Hoofdstuk 5

Ruimtegroepen

De objecten die in de kristallografie een rol spelen zijn (geïdealiseerd) periodieke discrete structuren. We weten dat de translaties die zo'n structuur invariant laten een rooster vormen en dat de orthogonale lineaire symmetriën van de structuur een eindige groep vormen. De vraag is nu, hoe deze twee componenten, de translaties en de eindige groepen van orthogonale afbeeldingen, samen spelen. Een cruciale rol spelen hierbij de *affiene afbeeldingen*.

5.1 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.

5.1 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* van φ.

(ii) De groep $\mathit{Aff}_n(K) := \{\varphi : K^n \to K^n \mid \varphi \text{ bijectieve affiene afbeelding}\}$ 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.

5.2 Opmerking Met betrekking tot een basis van K^n laat zich $\mathit{Aff}_n(K)$ 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 $\varphi \in \mathit{Aff}_n(K)$ 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

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

5.3 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 $\mathit{Aff}_n(K)$ die we met $T_n(K)$ noteren:

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

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

5.5 Definitie Zij G een groep met een normaaldeler $N \trianglelefteq G$ en een ondergroep $H \leq G$. Dan heet G het *semidirecte 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.

5.6 Opmerking Het directe product $G = N \times H$ is een speciaal geval van een semidirect product, namelijk voor het triviale automorfisme α met $\alpha(h) = id_{Aut(N)}$ 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 niet verder over het homomorfisme α na te denken, want $H = GL_n(K)$ is op natuurlijke manier gegeven als automorfismen van $T_n(K)$.

5.7 Propositie *De affiene groep $Aff_n(K)$ is een semidirect product $Aff_n(K) = T_n(K) \rtimes GL_n(K)$ 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 $\Pi : Aff_n(K) \to GL_n(K)$ 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 $T_n(K) \trianglelefteq Aff_n(K)$ een normaaldeler.

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

5.8 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 $\Pi : Aff_n(K) \to GL_n(K)$ noteren.

In het kader van symmetriegroepen hebben we het natuurlijk alleen maar over affiene afbeeldingen die lengtes en hoeken 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*.

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

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

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

In het geval dat $\mathit{Aff}_n(K)$ met betrekking tot een willekeurige basis van K^n geschreven is, zij F de Gram matrix van de basis, dan is $E_n(K)$ met betrekking tot deze basis gegeven door

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

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

Opdracht 18 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) 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).

•

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

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

5.10 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 graad dan n is en R/T eindig is, heet R een *subperiodieke groep.*

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

5.11 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 tranlaties 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 schruifdraaing 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 ondeindige cyclische groep die op het vlak loodrecht op de schruifas werkt.

Opdracht 19 Zij R een *subperiodieke groep*, d.w.z. een ondergroep van $E_n(\mathbb{R})$ zo dat de translaties in de translatieondergroep $T(R)$ een rooster van rang $k < n$ vormen en waarvoor de puntgroep $P(R) = R/T(R)$ eindig is. Laat zien dat zich R met betrekking tot een geschikte basis 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 de vectoren $\{t_g \mid g \in G\}$ een vector systeem vormen. •

Opdracht 20 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: Het aantal groepen is een priemgetal.) •

5.2 Vector systemen

Omdat de translatie ondergroep $T(R)$ de kern van een homomorfisme 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 $R/T(R)$.

5.12 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*.

5.13 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

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

dus is $t_g - t'_g \in L$. □

5.14 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.

Als we twee elementen van een ruimtegroep vermenigvuldigen, zien we dat de elementen van een vector systeem niet willekeurig gekozen mogen worden, want er geldt

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

en dit betekent dat de elementen van een vector systeem voldoen aan

$$t_{gh} \equiv t_g + gt_h \bmod \mathbb{Z}^n.$$

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.

5.15 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.

5.16 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

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

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

5.17 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 $\tau_m(g) + \tau_{m'}(g) = gm - m + gm' - m' = g(m + m') - (m + m') = \tau_{m+m'}(g)$. $\square$

5.18 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.

Opdracht 21 Zij R een ruimtegroep met puntgroep G en vector systeem $\{t_g \mid g \in G\}$. Het is duidelijk dat het vector systeem (modulo $\mathbb{Z}^n$) vast ligt door de elementen t_{g_i} voor voortbrengers g_i van G.

Laat zien dat door een geschikte keuze van de oorsprong (dus modulo inwendige derivaties) het vector systeem zo aangepast kan worden dat $t_{g_i} = 0$ voor één van de voortbrengers g_i die geen vaste vectoren heeft, dus voor een voortbrenger met $g_i v \neq v$ voor alle $v \neq 0$. $\bullet$

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

5.20 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. 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*.

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.

5.21 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 $t'_g \in \frac{1}{|G|}\mathbb{Z}^n$. □

5.22 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. □

5.23 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 die met een voorstelling van graad n over K op K^n werkt.

5.3 Equivalentieklassen van ruimtegroepen

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.

5.24 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 $\mathbb{Z}^n$) $t_{gh} = t_g + g t_h$ de vector t_{gh} aan als t_g en t_h bekend zijn. Hiermee laten zich de elementen van het vector systeem terug brengen op de elementen t_i op de voortbrengers.

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.

5.25 Opmerking Voor ieder product van de X_i dat $1 \in G$ 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 $1 \in G$ 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 cyclische 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 $1 \in G$ 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.

5.3.1 Definiërende relaties

Het doel is nu, een stelsel producten in de voortbrengers van G te vinden zo dat alle congruenties die we uit producten met lineair deel $1 \in G$ krijgen, consequenties van de congruenties voor dit stelsel producten zijn.

Om zo'n stelsel producten te vinden, hebben we een aantal eenvoudige eigenschappen van producten in de affiene groep nodig (die men eenvoudig na gaat). Met een *woord* bedoelen we hierbij een rij $w = X_{i_1}^{\pm 1} X_{i_2}^{\pm 1} \ldots X_{i_l}^{\pm 1}$ in de voortbrengers X_i en hun inversen die we als symbolisch product opvatten. Er geldt:

(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 $\mathbb{Z}^n$ met een voortbrenger X_i geconjugeerd wordt, heeft ook het resulterende woord $X_i^{-1} w X_i$ een tranlatiedeel in $\mathbb{Z}^n$.

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

Door een combinatie van de stappen (1) en (2) (samenvoegen en conjugeren) krijgen we de algemenere uitspraak dat het invoegen van een woord met translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ in een woord met translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ ook weer een woord met translatiedeel in $\mathbb{Z}^n$ oplevert. We hebben dus het volgende ingezien:

5.26 Gevolg *Voor een gegeven stelsel van woorden in de voortbrengers van G die $1 \in G$ opleveren, zijn alle congruenties die we door samenvoegen, conjugeren, inverteren of invoegen of weglaten van $X_i X_i^{-1}$ 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 $1 \in G$ 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*.

5.27 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 $1 \in G$ oplevert door samenvoegen, conjugeren, inverteren of invoegen of weglaten van $g_i g_i^{-1}$ 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 $1 \in G$ 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.

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

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

Bewijs: In een eerste stap nemen we aan dat alle groepselementen behalve $1 \in G$ voortbrengers zijn. Als relaties nemen nu de vergelijkingen voor alle producten van voortbrengers, dit geeft relaties van de vorm $g_i g_j = g_{k(i,j)}$. Als we nu met een willekeurig woord w in de groepselementen starten dat $1 \in G$ 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 $1 \in G$ moet zijn, en dus noodzakelijk van de vorm gg^{-1} of $g^{-1}g$ is. We kunnen dus alle woorden die $1 \in G$ 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 spielgeling 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.

Opdracht 22 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 $\mathbb{Z}^3$? •

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 groepetheorie, en we zullen ons hier tot een paar opmerkingen beperken:

- Voor een permutatiegroep $G \leq S_n$ laten zich definiërende relaties aan de hand van een *stabilisatorketen* $G = G_0 \geq G_1 \geq \ldots \geq G_r = \{1\}$ 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 (puntsgewijse) 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 gegeven relaties te bepalen, wat de grootste groep is die aan deze relaties voldoet. Als de orde van deze groep gelijk is aan de orde van de groep waarvoor definiërende relaties gezocht worden, heeft men aangetoond dat de relaties voldoende 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 is geslaagd 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* herschrijvings methoden.

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 $V_4 = \langle a = (1,2)(3,4), b = (1,3)(2,4)\rangle$ zijn $a^2, b^2, ab = ba$ en voor de factorgroep $S_3 = \langle g = (1,2,3), h = (1,2)\rangle$ 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.

Opdracht 23 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. •

5.3.2 Het Zassenhaus-algoritme

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 $1 \in G$ en de translatiedelen moeten in $\mathbb{Z}^n$ liggen.

5.30 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 $1 \in G$ 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.

5.31 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.

5.32 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 vierkantrooster, 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 $t'_s = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

Opdracht 24 Zij $A \in \mathbb{Z}^{m \times n}$ een geheeltallige matrix. Bedenk een manier hoe je de vectoren $x \in \mathbb{Q}^n$ met $A \cdot x \in \mathbb{Z}^m$ kunt vinden. Als men A als lineaire afbeelding van $\mathbb{Q}^n/\mathbb{Z}^n$ naar $\mathbb{Q}^m/\mathbb{Z}^m$ opvat, is dit juist de kern van de afbeelding.

(Hint: Denk bijvoorbeeld aan de Smith normaal vorm.) •

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.

5.33 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.

5.34 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 $t_{gh} = t_g + g t_h + v_{g,h}$ waarbij $v_{g,h} \in L$ is. Omdat α een automorfisme is, geldt $\alpha(t_{gh}) = \alpha(t_g) + \alpha(g t_h) + \alpha(v_{g,h})$, 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. $\square$

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 candidaten 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.

5.35 Voorbeeld Zij $G := \langle r = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \; s = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rangle \cong V_4$ 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.

5.36 Lemma *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. □

5.37 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. □

5.38 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 H. Zassenhaus die deze aanpak 1948 heeft voorgesteld.

Enantiomorfisme

In de kristallografie wordt een iets fijner begrip dan de affiene equivalentie gehanteerd. Omdat objecten in de fysicale ruimte niet gespiegeld kunnen worden (zonder beschadiging), mogen ruimtegroepen alleen maar met affiene transformaties geconjugeerd worden die de oriëntatie van de affiene ruimte bewaren. Dit betekent dat de lineaire delen van de affiene transformaties positieve determinant moeten hebben.

Als de vector systemen en de normalisator bekend zijn, is het makkelijk, deze vorm van equivalentie te bepalen. In plaats van de volle normalisator wordt in dit geval de ondergroep (van index 1 of 2) van elementen met deteminant 1 in de normalisator bekeken, dus de oriëntatie-bewarende normalisator N^+. De fijnere equivalentieklassen corresponderen dan met de banen van N^+ op $H^1(G, K^n/\mathbb{Z}^n)$.

5.39 Definitie Twee ruimtegroepen die niet equivalent onder oriëntatie-bewarende transformaties, maar wel onder alle affiene transformaties zijn, noemt men een *enantiomorf* paar.

Enantiomorfe ruimtegroepen zijn symmetriegroepen van gespiegelde structuren die verschillende oriëntaties hebben. Deze eigenschap kan men zelfs als definitie voor het begrip *oriëntatie* van een structuur opvatten.

In dimensie $n = 3$ geven 11 van de 219 klassen van ruimtegroepen onder affiene equivalentie aanleiding tot enantiomorfe paren, er zijn dus 230 klassen van kristallografische ruimtegroepen. In dimensie $n = 4$ zijn het er 111 van de 4783 affiene klassen, dus zijn er 4894 klassen van ruimtegroepen onder oriëntatie-bewarende affiene transformaties.

5.3.3 Het aantal van ruimtegroepen in hogere dimensies

Ten slotte geven we een paar classificatie resultaten van ruimtegroepen aan. De volledige classificatie is bekend tot dimensie $n = 6$. In hogere dimensies is een volledige classificatie in principe mogelijk, maar waarschijnlijk niet erg interessant, omdat slechts bepaalde puntgroepen van belang zijn.

Een van de problemen bij een volledige classificatie is aan de ene kant dat in principe alle ondergropen van behoorlijk grote en complexe groepen bekeken moeten worden. Een voorbeeld in dimensie 8 is de symmetriegroep van het E_8-rooster, die de simpele groep $O_8^+(2)$ bevat.

Een verder probleem is dat het aantal van ruimtegroepen heel snel groeit. Bij de puntgroepen spelen vooral de 2-groepen een rol, die met grotere dimensie ook een grotere orde kunnen krijgen en wiens aantal snel groeit.

Maar ook het aantal ruimtegroepen voor een gegeven puntgroep, d.w.z. het aantal banen van de normalisator op de cohomologiegroep $H^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$ groeit snel.

Opdracht 25 Zij G de groep van diagonaalmatrices in $GL_3(\mathbb{Z})$, dus

$$G := \left\langle g_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ g_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ g_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right\rangle \cong C_2^3.$$

De groep G is de volle symmetriegroep van een 3-dimensionaal rooster met orthogonale maar verschillende lange basis vectoren (het *monokliene* rooster). Definiërende relaties voor G zijn g_1^2, g_2^2, g_3^2, $g_1g_2g_1g_2$, $g_1g_3g_1g_3$, $g_2g_3g_2g_3$.

(i) Bepaal de orde van de cohomologiegroep $H^1(G, \mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3)$, dus het aantal verschillende vector systemen tot op inwendige derivaties na.

(ii) Probeer het resultaat uit (i) te veralgemenen op de groep G van diagonaalmatrices in $GL_n(\mathbb{Z})$. Deze groep is voortgebracht door de matrices $g_1, \ldots, g_n$, waarbij g_i en -1 in de i-de component van de diagonaal heeft en 1 elders. Er geldt $G \cong C_2^n$ en definiërende relaties zijn g_i^2 voor $1 \le i \le n$ en $g_ig_jg_ig_j$ voor $1 \le i < j \le n$.

•

We zullen dit aan een eenvoudig voorbeeld nagaan, namelijk de puntgroep van diagonaalmatrices, dus de groep $G \cong C_2^n \leq GL_n(\mathbb{Z})$. Men gaat na (zie opdracht hierboven) dat op de standaard voortbrengers met -1 in de i-de component de cocykels coördinaten in $\frac{1}{2}\mathbb{Z}$ moeten hebben en dat met behulp van de inwendige derivaties alleen maar de i-de coördinaat tot 0 gebracht kan worden. Hieruit volgt dat $H^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$ de orde $2^{n(n-1)}$ heeft.

De normalisator van G is de groep van monomiale matrices, dus van matrices met in ieder rij en kolom precies een element $\neq 0$ dat 1 of -1 kan zijn. Op de cocykels kunnen we de actie modulo 2 nemen, dus is de actie van de normalisator isomorf met de actie van S_n. Met het lemma van Cauchy/Frobenius (lemma van Burnside) laat zich het aantal banen bij een actie berekenen als het gemiddelde van het aantal vaste punten van elk element. De formule luidt

$$\#orb(\Omega \backslash G) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} |Fix_\Omega(g)|.$$

De dominante term in deze formule is de term voor $g = id$, want de identiteit heeft de meeste vaste punten. Hiermee laat zich het aantal banen naar beneden afschatten door $\#orb(\Omega \backslash G) \leq \frac{|\Omega|}{|G|}$. In ons geval krijgen we dus voor het aantal d_n van ruimtegroepen met de groep van diagonaalmatrices als puntgroep de afschatting

$$d_n \leq \left\lceil \frac{2^{n(n-1)}}{n!} \right\rceil.$$

In de volgende tabel noteren we met r_n het totale aantal equivalentieklassen van ruimtegroepen, met d_n het aantal equivalentieklassen met de groep van diagonaalmatrices als puntgroep en met $a_n := \lceil \frac{2^{n(n-1)}}{n!} \rceil$ onze afschatting voor het aantal ruimtegroepen in deze klasse. Verder geven we het aandeel $\frac{d_n}{r_n}$ van ruimtegroepen in deze klasse aan en de kwaliteit $\frac{a_n}{d_n}$ van de afschatting.

n	2	3	4	5	6
r_n	17	219	4783	222018	28927922
d_n	3	16	218	9608	1540944
a_n	2	11	171	8739	1491309
d_n/r_n	0.176	0.073	0.046	0.043	0.053
a_n/d_n	0.67	0.69	0.78	0.91	0.97

We zien aan de ene kant dat de afschatting a_n het aantal ruimtegroepen met de groep van diagonaalmatrices als puntgroep steeds beter benadert, aan de andere kant liggen in deze klas in dimensie 6 meer dan 5% van alle ruimtegroepen, en men kan ervan uitgaan dat het aantdeel met groeiende dimensie eerder stijgt dan daalt. Maar zelfs als we het aantal ruimtegroepen in dimensie n met a_n enigszins grof naar beneden afschatten, krijgen we:

$$a_7 = 8.7 \cdot 10^8, \quad a_8 = 1.8 \cdot 10^{12}, \quad a_9 = 1.3 \cdot 10^{16}, \quad a_{10} = 3.4 \cdot 10^{20}.$$

We kunnen met behulp van a_n ook de groei van het aantal groepen van dimensie n naar $n+1$ afschatten, er geldt $\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{2^{2n}}{n+1}$ en ook hier zien we duidelijk een exponentiële groei.

Voor de geïnteresseerde lezer zij hier nog een stukje MAGMA-code weergegeven, waarmee zich het aantal d_n van ruimtegroepen met de groep van diagonaalmatrices als puntgroep heel eenvoudig laat berekenen. Het idee hierbij is, dat de actie van de normalisator (isomorf met S_n) op $H^1(G, \mathbb{R}^n/\mathbb{Z}^n)$ in dit geval overeenkomt met de actie van S_n op geordende paren (i, j) met $1 \le i, j \le n$. Het aantal vaste punten van een permutatie π bij deze actie is $2^{b(\pi)}$, waarbij $b(\pi)$ het aantal banen van π op de paren is.

```
n := 10;
G := Sym(n);
S := GSet(G, {[1,2]});
C := ConjugacyClasses(G);
orb := 0;
for c in C do
  orb := orb + 2^#Orbits(sub< G | c[3] >, S) * c[2];
end for;
orb := orb / Factorial(n);
orb;
```

Als precieze waarden voor $d_7, \ldots, d_{10}$ krijgen we hiermee:

$$d_7 = 882033440, \quad d_8 = 1793359192848, \quad d_9 = 13027956824399552,$$
$$d_{10} = 341260431952972580352.$$

Als we verder doorgaan, vinden we bijvoorbeeld in dimensie $n = 24$ dat

$$a_{24} = 2.37603009062105008014983747732 \cdot 10^{142} \text{ en}$$
$$d_{24} \approx 2.37603009063968859111690123630 \cdot 10^{142},$$

de afwijking ligt dus pas in de elfde decimaal. Het precieze aantal is

$$d_{24} = 23\ 760\ 300\ 906\ 396\ 885\ 911\ 169\ 012\ 362\ 978\ 656\ 033\ 502\ 551\ 831$$
$$554\ 318\ 328\ 774\ 709\ 571\ 684\ 485\ 865\ 436\ 717\ 259\ 582\ 496\ 963\ 725$$
$$051\ 827\ 732\ 248\ 271\ 230\ 430\ 817\ 836\ 150\ 732\ 553\ 214\ 336\ 434\ 176\ .$$