Bemerkungen zur arithmetischen Berechnung der Bewegungsgruppen.

Bemerkungen zur arithmetischen Berechnung der Bewegungsgruppen

Von JOHANN JAKOB BURCKHARDT, Göttingen.

§ 1. Einleitung

Die Methoden, mit denen in der Kristallographie erstmals die möglichen Strukturformen abgeleitet wurden, sind geometrischer Natur. So hat *Hessel*[1]) zuerst geometrisch gezeigt, daß es nur 32 makroskopisch verschiedene Kristallsymmetrien geben kann. Diese 32 Kristallklassen können mathematisch beschrieben werden als Transformationen (bestehend aus Drehungen, Spiegelungen an einer Ebene und an einem Punkt) eines Punktgitters in sich, bei welchen ein Punkt fest bleibt. Später wurde bemerkt, daß sich die Kristallklassen auch auf arithmetischem Wege, sei es aus der Theorie der Substitutionsgruppen[2]), der Reduktion der ternären quadratischen Formen[3]) oder aus der Theorie der Gruppencharaktere[4]) herleiten lassen. *Schoenflies*[5]) und *Fedorow*[6]) haben dann die Gruppen aller Symmetrien, die ein Gitter in sich überführen, betrachtet. Sie sind wiederum geometrisch vorgegangen und haben gezeigt, daß es im Raume 230 solcher Gruppen gibt, Raum- oder Bewegungsgruppen genannt. Diese sind von *Niggli*[7]) ausführlich diskutiert worden, der die Substitutionen und die hinzutretenden primitiven Translationen in übersichtlicher Form zusammenstellte.

Im folgenden soll nun gezeigt werden, wie auch die Bewegungsgruppen auf arithmetischem Wege erhalten werden können. *Frobenius*[8]) hat dies zuerst angedeutet, die analytische Formulierung findet man bei *Speiser*[9]).

---

1) *I. C. F. Hessel,* Kristallometrie, 1830, Ostwalds Klassiker Bd. 88, 89.

2) *H. Weber,* Algebra, Bd. 2, 1899, § 78.

3) *P. Bachmann,* Die Arithmetik der quadratischen Formen, 2. Abteilung, S. 185 ff.

4) *G. Frobenius,* Gruppentheoretische Ableitung der 32 Kristallklassen, Berliner Sitzungsberichte 1911, S. 681.

5) *A. Schoenflies,* Kristallsysteme und Kristallstruktur, 1891.

6) *E. von Fedorow,* Zusammenstellung der kristallographischen Resultate etc., Zeitschrift f. Kristallogr. Bd. 20, 1892, S. 25.

7) *P. Niggli,* Geometrische Kristallographie des Diskontinuums, Leipzig 1919.

8) *G. Frobenius,* Ueber die unzerlegbaren diskreten Bewegunsgruppen, Berliner Sitzungsberichte 1911, S. 654, § 5.

9) *A. Speiser,* Gruppentheorie, 2. Auflage, § 70.

Ich beschränke mich in der Ausführung der Rechnungen auf die Ebene. Wie die 17 ebenen Bewegungsgruppen geometrisch abgeleitet werden können, ist sehr ausführlich dargestellt worden von *Pólya* und *Niggli*[10]), ferner von *Speiser*[9]), an diesen Stellen finden sich auch Figuren, welche den Sachverhalt veranschaulichen.

§ 2. Theoretischer Teil.

Eine Symmetrie des Raumes können wir darstellen durch lineare Substitutionen in der Gestalt

$$E_i = \begin{pmatrix} e_i & p_i \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

wo e_i eine n-reihige quadratische Matrix, p_i eine Kolonne von n Elementen $p_i^{(1)}, \ldots, p_i^{(n)}$ und 0 eine Zeile von n Nullen bedeutet. Führt man zwei solche Operationen E_i und E_k hintereinander aus, so erhält man die Operation

$$E_l = \begin{pmatrix} e_l & p_l \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

wobei

$$1) \qquad e_l = e_i e_k$$

$$2) \qquad p_l = e_i p_k + p_i$$

ist. Die Operationen E_i bilden eine Gruppe $\mathfrak{G}$, und betrachten wir als zu $\mathfrak{G}$ gehörig alle Operationen, die ein Gitter in sich überführen, so ist $\mathfrak{G}$ unendlich und diskret. Es gelten nun die folgenden Tatsachen[9]): Die rotativen Teile e_i bilden eine endliche, ganzzahlige Gruppe $\mathfrak{G}'$ der Ordnung g, nämlich die Symmetriegruppe der Kristallklasse, zu welcher die Raumgruppe gehört. Legen wir den Ursprung des Koordinatensystems in den Schwerpunkt eines Elementarbereiches (d. h. eines Bereiches, durch dessen Translation das ganze Gitter erhalten werden kann), so kann als Nenner der p_i nur g oder ein Faktor von g auftreten, enthält $\mathfrak{G}$ speziell ein Symmetriezentrum, so können die p_i nur Vielfache von $1/2$ sein. Um eine Raumgruppe zu bestimmen, ist es nötig, außer den rotativen Teilen noch die primitiven Translationen zu

[10]) Beide in Zeitschrift f. Kristallogr., Bd. ~~56~~ 60, S. 278.

kennen. Diese können aus den Gleichungen 2) gefunden werden, indem man diese als Kongruenzen nach dem Modul der ganzen Zahlen auffaßt; die so reduzierte Bewegungsgruppe ist dann mit $\mathfrak{G}'$ isomorph. Es sind also die Lösungen der folgenden Kongruenzen zu suchen

$$3) \qquad p_l \equiv e_i p_k + p_i \; (\text{mod. } 1).$$

In diesem Sinne sind alle Kongruenzen in § 3 zu verstehen. Eine Lösung dieser Kongruenzen ist stets: $p_i^{(\nu)} \equiv 0$ für alle vorkommenden i und ν, die zugehörige Raumgruppe ist durch den oberen Index 1 gekennzeichnet. Hierbei ist noch das folgende zu bemerken: Ist $\mathfrak{G}$ eine Bewegungsgruppe und u irgend eine reguläre n-reihige Matrix, so ist auch

$$(u, s)^{-1} \, \mathfrak{G} \, (u, s) = \mathfrak{H}$$

eine Bewegungsgruppe und heißt zu $\mathfrak{G}$ äquivalent. Wir können nun unsere Aufgabe dahin präzisieren, die untereinander inäquivalenten Bewegungsgruppen zu suchen. Ist s eine willkürliche Spalte, so genügt

$$p_i = (e_1 - e_i)\, s$$

den Gleichungen 2). Zwei Lösungen, deren Differenz diese Form hat, führen auf äquivalente Bewegungsgruppen. Denn es gilt

$$(u, s)^{-1} (e_i, p_i) \, (u, s) = (u^{-1} e_i u, \; u^{-1} (e_i s - s + p_i)).$$

Ist nun q_i eine andere Lösung, so daß

$$p_i - q_i = (e_1 - e_i)\, s$$

dann ist

$$q_i = e_i s - s + p_i,$$

also ist q_i wirklich eine zu p_i äquivalente Lösung.

In § 3 sollen auf diesem Wege alle Bewegungsgruppen der Ebene aufgesucht werden. Ich werde dabei im allgemeinen nur die inäquivalenten Lösungen der Kongruenzen 3) angeben. Was die Wahl des Koordinatensystems betrifft, wissen wir schon, daß sein Ursprung im Schwerpunkt eines Elementarparallelepipedes liegen muß. Ferner wählen wir für die Gruppe C_{4v} und ihre Untergruppen rechtwinklige Koordinaten. Für die Gruppe C_{6v} und ihre Untergruppen hingegen erweist es sich hier als vorteilhaft, ein Achsenkreuz zu nehmen, dessen beide Achsen um 120^0 gegeneinander geneigt sind. Diese so gewählten Achsen sind die Richtungen der angegebenen primitiven Translationen. Die Länge des Elementarparallelepipedes in jeder Achsenrichtung bezeichnen wir mit 1, sie gibt uns also den Maßstab für die Größe der primitiven Translationen. Daraus folgt sofort, daß $p_1^{(1)} \equiv p_1^{(2)} \equiv 0$ sein muß.

Für die Gruppen C_{4v} und ihre Untergruppen sind auf diese Weise unsere Werte sehr leicht mit denen von *Niggli*[7] [10]) zu vergleichen, sie sind mit ihnen bis auf die Gitter $\mathfrak{C}_s^{III}$ und $\mathfrak{C}_{2v}^{IV}$, für welche Niggli doppelt primitive Elementarparallelepipede als Einheit wählt, identisch. Für die Gitter von C_{6v} und seine Untergruppen ist die Uebereinstimmung nicht so ganz unmittelbar zu sehen, da Niggli die primitiven Translationen auf ein doppelprimitives orthohexagonales Gitter bezieht. Ich gebe in § 3 zuerst die Darstellungen der Gruppen C_{4v} und C_{6v} in den eben beschriebenen Koordinatensystemen, hierauf suche ich die zugehörigen Raumgruppen und beginne dabei mit der Untersuchung der kleinsten Untergruppe.

§ 3. Bestimmung der 17 ebenen Bewegungsgruppen

a) Die Gruppe C_{4v} und ihre Untergruppen [11]).

Die Gruppe C_{4v} ist von der Ordnung 8 und eine Darstellung von ihr in rechtwinkligen Koordinaten ist die folgende:

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad e_2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad e_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$e_6 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad e_7 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_8 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Wir suchen nun ihre Untergruppen und bestimmen die zugehörigen Bewegungsgruppen.

1) Natürlich ist e_1 eine Untergruppe. Zu ihr gehört nur das eine Gitter $\mathfrak{C}_1^I$, das aus allen ganzzahligen Translationen in zwei unabhängigen Richtungen besteht.

[11]) Siehe hierzu: *J. J. Burckhardt,* Die Algebren der Diedergruppen, Inauguraldissertation, Zürich 1928.

2) Die Untergruppe C_2 besteht aus den Substitutionen e_1 und e_3. Die zugehörigen Bewegungsgruppen haben also die Form

$$E_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad E_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & p_3^{(1)} \\ 0 & -1 & p_3^{(2)} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Da $e_3^2 = e_1$ ist, muß gelten $E_3^2 \equiv E_1$, was die Kongruenzen liefert:

$$-p_3^{(1)} + p_3^{(1)} \equiv 0$$
$$-p_3^{(2)} + p_3^{(2)} \equiv 0.$$

Da für $p_3^{(1)}$ und $p_3^{(2)}$ als Nenner nur 2 in Frage kommt, so findet man die vier Lösungen:

1) $p_3^{(1)} \equiv p_3^{(2)} \equiv 0$, 2) $p_3^{(1)} \equiv p_3^{(2)} \equiv \frac{1}{2}$

3) $p_3^{(1)} \equiv 0$, $p \equiv \frac{1}{2}$ 4) $p_3^{(1)} \equiv \frac{1}{2}$, $p_3^{(2)} \equiv 0$.

Die Lösungen 2), 3) und 4) sind mit 1) äquivalent, sie gehen durch Transformation mit

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{bezw.} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

in die Lösung 1) über. Also gibt es zu C_2 nur eine Bewegungsgruppe: $\mathfrak{C}_2^{\mathrm{I}}$.

3) C_s besteht aus den Substitutionen e_1 und e_6, wobei $e_6^2 = e_1$ ist. Daraus folgt

$$-p_6^{(1)} + p_6^{(1)} \equiv 0, \quad 2p_6^{(2)} \equiv 0.$$

Die inäquivalenten Lösungen dieser Kongruenzen sind:

I.	$p_6^{(1)} \equiv p_6^{(2)} \equiv 0$,	die zugehörige Bewegungsgruppe ist $\mathfrak{C}_s^{\mathrm{I}}$
II.	$p_6^{(1)} \equiv 0$, $p_6^{(2)} \equiv \frac{1}{2}$	„ „ „ „ $\mathfrak{C}_s^{\mathrm{II}}$
III.	$p_6^{(1)} \equiv p_6^{(2)} \equiv \frac{1}{2}$,	„ „ „ „ $\mathfrak{C}_s^{\mathrm{III}}$

4) C_{2v} entspricht der Vierergruppe, sie besteht aus den Substitutionen e_1, e_3, e_5, e_6. Als Nenner der $p_i^{(\nu)}$ kann wiederum nur 2 auftreten, und die einzigen nicht trivialen Bedingungen sind

$$-p_5^{(1)}+p_6^{(1)}\equiv p_3^{(1)}, \quad p_5^{(2)}+p_6^{(2)}=p_3^{(2)}.$$

Unter den 17 Lösungen, die man hierfür erhält, sind die folgenden inäquivalent:

I. $\mathfrak{C}_{2v}^{\mathrm{I}}$

II. $p_3^{(1)}\equiv p_3^{(2)}\equiv 0,\ p_5^{(1)}\equiv p_5^{(2)}\equiv p_6^{(1)}\equiv p_6^{(2)}\equiv \frac{1}{2}$: $\mathfrak{C}_{2v}^{\mathrm{II}}$

III. $p_3^{(1)}\equiv p_3^{(2)}\equiv p_5^{(1)}\equiv p_6^{(1)}\equiv 0,\ p_5^{(2)}\equiv p_6^{(2)}\equiv \frac{1}{2}$: $\mathfrak{C}_{2v}^{\mathrm{III}}$

IV. $p_3^{(1)}\equiv p_3^{(2)}\equiv p_6^{(1)}\equiv p_6^{(2)}\equiv p_5^{(1)}\equiv p_5^{(2)}\equiv \frac{1}{2}$: $\mathfrak{C}_{2v}^{\mathrm{IV}}$.

5) C_4 ist die zyklische Gruppe mit den vier Elementen e_1, e_2, e_3, e_4. Die Beziehungen $e_2^2=e_4^2=e_3$ und $e_2\,e_4=e_1$ ergeben die Kongruenzen:

$$\begin{aligned}
&-p_2^{(2)}+p_2^{(1)}\equiv p_3^{(1)}, \quad && p_4^{(2)}+p_4^{(1)}\equiv p_3^{(1)}, \quad && -p_4^{(2)}+p_2^{(1)}\equiv 0\\
&p_2^{(1)}+p_2^{(2)}\equiv p_3^{(2)}, && -p_4^{(1)}+p_4^{(2)}\equiv p_3^{(2)}, && p_4^{(1)}+p_2^{(2)}\equiv 0.
\end{aligned}$$

Alle Lösungen hiervon sind mit der Nullösung äquivalent, und deshalb gibt es zu C_4 nur die eine Bewegungsgruppe $\mathfrak{C}_4^{\mathrm{I}}$.

6) Die Elemente von C_{4v} haben wir zu Anfang angegeben. Aus der Gruppentafel der e_i findet man für die $p_i^{(\nu)}$ die beiden folgenden inäquivalenten Lösungssysteme:

I. $\mathfrak{C}_{4v}^{\mathrm{I}}$

II. $p_i^{(\nu)}\equiv 0$ für $\nu=1, 2;\ i=2, 3, 4.$
$p_i^{(\nu)}\equiv \frac{1}{2}$ für $\nu=1, 2;\ i=5, 6, 7, 8$: $\mathfrak{C}_{4v}^{\mathrm{II}}$

b) Die Gruppe C_{6v} und ihre Untergruppen.

C_{6v} hat in den in § 2 beschriebenen Koordinaten die Darstellung:

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad e_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad e_4 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$e_5 = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_6 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad e_7 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad e_8 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$e_9 = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad e_{10} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad e_{11} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_{12} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die Untergruppen sind:

7) C_3 besteht aus den Elementen e_1, e_3, e_5. Die Beziehung $e_3 e_5 = e_1$ liefert:

$$p_3^{(1)} - p_5^{(2)} \equiv 0, \quad p_3^{(1)} - p_3^{(2)} - p_5^{(1)} \equiv 0.$$

Die Lösungen davon sind:

I. $\mathfrak{C}_3^{\mathrm{I}}$

Die andere Lösung $p_3^{(1)} \equiv p_3^{(2)} \equiv p_5^{(2)} \equiv \frac{1}{3}$, $p_5^{(1)} \equiv 0$ geht durch die Transformation mit $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/9 \\ 0 & 1 & 2/9 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ in die Nullösung über.

8) C_{3v} besteht aus den Elementen e_1, e_3, e_5, e_7, e_9, e_{11}. Aus $e_7^2 = e_9^2 = e_{11}^2 = e_1$ schließt man:

$$p_7^{(1)} \equiv 0, \quad p_9^{(2)} \equiv 0, \quad p_{11}^{(1)} \equiv p_{11}^{(2)}.$$

Aus $e_7\, e_{11} = e_3$ folgt

$$p_{11}^{(1)} \equiv p_{11}^{(2)} \equiv p_3^{(1)}, \quad p_7^{(2)} \equiv p_3^{(2)}$$

aus $e_9\, e_{11} = e_5$ folgt

$$p_9^{(1)} \equiv p_5^{(1)}, \quad p_{11}^{(2)} \equiv p_5^{(2)}$$

und dazu treten noch die beiden Kongruenzen aus 7). Als Lösungen findet man die beiden inäquivalenten Systeme:

I. $\mathfrak{C}_{3v}^{\mathrm{I}}$

II. $p_5^{(1)} \equiv p_7^{(1)} \equiv p_9^{(2)} \equiv p_9^{(1)} \equiv 0, \quad p_3^{(1)} \equiv p_3^{(2)} \equiv p_5^{(2)} \equiv p_7^{(2)} \equiv p_{11}^{(1)} \equiv p_{11}^{(2)}$
$\equiv \frac{1}{3}$

Diese Lösung liefert die Gruppe $\mathfrak{C}_{3v}^{\mathrm{II}}$.

9) Die Gruppe C_6 besteht aus den Elementen e_i ($i = 1, \ldots, 6$). C_6 und C_{6v} besitzen ein Symmetriezentrum, also kann als Nenner der $p_i^{(\nu)}$ nur 2 auftreten, dies ist aber mit den Ergebnissen von 7) und 8) unvereinbar, also gibt es je nur eine zugehörige Bewegungsgruppe:

$\mathfrak{C}_6^{\mathrm{I}}$ und

10) $\mathfrak{C}_{6v}^{\mathrm{I}}$.

Damit haben wir unsere Aufgabe gelöst, wir haben auf arithmetischem Wege die 17 ebenen Bewegungsgruppen hergeleitet, man überlegt sich leicht an Figuren, daß sie mit den auf geometrischem Wege gefundenen völlig übereinstimmen.

(Eingegangen den 17. Februar 1930)