

HAUPTSATZ D10.11 Die Bezeichnungen seien wie zuvor. Es gibt 32 geometrische Kristallklassen in  $\mathbb{E}^3$ , und zwar 11 Klassen der ersten Art – sie enthalten nur Drehungen, 11 Klassen der zweiten Art – sie enthalten die Inversion  $-\mathbb{1}$ , und endlich 10 Klassen dritter Art; sie bestehen nicht nur aus Drehungen, enthalten aber die Inversion  $-\mathbb{1}$  nicht. Die Bezeichnungen dieser Klassen und Erzeugende ihrer Vertreter sind in den Tafeln D.2 und D.3 aufgeführt.

$ H $	S.	H. - M.	Erzeugende	$ H $	S.	H. - M.	Erzeugende
24	$O$	432	$\varphi_2, \psi_4$	48	$O_h$	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$-\varphi_2, \psi_4$
12	$T$	23	$\varphi_1, \varphi_2$	24	$T_h$	$\frac{2}{m}\bar{3}$	$\varphi_1, -\varphi_2$
8	$D_4$	422	$\varphi_1, \psi_4$	16	$D_{4h}$	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\varphi_1, \psi_4, \rho_3$
4	$C_4$	4	$\psi_4$	8	$C_{4h}$	$\frac{4}{m}$	$\psi_4, \rho_3$
4	$D_2$	222	$\varphi_1, \psi_4^2$	8	$D_{2h}$	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\varphi_1, \psi_4^2, \rho_3$
2	$C_2$	2	$\psi_4^2$	4	$C_{2h}$	$\frac{2}{m}$	$\psi_4^2, \rho_3$
12	$D_6$	622	$\varphi_1, \psi_6$	24	$D_{6h}$	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\varphi_1, \psi_6, \rho_3$
6	$C_6$	6	$\psi_6$	12	$C_{6h}$	$\frac{6}{m}$	$\psi_6, \rho_3$
6	$D_3$	32	$\varphi_1, \psi_6^2$	12	$D_{3d}$	$\bar{3}\frac{2}{m}$	$\varphi_2, -\psi_6^2$
3	$C_3$	3	$\psi_6^2$	6	$C_{3i}$	$\bar{3}$	$-\psi_6^2$
1	$C_1$	1	$\mathbb{1}$	2	$C_i$	$\bar{1}$	$-\mathbb{1}$

Tabelle D.2: Geometrische Kristallklassen der ersten und zweiten Art

$ H $	$(\tilde{H}, H^+)$	S. Symbol	H. - M. Symbol	Erzeugende
24	$(O, T)$	$T_d$	$\bar{4}3m$	$\varphi_1, \varphi_2, -\psi_4$
8	$(D_4, C_4)$	$C_{4v}$	$4mm$	$\rho_1, \psi_4$
8	$(D_4, D_2)$	$D_{2d}$	$\bar{4}2m$	$\varphi_1, -\psi_4$
4	$(D_2, C_2)$	$C_{2v}$	$mm2$	$\rho_1, \psi_4^2$
4	$(C_4, C_2)$	$S_4$	$\bar{4}$	$-\psi_4$
2	$(C_2, C_1)$	$C_s$	$m$	$\rho_3$
12	$(D_6, C_6)$	$C_{6v}$	$6mm$	$\rho_1, \psi_6$
12	$(D_6, D_3)$	$D_{3h}$	$\bar{6}m2$	$\varphi_2, -\psi_6$
6	$(D_3, C_3)$	$C_{3v}$	$3m$	$\rho_1, \psi_6^2$
6	$(C_6, C_3)$	$C_{3h}$	$\bar{6}$	$-\psi_6^2$

Tabelle D.3: Geometrische Kristallklassen der dritten Art

### 10.3 Diskussion der Liste der geometrischen Kristallklassen

Dieser Unterabschnitt ergänzt die in den vergangenen Unterabschnitten erarbeitete Aufzählung der geometrischen Kristallklassen in  $O(\mathbb{E}^3)$ . Zuerst betrachten wir die Verbände der Untergruppen der beiden maximalen geometrischen Kristallklassen  $O_h$

und  $D_{6h}$ . Danach werden die Begriffe des „Bravais-Gitters“ und des Kristallsystems eingeführt und erläutert. Zum Schluss werden Kristallformen besprochen

### 10.3a Verband der Untergruppen eines Vertreters der Klasse $O_h$

Es gibt zwar 32, also recht viele, geometrische Kristallklassen; sie sind aber alle vertreten durch die Untergruppen von nur zwei Gruppen. Es lohnt sich den Verband – auch *Hasse-Diagramm* genannt – der Untergruppen dieser beiden geometrischen Kristallklassen genauer zu betrachten.

Jeder Vertreter von  $O_h$ , der grösseren der beiden Klassen, hat die Ordnung 48; er enthält insbesondere die Untergruppen, die in Tafel D.4 wiedergegeben sind.

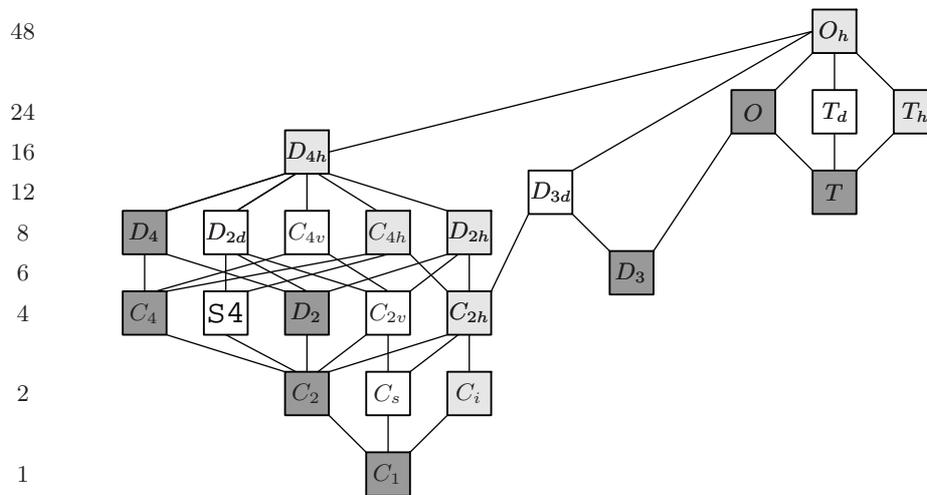


Tabelle D.4: Untergruppen von  $O_h$

*Quintette von Untergruppen.* Auffällig in Tafel D.4 ist zunächst das *Quintett der 5 Gruppen*, die zwischen der Drehgruppe  $T$  eines Tetraeders und der vollen Symmetriegruppe  $O_h$  eines Oktaeders liegen. Solche Quintette treten im Verband öfter auf, wenn auch die gewählte Darstellung dies etwas versteckt; ein Quintett ergibt sich nämlich immer dann, wenn im Verband ein Paar von Drehgruppen  $(\tilde{H}, H^+)$  mit Index 2 vorkommt. Die beiden Gruppen des Paares sind dann von der ersten Art; jede von ihnen gibt Anlass zu einer Gruppe der zweiten Art, den direkten Produkten  $H^+ \times \{\pm 1\}$  und  $\tilde{H} \times \{\pm 1\}$ . Zusätzlich liefern sie zusammen noch eine Gruppe  $\tilde{H} \wr H^+$  der dritten Art. Wenn  $H^+$  die Ordnung  $k$  hat, so haben  $\tilde{H}$ ,  $H^+ \times \{\pm 1\}$  sowie  $\tilde{H} \wr H^+$  die Ordnung  $2k$ , während die Gruppe  $\tilde{H} \times \{\pm 1\}$  die Ordnung  $4k$  hat. In der Tafel stehen die Namen der Gruppen der ersten Art auf dunkelgrauem, jene der zweiten Art auf hellgrauem Hintergrund. Dies macht es leicht, Paare  $(\tilde{H}, H^+)$  von Gruppen erster Art im Verband zu finden.

*Illustration der Sylowschen Sätze.* Sei  $H$  eine Gruppe, welche die Klasse  $O_h$  vertritt. Sie hat  $48 = 2^4 \cdot 3^1$  Elemente. Nach den *Sylowschen Sätzen* muss  $H$  deshalb eine Untergruppe  $S_2$  der Ordnung  $16 = 2^4$  und Untergruppe der Ordnung 3 haben; diese

Untergruppen werden als Sylowsche 2–Gruppe und Sylowsche 3–Gruppe bezeichnet. Ferner sind alle Sylowschen 2–Gruppen von  $H$  in  $H$  konjugiert und ihre Anzahl  $k_2$  ist kongruent 1 modulo 2, also ungerade; ebenso sind alle Sylowschen 3–Gruppen von  $H$  konjugiert und ihre Anzahl  $k_3$  ist kongruent 1 modulo 3.

Es fällt leicht, die Sylowschen 2–Gruppen von  $H$  anzugeben; sie vertreten alle die Kristallklasse  $D_{4h}$ . Nach Tafel D.4 enthält  $H$  nämlich eine Untergruppe  $S_2$  dieser Kristallklasse; da alle Sylowschen 2–Gruppe konjugiert sind – und zwar in  $H$ , also erst recht in  $O(\mathbb{E}^3)$  – vertreten sie alle die gleiche geometrische Kristallklasse. Weil die Sylowschen 2–Gruppen von  $H$  konjugiert sind, ist ihre Anzahl ein Teiler von  $|H|/|S_2| = 48/16 = 3$ . Tatsächlich ist ihre Anzahl 3: seien nämlich  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$  eine Orthonormalbasis von  $\mathbb{E}^3$  und  $\vartheta_1$ ,  $\vartheta_2$  und  $\vartheta_3$  die Drehungen der Ordnung 4, welche durch die Matrizen

$$(\vartheta_1)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\vartheta_2)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\vartheta_3)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

gegeben werden. Dann sind

$$\text{gp}(\{\vartheta_1^2, \vartheta_3, -\mathbb{1}\}), \quad \text{gp}(\{\vartheta_2^2, \vartheta_1, -\mathbb{1}\}) \quad \text{und} \quad \text{gp}(\{\vartheta_3^2, \vartheta_2, -\mathbb{1}\})$$

drei paarweise verschiedene Sylowsche 2–Gruppen von  $H$ . Nur eine dieser Untergruppen ist in der Tafel D.4 eingetragen; der gezeichnete Verband ist also unvollständig.

Die Gruppe  $H$  enthält auch eine Untergruppe der Ordnung 12, die zur geometrischen Klasse  $D_{3d}$  gehört. Deren Untergruppen sind weitgehend weggelassen worden, dies in der Absicht, das Diagramm zu entlasten; sie finden sich aber in der Tafel D.5 Die Drehungen der Ordnung 3 um die 4 Raumdiagonalen  $\mathbb{R} \cdot (b_1 \pm b_2 \pm b_3)$  erzeugen 4 Sylowsche 3–Gruppen. Da jede Untergruppe ungerader Ordnung in  $SO(\mathbb{E}^3)$  liegen muss, sieht man leicht, dass  $H$  keine weiteren Sylowschen 3–Gruppen enthalten kann.

### 10.3b Verband der Untergruppen eines Vertreters der Klasse $D_{6h}$

Ein Vertreter der geometrische Kristallklasse  $D_{6h}$ , hat die Ordnung  $24 = 2^3 \cdot 3$ ; er enthält insbesondere die Untergruppen, welche in Tafel D.5 wiedergegeben sind.

*Quintette von Untergruppen.* Eine Gruppe der Klasse  $D_{6h}$  enthält 7 Vertreter von geometrischen Kristallklassen der ersten Art, nämlich der Klassen  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$ ,  $C_6$  sowie  $D_2$ ,  $D_3$  und  $D_6$ . Diese Untergruppen geben Anlass zu verschiedenen Quintetten, die in Vertretern der Kristallklasse  $O_h$  nicht auftreten insbesondere die Quintette

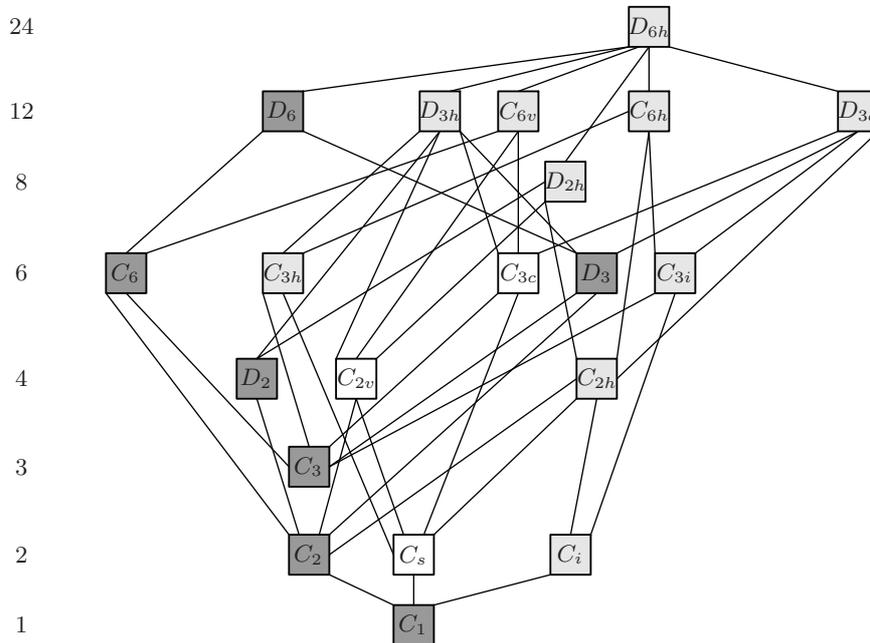
$$(D_6, D_3): D_3, \text{ dann } D_6, D_6 \downarrow D_3 = D_{3d}, D_{3h} \text{ und } D_{6h},$$

$$(D_6, C_6): C_6, \text{ dann } D_6, D_6 \downarrow C_6 = C_{6v}, C_{6h} \text{ und } D_{6h}$$

*Illustration der Sylowschen Sätze.* Jeder Vertreter  $H$  der geometrischen Kristallklasse  $D_{6h}$  hat Ordnung  $24 = 2^3 \cdot 3$ ; in ihm muss es daher Sylowsche 2–Gruppen der Ordnung  $2^3 = 8$  und Sylowsche 3–Gruppen der Ordnung 3 geben. Um diese Untergruppen zu beschreiben, benötige ich einige Definitionen.

Seien  $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$  eine Orthonormalbasis von  $\mathbb{E}^3$  und  $\varphi_1$  und  $\psi_6$  die Drehungen, welche durch die Matrizen

$$(\varphi_1)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\psi_6)_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Tabelle D.5: Untergruppen von  $D_{6h}$ 

dargestellt werden. Man kann annehmen, die Gruppe  $H$  werde von diesen Drehungen sowie der Rauminversion  $-1$  erzeugt. Dann erzeugen die Drehungen  $\varphi_1, \psi_6^3$  und die Inversion  $-1$  eine Untergruppe der Ordnung 8, also eine Sylowsche 2-Gruppe  $S_2$ . Neben dieser Sylowschen 2-Gruppe enthält  $H$  noch zwei weitere: konjugiert man nämlich  $S_2$  mit der Drehung  $\psi_6$  erhält man eine Gruppe  $S_2'$ , welche die Inversion, die Drehung  $\psi_6^3$  und eine Drehung um die Achse  $\psi_6(\mathbb{R} \cdot b_1)$  enthält und daher von  $S_2$  verschieden ist. Ferner ist  $S_2'' = \psi_6^2 \circ S_2 \circ \psi_6^{-21}$  sowohl von  $S_2$  wie auch von  $S_2'$  verschieden. Es gibt keine weiteren Sylowschen 2-Gruppen, denn ihre Anzahl ist ein Teiler des Indexes von  $S_2$  in  $H$ , also von  $24/8 = 3$ .

Nun zu den Sylowschen 3-Gruppen. Die Drehung erzeugt  $\psi_6^2$  erzeugt eine Gruppe  $S_3$  der Ordnung 3, also eine Sylowsche 3-Gruppe, und sie ist die einzige, denn Konjugation mit  $\varphi_1$  bildet  $\psi_6$  auf  $\psi_6^{-1}$  ab, weshalb die von  $\psi_6$  erzeugte zyklische Untergruppe  $C_6$ , also auch jede ihrer Untergruppen, ein Normalteiler von  $H$  ist.

### 10.3c Bravais'sche arithmetische Klassen und Holoedrien

Die geometrischen und arithmetischen Kristallklassen sind in Nummer 5.2c eingeführt worden, und zwar als Äquivalenzklassen von Relationen, welche die affine Äquivalenz von kristallographischen Gruppen vergrößern; diese Vergrößerung bewirkt, dass die Anzahl der neuen Klassen kleiner ist, weshalb die Chancen steigen, Vertreter in diesen Klassen explizit ausfindig machen zu können. Dass dieses Ziel tatsächlich realisierbar ist, haben wir in Unterabschnitt 10.2 gesehen.

In der Kristallographie werden die geometrischen Kristallklassen zu noch größeren Klassen zusammengefasst, den so genannten *Kristallsystemen*. Diese sind historisch älter als die Kristallklassen; schon 1815 entdeckte nämlich Samuel WEISS (1780–

1856), dass für die Beschreibung der makroskopischen Gestalt eines Kristalles ein rechtwinkliges Koordinatensystem nicht immer das günstigste ist. Diese Einsicht war der Ursprung der sieben (oder sechs in anderer Zählung) Koordinaten- oder Kristallsysteme.

ES IST MIR NICHT KLAR, WIE MAN AN DIE HOLOEDRIEN HERANKOMMT OHNE IMPLIZIT DIE BRAVAIS TYPEN BESTIMMEN ZU MUESSEN. DAS UNBEFRIEDIGENDE IST, DASS – IM GEGENSATZ ZU DEN GEOMETRISCHEN KLASSEN – ES SICH HIER NICHT UM EIN PROBLEM ZU HANDELN SCHEINT, DASS MAN MIT DARSTELLUNGSTHEORIE ANGEHEN KANN.

#### **10.4 Begriff des Kristallsystems**

#### **10.5 Begriff der Kristallform**

## D11 Arithmetische Kristallklassen des $\mathbb{E}^3$ und $\mathbb{E}^4$

Die arithmetischen Kristallklassen eines  $n$ -dimensionalen Euklidischen Vektorraumes entsprechen nach Hauptsatz C6.3 eindeutig den Konjugationsklassen der endlichen Untergruppen der linearen Gruppe  $GL(n, \mathbb{Z})$ . Weiter ist jede endliche Untergruppe von  $GL(n, \mathbb{Z})$  isomorph einer Untergruppe der endlichen Gruppe  $GL(n; \mathbb{Z}_3)$  (siehe Hauptsatz C7.1). Deshalb ist jede endliche Untergruppe von  $GL(n, \mathbb{Z})$  in einer maximal endlichen Untergruppe enthalten. Wenn es gelingt, Vertreter  $H_1, \dots, H_\ell$  der Konjugationsklassen der maximal endlichen Untergruppen von  $GL(n, \mathbb{Z})$  zu finden, kann man anschliessend eine Liste der Konjugationsklassen aller endlichen Untergruppen von  $GL(n, \mathbb{Z})$  dadurch gewinnen, dass man die Untergruppen der Gruppen  $H_1, \dots, H_\ell$  bestimmt und die so gefundenen endlichen Gruppen bis auf Konjugation klassifiziert.

Die arithmetischen Kristallklassen des  $\mathbb{E}^4$  sind 1967 mit dem skizzierten Verfahren gefunden worden: zuerst publizierte Everitt S. DADE 1965 eine Liste von 9 Gruppen, welche die Konjugationsklassen der maximal endlichen Untergruppen von  $GL(4, \mathbb{Z})$  vertreten ([Da65]). Gestützt auf diese Liste bestimmte Rolf BÜLOW die 710 Konjugationsklassen der endlichen Untergruppen von  $GL(4, \mathbb{Z})$  durch eine umfangreiche Rechnung (siehe [Bue67]).

In diesem Abschnitt erkläre ich das Verfahren von Dade und bestimme mit ihm die maximal endlichen Untergruppen von  $GL(n, \mathbb{Z})$  für  $n = 3$  und  $n = 4$ .

### 11.1 Bestimmung der maximalen arithmetischen Kristallklassen

In diesem Unterabschnitt skizziere ich das Verfahren, mit dem E. S. DADE 1965 Vertreter der 9 maximalen arithmetischen Kristallklassen eines  $\mathbb{E}^4$  fand. Die Details dieses Verfahrens sind umfangreich; ich führe sie daher nicht aus, illustriere sie aber durch die vollständige Bestimmung der maximal-endlichen Untergruppen von  $GL(3, \mathbb{Z})$ .

#### 11.1a Bestimmung der maximalen arithmetischen Klassen – Strategie

Gemäss Theorem C6.3 induziert die Zuordnung  $((\Gamma, H), \mathcal{B}) \mapsto H_{\mathcal{B}}$  eine Bijektion

$$\kappa_n : \mathcal{A}_n(\mathbb{E}^n) \xrightarrow{\sim} \mathcal{Z}_n = \left\{ {}^{GL(n, \mathbb{Z})}F \mid F \text{ endliche Untergruppe} \right\}$$

von der Menge der arithmetischen Klassen eines Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{E}^n$  auf die Menge der Konjugationsklassen der endlichen Untergruppen der Matrizen­gruppe  $GL(n, \mathbb{Z})$ . Im Folgenden wird ein Problem über  $GL(n, \mathbb{Z})$  mit Hilfe der Geometrie gelöst, in dem man es mittels  $\kappa_n$  in ein Problem über Gitter übersetzt.

**DEFINITION D11.1** Eine endliche Untergruppe  $F$  von  $GL(n, \mathbb{Z})$  wird *maximal-endlich* genannt, falls es keine Untergruppe  $\tilde{F}$  von  $GL(n, \mathbb{Z})$  gibt, welche  $F$  enthält und echt grössere Ordnung hat.

Jede endliche Untergruppe  $F$  ist in einer maximal-endlichen Untergruppe enthalten, denn nach Korollar C7.2 teilt die Ordnung jeder endlichen Untergruppe von  $GL(n, \mathbb{Z})$  die Ordnung der endlichen Gruppe  $GL(n, \mathbb{Z}_3)$ . Falls  $F$  eine maximal-endliche Untergruppe ist, so ist auch jede konjugierte Untergruppe von  $F$  maximal-endlich; man sagt daher, die Konjugationsklasse  ${}^{GL(n, \mathbb{Z})}F$  sei maximal-endlich.

Die Bestimmung der maximal-endlichen Kristallklassen erfolgt nun in drei Schritten:

1. *Schritt: Übersetzung in die Sprache der Gitter.* Ist  $F \subset \text{GL}(n, \mathbb{Z})$  eine maximal-endliche Untergruppe, so gibt es dank der Surjektivität der Abbildung  $\kappa_n$  ein Gitter  $\Gamma'$  in  $\mathbb{E}^n$ , eine Untergruppe  $H \subseteq \text{Aut}(\Gamma')$  und eine geordnete  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}$  von  $\mathbb{E}^n$ , derart dass  $H_{\mathcal{B}} = F$  ist. Theorem C7.5 zeigt dann, dass das Gitter  $\Gamma'$  so normalisiert werden kann, dass das entstehende Gitter  $\Gamma'_{norm}$  die Bedingung  $\text{Aut}(\Gamma') \subseteq \text{Aut}(\Gamma'_{norm})$  erfüllt. Die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_{norm})$  spannt nach Definition den Vektorraum  $\mathbb{E}^n$  auf und erzeugt ein Teilgitter  $\Gamma \subseteq \Gamma'_{norm}$ ; dieses Teilgitter ist unter  $\text{Aut}(\Gamma'_{norm})$  invariant, denn jeder Automorphismus von  $\Gamma'_{norm}$  permutiert die Minimalmenge von  $\Gamma'_{norm}$  und induziert daher einen Automorphismus des von der Minimalmenge erzeugten Teilgitters. Auf Grund der vorangehenden Überlegungen ist  $H$  also das erste Glied in einer Kette von Inklusionen

$$H \subseteq \text{Aut}(\Gamma') \subseteq \text{Aut}(\Gamma'_{norm}) \subseteq \text{Aut}(\Gamma).$$

Da  $F = \mathbb{H}_{\mathcal{B}}$  maximal-endlich ist, sind diese Inklusionen Gleichheiten. Es gilt also der

HILFSSATZ D11.2 *Zu jeder maximal-endlichen Untergruppe  $H$  von  $\text{GL}(n, \mathbb{Z})$  gibt es ein Gitter  $\Gamma$  und eine  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}$ , welche die folgenden Eigenschaften aufweisen:*

- (i)  $\text{Aut}(\Gamma)_{\mathcal{B}} = H$ ;
- (ii)  $\Gamma$  ist normalisiert, und
- (iii)  $\Gamma$  wird von seiner Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma)$  erzeugt.

2. *Schritt: Einbezug der Minimalfolgen.* Nun ziehen wir *Minimalfolgen* in unsere Betrachtungen ein.<sup>5</sup> Sei  $\Gamma$  ein normalisiertes Gitter. Dann enthält die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma)$  eine geordnete Basis des umgebenden Vektorraumes. Jede solche Basis ist dann eine Minimalfolge des Gitters  $\Gamma$ , denn die Vektoren in  $\mathcal{M}(\Gamma)$  haben die kleinstmögliche positive Länge. Umgekehrt liegen die Vektoren jeder Minimalfolge in  $\mathcal{M}(\Gamma)$ , denn ihre Längen hängen nach B4.15 nicht von der Wahl der Minimalfolge ab und müssen daher alle gleich 1 sein.

Wir nehmen nun an, jede Minimalfolge des normalisierten Gitters  $\Gamma$  erzeuge das Gitter<sup>6</sup> und wählen eine Minimalfolge  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  als  $\mathbb{Z}$ -Basis von  $\Gamma$ . Ist  $u = \sum x_h \cdot b_h$  ein beliebiger Vektor der Minimalfolge  $\mathcal{M}(\Gamma)$  und ist  $j$  ein Index mit  $x_j \neq 0$ , so ist die Folge

$$FF = (b_1, \dots, b_{j-1}, u, b_{j+1}, \dots, b_n)$$

linear unabhängig, also eine Minimalfolge und daher eine  $\mathbb{Z}$ -Basis. Der Koeffizient  $x_j$  ist daher 1 oder  $-1$ . Wendet man diese Überlegung auch auf die Bilder  $\varphi(b_k)$  der Basisvektoren unter einem Automorphismus  $\varphi$  von  $\Gamma$  an, kommt man zum Ergebnis:

HILFSSATZ D11.3 *Sei  $\Gamma$  ein normalisiertes Gitter, dessen Minimalfolgen das Gitter erzeugen. Für jede Minimalfolge  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$  gelten dann die Aussagen:*

- (i) ist  $\varphi \in \text{Aut}(\Gamma)$ , so liegt jeder Koeffizient von  $\varphi_{\mathcal{B}}$  in  $\{-1, 0, 1\}$ ;

<sup>5</sup>Siehe Unterabschnitt 4.3 und insbesondere Theorem B4.17.

<sup>6</sup>Nach Theorem B4.17 trifft dies jedenfalls dann zu, wenn  $n \leq 4$  und  $\Gamma$  kein innen-zentriertes kubisches Gitter ist.

(ii) schreibt man einen Vektor  $v$  der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma)$  als Linearkombination der Vektoren der Basis  $\mathcal{B}$ , so liegen alle Koeffizienten in  $\{-1, 0, 1\}$ .

BEMERKUNGEN D11.4 1) Aussage (i) verschärft Korollar C7.10 für den Fall, in dem  $n = 4$  ist und  $\Gamma$  kein innen-zentriertes kubisches Gitter ist.

2) Aussage (ii) zeigt, dass die Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma)$  auf dem Rand des Parallelepipeds mit den Ecken  $\pm b_1 \pm b_2 \pm \dots \pm b_n$  liegt. Insbesondere hat  $\mathcal{M}(\Gamma)$  daher höchstens  $3^n - 1$  Elemente. Die Minimalmenge erfüllt aber noch viele andere Einschränkungen; da sie auf der Einheitssphäre liegt, kann sie zum Beispiel keine drei Vektoren enthalten, die auf einer Gerade liegen.

3. Schritt: Konstruktion von maximal-endlichen Untergruppen. Wir nehmen an, die Minimalmengen einer Klasse von normalisierten Gittern seien, unter anderem mit Hilfe von Hilfssatz D11.3, analysiert worden; das Ergebnis sei eine Liste von Teilmengen  $S_1, S_2, \dots, S_f$ , die alle Minimalmengen umfassen, die von normalisierten Gittern mit maximaler Automorphismengruppe herrühren. Wir nehmen auch an, die Analyse, die zu den Teilmengen  $S_i$  führt, habe das Skalarprodukt nur wenig berücksichtigt. Jede der gefundenen Mengen  $S = S_i$  besitze aber die folgenden Eigenschaften:

- (I)  $S$  liegt in einem reellen Vektorraum  $V$  mit Basis  $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_n)$ ;
- (II)  $S$  liegt auf dem Rand des Parallelepipeds mit den Ecken  $\pm b_1 \pm b_2 \pm \dots \pm b_n$  und liegt symmetrisch zum Ursprung (d. h.  $-S_i = S_i$ );
- (III)  $S$  enthält die Vektoren  $\pm b_1, \dots, \pm b_n$ .

Sei nun  $S$  eine Teilmenge, welche die Axiome (I), (II) und (III) erfüllt. Wir ordnen ihr eine Symmetriegruppe zu:

$$\text{Sym}(S) = \{L: V \xrightarrow{\sim} V \mid L \text{ linear und } L(S) = S\}. \quad (\text{D11.1})$$

Da jede der linearen Symmetrien  $L \in \text{Sym}(S)$  eine Permutation der endlichen Menge  $S$  induziert und diese eine Basis von  $V$  enthält, ist die Symmetriegruppe endlich. Nach Satz C6.4 gibt es deshalb ein Skalarprodukt  $\langle -, - \rangle_i$  auf  $V$ , das unter der Symmetriegruppe  $\text{Sym}(S)$  invariant ist. Die Menge  $S$  erzeugt eine abelsche Untergruppe  $\Gamma(S)$  von  $V$ ; auf Grund der Axiome (II) und (III) ist diese Untergruppe gerade das von der Basis  $\mathcal{B}$  erzeugte Gitter.

Für jede der zuvor gefundenen Teilmengen  $S_i$  stellen sich dann die folgenden Fragen:

- Ist  $\text{Sym}(S_i)_{\mathcal{B}}$  eine maximal-endliche Gruppe?
- Ist  $S_i$  die Minimalmenge von  $\Gamma = \mathbb{Z} \cdot b_1 + \dots + \mathbb{Z} \cdot b_n$  bezüglich eines geeigneten Skalarproduktes  $\langle -, - \rangle_i$ ?
- Sind alle Skalarprodukte, die unter  $\text{Sym}(S_i)$  invariant sind und  $S_i$  als Minimalmenge haben, positive Vielfache eines einzigen Skalarproduktes?

11.1b *Maximale Untergruppen von  $GL(3, \mathbb{Z})$*

**11.2 Bestimmung der arithmetischen Klassen des  $\mathbb{E}^3$**

**11.3 Maximale Untergruppen von  $GL(4, \mathbb{Z})$**

11.3a *Graphische Teilmengen*

11.3b *Eine Liste von Graphen*

**11.4 Liste der maximalen Untergruppen**

**11.5 Bestimmung der arithmetischen Klassen des  $\mathbb{E}^4$**

## D12 Interessante Gitter

Es gibt einige Scharen von Gittern, die in verschiedenen Bereichen der Mathematik vorkommen, insbesondere in der Theorie der *endlichen Spiegelungsgruppen*.<sup>7</sup> In diesem Abschnitt werden einige dieser Scharen vorgestellt.

### 12.1 Gitter vom Typus $D_n$

Flächenzentrierte kubische Gitter des 3-dimensionalen Raumes sind in Nummer 1.1b erwähnt worden. Die Kristallographen fassen diese Gitter als Obergitter von primitiven kubischen Gitter auf. Bei der Verallgemeinerung auf höherdimensionale Gitter ist es aber oft zweckmässiger, ein flächenzentriertes kubisches Gitter als Teilgitter eines primitiven kubischen Gitters zu interpretieren. Nach Definition kann ein solches Gitter von einer Vektorraumbasis erzeugt werden, deren Vektoren paarweise orthogonal und von gleicher Länge sind. Es ist bequem, zusätzlich zu fordern, dass die Vektoren normiert sind. Die Verallgemeinerung der flächenzentrierten Gitter auf beliebige Dimensionen kann dann nun so ausgesprochen werden:

DEFINITION D12.1 Seien  $\Gamma_n$  ein kubisches Gitter von  $\mathbb{E}^n$  und  $\mathcal{B}_n = (b_1, \dots, b_n)$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters, die aus paarweise orthogonalen Vektoren gleicher Länge besteht. Dann ist die Teilmenge

$$\Gamma'_n = \{x_1 \cdot b_1 + \dots + x_n \cdot b_n \mid x_1 + \dots + x_n \text{ gerade}\} \quad (\text{D12.1})$$

ein Teilgitter von  $\Gamma_n$  und wird Gitter vom *Typus  $D_n$*  genannt.

Aus Gleichung (D12.1) erkennt man unmittelbar, dass die Untergruppe  $\Gamma'_n$  in  $\Gamma_n$  den Index 2 hat.

Das Gitter  $\Gamma'_n$  lässt eine zweite Beschreibung zu, die oft nützlich ist; sie bringt die Norm ins Spiel. Das Quadrat der Norm eines Vektors des kubischen Gitters berechnet sich zu

$$\left\| \sum_j x_j \cdot b_j \right\|^2 = \left( \sum_j x_j^2 \right) \cdot \|b_1\|^2. \quad (\text{D12.2})$$

Da die Zahlen  $x_j$  und  $x_j^2$  die gleiche Parität haben, lässt sich das Gitter  $\Gamma'_n$  also auch so beschreiben:

$$\Gamma'_n = \{v \in \Gamma_n \mid \|v\|^2 \in 2\mathbb{Z} \cdot \|b_1\|^2\}. \quad (\text{D12.3})$$

#### 12.1a Minimalmenge eines Gitters vom Typus $D_n$

Die Gleichungen (D12.2) und (D12.3) machen es leicht, die Minimalmenge eines Gitters vom Typus  $D_n$  zu bestimmen: sie ist

$$\mathcal{M}(\Gamma'_n) = \{\pm b_j \pm b_k \mid 1 \leq j < k \leq n\}. \quad (\text{D12.4})$$

Diese Menge besteht aus  $4 \binom{n}{2} = 2n(n-1)$  Vektoren und spannt den Vektorraum  $\mathbb{E}^n$  auf. Sie erzeugt das Gitter  $\Gamma'_n$ : die Rechnungen

$$\begin{aligned} \sum_j x_j \cdot b_j &= x_1 \cdot (b_1 - b_2) + (x_1 + x_2) \cdot (b_2 - b_3) + \dots \\ &\quad + (x_1 + \dots + x_{n-1}) \cdot (b_{n-1} - b_n) + (x_1 + \dots + x_n) \cdot b_n, \\ 2b_n &= (b_{n-1} + b_n) - (b_{n-1} - b_n) \end{aligned}$$

<sup>7</sup>Siehe etwa [Bou81], [GB85], [Hu90].

zeigen nämlich, dass die Folge

$$\mathcal{B}_1 = (b_1 - b_2, b_2 - b_3, \dots, b_{n-1} - b_n, b_{n-1} + b_n) \quad (\text{D12.5})$$

eine  $\mathbb{Z}$ -Basis des Gitters  $\Gamma'_n$  ist.

*Vergleich der geometrischen Eigenschaften der kubischen Gitter und der Gitter vom Typ  $D$ .* Ein 2-dimensionales kubisches Gitter und sein Teilgitter vom Typ  $D_2$  – anders gesagt, ein quadratisches Netz und das in ihm enthaltene flächenzentrierte quadratische Netz – sind ähnlich, wie Abbildung D.11 vor Augen führt.

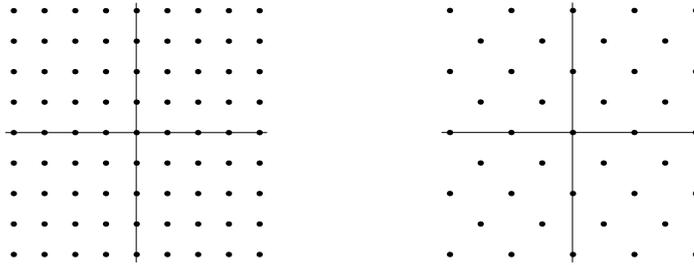


Abbildung D.11: Quadratisches Netz und Netz vom Typus  $D_2$

In höheren Dimensionen aber sind die kubischen Gitter  $\Gamma_n$  und jene vom Typ  $D_n$  nicht ähnlich, wie die Minimalmengen  $\mathcal{M}(\Gamma_n)$  und  $\mathcal{M}(\Gamma'_n)$  klar machen: die erste Menge enthält  $2n$  Elemente, die zweite deren  $2n(n-1)$  und diese Zahlen sind für  $n > 2$  verschieden. Dies schließt aber nicht aus, dass die Automorphismengruppen der beiden Gitter gleich sind.

### 12.1b Automorphismengruppe eines Gitters vom Typus $D_n$

Das folgende Resultat vergleicht die Automorphismengruppe eines kubischen Gitters mit jener des in ihm gelegenen Gitters vom Typus  $D$ .

**SATZ D12.2** *Seien  $\Gamma_n$  ein kubisches Gitter und  $\Gamma'_n$  das in ihm gelegene Gitter vom Typus  $D_n$ . Ist  $n \neq 4$ , so fallen die Gruppen  $\text{Aut}(\Gamma_n)$  und  $\text{Aut}(\Gamma'_n)$  zusammen; für  $n = 4$  aber ist  $\text{Aut}(\Gamma_n)$  eine Untergruppe von  $\text{Aut}(\Gamma'_n)$  mit Index 3.*

*Proof.* Nach Definition besitzt das kubische Gitter  $\Gamma_n$  eine  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}_n = (b_1, \dots, b_n)$ , die aus paarweise orthogonalen, gleichlangen Vektoren besteht. Da die aufgestellten Behauptungen ihre Gültigkeit nicht ändern, wenn das gegebene Gitter durch ein gestrecktes Gitter ersetzt wird, nehmen wir im Folgenden an, die Basisvektoren seien normiert. Dann besteht das Teilgitter  $\Gamma'_n$  gerade aus allen Vektoren  $v$  von  $\Gamma_n$ , deren Norm  $\|v\|^2$  eine gerade Zahl ist. Diese Beschreibung macht es offensichtlich, dass die Inklusion

$$\text{Aut}(\Gamma_n) \subseteq \text{Aut}(\Gamma'_n) \quad (\text{D12.6})$$

für jeden Wert von  $n \geq 2$  richtig ist.

Es fällt leicht nachzuweisen, dass in der Beziehung (D12.6) die Gleichheit für  $n = 2$  und  $n = 3$  gilt. Ist  $n = 2$ , so ist das Netz  $\Gamma'_2$  quadratisch, weshalb die Gruppen

$\text{Aut}(\Gamma_2)$  und  $\text{Aut}(\Gamma'_2)$  isomorph sind, also die gleiche Ordnung haben; dank der Inklusion (D12.6) fallen sie daher zusammen. Ist  $n = 3$ , so betrachten wir die Menge  $\mathcal{S}$  aller Vektoren  $x_1 \cdot b_1 + x_2 \cdot b_2 + x_3 \cdot b_3 \in \Gamma'_3$ , welche die Länge 2 haben. Die Koordinaten eines solchen Vektors liefern eine ganzzahlige Lösung der Gleichung  $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 4$ . Es folgt, dass  $\mathcal{F}$  die Menge  $\{\pm 2 \cdot b_1, \pm 2 \cdot b_2, \pm 2 \cdot b_3\}$  ist. Da jeder Automorphismus des flächenzentrierten kubischen Gitters  $\Gamma'_3$  diese Vektoren permutieren muss, bildet er das primitive kubische Gitter  $\Gamma_3$  auf sich ab, ist also ein Automorphismus von  $\Gamma'_3$ .

Der Beweis, dass in der Beziehung (D12.6) die Gleichheit für jede Dimension  $n > 4$  gilt, ist aufwändiger; er kann auf verschiedene Arten geführt werden. Der direkteste Beweis stützt sich auf den Begriff des *dualen Gitters* von  $\Gamma'_n$ . Der einsichtigste Beweis benützt das geometrische Hilfsmittel des *Coxeter-Graphen* eines Wurzelsystems vom Typus  $D_n$  (siehe Nummer 12.1c). Statt dieser beiden Verfahren erkläre ich hier eine Standard-Methode: bei ihr lässt man eine Gruppe auf einer endlichen Menge operieren und untersucht dann die Grösse einer Bahn und die Ordnung der Standuntergruppe eines Punktes der Bahn.

Sei  $n > 4$ . Die Automorphismengruppe  $H'_n = \text{Aut}(\Gamma'_n)$  operiert auf der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_n)$ ; diese wird in Gleichung (D12.4) beschrieben. Da  $H'_n$  die Automorphismengruppe  $H_n = \text{Aut}(\Gamma_n)$  enthält, und diese auf der Minimalmenge transitiv wirkt, ist die Wirkung der Gruppe  $H'_n$  ebenfalls transitiv. Die Ordnung  $c'_n$  der Gruppe  $H'_n$  lässt sich daher so beschreiben:

$$\begin{aligned} c'_n &= \text{card}(\mathcal{M}(\Gamma'_n)) \cdot \text{card}(\text{St}_{H'_n}(b_{n-1} - b_n)) \\ &= 2n(n-1) \cdot \text{card}(\text{St}_{H'_n}(b_{n-1} - b_n)). \end{aligned} \quad (\text{D12.7})$$

Sei  $\varphi \in \text{St}_{H'_n}(b_{n-1} - b_n)$ . Die orthogonale Abbildung  $\varphi$  hält den Vektor  $b_{n-1} - b_n$  fest – folglich jeden Punkt der Geraden  $\mathbb{R} \cdot (b_{n-1} - b_n)$ , und bildet das Orthogonalkomplement  $(\mathbb{R} \cdot (b_{n-1} - b_n))^\perp$  auf sich ab. Der Durchschnitt dieses Orthogonalkomplementes mit der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_n)$  ist

$$M_1 \cup M_2 \text{ mit } M_1 = \{\pm b_j \pm b_k \mid 1 \leq j < k \leq n-2\} \text{ und } M_2 = \{\pm(b_{n-1} + b_n)\}.$$

Die Vereinigung  $M_1 \cup M_2$  wird vom Automorphismus  $\varphi \in \text{St}_{H'_n}(b_{n-1} - b_n)$  permutiert. Nun stehen aber die Vektoren  $\pm(b_{n-1} + b_n)$  auf jedem Vektor der Menge  $M_1$  senkrecht, während es zu jedem Vektor  $v = \pm b_j \pm b_k$  in  $M_1$  einen Index  $h \in \{1, \dots, n-2\} \setminus \{j, k\}$ , und damit einen Vektor  $w$  in  $M_1$  – etwa  $b_j + b_h$  – gibt, der nicht senkrecht auf  $v$  ist.<sup>8</sup> Es folgt, dass  $\varphi$  die Teilmengen  $M_1$  und  $M_2$  auf sich abbildet. Anderenfalls gäbe es nämlich ein Paar von Vektoren  $\pm v \in M_1$  mit  $\varphi(v) \in M_2$ , die anderen Vektoren aus  $M_1$  aber würden von  $\varphi$  nach  $M_1$  hinein abgebildet, insbesondere die Vektoren  $w$ , die auf  $v$  nicht senkrecht stehen. Dann gälte  $\langle v, w \rangle \neq 0$  und  $\langle \varphi(v), \varphi(w) \rangle = 0$ .

Diese Einsicht lässt sich etwas geometrischer formulieren: das Orthogonalkomplement  $U = (\mathbb{R} \cdot (b_{n-1} - b_n))^\perp$  ist die orthogonale Summe des  $(n-2)$ -dimensionalen Unterraumes  $U_1$ , der von  $M_1$  aufgespannt wird, und der Geraden  $U_2 = \mathbb{R} \cdot (b_{n-1} + b_n)$ .

Die Ordnung der Standuntergruppe  $S = \text{St}_{H'_n}(b_{n-1} - b_n)$  kann nun wie folgt nach oben abgeschätzt werden: ist  $\varphi \in S$ , so bildet  $\varphi$  den Unterraum  $U_1$ , und daher den Durchschnitt  $\Gamma'_n \cap U_1$ , auf sich ab. Dieser Durchschnitt ist ein Gitter vom Typus  $D_{n-2}$ ; für die Einschränkung von  $\varphi$  auf  $U_1$  gibt es also höchstens  $c'_{n-2}$  Möglichkeiten. Das Orthogonalkomplement von  $U_1$  ist eine Ebene; sie wird aufgespannt von den Geraden  $U_2$  und  $(\mathbb{R} \cdot (b_{n-1} - b_n))$ . Es bildet  $\varphi$  jede dieser Geraden auf sich ab und induziert

<sup>8</sup>Hier benützt man die Annahme, dass  $n > 4$  ist.

auf der zweiten die Identität. Somit gibt es für  $\varphi$  höchstens  $2 \cdot c'_{n-2}$  Möglichkeiten. Dank Gleichung (D12.7) gilt daher die Abschätzung

$$c'_n = 2n(n-1) \cdot \text{card}(\text{St}_{H'_n}(b_{n-1} - b_n)) \leq 2n(n-1) \cdot 2 \cdot c'_{n-2}.$$

Falls induktiv schon bewiesen ist, dass die Ordnungen  $c'_{n-2}$  von  $\text{card}(H'_{n-2})$  und  $c_{n-2}$  von  $\text{card}(H_{n-2})$  übereinstimmen, kommt man mir ihr zur Abschätzung

$$c'_n \leq 2^2 \cdot n(n-1) \cdot c'_{n-2} = 2^2 \cdot n(n-1) \cdot 2^{n-2}(n-2)! = 2^n \cdot n! = c_n.$$

Wegen (D12.6) bedeutet sie, dass die Ordnungen  $c'_n$  und  $c_n$  ebenfalls übereinstimmen, weshalb die Gruppen  $H'_n = \text{Aut}(\Gamma'_n)$  und  $H_n = \text{Aut}(\Gamma_n)$  zusammenfallen müssen.

Wir haben eingangs überprüft, dass  $c'_3 = c_3$  ist. Obiges Argument impliziert deshalb, dass die Anzahlen  $c'_n$  und  $c_n$  für jeden ungeraden Index  $n \geq 3$  gleich sind. Dies rechtfertigt einen Teil der Behauptung des Satzes D12.2. Der andere Teil wird in den Nummern 12.1c und 12.1d begründet.  $\square$

### 12.1c Gleichheit der Automorphismengruppen für $n \neq 4$

In dieser und der folgenden Nummer werden die restlichen Teile der Aussage von Satz D12.2 gerechtfertigt. Dazu untersuche ich die geometrischen Eigenschaften der  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}'_n$  des Gitters  $\Gamma'_n$ , die zu Beginn des Unterabschnittes 12.1 gefundenen wurde; es ist

$$\mathcal{B}'_n = (\alpha_1 = b_1 - b_2, \alpha_2 = b_2 - b_3, \dots, \alpha_{n-1} = b_{n-1} - b_n, \alpha_n = b_{n-1} + b_n). \quad (\text{D12.8})$$

Die Vektoren dieser Basis liegen alle in der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_n)$  und haben die Länge  $\sqrt{2}$ .<sup>9</sup> Sie sind paarweise orthogonal, mit Ausnahme der Paare

$$\{\alpha_1, \alpha_2\}, \quad \{\alpha_2, \alpha_3\}, \dots, \{\alpha_{n-2}, \alpha_{n-1}\} \quad \text{und} \quad \{\alpha_{n-2}, \alpha_n\}.$$

Der von diesen Paaren gebildete Winkel hat das Gradmass  $120^\circ$ , denn das Skalarprodukt all dieser Paare ist  $-1$ . Für die weiteren Untersuchungen ist es nun hilfreich, die genannten geometrischen Eigenschaften der Basis durch einen Graphen auszudrücken, den *Coxeter-Graphen*.<sup>10</sup> Die Eckenmenge des Coxeter-Graphen vom Typus  $D_n$  ist die Menge der Vektoren der geordneten  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}'_n$ ; zwei Ecken, also Basisvektoren, sind genau dann durch eine Kante verbunden, falls das Gradmass des von den Basisvektoren gebildeten Winkels  $120^\circ$  beträgt. Für  $n \in \{2, 3, 4, 5\}$  besitzt der Coxeter-Graph vom Typus  $D_n$  daher folgende Gestalt:

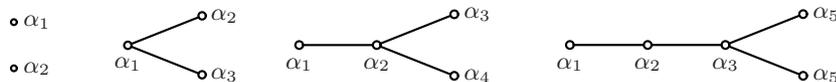


Abbildung D.12: Coxeter-Graphen der  $\mathbb{Z}$ -Basen  $\mathcal{B}'_n$  für  $n \in \{2, 3, 4, 5\}$

Die Strategie des neuen Beweises lässt sich nun so beschreiben. Sei  $\varphi \in H'_n = \text{Aut}(\Gamma'_n)$ . Dann induziert  $\varphi$  eine Permutation der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_n)$ ; weiter bildet  $\varphi$  die  $\mathbb{Z}$ -Basis  $\mathcal{B}'_n$  auf eine  $\mathbb{Z}$ -Basis mit den gleichen geometrischen Eigenschaften,

<sup>9</sup>Es wird weiterhin angenommen, die Vektoren der Basis  $\mathcal{B}'_n$  seien normiert.

<sup>10</sup>Geschichte des Graphen:

also dem gleichen Coxeter-Graphen ab. Die Automorphismen der Untergruppe  $H_n = \text{Aut}(\Gamma_n)$  induzieren alle Permutationen der Orthonormalbasis  $(b_1, \dots, b_n)$  und alle Vorzeichenwechsel. Es bleibt die Frage, ob ein Automorphismus in  $H'_n = \text{Aut}(\Gamma'_n)$  etwas anderes machen kann.

Betrachten wir zuerst ein 3-dimensionales Gitter mit der Basis

$$\mathcal{B}'_3 = (\alpha_1 = b_1 - b_2, \alpha_2 = b_2 - b_3, \alpha_3 = b_2 + b_3).$$

Die Bilder der Vektoren  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  unter einem Automorphismus von  $\Gamma'_3$  sind Linearkombinationen der Form  $\pm b_{j_1} \pm b_{k_1}$  und  $\pm b_{j_2} \pm b_{k_2}$ . Die Gleichung

$$\langle \varphi(\alpha_1), \varphi(\alpha_2) \rangle = \langle \alpha_1, \alpha_2 \rangle = -1 \quad (\text{D12.9})$$

impliziert, dass die Indexmengen  $\{j_1, k_1\}$  und  $\{j_2, k_2\}$  genau einen Index gemeinsam haben. Durch eine Permutation der Indexmenge  $\{1, 2, 3\}$  kann man erreichen, dass 1 dieser gemeinsame Index ist, und dass  $\varphi(\alpha_1)$  die Form  $x_1 \cdot b_1 + x_2 \cdot b_2$  annimmt. Auf Grund der Bedingung (D12.9) muss  $\varphi(\alpha_2)$  dann die Gestalt  $-x_1 \cdot b_1 + y_3 \cdot b_3$  haben. Da  $\varphi(\alpha_2)$  und  $\varphi(\alpha_3)$  orthogonal sind und da der Winkel zwischen  $\varphi(\alpha_1)$  und  $\varphi(\alpha_3)$  das Gradmass  $120^\circ$  hat, muss  $\varphi(\alpha_3) = -x_1 \cdot b_1 - y_3 \cdot b_3$  sein. Die drei Bildvektoren haben also die Form

$$\varphi(\alpha_1) = x_1 \cdot b_1 + x_2 \cdot b_2, \quad \varphi(\alpha_2) = -x_1 \cdot b_1 + y_3 \cdot b_3, \quad \varphi(\alpha_3) = -x_1 \cdot b_1 - y_3 \cdot b_3$$

Nach Anwendung von geeigneten Vorzeichenwechseln stimmt diese Folge mit der Folge  $\mathcal{B}'_3$  überein. Sei nun  $\psi$  der Automorphismus von  $\Gamma_3$ , welcher die oben genannte Permutation und die Vorzeichenwechsel auf  $\mathcal{M}(\Gamma'_3)$  induziert. Das ist die Zusammensetzung  $\psi \circ \varphi$  die Identität, weshalb  $\varphi = \psi^{-1}$  ein Automorphismus des kubischen Gitters  $\Gamma_3$  ist.

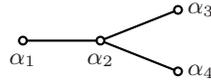
Seien nun  $n \geq 5$  und  $\varphi_1 \in H'_n$  ein Automorphismus des Gitter  $\Gamma'_n$ . Das Ziel ist es, den gegebenen Automorphismus schrittweise durch Automorphismen  $\varphi_2, \dots, \varphi_{n-1}$  zu ersetzen, die alle in der Nebenklasse  $H_n \circ \varphi_1$  liegen, und dann nachzuweisen, dass  $\varphi_{n-1}$  die Identität ist. Nach Definition gibt es dann einen Automorphismus  $\psi \in H_n$  mit  $\psi \circ \varphi_1 = \mathbb{1}$ , weshalb  $\varphi_1 = \psi^{-1}$  zu  $H_n = \text{Aut}(\Gamma_n)$  gehört.

Man findet die Kette der Automorphismen so. Die Bilder  $\varphi(\alpha_1)$  und  $\varphi(\alpha_2)$  der Basisvektoren  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  liegen in der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_n)$ , haben also die Form  $\pm b_{j_1} \pm b_{h_1}$  und  $\pm b_{j_2} \pm b_{h_2}$ . Da ihr Zwischenwinkel das Gradmass  $120^\circ$  hat, müssen die Paare  $\{j_1, h_1\}$  und  $\{j_2, h_2\}$  genau einen Index gemeinsam haben. Indem man den gegebenen Automorphismus  $\varphi_1$  durch einen geeigneten Automorphismus  $\varphi_2 \in H_n \circ \varphi_1$  ersetzt, kann man erreichen, dass dieser gemeinsame Index 2 ist und dass überdies  $\varphi_2$  die Basisvektoren  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  festhält. Was kann  $\varphi_2(\alpha_3)$  sein? Einerseits muss dieser Vektor auf  $\varphi_2(\alpha_1) = \alpha_1 = b_1 - b_2$  senkrecht stehen, ist also entweder gleich  $\pm(b_1 + b_2)$ , oder er hat die Form  $\pm b_{j_3} \pm b_{h_3}$  mit  $j_3 > 2$  und  $h_3 > 2$ . Andererseits bildet der Vektor  $\varphi_2(\alpha_3)$  mit dem Vektor  $\alpha_2 = b_2 - b_3$  einen Winkel von  $120^\circ$ . Also ist der Fall  $\pm(b_1 + b_2)$  ausgeschlossen und  $\varphi_1(\alpha_3)$  hat die Form  $b_3 \pm b_{k_3}$ . Korrigiert man  $\varphi_2$  mit einem geeigneten Automorphismus aus  $H_n$ , kommt man zu einem Automorphismus  $\varphi_3 \in H_n \circ \varphi_1$ , der jeden der drei Basisvektoren  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  und  $\alpha_3$  festhält. So fährt man weiter und findet nach einigen Schritten einen Automorphismus  $\varphi_{n-2}$ , der die Basisvektoren  $\alpha_1, \dots, \alpha_{n-2}$  punktweise festhält. Die Bilder der der restlichen Basisvektoren  $\alpha_{n-1}$  und  $\alpha_n$  müssen dann senkrecht auf den Vektoren  $\alpha_1, \dots, \alpha_{n-3}$  stehen und mit dem Basisvektor  $\alpha_{n-2}$  einen Winkel von  $120^\circ$  bilden. Die einzigen Vektoren der Minimalmenge  $\mathcal{M}(\Gamma'_n)$ , welche diese Eigenschaften erfüllen, sind  $\alpha_{n-1} = b_{n-1} - b_n$

und  $\alpha_n = b_{n-1} + b_n$ . Also hält  $\varphi_{n-2}$  jeden Vektor in  $\mathcal{B}'_n$  fest – ist also die Identität – oder  $\varphi_{n-2}$  vertauscht die letzten Basisvektoren  $\alpha_{n-1}$  und  $\alpha_n$ . Im zweiten Fall korrigieren wir  $\varphi_{n-2}$  mit einem geeigneten Automorphismus aus  $H_n$  und erhalten einen Automorphismus  $\varphi_{n-1} \in H_n \circ \varphi_1$ , der die Identität ist.

### 12.1d Der Ausnahmefall $n = 4$

Für  $n = 4$  hat der Coxeter-Graph die Gestalt



Die Symmetriegruppe dieses Graphen ist eine Diedergruppe der Ordnung 6, während die Symmetriegruppe des Coxeter-Graphen jedes anderen Gitters vom Typus  $D_n$  die Ordnung 2 aufweist. Dies zeigt, dass die Dimension 4 eine Ausnahme ist. Der Graph macht es überdies leicht, einen Automorphismus von  $\Gamma'_4$  zu konstruieren, der kein Automorphismus des kubischen Gitters  $\Gamma_4$  ist.

Die Folge  $\mathcal{B}'_4 = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$  ist eine geordnete Basis des Vektorraumes  $\mathbb{E}^4$ . Daher lässt sich die Zuordnung

$$\bar{\psi}: \alpha_2 \mapsto \alpha_2 \text{ und } \alpha_1 \mapsto \alpha_3 \mapsto \alpha_4 \mapsto \alpha_1$$

zu einer linearen Abbildung  $\psi$  fortsetzen. Diese Abbildung  $\psi$  ist orthogonal, denn die Zuordnung  $\bar{\psi}$  induziert einen Automorphismus des Coxeter-Graphen und dies bedeutet algebraisch gerade, dass  $\psi$  mit dem Skalarprodukt verträglich ist. Aus der Konstruktion des Automorphismus ist ferner klar, dass  $\psi$  die Ordnung 3 hat.

Da die Basis  $\mathcal{B}'_4$  keine Orthonormalbasis ist, fällt es schwer, die Eigenschaften des Automorphismus  $\psi$  zu erkennen. Es macht aber wenig Mühe, die Matrix  $R$  zu finden, welche  $\psi$  bezüglich der Orthonormalbasis  $(b_1, b_2, b_3, b_4)$  ausdrückt:

$$\begin{aligned} 2b_3 &= (b_3 - b_4) + (b_3 + b_4) = \alpha_3 + \alpha_4 \mapsto \alpha_4 + \alpha_1 = b_1 - b_2 + b_3 + b_4, \\ 2b_4 &= -(b_3 - b_4) + (b_3 + b_4) = -\alpha_3 + \alpha_4 \mapsto -\alpha_4 + \alpha_1 = b_1 - b_2 - b_3 - b_4, \\ 2b_2 &= 2(b_2 - b_3) + 2b_3 \mapsto 2(b_2 - b_3) + (b_1 - b_2 + b_3 + b_4) = b_1 + b_2 - b_3 + b_4, \\ 2b_1 &= 2\alpha_1 + 2b_2 \mapsto 2\alpha_3 + (b_1 + b_2 - b_3 + b_4) = b_1 + b_2 + b_3 - b_4 \end{aligned}$$

Die Matrix  $R$ , welche den Automorphismus in der Orthonormalbasis darstellt, ist also

$$R = \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{D12.10})$$

Da  $R$  nicht ganzzahlig ist, ist  $\psi$  kein Automorphismus des kubischen Gitters  $\Gamma_4$ .

Sei  $Q$  die Menge der Automorphismen  $\{\mathbb{1}, \psi, \psi^2\} \circ H_4$ . Da weder  $R$  noch  $R^2 = R^t$  ganzzahlige Matrizen sind, enthält  $Q$  genau  $3 \cdot \text{card}(H_4)$  Automorphismen. Ähnlich wie in Nummer 12.1c kann man nachweisen, dass jeder Automorphismus des Gitters  $\Gamma'_4$  zu  $Q$  gehört. Somit ist  $Q = \text{Aut}(\Gamma'_4)$  und  $H'_4 = \text{Aut}(\Gamma'_4)$  hat die Ordnung

$$c'_4 = 3 \cdot c_4 = 3 \cdot 2^4 \cdot 4! = 2^7 \cdot 3^2 = 1152.$$

### 12.1e Wurzelsystem vom Typus $D_n$

In Nummer 4.2c wurde darauf hingewiesen, dass die Menge

$$\mathcal{R}(\Gamma_n) = \{\pm b_i, \pm b_j \pm b_k \mid 1 \leq i \leq n, 1 \leq j < k \leq n\} = \{v \in \Gamma_n \mid \|v\|^2 = 1 \text{ oder } 2\}$$

das Gitter  $\Gamma_n$  erzeugt und aus Normalenvektoren von Hyperräumen besteht, deren zugeordnete Spiegelungen die Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma_n)$  erzeugen.

Analog erzeugt die Minimalmenge

$$\mathcal{M}(\Gamma'_n) = \{\pm b_j \pm b_k \mid 1 \leq j < k \leq n\} = \{v \in \Gamma_n \mid \|v\|^2 = 1\}$$

das Gitter  $\Gamma'_n$ . Die Spiegelungen an den Hyperräumen  $(\mathbb{R} \cdot \alpha)^\perp$  mit  $\alpha \in \mathcal{M}(\Gamma'_n)$  erzeugen eine Untergruppe  $W(D_n)$  von  $\text{Aut}(\Gamma_n) \subseteq \text{Aut}(\Gamma'_n)$ . Sie wird *Spiegelungsgruppe vom Typus  $D_n$*  genannt und besteht aus allen Abbildungen

$$b_1 \mapsto \pm b_1, \quad b_2 \mapsto \pm b_2, \dots, b_n \mapsto \pm b_n$$

mit einer *geraden* Anzahl von Vorzeichenwechseln und allen Permutationsabbildungen

$$b_1 \mapsto b_{\pi(1)}, \quad b_2 \mapsto b_{\pi(2)}, \dots, b_n \mapsto b_{\pi(n)}.$$

Ihre Ordnung ist daher  $\frac{1}{2} \cdot \text{card}(\text{Aut}(\Gamma_n)) = 2^{n-1} \cdot n!$ . Die Tatsache, dass jeder Automorphismus von  $\Gamma'_n$  die Minimalmenge auf sich abbildet, impliziert weiter, dass die Menge der Spiegelungen von  $W(D_n)$  invariant unter Konjugation mit  $\text{Aut}(\Gamma'_n)$  ist, weshalb  $W(D_n)$  ein Normalteiler von  $\text{Aut}(\Gamma'_n)$  ist.

Obige Überlegungen gelten auch für  $n = 4$ . Sie zeigen, dass die Spiegelungsgruppe  $W(D_4)$  mit  $2^3 \cdot 4! = 8 \cdot 24 = 192$  Elementen in der Obergruppe  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  den Index 6 hat.

**BEMERKUNG D12.3** Die Gruppe  $\text{Aut}(\Gamma'_4)$  ist auch eine Spiegelungsgruppe. Ihren Typus nennt man  $F_4$

## 12.2 Wurzelsystem des Typs $A_\ell$

## 12.3 Wurzelsystem des Typs $E_8$

---

# Literaturverzeichnis

---

## Lehrbücher der Kristallographie

- [So79] L. SOHNCKE: *Entwicklung einer Theorie der Krystalstruktur*; Teubner 1879.
- [Sch91] A. SCHOENFLIES: *Krystalssysteme und Krystalstruktur*; Teubner 1891.
- [Bu47] J. J. BURCKHARDT: *Die Bewegungsgruppen der Kristallographie*; Birkhäuser 1947 (erste Auflage) und 1966 (zweite, neubearbeitete Auflage).
- [Bu77] H. BURZLAFF und H. ZIMMERMANN: *Kristallographie*; Band I: Symmetriehlehre, Georg Thieme, Stuttgart 1977.
- [BBal] H. BROWN, R. BÜLOW, J. NEUBÜSER, H. WONDRATSCHEK und H. ZASSENHAUS: *Crystallographic Groups of Four-dimensional Space*; John Wiley & Sons 1978.
- [Kl82] M. KLEMM: *Symmetrien von Ornamenten und Kristallen*; Springer 1982.
- [Sch80] R. L. E. SCHWARZENBERGER: *N-dimensional crystallography*; Pitman Advanced Publishing Program 1980.
- [Iv90] B. IVERSEN: *Lectures on Crystallographic Groups*; 1990.
- [IT] T. HAHN: *International Tables for Crystallography*; Volume A on space-group symmetry; Fünfte Auflage, Kluwer Academic Publishers 2002.

## Andere Lehrbücher

- [Ar88] M. A. ARMSTRONG: *Groups and Symmetry*; Undergraduate Texts in Mathematics, Springer 1997.
- [Be90] M. BERGER: *Géométrie*; Zwei Bände 1 und 2; Nathan 1990.
- [Bou81] N. BOURBAKI: *Groupes et algèbres de Lie*; Kapitel 4, 5 und 6; Masson 1981.
- [CS88] J. H. CONWAY und N. J. A. SLOANE: *Sphere Packings, Lattices and groups*; Grundlehren der mathematischen Wissenschaften 290, Springer 1988.
- [CS04] J. H. CONWAY und D. A. SMITH: *On quaternions and octonions: their geometry, arithmetic, and symmetry*; Cambridge University Press 2004.
- [Cr76] K. CRITCHLOW: *Islamic patterns*; Thames and Hudson 1976 (reprinted 1989).
- [GB85] L. C. GROVE und C. T. BENSON: *Finite reflection groups*; Zweite Auflage, Springer 1985.

- [GS87] B. N. GRÜNBAUM und G. C. SHEPHARD: *Tilings and patterns*; W.H. Freeman and Company 1987.
- [Ha69] F. HARARY: *Graph theory*; Addison Wesley 1969 .
- [HC32] H. HILBERT und S. COHN-VOSSEN: *Anschauliche Geometrie*; Springer 1932 (nachgedruckt von der Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt 1972).
- [Hu72] J. E. HUMPHREYS: *Introduction to Lie algebras and representations theory*; Springer 1972.
- [Hu90] J. E. HUMPHREYS: *Reflection groups and Coxeter groups*; Cambridge Studies in advanced Mathematics 29, Cambridge University Press 1990.
- [Hu19] A. HURWITZ: *Zahlentheorie der Quaternionen*; Julius Springer 1919.
- [Jo01] D. L. JOHNSON: *Symmetries*; Springer Undergraduate Mathematics Series, Springer 1972.
- [Ku91] E. KUNZ: *Algebra*; Aufbaukurs Mathematik, Vieweg 1991.
- [Ma82] G. E. MARTIN: *Transformation geometry*; Springer 1982.
- [NST94] J. M. NEUMANN, G. A. STOY und E. C. THOMPSON: *Groups and geometry*; Oxford University Press 1994.
- [Sp27] A. SPEISER: *Die Theorie der Gruppen endlicher Ordnung*; Springer 1927 und Birkhäuser 1956.
- [St77] G. STRÜBEL: *Mineralogie*; Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart 1977.
- [Th97] W. P. THURSTON: *Three-dimensional geometry and topology*; volume 1; Princeton University Press 1997.

## Abhandlungen

- [AuCo] L. AUSLANDER und M. COOK: *An algebraic classification of the three-dimensional crystallographic groups*; Adv. Appl. Math. , **12** (1991), 1–21.
- [Bi10] L. BIEBERBACH: *Über die Bewegungsgruppen des  $n$ -dimensionalen Euklidischen Raumes mit einem endlichen Fundamentalbereich*; Nachr. Königl. Ges. Wissenschaften Göttingen, Math. Phys. Klasse (1910), 75–84.
- [Bi11a] L. BIEBERBACH: *Über die Bewegungsgruppen der Euklidischen Räume, Teil I*; Math. Annalen, **70** (1911), 297–336.
- [Bi11b] L. BIEBERBACH: *Über einen Satz des Herrn C. Jordan in der Theorie der endlichen Gruppen linearer Substitutionen*; Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Berlin, Phys. Math. Kl. (1911), 231–240.
- [Bi12] L. BIEBERBACH: *Über die Bewegungsgruppen der Euklidischen Räume, Teil II*; Math. Annalen, **72** (1912), 400–412.

- [Br50] A. BRAVAIS: *Mémoire sur les systèmes formés par les points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace*; J. École Polytechnique, **19** (1850), 1–128. Übersetzt als Nummer 90 in der Reihe *Ostwald's Klassiker der exakten Wissenschaften*, 1897.
- [BNWa] R. BÜLOW, J. NEUBÜSER und H. WONDRATSCHEK: *On crystallography in higher dimensions. II.Procedure of computation in  $R_4$* ; Acta Cryst. **A27** (1971), 520–523.
- [BNWb] R. BÜLOW, J. NEUBÜSER und H. WONDRATSCHEK: *On crystallography in higher dimensions. III.Results in  $R_4$* ; Acta Cryst. **A27** (1971), 523–535.
- [Bue67] R. BÜLOW; Diplomarbeit, Math. Seminar, Univ. Kiel (1967)
- [Bu30] J. J. BURCKHARDT: *Bemerkungen zur arithmetischen Berechnung der Bewegungsgruppen*; Comment. Math. Helv. **2** (1930), 91–98.
- [Bu34] J. J. BURCKHARDT: *Zur Theorie der Bewegungsgruppen*; Comment. Math. Helv. **6** (1934), 159–184.
- [Bu36] J. J. BURCKHARDT: *Bewegungsgruppen in mehrdimensionalen Räumen*; Comment. Math. Helv. **9** (1936/7), 284–302.
- [Bu85] P. BUSER: *A geometric proof of Bieberbachs theorems on crystallographic groups*; L'enseignement Mathématique **31**(1985),137–145.
- [CFHT] J. H. CONWAY, O. DELGADO FRIEDRICHS, D. H. HUSON und W. P. THURSTON: *On Three-Dimensional Space Groups*; Beitr. Alg. Geometrie **42** (2001), 475–507.
- [Da65] E. C. DADE: *The maximal finite groups of  $4 \times 4$  integral matrices*; Illinois J. Math. **9** (1965), 99–122.
- [Fe92] E. S. FEDOROV: *Zusammenstellung der kristallographischen Resultate des Herrn Schoenflies und der meinigen*; Zs. f. Kristallogr. **20** (1892), 25–75.
- [Fr11a] G. FROBENIUS: *Über den von L. Bieberbach gefundenen Beweis eines Satzes von C. Jordan*; Sitzungsber. K. Preuss. Akad. Wiss. Berlin (1911), 241–248; Ges. Abh. Bd. 3, pp. 493–500.
- [Fr11b] G. FROBENIUS: *Über die unzerlegbaren diskreten Bewegungsgruppen*; Sitzungsber. K. Preuss. Akad. Wiss. Berlin (1911), 654–665; Ges. Abh. Bd. 3, pp. 507–518.
- [Fr11c] G. FROBENIUS: *Gruppentheoretische Ableitung der 32 Kristallklassen*; Sitzungsber. K. Preuss. Akad. Wiss. Berlin (1911), 681–691; Ges. Abh. Bd. 3, pp. 519–529.
- [He49] C. HERMANN: *Kristallographie in Räumen beliebiger Dimensionszahl*; Acta Crystallographica **2** (1949), 139–145.
- [He52] C. HERMANN: *Translationsgruppen in  $n$  Dimensionen*; in *Zur Struktur und Materie der Festkörper*; H. O'Daniel (Herausgeber), Springer-Verlag 1952, pp. 24–33.

- [Hi00] D. HILBERT: *Mathematische Probleme*; Ges. Abh. Bd. 3, pp. 290–329.
- [Jo68] C. JORDAN: *Mémoire sur les groupes de mouvement*; Ann. di Mat. **2** (1868/9), 322–345; Œuvres, vol. IV, pp. 231–302.
- [Jo80] C. JORDAN: *Mémoire sur l'équivalence des formes*; J. Éc. Pol. **48** (1880), 112–150; Œuvres, vol. III, pp. 421–460.
- [Li86] R. LIPSCHITZ: *Untersuchungen über die Summen von Quadraten*; Bonn 1886.
- [MU32] S. MAZUR und S. ULAM: *Sur les transformations isométriques d'espaces vectoriels normés*; Comp. Rend. Paris **194** (1932), 946–948.
- [Ma75] G. MAXWELL: *The crystallography of Coxeter groups*; J. Algebra **35** (1975), 159–177.
- [Mi76] J. MILNOR: *Hilbert's problem 18: on crystallographic groups, fundamental domains, and on sphere packing*; in *Developments Arising from Hilbert Problems*, (Herausgeber: Felix Browder); American Mathematical Society 1976.
- [Mi87a] H. MINKOWSKI: *Über den arithmetischen Begriff der Äquivalenz und über die endlichen Gruppen linearer ganzzahliger Substitutionen*; Crelle J. **100** (1887), 449–458; Ges. Abhandlungen, Band 1, pp. 203–211.
- [Mi87b] H. MINKOWSKI: *Zur Theorie der positiven quadratischen Formen*; Crelle J. **101** (1905), 196–202; Ges. Abhandlungen, Band 1, pp. 212–218.
- [Mi05] H. MINKOWSKI: *Discontinuitätsbereiche für arithmetische Äquivalenz*; Crelle J. **129** (1905), 220–274; Ges. Abhandlungen, Band 2, pp. 53–100.
- [NWB] J. NEUBÜSER, H. WONDRAUSCHEK und R. BÜLOW: *On crystallography in higher dimensions. I. General definitions*; Acta Cryst. **A27** (1971), 517–520.
- [Ni24] P. NIGGLI: *Die Flächensymmetrien ebener Diskontinuen*; Z. f. Kristallogr. **60** (1924), 283–298.
- [Pe77] F. PÉCAUT: *Pavés et bulles – éléments de cristallographie mathématique*; Publication de l'Association des Professeurs de Mathématiques de l'Enseignement Public, N° **23**, 1977.
- [Pl96] W. PLESKEN: *Kristallographische Gruppen*; in *Group Theory, Algebra, Number Theory* (ed. H. G. Zimmer); Walter de Gruyter & Co. 1996, pp. 75–96.
- [PP75] W. PLESKEN und M. POHST: *On maximal finite irreducible subgroups of  $GL(n, \mathbb{Z})$ ; I. The five and seven dimensional cases*; Math. Comp. **31** (1975), 536–551.
- [PS00] W. PLESKEN und T. SCHULZ: *Counting crystallographic groups in low dimensions*; Exp. Math. **9** (2000), 407–411.
- [Sch78] D. SCHATTSCHNEIDER: *The plane symmetry groups: their recognition and notation*; Amer. Math. Monthly **95** (1978), 439–450.
- [Sch74] R. L. E. SCHWARZENBERGER: *Crystallography in spaces of arbitrary dimension*; Proc. Camb. Phil. Soc. **76** (1974), 23–32.

- [Sch76] R. L. E. SCHWARZENBERGER: *The use of directed graphs in the enumeration of orthogonal space groups*; Acta Crystallographica. **A32** (1976), 356–359.
- [Sch82] R. L. E. SCHWARZENBERGER: *Graphical representation of  $n$ -dimensional space groups*; Proc. London Math. Soc. (3), **44** (1982), 244–266.
- [Sou03] B. SOUVIGNIER: *Enantiomorphism of crystallographic groups in higher dimensions with results in dimensions up to 6*; Acta Crystallographica (Section A), **59** (2003), 210–220.
- [St03] R. STREBEL: *Burckhardtsche Bestimmung der Raumgruppen. I*; Elem. Math. **58** (2003), 141–155.
- [St04] R. STREBEL: *Burckhardtsche Bestimmung der Raumgruppen. II*; Elem. Math. **59** (2004), 1–18.
- [St34] B. STRESSMANN: *Periodische Minimalflächen*; Math. Z. **38** (1934), 417–442.
- [Za38a] H. ZASSENHAUS: *Neuer Beweis der Endlichkeit der Klassenzahl bei unimodularer Äquivalenz endlicher ganzzahliger Substitutionsgruppen*; Abh. math. Seminar Uni. Hamburg. **12** (1938), 276–288.
- [Za38b] H. ZASSENHAUS: *Beweis eines Satzes über diskrete Gruppen*; Abh. math. Seminar Uni. Hamburg. **12** (1938), 289–312.
- [Za48] H. ZASSENHAUS: *Über einen Algorithmus zur Bestimmung der Raumgruppen*; Comment. Math. Helv. **21** (1948), 117–141.