Krystallografiske grupper

W. Fenchel

1. Lidt om forhistorien.

Krystallerne, som jo med god tilnærmelse kan betragtes som polyedre, har givet anledning til en lang række interessante matematiske undersøgelser. Som første bidrag til en geometrisk analyse af krystallernes former betragtes N. Stensens "lov om kant-vinklernes konstans" (1669). Den udsiger, at der hos forskellige krystaller af samme substans optræder de samme toplansvinkler mellem sidefladerne. Tænker man sig enhedsvektorer i de ydre normalretninger til en krystals sideflader afsat fra samme punkt o i rummet, får man følgelig en figur F, der – bortset fra flytning – er karakteristisk for den pågældende slags krystaller.

I den følgende tid blev adskillige andre fysiske og geometriske egenskaber ved krystallerne opdaget. De geometriske, der er af interesse her, blev præciseret og undersøgt af R. J. Haüy (fra 1784). Han sammenfattede dem i "de rationale indices lov" og "symmetriloven". Den første kan i nutidens sprog formuleres således: Lad $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ være planer, som hver indeholder en af en krystals sideflader, og som afgrænser et tetraeder. Indfør parallelkoordinatsystemet, hvis nulpunkt er skæringspunktet mellem α, β og γ, hvis akser er disse planers skæringslinier, og hvis enhedspunkter er aksernes skæringspunkter med δ. Loven udsiger da, at enhver anden sideflades plan har en ligning $ax + by + cz = 1$, hvor a, b, c (planens indices) har rationale forhold. (Man kan vise, at dette udsagn er uafhængigt af valget af $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.) I denne formulering synes loven utilgængelig for eksperimentel kontrol. Men meningen er, at a, b, c er proportionale med ret små hele tal. Symmetriloven handler om de til de forskellige krystalarter hørende figurer F. En sådan tillader i almindelighed visse ortogonale afbildninger på sig selv, altså drejninger om akser gennem toppunktet o, spejlinger i planer gennem o, drejspejlinger, dvs. afbildninger, der er sammensat af en drejning og en spejling i en plan vinkelret på drejningsaksen. Symmetriloven udsiger, at der af sådanne "symmetrielementer" foruden spejlinger i planer kun forekommer drejninger og drejspejlinger med drejningsvinkler $\frac{\pi}{2}$, $\frac{\pi}{3}$ og multipla heraf. Med andre ord, der forekommer kun drejninger af orden 2, 3, 4 eller 6 og drejspejlinger af orden 2, 4 eller 6. Ud fra en hypotese om krystallernes struktur, hvorefter de på en vis måde er sammensat af små indbyrdes kongruente polyedre, kunne Haüy give en begrundelse for de to nævnte love. Vi vender tilbage hertil på grundlag af mere realistiske antagelser.

Symmetriloven har givet anledning til en fordeling af krystallerne på 7 krystalsystemer (Chr. S. Weiss, 1815). En matematisk tilfredsstillende motivering herfor blev først fundet senere. Den vil fremgå af det følgende.

Den grundlæggende inddeling i de såkaldte krystalklasser skyldes J. Fr. Chr. Hessel (1830). Hans udgangspunkt var, at hvis en figur F tillader visse symmetrielementer, da tillader den nødvendigvis også de af disse sammensatte. Han stillede sig opgaven, at finde alle mulige kombinationer af symmetrielementer. Inkluderende den identiske afbildning fandt han 32 muligheder. I gruppeteoriens sprog (som Hessel ikke havde til rådighed) drejer det sig om at bestemme alle grupper af ortogonale transformationer, hvis elementer er tilladt ifølge symmetriloven. Det er let at se, at alle disse grupper må være af endelig orden. Herefter ligger det nær at søge at bestemme alle endelige ortogonale grupper. Den første, der har løst denne opgave, synes at have været A. Bravais (1848). Han har også ydet andre væsentlige bidrag til emnet, som vil blive omtalt senere.

2. Ortogonale grupper og ortogonal-ækvivalens.

Lad der være valgt et sædvanligt retvinklet koordinatsystem $(o; \underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ i rummet. Koordinaterne betegnes x_1, x_2, x_3. En isometrisk, dvs. afstandsbevarende, afbildning af rummet på sig selv, der lader o fast, er da bestemt ved en lineær transformation

$$y = Ax,$$

hvor $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$, $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$, og A er en 3×3 ortogonal matrix, den opfylder altså

$$A'A = AA' = E, \quad \text{og dermed} \quad \det A = \pm 1,$$

hvor A' er den transponerede til A, og E betegner enhedsmatrix. Disse transformationer danner den ortogonale gruppe $O_3(\mathbb{R})$, kort O_3, idet der i det følgende kun optræder reelle tal. Dens elementer kan betegnes ved de pågældende matricer, og den kan opfattes som gruppen af ortogonale matricer.

De ortogonale matricer med determinant 1 svarende til de orienteringsbevarende isometrier danner en undergruppe

O_3^+ af indeks 2. Sideklassen O_3^- består af matricerne med determinant -1 svarende til isometrierne, som vender orienteringen. Elementerne i O_3^+ er, bortset fra identiteten, drejninger om akser gennem o, og elementerne i O_3^- er spejlinger i planer gennem o eller drejspejlinger med akser og de på disse vinkelrette spejlingsplaner gennem o.

En klassifikation af undergrupper i O_3 forudsætter en fastsættelse af, hvornår to af dem skal regnes til samme klasse. Det er klart, at fra geometrisk synspunkt giver isomorfi en for grov inddeling; f.eks. vil man ikke regne de to isomorfe grupper, der består af identiteten og henholdsvis en halv omdrejning og en spejling, til samme klasse. Man definerer: To undergrupper Γ' og $\tilde{\Gamma}'$ siges at være <u>ortogonal-ækvivalente</u>, hvis der findes $U \in O_3$ således, at

$$\tilde{\Gamma}' = U\Gamma' U^{-1},$$

dvs. at når A gennemløber Γ', skal UAU^{-1} gennemløbe $\tilde{\Gamma}'$. Det kræves altså, at Γ' og $\tilde{\Gamma}'$ er konjugerede undergrupper i O_3. Geometrisk betyder dette følgende: U bestemmer en isometrisk afbildning af rummet på sig selv. Hvis $y = Ax$ og $\tilde{x} = Ux$, $\tilde{y} = Uy$, da gælder $\tilde{y} = UAU^{-1}\tilde{x}$. Er x fixpunkt ved A, altså $Ax = x$, vil $\tilde{x} = Ux$ være fixpunkt ved UAU^{-1}. Drejningsakserne og spejlingsplanerne for elementerne i Γ' afbildes følgelig ved U på dem for $\tilde{\Gamma}'$. En anden fortolkning, som ofte er nyttig, beror på at $\tilde{x} = Ux$ kan opfattes som koordinattransformation. $\tilde{\Gamma}'$ bliver da Γ' skrevet i de nye koordinater.

O_3 er undergruppe i den generelle lineære gruppe $GL_3(\mathbb{R})$, der består af alle bijektive lineære transformationer eller, hvad der kommer ud på det samme, af alle reelle 3×3 matricer med fra 0 forskellig determinant. To undergrupper i GL_3 vil vi kalde <u>lineær-ækvivalente</u>, hvis de er konjugerede i GL_3. Med henblik på senere anvendelser nævnes følgende sætning, som for endelige ortogonale grupper vil fremgå af senere resultater:

Hvis to undergrupper Γ og $\tilde{\Gamma}$ af O_3 er lineær-ækvivalente, dvs. hvis der findes $M \in GL_3$, således at $\tilde{\Gamma} = M\Gamma M^{-1}$, da er de også ortogonal-ækvivalente, dvs. der findes $U \in O_3$ med $\tilde{\Gamma} = U\Gamma U^{-1}$.

<u>3. De endelige ortogonale grupper.</u>

Lad Γ være en endelig undergruppe af O_3^+ og $N \geq 2$ dens orden. Bortset fra identiteten består den af drejninger. Lad p betegne et af skæringspunkterne mellem en drejningsakse og enhedskuglen. Blandt drejningerne i Γ om denne akse findes to, hvis drejningsvinkler har den mindste positive absolutværdi. Lad A være én af disse. Undergruppen i Γ, hvis elementer lader p fast, er cyklisk og frembringes af A. Er $\nu \geq 2$ dens orden, kaldes p et ν-centrum. For hvert $B \in \Gamma$ vil da Bp også være et ν-centrum, nemlig for den ved BAB^{-1} frembragte undergruppe. De centrer, der på denne måde fås ud fra p, sammenfattes til en klasse. Den er uafhængig af, hvilket af dens centrer man starter med. For to elementer $B, C \in \Gamma$ vil der gælde $Bp = Cp$, hvis og kun hvis $B^{-1}C$ lader p fast og følgelig er en potens af A. Hvert punkt i klassen fremgår altså af p ved precis ν elementer af Γ. Antallet af ν-centrer i klassen er altså N/ν.

Der findes i alt endelig mange klasser. Lad $\nu_1, \dots, \nu_k$ være de tilhørende cykliske gruppers ordner. For det dobbelte antal af fra E forskellige elementer i Γ får man da

$$2(N-1) = \sum_{\varkappa=1}^{k} \frac{N}{\nu_\varkappa}(\nu_\varkappa - 1)$$

idet der i den $\varkappa$-te klasse findes $\frac{N}{\nu_\varkappa}$ $\nu_\varkappa$-centrer, til hvert af hvilke der hører $\nu_\varkappa - 1$ drejninger forskellig fra E, og hver af disse drejninger i alt optræder 2 gange, fordi hver drejningsakse bestemmer 2 diametralt modsatte centrer. Den fundne ligning kan skrives

$$2 - \frac{2}{N} = \sum_{\varkappa=1}^{k} \left(1 - \frac{1}{\nu_\varkappa}\right).$$

Idet $1 \leqq 2 - \frac{2}{N} < 2$ og hvert led på højre side er større end eller lig med $\frac{1}{2}$ og mindre end 1, må k være lig 2 eller 3. For $k = 2$ fås $\frac{2}{N} = \frac{1}{\nu_1} + \frac{1}{\nu_2}$, altså $\nu_1 = \nu_2 = N$, idet $\nu_1, \nu_2 \leqq N$. Hvis $k = 3$ og man antager $\nu_1 \leqq \nu_2 \leqq \nu_3$, må der gælde $\nu_1 = 2$, idet højre side ellers ville blive mindst 2. Er også $\nu_2 = 2$, er ligningen opfyldt for $\nu_3 \geqq 2$ og $N = 2\nu_3$. For $4 \leqq \nu_2 \leqq \nu_3$ ville højre side igen være mindst 2. Altså forbliver kun $\nu_2 = 3$. Ligningen reduceres da til $\frac{2}{N} = \frac{1}{\nu_3} - \frac{1}{6}$, hvoraf ses, at $\nu_3 < 6$. Der kommer altså kun $\nu_3 = 3, 4, 5$ i betragtning. I alt er der altså følgende muligheder:

	ν_1	ν_2	ν_3	N	
I	n	n		n	$n = 2, 3, \ldots$
II	2	2	n	$2n$	$n = 2, 3, \ldots$
III	2	3	3	12	
IV	2	3	4	24	
V	2	3	5	60	

Det drejer sig nu om at vise, at der til hver af disse muligheder findes en drejningsgruppe, og dernæst, at den er entydig bestemt på nær ortogonal-ækvivalens.

I tilfældet I er der to klasser af n-centrer hver bestående af ét punkt, og disse punkter må være diametralt modsatte, altså ligge på samme "n-akse". Dette gælder netop for den cykliske gruppe C_n frembragt af drejningen med drejningsvinklen $\frac{2\pi}{n}$ om denne akse. Da aksens stilling bestemmer gruppen, er det klart, at to sådanne grupper er ortogonal-ekvivalente.

I tilfældet II er der to klasser af 2-centrer med n punkter i hver, altså n 2-akser, samt én klasse af n-centrer bestående af 2 punkter, altså én n-akse. Idet den halve omdrejning om en 2-akse må ombytte de to n-centrer, må 2-akserne være vinkelrette på n-aksen. Endvidere må hver klasse af 2-centrer bestå af en regulær n-kants vinkelspidser, idet den afbildes på sig selv ved drejningerne om n-aksen. Alt dette gælder for gruppen af drejninger, der fører en regulær n-kant over i sig selv, og kun for en sådan. Alle disse grupper er øjensynlig indbyrdes ortogonal-ekvivalente. Idet man i denne forbindelse opfatter en regulær n-kant som et regulært polyeder med to sammenfaldende sideflader, et _dieder_, kalder man en sådan gruppe ~~en~~ _diedergruppe_ og betegner den med D_n.

I tilfældet III findes to klasser af 3-centrer med 4 i hver. Man ser let, at punkterne tilhørende samme klasse må have parvis lige store afstande, altså være et regulært tetraeders hjørner. De to tetraedre fremgår af hinanden ved spejling i punktet o. Gruppen af drejninger, der fører et af tetraederne, og dermed også det andet, over i sig selv, opfylder kravene, idet modstående kanters fællesnormaler er de 3 påkrævede 2-akser. En sådan gruppe kaldes _tetraedergruppen_ og betegnes med T. Det er klart, at kravene fastlægger den på nær ortogonal-ekvivalens.

I tilfældet IV findes en klasse bestående af 6 4-centrer, altså 3 4-akser. Man ser let, at de parvis må stå vinkelret på hinanden. De 6 4-centrer skal altså være et regulært oktaeders hjørner. Gruppen af drejninger, som fører oktaedret over i sig selv, opfylder kravene og er bestemt på nær ortogonal-ækvivalens. En sådan gruppe kaldes oktaedergruppe og betegnes med O. Idet midtpunkterne af et regulært oktaeders sideflader er en ternings hjørner, er O tillige gruppen af drejninger, der fører en terning over i sig selv.

I tilfældet V er der en klasse bestående af 12 5-centrer. Det kan vises, at de må være et regulært ikosaeders hjørner, og at gruppen af drejninger, der fører ikosaedret over i sig selv, opfylder kravene og er bestemt på nær ortogonal-ækvivalens. En sådan gruppe kaldes ikosaedergruppe og betegnes med I. Idet midtpunkterne af et regulært ikosaeders sideflader er et regulært dodekaeders hjørner, er en gruppe I tillige gruppen af drejninger, der fører et regulært dodekaeder over i sig selv.

Inkluderer man gruppen bestående af identiteten alene med betegnelsen C_1, har man altså følgende typer af endelige drejningsgrupper:

$$C_n, n=1,2,\dots, \quad D_n, n=2,3,\dots, \quad T, \ O, \ I.$$

Strengt taget står disse symboler for klasser af ortogonal-ækvivalente grupper, men man tillader sig f.eks. at tale om diedergruppen D_n.

Vi bestemmer nu de endelige ortogonale grupper, der indeholder orienteringsvendende elementer. Lad Γ^* betegne en sådan. De orienteringsbevarende elementer i den udgør en undergruppe Γ af indeks 2. Er $U \in \Gamma^* \setminus \Gamma$, har man altså $\Gamma^* = \Gamma \cup U\Gamma$. Omvendt kan man udvide en drejningsgruppe Γ til en gruppe Γ^* ved at adjungere en passende spejling eller drejspejling U. For denne må øjensynlig gælde, at $U^2 = E$ og $U\Gamma U^{-1} = \Gamma$, altså at U afbilder figuren bestående af drejningsakserne hørende til Γ på sig selv under bevarelse af ordnerne. Disse betingelser ses let også at være tilstrækkelige. For hver af de fundne drejningsgrupper kan man uden besvær angive egnede isometrier U. Men for at sikre, at man får alle muligheder med og ingen flerdobbelt, er en lidt anden fremgangsmåde at foretrække. Man fæster opmærksomheden på spejlingen i punktet o; den er identisk med en (vilkårlig) drejspejling med drejningsvinkel π. Den er bestemt ved matricen $-E$ og er ombyttelig med enhver lineær transformation. Krystallograferne kalder den <u>inversionen</u> og betegner den med <u>i</u>. Den opfylder øjensynlig de stillede krav. Men det ses også let direkte, at $\Gamma^* = \Gamma \cup i\Gamma$ for hver endelig drejningsgruppe Γ er en endelig ortogonal gruppe. Omvendt kan hver gruppe Γ^*, der indeholder i, fås på denne måde. Af de fundne drejningsgrupper fås grupper, som vi foreløbig betegner $C_{ni}, D_{ni}, T_i, O_i, I_i$.

Lad nu Γ^* være en endelig ortogonal gruppe, som indeholder en orienteringsvendende isometri, men ikke inversionen. Hvis Γ er drejningsundergruppen og Γ' dens sideklasse, altså $\Gamma^* = \Gamma \cup \Gamma'$, vil $\Gamma \cup i\Gamma' = \Delta$ være en drejningsgruppe, idet alle elementer i $i\Gamma'$ er orienteringsbevarende, og gruppeegenskaberne følger af dem af $\Gamma \cup \Gamma'$ og ombytteligheden af <u>i</u> med alle elementer. Endvidere er $\Gamma \cap i\Gamma' = \emptyset$; thi ellers ville <u>$i$</u> være produkt af et element af Γ og et element af Γ' og følgelig tilhøre Γ^*. Δ har altså samme orden som Γ^*, og det er let at se, at de to grupper er isomorfe.

Omvendt, er der givet en drejningsgruppe Δ med en undergruppe T' af indeks 2, vil $T' \cup i(\Delta \setminus T')$ være en endelig ortogonal gruppe, som vi foreløbig betegner med $T'(\Delta)$. For at få samtlige sådanne grupper skal man altså for hver drejningsgruppe finde de andre, i hvilke den er undergruppe af indeks 2. For C_n er det C_{2n} og D_n, for D_n er det D_{2n}, for T er det O, medens O og I ikke er undergrupper i nogen af de andre. Herefter har man alt i alt følgende endelige ortogonale grupper:

$$
\begin{array}{llllll}
C_n & n=1,2,\dots, & D_n & n=2,3,\dots, & T, & O, \quad I \\
C_{ni} & & D_{ni} & & T_i & O_i \quad I_i \\
C_n(C_{2n}) & & D_n(D_{2n}) & & T(O) & \\
C_n(D_n) & n=2,3,\dots & & & &
\end{array}
$$

Ifølge symmetriloven er I, I_i og alle med mærketal $n=5$ samt alle med n eller $2n$ større end 6 uden interesse for krystallografien. Der forbliver Hessels 32 krystalklasser. De er med delvis andre betegnelser opført på det uddelte skema. En væsentlig del af grupperne indeholder spejlinger. Dette ses af, at $\underline{i}$ sammensat med en halv omdrejning giver spejlingen i planen gennem o vinkelret på drejningens akse. De anvendte betegnelser, der går tilbage til A. Schoenflies (1891), angiver ved en indeks en spejling, ved hvis adjunktion en sådan gruppe fås ud fra den pågældende drejningsgruppe. Man tænker den eller en af drejningsakserne med højest orden anbragt lodret (dog med undtagelse af T, der betragtet som undergruppe af O får en lodret 2-akse). Spejling i den horisontale plan angives ved indeks h, i en vertikal plan ved indeks v. Ved indeks d angives spejling i en "diagonalt" beliggende plan, dvs. en plan, der halverer vinklen mellem to 2-akser, som danner den mindste mellem sådanne optrædende vinkel, og står vinkelret på disse aksers plan. Bortset fra drejningsgrupperne er C_{ni} for ulige n og $C_n(C_{2n})$ for lige n de eneste, der ikke indeholder spejlinger. De sidstnævnte betegnes S_{2n}. S_{2n} er cyklisk og frembringes af en drejespejling med drejningsvinkel $\frac{\pi}{n}$. Schoenflies' betegnelsen er herefter følgende:

$C_n \quad n = 1, 2, \dots \qquad D_n \quad n = 2, 3, \dots \qquad T \quad O \quad I$

$C_{ni} = \begin{cases} C_{ni} & n \text{ ulige} \\ C_{nh} & n \text{ lige} \end{cases} \qquad D_{ni} = \begin{cases} D_{nd} & n \text{ ulige} \\ D_{nh} & n \text{ lige} \end{cases} \qquad T_i = T_h \quad O_i = O_h \quad I_i = I_d$

$C_n(C_{2n}) = \begin{cases} C_{nh} & n \text{ ulige} \\ S_{2n} & n \text{ lige} \end{cases} \qquad D_n(D_{2n}) = \begin{cases} D_{nh} & n \text{ ulige} \\ D_{nd} & n \text{ lige} \end{cases} \qquad T(O) = T_d$

$C_n(D_n) = C_{nv} \quad n = 2, 3, \dots$

Krystallograferne bruger nu et andet betegnelsessystem, det såkaldte internationale.

4. Gitre.

Spekulationerne over krystallernes struktur førte til en hypotese, der viste sig at være særdeles frugtbar, ikke mindst fra matematisk synspunkt. Den går ud på, at en krystals molekyler, der antages ens, er placeret i punkterne af et "gitter" (M. L. Frankenheim, 1835). De dermed forbundne geometriske problemer blev behandlet udtømmende af A. Bravais (1849).

En vektor i det sædvanlige rum bestemmer en translation og omvendt. I betragtning heraf skrives i det følgende sammensætning af translationer additiv.

Vi betragter grupper af translationer, der opererer diskontinuert, dvs. for hvilke "banen" af et punkt ikke fortætter sig.

Det er let at se, at hvis dette gælder for ét punkt, gælder det også for hvert andet. Man kan vise, at enhver sådan gruppe Θ har en basis, dvs. der findes lineært uafhængige $v_\lambda \in \Theta$, $\lambda = 1, \dots, \ell$, $\ell \leq 3$, således at

$$\Theta = \{ n_1 v_1 + \dots + n_\ell v_\ell \mid n_\lambda \in \mathbb{Z} \}.$$

Banen Θp af et punkt p består af punkterne, der fås ved fra p at afsætte samtlige vektorer i Θ. Den kaldes et lineært, et plant eller et rumligt gitter, eftersom $\ell = 1, 2$ eller 3. (Her er set bort fra tilfældet, hvor Θ kun består af identiteten.)

De nævnte forestillinger om en krystal går ud på, at molekylernes tyngdepunkter danner et rumgitter, at krystallens symmetrielementer er elementerne i den ortogonale gruppe, der lader et punkt fast og afbilder gitret på sig selv, eller en undergruppe af den, såfremt molekylerne har ringere symmetri. Som krystalflader antages at optræde "gitterplaner", dvs. planer, der indeholder tre ikke kollineære gitterpunkter og dermed et helt plant gitter.

De rationale indices lov er en umiddelbar konsekvens heraf. Vælges et gitterpunkt som nulpunkt og vektorerne i en gitterbasis som enhedsvektorer for et parallelkoordinatsystem, vil nemlig gitterplanerne med hensyn til dette have ligninger med rationale koefficienter. Overgangen til andre gitterplaner som koordinatplaner sker ved en koordinattransformation, hvis matrix har rationale elementer, og heraf sluttes loven i den fremsatte almindelige form.

Symmetriloven er ligeledes en simpel konsekvens af antagelserne. Først bemærkes, at hvis en ortogonal gruppe Γ_o, der lader et punkt o fast, afbilder et rumgitter Θp på sig selv, vil den "parallelforskudte" gruppe T_p der lader p fast, ligeledes afbilde gitret Θ_p på sig selv. Dette følger simpelthen af, at elementerne af T_0' afbilder hver gittervektor, altså en vektor, der forbinder to gitterpunkter, på en gittervektor. Følgelig gør T_p det samme. Afsættes gittervektorerne fra p, fås påstanden. Endvidere bemærkes, at hvis D er en akse for en drejning eller drejspejling tilhørende T_p, vil planen δ gennem p vinkelret på D være en gitterplan. Er nemlig q et gitterpunkt, som ikke ligger på D, og q^* dets billede ved drejningen eller drejspejlingen, vil henholdsvis vektoren $\overrightarrow{qp}$ eller $\overrightarrow{pq}$ afsat fra q^* ende i et gitterpunkt beliggende i δ. Anvendes det samme på et passende, fra q forskelligt gitterpunkt, ses, at der findes tre ikke kollineære gitterpunkter i δ, og dette giver påstanden. Symmetriloven er hermed reduceret til påstanden, at kun drejninger af orden 2, 3, 4, 6 om et gitterpunkt p kan afbilde et plant gitter på sig selv. Lad q være et af de fra p forskellige gitterpunkter, der har minimal afstand fra p, og lad q^* være billedet af q ved en drejning vinklen $\frac{2\pi}{n}$. Hvis $n > 6$, ville der gælde $|\overrightarrow{qq^*}| < |\overrightarrow{pq}|$, i strid med, at $\overrightarrow{pq}$ er gittervektor med minimal længde. Hvis $n = 5$, betragtes billedet q^{**} af q ved drejningen vinklen $\frac{4\pi}{5}$. Vektoren $\overrightarrow{pq}$ afsat fra q^{**} ville da ende i et gitterpunkt med afstand fra p mindre end $|\overrightarrow{pq}|$, i strid med antagelsen om q.

Den maksimale ortogonale gruppe, hvis elementer afbilder et gitter på sig selv, kaldes gitrets <u>holoedri</u>; dens undergrupper af indeks 2 og 4 henholdsvis gitrets <u>hemiedrier</u> og <u>tetartoedrier</u>. Der opstår nu spørgsmålet, hvilke af de 32 krystalklasser der kan optræde som holoedrier, og hvordan de pågældende gitre kan karakteriseres. Klassifikation af gitrene efter deres holoedrier viser sig at være for grov, efter isometri oplagt for fin. Det er nødvendigt at inddrage rummets <u>affine gruppe</u> Aff_3. Den består af alle transformationer, der med hensyn til et valgt parallelkoordinatsystem kan skrives

$$y = Ax + a , \qquad \det A \neq 0 .$$

Her er A en regulær 3×3 matrix, a en søjlematrix, x og y koordinatsøjlerne for henholdsvis original- og billedpunkt. Vi skriver kort (A,a) for en sådan affin transformation. Gruppekompositionen $(B,b)(A,a)$ ses da af

$$y = Ax + a \quad z = By + b = BAx + Ba + b$$

at være

$$(B,b)(A,a) = (BA, Ba+b),$$
$$(A,a)^{-1} = (A^{-1}, -A^{-1}a),$$

idet etelementet, altså den identiske afbildning, er $(E,0)$.

Et rumgitter er bestemt, når et af dets punkter, p, og en diskontinuert translationsgruppe Θ (med 3 lineært uafhængige translationer) er givet. Lad T_Θ være gitrets holoedri. Vi betegner da gitret (p,Θ,T_Θ). Er også $(\tilde{p},\tilde{\Theta},T_{\tilde{\Theta}})$ et gitter, siges det at være <u>ækvivalent</u> med (p,Θ,T_Θ), hvis der findes en affin transformation (M,m), således at

$$\tilde{p} = Mp + m , \qquad M\Theta = \tilde{\Theta} , \qquad MT_\Theta M^{-1} = T_{\tilde{\Theta}} .$$

hvor Θ og $\tilde{\Theta}$ skal fortolkes som grupper af vektorer. (Hvis de fortolkes som transformationsgrupper, skal det andet krav skrives $M\Theta M^{-1} = \tilde{\Theta}$.) Dette går ud på, at en basis (v_1,v_2,v_3) for Θ ved M afbildes på en basis (Mv_1, Mv_2, Mv_3) for $\tilde{\Theta}$, og at T_Θ fremstillet i koordinatsystemet $(p; v_1,v_2,v_3)$ stemmer overens med $T_{\tilde{\Theta}}$ fremstillet i koordinatsystemet $(\tilde{p}; Mv_1, Mv_2, Mv_3)$. Heraf kan man slutte, at T_Θ og $T_{\tilde{\Theta}}$ hører til samme krystalklasse, skønt M almindeligvis ikke er ortogonal. Grupperne er jo isomorfe og tilsvarende elementer er af samme slags. (Jf. også den i begyndelsen nævnte sætning.) Det omvendte gælder imidlertid ikke; gitre, hvis holoedrien tilhører samme krystalklasse, behøver ikke at være ækvivalente. Dertil kræves yderligere, at de har baser, på hvilke holoedrierne opererer på samme måde.

Bravais har vist, at der findes 14 ækvivalensklasser af gitre med i alt 7 forskellige holoedrier. For at vise, hvorledes dette kan gøres, betragtes de to simpleste tilfælde. Ethvert gitter tillader inversionen $\underline{i}$. De "fleste" gitre tillader ikke andre ortogonale transformationer og er oplagt indbyrdes ækvivalente; fordi der findes en affin transformation, der fører det ene over i det andet, og da $\underline{i}$ er ombyttelig med alle lineære transformationer, er betingelsen for holoedrierne, som her er C_i, trivielt opfyldt. Antag nu, at et gitter tillader C_2, altså en halvdrejning om en akse D gennem et gitterpunkt p. Som vist tidligere indeholder planen α gennem p vinkelret på D et plant delgitter. Lad v_1, v_2 være en basis for dette. Hver plan parallel med α gennem et gitterpunkt indeholder et gitter, som fremgår af det i α ved en translation. Da gitrets translationsgruppe er diskontinuert, findes blandt disse planer to, der har minimal positiv afstand fra α. Lad β være en af disse, w_3 vektoren fra p til et gitterpunkt i β og $\bar{w}_3$ ortogonalprojektionen af w_3 på α. Det kan vises, at (v_1, v_2, w_3) er en basis for det givne gitter. Den halve omdrejning om D fører w_3 over i w_3^*. Da er $w_3 - w_3^* = 2\bar{w}_3$ en gittervektor parallel med α, altså

$$2\bar{w}_3 = m_1 v_1 + m_2 v_2 \,, \quad m_1, m_2 \in \mathbb{Z} .$$

Nu kan w_3 erstattes med $v_3 = w_3 + n_1 v_1 + n_2 v_2$, $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$. I stedet for

$2\bar{v}_3$ fås da

$$2\bar{v}_3 = (m_1 + 2n_1)v_1 + (m_2 + 2n_2)v_2 .$$

Ved passende valg af n_1 og n_2 kan opnås, at koefficienterne til v_1 og v_2 bliver 0 eller 1. Der er herefter fire muligheder:

$$\bar{v}_3 = 0, \quad \bar{v}_3 = \tfrac{1}{2}v_1 , \quad \bar{v}_3 = \tfrac{1}{2}v_2 , \quad \bar{v}_3 = \tfrac{1}{2}(v_1 + v_2) .$$

I det første tilfælde er v_3 vinkelret på α, og det pågældende "simple" gitter kan tænkes opbygget af rette prismer, hvis grundflade er et parallelogram, som er hverken en rombe eller et rektangel. Holoedrien er da C_{2h}. Alle disse gitre ses let at være ækvivalente. De to sidste tilfælde er ikke væsentlig forskellige fra det første, idet man i stedet for (v_1, v_2) kan vælge (v_2, v_1) eller $(v_1 + v_2, v_2)$ som basis for gitret i α. Gitret kan opbygges af prismer som de nævnte, hvor, foruden hjørnerne, midtpunkterne af ét par modstående rektangulære sideflader er gitterpunkter. Holoedrien er også her C_{2h}. Disse "enkelt fladecentrerede" gitre ses let at være indbyrdes ækvivalente. Men de er ikke ækvivalente med de simple gitre, idet disse har en basis, hvis ene vektor lades fast ved den halve omdrejning, medens de andre går over i de modsatte. De fladecentrerede gitre har imidlertid ikke nogen basis, der afbildes på denne måde.

På tilsvarende måde kan bestemmes klasserne af de gitre, som tillader D_2, C_3, C_4, C_6; T. De tilsvarende holoedrier viser sig at være D_{2h}, D_{3d}, D_{4h}, D_{6h}, O_h. Sammen med C_i og C_{2h} giver de anledning til fordeling af de 32 krystalklasser på 7 krystalsystemer. Til det til en holoedri bestemte system regnes hver af dens undergrupper, for hvilken det gælder, at hvis et gitter tillader den, vil det også tillade holoedrien.

5. De aritmetiske klasser.

De omtalte resultater tillader en ny karakterisering af krystalklasserne og en, som det vil vise sig, nyttig videredeling af dem.

Lad Θ være vektorgruppen for et rumgitter og (v_1, v_2, v_3) en basis for den. En lineær afbildning, som lader et gitterpunkt p fast og afbilder gitret på sig selv, vil med hensyn til koordinatsystemet $(p; v_1, v_2, v_3)$ være bestemt ved en matrix P med heltallige elementer og determinant ± 1. Omvendt vil enhver sådan matrix bestemme en afbildning af gitret på sig selv. En basis afbildes på en basis, og en sådan afbildning er bestemt ved for en valgt basis at foreskrive dettes billede. De omtalte matricer danner en gruppe, den udvidede unimodulære gruppe Ω_3. Undergruppen Ω_3^+, hvis elementer har determinant $+1$, kaldes den unimodulære gruppe.

Lad Γ være en ortogonal gruppe, der afbilder gitret på sig selv, som altså tilhører en krystalklasse. Benyttes $(p; v_1, v_2, v_3)$ som koordinatsystem, vil elementerne i Γ blive bestemt ved matricer tilhørende Ω_3. Er Γ oprindelig henført til et sædvanligt retvinklet koordinatsystem, findes der altså en matrix M, således at $M\Gamma M^{-1}$ er en undergruppe af Ω_3. Vi kan altså sige, at hver krystalklasse er lineær-ækvivalent med en endelig unimodulær gruppe.

Heraf fås et nyt simpelt bevis for symmetriloven: For et $A \in \Gamma$, som jo er en drejning eller drejspejling (specielt spejling), kan det retvinklede koordinatsystem vælges således, at den tredje koordinatakse er drejningsaksen eller normal til spejlingsplanen. Da har man

$$A = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix}$$

hvor α er drejningsvinklen. For et vist M er MAM^{-1} en matrix med hele elementer. Nu har denne samme spor som A, altså

$$\operatorname{tr} A = 2\cos\alpha \pm 1 = \operatorname{tr}(MAM^{-1}) \in \mathbb{Z}.$$

Følgelig er $\cos\alpha = 0, \pm\frac{1}{2}, \pm 1$, og dette giver symmetriloven.

Man kan spørge, om enhver endelig unimodulær gruppe, dvs. enhver endelig undergruppe i Ω_3, er linear-ækvivalent med en ortogonal gruppe, altså en krystalklasse. Svaret er bekræftende. Beviset beror på følgende sætning: Enhver endelig linear gruppe lader en positiv definit kvadratisk form invariant. Bevis: Lad $P_1, \dots, P_n$ være matricerne, der med hensyn til et valgt parallelkoordinatsystem bestemmer gruppens elementer. Koordinaterne x_1, x_2, x_3 sammenfattes til en søjlematrix x, og den transponerede, altså rækkematricen, betegnes x'. Matrixproduktet $x'x = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ er da den kvadratiske enhedsform. Man danner

$$\sum_{i=1}^{n} (P_i x)' P_i x = \sum_{i=1}^{n} x' P_i' P_i x .$$

Dette er øjensynlig en positiv definit kvadratisk form, og den er invariant ved gruppen. Erstattes nemlig x med $P_k x$, fås

$$\sum_{i=1}^{n} (P_i P_k x)' P_i P_k x ,$$

og dette er lig med det oprindelige, idet $P_i P_k$, $i = 1, \dots, n$, er $P_1, \dots, P_n$ blot i en anden orden. Dermed er sætningen bevist. Nu kan enhver positiv definit kvadratisk form ved en linear transformation overføres i enhedsformen. Ved samme transformation går gruppen over i en ortogonal gruppe.

I stedet for krystalklasserne kan man altså betragte de endelige unimodulære grupper. Det ligger nær at foretage følgende klassedeling af disse. To unimodulære grupper siges at være <u>unimodulær-ækvivalente</u>, hvis de er konjugerede undergrupper i Ω_3. Klasserne af unimodulær-ækvivalente endelige unimodulære grupper kaldes de aritmetiske krystalklasser.

Hvis to endelige unimodulære grupper Σ og $\tilde{\Sigma}$ hører til samme aritmetiske klasse, og hvis de er lineær-ækvivalente med de ortogonale grupper Γ og $\tilde{\Gamma}$, da er Γ og $\tilde{\Gamma}$ lineær-ækvivalente, altså ifølge en tidligere nævnt sætning ortogonal-ækvivalente, dvs. de hører til samme krystalklasse i hidtidig forstand, til samme geometriske krystalklasse. Det omvendte er imidlertid ikke rigtigt. Unimodulære grupper fra forskellige aritmetiske klasser kan være lineær-ækvivalente med samme ortogonale gruppe. Inddelingen i aritmetiske klasser kan herefter opfattes som en videredeling af de geometriske. Det er ikke oplagt, at der findes kun endelig mange aritmetiske klasser. Vi kan dog slutte det af, at der kun findes endelig mange klasser af gitre. Lad nemlig $(p, \Theta, \Gamma_\Theta)$ være et gitter med holoedri Γ_Θ. Benyttes $(p; v_1, v_2, v_3)$ som koordinatsystem, hvor p tilhører gitret og (v_1, v_2, v_3) er en basis, vil Γ_Θ være fremstillet ved en unimodulær gruppe, og ved overgang til alle mulige baser fås hele den pågældende aritmetiske klasse. Hver af de endelig mange undergrupper af Γ_Θ bestemmer ligeledes en aritmetisk klasse. (Her må det tages i betragtning, at Γ_Θ kan have flere undergrupper hørende til samme geometriske, men ikke samme aritmetiske klasse. Eksempler vil blive omtalt senere.) Det er let at se, at ækvivalente gitre bestemmer de samme aritmetiske klasser. Der findes altså kun endelig mange af dem.

Spørgsmålet er, hvilke af de således bestemte klasser der er indbyrdes forskellige. Det er let at se, at gitre, hvis holoedrier tilhører samme aritmetiske klasse, er ækvivalente. En holoedrie geometriske klasse falder altså i så mange aritmetiske som der er klasser af gitre i det pågældende krystalsystem. Det viser sig, at også enhver anden geometrisk krystalklasse falder i mindst så mange aritmetiske som der er klasser af gitre hørende til det pågældende krystalsystem, i nogle tilfælde endda flere. Således kan C_{2v} operere på to forskellige måder på det andet af de fire rombiske gitre: C_{2v} frembringes af spejlingerne i to på hinanden vinkelrette planer. Disse kan vælges begge lodrette eller den ene lodret og den anden vandret, hvilket giver to forskellige aritmetiske klasser. Tilsvarende kan D_{2d} operere på to forskellige måder på hvert af de to tetragonale gitre. Dette beror på, at de to vandrette 2-akser kan ligge på to forskellige måder i det vandrette kvadratiske plangitter, der indeholder p. Endvidere gælder tilsvarende for D_{3h} i det hexagonale system, og endelig viser det sig, at alle fem grupper i det trigonale system også kan operere på det hexagonale gitter, de tre af dem endda på to måder. Man får således yderligere 8 aritmetiske klasser.

Man kommer således til i alt 73 aritmetiske krystalklasser. Denne klassedelings betydning vil fremgå af det følgende.

6. Regelmæssige punktsystemer og rumgrupper.

Hypotesen om krystallernes gitterstruktur tillader, som det fremgår af det foregående, en naturlig og simpel udledning af krystallernes geometriske egenskaber. Derimod knibede det med forståelsen af visse fysiske. Også fra matematisk synspunkt var det nærliggende at spørge, om en regelmæssig opbygning nødvendigvis måtte være gitterformet. Omkring 1870 kom flere til et mere alment begreb, regelmæssigt punktsystem. Herved forstås en punktmængde Σ i rummet med følgende egenskaber:

1) Σ har ikke nogen fortætningspunkter.
2) Der findes et tal $\varrho > 0$, således at hver kugle med radius ϱ indeholder mindst ét punkt af Σ.
3) Til $p, q \in \Sigma$ findes en isometri af rummet, ved hvilken Σ afbildes på sig selv og p går over i q.

De isometrier af rummet, ved hvilke Σ afbildes på sig selv, udgør en undergruppe Φ af gruppen Is_3 af alle isometrier. Af 1) følger, at Φ opererer diskontinuert, idet banen Φp af et punkt af Σ, og derfor også af ethvert andet punkt, ikke fortætter sig. Af 2) og 3) sluttes, at der findes en begrænset punktmængde, i hvilken hvert punkts bane er repræsenteret ved mindst ét punkt. Er nemlig x et vilkårligt punkt, vil kuglen med radius ϱ om det indeholde et $q \in \Sigma$. For et fast valgt $p \in \Sigma$ findes et element $\varphi \in \Phi$, således at $\varphi q = p$, og φx vil da ligge i kuglen om p med radius 2ϱ. Denne kugle opfylder altså det stillede krav. Omvendt, lad $\Phi \subset Is_3$ være en gruppe med de nævnte to egenskaber. Det er da næsten oplagt, at Φp for hvert punkt p er et regelmæssigt punktsystem. Sådanne grupper kaldes af krystallograferne for rumgrupper i modsætning til krystalklassernes punktgrupper.

Opgaven i en vis forstand at bestemme samtlige rumgrupper blev for grupper bestående af egentlige flytninger løst af L. Sohncke (1879) og fuldstændigt af E. Fedorov (1890) og uafhængigt af A. Schoenflies (1891). Inddeler man rumgrupperne i klasser på den i det følgende omtalte måde, findes der, som Fedorov og

Schoenflies har vist, 230 klasser.

Is_3 er en undergruppe i Aff_3. Med hensyn til et sædvanligt retvinklet koordinatsystem kan elementerne i Is_3 skrives (A,a) med en ortogonal matrix A. Hvis $\det A = 1$, er (A,a) enten en translation (hvis $A = E$) eller en drejning eller en skruning, dvs. sammensat af en drejning og en translation parallel med drejningsaksen. Hvis $\det A = -1$, er (A,a) enten en spejling i en plan eller en drejespejling eller en glidespejling, dvs. sammensat af en spejling og en translation parallel med spejlingsplanen.

Lad Φ foreløbig betegne en vilkårlig undergruppe af Is_3. Translationerne i Φ danner en kommutativ undergruppe Θ (som muligvis kun består af $(E,0)$). For $(A,a) \in \Phi$ og $(E,t) \in \Theta$ finder man

$$(A,a)(E,t)(A,a)^{-1} = (E, At) \in \Theta.$$

Dette udsiger dels, at Θ er en normal undergruppe i Φ, dels at gitret Θp, hvor p er et vilkårligt valgt punkt, afbildes på sig selv ved "ortogonalkomponenterne" A af elementerne $(A,a) \in \Phi$. Idet

$$(B,b)(A,a) = (BA, Ba+b),$$

vil der ved $(A,a) \longmapsto A$ bestemmes en homomorf afbildning af Φ på en undergruppe Γ af O_3. Kernen ved denne homomorfi er præcis Θ, og Γ er følgelig isomorf med faktorgruppen Φ/Θ. Af det sagte fremgår, at Γ afbilder hvert af de ved Θ bestemte gitre på sig selv.

Det første vanskelige skridt ved bestemmelsen af rumgrupperne består i at bevise, at en sådans translationsundergruppe indeholder tre lineært uafhængige translationer, altså at Θ bestemmer rumgitre. Dette følger ikke af diskontinuiteten alene, hvilket fremgår af, at gruppen frembragt af en skruning med skruningsvinkel et irrationalt multiplum af π er diskontinuert. Schoenflies' bevis for påstanden beror på hjælpesætningen, at hvis en gruppe Φ indeholder en sådan skruning og et element, som ikke afbilder skruningsaksen på sig selv, kan den ikke være diskontinuert. Eksistensen af et sådant element følger af den anden af rumgruppernes egenskaber. Satningen fås herefter let. Gruppen T bestående af ortogonalkomponenterne af rumgruppens elementer afbilder altså et rumgitter på sig selv, tilhører følgelig en krystalklasse og har endelig orden. Med andre ord, Θ har endelig indeks l i Φ.

Lad (A_λ, a_λ), $\lambda = 1, \cdots, l$, være repræsentanter for sideklasserne til Θ. Elementerne i den λ-te sideklasse er da $(A_\lambda, a_\lambda + v)$, hvor v gennemløber Θ. Billederne af et punkt p ved disse, altså punkterne $A_\lambda p + a_\lambda + v$, $v \in \Theta$, udgør et rumgitter hørende til Θ. Banen af p ved rumgruppen Φ er altså foreningsmængden af l (ikke nødvendigvis forskellige) gitre, der fremgår af et af dem ved passende parallelforskydninger. Dermed har vi en beskrivelse af de regelmæssige punktsystemer. M. von Laue's opdagelse af Röntgenstrålernes interferens og bøjning (1912) har jo muliggjort undersøgelsen af krystallernes struktur med resultatet, at ~~den~~ med oplagte idealiseringer kan beskrives ved hjælp af regelmæssige punktsystemer. Rumgrupperne beskriver krystallernes mikroskopiske og de tilhørende punktgrupper deres globale symmetriegenskaber.

~~En~~ videregående undersøgelse af rumgruppernes forudsætter, som allerede nævnt, en hensigtsmæssig klassedeling af dem. Lad Aff_3^+ betegne undergruppen af Aff_3, der består af de affine transformationer (M,m) med $\det M > 0$. To rumgrupper Φ og $\tilde{\Phi}$ siges at være <u>(positiv-affin-) ækvivalente</u>, hvis der findes $(M,m) \in Aff_3^+$, således at $\tilde{\Phi} = (M,m)\Phi(M,m)^{-1}$. At man her kun tager orienteringsbevarende transformationer i betragtning, kræver en motivering. Ved de omtalte ækvivalensbegreber for ortogonale og unimodulære grupper er det ligegyldigt, om man foretager denne indskrænkning eller ej, fordi $MT M^{-1} = (-M)T(-M)^{-1}$ og $\det(-M) = -\det M$. At den er væsentlig for rumgrupper ses af følgende eksempel: Lad e_1, e_2 og e_3 være parvis ortogonale vektorer afsat fra et punkt o. Antag e_1, e_2 lige store og beliggende i den vandrette plan gennem o. Man betragter gruppen frembragt af translationerne e_1, e_2 og skruningen, hvis akse går gennem o og har retning e_3, hvis forskydning er $|e_3|/4$ i denne retning, og hvis skruningsvinkel er $\pi/2$ i den ved (e_1, e_2) bestemte omløbsretning. Vælges $-\pi/2$ i stedet for, fås en anden gruppe, der fremgår af den første f.eks. ved transformation med spejlingen i den ved e_2 og e_3 udspændte plan. Men den kan ikke fås ved en orienteringsbevarende transformation, da en sådan ikke kan overføre en højreskrue i en venstreskrue. Motiveringen for, at krystallograferne ønsker at skelne imellem sådanne grupper er fænomener som drejning den ene eller den anden vej af polarisationsplanen ved gennemgang af polariseret lys gennem en krystal.

For det følgende er det hensigtsmæssigt at tænke rumgrupperne fremstillet med hensyn til vilkårlige parallelkoordinatsystemer, af en bestemt orientering, f.eks. højrekoordinatsystemer. Lad Φ og $\tilde{\Phi}$ være rumgrupper. Antag, at Φ er fremstillet med hensyn til et valgt koordinatsystem. At $\tilde{\Phi}$ er ækvivalent med Φ er da ensbetydende med, at der findes et koordinatsystem med hensyn til hvilket $\tilde{\Phi}$ har den samme fremstilling som Φ med hensyn til det første. Er Θ translationsundergruppen i Φ, kan vi som koordinatenhedsvektorer vælge vektorerne i en basis for Θ. Faktorgruppen $\Gamma \cong \Phi/\Theta$ får da en unimodulær fremstilling. Vælges en anden basis fås en unimodulær-ækvivalent fremstilling. Rumgruppen bestemmer altså en aritmetisk krystalklasse. Af det sagte fremgår, at ækvivalente rumgrupper bestemmer samme aritmetiske klasse.

Vi beviser nu efter G. Frobenius (1911), at der for en given aritmetisk krystalklasse kun findes endelig mange klasser af rumgrupper, der bestemmer den. Lad altså Γ være en unimodulær gruppe hørende til en given aritmetisk krystalklasse, og lad l være dens orden. Dens elementer er unimodulære matricer $A_1 = E, A_2, \ldots, A_l$. Er nu Φ en rumgruppe med translationsundergruppe Θ, der henført til et koordinatsystem bestemt ved en passende basis for Θ, bestemmer Γ, vil repræsentanter for sideklasserne til Θ kunne skrives (A_λ, a_λ) med visse søjlematricer a_λ, $\lambda = 1, \ldots, l$. Sideklasserne er da

$$\{(A_\lambda, a_\lambda + h) \mid h \in \mathbb{Z}^n\}.$$

Til hvert par (λ, μ), $\lambda, \mu \in \{1, \ldots, l\}$, findes ét $\nu \in \{1, \ldots, l\}$ således, at

$$(A_\lambda, a_\lambda)(A_\mu, a_\mu) = (A_\nu, a_\nu + h)$$

for en vis heltallig søjle h. Dette giver

$$A_\lambda a_\mu + a_\lambda \equiv a_\nu \ (\mathrm{mod}\ 1),$$

dvs. venstre og højre side adskiller sig ved en heltallig søjle. Når μ gennemløber $\{1, \ldots, l\}$, vil også ν gøre det. Sætter vi

$$c = \frac{1}{l} \sum_{\mu=1}^{l} a_\mu ,$$

får vi ved summation over μ

$$l A_\lambda c + l a_\lambda \equiv l c \pmod 1.$$

Koordinatsystemets nulpunkt har hidtil været vilkårligt. Vi foretager en parallelforskydning af koordinatsystemet, så at c bliver det nye nulpunkt, dvs. i $y = A_\lambda x + a_\lambda$ indføres nye koordinatsøjler x^* og y^* ved $x = x^* + c$, $y = y^* + c$. Dette giver $y^* = A_\lambda x^* + a_\lambda^*$, hvor

$$a_\lambda^* = A_\lambda c + a_\lambda - c.$$

(Dette er ensbetydende med $(E,-c)(A_\lambda, a_\lambda)(E,c) = (A_\lambda, a_\lambda^*)$.) Indføres a_λ^* i ovenstående kongruens, fås

$$l a_\lambda^* \equiv 0 \pmod 1.$$

Dette betyder, at søjlerne a_λ^* består af rationale tal med nævner l. Da translationskomponenterne i sideklassernes repræsentanter (A_λ, a_λ^*) kan ændres ved addition af vilkårlige heltallige søjler, kan antages, at $0 \leq a_\lambda^* < 1$ i den forstand, at alle søjlens elementer opfylder disse uligheder. Disse elementer er da af formen $\frac{h}{l}$, hvor h er et ikke-negativt helt tal mindre end l. Der findes altså kun endelige mange muligheder for a_λ^*. Heraf følger påstanden, idet hver rumgruppe, der bestemmer Γ, i et passende koordinatsystem må have en af endelig mange matrixfremstillinger.

Som allerede nævnt, findes der 230 klasser af positiv-affin-ækvivalente rumgrupper, der fordeler sig meget ujævnt over de aritmetiske klasser. Til hver af disse findes mindst én rumgruppe, nemlig den med alle $a_\lambda = 0$. For nogle aritmetiske klasser findes kun denne, for et par andre 16.

Giver man afkald på orienteringsforskellen, betragter altså klasser af affin-ækvivalente rumgrupper, reduceres antallet af klasser til 219. Bemærkelsesværdig er, at isomorfe rumgrupper hører til den samme af disse klasser, er altså affin-ækvivalente.

7. Problemerne for andre dimensionstal.

For planen er de omtalte problemer betydelig simplere. De endelige ortogonale grupper har man kendt længe. De kan beskrives som restriktionerne af C_n og C_{nv} til en plan vinkelret på drejningsaksen. Der findes 5 klasser af gitre, 10 geometriske og 13 aritmetiske "krystalklasser" samt 17 klasser af affin-ækvivalente "plangrupper". Skønt disse siden oldtiden har fundet anvendelse ved ornamenter, er deres matematiske behandling yngre end rumgruppernes. Den første der har bestemt de 17 klasser synes at have været R. Fricke som led i omfattende undersøgelser over grupper af brudne lineære transformationer af en kompleks variabel (1897). Dette har imidlertid mange ikke været opmærksom på. Som regel citeres G. Pólya (1924), der øjensynlig uden kendskab til Frickes arbejde har behandlet det plane tilfælde.

Blandt de mange problemer D. Hilbert stillede i sit berømte foredrag "Mathematische Probleme" ved den Internationale Matematikerkongres i Paris 1900 nævner han spørgsmålet, om der også i euklidiske rum af dimension $n > 3$ kun findes endelig mange klasser af affin-ækvivalente rumgrupper. Spørgsmålet blev besvaret bekræftende af L. Bieberbach (1910, 1912). Han viste, at enhver rumgruppe indeholder n lineært uafhængige translationer, og at isomorfe rumgrupper hører til samme klasse. Ved hjælp af den dybtliggende sætning, først bevist af C. Jordan (1880), at der for hvert n kun findes endelig mange klasser af unimodulær ækvivalente, endelige unimodulære grupper, kunne han da gennemføre beviset. Flere af hans ræsonnementer blev forenklet væsentlig af G. Frobenius (1911).

8. Litteratur.

Let tilgængelige fremstillinger af nogle af de omtalte emner, især vedrørende planen og de endelige ortogonale grupper, findes i følgende bøger;

D. Hilbert und S. Cohn-Vossen: Anschauliche Geometrie. [Berlin 1932]. På engelsk: Geometry and the Imagination. [New York 1952].

H. Weyl: Symmetry [Princeton 1952]. På tysk: Symmetrie [Basel 1955].

H.S.M. Coxeter: Introduction to Geometry [New York 1961].

P.B. Yale: Geometry and Symmetry [San Francisco 1968].

Væsentlige sider af sagen er behandlet kort i

A. Speiser: Die Theorie der Gruppen von endlicher Ordnung [4. Aufl. Basel 1956].

Blandt nyere systematiske fremstillinger nævnes

J.J. Burckhardt: Die Bewegungsgruppen der Kristallographie [2. Aufl. Basel 1966].

Her bestemmes bl. a. samtlige klasser af gitre, de aritmetiske klasser i planen og i rummet samt alle klasser af plan- og rumgrupper. Bogen er imidlertid stedvis vanskelig at læse, idet en del af de fremsatte påstande ikke er bevist.