Kristallografische groepen

Bernd Souvignier

najaar 2005

Hoofdstuk 1

Introductie

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.

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.)

Equivalente 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 Sovjetunie. 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 het 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 van $\mathbb{R}^n$ bewaren, want voor scalairen $a \in \mathbb{Z}$ geldt natuurlijk ook $v \in T(S) \Rightarrow a \cdot v \in T(S)$.

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 nieuw (?) begrip nodig, namelijk het begrip van een *rooster*.

1.7 Definitie Een ondergroep $L \leq (\mathbb{R}^n, +)$ van de optelgroep van een vectorruimte V heet een *(vol) rooster* als er een ($\mathbb{R}$-)basis $B = (b_1, \ldots, b_n)$ van V 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 $\mathbb{R}^m \cong U \subsetneq \mathbb{R}^n$ 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 $\mathbb{R}$. 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.

Een soortgelijk voorbeeld is het $\mathbb{Z}$-opspansel van de hoekpunten van een regelmatig vijfhoek in $\mathbb{R}^2$. Dit geeft een $\mathbb{Z}$-module met 4 over $\mathbb{Z}$ onafhankelijke vectoren, en ook deze $\mathbb{Z}$-module ligt dicht in $\mathbb{R}^2$. Maar het is mogelijk om deze $\mathbb{Z}$-module als 4-dimensionaal rooster te interpreteren en slechts bepaalde punten van dit rooster naar een 2-dimensionale deelruimte te projecteren zo dat de projecties een Delone verzameling vormen, namelijk het Penrose pattern.

Natuurlijk hebben we het begrip van een rooster ingevoerd omdat de translaties van een Delone verzameling een rooster vormen, dit gaan we nu bewijzen.

1.9 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 $T(S)$ eindig voortgebracht en 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 $C := \{\sum_{i=1}^n c_i b_i \mid 0 \leq c_i \leq 1\}$ 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 $B \cup \{b\}$. Dan zijn er twee mogelijkheden:

(1) De index $[L' : L]$ van L in L' is oneindig. Maar dan is $vol(\mathbb{R}^n/L') = 0$ en dit betekent dat L' dicht in $\mathbb{R}^n$ ligt, en dit is in strijd met de discreetheid van S.

(2) De index $[L' : L] = k$ is eindig. In dit geval volgt uit de hoofdstelling over eindig voortgebrachte abelse groepen, dat er voortbrengers van L' bestaan zo dat de voortbrengers van L veelvouden van deze voortbrengers zijn. Omdat L' geen elementen van eindige orde bevat, volgt hieruit dat L' ook door n elementen voortgebracht is. Verder weten we dat $vol(\mathbb{R}^n/L') = \frac{1}{k} vol(\mathbb{R}^n/L)$.

Uit de discreetheid van S volgt dat we maar eindig vaak in het geval (2) terecht kunnen komen, en uiteindelijk hebben we een stelsel van n voortbrengers voor $T(S)$ gevonden.

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. $\square$

1.10 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 van roosters

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 met behulp van hun symmetrieoperaties 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 vierkantrooster 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 een schaling en een rotatie kunnen we ervoor zorgen dat de vector $(1, 0)^{tr}$ een vector van minimale lengte is.
- Met de hierboven genoemde normering zijn het vierkantrooster en het hexagonale rooster eenduidig bepaald.
- Het vierkantrooster 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 deelrooster van een rooster wordt in de kristallografie meestal een *centrering* genoemd.

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 vierkantrooster 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.

1.11 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.

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

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

(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 te 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:

1.13 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 $Aut(L_D)$. •

We kunnen ook omgekeerd uitgaan van symmetriegroepen en hiervoor roosters bepalen. We kunnen makkelijk inzien dat een eindige ondergroep $G \leq GL_n(\mathbb{Q})$ altijd een rooster vast laat, namelijk het rooster gegeven door

$$L := \langle g \cdot \mathbb{Z}^n \mid g \in G \rangle_{\mathbb{Z}}.$$

Als we G op een basis van dit rooster transformeren, worden de matrices geheeltallig.

Een probleem bij de symmetriegroepen als uitgangspunt is het volgende: De symmetriegroep van het rechthoekrooster laat ook het vierkantrooster invariant, en het is nog steeds onhandig een rechthoekrooster door de negatieve eigenschap te beschrijven dat het *geen* vierkantrooster is. We zullen daarom een alternatieve beschrijving voor de roosters, die onder een groep invariant zijn, ontwikkelen. Hiervoor hebben we echter nog een aantal nieuwe begrippen nodig.

1.14 Definitie Voor een rooster $L \subseteq \mathbb{R}^n$ met roosterbasis $B = (b_1, \ldots, b_n)$ heet de matrix $F \in \mathbb{R}^{n \times n}$ met $F_{ij} := b_i \cdot b_j$ de *Gram matrix* van L met betrekking tot B. Uit de eigenschappen van het standaardinproduct op $\mathbb{R}^n$ volgt dat F een symmetrische en positief definiete matrix is.

Herinnering: Voor een $\mathbb{R}$-vectorruimte V heet een bilineaire afbeelding $\Phi : V \times V \to \mathbb{R}$ *positief definiet* als $\Phi(v,v) \geq 0$ voor alle $v \in V$ en $\Phi(v,v) = 0 \Rightarrow v = 0$.

Een Gram matrix F van een bilineaire afbeelding Φ heet positief definiet als Φ positief definiet is. Er geldt dat F positief is dan en slechts dan als de determinanten van de linksboven $i \times i$ deelmatrices van F voor alle $1 \leq i \leq n$ positief zijn.

Voor een symmetrische 2×2-matrix $F = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$ betekent dit, dat F positief definiet is dan en slechts dan als $a > 0$ en $ab > c^2$.

1.15 Opmerking Als we een element $X \in O_n(\mathbb{R})$ als matrix g met betrekking tot de roosterbasis B schrijven, moeten we X met de transformatiematrix van de standaardbasis $(e_1, \ldots, e_n)$ naar de roosterbasis $B = (b_1, \ldots, b_n)$ conjugeren. Als we met T de transformatiematrix met de b_i als kolommen noteren, geldt $g = T^{-1}XT$ en $TgT^{-1} = X$. Uit $X^{tr}X = \mathbb{I}$ volgt dus:

$$(TgT^{-1})^{tr}(TgT^{-1}) = T^{-tr}g^{tr}T^{tr}TgT^{-1} = \mathbb{I} \text{ en dus } g^{tr}(T^{tr}T)gT^{-1} = T^{tr}T.$$

Maar volgens de definitie van de Gram matrix geldt $T^{tr}T = F$, dus wordt met betrekking tot de roosterbasis B de orthogonaliteitseis $X^{tr}X = \mathbb{I}$ getransformeerd naar $g^{tr}Fg = F$.

Volgens de laatste opmerking kunnen we de symmetriegroep van een rooster L ook met behulp van de Gram matrix F van het rooster (met betrekking tot een vast gekozen roosterbasis) beschrijven, namelijk door

$$Aut(L) = \{g \in GL_n(\mathbb{Z}) \mid g^{tr} F g = F\}.$$

Maar nu kunnen we de boel ook omdraaien, we weten dat een eindige groep $G \leq GL_n(\mathbb{Z})$ een rooster L vast laat, en daarom blijft ook de Gram matrix F van L invariant onder G. Echter kunnen ook nog andere Gram matrices onder G invariant zijn die geen veelvouden van F zijn. Voor de symmetriegroep van het rechthoekrooster zo als we die boven hebben aangegeven, zien we dat meteen in: Alle matrices van de vorm $F = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$ blijven invariant onder $Aut(L_R)$ en voor $a, b > 0$ zijn dit Gram matrices van roosters. We hebben dus een 2-dimensionale variëteit van invariante Gram matrices.

1.16 Definitie Voor $G \leq GL_n(\mathbb{Z})$ heet

$$\mathcal{F}(G) := \{F \in \mathbb{R}^{n\times n}_{sym} \mid g^{tr} F g = F \text{ voor alle } g \in G\}$$

de *ruimte van invariante vormen* van G. Het is duidelijk dat $\mathcal{F}(G)$ een $\mathbb{R}$-vectorruimte is.

De deelverzameling $\mathcal{F}(G)_{>0} := \{F \in \mathcal{F}(G) \mid F \text{ is positief definiet }\}$ van positief definiete vormen in $\mathcal{F}(G)$ heet de *Bravais variëteit* van G.

De naam *Bravais* variëteit is ter ere van Auguste Bravais (1811-1863) die rond 1850 als eerste de 14 typen van 3-dimensionale kristalroosters correct heeft beschreven.

1.17 Opmerking Als $G \leq GL_n(\mathbb{Z})$ eindig is, bevat $\mathcal{F}(G)$ altijd een positief definiete vorm, namelijk $F_0 := \sum_{g\in G} g^{tr} g$. Voor oneindige groepen is dit nooit het geval, want een positief definiete vorm kan alleen maar onder een eindige groep invariant blijven.

We kunnen voor de vijf symmetriegroepen van boven de ruimtes van invariante vormen en de Bravais variëteiten makkelijk bepalen:

(1) Er geldt $\mathcal{F}(Aut(L_V)) = \{a \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mid a \in \mathbb{R}\}$ en de Bravais variëteit bevat de vormen met $a > 0$.

(2) Er geldt $\mathcal{F}(Aut(L_H)) = \{a \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \mid a \in \mathbb{R}\}$ en de Bravais variëteit bevat de vormen met $a > 0$.

(3) Er geldt $\mathcal{F}(Aut(L_R)) = \{\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} \mid a, b \in \mathbb{R}\}$ en de Bravais variëteit bevat de vormen met $a, b > 0$.

(4) Er geldt $\mathcal{F}(Aut(L_D)) = \{\begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} \mid a, b \in \mathbb{R}\}$ en de Bravais variëteit bevat de vormen met $a > 0$ en $|b| < a$.

(5) Er geldt $\mathcal{F}(Aut(L_P)) = \{\begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \mid a, b, c \in \mathbb{R}\}$ en de Bravais variëteit bevat de vormen met $a, b > 0$ en $c^2 < ab$.

We zien aan de ruimtes van invariante vormen ook weer dat het vierkantrooster een speciaal geval van een rechthoekrooster is, namelijk voor het geval $a = b$. Het is duidelijk dat inclusie van symmetriegroepen correspondeert met de omgekeerde inclusie van ruimtes van invariante vormen.

Maar het kan zijn dat een echte ondergroep nog steeds dezelfde ruimte van invariante vormen heeft, dit is bijvoorbeeld voor de ondergroep $C_4 \le D_4$ in het geval van het vierkantrooster zo. Dit betekent dat C_4 nog niet de volledige symmetriegroep van het vierkantrooster is. Maar om roosters te karakteriseren, hebben we volledige symmetriegroepen nodig, en deze kunnen we als volgt beschrijven:

1.18 Definitie Voor een verzameling $\mathcal{F} \subseteq \mathbb{R}^{n\times n}_{sym}$ van symmetrische matrices, noemen we

$$\mathcal{B}(\mathcal{F}) := \{g \in GL_n(\mathbb{Z}) \mid g^{tr} F g = F \text{ voor alle } F \in \mathcal{F}\}$$

de *volledige symmetriegroep* of *Bravais groep* van $\mathcal{F}$. Als $\mathcal{F}$ een positief definiete matrix bevat is $\mathcal{B}(\mathcal{F})$ noodzakelijk een eindige groep.

Voor $G \le GL_n(\mathbb{Z})$ noemen we $\mathcal{B}(G) := \mathcal{B}(\mathcal{F}(G))$ de *Bravais groep* van G. Het is duidelijk dat $G \le \mathcal{B}(G)$ geldt en in het geval $G = \mathcal{B}(G)$ noemen we G zelf een *Bravais groep*.

Merk op: De Bravais groepen zijn juist de volledige symmetriegroepen van roosters.

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 $H \lneqq Aut(L)$ met $\mathcal{F}(H) = \mathcal{F}(Aut(L))$. Dit zijn juist de eindige ondergroepen van de orthogonale groep die geen volledige symmetriegroepen van een rooster zijn. •

We kunnen nu ook zeggen wat we met een 'algemeen' rooster van een zekere type bedoelen:

1.19 Definitie Zij G een Bravais groep, d.w.z. $G = \mathcal{B}(\mathcal{F}(G))$ is de volledige symmetriegroep van een rooster.

(i) Een positief definiete vorm $F \in \mathcal{F}(G)$ heet een *algemene vorm* als $\mathcal{B}(F) := \mathcal{B}(\{F\}) = G$. Dit betekent dat de symmetrieen die F invariant laten ook alle andere vormen in de ruimte van invariante vormen van G vast laten.

(ii) Als $\mathcal{B}(F) \gneqq G$ noemen we F een *speciale vorm*.

(iii) Een rooster L heet een *algemeen rooster* voor G als de Gram matrix F van G een algemene vorm is.

1.2.1 Gereduceerde bases

We hebben in het geval van 2- en 3-dimensionale roosters nog een andere mogelijkheid, we kunnen namelijk naar een *gereduceerde basis* kijken.

1.20 Definitie We noemen een stelsel $v_1, \ldots, v_n$ van vectoren in een rooster L een *minimaalsysteem* als v_k een vector van minimale lengte in L is die lineair onafhankelijk van $(v_1, \ldots, v_{k-1})$ is.

1.21 Lemma *Voor een minimaalsysteem $v_1, \ldots, v_n$ van een rooster L geldt:*

(i) $\|v_i\| \leq \|v_j\|$ *voor* $i < j$.

(ii) $|v_i \cdot v_j| \leq \frac{1}{2}\|v_i\|^2$ *voor* $i < j$.

(iii) De lengtes $\|v_i\|$ zijn eenduidig bepaald.

BEWIJS: *(i): Dit zal duidelijk zijn.*
(ii): Met v_j is ook $v_i \pm v_j$ lineair onafhankelijk van $v_1, \ldots, v_{j-1}$, dus geldt $\|v_i \pm v_j\|^2 \geq \|v_j\|^2$. Hieruit volgt $\|v_i\|^2 \pm 2v_i \cdot v_j + \|v_j\|^2 \geq \|v_j\|^2$.
(iii): Stel dat $w_1, \ldots, w_n$ ook een minimaalsysteem is en neem aan dat $\|v_k\| < \|w_k\|$. Dan bestaat er een index $1 \leq i \leq k$ zo dat v_i niet in $\langle w_1, \ldots, w_{k-1}\rangle$ ligt, want anders zou w_k hoogstens lengte $\|v_k\|$ hebben. Maar dan geldt $\|v_i\| \leq \|v_k\| < \|w_k\|$ in tegenstelling tot de minimaliteitseigenschap van w_k. □

1.22 Propositie *Voor $n = 2$ is een minimaalsysteem van een rooster L altijd een roosterbasis van L.*

BEWIJS: Oefening. □

Opdracht 3 Zij L een 2-dimensionaal rooster.

(i) Bewijs de propositie hierboven.

(ii) Neem aan dat L 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.

•

1.23 Definitie Een roosterbasis die tegelijkertijd een minimaalsysteem is heet een *gereduceerde basis*.

Merk op dat vanaf dimensie 4 niet elk minimaalsysteem een roosterbasis is. Als we bijvoorbeeld met $B = (e_1, e_2, e_3, e_4)$ de standaardbasis in $\mathbb{Z}^4$ noteren, dan is het rooster $F_4 := \langle e_1, e_2, e_3, \frac{1}{2}(e_1 + e_2 + e_3 + e_4)\rangle_{\mathbb{Z}}$ een rooster dat het standaardrooster $\mathbb{Z}^4$ van index 2 bevat, terwijl B een minimaalsysteem van F_4 is.

Met de analoge constructie $L := \langle e_1, \ldots, e_{n-1}, \frac{1}{2}(e_1 + \ldots + e_n)\rangle_{\mathbb{Z}}$ kunnen we voor $n \geq 5$ roosters produceren, waarvoor geen enkel minimaalsysteem een roosterbasis is, omdat $e_1, \ldots, e_n$ tot op volgorde en teken het enige minimaalsysteem is. Deze roosters hebben dus geen gereduceerde basis.