Kristallografische groepen

Bernd Souvignier

voorjaar 2009

Inhoud

Het onderwerp van deze cursus *Kristallografische groepen* zijn in eerste instantie de groepen die in de behandeling van structuren zo als kristallen een rol spelen. Terwijl de echte kristallografie op het raakvlak van de scheikunde en de natuurkunde ligt, zullen wij het onderwerp vanuit de wiskundige invalshoek bekijken.

Het opmerkelijke van kristallen tegenover amorfe structuren is, dat de structuur op macroscopische schaal opgebouwd is uit periodieke herhaling van dezelfde patronen op moleculaire schaal. Na aanleiding hiervan zullen we kijken naar structuren die door discrete en periodieke herhaling van een elementair patroon voortgebracht zijn. We zullen straks de zuivere definities van *discreet* en *periodiek* geven.

In tegenstelling tot echte kristallen zullen we aannemen, dat onze structuren oneindig zijn. Dit is niet zo'n erg slechte benadering, want tussen de moleculaire patronen en de kristallen zit vaak een behoorlijk grote factor van 10^{10}.

Natuurlijk zijn de belangrijkste toepassingen van kristallografische groepen in de 3-dimensionale ruimte te vinden, maar ook 2-dimensionale structuren spelen een belangrijke rol. Aan de andere kant hebben zekere structuren handige beschrijving in hoger-dimensionale ruimtes, bijvoorbeeld krijgt men het beroemde *Penrose pattern* als geschikte projectie van 'kubussen' in de 5-dimensionale ruimte.

We zullen daarom de algemene begrippen, methoden en algoritmen voor structuren in de n-dimensionale ruimte ontwikkelen, maar vooral voorbeelden in de 2- en 3-dimensionale ruimte bekijken.

Literatuur

- T. Hahn (ed.), *International Tables for Crystallography, Vol. A,* 5^{th} *ed.*, Springer, Dordrecht, 2005.
- J.J. Burckhardt, *Die Bewegungsgruppen der Kristallographie,* 2^{nd} *ed.*, Birkhäuser, Basel, 1966.
- T. Janssen, *Crystallographic Groups*, North-Holland, Amsterdam, 1973.
- H. Zassenhaus, *Über einen Algorithmus zur Bestimmung der Raumgruppen*, Comm. Math. Helv. 21, pp. 117-141, 1948.
- B. Souvignier, *Enantiomorphism of crystallographic groups in higher dimensions with results in dimensions up to 6*, Acta Cryst. A59, pp. 210-220, 2003.
- J. Opgenorth, W. Plesken, T. Schulz, *Crystallographic Algorithms and Tables*, Acta Cryst. A54, pp. 517-531, 1998.

Hoofdstuk 1

Introductie

1.1 Periodieke verzamelingen

We beginnen met verzamelingen van punten in de n-dimensionale ruimte $\mathbb{R}^n$. Later kunnen we de punten door andere objecten vervangen, bijvoorbeeld door ornamenten of moleculen.

Om te beginnen willen we beschrijven wat het betekent dat een verzameling van punten aan de ene kant discreet in $\mathbb{R}^n$ ligt, maar aan de andere kant ook in zekere zin de volledige ruimte vult. Vervolgens definiëren we wanneer we zo'n verzameling periodiek noemen.

In het vervolg is $S \subseteq \mathbb{R}^n$ altijd een verzameling van punten in $\mathbb{R}^n$.

1.1 Definitie Een puntsverzameling $S \subseteq \mathbb{R}^n$ heet *discreet* als er een $0 < r \in \mathbb{R}$ bestaat zo dat voor alle $x \in S$ geldt dat $B(x, r) \cap S = \{x\}$.
(Met $B(x, r)$ noteren we de open bol van straal r rond x.)

Equivalent met deze definitie is dat de punten van de verzameling onderling minimaal afstand $2r$ hebben, dus dat $\|x - y\| \geq 2r$ voor alle $x, y \in S$.

In het bijzonder zijn convergente rijen in een discrete verzameling altijd bijna constant (constant vanaf een zekere n_0).

1.2 Definitie Een puntsverzameling $S \subseteq \mathbb{R}^n$ heet *relatief dicht* in $\mathbb{R}^n$ als er een $0 < R \in \mathbb{R}$ bestaat zo dat $B(x, R) \cap S \neq \emptyset$ voor alle $x \in \mathbb{R}^n$.

1.3 Definitie Een puntsverzameling $S \subseteq \mathbb{R}^n$ heet een *Delone verzameling* als S discreet en relatief dicht in $\mathbb{R}^n$ is.

Boris Nikolaevich Delone (1890 - 1980) is een van de cruciale figuren in de school van kristallografen in de Sovjet-Unie. Soms (vooral in Franstalige literatuur) wordt zijn naam ook *Delaunay* geschreven, maar let op, er is ook een Charles Delaunay (1816-1872) met wie hij niets te maken heeft.

Het begrip van Delone verzameling zal later handig zijn als we niet alleen maar periodieke structuren zo als kristallen maar ook aperiodieke structuren zo als quasikristallen (bijvoorbeeld de punten van een Penrose pattern) bekijken.

Om nu het begrip *periodiciteit* nader toe te lichten, beginnen we even met de intuïtieve voorstelling. Het idee is, dat we door herhaalde verschuivingen uit een eindig deel van het patroon de volledige structuur kunnen produceren. We zullen daarom eens naar de verschuivingen (of *translaties*) kijken.

1.4 Definitie Zij $S \subseteq \mathbb{R}^n$ een Delone verzameling. Dan heet

$$T(S) := \{v \in \mathbb{R}^n \mid v + S = \{v + s \mid s \in S\} = S\}$$

het systeem van translaties van S.

Het zal duidelijk zijn dat $T(S)$ een ondergroep van de optelgroep $(\mathbb{R}^n, +)$ van de n-dimensionale vectorruimte is:

(i) $0 \in T(S)$.

(ii) Voor $v \in T(S)$ geldt dat $-v + S = -v + (v + S) = (-v + v) + S = S$, dus is ook $-v \in T(S)$.

(iii) Uit $v, w \in T(S)$ volgt $v + w + S = v + (w + S) = v + S = S$, dus is $T(S)$ afgesloten ten opzichte van de optelling.

Maar we kunnen ook nog een deel van de scalaire vermenigvuldiging op $\mathbb{R}^n$ redden, want voor scalairen $a \in \mathbb{Z}$ geldt natuurlijk:

$$v \in T(S) \Rightarrow a \cdot v = \underbrace{v + \ldots + v}_{a} \in T(S).$$

1.5 Definitie Een ondergroep $U \leq V$ van een K-vectorruimte V die afgesloten is ten opzichte van scalaire vermenigvuldiging met elementen van een deelring $R \subseteq K$ heet een *R-module* in V.

We hebben dus gezien:

1.6 Propositie *Voor een Delone verzameling is het systeem $T(S)$ van translaties van S een $\mathbb{Z}$-module in $\mathbb{R}^n$.*

Voordat we nu kunnen definiëren wat een periodieke verzameling is, hebben we nog een verder begrip nodig, namelijk het concept van een *rooster*.

1.7 Definitie Een ondergroep $L \leq (\mathbb{R}^n, +)$ van de optelgroep van de vectorruimte $\mathbb{R}^n$ heet een *(vol) rooster* als er een ($\mathbb{R}$-)basis $B = (b_1, \ldots, b_n)$ van $\mathbb{R}^n$ bestaat zo dat $L = \{\sum_{i=1}^n a_i b_i \mid a_i \in \mathbb{Z}\}$.

In dit geval heet B een *roosterbasis* van L.

Een rooster is dus in het bijzonder een $\mathbb{Z}$-module en bestaat juist uit de geheeltallige lineaire combinaties van een onafhankelijk stelsel vectoren.

In het algemeen zullen we het attribuut *vol* onderdrukken, omdat we het meestal met roosters te maken hebben die door een basis van de volledige vectorruimte $\mathbb{R}^n$ opgespannen zijn. Maar in sommige situaties is het ook handig om naar roosters in een echte deelruimte $\mathbb{R}^m \cong U \lneqq \mathbb{R}^n$ te kijken. We zullen er in deze gevallen expliciet op wijzen.

1.8 Opmerking Er zijn ook situaties waar men naar het $\mathbb{Z}$-opspansel van een stelsel vectoren kijkt die over $\mathbb{Z}$ onafhankelijk zijn, maar afhankelijk over $\mathbb{R}$. We geven hier twee voorbeelden van:

(1) Een eenvoudig 1-dimensionaal voorbeeld is het stelsel $(1, \sqrt{2})$ in $\mathbb{R}^1$. Omdat $\sqrt{2}$ geen rationaal getal is, zijn deze twee elementen onafhankelijk over $\mathbb{Z}$. Aan de andere kant laat zich $\sqrt{2}$ willekeurig nauwkeurig door rationale getallen benaderen (bijvoorbeeld door kettingbreuken), daarom liggen de getallen $a \cdot 1 + b \cdot \sqrt{2}$ dicht in $\mathbb{R}$. Dit is dus een voorbeeld van een $\mathbb{Z}$-module die niet discreet is.

    De verzameling $\mathbb{Z}[\sqrt{2}] := \{a + b\sqrt{2} \mid a, b \in \mathbb{Z}\}$ speelt in de getaltheorie een belangrijke rol, namelijk als ring van gehele getallen in het lichaam $\mathbb{Q}(\sqrt{2})$. Vaak worden 1 en $\sqrt{2}$ met basisvectoren van $\mathbb{R}^2$ geïdentificeerd, en zo wordt $\mathbb{Z}[\sqrt{2}]$ een 2-dimensionaal discreet rooster.

(2) Het $\mathbb{Z}$-opspansel van de hoekpunten van een regelmatige vijfhoek in $\mathbb{R}^2$ geeft een $\mathbb{Z}$-module met 4 over $\mathbb{Z}$ onafhankelijke vectoren. Deze $\mathbb{Z}$-module ligt dicht in $\mathbb{R}^2$ maar laat zich als 4-dimensionaal rooster interpreteren.

    Door slechts bepaalde punten van dit rooster naar een 2-dimensionale deelruimte te projecteren kan men een Delone verzameling construeren, te weten een Penrose pattern.

Natuurlijk hebben we het begrip van een rooster ingevoerd omdat de translaties van een Delone verzameling een rooster vormen. Maar om dit te bewijzen hebben we nog een belangrijke uitspraak over ondergroepen van roosters nodig.

1.9 Lemma *Zij $L \subseteq \mathbb{R}^n$ een (vol) rooster en zij $L' \leq L$ een $\mathbb{Z}$-module bevat in L. Dan is er een roosterbasis $B = (b_1, \ldots, b_n)$ van L en getallen $d_1, \ldots, d_r \in \mathbb{N}$ met $d_i | d_{i+1}$ zo dat $B' = (d_1 b_1, \ldots, d_r b_r)$ een roosterbasis van L' is. Men noemt de bases B en B' ook* compatiebele bases *voor L en L'.*

In het bijzonder geldt voor $[L : L'] < \infty$ dat L' een vol rooster in $\mathbb{R}^n$ is.

Bewijs: We laten eerst zien dat L' eindig voortgebracht is: Zij $U \leq \mathbb{R}^n$ de deelruimte opgespannen door de elementen uit L', $\dim U = r$. Kies lineair onafhankelijke elementen $(v_1, \ldots, v_r)$ in L', dan is het rooster L'' opgespannen door de v_i een deelmodule van L'. We beweren dat $[L' : L''] < \infty$. Zij hiervoor $C := \{\sum_{i=1}^r c_i v_i \mid 0 \leq c_i < 1\}$ de elementaire cel van L''. Dan is $[L' : L'']$ het aantal punten van L' die binnen C liggen en omdat L' een deelmodule van een rooster is, is dit aantal eindig.

De rest van het bewijs geven we in de vorm van een algoritme. We schrijven voortbrengers van L' als coördinaatvectoren met betrekking tot de roosterbasis van L. Deze coördinaatvectoren schrijven we als kolommen in een matrix $A \in \mathbb{Z}^{n \times m}$ (als L' door m elementen is voortgebracht).

Met behulp van elementaire (geheeltallige) rij- en kolomoperaties brengen we A op diagonaalvorm, waarbij de diagonaalelementen delers van elkaar moeten zijn, we bepalen dus matrices $P \in GL_n(\mathbb{Z})$, $Q \in GL_m(\mathbb{Z})$ zo dat

$$P \cdot A \cdot Q = D = \begin{pmatrix} d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_n \end{pmatrix} \text{ met } d_i \mid d_{i+1}.$$

Hierbij is het toegestaan dat D rechts of onder door nullen aangevuld wordt (afhankelijk of $m > n$ of $m < n$). De diagonaalmatrix D heet de *Smith normaal vorm* van A.

Het idee voor het bepalen van de Smith normaal vorm is heel simpel: Met elementaire rij- en kolomoperaties kunnen we ervoor zorgen, dat het element A_{11} vervangen wordt door $d_1 = \mathrm{ggd}(A_{ij} \mid 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m)$. Vervolgens kunnen we met behulp van d_1 de rest van de eerste rij en kolom tot 0 transformeren (vegen). De resterende $(n-1) \times (m-1)$-matrix (vanaf rij- en kolomindex 2) heeft nu elementen die alle veelvouden zijn van d_1 en door iteratie vinden we de gewenste diagonaalvorm D.

De matrix Q werkt op de kolommen van A en bevat dus de transformatie van de voortbrengers van L', de matrix van P werkt op de rijen van A en bevat dus de basistransformatie voor de basis van L. Wegens $P^{-1}D = AQ$ zijn de kolommen van P^{-1} en van AQ compatibele bases voor L en L'. In feite is het niet eens nodig, de matrix P te inverteren, want de basis van L wordt verkregen door de i-de kolom van AQ door d_i te delen. □

Merk op dat we P en Q tijdens het transformeren van A bijna cadeau krijgen door de rijoperaties en kolomoperaties apart op twee eenheidsmatrices toe te passen, de rijoperaties geven dan P en de kolomoperaties geven Q.

1.10 Voorbeeld We willen compatibele bases voor het standaardrooster $\mathbb{Z}^3$ en het deelrooster $L' = \langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \rangle$ bepalen.

We schrijven de eenheidsmatrices voor de rij- en kolomoperaties links en rechts onder de matrix A en passen de operaties simultaan op A en op deze matrices toe.

$$\begin{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} & \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

eerste kolom van tweede en derde kolom aftrekken

$$\longrightarrow \begin{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -2 \\ 1 & -2 & 0 \end{pmatrix} & \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & & \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

eerste rij van tweede en derde rij aftrekken

$$\longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & -2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

tweede en derde kolom met -1 vermenigvuldigen en verruilen

$$\longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

We hebben dus als basis voor L' de kolommen van

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

dus zijn $B = (b_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, b_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, b_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix})$ en $B' = (b_1, 2b_2, 2b_3)$ compatibele bases voor $\mathbb{Z}^3$ en L'.

1.11 Propositie *Zij S een Delone verzameling met systeem van translaties $T(S)$ en zij $U \leq \mathbb{R}^n$ het $\mathbb{R}$-opspansel van $T(S)$. Dan is $T(S)$ een vol rooster in U.*

Bewijs: We gaan er eerst van uit dat $\dim_{\mathbb{R}}(U) = n$. We weten al dat $T(S)$ een $\mathbb{Z}$-module is. We zullen tegelijkertijd bewijzen dat $T(S)$ door precies n elementen voortgebracht is.

Zij $B = (b_1, \ldots, b_n)$ een $\mathbb{R}$-onafhankelijk stelsel in $T(S)$ en zij L het $\mathbb{Z}$-opspansel van B. Dan noemen we $C := \{\sum_{i=1}^n c_i b_i \mid 0 \leq c_i < 1\}$ de elementaire cel opgespannen door B. Merk op dat C een systeem van representanten voor de restklassenruimte $\mathbb{R}^n/L$ is. Uit de Analyse weten we dat $vol(C) = vol(\mathbb{R}^n/L) = \det(\tilde{B})$, waarbij we met $\tilde{B}$ de matrix met de vectoren b_i als kolommen noteren.

Als nu $L \neq T(S)$, dan is er een vector $b \in T(S) \setminus L$. Zij L' het $\mathbb{Z}$-opspansel van $B \cup \{b\}$. De index $[L' : L]$ van L in L' is het aantal punten van L' die in C liggen. Omdat S discreet is, moet deze index eindig zijn, zeg k. Door nu compatiebele bases voor L' en L te bepalen, zien we dat L' ook door n elementen voortgebracht is. Verder weten we dat $vol(\mathbb{R}^n/L') = \frac{1}{k} vol(\mathbb{R}^n/L)$.

Als nog steeds $L' \neq T(S)$, kunnen we dezelfde constructie herhalen. Omdat het volume van de eenheidscel in iedere stap minstens een factor 2 kleiner wordt, eindigen we na eindig veel stappen met een rooster L dat gelijk is aan $T(S)$.

Als $\dim_{\mathbb{R}}(U) = m < n$ gaat het bewijs bijna op dezelfde manier door: We moeten in dit geval alleen maar een vaste $\mathbb{R}$-basis voor $T(S)$ kiezen en vervolgens alle vectoren als coördinaatvectoren met betrekking tot deze basis schrijven. □

1.12 Definitie Zij $S \subseteq \mathbb{R}^n$ een Delone verzameling.

(i) We noemen S *periodiek* als $T(S)$ een vol rooster in $\mathbb{R}^n$ is.

(ii) Als $\{0\} \neq T(S)$ een rooster in een echte deelruimte van $\mathbb{R}^n$ is, noemen we S *subperiodiek*.

(iii) In het geval $T(S) = \{0\}$ heet S *aperiodiek*.

Voor een discrete verzameling $S \subseteq \mathbb{R}^n$ die periodiek is, volgt automatisch dat S relatief dicht ligt en dus een Delone verzameling is. Voor subperiodieke verzamelingen geldt dit niet, en we zullen soms ook discrete subperiodieke verzamelingen bekijken die alleen maar relatief dicht in een echte deelverzameling van $\mathbb{R}^n$ liggen.

1.2 Equivalentie op basis van symmetrie

We hebben gezien dat de translaties die een periodieke verzameling invariant laten een rooster vormen. Natuurlijk zijn er oneindig veel verschillende roosters, maar aan de andere kant delen veel roosters belangrijke eigenschappen die vooral op hun symmetrie gebaseerd zijn.

We zullen nu aan de hand van voorbeelden in $\mathbb{R}^2$ nagaan, hoe we op basis van hun symmetrieeigenschappen roosters in equivalentieklassen kunnen samenvatten. Als we over typen van roosters in $\mathbb{R}^2$ nadenken, komen we snel naar de volgende lijst:

(1) Het vierkantsrooster L_V: Dit heeft een roosterbasis met vectoren b_1 en b_2 die loodrecht op elkaar staan en dezelfde lengte hebben.

(2) Het hexagonale rooster L_H: Dit heeft een roosterbasis met vectoren b_1 en b_2 die dezelfde lengte hebben en een hoek van $\frac{2\pi}{6} = 60°$ maken.

(3) Het rechthoekrooster L_R: Dit heeft een roosterbasis met vectoren b_1 en b_2 die loodrecht op elkaar staan maar niet dezelfde lengte hebben.

(4) Het ruitrooster L_D (Engels: ruit = *diamond* of *rhombus*): Dit heeft een roosterbasis met vectoren b_1 en b_2 die dezelfde lengte hebben en een hoek insluiten die niet $\frac{2\pi}{6}$, $\frac{2\pi}{4}$ of $\frac{2\pi}{3}$ is.

(5) Het parallellogramrooster L_P: Iedere roosterbasis bevat twee vectoren b_1 en b_2 die verschillend lang zijn en geen rechte hoek insluiten.

Aan de hand van deze lijst kunnen we een aantal belangrijke opmerkingen kwijt:

- Omdat een rooster discreet is, bevat het een (of meerdere) vectoren $\neq 0$ van minimale lengte. Door eventueel een schaling en een rotatie toe te passen kunnen we ervoor zorgen dat de vector $(1, 0)^{tr}$ een vector van minimale lengte is.

- Met de hierboven genoemde normering zijn het vierkantsrooster en het hexagonale rooster eenduidig bepaald.

- Het vierkantsrooster is een grensgeval van het rechthoekrooster en van het ruitrooster.

- Het hexagonale rooster is een grensgeval van het ruitrooster.

- Het rechthoekrooster en het ruitrooster zijn grensgevallen van het parallellogramrooster.

- Het rechthoekrooster bevat een ruitrooster als deelrooster van index 2: Als $b_1 \cdot b_2 = 0$, dan hebben $b_1 + b_2$ en $b_1 - b_2$ dezelfde lengte. De matrix van de basistransformatie heeft determinant ± 2, daarom is de index inderdaad 2.

- Het ruitrooster bevat een rechthoekrooster als deelrooster van index 2: Als $\|b_1\| = \|b_2\|$, dan is $(b_1 + b_2) \cdot (b_1 - b_2) = 0$.

- Een rooster L' dat een rooster L als deelrooster bevat wordt in de kristallografie een *centrering* genoemd. Het idee achter deze terminologie is, dat de punten van L' uit die van L worden verkregen door inwendige punten van de eenheidscel toe te voegen, i.h.b. het middelpunt (en natuurlijk de translaties met L van dit punt).

- Het ruitrooster heet in de kristallografie daarom typisch het *gecentreerde rechthoekrooster*.

We hebben dus de volgende *hierarchie* van roosters, waarbij een rooster verder boven een speciaal geval van een lager rooster is:

$$\begin{tikzcd}
\text{vierkantsrooster} & L_V \arrow[d, dash] \arrow[drr, dash] & & L_H \arrow[d, dash] & \text{hexagonaal rooster} \\
\text{rechthoekrooster} & L_R \arrow[dr, dash] & & L_D \arrow[dl, dash] & \text{ruitrooster} \\
\text{parallellogramrooster} & & L_P & &
\end{tikzcd}$$

De boven aangegeven lijst van roosters lijkt wel enigszins volledig en voor de hand liggend, maar in principe ontbreken er nog een hele hoop details. Om bijvoorbeeld te bewijzen dat rechthoekrooster en ruitrooster echt verschillende klassen zijn, moeten we laten zien dat een ruitrooster geen orthogonale roosterbasis heeft. Verder is ook de beschrijving van het parallellogramrooster niet zo erg handig, omdat het een beschrijving met negatieve eigenschappen is.

We willen daarom nog andere eigenschappen vinden die de typen van roosters karakteriseren. Hiervoor zullen de symmetrieeigenschappen handig blijken.

Bijvoorbeeld weten we dat een vierkantsrooster invariant is onder een rotatie van orde 4 en dit is voor geen van de andere typen het geval. Net zo is het hexagonale rooster gekarakteriseerd door zijn invariantie onder een rotatie van orde 6.

Als symmetrieën beschouwen we orthogonale lineaire afbeeldingen, d.w.z. lineaire afbeeldingen die lengtes en hoeken bewaren. Alle orthogonale afbeeldingen vormen de *orthogonale groep* $O_n(\mathbb{R}) = \{X \in GL_n(\mathbb{R}) \mid X^{tr}X = \mathbb{I}\}$, waarbij we de afbeeldingen als matrices met betrekking tot de standaardbasis schrijven.

1.13 Definitie Voor een vol rooster $L \leq \mathbb{R}^n$ heet de groep

$$Aut(L) := \{g \in O_n(\mathbb{R}) \mid gL = L\}$$

de *automorfismengroep* of *symmetriegroep* van L.

1.14 Propositie *De automorfismengroep $Aut(L)$ van een rooster L is eindig.*

Bewijs: Omdat de elementen van $Aut(L)$ orthogonale transformaties zijn, laat de actie van $g \in Aut(L)$ op $b \in L$ de lengte van b invariant. Dit betekent dat basisvectoren op vectoren van dezelfde lengte afgebeeld worden. Maar omdat L discreet is, zijn er van een gegeven lengte maar eindig veel vectoren in L, daarom zijn er slechts eindig veel mogelijke beelden voor een roosterbasis van L. □

We zullen nu eens de symmetriegroepen van de vijf typen van roosters bepalen. Hiervoor is het handig om een roosterbasis vast te kiezen, en de automorfismen met betrekking tot deze basis te schrijven, dus met *coördinaatvectoren* te werken. De matrices van de automorfismen worden dan geheeltallige matrices.

> We zullen in deze cursus de volgende notaties voor diëdergroepen hanteren: De diëdergroep D_n heeft orde $2n$ en bevat een rotatie van orde n. Dit is de conventie in de meeste boeken over kristallografische groepen. Let wel dat het in de (algoritmische) groepentheorie net zo gebruikelijk is de diëdergroep van orde $2n$ met D_{2n} te noteren, maar dit zal ons niet verder verwarren.

(1) $L = L_V = \langle b_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, b_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rangle_{\mathbb{Z}}$:

$$Aut(L) = \langle \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rangle \cong D_4.$$

(2) $L = L_H = \langle b_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, b_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \rangle_{\mathbb{Z}}$:

$$Aut(L) = \langle \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rangle \cong D_6.$$

(3) $L = L_R = \langle b_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, b_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \rangle_{\mathbb{Z}}$:

$$Aut(L) = \langle \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rangle \cong D_2 = V_4.$$

(4) $L = L_D = \langle b_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, b_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \rangle_{\mathbb{Z}}$:

$$Aut(L) = \langle \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \rangle \cong D_2 = V_4.$$

(5) $L = L_P = \langle b_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix}, b_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \rangle_{\mathbb{Z}}$:

$$Aut(L) = \langle \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rangle \cong C_2.$$

We zien nu dat we drie van de vijf types aan de hand van de isomorfietype van hun symmetriegroep kunnen identificeren. Het enige geval dat moeilijker is zijn het rechthoekrooster en het ruitrooster. De vraag is nog steeds of een ruitrooster een orthogonale roosterbasis zou kunnen hebben. Maar als we een andere basis van het rooster kiezen, moeten we ook de matrices van de symmetriegroep transformeren, en omdat we het over roosterbases hebben, zou zo'n transformatie een geheeltallige matrix moeten zijn. Dit geeft aanleiding tot de definitie van equivalentie van roosters:

1.15 Definitie Zij L een rooster met symmetriegroep $G = Aut(L)$. Dan noemen we een rooster L' *equivalent* met L als L' een roosterbasis heeft zo dat met betrekking tot deze roosterbasis geldt dat $Aut(L') = G$.

Twee roosters L en L' die met betrekking tot zekere roosterbases de symmetriegroepen $Aut(L)$ en $Aut(L')$ hebben, zijn dus equivalent dan en slechts dan als er een transformatiematrix $T \in GL_n(\mathbb{Z})$ bestaat zo dat $Aut(L') = T^{-1}Aut(L)T$.

De vraag is dus of er een basistransformatie $T \in GL_2(\mathbb{Z})$ bestaat zo dat $T^{-1}Aut(L_R)T = Aut(L_D)$. We kunnen in dit geval nog expliciet nagaan dat zo'n matrix niet bestaat door de elementen van T als veranderlijken op te vatten, maar het zal ook duidelijk zijn dat dit in het algemeen een enigszins ingewikkelde vraag kan zijn.

Opdracht 1 Met betrekking tot geschikte roosterbases hebben het rechthoekrooster L_R en het ruitrooster L_D de symmetriegroepen

$$Aut(L_R) = \langle \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rangle \quad \text{en} \quad Aut(L_D) = \langle \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \rangle.$$

Laat zien dat er geen basistransformatie $T \in GL_2(\mathbb{Z})$ van de basis van L_R bestaat zo dat de symmetriegroep met betrekking tot deze nieuwe basis gelijk is aan $Aut(L_D)$. •

Opdracht 2 Bepaal voor ieder van de vijf volledige symmetriegroepen $Aut(L)$ van de verschillende typen van roosters in $\mathbb{R}^2$ (dus $L \in \{L_V, L_H, L_R, L_D, L_P\}$) de ondergroepen $H \subsetneqq Aut(L)$ die niet op een *algemener rooster* (d.w.z. op een rooster lager in de hierarchie) werken. Dit zijn juist de eindige ondergroepen van de orthogonale groep die geen volledige symmetriegroepen van een rooster zijn. •

Opdracht 3 Voor een vol rooster $L \subseteq \mathbb{R}^n$ heet een stelsel $(v_1, \ldots, v_n)$ van vectoren een *minimaalsysteem* als voor iedere i geldt dat $v_i \in L$ een vector van minimale lengte is die lineair onafhankelijk van $(v_1, \ldots, v_{i-1})$ is (in het bijzonder is dus v_1 een vector van minimale lengte).

(i) Bewijs dat voor een 2-dimensionaal rooster een minimaalsysteem altijd een roosterbasis is. (Hint: Laat zien en pas toe dat $|v_1 \cdot v_2| \leq \frac{1}{2}\|v_1\|^2$.)

(ii) Zij L een 2-dimensionaal rooster dat zo gedraaid en geschaald is dat $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ een vector van minimale lengte in L is.

(a) Laat zien dat (na mogelijke spiegelingen van L in de x- en y-as) een vector $v_2 = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ met $-\frac{1}{2} \leq x \leq 0$ en $y > 0$ (en natuurlijk $x^2+y^2 \geq 1$) gekozen kan worden zo dat (v_1, v_2) een minimaalsysteem van L is.

(b) Beschrijf voor de verschillende typen van 2-dimensionale roosters de mogelijke posities van de vector v_2 zo als die volgens (a) bestaat.

•

Hoofdstuk 2

Ruimtegroepen

De objecten die in de kristallografie een rol spelen zijn (geïdealiseerd) Delone verzamelingen, en het meest belangrijke geval zijn periodieke discrete structuren. We hebben gezien dat de translaties die zo'n structuur invariant laten een rooster vormen en dat de automorfismengroep van een rooster eindige is. De vraag is nu, hoe deze twee componenten, de translaties en de eindige groepen van orthogonale afbeeldingen, samen spelen. Een cruciale rol hierbij spelen de *affiene afbeeldingen*.

2.1 Isometrieën

De fundamentele definitie van de groepen waar we het over hebben staat in de *International Tables for Crystallography, Volume A* (kort ITA) als volgt vermeld.

2.1 Definitie Een *ruimtegroep* is een groep van isometrieën van $\mathbb{R}^n$ die een kristal patroon invariant laat.

Een *kristal patroon* is hierbij gedefinieerd als een periodieke discrete structuur, maar we kunnen ook iets algemener aan een Delone verzameling denken.

Om over *isometrieën* te kunnen praten, hebben we natuurlijk een norm (of een inproduct) op $\mathbb{R}^n$ nodig, en we veronderstellen hiervoor de gewone Euclidische norm $\|(x_1, \ldots, x_n)^{tr}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$.

Door een norm wordt natuurlijk ook een inproduct vastgelegd, want er geldt $v \cdot w = \frac{1}{2}(\|v\|^2 + \|w\|^2 - \|v-w\|^2)$ als we veronderstellen dat $\|v\| = \sqrt{v \cdot v}$.

2.2 Definitie Een isometrie op $\mathbb{R}^n$ is een afbeelding $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ die afstanden bewaart, dus waarvoor geldt $\|f(v) - f(w)\| = \|v - w\|$.

Merk op dat een isometrie altijd injectief is, want uit $f(v) = f(w)$ volgt $\|v - w\| = 0$ en dit geldt alleen maar voor $v = w$.

Een type van isometrieën zijn translaties (verschuivingen). Voor elke vector $t \in \mathbb{R}^n$ is de translatie om t gegeven door $\tau_t : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, v \mapsto v + t$ een isometrie.

Laat nu f een willekeurige isometrie zijn en stel dat $f(0) = t$. Dan is $f' := \tau_{-t} \circ f$ een isometrie met $f'(0) = 0$. Omgekeerd is dan natuurlijk $f = \tau_t \circ f'$, dus kunnen we elke isometrie van $\mathbb{R}^n$ zien als de samenstelling van een isometrie die 0 vast laat en een translatie.

2.3 Lemma *Zij f een isometrie met $f(0) = 0$, dan geldt $f(v) \cdot f(w) = v \cdot w$.*

Bewijs: Er geldt $\|f(v)\| = \|v\|$ voor alle $v \in \mathbb{R}^n$. Maar dan is $f(v) \cdot f(w) = \frac{1}{2}(\|f(v)\|^2 + \|f(w)\|^2 - \|f(v) - f(w)\|^2) = \frac{1}{2}(\|v\|^2 + \|w\|^2 - \|v - w\|^2) = v \cdot w$. □

Dit betekent dat een isometrie met een vaste punt niet alleen maar afstanden, maar ook hoeken bewaart. We bewijzen nu dat een isometrie met een vaste punt automatisch een lineaire afbeelding moet zijn.

2.4 Stelling *Een isometrie f op $\mathbb{R}^n$ met $f(0) = 0$ is een bijectieve lineaire afbeelding. Elke isometrie op $\mathbb{R}^n$ is dus bijectief en de samenstelling van een translatie en een lineaire afbeelding.*

Bewijs: Er geldt $\|f(cv)\| = \|cv\| = |c|\|v\| = |c|\|f(v)\| = \|cf(v)\|$, dus zijn $f(cv)$ en $cf(v)$ even lang. Verder is $f(cv) \cdot cf(v) = c(f(cv) \cdot f(v)) = c(cv \cdot v) = c^2\|v\|^2 = \|cf(v)\|^2$. Maar het inproduct van twee vectoren van dezelfde lengte kan alleen maar gelijk aan hun norm zijn als ze gelijk zijn, dus volgt $f(cv) = cf(v)$.

Er geldt $\|f(v + w)\| = \|v + w\| = \|v - (-w)\| = \|f(v) - f(-w)\| = \|f(v) + f(w)\|$, dus hebben $f(v+w)$ en $f(v)+f(w)$ dezelfde lengte. Verder is $f(v+w) \cdot (f(v)+f(w)) = f(v+w) \cdot f(v) + f(v+w) \cdot f(w) = (v+w) \cdot v + (v+w) \cdot w = \|v+w\|^2$. Met hetzelfde argument als boven geldt nu weer dat $f(v + w) = f(v) + f(w)$.

We zien meteen dat f injectief is, want uit $f(v) = 0$ volgt $\|f(v)\| = \|v\| = 0$ en dus $v = 0$. Maar een lineaire afbeelding van $\mathbb{R}^n$ naar zich zelf die injectief is, is ook surjectief en dus bijectief. □

Deze stelling zegt dat de isometrieën van een kristal structuur tot op een translatie na bijectieve lineaire afbeeldingen moeten zijn, dus zijn de isometrieën noodzakelijk *affiene afbeeldingen*.

2.2 Affiene afbeeldingen

We zullen affiene ruimtes niet in de grootst mogelijke algemeenheid behandelen, maar ons beperken tot het idee van affiene afbeeldingen op een vectorruimte over een lichaam K.

De overgang tussen een vectorruimte en een affiene ruimte bestaat in feite in de keuze van een oorsprong $\mathcal{O}$.

De elementen van een affiene ruimte $\mathcal{A}$ zijn de punten van een vectorruimte V. Voor twee punten $P, Q \in \mathcal{A}$ is er een eenduidige vector $v \in V$

met $Q = P + v$. De vectoren uit V worden dus verkregen als verschillen tussen de punten van $\mathcal{A}$ en de vectoren uit V werken als translaties op $\mathcal{A}$.

Omgekeerd wordt $\mathcal{A}$ uit V verkregen door een oorsprong $\mathcal{O}$ te kiezen en vervolgens de punten van $\mathcal{A}$ in de vorm $\mathcal{O} + v$ voor $v \in V$ te creëren.

2.5 Definitie Zij K^n de (standaard) vectorruimte van dimensie n over een lichaam K.

(i) Een *affiene afbeelding* op een vectorruimte K^n is een afbeelding φ van de vorm $\varphi : K^n \to K^n, v \mapsto g_\varphi(v) + t_\varphi$, waarbij g_φ een lineaire afbeelding op K^n is en $t_\varphi \in K^n$ een vector. We noemen g_φ het *lineaire deel* van φ en t_φ het *translatie deel* of *vector deel* van φ.

(ii) De groep $\mathcal{A}_n(K) := \{\varphi : K^n \to K^n \mid \varphi \text{ bijectieve affiene afbeelding}\}$ heet de *affiene groep* van graad n over K. Merk op dat een affiene afbeelding φ bijectief is dan en slechts dan als het lineaire deel g_φ inverteerbaar is.

2.6 Opmerking Met betrekking tot een basis van K^n laat zich $\mathcal{A}_n(K)$ schrijven met behulp van $(n+1) \times (n+1)$-matrices. Hiervoor worden de vectoren van K^n met een extra component aangevuld, die steeds 1 is. Een element $\varphi \in \mathcal{A}_n(K)$ wordt dan beschreven door $\varphi = \left(\begin{array}{c|c} g_\varphi & t_\varphi \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$ want er geldt:

$$\left(\begin{array}{c|c} g_\varphi & t_\varphi \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \cdot \left(\begin{array}{c} v \\ \hline 1 \end{array}\right) = g_\varphi \cdot v + t_\varphi.$$

Merk op dat we hierbij de lineaire afbeelding g_φ met de $n \times n$-matrix hebben geïdentificeerd die de afbeelding met betrekking tot de gekozen basis van K^n beschrijft.

Op grond van deze opmerking wordt de affiene groep vaak rechtstreeks als matrix groep geschreven, namelijk als

$$\mathcal{A}_n(K) = \left\{ \left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \mid g \in GL_n(K), t \in K^n \right\} \leq GL_{n+1}(K).$$

2.7 Definitie We noemen een affiene afbeelding φ een *translatie* als alle vectoren om dezelfde vector t_φ verschoven worden. Dit betekent dat $\varphi(v) = v + t_\varphi$ voor alle $v \in K^n$, daarom zijn de translaties juist de affiene afbeeldingen met lineair deel $g_\varphi = id$.

Het is duidelijk dat het product van twee translaties weer een translatie is (namelijk om de vectorsom van de translatievectoren), dus vormen de translaties een ondergroep van $\mathcal{A}_n(K)$ die we met $T_n(K)$ noteren:

$$T_n(K) = \left\{ \left(\begin{array}{c|c} id & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \mid t \in K^n \right\} \leq \mathcal{A}_n(K).$$

2.8 Opmerking Vaak identificeren we een ondergroep $T \leq T_n(K)$ met de verzameling $L(T)$ van vectoren in K^n om die de elementen van T verschuiven, dus met

$$L(T) := \{t \in K^n \mid v \mapsto v + t \in T\}.$$

Omdat het product van twee translaties juist om de som van de translatievectoren verschuift, is duidelijk dat $T \cong L(T)$.

Ook de groep $GL_n(K)$ is in $\mathcal{A}_n(K)$ ingebed, namelijk als ondergroep van de lineaire afbeeldingen in $\mathcal{A}_n(K)$ (dus de elementen met translatie deel 0). We gaan nu na, dat $\mathcal{A}_n(K)$ op een bepaalde manier uit de twee ondergroepen $T_n(K)$ en $GL_n(K)$ opgebouwd is.

2.9 Definitie Zij G een groep met een normaaldeler $N \trianglelefteq G$ en een ondergroep $H \leq G$. Dan heet G een *semidirect product* van N en H, als

(i) $G = \{nh \mid n \in N, h \in H\}$;

(ii) $N \cap H = \{1\}$.

Omgekeerd laat zich uit een groep N, een groep H en een homomorfisme $\alpha : H \to Aut(N)$ een semidirect product $G = N \rtimes_\alpha H$ als volgt construeren: De elementen van G zijn de paren (n, h) met $n \in N$ en $h \in H$ en het product van twee paren is gedefinieerd door

$$(n_1, h_1) \cdot (n_2, h_2) := (n_1 n_2^{\alpha(h_1)}, h_1 h_2)$$

waarbij we met $n^{\alpha(h)}$ de toepassing van het automorfisme $\alpha(h)$ op n noteren.

Het is duidelijk dat het element $(1_N, 1_H)$ het neutrale element van $N \rtimes_\alpha H$ is en men gaat na dat $((n^{\alpha(h^{-1})})^{-1}, h^{-1})$ het inverse element van (n, h) is. Dat de vermenigvuldiging associatief is, volgt uit de associativiteit van de producten in N en H en uit het feit dat α een homomorfisme is.

2.10 Opmerking Het directe product $G = N \times H$ is een speciaal geval van een semidirect product, namelijk voor het triviale automorfisme $\alpha = id_{Aut(N)}$ met $\alpha(h) = h$ voor alle $h \in H$.

In tegenstelling tot een direct product is bij een semidirect product met niet-triviale α het product in N door de actie van H *getwist*.

We laten nu zien dat de affiene groep een semidirect product van $N = T_n(K)$ en $H = GL_n(K)$ is. In dit geval hoeven we niet verder over het homomorfisme α na te denken, want $H = GL_n(K)$ is op natuurlijke manier gegeven als automorfismen van $T_n(K)$.

2.11 Propositie *De affiene groep $\mathcal{A}_n(K)$ is een semidirect product $\mathcal{A}_n(K) = T_n(K) \rtimes GL_n(K)$ van de translatie groep $T_n(K)$ met de lineaire groep $GL_n(K)$.*

Het product van twee paren (t_g, g) en (t_h, h) met $t_g, t_h \in T_n(K)$ en $g, h \in GL_n(K)$ is hierbij gegeven door

$$(t_g, g) \cdot (t_h, h) = (t_g + g\, t_h, gh)$$

(de bewerking in $T_n(K)$ wordt als optelling geschreven).

Bewijs: We moeten een keer het product van twee affiene afbeeldingen uitschrijven. Er geldt:

$$\left(\begin{array}{c|c} g & t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \cdot \left(\begin{array}{c|c} h & t_h \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} gh & g\,t_h + t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right).$$

Hieruit laten zich een aantal belangrijke conclusies trekken:

(i) De afbeelding $\Pi : \mathcal{A}_n(K) \to GL_n(K)$ die een affiene afbeelding φ op zijn lineaire deel g_φ afbeeldt, is een homomorfisme.

(ii) De kern van Π is juist de translatiegroep $T_n(K)$. In het bijzonder is dus $T_n(K) \trianglelefteq \mathcal{A}_n(K)$ een normaaldeler.

(iii) Ieder element van $\mathcal{A}_n(K)$ laat zich schrijven als een product van een element van $T_n(K)$ en een element van $GL_n(K)$: Voor φ met lineair deel g_φ en translatie deel t_φ zet in de bovenstaande formule $g = id$, $t_g = t_\varphi$, $h = g_\varphi$, $t_h = 0$.

Omdat volgens (iii) $\mathcal{A}_n(K) = \{tg \mid t \in T_n(K), g \in GL_n(K)\}$ en volgens (ii) $T_n(K) \trianglelefteq \mathcal{A}_n(K)$ met $\mathcal{A}_n(K)/T_n(K) \cong GL_n(K)$ en natuurlijk $T_n(K) \cap GL_n(K) = \{id\}$ volgt de bewering. □

2.12 Opmerking Voor de volledigheid geven we het inverse element van een element uit $\mathcal{A}_n(K)$ aan: Er geldt

$$\left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)^{-1} = \left(\begin{array}{c|c} g^{-1} & -g^{-1}t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right).$$

2.13 Notatie Vanaf nu zullen we net als in het bewijs hier boven het homomorfisme dat een affiene afbeelding φ op de matrix $g \in GL_n(K)$ van zijn lineair deel afbeeldt met $\Pi : \mathcal{A}_n(K) \to GL_n(K)$ noteren.

In het kader van symmetriegroepen hebben we het natuurlijk alleen maar over affiene afbeeldingen die afstanden bewaren. Voor translaties is dit natuurlijk het geval, maar voor het lineaire deel van een affiene afbeelding moeten we hiervoor eisen, dat het een orthogonale afbeelding is. Dit geeft aanleiding tot de definitie van de *Euclidische groep*.

2.14 Definitie Stel dat de matrices van $\mathcal{A}_n(K)$ geschreven zijn met betrekking tot een orthonormale basis van K^n, dan heet

$$E_n(K) := \left\{ \left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \in \mathcal{A}_n(K) \mid g^{tr} g = I_n \right\}$$

de Euclidische groep van graad n over K. De Euclidische groep is dus de ondergroep van $\mathcal{A}_n(K)$ met lineaire delen in de orthogonale groep $O_n(K)$.

In het geval dat $\mathcal{A}_n(K)$ met betrekking tot een willekeurige basis $(v_1, \ldots, v_n)$ van K^n geschreven is, zij $F = (v_i \cdot v_j)_{1 \le i,j \le n}$ de *Gram matrix* van de basis, dan is $E_n(K)$ met betrekking tot deze basis gegeven door

$$E_n(K) = \left\{ \left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \in \mathcal{A}_n(K) \mid g^{tr} F g = F \right\}.$$

De symmetriegroepen van periodieke structuren zijn dus ondergroepen van de Euclidische groep.

We zijn nu klaar voor de zuivere definitie van de symmetriegroepen van periodieke structuren. Omdat we het over 'echte' structuren willen hebben, veronderstellen we vanaf nu dat

$$\mathbb{Q} \subseteq K \subseteq \mathbb{R}.$$

2.15 Definitie Zij R een ondergroep $R \leq E_n(K)$ van de Euclidische groep, zij $T = T(R) := R \cap T_n(K) = \ker(\Pi_{|R})$ de groep van translaties in R en zij $L := L(T)$ de verzameling van translatievectoren van R.

(i) R heet een *ruimtegroep* als L een vol rooster in K^n is, dus als $T \cong \mathbb{Z}^n$.

(ii) Als L een rooster van kleinere rang dan n is, heet R een *subperiodieke groep.*

(ii') Als L een rooster van kleinere rang dan n is en R is een ondergroep van een ruimtegroep, dan heet R een *kristallografische subperiodieke groep.*

(iii) Voor een ruimtegroep of een subperiodieke groep heet de groep $\Pi(R) \cong R/T$ de *puntgroep* van R.

Het verschil tussen algemene subperiodieke groepen en kristallografische subperiodieke groep is enigszins subtiel (maar wel belangrijk). In het algemene geval kan de puntgroep op het complement van het rooster een willekeurige ondergroep van $O_{n-k}(K)$ zijn en hoeft niet eens eindig te zijn. In het kristallografische geval moet ook deze ondergroep op een rooster werken (ook al liggen de translaties van dit rooster niet in de groep). Dit betekent, dat de groep geconjugeerde met een ondergroep van $GL_{n-k}(\mathbb{Q})$ moet zijn.

Bij de ruimtegroepen speelt dit probleem niet, omdat de puntgroep door zijn werking op een vol rooster sowieso geconjugeerde met een ondergroep van $GL_n(\mathbb{Q})$ moet zijn.

2.16 Opmerking Voor $n = 2$ en $n = 3$ hebben de kristallografische subperiodieke groepen speciale namen.

Voor $n = 2$ heten de groepen met 1-dimensionaal translatierooster *friesgroepen* (*frieze groups* in het Engels).

Voor $n = 3$ heten de groepen met 1-dimensionaal translatierooster *staafgroepen* (*rod groups*) en de groepen met 2-dimensionaal translatierooster heten *laaggroepen* (*layer groups*).

2.17 Propositie *Zij R een ruimtegroep met translatierooster L en puntgroep G. Dan is $G \leq Aut(L)$ en G is isomorf met een eindige ondergroep van $GL_n(\mathbb{Z})$.*

Bewijs: Per definitie bevat G alleen maar orthogonale afbeeldingen, daarom is het voldoende als we aantonen dat L invariant onder de actie van G is. Zij nu $g \in G$, dan is er een element $\varphi \in R$ met $\varphi = \left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$ en er geldt

$$\left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)^{-1} = \left(\begin{array}{c|c} g^{-1} & -g^{-1}t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right).$$

Voor een willekeurige translatie $v \in T(R)$ moet $\varphi^{-1}v\varphi \in T(R)$ zijn, omdat $T(R)$ een normaaldeler in R is. Maar dit uitgewerkt in matrices geeft:

$$\begin{aligned}\left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{c|c} id & v \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) &= \left(\begin{array}{c|c} g^{-1} & -g^{-1}t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} g & t+v \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \\ &= \left(\begin{array}{c|c} id & g^{-1}v \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \in T(R)\end{aligned}$$

dus moet $g^{-1}v \in L$ liggen en dus is L invariant onder de actie van G.

Omdat L een vol rooster in K^n is, kunnen we G met betrekking tot een roosterbasis van L schrijven, en met deze basistransformatie wordt G een eindige ondergroep van $GL_n(\mathbb{Z})$. □

Vaak worden ruimtegroepen zo gedefinieerd dat de translaties een rooster vormen en de puntgroep een eindige groep is, maar omdat we in de definities graag zuinig zijn, hebben we de eindigheid niet verondersteld maar bewezen.

Voor subperiodieke groepen werkt het bewijs niet, omdat de groep die op het orthogonale complement van het translatierooster werkt oneindig kan zijn. Een voorbeeld van zo'n groep in 3 dimensies is de cyklische groep voortgebracht door een schroefdraaiing om een niet-rationale hoek, dus een hoek die niet van de vorm $\frac{2\pi m}{n}$ is. In dit geval is de puntgroep een oneindige cyklische groep die op het vlak loodrecht op de schroefas werkt.

Opdracht 4 We onderzoeken de Euclidische groep $E_2(\mathbb{R})$.

(i) Laat zien dat de elementen van $E_2(\mathbb{R})$ in de volgende vier klassen vallen:

- translaties;
- rotaties;
- spiegelingen;
- glijspiegelingen.

Ga hiervoor na dat een orthogonale afbeelding in het vlak of een rotatie of een spiegeling is en dat er geen 'glijrotaties' zijn (dus dat de combinatie van een rotatie en een translatie een zuivere rotatie is).

(ii) De klassen laten zich makkelijk karakteriseren (ga dit na):

- translaties: lineair deel is de identiteit;

– rotaties: lineair deel heeft determinant 1, er is een eenduidige vaste punt;

– spiegelingen: lineair deel heeft determinant -1, de vaste punten liggen op een lijn;

– glijspiegeling: lineair deel heeft determinant -1, er is een invariante lijn, maar er zijn geen vaste punten.

Het vaste punt bij een rotatie en de invariante lijnen bij een spiegeling of glijspiegeling heten ook de *symmetrieëlementen* van de afbeelding.

Geef aan hoe je voor een affiene afbeelding (g, t) die niet noodzakelijk ten opzichte van een orthogonale basis geschreven is, de symmetrieëlementen kunt bepalen.

(iii) Geef voor de verschillende combinaties van twee klassen aan in welke klasse het product van elementen van die twee klassen valt (let op dat dit niet altijd eenduidig is).

•

Opdracht 5 Zij R een *kristallografische subperiodieke groep*, d.w.z. een ondergroep van een ruimtegroep $R \leq E_n(\mathbb{R})$ zo dat de translaties in de translatieondergroep $T(R)$ een rooster van rang $k < n$ vormen. Laat zien dat zich R met betrekking tot een geschikte basis (die een roosterbasis van $T(R)$ bevat) laat schrijven als

$$R = \left\{ \left(\begin{array}{c|c|c} g & 0 & t_g + t \\ \hline 0 & h & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \mid g \in GL_k(\mathbb{Z}), h \in GL_{n-k}(\mathbb{Z}), t \in \mathbb{Z}^k, t_g \in \mathbb{R}^k \right\}$$

waarbij de $g \in GL_k(\mathbb{Z})$ en de $h \in GL_{n-k}(\mathbb{Z})$ telkens in een eindige groep liggen en waarbij de componenten van de vectoren t_g voor iedere $g \in G$ in het halfopen interval $[0, 1)$ liggen (en $t_{id} = 0$). •

Opdracht 6 Bepaal de verschillende *friesgroepen*, d.w.z. de subperiodieke groepen in $E_2(\mathbb{R})$ met een translatierooster van rang 1. Geef voor iedere groep een patroon in het vlak aan, dat deze groep als symmetriegroep heeft.

(Hint: In de notatie van de vorige opdracht zijn g en h elementen uit $GL_1(\mathbb{Z})$ en dus ± 1. De vraag is nu hoe t_g er uit kan zien. Merk hierbij op dat voor $g = -1$ het kwadraat van het element een translatiedeel in $\mathbb{Z}$ moet hebben.) •

Hoofdstuk 3

Ruimtegroepen als uitbreidingen

We hebben gezien dat zich een ruimtegroep R met behulp van het homomorfisme Π in zijn translatieondergroep $T(R)$ en zijn puntgroep G van lineaire delen laat opsplitsen. Echter ligt R door $T(R)$ en G nog niet vast, er zijn verschillende mogelijkheden om uit deze gegeven bouwstenen een ruimtegroep te maken.

Het deelgebied van de groepentheorie die hierbij aan bod komt is de *uitbreidingstheorie* waarbij men uit twee groepen N en H grotere groepen G probeert te maken met $N \trianglelefteq G$ en $G/N \cong H$. In dit geval heet G een *uitbreiding* van N met H. In principe hebben we het hier met *cohomologietheorie* te maken, een nogal abstract gebied, maar in het kader van ruimtegroepen laat zich alles zeer expliciet en overzichtelijk beschrijven.

3.1 Vector systemen

Omdat de translatie ondergroep $T(R)$ de kern van het homomorfisme Π van R naar de puntgroep $G \cong R/T(R)$ is, zijn de elementen van G in bijectie met een transversaal van $T(R)$ in R, dus met een verzameling van representanten van de restklassen in $R/T(R)$.

3.1 Definitie Zij R een ruimtegroep en voor iedere $g \in G = \Pi(R)$ zij $\varphi_g = \left(\begin{array}{c|c} g & t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \in R$ een element van R met $\Pi(\varphi_g) = g$. Dan is $\{\varphi_g \mid g \in G\}$ een transversaal van $T(R)$ in R en de verzameling $\{t_g \mid g \in G\}$ heet een *vector systeem* of *systeem van niet-primitieve translaties.*

3.2 Lemma *Verschillende vector systemen van een ruimtegroep R verschillen alleen maar om elementen van het translatierooster L van R, d.w.z. voor twee vector systemen $\{t_g \mid g \in G\}$ en $\{t'_g \mid g \in G\}$ geldt dat $t_g - t'_g \in L$.*

BEWIJS: Laten $\left(\begin{array}{c|c} g & t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$ en $\left(\begin{array}{c|c} g & t'_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \in R$. Er geldt

$$\left(\begin{array}{c|c} g & t'_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{c|c} g & t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} g^{-1} & -g^{-1}t'_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} g & t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$
$$= \left(\begin{array}{c|c} id & g^{-1}(t_g - t'_g) \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \in T(R)$$

dus is $t_g - t'_g \in L$. □

3.3 Gevolg *In een vector systeem van een ruimtegroep R is het element t_{id} voor het neutrale element van de puntgroep G van R steeds een element van het translatierooster L van R.*

BEWIJS: Het neutrale element van R heeft de nulvector als translatiedeel, dus moet $t_{id} - 0 = t_{id}$ in L liggen. □

Op grond van het bovenstaande lemma kunnen we een ruimtegroep R met betrekking tot een basis van zijn translatierooster altijd schrijven als

$$R = \left\{ \left(\begin{array}{c|c} g & t_g + t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \mid g \in G \leq GL_n(\mathbb{Z}), t \in \mathbb{Z}^n \right\}$$

waarbij G een eindige ondergroep van $GL_n(\mathbb{Z})$ is en de vectoren t_g een vector systeem vormen.

Merk op: Als niet expliciet iets anders verondersteld wordt, nemen we vanaf nu aan, dat een ruimtegroep altijd in deze vorm gegeven is, d.w.z. dat het translatierooster $L = \mathbb{Z}^n$ is.

3.4 Lemma *Zij R een ruimtegroep met puntgroep G en vector systeem $\{t_g \mid g \in G\}$. Dan voldoen de elementen van het vector systeem aan*

$$t_{gh} \equiv t_g + g t_h \bmod \mathbb{Z}^n \text{ voor alle } g, h \in G.$$

BEWIJS: Omdat de elementen t_g tot op elementen uit $\mathbb{Z}^n$ na vast liggen, volgt dit rechtstreeks uit de vermenigvuldiging van twee elementen van een ruimtegroep, want er geldt:

$$\left(\begin{array}{c|c} g & t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} h & t_h \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} g & g t_h + t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$

□

Omdat vector systemen aan de ene kant aan deze relatie voldoen en aan de andere kant voor een gegeven ruimtegroep R de vector systemen alleen maar tot op vectoren in $\mathbb{Z}^n$ na bepaald zijn, ligt het voor de hand de vector systemen modulo $\mathbb{Z}^n$ te bekijken. Dit geeft aanleiding tot een afbeelding

$$\tau : G \to K^n/\mathbb{Z}^n, g \mapsto t_g + \mathbb{Z}^n \text{ die voldoet aan } \tau(gh) = \tau(g) + g\tau(h).$$

Men noemt de relatie $\tau(gh) = \tau(g) + g\tau(h)$ ook de *cocykel-conditie*. Afbeeldingen die aan een cocykel-conditie voldoen, spelen in verschillende gebieden van de algebra een belangrijke rol.

Een cruciaal punt is dat een puntgroep $G \le GL_n(\mathbb{Z})$ op K^n en op $\mathbb{Z}^n$ werkt, daarom werkt G ook op $K^n/\mathbb{Z}^n$. Merk op dat $K^n/\mathbb{Z}^n$ niet onder scalaire vermenigvuldiging met elementen uit K bewaard blijft, maar wel voor elementen uit $\mathbb{Z}$. Daarom is $K^n/\mathbb{Z}^n$ geen K-vectorruimte, maar men noemt dit een $\mathbb{Z}$-*module*.

3.5 Definitie Voor een Abelse groep $(M, +)$ definiëren we de scalaire vermenigvuldiging met $a \in \mathbb{Z}$ door $a \cdot v := \underbrace{v + v + \ldots + v}_{a}$. Met deze scalaire vermenigvuldiging voldoet M aan de gewone axioma's van een vectorruimte en men noemt M een $\mathbb{Z}$-*module*.

In het algemeen zijn R-modulen Abelse groepen met scalaire vermenigvuldiging met elementen uit een willekeurige ring R, waarbij een de axioma's van een vectorruimte wordt voldaan. Omdat we deze algemeenheid niet nodig hebben, zullen we in het vervolg met een module steeds een $\mathbb{Z}$-module bedoelen.

3.6 Definitie Een module M waarop een groep G werkt, noemt men een G-module.

De voor ons belangrijke G-modulen zijn natuurlijk $\mathbb{Z}^n$ en $K^n/\mathbb{Z}^n$ voor $G \le GL_n(\mathbb{Z})$.

3.7 Definitie Zij G een groep G en M een G-module.

(i) Een afbeelding $\tau : G \to M$ heet een 1-*cocykel* of *derivatie* van G met waarden in M als $\tau(gh) = \tau(g) + g\tau(h)$ voor alle $g, h \in G$.

(ii) De som van twee derivaties τ en τ' is gedefinieerd door puntsgewijs optellen, d.w.z. door $(\tau + \tau')(g) := \tau(g) + \tau'(g)$. Met deze bewerking wordt de verzameling van alle derivaties van G met waarden in M een groep, die met $C^1(G, M)$ genoteerd wordt en de *groep van* 1-*cocykels van* G *met waarden in* M heet.

Het gebruik van het begrip *derivatie* voor de 1-cocykels laat zich op verschillende manieren rechtvaardigen. Als we eisen dat voor een afbeelding $\tau : G \to M$ van een groep G naar een G-module M de gewone productregel geldt, krijgen we $\tau(gh) = \tau(g)h + g\tau(h)$. Maar hier hebben we nodig dat M een module voor werkingen van G van links *en* van rechts is, dus dat M een *bimodule* voor G is. De eenvoudigste manier om van een gewone linksmodule M een bimodule te maken, is de werking van rechts als triviaal te definiëren, dus door $mg = m$ voor alle $g \in G$. Maar dan is $\tau(g)h = \tau(g)$ en de productregel wordt de cocykel-conditie $\tau(gh) = \tau(g) + g\tau(h)$.

Een andere motivatie voor het begrip *derivatie* ligt in de differentiaalmeetkunde. Het idee is, dat we een groep G ook als een topologische ruimte beschouwen en de raakruimte aan het 1-element van G bekijken. In een kleine omgeving van 1 kunnen we de groepselementen lineair benaderen door $g = 1 + x$, waarbij we veronderstellen dat x een differentieel kleine afwijking is. Net zo als bij Taylor reeksen zien we $1 + x$ als *linearisering* van g en dus kunnen we $x = g - 1$ als *afgeleide* in het punt g beschouwen. Maar voor twee groepselementen $g = 1 + x$ en $h = 1+y$ geldt $gh-1 = x+y+xy = x+(1+x)y = (g-1)+g(h-1)$, dus is voor dit soort afleiding de productregel gegeven door $(gh)' = g' + gh'$ en dit is juist de cocykel-conditie.

De cocykel-conditie is een sterke voorwaarde waar het vector systeem van een ruimtegroep aan moet voldoen, maar we hebben tot nu toe een belangrijk punt verwaarloosd: Voor de lineaire delen van een ruimtegroep speelt de gekozen oorsprong (nulvector) van K^n een belangrijke rol, want dit is het punt dat onder alle operaties vast blijft. Maar de translaties zijn onafhankelijk van de oorsprong, daarom verandert een andere keuze van de oorsprong niet het translatierooster van R, maar wel het vector systeem.

Voorbeeld: De matrix $\left(\begin{array}{c|c} -1 & \frac{1}{2} \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$ beschrijft een spiegeling in $\mathbb{R}^1$ gecombineerd met een verschuiving. Als we naar een paar punten kijken zien we dat $0 \mapsto \frac{1}{2}$, $\frac{1}{2} \mapsto 0$, $1 \mapsto -\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2} \mapsto 1$ en $\frac{1}{4} \mapsto \frac{1}{4}$. In feite hebben we het dus niet met een glijspiegeling, maar met een zuivere spiegeling in het punt $\frac{1}{4}$ te maken. We hadden alleen maar de oorsprong ongunstig gekozen.

3.8 Propositie *Zij R een ruimtegroep met puntgroep G en vector systeem $\{t_g \mid g \in G\}$. Door verschuiving van de oorsprong om $t \in K^n$ wordt het vector systeem van R getransformeerd naar het nieuwe vector systeem*

$$\{t_g + (g - id)t \mid g \in G\}.$$

Bewijs: Een verschuiving van de oorsprong om de vector $t \in K^n$ is gegeven door de affiene afbeelding $\left(\begin{array}{c|c} id & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$ en de transformatie van de ruimtegroep op het coördinaatsysteem met de nieuwe oorsprong wordt gerealiseerd door de conjugatie met deze matrix. Maar er geldt

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{c|c} id & -t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} g & t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} id & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) &= \left(\begin{array}{c|c} id & -t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} g & gt + t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \\ &= \left(\begin{array}{c|c} g & gt + t_g - t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} g & t_g + (g - id)t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right). \end{aligned}$$

dus wordt de vector t_g van het vector systeem getransformeerd naar de vector $t_g + (g - id)t$. □

3.9 Lemma *Voor een groep G, een G-module M en een element $m \in M$ is de afbeelding $\tau_m : G \to M, g \mapsto gm - m = (g - id)m$ een element van $C^1(G, M)$ en er geldt $\tau_m + \tau_{m'} = \tau_{m+m'}$.*

Bewijs: Er geldt $\tau_m(gh) = ghm - m = (gm - m) + g(hm - m) = \tau_m(g) + g\tau_m(h)$, dus voldoet τ_m aan de cocykel-conditie. Omdat we derivaties puntsgewijs optellen, geldt $\tau_m(g)+\tau_{m'}(g) = gm-m+gm'-m' = g(m+m')-(m+m') = \tau_{m+m'}(g)$. □

3.10 Definitie Zij G een groep en M een G-module.

(i) Een derivatie $\tau \in C^1(G, M)$ van de vorm $\tau(g) = gm - m$ voor een $m \in M$ heet een *inwendige derivatie* of *corand* van G met waarden in M.

(ii) De ondergroep van alle inwendige derivaties in $C^1(G, M)$ wordt genoteerd met $B^1(G, M)$.

(iii) De factorgroep $H^1(G, M) := C^1(G, M)/B^1(G, M)$ heet de *eerste cohomologie groep* van G met waarden in M.

We hebben gezien dat twee ruimtegroepen die alleen maar door verschillende keuzes van de oorsprong verschillen, vector systemen hebben die hetzelfde element van $H^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$ representeren. Omgekeerd kunnen we door een verschuiving van de oorsprong ervoor zorgen, dat een ruimtegroep een 'mooi' vector systeem heeft. Een bijzonder eenvoudig geval zijn vector systemen die met een inwendige derivatie en dus met het 0-element van $H^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$ corresponderen.

3.11 Definitie Een ruimtegroep R waarvoor het vector systeem een inwendige derivatie representeert, heet een *symmorfe* ruimtegroep.

3.12 Opmerking Door een geschikte verschuiving van de oorsprong laat zich een symmorfe ruimtegroep R steeds zo schrijven dat het vector systeem triviaal is, dus zo dat alle t_g de nulvector zijn: voor $t_g = (g - id)t$ moet men gewoon met $-t$ verschuiven.

Maar in dit geval vormen de elementen $\left(\begin{array}{c|c} g & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$ een ondergroep van R die juist een complement van de translatieondergroep is, en dus is een symmorfe ruimtegroep een semidirect product $R = T(R) \rtimes G$ van zijn translatieondergroep $T(R)$ en zijn puntgroep. Omdat de actie van G op $T(R)$ door de matrices van G vast ligt, is er voor een gegeven puntgroep G een eenduidige ruimtegroep R met puntgroep G en translatierooster $\mathbb{Z}^n$. Deze ruimtegroep heet vaak gewoon de *symmorfe ruimtegroep met puntgroep G*.

Omgekeerd is een ruimtegroep R waarvoor het vectorsysteem geen inwendige derivatie representeert geen semidirect product van $T(R)$ met de puntgroep, want in dit geval bevat R geen ondergroep isomorf met $R/T(R)$: stel dat G wel een complement van $T(R)$ is, dan is er een punt die onder alle elementen van G vast blijft (namelijk $\sum_{g \in G} gv$ voor een willekeurige $v \in K^n$). Maar dan zijn alle translatiedelen van G met betrekking tot dit punt als oorsprong de nulvector.

Voorbeeld 1: We bekijken de puntgroep $G = \left\langle g = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\rangle \cong C_2$. De inwendige derivaties zijn het beeld van $g - id = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$, dus de vectoren van de vorm $\begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix}$ met $y \in K$.

Wegens $g^2 = id$ moet voor een element $\varphi \in R$ met lineair deel g het translatiedeel van φ^2 in $\mathbb{Z}^2$ liggen. Er geldt $\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & a \\ 0 & -1 & b \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)^2 = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 2a \\ 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ en hieruit volgt dat $2a \in \mathbb{Z}$ moet zijn. Omdat we met de inwendige derivaties de tweede component van t_g op 0 kunnen brengen, zijn de verschillende vector systemen voor G dus $t_g = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ en $t'_g = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}$. In het eerste geval is de ruimtegroep symmorf, in het tweede niet.

Voorbeeld 2: Als we tegenover Voorbeeld 1 van het rechthoekrooster naar het ruitrooster overgaan, hebben we het met de puntgroep $G = \left\langle g = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle \cong C_2$ te maken. In dit geval zijn de inwendige derivaties het beeld van $g - id = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, dus de vectoren van de vorm $\begin{pmatrix} -x \\ x \end{pmatrix}$ met $x \in K$.

Ook hier moet voor een element $\varphi \in R$ met lineair deel g gelden, dat het translatiedeel van φ^2 in $\mathbb{Z}^2$ ligt. Dit geeft $\left(\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & a \\ 1 & 0 & b \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)^2 = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & a+b \\ 0 & 1 & a+b \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ en hieruit volgt dat $a + b \in \mathbb{Z}$ moet zijn. Maar met de inwendige derivaties kunnen we de tweede component b van t_g op 0 brengen, dan volgt dat $a \in \mathbb{Z}$ moet zijn en we hebben het met het triviale vector systeem te maken. Er geldt dus $H^1(G, K^2/\mathbb{Z}^2) = \{0\}$, d.w.z. voor de gegeven puntgroep G is de symmorfe ruimtegroep de enige ruimtegroep met G als puntgroep.

Ook voor ruimtegroepen die niet symmorf zijn, laat zich het vector systeem op een eenvoudige vorm brengen. De volgende stelling geeft aan, dat de waarden van een vector systeem altijd als getallen in $\mathbb{Q}$ met door de orde $|G|$ begrensde noemers gekozen kunnen worden.

3.13 Stelling *Zij R een ruimtegroep met puntgroep G en translatierooster $\mathbb{Z}^n$. Door geschikte keuze van de oorsprong laat zich R zo schrijven dat het vector systeem $\{t_g \mid g \in G\}$ alleen maar waarden in $\frac{1}{|G|}\mathbb{Z}$ heeft.*

Bewijs: Zij $\{t_g \mid g \in G\}$ het vector systeem van R. We definiëren $t_0 := \frac{1}{|G|}\sum_{g \in G} t_g \in K^n$, dan geldt

$$\begin{aligned} |G|t_0 &= \sum_{g \in G} t_g = \sum_{h \in G} t_{gh} \\ &\equiv \sum_{h \in G}(t_g + gt_h) = |G|t_g + g(\sum_{h \in G} t_h) = |G|t_g + |G|gt_0 \bmod \mathbb{Z}^n. \end{aligned}$$

Als we dit door $|G|$ delen, krijgen we

$$t_g \equiv t_0 - gt_0 \bmod \frac{1}{|G|}\mathbb{Z}^n.$$

Door de oorsprong met t_0 te verschuiven, wordt t_g getransformeerd naar $t'_g = t_g + (g - id)t_0 \equiv 0 \bmod \frac{1}{|G|}\mathbb{Z}^n$, dus is $t'_g \in \frac{1}{|G|}\mathbb{Z}^n$. □

3.14 Gevolg *Voor een ruimtegroep R met translatieondergroep $T := T(R)$ is $R' := \langle R, \frac{1}{|G|}T(R)\rangle$ een symmorfe ruimtegroep.*

Bewijs: Dit volgt rechtstreeks, omdat R en R' dezelfde puntgroep hebben en het vector systeem van R dus ook een vector systeem van R' is. Maar voor R' liggen de elementen van het vector systeem in het translatie rooster. □

3.15 Gevolg *Voor een G-module M over een lichaam K met* $\mathrm{kar}(K) \nmid |G|$ *geldt $H^1(G, M) = \{0\}$.*

Bewijs: Zij $\tau \in C^1(G, M)$, dan geldt $\tau(gh) = \tau(g) + g\tau(h)$. Net als in het bewijs van de stelling definiëren we $t_0 := \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\tau(g)$, dan is $t_0 \in M$. Met hetzelfde argument als boven volgt dat $|G|t_0 = |G|\tau(g) + |G|gt_0$, dus is $\tau(g) = -(g - id)t_0$ en dus $\tau \in B^1(G, M)$. □

In het bijzonder geldt dus voor een lichaam K met $\mathbb{Q} \subseteq K \subseteq \mathbb{C}$ dat $H^1(G, K^n) = 0$ voor een eindige groep $G \leq GL_n(K)$.

Opdracht 7 Zij R een ruimtegroep met puntgroep G en vector systeem $\{t_g \mid g \in G\}$. Laten $g_1, \ldots, g_s$ voortbrengers van G zijn en stel dat g_1 geen eigenvector voor de eigenwaarde 1 heeft, d.w.z. er geldt $g_1 v \neq v$ voor alle $v \neq 0$.

Laat zien dat door een geschikte keuze van de oorsprong (dus modulo inwendige derivaties) het vector systeem van R zo aangepast kan worden dat $t_{g_1} = 0$ is. •

Opdracht 8 Zij R een ruimtegroep met puntgroep G en translatieondergroep $\mathbb{Z}^n$. Zij U een ondergroep van G, zij $\{t_u \mid u \in U\}$ een vector systeem van U en zij $H \leq R$ het origineel van U in R.

(i) Zij $t_0 := \frac{1}{|U|}\sum_{u\in U} t_u$. Laat zien dat $t_0 + \frac{1}{|U|}\mathbb{Z}^n$ invariant onder de actie van H is.

(ii) Stel dat U geen vaste vector heeft, d.w.z. $\nexists x \in \mathbb{R}^n$ met $ux = x$ voor alle $u \in U$. Laat zien dat dan $\sum_{u\in U} u = 0$.

(iii) Stel dat U een normaaldeler in G is die geen vaste vector heeft. Bewijs dat $t_0 + \frac{1}{|U|}\mathbb{Z}^n$ dan ook invariant onder de actie van R is.

(iv) Concludeer dat zich voor een puntgroep G met een normaaldeler U die geen vaste vector heeft door een verschuiving van de oorsprong de noemers in het vector systeem tot delers van $|U|$ laten beperken.

In het bijzonder zijn voor een puntgroep G die $-I_n$ bevat de noemers hoogstens 2.

•

3.2 Het Zassenhaus algoritme

In de twee voorbeelden die we in de vorige sectie hebben bekeken, hebben we de beperkingen voor de vector systemen eruit afgeleid, dat elementen van een ruimtegroep met triviaal lineair deel een translatiedeel in het translatierooster moeten hebben, volgens onze conventies in $\mathbb{Z}^n$ dus. Maar in feite hadden beide voorbeelden puntgroep $G \cong C^2$ en konden we de vector systemen makkelijk bepalen door naar het kwadraat van een element van de ruimtegroep te kijken, dat als lineair deel de voortbrenger van C_2 en een translatiedeel met onbekenden had.

Om ook naar ingewikkeldere groepen dan C_2 te kunnen kijken, merken we eerst eens op, dat het voldoende is om een vector systeem op *voortbrengers* van de puntgroep G te kennen.

3.16 Opmerking Zij $G = \langle g_1, \ldots, g_s \rangle$ de puntgroep van een ruimtegroep R, dan is het vector systeem van R (modulo $\mathbb{Z}^n$) vastgelegd door de waarden $t_i := t_{g_i}$ op de voortbrengers. Ieder element van G is namelijk een product in de g_i en de cocykel-conditie geeft (modulo $\mathbb{Z}^n$) $t_{gh} = t_g + gt_h$, d.w.z. t_{gh} is door t_g en t_h bepaald. Hiermee laten zich de elementen van het vector systeem terug brengen op de elementen t_i op de voortbrengers van G.

Maar we mogen ook op de voortbrengers van G de elementen van het vector systeem niet willekeurig kiezen, want ieder product met als lineair deel de identiteit in G moet als translatiedeel een vector in $\mathbb{Z}^n$ hebben.

Het idee om de mogelijke vector systemen te bepalen is nu als volgt: Voor de voortbrengers $g_1, \ldots, g_s$ van G schrijven we elementen $X_1, \ldots, X_s$ van een ruimtegroep met variabelen voor de translatiedelen, d.w.z. X_i is van de vorm

$$X_i = \left(\begin{array}{c|c} & x_{i1} \\ g_i & \vdots \\ & x_{in} \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right)$$

waarbij de x_{ij} onbekenden zijn.

3.17 Opmerking Voor ieder product van de X_i dat $id \in G$ als lineair deel heeft, moet het translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ liggen. De componenten van de translatiedelen van deze producten leveren dus lineaire congruenties modulo $\mathbb{Z}$ in de variabelen x_{ij} op aan die een vector systeem voor G moet voldoen.

Het probleem is, dat er oneindig veel mogelijke producten in de g_i zijn die $id \in G$ opleveren en we het daarom in principe met oneindig veel lineaire congruenties te maken hebben. Maar gelukkig is het niet nodig om naar alle producten te kijken, het voorbeeld van een cyklische groep $G = \langle g \rangle \cong C_m$ van orde m zal duidelijk maken wat het idee is:

Voorbeeld: De producten in de voortbrenger g van $G = \langle g \rangle$ die $id \in G$ geven, zijn de producten g^{km} met $k \in \mathbb{Z}$. Als we nu een element φ van een ruimtegroep met lineair deel g hebben, zo dat φ^m een translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ heeft, dan hebben ook de elementen $\varphi^{km} = (\varphi^m)^k$ translatiedelen in $\mathbb{Z}^n$. Er wordt dus automatisch aan alle congruenties voor g^{km} voldaan, als aan de congruenties voor g^m voldaan wordt, dus zijn de congruenties voor g^{km} *consequenties* van de congruenties voor g^m.

3.2.1 Definiërende relaties

Het doel is, een stelsel producten in de voortbrengers van G te vinden zo dat alle congruenties die we uit producten met lineair deel $id \in G$ krijgen, consequenties van de congruenties voor dit stelsel producten zijn.

Om zo'n stelsel producten te bepalen, gebruiken we een aantal eenvoudige eigenschappen van producten die in de affiene groep gelden. Met een *woord* bedoelen we hierbij een product $w = X_{i_1}^{\pm 1} X_{i_2}^{\pm 1} \dots X_{i_l}^{\pm 1}$ in de elementen X_i en hun inversen dat we als keten van de symbolen $X_i^{\pm 1}$ opvatten.

3.18 Lemma *Neem aan dat in de elementen X_i concrete waarden voor de onbekenden x_{ij} ingevuld zijn.*

(1) *Als twee woorden w_1 en w_2 translatiedelen in $\mathbb{Z}^n$ hebben, heeft ook het samengevoegde woord $w_1 w_2$ een translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$.*

(2) *Als een woord w met translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ en lineair deel id met een voortbrenger X_i geconjugeerd wordt, heeft ook het resulterende woord $X_i^{-1} w X_i$ een translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ (en lineair deel id).*

(3) *Als we een woord $w = X_{i_1}^{\pm 1} \dots X_{i_l}^{\pm 1}$ met translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ inverteren, heeft het resulterende woord $w^{-1} = X_{i_l}^{\mp 1} \dots X_{i_1}^{\mp 1}$ een translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$.*

(4) *Het invoegen of weglaten van een uitdrukking van de vorm $X_i X_i^{-1}$ of $X_i^{-1} X_i$ in een woord verandert het translatiedeel van het woord niet.*

Bewijs:

(1) Dit volgt rechtstreeks uit de samenstelling van affiene afbeeldingen:

$$\left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} h & u \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} gh & gu+t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$

Voor $t, u \in \mathbb{Z}^n$ en $g \in GL_n(\mathbb{Z})$ is ook $gu + t \in \mathbb{Z}^n$.

(2) Er geldt

$$\left(\begin{array}{c|c} h & u \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)^{-1} \left(\begin{array}{c|c} id & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} h & u \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} h^{-1} & -h^{-1}u \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} h & u+t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$
$$= \left(\begin{array}{c|c} id & -h^{-1}t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right).$$

(3) Dit volgt uit

$$\left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)^{-1} = \left(\begin{array}{c|c} g^{-1} & -g^{-1}t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right).$$

(4) Dit is duidelijk. □

Door een combinatie van de eigenschappen (1) en (2) (samenvoegen en conjugeren) krijgen we de algemenere uitspraak dat de verzameling van woorden met translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ en lineair deel id afgesloten is onder het invoegen van een woord in een ander woord. We hebben dus het volgende ingezien:

3.19 Gevolg *Voor een gegeven stelsel van woorden in de voortbrengers van G die $id \in G$ opleveren, zijn alle congruenties die we door samenvoegen, conjugeren, inverteren of het invoegen of weglaten van $X_iX_i^{-1}$ of $X_i^{-1}X_i$ in de corresponderende woorden in de X_i verkrijgen consequenties van de congruenties die het gegeven stelsel oplevert.*

Het doel is daarom, een stelsel van woorden te vinden, zo dat zich alle woorden in de voortbrengers die $id \in G$ opleveren uit deze woorden op de aangegeven manier laten afleiden. Van de andere kant bekeken betekent dit, dat we alle woorden door het omgekeerde van deze operaties tot het lege woord terug kunnen brengen. Zo'n stelsel van woorden heet een stelsel van *definiërende relaties.*

3.20 Definitie Voor een groep G met voortbrengers $g_1, \ldots, g_s$ heet een stelsel $\mathcal{R}$ van woorden in de g_i en hun inversen g_i^{-1} een stelsel van *definiërende relaties* voor G als zich ieder woord in de g_i en g_i^{-1} dat $id \in G$ oplevert door samenvoegen, conjugeren, inverteren of invoegen of weglaten van $g_ig_i^{-1}$ of $g_i^{-1}g_i$ uit $\mathcal{R}$ laat afleiden.

Als we heel penibel willen zijn, moeten we een woord w in de voortbrengers en hun inversen dat $id \in G$ geeft eigenlijk een *relator* noemen, de relatie is de vergelijking $w = 1$. Maar het is gebruikelijk (bijvoorbeeld in computeralgebra systemen zo als MAGMA) relaties van de vorm $w = 1$ gewoon als w te schrijven.

3.21 Opmerking Vaak is het handig voor een woord $w = w_1w_2$ met $w = 1$ de relatie in twee delen op te splitsen door w (van rechts) met w_2^{-1} te vermenigvuldigen. In plaats van $w_1w_2 = 1$ krijgt men zo de vergelijking $w_1 = w_2^{-1}$.

In het kader van de ruimtegroepen betekent dit dat de translatiedelen van w_1 en w_2^{-1} modulo $\mathbb{Z}$ hetzelfde moeten zijn.

3.22 Propositie *Een eindige groep heeft altijd een eindig stelsel van definiërende relaties voor een gegeven stelsel voortbrengers.*

BEWIJS: In een eerste stap nemen we aan dat alle groepselementen behalve $id \in G$ voortbrengers zijn. Als relaties nemen we nu de vergelijkingen voor alle producten van voortbrengers, dit geeft relaties van de vorm $g_ig_j = g_{k(i,j)}$. Als we nu met een willekeurig woord w in de groepselementen starten dat $id \in G$ geeft, kunnen we w door toepassen van de relatie voor de laatste twee tekens om één teken korter maken. Door dit de herhalen komen we uiteindelijk naar een woord van lengte 2 dat $id \in G$ moet zijn, en dus noodzakelijk van de vorm gg^{-1} of $g^{-1}g$ is. We kunnen dus alle woorden die $id \in G$ geven tot het lege woord terug brengen.

Voor een gegeven stelsel voortbrengers moeten we eerst voor de groepselementen die geen voortbrengers zijn relaties van de vorm $g_i = w_i(g_1, \ldots, g_s)$ maken. Door $w_i := g_i$ voor de voortbrengers de definiëren, zijn we weer in de situatie van het eerste deel, als we alle w_i als voortbrengers van de groep beschouwen. De relaties zijn dan van de vorm $w_i w_j = w_{k(i,j)}$ en door de lengte in de w_i (niet in de g_i) te bekijken, volgt met hetzelfde argument als boven, dat we alle woorden tot het lege woord terug kunnen brengen. □

Natuurlijk is dit een typisch existentie bewijs, want we zouden het met $|G|^2$ relaties te maken hebben, wat al voor redelijk kleine groepen erg onhandig is. In het kader van de groepen die als puntgroepen in de kristallografie een rol spelen laat zich in feite altijd een stelsel met slechts een handvol relaties vinden.

Voorbeelden:

(1) We hebben al gezien dat de cyklische groep $\langle g \rangle \cong C_n$ de definiërende relatie g^n heeft.

(2) De diëdergroep $D_n = \langle r, s \rangle$ van orde $2n$ voortgebracht door een rotatie r van orde n en een spiegeling s heeft de definiërende relaties

$$r^n,\ s^2,\ sr = r^{-1}s.$$

Het is duidelijk dat deze relaties gelden, en als we een willekeurig woord in r en s hebben, kunnen we dit door herhaald toepassen van de derde relatie op de vorm $r^a s^b$ brengen. Volgens de eerste twee relaties mogen we a modulo n en b modulo 2 nemen. Maar de enige $0 \le a < n$ en $0 \le b < 2$ met $r^a s^b = 1$ zijn $a = b = 0$, dus kunnen we alle woorden in r en s die in D_n triviaal zijn uit de aangegeven relaties afleiden.

Het is in het algemeen niet makkelijk, om voor een gegeven groep definiërende relaties te vinden. Dit vraagstuk is een belangrijk onderwerp in de algoritmische groepentheorie dat het kader van deze cursus overstijgt. We zullen ons hier tot een paar opmerkingen beperken:

- Voor een permutatiegroep $G \le S_n$ laten zich definiërende relaties aan de hand van een *stabilisatorketen* $G = G_0 \ge G_1 \ge \ldots \ge G_r = \{1\}$ berekenen, waarbij $G_i := Stab_{G_{i-1}}(x_i)$ voor een $x_i \in \{1, \ldots, n\}$ is. De groep G_i is dus de (puntsgewijze) stabilisator van de punten $x_1, \ldots, x_i$. Het idee is, op elke level i van de stabilisatorketen voor elk punt x in de baan van x_i onder G_i een element aan te geven dat het punt x_i op x afbeeldt. Met behulp van deze elementen laten zich alle elementen van G in een eenduidige *normaalvorm* schrijven en uit deze normaalvorm laten zich definiërende relaties afleiden.

- Er zijn algoritmen om voor een stelsel relaties die in een groep G gelden te bepalen, wat de grootste groep is die aan deze relaties voldoet. Als de orde van deze groep gelijk is aan de orde van G, heeft men aangetoond dat de relaties definiërende relaties voor G zijn. De technieken die hierbij toegepast worden, staan bekend onder de naam *Todd-Coxeter restklassen aftelling*. Een probleem hierbij is dat het Todd-Coxeter algoritme alleen maar stopt als de groep eindig is, maar ook in dit geval geen grens aangegeven kan worden hoe snel het stopt. Als het algoritme na een tijd nog geen antwoord heeft gevonden, kan dit betekenen dat de grootste groep die aan de relaties voldoet oneindig is, maar dit hoeft niet zo te zijn.

  In de praktijk doet zich dit probleem in het kader van kristallografische groepen echter nooit voor, omdat de groepen hier redelijk overzichtelijk zijn.

- Als een groep een normaaldeler N heeft en definiërende relaties voor N en de factorgroep G/N bekend zijn, laten zich hiermee definiërende relaties voor G vinden. Als voortbrengers neemt men hierbij de voortbrengers van N en originelen in G van de voortbrengers van G/N. Voor de gekozen originelen in G moet de identiteit in de relaties voor G/N door een element van N vervangen worden en als verdere relaties moet de conjugatie werking van de originelen van de voortbrengers van G/N op de voortbrengers van N toegevoegd worden.

- Als men erin geslaagd is definiërende relaties voor een groep te vinden, is het gevonden stelsel van relaties vaak in hoge mate redundant en men probeert, het stelsel te vereenvoudigen. De eenvoudigste situatie hiervoor zijn relaties van de vorm xw waarbij x een voortbrenger is die in het woord w niet voorkomt. Met behulp van deze relatie laat zich x door de andere voortbrengers uitdrukken en is dus overbodig. Maar ook al laat zich zo het aantal voortbrengers reduceren, wordt de totale lengte van de relaties op deze manier vaak duidelijk langer. Een andere mogelijkheid is dus, een (kort) product in de voortbrengers dat op meerdere plaatsen in de relaties voorkomt door een nieuwe voortbrenger te vervangen. Op deze manier wordt het aantal voortbrengers verhoogd, maar de totale lengte van de relaties neemt af.

  Men heeft het hier te maken met het probleem strings over een alfabet volgens zekere regels te herschrijven, en de technieken die hierbij toegepast worden staan bekend onder de begrippen *Tietze transformaties* en *Knuth-Bendix* herschrijvingsmethoden.

Voorbeeld: We illustreren het voorlaatste punt door definiërende relaties voor S_4 uit definiërende relaties voor een normaaldeler en voor een factorgroep te construëren:

S_4 heeft een normaaldeler V_4 en er geldt $S_4/V_4 \cong S_3$. Definiërende relaties voor $V_4 \cong D_2 = \langle a = (1,2)(3,4), b = (1,3)(2,4)\rangle$ zijn $a^2, b^2, ab = ba$ en voor de factorgroep $S_3 \cong D_3 = \langle g = (1,2,3), h = (1,2)\rangle$ zijn $g^3, h^2, hg = g^{-1}h$ definiërende relaties.

We moeten nu originelen x en y van g en h in S_4 kiezen zo dat x onder het natuurlijke homomorfisme $S_4 \to S_4/V_4$ naar g en y naar h gaat. Maar omdat onze S_3 juist een complement van V_4 in S_4 is, mogen we hiervoor $x = g$ en $y = h$ kiezen. Er geldt $x^{-1}ax = ab$, $x^{-1}bx = a$, $y^{-1}ay = a$, $y^{-1}by = ab$ en omdat $x = g$ en $y = h$ hoeven we de relaties voor S_3 niet te veranderen. (Hadden we $y = (1, 3, 2, 4)$ in plaats van $y = h$ gekozen, hadden we de definiërende relaties voor S_3 moeten aanpassen, namelijk door $y^2 = a$ en $yx = x^{-1}yb$.)

Op de voortbrengers $a = (1, 2)(3, 4)$, $b = (1, 3)(2, 4)$, $x = (1, 2, 3)$, $y = (1, 2)$ heeft S_4 dus de definiërende relaties:

$$a^2, b^2, ab = ba, x^3, y^2, yx = x^{-1}y, x^{-1}ax = ab, x^{-1}bx = a, yay = a, yby = ab$$

waarbij we y in plaats van y^{-1} hebben geschreven, omdat $y^2 = 1$ is. We zien al in dit eenvoudig voorbeeld dat het erg wenselijk is stelsels van definiërende relaties te kunnen vereenvoudigen.

3.2.2 Frobenius congruenties

We gaan er vanaf nu van uit dat we voor de groepen die we als puntgroepen tegenkomen, definiërende relaties kunnen vinden.

Stel nu een gegeven puntgroep G heeft voortbrengers $g_1, \ldots, g_s$, dan definiëren we voor iedere voortbrenger g_i een formeel elementen X_i van de affiene groep dat als translatiedeel een vector in variabelen heeft. De voortbrengers X_i vullen we nu in de definiërende relaties van de puntgroep G in, de resulterende elementen hebben dan per definitie lineair deel $id \in G$ en de translatiedelen moeten in $\mathbb{Z}^n$ liggen.

3.23 Definitie Zij $G \leq GL_n(\mathbb{Z})$ een puntgroep met voortbrengers $g_1, \ldots, g_s$ en definiërende relaties $w_1, \ldots, w_r$ in de g_i. Voor $i = 1, \ldots, s$ zij

$$X_i := \left(\begin{array}{c|c} & x_{i1} \\ g_i & \vdots \\ & x_{in} \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$

waarbij de x_{ij} onbekenden zijn. Omdat de X_i ingevuld in de relaties w_j lineair deel $id \in G$ hebben, moeten de translatiedelen van deze elementen in $\mathbb{Z}^n$ liggen. De zo verkregen congruenties modulo $\mathbb{Z}$ in de onbekenden x_{ij} heten de *Frobenius congruenties* voor de puntgroep G (ter ere van Georg Frobenius die 1911 als eerste ruimtegroepen op deze manier heeft benaderd).

3.24 Opmerking De oplossingen van de Frobenius congruenties zijn juist representanten van de elementen van $C^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$. Door de inwendige derivaties $(g_i - id)v$ met $i = 1, \ldots, s$ te bepalen, vinden we uiteindelijk $H^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$. Merk op dat we voor elke voortbrenger dezelfde v moeten gebruiken.

3.25 Voorbeeld Zij $G := \langle r = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ s = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rangle \cong D_4$ de volledige symmetriegroep van het vierkantsrooster, dan heeft G de definiërende relaties $r^4, s^2, sr = r^{-1}s$.

Zij $R = \begin{pmatrix} 0 & -1 & a \\ 1 & 0 & b \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ en $S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & c \\ 0 & -1 & d \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Er geldt $R^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & a-b \\ 0 & -1 & a+b \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $R^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, de eerste relatie geeft dus geen beperking.

Verder is $S^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2c \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, dus moet $2c \in \mathbb{Z}$ zijn.

Er geldt $R^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -b \\ -1 & 0 & a \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, dus is $SR = \begin{pmatrix} 0 & -1 & a+c \\ -1 & 0 & -b+d \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, en $R^{-1}S = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -b+d \\ -1 & 0 & a-c \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Uit $SR = R^{-1}S$ volgen de vergelijkingen $a+b+c-d \in \mathbb{Z}$ en $a+b-c-d \in \mathbb{Z}$. Dit betekent dat de vector systemen aan de Frobenius congruenties

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \bmod \mathbb{Z}$$

moeten voldoen.

Voor de inwendige derivaties passen we $r - id$ en $s - id$ op de standaardbasis van $\mathbb{R}^2$ toe dit geeft met $e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ de inwendige derivatie $\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ en met $e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ de inwendige derivatie $\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \\ -2 \end{pmatrix}$. Met de inwendige derivaties kunnen we a en b op 0 brengen, dan blijven de relaties $2c \in \mathbb{Z}$ en $c + d \in \mathbb{Z}$ over, en hieruit volgt dat $H^1(G, \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2) = C_2$ en de vector systemen zijn $t_r = t_s = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ en $t'_r = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ en $t'_s = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

Om algemeen de Frobenius congruenties op te lossen, moeten we voor een matrix $A \in \mathbb{Z}^{m \times n}$ de vectoren $x \in \mathbb{R}^n$ bepalen die aan $Ax \in \mathbb{Z}^m$ voldoen. Hiervoor is het handig de matrix met behulp van geheeltallige elementaire rij- en kolomoperaties op diagonaalvorm te brengen.

3.26 Lemma *Zij $A \in \mathbb{Z}^{m \times n}$ een geheeltallige matrix. Laten verder $P \in GL_m(\mathbb{Z})$ en $Q \in GL_n(\mathbb{Z})$ zo dat $PAQ = D$ een diagonaalmatrix is met $D_{ii} = d_i \in \mathbb{Z}$, $d_i > 0$ voor $1 \leq i \leq r$ en $D_{ij} = 0$ elders.*

Dan zijn de oplossingen van $Ax \in \mathbb{Z}^m$ de lineaire combinaties van de vorm

$$a_1 d_1^{-1} Q e_1 + \ldots + a_r d_r^{-1} Q e_r + b_{r+1} Q e_{r+1} + \ldots + b_n Q e_n$$

waarbij $a_i \in \mathbb{Z}$ en $b_j \in \mathbb{R}$ (en e_i is de i-de vector in de standaardbasis van $\mathbb{R}^n$).

BEWIJS: Er geldt $Ax \in \mathbb{Z}^m \Leftrightarrow PAx \in \mathbb{Z}^m$, omdat $P \in GL_m(\mathbb{Z})$. Zij nu $x' = Q^{-1}x$, dan is $Ax \in \mathbb{Z}^m \Leftrightarrow PAQx' \in \mathbb{Z}^m \Leftrightarrow Dx' \in \mathbb{Z}^m$. De oplossingen van $Dx' \in \mathbb{Z}^m$ zijn de lineaire combinaties van de vorm $x' = a_1 d_1^{-1} e_1 + \ldots + a_r d_r^{-1} e_r + b_{r+1} e_{r+1} + \ldots + b_n e_n$ met $a_i \in \mathbb{Z}$ en $b_j \in \mathbb{R}$ en door dit met Q te vermenigvuldigen volgt de bewering. $\square$

3.27 Gevolg *De elementen*

$$a_1 d_1^{-1} Q e_1 + \ldots + a_r d_r^{-1} Q e_r$$

met $0 \le a_i < d_i$ zijn representanten van $H^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$. In het bijzonder is de orde van $H^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$ gelijk aan $\prod_{i=1}^r a_i$.

BEWIJS: Omdat $H^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$ eindig is, moeten de oplossingen met coëfficiënten $b_j \in \mathbb{R}$ van inwendige derivaties afkomstig zijn. Andersom vormen de inwendige derivaties een $\mathbb{R}$-vectorruimte, dus kunnen de inwendige derivaties geen elementen van eindige orde in $C^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$ zijn. $\square$

3.28 Opmerking Er zijn twee voor de hand liggende manieren om de inwendige derivaties uit te delen.

(1) De Frobenius congruenties worden zo als boven aangegeven opgelost en het gedeelte met de vrije parameters b_j wordt genegeerd.

(2) Er wordt eerst een basis voor de inwendige derivaties bepaald, op trapvorm gebracht en de bij de pivot elementen horende onbekenden worden als 0 gekozen. Vervolgens worden de Frobenius congruenties voor het gereduceerde aantal onbekenden opgesteld en opgelost. In dit geval kunnen er geen vrije parameters meer in de oplossingen zitten.

Deze aanpak is bijzonder handig als een van de voortbrengers geen eigenwaarde 1 heeft, want dan kan het translatiedeel van deze voortbrenger als de nulvector gekozen worden.

Opdracht 9 Zij $G_1 := \left\langle g = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right\rangle \le GL_3(\mathbb{Z})$, dan is $G_1 \cong C_6$ en g^6 is een definiërende relatie voor G_1.

Geef de ruimtegroepen R met puntgroep G_1 en translatierooster $\mathbb{Z}^3$ aan, door de verschillende vector systemen (gegeven door de vector t_g) tot op inwendige derivaties na te bepalen, d.w.z. tot op verschuivingen van de oorsprong.

Probeer de gevonden groepen meetkundig te beschrijven.

Een iets grotere groep die net zo als G_1 op het 3-dimensionale hexagonale rooster werkt is $G_2 := \left\langle g = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ h = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right\rangle \leq GL_3(\mathbb{Z})$. Er geldt $G_2 \cong C_6 \times C_2$ en definiërende relaties voor G_2 zijn $g^6, h^2, hghg^{-1}$.

Wat zijn in dit geval de vector systemen van ruimtegroepen met puntgroep G_2 en translatierooster $\mathbb{Z}^3$? •

Opdracht 10 De alternerende groep $A_5 := \langle a = (1,2)(3,4),\ b = (1,3,5)\rangle$ heeft de definiërende relaties $a^2, b^3, (ab)^5$. Door uitdelen naar de vaste vector van de 5-dimensionale permutatie representatie krijgt men de volgende 4-dimensionale voorstelling van A_5 over $\mathbb{Z}$:

$$G := \left\langle g = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},\ h = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \right\rangle \cong A_5.$$

Bepaal de vector systemen van ruimtegroepen met puntgroep G en translatierooster $\mathbb{Z}^4$ tot op inwendige derivaties na. •

3.2.3 Equivalentie van ruimtegroepen

Tot nu toe hebben we met behulp van de inwendige derivaties alleen maar ervoor gezorgd, dat we geen twee vector systemen kiezen die alleen maar door een verschuiving van de oorsprong verschillen. Maar natuurlijk zijn verschuivingen slechts een speciale soort van affiene transformaties en we zullen in het algemeen twee ruimtegroepen als equivalent beschouwen, als ze alleen maar door een affiene transformatie van de onderliggende ruimte verschillen.

3.29 Definitie Twee ruimtegroepen $R, R' \leq E_n(K)$ heten *affien equivalent* of gewoon *equivalent* als er een affiene transformatie is die R op R' afbeeldt.

3.30 Stelling (L. Bieberbach, 1911)
Twee ruimtegroepen zijn affien equivalent dan en slechts dan als ze isomorf zijn.

Bewijs: Het is duidelijk dat conjugatie met een affiene transformatie een isomorfisme is, daarom moeten we alleen maar aantonen, dat ieder isomorfisme α van R naar R' door een affiene conjugatie geïnduceerd is.

In een eerste stap kiezen we een roosterbasis $B = (b_1, \ldots, b_n)$ voor het translatierooster L van R. Dan is $B' = (\alpha(b_1), \ldots, \alpha(b_n))$ een roosterbasis van het translatierooster van R'. Omdat α een automorfisme is, heeft R' ten opzichte van de basis B' dezelfde lineaire delen als R ten opzichte van de basis B. Maar de transformatie van R' van zijn oorspronkelijke basis op de basis B' is een lineaire en dus natuurlijk ook affiene transformatie, dus komen de lineaire delen van R en R' inderdaad tot op een affiene transformatie overeen.

Vanaf nu mogen we dus aannemen dat R en R' dezelfde lineaire delen hebben, en door onze keuze van de roosterbasis hebben ze natuurlijk ook dezelfde translatieondergroep. Er geldt zelfs dat $\alpha_{|L}$ de identiteit is. Het enige verschil kan nu nog in het vector systeem liggen en we moeten aantonen dat de vector systemen alleen maar om een inwendige derivatie verschillen.

Zij $\{t_g \mid g \in G\}$ een vector systeem van R, dan is $\{t'_g = \alpha(t_g) \mid g \in G\}$ een vector systeem van R'. Voor $g, h \in G$ geldt $t_{gh} = t_g + gt_h + v_{g,h}$ waarbij $v_{g,h} \in L$ is. Omdat α een automorfisme is, geldt $\alpha(t_{gh}) = \alpha(t_g) + \alpha(gt_h) + \alpha(v_{g,h})$, maar wegens $v_{g,h} \in L$ is $\alpha(v_{g,h}) = v_{g,h}$. Hieruit volgt dat $t_{gh} - t'_{gh} = t_g - t'_g + g(t_h - t'_h)$ en dus is $\tau : G \to K^n, g \mapsto t_g - t'_g$ een derivatie van G met waarden in K^n. Maar we hadden gezien, dat alle derivaties met waarden in een vectorruimte inwendig zijn, dus is τ een inwendige derivatie en de vector systemen $\{t_g \mid g \in G\}$ en $\{t'_g =\mid g \in G\}$ verschillen alleen maar om een verschuiving van de oorsprong. □

Uit het bewijs wordt duidelijk dat ruimtegroepen alleen maar equivalent kunnen zijn als ze met betrekking tot een roosterbasis dezelfde lineaire delen hebben. Voor een ruimtegroep in normaalvorm (dus met betrekking tot een roosterbasis) is het translatierooster steeds $\mathbb{Z}^n$ en de puntgroep is een eindige ondergroep $G \leq GL_n(\mathbb{Z})$.

We hebben al gezien, hoe we in deze situatie kandidaten voor de verschillende vector systemen vinden, namelijk door representanten van de cohomologiegroep $H^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$ te bepalen. Maar de verschuivingen van de oorsprong zijn niet de enige transformaties die de puntgroep en het translatierooster kunnen bewaren. Omdat we met de inwendige derivaties de verschuivingen van de oorsprong al kunnen controleren, hoeven we alleen maar nog naar lineaire transformaties te kijken. Wat we nodig hebben is een lineaire transformatie T die $\mathbb{Z}^n$ invariant laat, dus moet $T \in GL_n(\mathbb{Z})$ zijn. Maar ook de puntgroep moet (onder conjugatie) invariant blijven, dus moet $T^{-1}GT = G$ zijn, en dit betekent dat T in de normalisator $N_{GL_n(\mathbb{Z})}(G)$ van G in $GL_n(\mathbb{Z})$ moet liggen.

De normalisator zijn we in feite al eerder tegen gekomen, bijvoorbeeld in het kader van het rechthoekrooster. Het rechthoekrooster heeft een basis van orthogonale maar verschillend lange vectoren. Het is echter niet vastgelegd welke vector de langere is, daarom is het verruilen van de basisvectoren een operatie die de meetkundige eigenschappen van de symmetrieën van het rechthoekrooster bewaart. Dit komt overeen met het feit dat de matrix $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ in de normalisator van de symmetriegroep van het rechthoekrooster ligt.

In het volgende voorbeeld gaan we na, wat de normalisator voor de vector systemen betekent.

3.31 Voorbeeld Zij $G := \left\langle r = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \ s = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\rangle \cong V_4$ de volledige symmetriegroep van het rechthoekrooster, dan heeft G de definiërende relaties $r^2, s^2, sr = rs$.

Omdat $r - id$ inverteerbaar is, kunnen we het translatiedeel van r door een inwendige derivatie op de nulvector brengen.

Zij dus $R = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ en $S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & a \\ 0 & -1 & b \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Er geldt $S^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2a \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, dus moet $2a \in \mathbb{Z}$ zijn.

Verder is $SR = \begin{pmatrix} -1 & 0 & a \\ 0 & 1 & b \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, en $RS = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -a \\ 0 & 1 & -b \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, hieruit volgt $2a \in \mathbb{Z}$ en $2b \in \mathbb{Z}$.

Als we altijd $t_r = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ zetten, krijgen we de verschillende vector systemen met $t_s \in \{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}\}$ en $H^1(G, \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2) \cong C_2 \times C_2$.

Maar bij een rechthoekrooster weten we alleen maar, dat er twee verschillend lange orthogonale basisvectoren zijn, dus mogen we de basisvectoren verruilen zonder hun meetkundige eigenschappen te veranderen. Het verruilen van de basisvectoren is juist een conjugatie met de matrix $n = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ die G invariant laat, die dus in de normalisator van G in $GL_n(\mathbb{Z})$ ligt.

Maar onder conjugatie met n worden s en rs verruild, en dit betekent dat het vector systeem met $t_s = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}$ getransformeerd wordt in het vector systeem met $t_s = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$. Deze twee vector systemen horen dus bij dezelfde ruimtegroep, omdat een transformatie met een element uit de normalisator de puntgroep ongedeerd laat.

3.32 Opmerking Soms wordt de normalisator in het kader van ruimtegroepen ook de *symmetrie der symmetrieën* genoemd. De elementen van de normalisator beelden namelijk juist symmetrieëlementen van dezelfde soort op elkaar af, bijvoorbeeld spiegelingsvlakken of -lijnen of rotatieassen.

3.33 Stelling *De normalisator $N := N_{GL_n(\mathbb{Z})}(G)$ werkt op $C^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$ en onder deze werking blijft $B^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$ invariant, dus werkt N op de cohomologiegroep $H^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$.*

Bewijs: Zij $\{t_g \mid g \in G\}$ een vector systeem van G en zij $n \in N$. Er geldt

$$\left(\begin{array}{c|c} n & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} g & t_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} n^{-1} & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} ngn^{-1} & nt_g \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$

en dus is

$$\left(\begin{array}{c|c} n & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} n^{-1}gn & t_{n^{-1}gn} \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} n^{-1} & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} g & nt_{n^{-1}gn} \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right).$$

We moeten aantonen dat de afbeelding $\tau : G \to K^n, g \mapsto nt_{n^{-1}gn}$ modulo $\mathbb{Z}^n$ een cocykel is. Er geldt

$$\begin{aligned}\tau(gh) &= nt_{n^{-1}ghn} = nt_{(n^{-1}gn)(n^{-1}hn)} \\ &\equiv n(t_{n^{-1}gn} + n^{-1}gnt_{n^{-1}hn}) = n(t_{n^{-1}gn} + gnt_{n^{-1}hn} = \tau(g) + g\tau(h),\end{aligned}$$

dus is τ inderdaad een cocykel met waarden in $K^n/\mathbb{Z}^n$.

Voor een inwendige derivatie geldt dat t_g (modulo $\mathbb{Z}^n$) van de vorm $(g-id)v$ is voor een vaste $v \in K^n$. Maar voor het beeld onder conjugatie met n geldt dan

$$nt_{n^{-1}gn} = n(n^{-1}gn - id)v = gnv - nv = (g - id)nv$$

en dus is dit ook een inwendige derivatie. □

3.34 Stelling *De affiene equivalentieklassen van ruimtegroepen met puntgroep G zijn in bijectie met de banen van $N := N_{GL_n(\mathbb{Z})}(G)$ op $H^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$.*

Bewijs: Het is duidelijk dat twee ruimtegroepen met vector systemen die met derivaties in dezelfde baan onder N corresponderen equivalent zijn. Omgekeerd hebben we gezien dat we equivalente ruimtegroepen zo kunnen schrijven dat ze dezelfde puntgroep en hetzelfde translatierooster hebben. Maar dan moet een affiene afbeelding die een op de andere transformeert noodzakelijk een lineair deel in N hebben. □

3.35 Opmerking De methode om voor een gegeven puntgroep G met behulp van de Frobenius congruenties voor definiërende relaties van G de cohomologiegroep $H^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$ te berekenen en vervolgens de ruimtegroepen tot op affiene equivalentie na als banen van de normalisator $N_{GL_n(\mathbb{Z})}(G)$ op $H^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$ te bepalen, staat bekend als *Zassenhaus-algoritme*, ter ere van Hans Zassenhaus die deze aanpak 1948 heeft voorgesteld.

Opdracht 11 De puntgroep G voortgebracht door

$$g = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \; h = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

heeft de presentatie $\langle x, y \mid x^6, y^2, (xy)^3, (x^3y)^2 \rangle$.

Omdat $g - id$ inverteerbaar is, kan het translatiedeel van g als de nulvector gekozen worden.

De normalisator $N := N_{GL_n(\mathbb{Z})}(G)$ van G bevat de matrix $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ die de tweede en derde basisvectoren verruilt.

Bepaal de oplossingen van de Frobenius congruenties voor G (met $t_g = 0$) en ga na welke van de verkregen vector systemen in een baan onder de werking van N liggen. Bepaal op deze manier de niet-equivalente ruimtegroepen met puntgroep G. •

Hoofdstuk 4

Ondergroepen van ruimtegroepen

In dit hoofdstuk behandelen we ondergroepen van ruimtegroepen. Omdat ruimtegroepen oneindige groepen zijn, is dit een iets subtieler vraagstuk dan bij eindige groepen. Maar in feite zijn vooral twee situaties van interesse, die bij het geval van eindige groepen aansluiten:

- Eindige ondergroepen: dit zijn de stabilisatoren van punten en geven aanleiding tot de *Wyckoff posities*
- Ondergroepen van eindige index: deze spelen een belangrijke rol bij fase overgangen van kristallen (bij het verhitten en/of afkoelen).

  Verder laten zich ook de *kleurgroepen* door ondergroepen van eindige index beschrijven.

4.1 Definitie Zij R een ruimtegroep.

(i) Een ondergroep $S \leq R$ heet *roostergelijk* of *translatiegelijk* als $T(R) \leq S$, d.w.z. de translatieondergroepen van S en R zijn gelijk.

(ii) Een ondergroep $S \leq R$ heet *klassengelijk* $\Pi(S) = \Pi(R)$, d.w.z. de puntgroepen van S en R zijn gelijk.

4.2 Stelling *(Stelling van Hermann) Voor iedere ondergroep $S \leq R$ van een ruimtegroep R is er een unieke ondergroep $S \leq M \leq R$ zo dat $T(M) = T(R)$ en $\Pi(S) = \Pi(M)$. M.a.w. is S (op een unieke manier) een klassengelijke ondergroep van een roostergelijke ondergroep van R.*

BEWIJS: Definieer $M := \langle S, T(R) \rangle$, dan is $T(M) = T(R)$ en $\Pi(S) = \Pi(M)$. Verder geldt $\langle S, T(M) \rangle = \langle S, T(R) \rangle = M$.

Zij nu M' een verdere groep met $T(M') = T(R)$ en $\Pi(S) = \Pi(M')$. Dan is $M' = \langle S, T(M') \rangle = \langle S, T(M) \rangle = M$. □

4.3 Gevolg *Iedere maximale ondergroep van een ruimtegroep is een klassengelijke ondergroep of een roostergelijke ondergroep.*

4.1 Eindige ondergroepen

Een belangrijke vraag bij de analyse van kristallen is de precieze posities van de atomen te bepalen. Deze liggen in het algemeen niet op de punten van het onderliggende translatierooster, aan de andere kant liggen er meestal slechts weinig atomen in de eenheidscel van het rooster. Het blijkt dat de atomen vooral op posities zitten die een niet-triviale stabilisator in de ruimtegroep hebben.

We zullen daarom in deze sectie de stabilisatoren van punten bepalen en vervolgens hieruit de interessante posities voor de atomen afleiden, de zogeheten *Wyckoff posities*.

4.1.1 Plaats-symmetrie groepen

4.4 Definitie Zij R een n-dimensionale ruimtegroep en $x \in \mathbb{R}^n$. Dan heet $R_x := Stab_R(x) := \{g \in R \mid g(x) = x\}$ de *plaats-symmetrie groep* van x.

4.5 Lemma *Iedere plaats-symmetrie groep is eindig.*

Bewijs: Omdat een translatie geen punt vast laat, bevat een plaats-symmetrie groep geen translaties. Maar dan bevat R_x voor ieder element uit de puntgroep van R hoogstens een element en is dus eindig. □

4.6 Gevolg *Voor een plaats-symmetrie groep $R_x \leq R$ induceert het homomorfisme Π een isomorfisme op een ondergroep van de puntgroep $\Pi(R)$ van R.*

Bewijs: Omdat ieder lineair deel van $\Pi(R)$ in R_x hoogstens een keer voorkomt is de beperking van Π op R_x injectief. □

4.7 Lemma *In de baan van x onder R wordt iedere punt $|R_x|$ keer verkregen.*

Bewijs: Zij $g, g' \in R$ met $g(x) = y$ en $g'(x) = y$. Dan is $g^{-1}g'(x) = x$, d.w.z. $g^{-1}g' = h \in R_x$ en dus is $g' = gh$ met $h \in R_x$. Dit betekent dat de elementen die x op y afbeelden juist een restklasse van R_x in R vormen en het er dus $|R_x|$ elementen zijn. □

4.8 Gevolg *Zij R een n-dimensionale ruimtegroep met translatierooster L. Voor een roosterbasis $(b_1, \ldots, b_n)$ van L zij $C := \{\sum_{i=1}^n c_i b_i \mid 0 \leq c_i < 1\}$ de eenheidscel van L.*

Dan liggen er $|\Pi(R)|/|R_x|$ verschillende punten van de baan van x onder R in C.

Bewijs: Er zijn $|\Pi(R)|$ elementen $g \in R$ zo dat $g(x)$ in de eenheidscel C ligt, namelijk precies één uit iedere restklasse $gT(R)$. Maar iedere punt in de baan van x wordt $|R_x|$ keer verkregen, dus is het aantal verschillende punten van de baan in C juist $|\Pi(R)|/|R_x|$. □

We kunnen dus aan de hand van de baan van een punt de orde van zijn plaats-symmetrie groep aflezen. Omdat er meestal slechts weinig atomen van dezelfde soort in een eenheidscel liggen, zullen deze meestal op punten met een grotere plaats-symmetrie groep liggen. Dit geeft aanleiding tot een classificatie van de punten in $\mathbb{R}^n$ volgens hun plaats-symmetrie groepen.

4.1.2 Wyckoff posities

De eenvoudigste classificatie van punten in $\mathbb{R}^n$ onderscheid alleen maar of de plaats-symmetrie groep triviaal is of niet.

4.9 Definitie Zij R een n-dimensionale ruimtegroep.

(i) Een punt $x \in \mathbb{R}^n$ met $R_x = \{1\}$ heet een punt in *algemene positie.*

(ii) Een punt $x \in \mathbb{R}^n$ met $R_x \neq \{1\}$ heet een punt in *speciale positie.*

De elementen in de baan van een punt in algemene positie zijn in bijectie met de elementen van de ruimtegroep. Dit betekent dat de ruimtegroep volledig uit de baan van een punt in algemene positie gereconstrueerd kan worden.

4.10 Lemma *Zij G een groep die op een verzameling X werkt. Dan hebben punten in een baan onder G geconjugeerde stabilisatoren. Preciezer gezegd geldt voor $x, y \in X$ met $g \cdot x = y$ dat $G_y = gG_xg^{-1}$.*

BEWIJS: Zij $g(x) = y$ en G_x de stabilisator van x in G. Dan is $gG_xg^{-1} \subseteq G_y$, want voor $h \in G_x$ is $ghg^{-1}(y) = gh(x) = g(x) = y$. Maar omgekeerd volgt ook dat $g^{-1}G_yg \subseteq G_x$, dus is $G_y = gG_xg^{-1}$. □

Punten die in een baan onder de ruimtegroep liggen, kunnen zeker als equivalent beschouwd worden, daarom worden posities met geconjugeerde plaats-symmetrie groepen in een klasse samengevat.

4.11 Definitie Zij R een n-dimensionale ruimtegroep.

(i) Twee punten $x, y \in \mathbb{R}^n$ behoren tot dezelfde *Wyckoff positie* als R_x en R_y geconjugeerd in R zijn.

(ii) Twee punten $x, y \in \mathbb{R}^n$ behoren tot dezelfde *Wyckoff set* als R_x en R_y geconjugeerd in de affiene normalisator van R zijn.

Een methode om de Wyckoff posities te bepalen maakt gebruik van de volgende opmerking.

4.12 Lemma *Zij $S \leq R$ met $\Pi(S)$ voortgebracht door $g_1, \ldots, g_s \in \Pi(R)$ en laten $\{g_1 \mid t_1\}, \ldots, \{g_s \mid t_s\} \in R$ corresponderende elementen in R zijn.*
Dan heeft $x \in \mathbb{R}^n$ stabilisator R_x met $\Pi(R_x) = \Pi(S) \Leftrightarrow \exists u_1, \ldots, u_s \in \mathbb{Z}^n$ met $g_ix + t_i + u_i = x$, d.w.z. als $(g_i - id)x \equiv -t_i \bmod \mathbb{Z}^n$ voor alle i.

BEWIJS: De elementen in R met $\Pi(g) = g_i$ zijn van de vorm $\{g_i \mid t_i + u_i\}$ voor $u_i \in \mathbb{Z}^n$ en x is een vast punt voor zo'n element als $g_ix + t_i + u_i = x$. Het is duidelijk dat x dan een vast punt onder de groep voortgebracht door de $\{g_i \mid t_i + u_i\}$ is. □

4.13 Voorbeeld Zij R de 2-dimensionale ruimtegroep (met symbool `p2mm`) voortgebracht door $g := \left(\begin{array}{cc|c} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ en $h := \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ (en de translaties van $\mathbb{Z}^2$). Dan is $\Pi(R)$ een Klein viergroep V_4 en heeft drie ondergroepen van orde 2, voortgebracht door $g_1 := \Pi(g)$, $g_2 := \Pi(h)$ en $g_3 = g_1 g_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Voor deze drie ondergroepen kijken we nu naar de congruentie $(g_i - id)x \equiv 0 \bmod \mathbb{Z}^2$.

(1) $(g_1 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2x \\ 0 \end{pmatrix}$. In dit geval moet dus $x \in \{0, \frac{1}{2}\}$ zijn en y is een vrije coördinaat.

(2) $(g_2 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -2y \end{pmatrix}$. In dit geval moet dus $y \in \{0, \frac{1}{2}\}$ zijn en x is een vrije coördinaat.

(3) $(g_3 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2x \\ -2y \end{pmatrix}$. In dit geval moet dus $x, y \in \{0, \frac{1}{2}\}$ zijn.

De speciale posities met $\Pi(R_x) = \langle g_1 \rangle$ zijn dus $(0, y)$ en $(\frac{1}{2}, y)$, de banen (beperkt op de eenheidscel) zijn $(0, y), (0, -y)$ en $(\frac{1}{2}, y), (\frac{1}{2}, -y)$. Voor deze ondergroep van de puntgroep vinden we dus twee Wyckoff posities.

De speciale posities met $\Pi(R_x) = \langle g_2 \rangle$ zijn $(x, 0)$ en $(x, \frac{1}{2})$, de banen (beperkt op de eenheidscel) zijn $(x, 0), (-x, 0)$ en $(x, \frac{1}{2}), (-x, \frac{1}{2})$. Ook Voor deze ondergroep van de puntgroep zijn er dus twee Wyckoff posities.

Het geval $\Pi(R_x) = \langle g_3 \rangle$ is interessanter, want in dit geval zien we dat de gevonden posities banen van lengte 1 hebben (in de eenheidscel) en er dus een plaats-symmetrie groep met $|R_x| = 4$ bij hoort. Dit kunnen we ook anders zien, want de posities die invariant voor g_3 zijn, zijn ook invariant voor g_1 en g_2. Deze ondergroep van de puntgroep is dus een voorbeeld van een groep die niet als plaats-symmetrie groep voorkomt, omdat alle vast punten een echt grotere stabilisator hebben.

De vier posities $(0, 0)$, $(0, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ vormen vier aparte Wyckoff posities met plaats-symmetrie groepen isomorf met de volle viergroep $\Pi(R)$.

Op basis van het bovenstaande lemma krijgen we een algoritme voor het bepalen van speciale posities dat een kernidee met het algoritme voor vector systemen deelt. We kijken eerst naar het geval van een symmorfe ruimtegroep, d.w.z. we kunnen aannemen dat de translatie delen $t_i = 0$ zijn.

4.14 Algoritme (symmorf geval) Laten $g_1, \ldots, g_s$ voortbrengers van een ondergroep $H \leq \Pi(R)$ zijn. Schrijf de g_i boven elkaar in een $ns \times n$ matrix A. Dan is $x \in \mathbb{R}^n$ een vast punt voor een plaats-symmetrie groep R_x met $\Pi(R_x) = H$ als $Ax \equiv 0 \bmod \mathbb{Z}^n$.

Breng A op Smith normaal vorm, d.w.z. bepaal $P \in GL_{ns}(\mathbb{Z})$ en $Q \in GL_n(\mathbb{Z})$ zo dat PAQ een diagonaal matrix $D = (d_1, \ldots, d_r, 0, \ldots, 0)$ is. Dan is $Ax \in \mathbb{Z}^n \Leftrightarrow PAQ(Q^{-1}x) \in \mathbb{Z}^n \Leftrightarrow D(Q^{-1}x) \in \mathbb{Z}^n$. Voor $1 \leq i \leq r$ moet dan

$Q^{-1}x = \frac{1}{d_i}e_i$ zijn, dus $x = \frac{1}{d_i}Qe_i$, m.a.w. x is de i-de rij van Q, gedeeld door d_i. De kolommen $r+1, \ldots, n$ van Q leveren vrije parameters op.

Om te zien wat er in het niet-symmorfe geval verandert, kijken we naar twee voorbeelden die aan het voorbeeld `p2mm` van boven gerelateerd zijn (namelijk alleen maar andere vector systemen hebben).

4.15 Voorbeelden Zij R de 2-dimensionale ruimtegroep (met symbool `p2mg`) voortgebracht door $g := \left(\begin{array}{cc|c} -1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ en $h := \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ (en de translaties van $\mathbb{Z}^2$). We kijken nu naar de congruentie $(g_i - id)x + t_i \equiv 0 \bmod \mathbb{Z}^2$.

(1) $(g_1 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2x + \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}$. In dit geval moet dus $x \in \{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\}$ zijn en y is een vrije coördinaat.

(2) $(g_2 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -2y \end{pmatrix}$. Dit heeft natuurlijk geen oplossing.

(3) $(g_3 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2x \\ -2y \end{pmatrix}$. In dit geval moet dus $x, y \in \{0, \frac{1}{2}\}$ zijn.

We krijgen dus voor g_1 een posities, namelijk de baan $(\frac{1}{4}, y), (\frac{3}{4}, -y)$.

Omdat er voor g_2 geen vast punt is, kan ook de hele puntgroep geen vaste punt hebben.

De vier oplossingen voor g_3 vallen in twee banen, namelijk $(0,0), (\frac{1}{2}, 0)$ en $(0, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

Zij nu R de 2-dimensionale ruimtegroep (met symbool `p2gg`) voortgebracht door $g := \left(\begin{array}{cc|c} -1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ en $h := \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & -1 & \frac{1}{2} \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ (en de translaties van $\mathbb{Z}^2$). We kijken weer naar de congruentie $(g_i - id)x + t_i \equiv 0 \bmod \mathbb{Z}^2$.

(1) $(g_1 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2x + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$. Dit heeft geen oplossing.

(2) $(g_2 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -2y + \frac{1}{2} \end{pmatrix}$. Dit heeft ook geen oplossing.

(3) $(g_3 - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2x \\ -2y \end{pmatrix}$. In dit geval moet dus weer $x, y \in \{0, \frac{1}{2}\}$ zijn.

We krijgen dus alleen maar voor g_3 speciale posities. Deze vallen in twee banen, namelijk $(0,0), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ en $(0, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 0)$.

Het verschil van het algemene geval tegenover het symmorfe geval is dat we nu met een inhomogeen stelsel lineaire congruenties te maken hebben. Maar net zo als bij stelsels lineaire vergelijkingen hoeven we alleen maar één particuliere oplossing te bepalen en krijgen dan alle oplossingen door combinatie met de oplossingen van het homogene stelsel. Dit geeft aanleiding tot het volgende algoritme voor het algemene geval.

4.16 Algoritme (algemeen geval) Laten $g_1, \ldots, g_s$ voortbrengers van een ondergroep $H \le \Pi(R)$ zijn. Schrijf de g_i boven elkaar in een $ns \times n$ matrix A en de $-t_i$ boven elkaar in een vector b. Dan is $x \in \mathbb{R}^n$ een vast punt voor een plaats-symmetrie groep R_x met $\Pi(R_x) = H$ als $Ax \equiv b \bmod \mathbb{Z}^n$.

Breng A op Smith normaal vorm, d.w.z. bepaal $P \in GL_{ns}(\mathbb{Z})$ en $Q \in GL_n(\mathbb{Z})$ zo dat PAQ een diagonaal matrix $D = (d_1, \ldots, d_r, 0, \ldots, 0)$ is. Dan is $Ax \equiv b \bmod \mathbb{Z}^n \Leftrightarrow PAQ(Q^{-1}x) \equiv Pb \bmod \mathbb{Z}^n \Leftrightarrow D(Q^{-1}x) \equiv Pb \bmod \mathbb{Z}^n$. Dit is alleen maar oplosbaar als alleen maar in de eerste r componenten van Pb elementen $\neq 0$ voorkomen. Dan vinden we een oplossing door eerst de i-de component van Pb door d_i te delen en de zo verkregen vector met Q te vermenigvuldigen.

Wyckoff sets

Voor de overgang van Wyckoff posities naar Wyckoff sets hebben we de affiene normalisator van R nodig. Bijvoorbeeld ligt in het voorbeeld `p2mm` de matrix $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ die de twee coördinaten verruild in de normalisator. Hierdoor vallen de Wyckoff posities $(x, 0)$ en $(0, y)$ in een Wyckoff set, net zo als $(x, \frac{1}{2})$ en $(\frac{1}{2}, y)$.

Zo als in het kader van het Zassenhaus algoritme al opgemerkt kan het bepalen van de affiene normalisator een moeilijk probleem zijn. Vaak is echter al het translatiedeel van de normalisator voldoende om te zien welke Wyckoff posities in dezelfde Wyckoff set vallen.

4.17 Propositie *Zij R een ruimtegroep met puntgroep $\Pi(R)$ voortgebracht door $g_1, \ldots, g_s$. Dan ligt de translatie $\{id \mid v\}$ in de affiene normalisator van R $\Leftrightarrow$ $(g_i - id)v \in \mathbb{Z}^n$ voor alle $1 \le i \le s$.*

Bewijs: Dit volgt rechtstreeks uit het conjugeren van $\{g \mid t\}$ met $\{id \mid v\}$:

$$\left(\begin{array}{c|c} id & -v \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} g & t \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} id & v \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} g & gv + t - v \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$$

dus moet $gv - v \in \mathbb{Z}^n$ zijn.

4.18 Voorbeeld Zij R een ruimtegroep met puntgroep voortgebracht door $g = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ en $h = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ (dus een van de groepen `p2mm`, `p2mg`, `p2gg`).

Dan is het translatiedeel van $N_{\mathcal{A}_n}(R)$ gelijk aan $\frac{1}{2}\mathbb{Z}^2$, want uit $(g - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{Z}^2$ volgt $2x \in \mathbb{Z}$ en uit $(h - id)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{Z}^2$ volgt $2y \in \mathbb{Z}$. In het bijzonder liggen dus de posities $(0, 0)$ en $(0, \frac{1}{2})$ in dezelfde Wyckoff set.

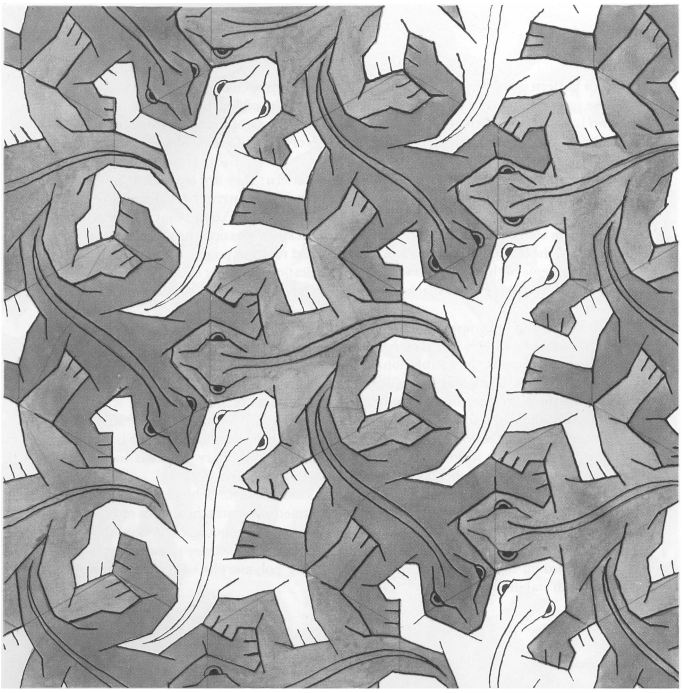
4.2 Ondergroepen van eindige index

Als kristallen verhit of afgekoeld worden, vinden er vaak faseovergangen plaats waarbij de symmetrie verandert. Echter zijn de symmetriegroepen van de twee fasen meestal nauw gerelateerd, meestal is één een ondergroep van redelijk kleine index in de andere. Om faseovergangen goed te kunnen beschrijven is daarom kennis van de ondergroepen van een ruimtegroep cruciaal.

Voordat we het probleem behandelen hoe de ondergroepen van eindige index in een ruimtegroep er uit zien, geven we eerst nog een toepassing waarbij ondergroepen een belangrijke rol spelen.

4.2.1 Kleurgroepen

In zijn beroemde regelmatige vlakvullingen maakt M.C. Escher vaak gebruik van congruente tegels met verschillende kleuren. Men krijgt dan met symmetrieoperaties te maken die wel het patroon van tegels invariant laten, maar wel de kleuren veranderen. Hierbij veranderen te tegels op een gelijkvormige manier van kleur: alle tegels van een kleur krijgen dezelfde nieuwe kleur. Dit geeft aanleiding tot het concept van *kleursymmetrieën*. Raar genoeg heeft Escher dit concept al lang in zijn prenten gebruikt voordat de kristallografen een goede definitie ervan hebben gegeven.



Reptielen van M.C. Escher

4.19 Definitie Zij X een kristal structuur met ruimtegroep R. Neem aan dat ieder punt in X één van n kleuren heeft, d.w.z. er is een afbeelding $c : X \to \{1, \ldots, n\}$.

Dan heet $g \in R$ een *kleursymmetrie* als g op de kleuren werkt, d.w.z. als $c(x) = c(y) \Rightarrow c(g(x)) = c(g(y))$ voor alle $x, y \in X$.

De verzameling van kleursymmetrieën van X vormt de *kleurgroep* van X.

In het plaatje *Reptielen* van Escher verruilen bijvoorbeeld de rotaties van orde 3 de drie kleuren (wit, licht grijs, donker grijs) terwijl de translaties alle kleuren vast laten.

Natuurlijk kunnen we de waarden van de afbeelding c ook met iets anders dan kleuren identificeren. Belangrijke voorbeelden zijn:

- soorten van atomen;
- elektrische lading;
- magnetisch moment;
- spin (*up* en *down*) van een elementair deeltje.

We zullen van nu af aannemen dat R een kleurgroep is die transitief op de kleuren werkt. Dit is geen beperking, want een patroon waarbij de kleurgroep niet transitief op de kleuren werkt laat zich in de banen van de kleurgroep opsplitsen en de groep is dan transitief op iedere baan.

4.20 Lemma *Zij R een kleurgroep die transitief op n kleuren werkt.*

(i) De stabilisator $R_1 := \{g \in R \mid c(g(x)) = 1 \forall x \text{ met } c(x) = 1\}$ van de eerste kleur is een ondergroep van index n in R.

(ii) Voor $g \in R$ met $c(g(x)) = i$ voor x met $c(x) = 1$ is gR_1g^{-1} de stabilisator van de i-de kleur.

(iii) De normaaldeler $R_0 := \bigcap_{g \in R} gR_1g^{-1} \trianglelefteq R$ werkt triviaal op de kleuren.

(iv) De quotiënt R/R_0 is isomorf met een transitieve ondergroep van de symmetrische groep S_n.

Bewijs:

(i) De index van de stabilisator is gelijk aan de lengte van de baan, dus is $[R : R_1] = n$, want R is transitief op de n kleuren.

(ii) We hebben al eerder bewezen dat voor een groep die op een verzameling werkt de stabilisatoren van punten in een baan geconjugeerd zijn.

(iii) Voor de doorsnede R_0 is in feite alleen maar een doorsnede over een stelsel $\{g_1, \ldots, g_n\}$ van restklassen representanten van R_1 in R nodig. Deze g_i kunnen zo gekozen worden dat $c(g_i(x)) = i$ voor x met $c(x) = 1$. Dan is $R_i := g_iR_1g_i^{-1}$ de stabilisator van de i-de kleur en de elementen in R_0 laten alle n kleuren vast.

(iv) Als we met $\varepsilon : R \to S_n$ het homomorfisme noteren dat een element van R op de geïnduceerde permutatie van de kleuren afbeeldt, is $R_0 = \ker(\varepsilon)$.

□

In een kleurgroep is dus de ruimtelijke werking van een ruimtegroep R met de werking van een ondergroep van $H \leq S_n$ gecombineerd die isomorf met een factor groep van R is. Dit laat zich als volgt formaliseren:

4.21 Lemma *Zij R een ruimtegroep, $H \leq S_n$ en $\varepsilon : R \to H$ een epimorfisme. Dan is $R|H := \{(g,h) \in R \times H \mid \varepsilon(g) = h\}$ een ondergroep van $R \times H$ die isomorf met R is.*

Bewijs: Omdat voor iedere $g \in R$ de tweede component van $(g,h) \in R \times H$ door $\varepsilon(g)$ vastgelegd is, is $R|H \cong R$. □

4.22 Opmerking De constructie hier boven is een speciaal geval van een zogeheten *subdirect product*. Een subdirect product van twee groepen G en H is een ondergroep van het directe product $G \times H$ zo dat de projecties op de twee componenten nog steeds surjectief is. Dit laat zich als volgt realiseren: Zij $G_1 \trianglelefteq G$ en $H_1 \trianglelefteq H$ zo dat $G/G_1 \cong N \cong H/H_1$. Dan zijn er epimorfismen $\varepsilon_1 : G \to N$ en $\varepsilon_2 : H \to N$ met $\ker(\varepsilon_1) = G_1$ en $\ker(\varepsilon_2) = H_1$. Dan noemt men $\{(g,h) \in G \times H \mid \varepsilon_1(g) = \varepsilon_2(h)\}$ een subdirecte product van G en H met geïdentificeerde factorgroep N. Merk op dat voor dezelfde N verschillende epimorfismen tot verschillende subdirecte producten kunnen leiden.

We hebben gezien dat de werking van een kleurgroep aanleiding geeft tot een ondergroep van index n (de stabilisator van een kleur). Omgekeerd laat zich de werking van een kleurgroep uit een ondergroep van index n reconstrueren. Dit is in feite een algemene uitspraak over permutatie voorstellingen van groepen.

4.23 Definitie Een *permutatie voorstelling* van graad n van een groep G is een homomorfisme $\pi : G \to S_n$. Als $\pi(G)$ een transitieve ondergroep van S_n is noemt men dit een *transitieve* permutatie voorstelling.

Twee permutatie voorstellingen π en π' heten *equivalent* als ze alleen maar om een hernummering van de punten $\{1, \ldots, n\}$ verschillen, d.w.z. als $\pi'(g) = \rho \circ \pi(g)$ voor alle $g \in G$ voor een $\rho \in S_n$.

4.24 Stelling *Iedere transitieve permutatie voorstelling van een groep G wordt verkregen als de actie van G op de restklassen van een ondergroep $H \leq G$ met $[G : H] = n$.*

Twee van deze permutatie voorstellingen zijn equivalent dan en slechts dan als de ondergroepen geconjugeerd zijn.

Bewijs: Zij $H := \{h \in G \mid \pi(h) \in Stab(1)\}$ de stabilisator van 1 (in de permutatie voorstelling), dan is $[G : H] = 1$. Verder zij voor $i \in \{1, \ldots n\}$ $g_i \in G$ zo dat $\pi(g_i)(1) = i$. Dan zijn g_iH de restklassen van H in G, want voor $g \in G$ met $\pi(g)(1) = i$ is $g \in g_iH$. M.a.w. bevat g_iH juist de elementen g waarvoor $\pi(g)$ het punt 1 op i afbeeldt.

Als we de restklasse g_iH met het punt i identificeren, is de werking van g op de restklassen (door vermenigvuldiging van links) gelijk aan $\pi(g)$: Er geldt $gg_iH = g_jH$ d.e.s.d.a. $\pi(gg_i)$ het punt 1 naar j afbeeldt, dus als $\pi(g)$ het punt i naar j afbeeldt.

Stel dat $\{g_1, \dots, g_n\}$ een transversaal van H in G is en zij $H' = xHx^{-1}$ een geconjugeerde ondergroep. Dan is $\{g_1x^{-1}, \dots, g_nx^{-1}\}$ een transversaal van H' in G. De actie van G op de restklassen van H en van H' zijn gelijk als we g_iH met $g_ix^{-1}H' = g_iHx^{-1}$ identificeren, want $gg_ix^{-1}H' = g_jx^{-1}H' \Leftrightarrow gg_iHx^{-1} = g_jHx^{-1} \Leftrightarrow gg_iH = g_jH$.

Omgekeerd is een equivalente permutatie voorstelling gekarakteriseerd door het beeld van het vaste punt, zeg i. Er geldt $gg_iH = g_iH \Leftrightarrow g \in g_iHg_i^{-1}$. □

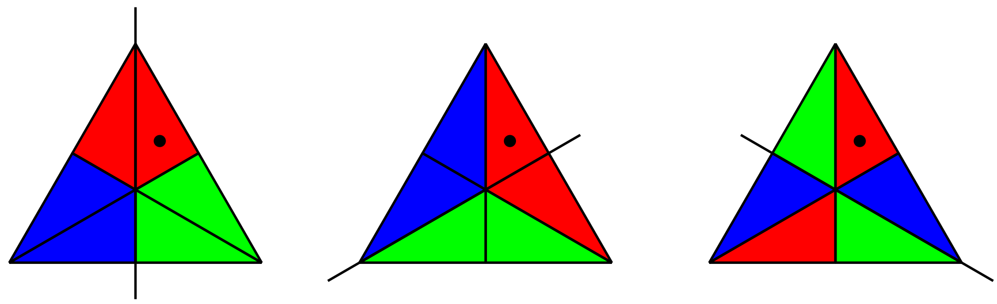
4.25 Gevolg *Voor een gegeven ruimtegroep R corresponderen de kleurgroepen met n kleuren met de conjugatieklassen van ondergroepen van index n in R.*

Net zo als voor een ruimtegroep een kristal patroon met deze ruimtegroep verkregen kan worden door de baan van een punt in algemene positie te construeren, kan ook een kleuring (van een kristal patroon) als een baan onder een kleurgroep aangemaakt worden. Echter ligt hier nog een subtiel probleem, want het punt in algemene positie kan ten opzichte van de ondergroep van index n verschillende posities hebben. Er zijn twee mogelijke standpunten:

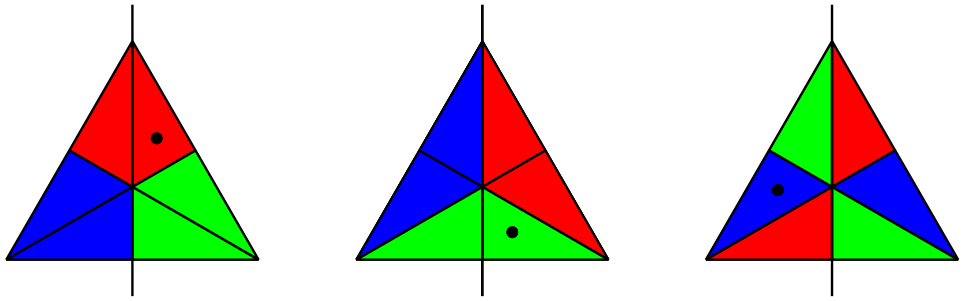
- voor een gegeven punt in algemene positie geven geconjugeerde ondergroepen verschillende kleuringen;
- voor een gegeven ondergroep geven punten in de baan van het punt in algemene positie verschillende kleuringen.

Deze twee standpunten hebben een nauw verband: Voor een kleurgroep R met ondergroep S en een punt x in algemene positie geeft het punt x met de geconjugeerde ondergroep $g^{-1}Sg$ dezelfde kleuring als het punt $g(x)$ met de ondergroep S.

Dit is in de volgende plaatjes herkenbaar: In de bovenste rij wordt de spiegelingsas gevarieerd, in de onderste rij het punt in algemene positie.



Vast punt in algemene positie, geconjugeerde ondergroepen



Vaste ondergroep, verschillende punten in algemene positie (in een baan)

4.26 Lemma *Voor een ruimtegroep R met ondergroep S van index n is het aantal verschillende kleuringen gelijk aan de index $[R : N]$ van de normalisator $N := N_R(S)$ van S in R.*

BEWIJS: De verschillende geconjugeerde ondergroepen van S is de baan van S onder de conjugatie met R. De lengte van deze baan is de index van de stabilisator van S voor deze werking en dit is juist de normalisator $N_R(S)$. □

4.27 Gevolg *Voor een gegeven ruimtegroep R corresponderen de kleuringen met n kleuren met de ondergroepen van R van index n.*

4.2.2 Roostergelijke ondergroepen

Op basis van de stelling van Hermann kunnen we alle ondergroepen van een ruimtegroep bepalen als we in staat zijn, roostergelijke en klassengelijke ondergroepen te bepalen. In principe is het zelfs voldoende om naar maximale ondergroepen te kijken (die automatisch roostergelijk of klassengelijk zijn), maar voor roostergelijke ondergroepen is deze beperking niet eens nodig.

4.28 Stelling *Zij R een ruimtegroep en $S \leq R$ een roostergelijke ondergroep. Dan is $H := \Pi(S)$ een ondergroep van $\Pi(R)$ en $S = \Pi^{-1}(H)$.*

De roostergelijke ondergroepen van R zijn dus in bijectie met de ondergroepen van $\Pi(R)$ waarbij twee ondergroepen in R geconjugeerd zijn dan en slechts dan als hun puntgroepen in $\Pi(R)$ geconjugeerd zijn.

BEWIJS: Omdat $T(S) = T(R)$ bevat S met een element $g \in R$ de volledige restklasse $gT(R)$. Maar dit betekent dat S een vereniging van restklassen $gT(R)$ is, d.w.z. $S = \bigcup_{\Pi(g) \in H} gT(R)$.

Omdat $T(R)$ een normaaldeler in R is, is het duidelijk dat twee roostergelijke ondergroepen $S_1, S_2 \leq R$ geconjugeerd in R zijn dan en slechts dan als $\Pi(S_1)$ en $\Pi(S_2)$ in $\Pi(R)$ geconjugeerd zijn. □

We vinden dus alle roostergelijke ondergroepen van R als originelen van de ondergroepen van $\Pi(R)$ (onder Π). Zij $G := \Pi(R)$ de puntgroep van R en $\{t_g \mid g \in G\}$ een vector systeem van R, dan is voor een ondergroep $H \leq G$ het origineel $S = \Pi^{-1}(H)$ van H onder Π gegeven door $S = \{\{h \mid t_h + t\} \mid h \in H, t \in T(R)\}$.

4.29 Opmerking De vraag om voor een gegeven eindige groep $G = \Pi(R)$ de ondergroepen de bepalen is een probleem uit de algoritmische groepentheorie, waar efficiënte algoritmen voor bestaan. De gebruikte methoden kunnen we hier alleen maar aanduiden:

- De ondergroepen worden iteratief van boven naar beneden bepaald, d.w.z. eerst de maximale ondergroepen.
- Voor simpele groepen zijn de maximale ondergroepen bekend en gedeeltelijk in een database opgeslagen. Tegenwoordig kan men in MAGMA voor alle puntgroepen die in dimensie $n \le 7$ voorkomen de ondergroepen met de standaardfunctie bepalen. Het eerste problematische geval is de automorfisme groep van het E_8 rooster, waar de simpele groep $O_8^+(2)$ van orde 174.182.400 in voorkomt.
- Een ondergroep $H \le G$ is een maximale ondergroep dan en slechts dan als de permutatieactie van G op de restklassen G/H een *primitieve* permutatieactie van G is.
  (Een permutatieactie van G op Ω heet *imprimitief* als er een niet-triviale partitie van Ω in blokken is zo dat de blokken onder de werking van G intact blijven. Als zo'n partitie niet bestaat heet de actie *primitief*.)
  Voor een groep M met $H < M < G$ zouden de restklassen van M/H een niet-triviale blok in G/H vormen.
- Voor oplosbare groepen bevatten de maximale ondergroepen de commutatorgroep $G' = [G, G]$.
  (Een groep is oplosbaar als de commutatorrij $G^{(0)} := G$, $G^{(1)} := G' = [G, G]$, $G^{(i+1)} := [G^{(i)}, G^{(i)}]$ met $G^{(k)} = \{1\}$ eindigt.)
  Omdat G/G' een abelse groep is, moet men hiervoor de maximale ondergroepen van de abelse groep $A = G/G'$ vinden, die invariant onder de werking van G zijn. Op dit probleem komen we straks bij de klassengelijke ondergroepen terug.
- Als de ondergroepen van G/H voor een oplosbare normaaldeler $H \trianglelefteq G$ bekend zijn, laten zich deze ondergroepen tot ondergroepen van G *liften.* Dit gebeurt stapsgewijs door naar elementair abelse layers te kijken: Kies een normaaldeler $H_0 \trianglelefteq G$ met $H_0 \le H$ zo dat H/H_0 elementair abels is. Lift dan de ondergroepen van G/H tot ondergroepen van G/H_0.

4.2.3 Klassengelijke ondergroepen

De vraag naar klassengelijke ondergroepen is iets subtieler dan die naar roostergelijke ondergroepen. Daarom is het hier nuttig om vooral naar maximale klassengelijke ondergroepen te kijken. We analyseren nu de volgende situatie: R is een ruimtegroep met $S \le R$ een maximale ondergroep zo dat $\Pi(S) = \Pi(R)$.

4.30 Lemma *Zij $S \le R$ een klassengelijke ondergroep en laten $L := L_R := \{t \in \mathbb{R}^n \mid \{id \mid t\} \in T(R)\}$ en $L_S := \{t \in \mathbb{R}^n \mid \{id \mid t\} \in T(S)\}$ de translatieroosters van R en S zijn.*

Dan werkt $G := \Pi(R)$ door $g(t + L_S) := g(t) + L_S$ op de quotiënt L/L_S.

Bewijs: We weten dat de puntgroep van een ruimtegroep op het bijhorende translatierooster werkt, dus werkt G wegens $G = \Pi(R) = \Pi(S)$ op L en op L_S. Maar dan geeft de werking van G op L en geïnduceerde werking op L/L_S, want voor $t + L_S = t' + L_S$ is $t - t' \in L_S$, dus ook $g(t) - g(t') = g(t - t') \in L_S$ en dus $g(t + L_S) = g(t' + L_S)$. □

Het is nu een voor de hand liggend idee dat voor een maximale klassengelijke ondergroep S het translatierooster L_S een maximaal G-invariant deelrooster van L is. Dat dit inderdaad geldt, ligt aan de volgende eenvoudige opmerking.

4.31 Lemma *Zij S een ruimtegroep met puntgroep $G = \Pi(S)$ en translatierooster L_S en zij $L \geq L_S$ een G-invariant rooster. Dan is S een klassengelijke ondergroep van $R := \langle S, \{\{id \mid t\} \mid t \in L\}\rangle$ en R heeft translatierooster L.*

Bewijs: Dat $\Pi(R) = \Pi(S)$ is duidelijk, want we voegen alleen maar translaties toe. Verder geven de elementen van S alleen maar translaties in $L_S \leq L$, dus bevat R precies de translaties uit L. □

4.32 Opmerking Door het toevoegen van translaties kan een niet-triviaal vector systeem wel triviaal worden. Bijvoorbeeld wordt een glijspiegeling door toevoegen van de glijcomponent als translatie een gewone spiegeling. We hadden al eerder gezien dat door uitbreiden van de translaties tot $\frac{1}{|G|}L_S$ het vector systeem altijd triviaal wordt.

Om de maximale klassengelijke ondergroepen te vinden, gaan we nu de maximale G-invariante deelroosters van $L = L(R)$ karakteriseren.

4.33 Stelling *Zij G een eindige groep die op een rooster L werkt en zij $M \leq L$ een maximaal G-invariant deelrooster van L. Dan geldt:*

(i) De index $[L : M]$ is eindig.

(ii) De index $[L : M]$ is een priemmacht p^a.

(iii) L/M is een elementair abelse groep.

(iv) L/M is een irreducibele $\mathbb{F}_pG$-module.

Voordat we deze stelling bewijzen, herhalen we een aantal concepten uit de groepentheorie.

4.34 Definitie Een ondergroep $H \leq G$ heet een *karakteristieke* ondergroep van G, als $\alpha(H) = H$ voor alle automorfismen $\alpha \in Aut(G)$.

Een karakteristieke groep is in het bijzonder een normaaldeler, want de inwendige automorfismen die door conjugatie met elementen uit G tot stand komen vormen een ondergroep van $Aut(G)$.

4.35 Definitie Zij K een lichaam en $\Delta : G \to GL_n(K)$ een homomorfisme. Dan heet Δ een *voorstelling* van G over K en de vectorruimte $V = K^n$ wordt een G-module met de werking $gv = \Delta(g) \cdot v$.

Door de werking K-lineair uit te breiden wordt V een KG-module.

4.36 Definitie Een voorstelling van G over K heet *irreducibel* als $\{0\}$ en V de enige G-invariante deelruimten van V zijn.

BEWIJS:

(i) We kunnen de bases van L en M zo kiezen dat $(b_1, \ldots, b_n)$ een basis van L is en $(a_1 b_1, \ldots, a_k b_k)$ een basis van M (compatibele bases). Voor $k < n$ kunnen we een rooster tussen M en L als volgt construeren: Met L is ook pL invariant onder G, dan is ook het rooster $M' := \langle M, pL \rangle$ invariant onder G. Maar een basis voor M' is $(\mathrm{ggd}(a_1, p)b_1, \ldots, \mathrm{ggd}(a_k, p)b_k, pb_{k+1}, \ldots, pb_n)$ en dit is een rooster dat echt tussen M en L ligt.

(ii) We weten dat L/M een eindige abelse groep is, dus is $L/M \cong \oplus_{i=1}^r H_i$, waarbij H_i de p_i-Sylow groep (of p_i-primaire component) van A is, d.w.z. $H_i = C_{p_i^{a_1}} \times \ldots \times C_{p_i^{a_{r_i}}}$. Omdat onder een automorfisme een p-groep weer naar een p-groep gaat, zijn de H_i karakteristieke ondergroepen, want H_i is de unieke ondergroep van A die alle elementen van orde p_i^a bevat. De werking van G op L/M induceert automorfismen van A, dus zijn de H_i invariant onder G. Maar dan kan M alleen maar maximaal zijn als $r = 1$, dus A bevat slechts een enkele Sylow groep en is dus een p-groep.

(iii) In een abelse p-groep A vormen de elementen van orde p (samen met de identiteit) de ondergroep $A_p := \{a \in A \mid a^p = 1\}$. Omdat een element van orde p onder een automorfisme weer naar een element van orde p gaat, is A_p een karakteristieke ondergroep van A. In het bijzonder kan M alleen maar maximaal zijn, als $A_p = A$, d.w.z. als A een elementair abelse groep is.

(iv) We weten nu dat $A = L/M$ een elementair abelse groep is, d.w.z. $A \cong \underbrace{C_p \times \ldots \times C_p}_{r}$. Als we A nu als optelgroep schrijven, hebben we $A \cong \mathbb{F}_p^r$ en door een basis van $\mathbb{F}_p^r$ te kiezen geeft de werking van G op A een voorstelling van G over $\mathbb{F}_p$. Een G-invariante deelmodule van $\mathbb{F}_p^r$ zou aanleiding geven tot een rooster M' dat echt tussen M en L ligt, dus moet de zo verkregen voorstelling irreducibel zijn. □

Om de maximale klassengelijke ondergroepen te vinden, moeten we dus irreducibele $\mathbb{F}_pG$-modulen kunnen bepalen. Dit is een vraagstelling uit de (algoritmische) representatietheorie waar rond 1980 door R.A. Parker een efficiënte methode voor is bedacht, de zogeheten *Meataxe*. We zullen hier niet verder op ingaan, maar nemen genoegen met de opmerking dat de dimensies waar we met kristallografische groepen werken voor de Meataxe min of meer triviaal zijn.

We gaan er dus van uit dat we over de irreducibele $\mathbb{F}_pG$-modulen die als compositiefactoren in L/pL voorkomen, beschikken. In feite levert de Meataxe zelfs alle maximale deelmodulen van L/pL, en dit is precies wat we nodig hebben.

Voordat we aan de hand van een aantal voorbeelden laten zien, hoe we voor een gegeven maximaal deelrooster de klassengelijke ondergroepen kunnen vinden, geven we eerst een opmerking die het aantal *interessante* priemgetallen tot de delers van $|\Pi(R)|$ beperkt.

4.37 Opmerking Als S een maximale klassengelijke ondergroep van R is, dan is $S/T(S)$ een complement van $T(R)/T(S)$ in $R/T(S)$, want $S \cap T(R) = T(S)$ en $\langle S, T(R)\rangle = R$.

Zij nu R een ruimtegroep met puntgroep $G = \Pi(R)$ en translatieondergroep $T(R)$ en zij M een maximale G-invariant ondergroep van $T(R)$. Stel dat $[T(R) : M] = p^a$ en dat $p \nmid |G|$.

Dan zegt de *stelling van Schur-Zassenhaus*:

(i) $T(R)/M$ heeft een complement S/M in R/M.

(ii) Alle complementen van $T(R)/M$ in R/M zijn geconjugeerd.

Dit betekent dat voor priemgetallen p die de orde van de puntgroep niet delen de klassengelijke ondergroepen voor een gegeven deelrooster geconjugeerd in R zijn.

Sterker nog laat zich aantonen dat deze groepen ook alle isomorf zijn, maar daar zit nog iets een stukje representatie theorie achter.

Voor priemgetallen p die de orde van de puntgroep wel delen, doen zich de volgende twee problemen voor:

- Een klassengelijke ondergroep van een symmorfe groep hoeft niet symmorf te zijn.
- Voor een niet symmorfe groep hoeft er geen complement van $T(R)/M$ in R/M te bestaan.

Het probleem komt erop neer, dat we voor een deelrooster $M \leq L$ het vector systeem $\{t_g \mid g \in \Pi(R)\}$ van R tot een vector systeem $\{t'_g \mid g \in \Pi(R)\}$ met $t'_g - t_g \in L$ moeten aanpassen zo dat de relaties van $\Pi(R)$ met het nieuwe vector systeem translaties in M geven. De verschillende mogelijkheden hiervoor geven de verschillende complementen van $T(R)/M$ in R/M.

4.38 Voorbeeld Voor de ruimtegroep `p2mm` voortgebracht door

$$g := \left(\begin{array}{cc|c} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \text{ en } h := \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

heeft het rooster $L = \mathbb{Z}^2$ een maximaal G-invariant deelrooster $M = \langle 2e_1, e_2\rangle$.

Dit deelrooster leidt niet alleen maar tot de voor de hand liggende maximale klassengelijke ondergroep voortgebracht door g, h en M, maar ook tot de ondergroep voortgebracht door g, h' en M met $h' = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$. Omdat e_1 geen translatie van M meer is, is h' nu een glijspiegeling en de groep is niet meer symmorf.

4.39 Voorbeeld Voor de ruimtegroep `pg` voortgebracht door

$$g := \left(\begin{array}{cc|c} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

heeft het rooster $L = \mathbb{Z}^2$ een maximaal G-invariant deelrooster $M = \langle e_1, 2e_2 \rangle$. We passen het translatiedeel van g door een algemene vector uit $\mathbb{Z}^2$ aan, dan wordt

$$\left(\begin{array}{cc|c} -1 & 0 & x \\ 0 & 1 & \frac{1}{2}+y \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)^2 = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2}+2y \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

en $\frac{1}{2} + 2y$ ligt voor $y \in \mathbb{Z}$ natuurlijk nooit in $2\mathbb{Z}$.

We vinden dus in dit geval geen enkele maximale klassengelijke ondergroep met translatierooster M.

4.40 Voorbeeld Voor de ruimtegroep voortgebracht door

$$g_1 := \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right), g_2 := \left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right), g_3 := \left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

is $M = \langle e_1, e_2, 3e_3 \rangle$ een maximaal G-invariant deelrooster van $\mathbb{Z}^3$. Er geldt

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2}+z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)^2 = \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 1+2z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

en voor $z = 1$ ligt het translatiedeel van dit element in M. Omdat we het vector systeem alleen maar met representanten van L/M hoeven aan te passen, dus met $z \in \{0, 1, 2\}$ is dit de enige maximale klassengelijke ondergroep voor M.