Zeitschrift: Elemente der Mathematik
Herausgeber: Schweizerische Mathematische Gesellschaft
Band: 58 (2003)

Artikel: Burckhardtsche Bestimmung der Raumgruppen I
Autor: Strebel, Ralph
DOI: https://doi.org/10.5169/seals-8492

Nutzungsbedingungen
Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation
L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use
The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 10.07.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

Elem. Math. 58 (2003) 141 – 155
0013-6018/03/040141-15
DOI 10.1007/s00017-004-0202-3

© Birkhäuser Verlag, Basel, 2003

Elemente der Mathematik

Burckhardtsche Bestimmung der Raumgruppen I

Ralph Strebel

1 Einleitung

Die *Geometrische Kristallographie* hat zum Ziel, die räumliche Verteilung der Atome, Ionen oder Moleküle eines Kristalls nach ihren Symmetrien zu klassifizieren. Um die Klassifikation eindeutig zu machen, muss man festlegen, welche räumlichen Verteilungen und welche Isometrien des Raumes zugelassen sind, und wann die Symmetriegruppen von zwei Kristallstrukturen als gleichwertig betrachtet werden. Der Mathematiker A.M. Schoenflies (1853–1928) traf in seinem 1891 erschienenen Buch *Krystallsysteme und Krystallstructur* die Festsetzungen, die heute noch in der Kristallographie üblich sind: als Anordnung wird jedes *regelmässige* Punktsystem $\mathcal{P}$ zugelassen, also jede endliche Vereinigung von Punktgittern; jede Isometrie des Raumes, die $\mathcal{P}$ auf sich abbildet, gilt als Symmetrie von $\mathcal{P}$; zwei Symmetriegruppen G, G' sind gleichberechtigt, wenn sie *eigentlich affin äquivalent* sind, das heisst, wenn es eine *orientierungserhaltende affine* Transformation α des Raumes gibt, derart, dass G' gleich $\alpha \cdot G \cdot \alpha^{-1}$ ist.

Schoenflies bezeichnete die Symmetriegruppen der regelmässigen Punktsysteme als *Raumgruppen* ([13], Kap. 6, §1) und fand 230 eigentlich affine Klassen (oder Typen) von Raumgruppen. Der Geometer und Kristallograph E.S. Fedorov (1853–1919) stiess um 1890 auf die gleichen Klassen von Symmetriegruppen, als er die regelmässigen Einteilungen des Raumes bestimmte (s. [9]).

Beide Klassifikationen werden durch geometrische Analyse der Anordnung der Symmetrie-Elemente – der Dreh- oder Schraubenachsen, der Spiegelungs-, Gleitspiegelungs- oder Drehspiegelungsebenen – einer Raumgruppe gewonnen. In den Jahren 1930 bis 1936 erarbeitete dann J.J. Burckhardt ein *algebraisches* Bestimmungsverfahren ([4], [5] und [6]), mit dem er in seinem Lehrbuch *Die Bewegungsgruppen der Kristallographie* die Raumgruppen des 3-dimensionalen Raumes erneut konstruierte. Sein Verfahren erlaubt es, auch die Raumgruppen in euklidischen Räumen E^n höherer Dimension zu bestimmen. Für $n = 4$ ist diese umfangreiche Aufgabe 1973 mit Hilfe von Grossrechnern abgeschlossen worden; danach gibt es 4895 eigentlich affine Typen (s. [3]).

In diesem Artikel erläutere ich zunächst die Begriffe des Gitters und der Raumgruppe durch Beispiele und ausgewählte Ergebnisse (Abschnitte 2 und 3). Danach skizziere ich zwei Verfahren zur Konstruktion von Raumgruppen: die geometrische Methode von Schoenflies [13] und den algebraischen Zugang von Burckhardt. Da meine Skizze die

Burckhardtsche Methode aber nicht angemessen darstellt, trage ich einige ihrer Einzelheiten in der Fortsetzung [14] dieses Aufsatzes nach.

2 Gitter

Gitter sind Untergruppen von euklidischen Vektorräumen mit speziellen Eigenschaften. Sie sind für die Raumgruppen aus zwei Gründen wichtig: ihre Bahnen, genannt *Punktgitter*, liefern den einfachsten Typ eines regelmässigen Punktsystems, und die Translationsvektoren der Translationen einer Raumgruppe bilden ein Gitter.

2.1 Grundbegriffe

Im folgenden bezeichnet $E = (V, \langle -, - \rangle)$ einen euklidischen Vektorraum.

Definition 2.1 Ein *Gitter* Γ von E ist eine diskrete Untergruppe von E, die ein Erzeugendensystem des Vektorraumes V enthält.

Die gegebene Definition eines Gitters lässt sich etwas konkreter fassen:

Satz 2.2 *Jedes Gitter Γ in $E^n = (V^n, \langle -, - \rangle)$ enthält eine Basis $\mathcal{B} = (b_1, \ldots, b_n)$ des Vektorraumes V^n, bezüglich welcher die Punkte von Γ gerade die ganzzahligen Linearkombinationen $\sum \lambda_i b_i$ sind. Umgekehrt bilden die ganzzahligen Linearkombinationen jeder Basis von V^n ein Gitter von E.*

Beweis. Die erste Behauptung kann so begründet werden. Nach Definition enthält Γ eine Vektorraumbasis, etwa $\mathcal{B} = (u_1, u_2, \ldots, u_n)$. Diese Basis gibt Anlass zu einer Fahne von Unterräumen

$$U_1 = \mathbb{R}u_1, \quad U_2 = \mathbb{R}u_1 + \mathbb{R}u_2, \quad \ldots, \quad U_n = V^n.$$

Weil Γ diskret ist, enthält jede Kugel $K_r = \{v \in V \mid \|v\| \leq r\}$ nur endlich viele Gitterpunkte. Insbesondere gibt es daher auf der Geraden U_1 einen Gitterpunkt minimaler, positiver Norm w_1; er erzeugt das Teilgitter $\Gamma \cap U_1$. In der Ebene U_2 betrachten wir sodann alle Geraden, die zu U_1 parallel sind und einen Gitterpunkt $x \in \Gamma \cap U_2$ enthalten. Jede dieser Geraden enthält einen Gitterpunkt $y \in \Gamma \cap U_2$, dessen Orthogonalprojektion auf U_1 höchstens die Norm $\frac{1}{2}\|w_1\|$ hat. Aus der Endlichkeit der Durchschnitte $\Gamma \cap K_r$ folgt daher, dass es in U_2 eine Gerade $w_2 + U_1$ gibt, die von U_1 kleinsten, positiven Abstand aufweist. Es erzeugt dann (w_1, w_2) das Teilgitter $\Gamma \cap U_2$. Das gegebene Argument lässt sich analog auf die Gitterpunkte in $U_3 \setminus U_2$, $U_4 \setminus U_3, \ldots$ anwenden und liefert eine Vektorraumbasis $(w_1, w_2, \ldots, w_n)$ von V, welche die Bedingung $\Gamma = \mathbb{Z} \cdot w_1 + \mathbb{Z} \cdot w_2 + \cdots + \mathbb{Z} \cdot w_n$ erfüllt. Die zweite Behauptung ergibt sich aus dem Umstand, dass jede geordnete Basis $\mathcal{B} = (b_1, b_2, \ldots, b_n)$ von V^n einen linearen Isomorphismus $L_{\mathcal{B}}\colon \mathbb{R}^n \xrightarrow{\sim} V$ induziert, der $\mathbb{Z}^n$ auf das Gitter Γ der ganzzahligen Linearkombinationen von $\mathcal{B}$ abbildet. Da $L_{\mathcal{B}}$ und ihre Umkehrabbildung stetig sind, ist das Bild der diskreten Gruppe $\mathbb{Z}^n \subset \mathbb{R}^n$ unter $L_{\mathcal{B}}$, also Γ, eine diskrete Untergruppe von V. $\square$

Ebenso wie regelmässige Punktsysteme können auch Gitter Symmetrien haben. Eine für das folgende zweckmässige Definition der Symmetriegruppe eines Gitters ist diese:

Definition 2.3 Die *Symmetriegruppe* $\mathrm{S}(\Gamma)$ eines Gitters Γ von E besteht aus den orthogonalen Abbildungen $\varphi\colon E \xrightarrow{\sim} E$, die Γ auf sich abbilden.

2.2 Beispiele

Seien $V = \mathbb{R}^n$ und $\langle -, - \rangle$ das Skalarprodukt, das dem Paar (x, y) das Matrizenprodukt $x^t \cdot y$ zuordnet. Seien $e_1, e_2, \ldots, e_n$ die Standardbasisvektoren von $\mathbb{R}^n$. Die Gruppe $\mathbb{Z}^n \subset \mathbb{R}^n$ ist diskret und enthält eine Basis von $\mathbb{R}^n$, sie ist also ein Gitter von $E^n = (\mathbb{R}^n, \langle -, - \rangle)$. Ebenso ist jede Untergruppe von $\mathbb{Z}^n$, die ein Erzeugendensystem des Vektorraumes $\mathbb{R}^n$ enthält, ein Gitter von $\mathbb{R}^n$. Die folgenden Teilmengen S_n, S'_n und S''_n erzeugen daher Gitter Γ_n, Γ'_n und Γ''_n von E^n:

$$S_n = \{\pm 2e_\ell \mid 1 \leq \ell \leq n\} \qquad \text{für } n \geq 1, \tag{2.1}$$

$$S'_n = \{\pm e_i \pm e_j \mid 1 \leq i < j \leq n\} \qquad \text{für } n \geq 2, \tag{2.2}$$

$$S''_n = S_n \cup \{e_1 + e_2 + \cdots + e_n\} \qquad \text{für } n \geq 3. \tag{2.3}$$

Sie verallgemeinern die kubischen Gitter der Kristallographen.

Die Gitter Γ_2 und Γ'_2 können wie in Fig. 1 gezeigt veranschaulicht werden.

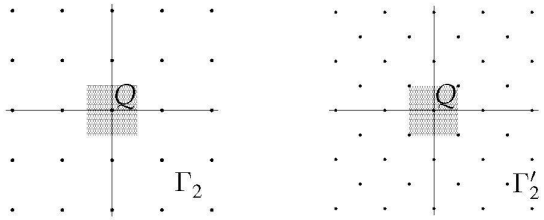


Fig. 1

Das Gitter Γ_2 ist quadratisch; seine Symmetriegruppe $\mathrm{S}(\Gamma_2)$ fällt mit jener des Quadrates $Q = \{x \in \mathbb{R}^2 \big| |x_i| \leq 1\}$ zusammen; sie besteht also aus 4 Drehungen um $(0,0)^t$ sowie den Spiegelungen an den Koordinatenachsen und an den Diagonalen von Q. Das Gitter Γ'_2 ist ebenfalls quadratisch. Da $\mathrm{S}(\Gamma'_2) = \mathrm{S}(\Gamma_2)$ ist, sind die Gitter Γ_2 und Γ'_2 *geometrisch* äquivalent im Sinne der Definition 4.2. Die lineare Abbildung

$$\sigma\colon \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^2, \quad \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \longmapsto \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

bildet das Gitter Γ_2 auf Γ'_2 ab und induziert einen Gruppenisomorphismus

$$\sigma_*\colon \mathrm{S}(\Gamma_2) \xrightarrow{\sim} \mathrm{S}(\Gamma'_2), \quad \varphi \longmapsto \sigma \circ \varphi \circ \sigma^{-1}.$$

Die beiden Gitter Γ_2 und Γ'_2 sind also sogar *arithmetisch* äquivalent (im Sinne der Definition 4.2). Man beachte, dass σ_* die Spiegelungen an den Koordinatenachsen in jene an den Diagonalen von Q überführt und daher nicht die Identität auf $\mathrm{S}(\Gamma_2) = \mathrm{S}(\Gamma'_2)$ ist.

Das Gitter Γ_3 wird in der Kristallographie als *primitiv kubisch* bezeichnet. Verschiebt man mit ihm den achsenparallelen Würfel $W = \{x \in \mathbb{R}^3 \mid 0 \leq x_\ell \leq 2\}$, erhält man eine Pflasterung des Raumes durch Würfel. Die Menge S'_3 besteht aus Mittelpunkten

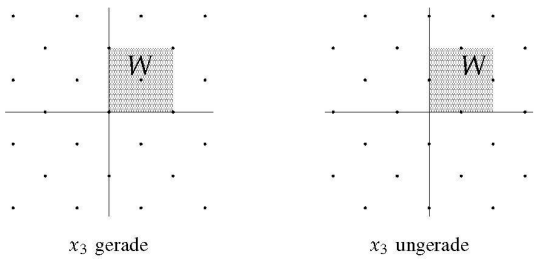


Fig. 2

der Flächen dieser Würfel, und die Rechnung $2e_i = (e_i + e_j) + (e_i - e_j)$ zeigt, dass Γ_3' das primitive Gitter $\Gamma_3 = (2\mathbb{Z})^3$ umfasst. In der Kristallographie wird Γ_3' daher ein *flächenzentriertes, kubisches Gitter* genannt. Es wird durch Fig. 2 veranschaulicht.

In ihr sind links eine Gitterebene für einen geraden Wert von x_3 und rechts eine Gitterebene für einen ungeraden Wert von x_3 dargestellt. Beide Punktsysteme sind quadratisch, aber nicht kongruent. Dies deutet darauf hin, dass es keine Ähnlichkeitsabbildung $\sigma\colon \mathbb{R}^3 \xrightarrow{\sim} \mathbb{R}^3$ gibt, die das primitive Gitter Γ_3 auf das Gitter Γ_3' abbildet. Dieser Eindruck ist richtig: das Gitter Γ_3 hat 6 Vektoren kleinster positiver Norm, nämlich $\pm 2e_1$, $\pm 2e_2$ und $\pm 2e_3$, während Γ_3' zwölf solche Vektoren aufweist, die Vektoren $\pm e_i \pm e_j$.

Das Gitter Γ_3'' besteht aus dem Teilgitter $\Gamma_3 = (2\mathbb{Z})^3$ und seiner Nebenklassse $\Gamma_3 + (1,1,1)^t$. Die Kristallographen nennen es ein *innenzentriertes, kubisches* Gitter; in der Tat bilden die Punkte der Nebenklasse $\Gamma_3 + (1,1,1)^t$ die Mittelpunkte der Würfel $W + x$ mit $x \in \Gamma_3$. Das Gitter Γ_3'' besitzt 8 Punkte kleinster positiver Norm, nämlich die Punkte $\pm e_1 \pm e_2 \pm e_3$, und ist daher weder dem primitiven noch dem flächenzentrierten Gitter ähnlich. Die Symmetriegruppen der drei Gitter Γ_3, Γ_3' und Γ_3'' stimmen überein: die drei Gitter sind *geometrisch*, nicht aber *arithmetisch*, äquivalent (im Sinne der Definition 4.2).

2.3 Endlichkeit der Symmetriegruppen

Die Symmetriegruppen der Gitter von E sind Untergruppen der orthogonalen Gruppe $\mathrm{O}(E)$ von E mit speziellen Eigenschaften. Es gilt nämlich

Satz 2.4 *Die Symmetriegruppe jedes Gitters Γ ist endlich.*

Beweis. Die Gruppe $\mathrm{S}(\Gamma)$ besteht aus den orthogonalen Abbildungen φ von E, die Γ auf sich abbilden. Diese Abbildungen bilden jede Kugel $K_r = \{x \in V \mid \|x\| \leq r\}$, also auch jeden Durchschnitt $\Gamma \cap K_r$, auf sich ab. Da diese Durchschnitte endlich sind, erhält man für jede Zahl $r > 0$ durch Einschränken eine Abbildung

$$f_r\colon \mathrm{S}(\Gamma) \longrightarrow H_r = \mathrm{Perm}(\Gamma \cap K_r)$$

von $\mathrm{S}(\Gamma)$ in die Permutationsgruppen der endlichen Mengen $\Gamma \cap K_r$. Es ist f_r ein Homomorphismus, dessen Kern aus allen $\varphi \in \mathrm{S}(\Gamma)$ besteht, die $\Gamma \cap K_r$ punktweise festhalten. Wählt man nun r so gross, dass $\Gamma \cap K_r$ ein Erzeugendensystem von V umfasst, wird f_r daher injektiv. Dies zeigt, dass $\mathrm{S}(\Gamma)$ einer Gruppe von Permutationen einer endlichen Menge isomorph ist. $\square$

Beispiel. Wendet man obigen Beweis auf das primitive kubische Gitter $\Gamma_3 = (2\mathbb{Z})^3$ aus 2.2 an und berücksichtigt, dass jede lineare Abbildung $(0,0,0)^t$ festhält, erkennt man, dass $\mathrm{S}(\Gamma_3)$ isomorph einer Untergruppe von $\mathrm{Perm}(\{\pm 2e_1, \pm 2e_2, \pm 2e_3\})$ ist; insbesondere teilt die Ordnung von $\mathrm{S}(\Gamma_3)$ die Zahl $6! = 720 = 2^4 \cdot 3^2 \cdot 5$.

Bemerkungen. 1) Nach Satz 2.2 gibt es für jedes Gitter Γ von E^n eine geordnete Vektorraumbasis $\mathfrak{B}$, die eine $\mathbb{Z}$-Basis von Γ ist. Stellt man die Symmetriegruppe $\mathrm{S}(\Gamma)$ in dieser Basis dar, erhält man eine endliche Untergruppe der Matrizengruppe $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$. Umgekehrt lässt sich jede endliche Untergruppe H von $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$ als Symmetriegruppe eines Gitters $\Gamma \subset E^n$ realisieren. Zunächst ist nämlich $\mathbb{Z}^n$ eine diskrete Untergruppe von $\mathbb{R}^n$ und H besteht aus Automorphismen von $\mathbb{Z}^n$. Mittelt man ein Skalarprodukt auf $\mathbb{R}^n$ mit Hilfe der Gruppe H, gewinnt man ein H-invariantes Skalarprodukt $\langle -,- \rangle_H$. Es sind dann $\Gamma = \mathbb{Z}^n$ ein Gitter von $E^n = (\mathbb{R}^n, \langle -,- \rangle_H)$ und H eine Untergruppe von $\mathrm{S}(\Gamma)$.

2) Die Ordnungen der endlichen Untergruppen H von $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$ sind *uniform beschränkt*. Nach Minkowski ist nämlich die Einschränkung der kanonischen Projektion π_p: $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z}) \to \mathrm{GL}(n,\mathbb{Z}/p\mathbb{Z})$ auf H *injektiv*, wenn p eine ungerade Primzahl ist. Insbesondere besitzt $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$ nur endlich viele Isomorphietypen von endlichen Untergruppen. Es ist dies ein erstes *Endlichkeitsresultat* über $\mathrm{GL}(n,\mathbb{Z})$; es kann zu Theorem 8.2 (s. [14]), einem entscheidenden Hilfsmittel des Bieberbachschen Beweises von Theorem 3.5, verschärft werden.

3 Raumgruppen

Die Raumgruppen treten in der Kristallographie als Gruppen der Deckbewegungen von *Kristallstrukturen* auf, d.h. von idealisierten Systemen der Positionen der Atome, Ionen oder Moleküle, aus denen Kristalle aufgebaut sind. In diesen Anwendungen sind die Raumgruppen also Gruppen von Deckbewegungen. Für viele Fragen ist es aber nützlich, über eine direkte Definition der Raumgruppen zu verfügen, etwa über Definition 3.1.

3.1 Grundbegriffe

Wie zuvor bezeichne $E = (V, \langle -,- \rangle)$ einen euklidischen Vektorraum. Eine Abbildung ψ: $E \to E$ wird *Isometrie* genannt, falls sie alle Distanzen erhält. Jede Isometrie ist bijektiv und die Zusammensetzung einer orthogonalen Abbildung φ: $E \to E$ und einer Translation τ_v mit Translationsvektor $v = \psi(0)$. Die Gruppe $\mathrm{Iso}(E)$ aller Isometrien von E ist, wie man leicht bestätigt, isomorph zur Produktmenge $V \times \mathrm{O}(E)$, versehen mit dem Produkt

$$(v,\varphi) \cdot (v',\varphi') = (v + \varphi(v'), \varphi \circ \varphi'). \tag{3.1}$$

Diese Formel zeigt, dass die Projektion $(v,\varphi) \mapsto \varphi$ einen Gruppenhomomorphismus π von $\mathrm{Iso}(E)$ auf $\mathrm{O}(E)$ liefert; sein Kern besteht aus allen Translationen von E.

Sei nun G eine Untergruppe von $\mathrm{Iso}(E)$. Der Kern der Einschränkung von π auf G ist der *Translationsnormalteiler* von G; ich bezeichne ihn mit $T(G)$ und die zugeordnete Untergruppe der Translationsvektoren mit $\Gamma(G)$. Die angekündigte Definition einer Raumgruppe kann nun so ausgesprochen werden:

Definition 3.1 Eine Untergruppe G von $\mathrm{Iso}(E)$ wird *Raumgruppe* genannt, falls $\Gamma(G)$ ein Gitter ist.

Ist G eine Raumgruppe, so bezeichnet man ihr Bild unter π als *Punktgruppe* G_0 von G. Diese Gruppe ist isomorph zu $G/T(G)$ und endlich, denn es gilt

Hilfssatz 3.2 *Die Punktgruppe G_0 einer Raumgruppe G ist eine Untergruppe der Symmetriegruppe des Gitters $\Gamma(G)$.*

Beweis. Es ist $T(G)$ ein Normalteiler von G. Die Rechnung

$$(v,\varphi)\cdot(w,\mathbb{1})\cdot(v,\varphi)^{-1} = \big(v+\varphi(w),\varphi\big)\cdot\big(-\varphi^{-1}(v),\varphi^{-1}\big) = \big(\varphi(w),\mathbb{1}\big)$$

impliziert deshalb, dass jede orthogonale Abbildung $\varphi \in G_0$ das Gitter $\Gamma(G)$ auf sich abbildet und daher in $\mathrm{S}(\Gamma(G))$ liegt. □

Eine Kristallstruktur kann durch eine Funktion der Form $h\colon E^3 \to \mathscr{F}$ beschrieben werden; dabei sagt der Wert $h(x)$, ob sich in $x \in E$ ein Atom oder Ion befindet, und falls ja, um welche Sorte es sich handelt. Die *Invarianzgruppe* $\mathrm{Inv}(h)$ einer Funktion $h\colon E \to \mathscr{F}$ ist ganz allgemein so erklärt:

$$\mathrm{Inv}(h) = \{\psi \in \mathrm{Iso}(E) \mid h\circ\psi = h\}. \tag{3.2}$$

Die Invarianzgruppe einer Funktion h, die ein Muster beschreibt, erlaubt es, das Muster nach seiner Regelmässigkeit zu klassifizieren. Dazu muss man aber noch festlegen, *wann zwei Muster als im wesentlichen gleich betrachtet werden sollen.* Zunächst wird man ein Muster und sein Bild unter einer Translation als gleichberechtigt ansehen; häufig wird man sogar das Bild des Musters unter einer Ähnlichkeitsabbildung $\sigma\colon E \to E$ nicht vom Original unterscheiden wollen. Beiden Festsetzungen entsprechen Konjugationsklassen von Invarianzgruppen. Wie man leicht nachrechnet, gilt nämlich die Beziehung

$$\mathrm{Inv}(h\circ\sigma^{-1}) = \sigma\cdot\mathrm{Inv}(h)\cdot\sigma^{-1}. \tag{3.3}$$

Obige Überlegungen veranlassen einen, auch die Raumgruppen zu Konjugationsklassen bezüglich der Translationen oder der Ähnlichkeitsabbildungen zusammenzufassen. Da die Menge der Ähnlichkeitsklassen von Raumgruppen aber immer noch unendlich ist, falls $\dim E > 1$ beträgt, betrachtet man noch gröbere Äquivalenzrelationen, insbesondere die folgenden zwei:

Definition 3.3 Zwei Raumgruppen G und G' in $\mathrm{Iso}(E)$ werden *affin äquivalent* genannt, falls es eine affine Abbildung $\alpha = \tau\circ L\colon E \to E$ gibt, welche die Beziehung

$$G' = \alpha\cdot G\cdot\alpha^{-1} = \{\alpha\circ\psi\circ\alpha^{-1} \mid \psi \in G\} \tag{3.4}$$

erfüllt. Falls man in dieser Beziehung α *orientierungserhaltend* wählen kann, werden G und G' als *eigentlich affin äquivalent* oder windungsäquivalent bezeichnet.

Bemerkungen. 1) Eine affine Abbildung $\alpha\colon E \to E$ ist die Zusammensetzung einer *linearen* Abbildung L mit einer Translation $\tau_v\colon x \mapsto x+v$; eine Raumgruppe G besteht dagegen aus Isometrien. Ist nun $\alpha\colon E \to E$ eine bijektive affine Abbildung, so wird $\alpha\cdot G\cdot\alpha^{-1}$ im allgemeinen keine Raumgruppe sein. Ist sie es, so zeigt die Rechnung

$$(v,L)\cdot(w,\varphi)\cdot(v,L)^{-1} = \big(L(w)+v-L\circ\varphi\circ L^{-1}(v),\, L\circ\varphi\circ L^{-1}\big), \tag{3.5}$$

dass $L\circ\varphi\circ L^{-1}$ für jede orthogonale Abbildung $\varphi \in G_0$ orthogonal sein muss. Dies bedingt, dass L der Gruppe G_0 angepasst ist; genauer gilt der

Satz 3.4 *Sind G_0 eine Untergruppe von $\mathrm{O}(E)$ und $L\colon E \xrightarrow{\sim} E$ eine bijektive lineare Abbildung mit $L \cdot G_0 \cdot L^{-1} \subset \mathrm{O}(E)$, so gibt es eine lineare, symmetrische und positive Abbildung P, die mit allen $\varphi \in G_0$ vertauschbar ist, und eine orthogonale Abbildung ψ, welche die Bedingungen $L = \psi \circ P$ und $L \cdot G_0 \cdot L^{-1} = \psi \cdot G_0 \cdot \psi^{-1}$ erfüllen.*

2) Sind G und G' affin äquivalent vermöge $\alpha = \tau \circ L$, so zeigt die Rechnung (3.5), dass die Paare $(\Gamma(G), G_0)$ und $(\Gamma(G'), G'_0)$ die Bedingung

$$L(\Gamma) = \Gamma' \quad \text{und} \quad L \cdot G_0 \cdot L^{-1} = G'_0 \tag{3.6}$$

erfüllen. Diese Bedingung definiert eine Relation, welche die affine Äquivalenz abschwächt; sie kommt in Abschnitt 4 ausführlicher zur Sprache.

3.2 Beispiele

1) *Invarianzgruppe eines Gitters.* Seien $\Gamma \subset E$ ein Gitter und $h\colon E \to \{0,1\}$ die charakteristische Funktion χ_Γ des Gitters (es ist also $\chi_\Gamma(x) = 1 \Leftrightarrow x \in \Gamma$). Die Invarianzgruppe von χ_Γ enthält dann die Translationen τ_v mit $v \in \Gamma$ und die orthogonalen Abbildungen $\varphi \in \mathrm{S}(\Gamma)$, und sie wird von ihnen erzeugt; genauer ist

$$\mathrm{Inv}(\chi_\Gamma) = \{\tau_v \circ \varphi \mid \varphi \in \mathrm{S}(\Gamma),\, v \in \Gamma\} \xrightarrow{\sim} \Gamma \rtimes \mathrm{S}(\Gamma).$$

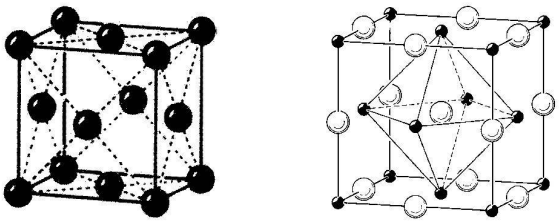
Sei Γ' ein zweites Gitter in E. Wenn die Gruppen $G = \mathrm{Inv}(\chi_\Gamma)$ und $G' = \mathrm{Inv}(\chi_{\Gamma'})$ affin äquivalent sind, so gibt es definitionsgemäss eine bijektive Abbildung $\alpha = \tau \circ L\colon E \xrightarrow{\sim} E$ mit $\alpha \cdot G \cdot \alpha^{-1} = G'$. Eine kurze Rechnung zeigt, dass dies genau dann gilt, falls $\Gamma' = L(\Gamma)$ und $\mathrm{S}(\Gamma') = L \cdot \mathrm{S}(\Gamma) \cdot L^{-1}$ ist, falls also die Paare $(\Gamma, \mathrm{S}(\Gamma))$ und $(\Gamma', \mathrm{S}(\Gamma'))$ die Bedingung (3.6) erfüllen.

2) *Raumgruppe der Elemente vom Kupfertyp.* Die Atome des Metalles Kupfer bilden ein flächenzentriertes kubisches Punktgitter $F \in \mathbb{R}^3$, das dem Gitter $\Gamma'_3 = \{x \in \mathbb{Z}^3 \mid x_1 + x_2 + x_3 \text{ gerade}\}$ ähnlich ist (s. Fig. 3, links). Die Invarianzgruppe von χ_F ist daher affin äquivalent zur Gruppe $\mathrm{Inv}(\chi_{\Gamma'_3}) \xrightarrow{\sim} \Gamma'_3 \rtimes \mathrm{S}(\Gamma'_3)$.

Die Gruppe $\mathrm{S}(\Gamma'_3)$ ist die Symmetriegruppe des Würfels $W' = \{x \in \mathbb{R}^3 \mid |x_i| \leq 1\}$; sie besitzt 48 Elemente und wird in der Kristallographie mit O_h oder $\frac{4}{m}\overline{3}\frac{2}{m}$ bezeichnet.[1] Der erste Teil des Symbols $\frac{4}{m}\overline{3}\frac{2}{m}$, also $\frac{4}{m}$, besagt, dass das Gitter Drehungen der Ordnung 4 um die Koordinatenachsen und Spiegelungen an den Koordinatenebenen zulässt; das Symbol $\overline{3}$ deutet darauf hin, dass die Raumdiagonale $\mathbb{R} \cdot (1,1,1)^t$ die Achse einer Drehspiegelung der Ordnung 6 ist; schliesslich zeigt $\frac{2}{m}$, dass die Achsen durch die Mittelpunkte gegenüberliegender Kanten 2-zählige Drehachsen sind und das Gitter Spiegelungen an Ebenen, die auf diesen Drehachsen senkrecht stehen, zulässt. Der Typ der Raumgruppe $\mathrm{Inv}(\Gamma'_3)$ wird mit $F\frac{4}{m}\,\overline{3}\,\frac{2}{m}$ bezeichnet; s. [11]. Die Kristallstrukturen der Metalle Al, Ag, Au und Pb sind jener des Kupfers ähnlich; ihre Raumgruppen sind daher vom gleichen Typ.

---

1) Die Kristallographen bezeichnen die geometrischen Kristallklassen auf zwei Weisen. Die erste geht auf Schoenflies zurück; bei ihr trägt die Symmetriegruppe des Würfels oder regelmässigen Oktaeders die Bezeichnung O_h. Die andere Bezeichnungsweise stammt von Hermann und Mauguin; sie ist sprechender, aber gewöhnungsbedürftig.



Kristallstruktur von Cu Kristallstruktur von NaCl

Fig. 3

3) *Raumgruppen der Verbindungen vom Typ NaCl.* Beim Steinsalz bilden die Natriumionen Na^+ ein flächenzentriertes kubisches Punktgitter F^+, die Chlorionen Cl^- ein zu F^+ kongruentes Punktgitter F^-. Diese Anordnung ist dem Paar $(\Gamma_3', \Gamma_3' + (1,1,1)^t)$ ähnlich; sie ist in Fig. 3 rechts dargestellt. Die Raumgruppe ist erneut vom Typ $F\frac{4}{m}\overline{3}\frac{2}{m}$.

3.3 Endlichkeit der Typen von Raumgruppen

Die in Definition 3.3 festgelegten Relationen der affinen und der eigentlich affinen Äquivalenz führen im Falle des 3-dimensionalen Raumes zu endlich vielen Klassen. Dies wurde um 1890 von E.S. Fedorov und von A. Schoenflies bewiesen, und zwar durch explizite Bestimmung der Typen: bezüglich der eigentlich affinen Äquivalenz gibt es 230 Typen von Raumgruppen.

Die grosse Anzahl der Typen macht es schwierig, vorher zu sagen, wie das Ergebnis für höherdimensionale Räume lautet. D. Hilbert warf deshalb in der Ausarbeitung seines Pariser Vortrages von 1900 die folgende Frage auf (Problem 18 in [10]):

> [...] es ist daher die Untersuchung der Frage wünschenswert, *ob es auch im n-dimensionalen Euklidischen Raume nur eine endliche Anzahl wesentlich verschiedener Arten von Bewegungsgruppen mit Fundamentalbereich gibt.*

1910 schon konnte L. Bieberbach seine Antwort ankündigen; er begründete sie in den Arbeiten [1] und [2]:

Theorem 3.5 *Für jeden euklidischen Raum E enthält* $\mathrm{Iso}(E)$ *nur endlich viele Typen von Raumgruppen.*

Die Beweise von Theorem 3.5 – etwa jener in [8] – liefern selbst in kleinen Dimensionen astronomisch grosse Schranken. Die Tabelle unten zeigt zum Vergleich die heute bekannten, exakten Anzahlen.

4 Konstruktion der Raumgruppen – Skizze

Die Aufgabe, die Raumgruppen eines gegebenen euklidischen Raumes bis auf affine Äquivalenz zu bestimmen, ist umfangreich, falls $\dim E > 2$ ist. Es ist daher naheliegend, in einem ersten Schritt Klassifikationen nach Äquivalenzrelationen, die jene der affinen oder eigentlich affinen Äquivalenz vergröbern, vorzunehmen.

Seien G und G' Raumgruppen von E mit Gittern $\Gamma = \Gamma(G)$, $\Gamma' = \Gamma(G')$ und Punktgruppen G_0, G'_0. Man nennt G und G' *arithmetisch äquivalent*, falls es eine affine Transformation $\alpha = \tau \circ L\colon E \to E$ gibt, welche die Bedingung (3.6) erfüllt. Diese Bedingung ist nur eine Forderung an die Paare (Γ, G_0) und (Γ', G'_0); sie besagt, dass die Paare arithmetisch äquivalent im Sinne der Definition 4.1 sind:

Definition 4.1 Zwei Paare $(\Gamma, H \subseteq \mathrm{S}(\Gamma))$ und (Γ', H') werden *arithmetisch* äquivalent genannt, falls es eine lineare Bijektion $L\colon E \xrightarrow{\sim} E$ gibt, welche die Bedingung

$$\Gamma' = L(\Gamma) \quad \text{und} \quad H' = L \cdot H \cdot L^{-1} \tag{4.1}$$

erfüllt. Genügt L der schwächeren Bedingung $H' = L \cdot H \cdot L^{-1}$, bezeichnet man die Paare als *geometrisch* äquivalent.

Die Äquivalenzklassen der arithmetischen oder geometrischen Äquivalenz nennt man die *arithmetischen* oder die *geometrischen Kristallklassen* (oder Klassen). Wie die folgende Tabelle vor Augen führt, ist die Mächtigkeit der Menge der arithmetischen Klassen $\mathscr{A}$ und jene der Menge der geometrischen Klassen $\mathscr{G}$ deutlich kleiner als die Anzahl der affinen Typen von Raumgruppen. (Die Zahlen stammen für $n \leq 4$ aus [3], S. 52, und für $n \in \{5, 6\}$ aus [12], Tabelle 2).

$\dim E$	Raumgruppentypen	$\mathrm{card}(\mathscr{A})$	$\mathrm{card}(\mathscr{G})$
2	17	13	10
3	219	73	32
4	4783	710	227
5	222 018	6079	955
6	28 927 922	85 311	7014

Definition 4.1 liefert auch Einteilungen der Gitter:

Definition 4.2 Zwei Gitter Γ und Γ' werden *arithmetisch* äquivalent genannt, falls die Paare $\big(\Gamma, \mathrm{S}(\Gamma)\big)$ und $\big(\Gamma', \mathrm{S}(\Gamma')\big)$ arithmetisch äquivalent sind. Analog definiert man die *geometrische* Äquivalenz von Gittern.

4.1 Bestimmung der geometrischen Kristallklassen von E^3

Die Bestimmung der *geometrischen* Kristallklassen läuft nach Definition 4.1 und Satz 3.4 darauf hinaus, alle endlichen Untergruppen der orthogonalen Gruppe $\mathrm{O}(E)$ zu finden, die in einer geeigneten Basis ganzzahlig dargestellt werden, und diese Untergruppen bis auf Konjugation in $\mathrm{O}(E)$ zu klassifizieren.

Im Falle des 3-dimensionalen Raumes ist diese Bestimmung bereits in der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts durchgeführt worden. Sie kann so erfolgen: man klassifiziert zunächst alle endlichen Untergruppen von $\mathrm{O}(3, \mathbb{R})$ bis auf Konjugation und entfernt dann aus dieser Liste jene Gruppen, die keine treue ganzzahlige Darstellung in $\mathrm{GL}(3, \mathbb{Z})$ haben. Beide Teile dieses Weges sind recht kurz; dass dem so ist, beruht auf Eigenschaften von E^3, die in höheren Dimensionen nicht mehr vorliegen.

Endliche Untergruppen von $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$**.** Die Suche der endlichen Untergruppen H von $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ wird durch den Umstand erleichtert, dass jedes Element $\varphi \in H \setminus \{\mathbb{1}\}$ eine Drehung um eine Achse ist, welche die Einheitssphäre $\mathbb{S}^2$ in zwei Punkten durchstösst, den *Polen* von φ. Die Menge aller Pole ist eine Teilmenge $\mathcal{P} \subset \mathbb{S}^2$, auf der H operiert. Analysiert man diese Wirkung, kommt man zu

Satz 4.3 *Für jede endliche Untergruppe $H \subset \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ trifft eine der folgenden Aussagen zu:*

(i) *Alle Drehachsen von $H \setminus \{\mathbb{1}\}$ stimmen überein. Dann ist H zyklisch.*

(ii) *Es gibt genau 3 Drehachsen; sie sind paarweise orthogonal und H ist isomorph der Gruppe $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$.*

(iii) *Es gibt mehr als 3 Drehachsen und auf einer unter ihnen stehen alle anderen senkrecht. H ist dann eine Diedergruppe der Ordnung $2m$ mit $m > 2$.*

(iv) *Die Pole der 3-zähligen Drehachsen bilden die Ecken eines Würfels W oder eines Dodekaeders D. Dann ist H die Drehgruppe der dem Würfel W einbeschriebenen Tetraeder, die Drehgruppe von W oder jene von D.*

Die Untergruppen von $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$ ergeben sich leicht aus jenen von $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Es ist nämlich $\det(-\mathbb{1}) = (-1)^3 = -1$ und daher ist $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$ das direkte Produkt der Untergruppen $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ und $\overline{1} = \{\mathbb{1}, -\mathbb{1}\}$. Jede Untergruppe U von $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$ gehört daher zu einer von 3 Sorten: (a) $U \subseteq \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, (b) $-\mathbb{1} \in U$ oder (c) $U \subsetneq \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ und $-\mathbb{1} \notin U$. Im zweiten Fall ist $U = (U \cap \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})) \times \overline{1}$; im dritten Fall ist der offensichtliche Homomorphismus $U \hookrightarrow \mathrm{SO}(3,\mathbb{R}) \times \overline{1} \to \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ injektiv; U ist also isomorph einer Untergruppe $\hat{U} \subset \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ und entsteht aus $\hat{U}$ dadurch, dass jedes Element φ von $\hat{U} \setminus (U \cap \mathrm{SO}(3,\mathbb{R}))$ durch $-\varphi$ ersetzt wird.

Kristallographische Untergruppen von $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$**.** Das Aussondern der endlichen Untergruppen von $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$, die nicht *kristallographisch* sind, also kein Gitter invariant lassen, geschieht wie folgt. Sei φ eine Drehung in E^3, die ein Gitter Γ von E^3 auf sich abbildet. Berechnet man die Spur von φ in einer orthonormierten Basis $\mathcal{B} = (b_1, b_2, b_3)$ mit $\varphi(b_1) = b_1$, sieht man, dass $\mathrm{sp}\,\varphi = 1 + 2\cos t$ ist; wählt man hingegen eine Basis von E^3, die eine $\mathbb{Z}$-Basis des Gitters Γ ist, so erkennt man, dass $\mathrm{sp}\,\varphi$ in $\mathbb{Z}$ liegt. Folglich ist $\cos t \in \{1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, -1\}$ und φ hat die Ordnung 1, 6, 4, 3 oder 2. Diese Folgerung nennt man die *kristallographische Bedingung* an die Rotationen von E^3.

Sei nun H eine endliche Untergruppe von $\mathrm{SO}(E^3)$, die ein Gitter Γ invariant lässt. Jede der Drehungen $\varphi \in H$ hat dann eine der Ordnungen 1, 2, 3, 4 oder 6. Das schliesst die meisten der in Satz 4.3 aufgezählten Gruppen aus. Übrig bleiben die zyklischen Gruppen der Ordnungen 1, 2, 3, 4 und 6, die Diedergruppen der Ordnungen 4, 6, 8 und 12, sowie die Drehgruppen eines regulären Tetraeders oder Oktaeders. Diese Gruppen vertreten 11 verschiedene Konjugationsklassen. Bildet man die direkten Produkte der genannten Gruppen mit $\overline{1} = \{\mathbb{1}, -\mathbb{1}\}$, erhält man Vertreter von 11 weiteren Konjugationsklassen. Es verbleibt die Aufgabe, in den Vertretern $\hat{H}$ der ersten 11 Klassen Untergruppen N vom Index 2 aufzusuchen, und die Gruppen $H = N \cup \{-\varphi \mid \varphi \in \hat{H} \setminus N\}$ zu klassifizieren. Dies führt auf 10 weitere Klassen. Insgesamt kommt man zu $11 + 11 + 10 = 32$ Konjugationsklassen kristallographischer Gruppen oder (geometrischen) *Kristallklassen*.

Beispiel. Sei $\hat{H}$ die Drehgruppe eines Würfels; sie hat die Ordnung 24, ist isomorph der symmetrischen Gruppe S_4 und besitzt genau einen Normalteiler N vom Index 2; dieser ist isomorph der alternierenden Gruppe A_4. Aus $\hat{H}$ und N gewinnt man dann 5 Gruppen, nämlich

$$N, \quad \hat{H}, \quad N \times \overline{1}, \quad H = N \cup -(\hat{H} \setminus N) \quad \text{und} \quad \hat{H} \times \overline{1}.$$

Sie vertreten die Kristallklassen des sogenannten *kubischen Kristallsystems*. In der Schoenfliesschen Notation werden sie mit T, O, T_h, T_d und O_h bezeichnet, in jener von Hermann-Mauguin mit

$$233, \quad 432, \quad \tfrac{2}{m}\overline{3} \text{ oder } m\overline{3}, \quad \overline{4}3m, \quad \text{und} \quad \tfrac{4}{m}\overline{3}\tfrac{2}{m} \text{ oder } m\overline{3}m.$$

Vier dieser Klassen werden durch Symmetriegruppen von regelmässigen Polyedern vertreten. Die Drehgruppe $\mathrm{S}^+(\mathcal{T})$ eines regelmässigen Tetraeders $\mathcal{T}$ (mit Zentrum $(0,0,0)^t$) ist vom Typ $T \sim 233$; die volle Symmetriegruppe $\mathrm{S}(\mathcal{T})$ vom Typ $T_d \sim \overline{4}3m$, denn $\mathrm{S}(\mathcal{T})$ enthält zwar Spiegelungen, nicht aber $-\mathbb{1}$. Das Symbol $\overline{4}$ in der Bezeichnung $\overline{4}3m$ drückt aus, dass $\mathrm{S}(\mathcal{T})$ eine Drehspiegelung der Ordnung 4 enthält. Ist $\mathcal{O}$ ein reguläres Oktaeder, so gehört $\mathrm{S}^+(\mathcal{O})$ zur Klasse mit dem Namen O oder 432, und $\mathrm{S}(\mathcal{O})$ zur Klasse O_h oder $\frac{4}{m}\overline{3}\frac{2}{m}$.

Es verbleibt die Klasse T_h oder $\frac{2}{m}\overline{3}$. Das Symbol T_h deutet darauf hin, dass ein geeigneter Vertreter eine horizontale Spiegelungsebene enthält. Polyeder mit dieser Symmetrie sind die in Fig. 4 dargestellten Dodekaeder.

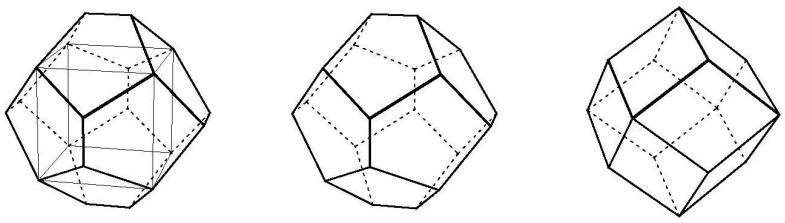


Fig. 4

Die Figur links erklärt ihre Konstruktion: man setzt auf jede Seitenfläche eines Würfels ein Walmdach und zwar so, dass die Neigungen der Flächenstücke, die längs einer Kante aneinander stossen, übereinstimmen und dass das so entstehende Dodekaeder 3-zählige Drehungen um die Diagonalen des Würfels zulässt. Das Dodekaeder besitzt dann 12 kongruente fünfeckige Flächen mit 4 gleichlangen Kanten. Hat die fünfte Kante eine andere Länge, so ist $\mathrm{S}(\mathcal{P})$ vom Typ T_h. Dies gilt auch dann noch, wenn die fünfte Kante die Länge 0 hat: $\mathcal{P}$ ist dann ein *Rhombendodekaeder*.

4.2 Bestimmung der arithmetischen Kristallklassen des E^3

Die *arithmetischen* Kristallklassen von E können mit verschiedenen Verfahren gefunden werden. Eines geht auf das 19. Jahrhundert zurück: bei ihm gewinnt man die arithmetischen Klassen durch Verfeinerung der geometrischen Klassen (s. anschliessendes Beispiel). Bei einem zweiten Verfahren bestimmt man Vertreter der arithmetischen Klassen auf direktem Wege (s. [14], Nummer 8.3).

Beispiel. Seien H eine endliche Untergruppe von $\mathrm{SO}(E^3)$ vom Typ C_4 und ρ eine Drehung mit Drehachse U, die H erzeugt. Sei weiter Γ ein Gitter von E^3, das von H auf sich abgebildet wird. Es gibt einen Gitterpunkt $v \in \Gamma \setminus U$. Mit v sind auch $\rho(v)$ und $w = v - \rho(v)$ Gitterpunkte; da $w \neq (0,0,0)^t$ ist und auf U senkrecht steht, enthält die Drehebene $W = U^\perp$ einen Gitterpunkt positiver Länge. Es folgt, dass $\Gamma \cap W$ ein quadratisches Gitter von W ist; seien b_1, b_2 orthogonale Vektoren gleicher Länge, die $\Gamma \cap W$ erzeugen. Die Summe $v + \rho(v) + \rho^2(v) + \rho^3(v)$ ist ungleich $(0,0,0)^t$ und wird von ρ festgehalten. Also ist $U \cap \Gamma$ ein Gitter in U; insbesondere gibt es einen Vektor $b_3 \in \Gamma \cap U$ mit kleinster positiver Norm.

Zwei Fälle treten nun auf: Γ ist entweder gleich $\Gamma_1 = (\Gamma \cap W) \oplus (\Gamma \cap U)$, oder es gibt einen Vektor $u \in \Gamma \setminus \Gamma_1$. Im zweiten Fall ist $(\Gamma \cap W) + u$ eine Teilmenge der affinen Ebene $W + u$, die unter der Drehung ρ invariant ist. Dies ist nur möglich, wenn die Orthogonalprojektion von $(\Gamma \cap W) + u$ auf die Ebene W mit der Menge $(\Gamma \cap W) + \frac{1}{2}(b_1 + b_2)$ zusammenfällt. Es gehört dann $2 \cdot u$ zu Γ_1 und Γ ist gleich $\Gamma_1 \cup \Gamma_1 + \frac{1}{2}(b_1 + b_2 + b_3)$: das Gitter Γ entsteht aus Γ_1 durch *Zentrierung*.

Dieses Ergebnis bedeutet, dass die geometrische Kristallklasse C_4 aus genau zwei arithmetischen Kristallklassen zusammengesetzt ist. Sei nämlich $L\colon E^3 \to \mathbb{R}^3$ die lineare Abbildung, die der geordneten Basis (b_1, b_2, b_3) von E^3 die Standardbasis (e_1, e_2, e_3) von $\mathbb{R}^3$ zuordnet. Durch L wird Γ_1 auf das Standardgitter $\mathbb{Z}^3$ von $\mathbb{R}^3$ geworfen; da die Vektoren b_1, b_2 und b_3 paarweise orthogonal sind und b_1, b_2 gleiche Länge haben, ist $\rho' = L \cdot \rho \cdot L^{-1}$ eine Drehung um die Achse $\mathbb{R} \cdot e_3$. Sei $H' \subset \mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$ die von ρ' erzeugte Untergruppe. Im ersten Fall ist das Paar (Γ, H) dem Paar $(\mathbb{Z}^3, H')$ arithmetisch äquivalent, im zweiten dem Paar $\left(\mathbb{Z}^3 \cup \mathbb{Z}^3 + \frac{1}{2}(1,1,1)^t, H'\right)$. Die beiden Paare sind nicht arithmetisch äquivalent: es wird nämlich $\mathbb{Z}^3$ von Gitterpunkten erzeugt, die auf der Achse $U' = \mathbb{R} \cdot e_3$ und der Drehebene $W' = (U')^\perp$ liegen, nicht aber $\mathbb{Z}^3 \cup \mathbb{Z}^3 + \frac{1}{2}(1,1,1)^t$.

4.3 Konstruktion der Raumgruppen nach Schoenflies

In dieser und der folgenden Nummer vergleiche ich die Konstruktionen von Schoenflies und Burckhardt am Beispiel der Raumgruppen der geometrischen Klasse C_4.

Seien G eine Raumgruppe von E^3, deren Punktgruppe $H = G_0$ von einer Drehung der Ordnung 4 erzeugt wird, U die Achse dieser Drehung und $\pi_U\colon E^3 \to E^3$ die Orthogonalprojektion auf diese Achse. In G gibt es dann eine Isometrie der Form (v_φ, φ); sie ist eine Drehung, wenn $\pi_U(v_\varphi)$ der Nullvektor ist, und sonst eine Schraubung. In jedem Falle liegt $4 \cdot \pi_U(v_\varphi)$ in $\Gamma = \Gamma(G)$. Durch Verschieben des Ursprungs kann man erreichen, dass v_φ und $\pi_U(v_\varphi)$ zusammenfallen. Nach Nummer 4.2 gibt es eine Basis $\mathfrak{B} = (b_1, b_2, b_3)$ von E^3, so dass b_3 das Teilgitter $\Gamma \cap U$ von U und b_1, b_2 das Teilgitter $\Gamma \cap W$ von $W = U^\perp$ erzeugen. Wir können annehmen, b_1 und b_2 seien orthogonal und von der gleichen Länge. Dann ist entweder Γ gleich dem Teilgitter $\Gamma_1 = (\Gamma \cap W) \oplus (\Gamma \cap U)$, oder gleich $\Gamma_1 \cup \Gamma_1 + \frac{1}{2}(b_1 + b_2 + b_3)$.

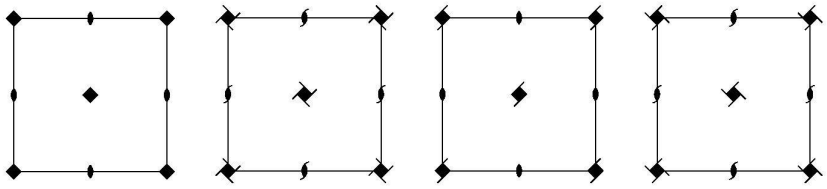
Die Gruppe G enthält mit (v_φ, φ) auch jedes Paar der Form $(w + v_\varphi, \varphi)$ mit $w \in \Gamma$. Um die Achsen dieser Paare zu finden, suchen wir die Vektoren $x \in W$, welche die Gleichung $\varphi(x) + \pi_W(w) + v_\varphi = x + v_\varphi$ oder $\pi_W(w) = (\mathbb{1} - \varphi)(x)$ erfüllen. Sei $L_\varphi\colon W \to W$ die lineare Abbildung $(\mathbb{1} - \varphi)_{|W}$. Wir können annehmen, L_φ werde bezüglich (b_1, b_2)

durch die Matrix

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

beschrieben; A ist regulär. Die Umkehrabbildung L_φ^{-1} ist dann eine Drehstreckung mit Drehwinkel $\pi/4$ und Faktor $\sqrt{2}/2$.

Wir unterscheiden nun zwei Fälle. Ist $\Gamma = \Gamma_1$, also ein primitives Gitter, so ist $\pi_W(\Gamma) = \Gamma \cap W = \mathbb{Z}b_1 \oplus \mathbb{Z}b_2$, weshalb G eine Schar von Achsen aufweist, die W in dem quadratischen Gitter $L_\varphi^{-1}(\Gamma \cap W)$ durchstossen. Je nach dem Wert von v_φ gehören diese Achsen zu Drehungen oder Schraubungen. Ihre geometrische Verteilung ist in Fig. 5 für $v_\varphi = \frac{k}{4}b_3$ und $k \in \{0,1,2,3\}$ dargestellt.



Typ $P4$ Typ $P4_1$ Typ $P4_2$ Typ $P4_3$

Fig. 5

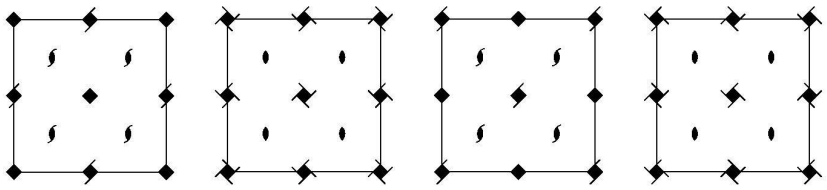
Die Ecken der gezeichneten 4 Quadrate sind der Ursprung und b_1, $b_1 + b_2$ sowie b_2. Das Diagramm ganz links illustriert die Achsenverteilung für $k = 0$: es zeigt, dass die Lote in den 4 Ecken und im Mittelpunkt des Quadrates Drehachsen sind. Das nächste Diagramm gehört zu $k = 1$: an Stelle der Drehachsen finden sich nun Achsen von Schraubungen der Ganghöhe $\frac{1}{4}b_3$. Die letzten zwei Diagramme veranschaulichen die Fälle $k = 2$ und $k = 3$: die Schraubungen haben die Ganghöhen $\frac{2}{4}b_3$ und $\frac{3}{4}b_3$, was durch die andere Art der Flügelchen angedeutet ist.

In den Diagrammen sind auch die Positionen von Achsen, die von der Achse U der Drehung φ^2 herrühren, eingezeichnet. Die Durchstosspunkte dieser Schar von Achsen mit der Ebene W bilden das Gitter $(\mathbb{1} - \varphi^2)_{|W}^{-1}(\Gamma \cap W)$; es ist quadratisch und gleich $(\frac{1}{2}\Gamma) \cap W$. Für $k \in \{0,2\}$ sind die Geraden Drehachsen, für $k \in \{1,3\}$ Achsen von Schraubungen.

Die Dispositionen der Achsen sind in den 4 Fällen deutlich unterschiedlich. Dies zeigt, dass es 4 Typen von Raumgruppen in der arithmetischen Klasse $P4$ gibt. Die Kristallographen bezeichnen sie mit $P4$, $P4_1$, $P4_2$ und $P4_3$.

Im zweiten Fall ist Γ gleich $\Gamma_1 \cup \Gamma_1 + \frac{1}{2}(b_1 + b_2 + b_3) = \Gamma_1 + \mathbb{Z}\frac{1}{2}(b_1 + b_2 + b_3)$. Setze $\overline{\Gamma} = \pi_W(\Gamma) = \mathbb{Z}b_1 + \mathbb{Z}b_2 + \mathbb{Z}\frac{1}{2}(b_1 + b_2)$; dann ist $L_\varphi^{-1}(\overline{\Gamma})$ das quadratische Gitter $\mathbb{Z}\frac{1}{2}b_1 + \mathbb{Z}\frac{1}{2}b_2$. Die Anordnungen der Achsen für $v_\varphi = \frac{k}{4}b_3$ und $k \in \{0,1,2,3\}$ sind in Figur 6 dargestellt. Das Diagramm ganz links zeigt die Anordnung für $k = 0$: die Lote in den Ecken und in der Mitte des Quadrates sind Drehachsen, die anderen Lote sind Schraubenachsen mit der Ganghöhe $\frac{1}{2}b_3$ Das zweite Diagramm zeigt die Situation für $k = 1$: alle Lote in den Punkten von $L_\varphi^{-1}(\overline{\Gamma})$ sind Achsen von Schraubungen, deren

Ganghöhen teils $\frac{1}{4}b_3$, teils $\frac{3}{4}b_3$ betragen. Geht man von $v_\varphi = \frac{1}{4}b_3$ zu $v_\varphi = \frac{2}{4}b_3$ über, werden die Lote in den Ecken und in der Mitte Schraubenachsen mit der Ganghöhe $\frac{1}{2}b_3$, die anderen Lote aber sind Drehachsen. Vergleicht man nun das erste und das dritte Diagramm, erkennt man, dass ihre periodischen Fortsetzungen durch eine Translation auseinander hervorgehen. Dies bedeutet, dass die dritte Gruppe durch Verschieben des Ursprunges in die erste Gruppe überführt werden kann. Ebenso sind die Gruppen des zweiten und vierten Diagrammes affin äquivalent. Daher gibt es in der arithmetischen Klasse $I4$ nur zwei eigentlich affine Typen von Raumgruppen; in der Kristallographie werden sie mit $I4$ und $I4_1$ bezeichnet.



Typ $I4$ Typ $I4_1$ Typ $I4$ Typ $I4_1$

Fig. 6

Bemerkungen. 1) Die oben vorgebrachten Überlegungen finden sich sinngemäss alle im Schoenfliesschen Werk [13]. Naturgemäss überzeugen sie umso eher, als man gewohnt ist, geometrisch, und nicht rechnerisch, zu argumentieren.

2) Die Analyse der Anordnung der Symmetrieelemente einer Raumgruppe G kann auf die Analyse kleinerer Gruppen abgestützt werden; denn es gilt: *Sei G eine Raumgruppe mit Gitter Γ und Punktgruppe G_0. Für jede Untergruppe $H \subset G_0$ ist das Urbild von H unter der Projektion $G \twoheadrightarrow G_0$ eine Untergruppe G_H von G mit Gitter Γ* ([13], Cap. VI, Lehrsatz XVI). Schoenflies benützt dieses Resultat bei den Untersuchungen der Raumgruppen mit nicht zyklischer Punktgruppe ausgiebig. Will man mit seiner Methode die Raumgruppen einer solchen arithmetischen Klasse finden, hat man daher auch die Raumgruppen von anderen Klassen zu ermitteln. Beim Burckhardtschen Zugang ist dies im Prinzip nicht nötig (s. [14], Nummer 6.5).

4.4 Konstruktion der Raumgruppen nach Burckhardt

Seien Γ das Gitter $\mathbb{Z}^3 \subset \mathbb{R}^3$ und H die Gruppe der Ordnung 4, die von den Potenzen der Drehung φ: $(x_1, x_2, x_3)^t \mapsto (-x_2, x_1, x_3)^t$ gebildet wird. Jede Raumgruppe G von $(\mathbb{R}^3, \langle -, - \rangle)$, welche der arithmetischen Klasse von $(\mathbb{Z}^3, H)$ angehört, wird vom Gitter der Translationsvektoren $\mathbb{Z}^3$ und einem Element der Form (v, φ) mit $v \in \mathbb{R}^3$ erzeugt. Es stellen sich zwei Fragen:

(i) Welche Vektoren v sind zugelassen?

(ii) Wann liefern Vektoren v, v' eigentlich affin äquivalente Gruppen?

Die Antwort auf (i) ergibt sich wie bei Schoenflies: $(v, \varphi)^4$ ist eine Translation; sie gehört genau dann zu G, falls $v + \varphi(v) + \varphi^2(v) + \varphi^3(v) = (0, 0, 4v_3)^t$ in $\mathbb{Z}^3$ liegt, d.h., falls $v_3 \in \frac{1}{4}\mathbb{Z}$ ist. Um den ersten Teil von (ii) zu beantworten, imitiert man das

geometrische Verfahren des Verschiebens des Ursprunges mit algebraischen Mitteln: dies führt auf die Translationsklassen (s. [14], Nummer 6.2). Durch Übergang von G zu einer andern Gruppe in der gleichen Translationsklasse kann man erreichen, dass der Vektor in (v, φ) die Form $(0, 0, \frac{k}{4})^t$ mit $k \in \mathbb{Z}$ bekommt. Es folgt, dass jede Raumgruppe der arithmetischen Klasse $P4$ eigentlich affin äquivalent ist zu einer Gruppe, die von $\mathbb{Z}^3$ und einem Element der Form $(\frac{k}{4}, \varphi)$ mit $k \in \{0, 1, 2, 3\}$ erzeugt wird. Es bleibt die Frage, ob verschiedene Werte von k auf eigentlich affin äquivalente Gruppen führen können. Man kann sie beantworten, indem man die Wirkung des Normalisators $N_{\mathrm{SL}(3,\mathbb{Z})}(H)$ auf der Menge der Translationsklassen analysiert (s. [14], Nummer 6.4).

Literatur

[1] Bieberbach, L.: Über die Bewegungsgruppen der Euklidischen Räume, Teil I. *Math. Annalen* 70 (1911), 297–336.

[2] Bieberbach, L.: Über die Bewegungsgruppen der Euklidischen Räume, Teil II. *Math. Annalen* 72 (1912), 400–412.

[3] Brown, H.; Bülow, R.; Neubüser, J.; Wondratschek, H.; Zassenhaus, H.: *Crystallographic groups of four-dimensional space*. John Wiley & Sons, 1978.

[4] Burckhardt, J.J.: Bemerkungen zur arithmetischen Berechnung der Bewegungsgruppen. *Comment. Math. Helv.* 2 (1930), 91–98.

[5] Burckhardt, J.J.: Zur Theorie der Bewegungsgruppen. *Comment. Math. Helv.* 6 (1934), 159–184.

[6] Burckhardt, J.J.: Bewegungsgruppen in mehrdimensionalen Räumen. *Comment. Math. Helv.* 9 (1936/37), 284–302.

[7] Burckhardt, J.J.: *Die Bewegungsgruppen der Kristallographie*. Birkhäuser, 1947 (1. Auflage) und 1966 (2. neubearbeitete Auflage).

[8] Buser, P.: A geometric proof of Bieberbach's theorems on crystallographic groups. *L'Enseignement Mathématique* 31 (1985), 137–145.

[9] Fedorov, E.S.: Zusammenstellung der krystallographischen Resultate des Herrn Schoenflies und der meinigen. *Zs. f. Kristallogr.* 20 (1892), 25–75.

[10] Hilbert, D.: *Mathematische Probleme*. Ges. Abh. Bd. 3, 290–329.

[11] *International Tables for Crystallography*. Volume A on space-group symmetry (T. Hahn); Kluwer Academic Publishers 2002 (fifth edition).

[12] Plesken, W.; Schulz, T.: Counting crystallographic groups in low dimensions. *Exp. Math.* 9 (2000), 407–411.

[13] Schoenflies, A.: *Krystallsysteme und Krystallstructur*. Teubner, 1891.

[14] Strebel, R.: Burckhardtsche Bestimmung der Raumgruppen II. Erscheint in *Elem. Math.*.

Ralph Strebel
Departement für Mathematik
Universität Freiburg
CH–1700 Freiburg, Schweiz
e-mail: `ralph.strebel@unifr.ch`