Berechnung von Dirichletzellen kristallographischer Gruppen mittels endlicher Wortlänge

Lukas Schnelle

Grüppchen 2025

In Zusammenarbeit mit
Alice C. Niemeyer und Reymond Akpanya

In diesem Vortrag operieren wir von rechts, also z.B. ein Gruppenelement $\varphi \in G$ einer Gruppe G die auf einer Menge M operiert, wird bezeichnet als m^φ für $m \in M$.

In diesem Vortrag operieren wir von rechts, also z.B. ein Gruppenelement $\varphi \in G$ einer Gruppe G die auf einer Menge M operiert, wird bezeichnet als m^φ für $m \in M$.

Notation

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren und $r \in \mathbb{R}$ eine reelle Zahl.

In diesem Vortrag operieren wir von rechts, also z.B. ein Gruppenelement $\varphi \in G$ einer Gruppe G die auf einer Menge M operiert, wird bezeichnet als m^φ für $m \in M$.

Notation

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren und $r \in \mathbb{R}$ eine reelle Zahl. Dann bezeichnen wir mit

(i) $\langle v, w \rangle$ das Euklidische Skalarprodukt,

In diesem Vortrag operieren wir von rechts, also z.B. ein Gruppenelement $\varphi \in G$ einer Gruppe G die auf einer Menge M operiert, wird bezeichnet als m^φ für $m \in M$.

Notation

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren und $r \in \mathbb{R}$ eine reelle Zahl. Dann bezeichnen wir mit

(i) $\langle v, w \rangle$ das Euklidische Skalarprodukt,

(ii) $||v|| := \sqrt{\langle v, v \rangle}$ die Euklidische Norm,

In diesem Vortrag operieren wir von rechts, also z.B. ein Gruppenelement $\varphi \in G$ einer Gruppe G die auf einer Menge M operiert, wird bezeichnet als m^φ für $m \in M$.

Notation

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren und $r \in \mathbb{R}$ eine reelle Zahl. Dann bezeichnen wir mit

(i) $\langle v, w \rangle$ das Euklidische Skalarprodukt,

(ii) $||v|| := \sqrt{\langle v, v \rangle}$ die Euklidische Norm,

(iii) $d(v, w) := ||v - w||$ die Euklidische Distanz,

In diesem Vortrag operieren wir von rechts, also z.B. ein Gruppenelement $\varphi \in G$ einer Gruppe G die auf einer Menge M operiert, wird bezeichnet als m^φ für $m \in M$.

Notation

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren und $r \in \mathbb{R}$ eine reelle Zahl. Dann bezeichnen wir mit

(i) $\langle v, w \rangle$ das Euklidische Skalarprodukt,

(ii) $||v|| := \sqrt{\langle v, v \rangle}$ die Euklidische Norm,

(iii) $d(v, w) := ||v - w||$ die Euklidische Distanz,

(iv) $B_r(v) := \{u \in \mathbb{R}^n \mid d(v, u) < r\}$ den offenen r-Ball und mit

In diesem Vortrag operieren wir von rechts, also z.B. ein Gruppenelement $\varphi \in G$ einer Gruppe G die auf einer Menge M operiert, wird bezeichnet als m^φ für $m \in M$.

Notation

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren und $r \in \mathbb{R}$ eine reelle Zahl. Dann bezeichnen wir mit

(i) $\langle v, w \rangle$ das Euklidische Skalarprodukt,

(ii) $||v|| := \sqrt{\langle v, v \rangle}$ die Euklidische Norm,

(iii) $d(v, w) := ||v - w||$ die Euklidische Distanz,

(iv) $B_r(v) := \{u \in \mathbb{R}^n \mid d(v, u) < r\}$ den offenen r-Ball und mit

(v) $\overline{B_r(v)} := \{u \in \mathbb{R}^n \mid d(v, u) \leq r\}$ den abgeschlossenen r-Ball.

In diesem Vortrag operieren wir von rechts, also z.B. ein Gruppenelement $\varphi \in G$ einer Gruppe G die auf einer Menge M operiert, wird bezeichnet als m^φ für $m \in M$.

Notation

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren und $r \in \mathbb{R}$ eine reelle Zahl. Dann bezeichnen wir mit

(i) $\langle v, w \rangle$ das Euklidische Skalarprodukt,

(ii) $||v|| := \sqrt{\langle v, v \rangle}$ die Euklidische Norm,

(iii) $d(v, w) := ||v - w||$ die Euklidische Distanz,

(iv) $B_r(v) := \{u \in \mathbb{R}^n \mid d(v, u) < r\}$ den offenen r-Ball und mit

(v) $\overline{B_r(v)} := \{u \in \mathbb{R}^n \mid d(v, u) \leq r\}$ den abgeschlossenen r-Ball.

Kurz: Unsere Welt ist eine Euklidische.

Definition

Sei $n \in \mathbb{N}$ und $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Dann bezeichnen wir φ also *Isometrie*, falls für alle $v, w \in R^n$ gilt, dass:

$$d(v^\varphi, w^\varphi) = d(v, w).$$

Definition

Sei $n \in \mathbb{N}$ und $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Dann bezeichnen wir φ also *Isometrie*, falls für alle $v, w \in R^n$ gilt, dass:

$$d(v^\varphi, w^\varphi) = d(v, w).$$

Die Menge aller Isometrien zu einem festen n bezeichnen wir mit $E(n)$.

Definition

Sei $n \in \mathbb{N}$ und $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Dann bezeichnen wir φ also *Isometrie*, falls für alle $v, w \in R^n$ gilt, dass:

$$d(v^\varphi, w^\varphi) = d(v, w).$$

Die Menge aller Isometrien zu einem festen n bezeichnen wir mit $E(n)$.

Proposition

Sei $n \in \mathbb{N}$ fest. Dann ist die Menge aller Isometrien $E(n)$ eine Gruppe mit der Konkatenation von Abbildungen als Gruppenoperation. Diese Gruppe bezeichnen wir als die *euklidische Gruppe*. Die Gruppe operiert auf $\mathbb{R}^n$ durch die Anwendung eines Gruppenelements als Abbildung.

Proposition

$$E(n) \cong O(n) \ltimes \mathbb{R}^n$$

Proposition

$$E(n) \cong O(n) \ltimes \mathbb{R}^n$$

Notation

Sei $\varphi \in E(n)$. Dann bezeichnen wir mit der Isomorphie von oben

$$\varphi = (\varphi_o, \varphi_t),$$

wobei $\varphi_o \in O(n)$ als *orthogonaler Anteil* bezeichnet wird und $\varphi_t \in \mathbb{R}^n$ als *translatiorischer Anteil*.

Betrachte $v \in \mathbb{R}^n$. Dann ist die Gruppenoperation von φ auf v gegeben durch

$$v^{(\varphi_o, \varphi_t)} = v^{\varphi_o} + \varphi_t.$$

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe. Dann wird der *Translationennormalteiler* von Γ definiert als

$$\mathcal{T}(\Gamma) := \{(\varphi_o, \varphi_t) \in \Gamma \mid \varphi_o = Id\}.$$

Proposition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe. Dann ist $\mathcal{T}(\Gamma)$ ein Normalteiler.

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe. Dann definieren wir die *Punktgruppe* von Γ als die Faktorgruppe

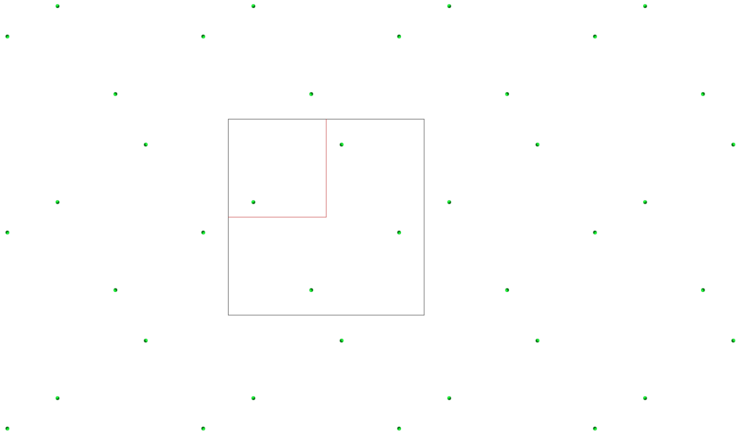
$$\mathcal{P}(\Gamma) := \Gamma / \mathcal{T}(\Gamma).$$

Proposition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe. Die Menge

$$\mathcal{L}(\Gamma) := \{\varphi_t \mid \varphi \in \mathcal{T}(\Gamma)\}$$

enthält n linear unabhängige Vektoren. Diese bilden ein Gitter der Dimension n und spannen sogenannte *Translationszellen* auf.



Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine Untergruppe und $F \subseteq \mathbb{R}^n$ eine abgeschlossene Menge. Dann heißt F ein *Fundamentalbereich* von Γ falls

(i) $\bigcup_{\gamma \in \Gamma} F^\gamma = \mathbb{R}^n$

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine Untergruppe und $F \subseteq \mathbb{R}^n$ eine abgeschlossene Menge. Dann heißt F ein *Fundamentalbereich* von Γ falls

(i) $\bigcup_{\gamma \in \Gamma} F^\gamma = \mathbb{R}^n$

(ii) es gibt ein Vertretersystem $V \subseteq \mathbb{R}^n$ von den Bahnen der Operation von Γ auf $\mathbb{R}^n$, sodass

$$F^\circ \subseteq V \subseteq F.$$

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine Untergruppe und $F \subseteq \mathbb{R}^n$ eine abgeschlossene Menge. Dann heißt F ein *Fundamentalbereich* von Γ falls

(i) $\bigcup_{\gamma \in \Gamma} F^\gamma = \mathbb{R}^n$

(ii) es gibt ein Vertretersystem $V \subseteq \mathbb{R}^n$ von den Bahnen der Operation von Γ auf $\mathbb{R}^n$, sodass

$$F^\circ \subseteq V \subseteq F.$$

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine Untergruppe. Dann heißt Γ kristallographische Gruppe falls Γ eine diskrete Untergruppe ist und ein kompakter Fundamentalbereich von Γ existiert.

In der Literatur werden kristallographische Gruppen (insbesondere der Dimension 3) auch als Raumgruppen bezeichnet.

In 1900 hat Hilbert 23 Probleme bei einem Kongress vorgestellt, die zu diesem Zeitpunkt ungelöst waren.

18. Hilbert Problem

Gibt es für festes n endlich viele kristallographische Gruppen?

In 1900 hat Hilbert 23 Probleme bei einem Kongress vorgestellt, die zu diesem Zeitpunkt ungelöst waren.

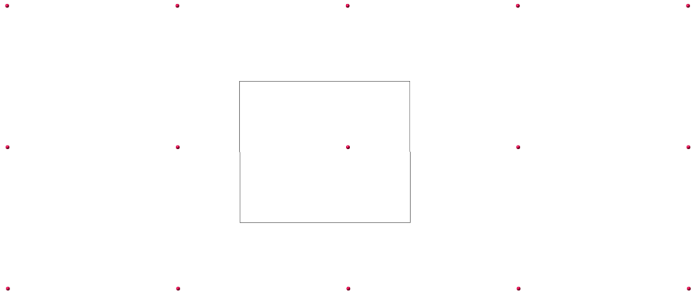
18. Hilbert Problem

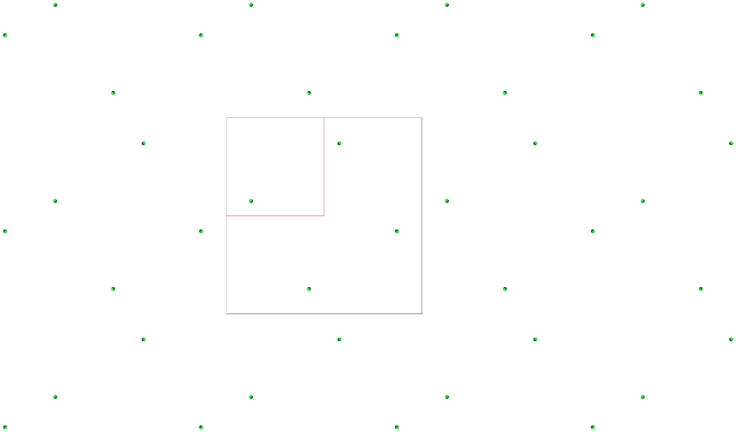
Gibt es für festes n endlich viele kristallographische Gruppen?

Bieberbachsche Sätze (1910)

Ja, für festes $n \in \mathbb{N}$ gibt es nur endlich viele kristallographische Gruppen.
Für $n = 2$ gibt es 17, für $n = 3$ gibt es 230.

Für bis niedrige Dimensionen sind alle dieser Gruppen bekannt, z.B. für $n \leq 4$ hier: [1].





Theorem

Sei Γ eine kristallographische Gruppe mit Fundamentalbereich F und Translationszelle C. Dann gilt

$$vol(F) = \frac{vol(C)}{|\mathcal{P}(\Gamma)|}$$

Problem

Gegeben eine kristallographische Gruppe $\Gamma \leq E(n)$. Was ist ein Fundamentalbereich?

Problem

Gegeben eine kristallographische Gruppe $\Gamma \leq E(n)$. Was ist ein Fundamentalbereich?

Antwort

Dirichletzellen

Definition

Seien $u, v \in \mathbb{R}^n$ Vektoren. Wir nennen

$$H^+(u,v) := \{w \in \mathbb{R}^n \mid d(u,w) \leq d(v,w)\}$$

den *Halbraum* von u und v.

Definition

Seien $u, v \in \mathbb{R}^n$ Vektoren. Wir nennen

$$H^+(u,v) \coloneqq \{w \in \mathbb{R}^n \mid d(u,w) \leq d(v,w)\}$$

den *Halbraum* von u und v.

Definition

Sei $O \subseteq \mathbb{R}^n$ eine diskrete Menge und $u \in O$ ein Punkt. Dann nennen wir

$$D(u,O) \coloneqq \{v \in \mathbb{R}^n \mid \forall w \in O \setminus \{u\} : d(u,v) \leq d(v,w)\}$$

die *Dirichletzelle* von u und O.

Definition

Seien $u, v \in \mathbb{R}^n$ Vektoren. Wir nennen

$$H^+(u, v) := \{w \in \mathbb{R}^n \mid d(u, w) \leq d(v, w)\}$$

den *Halbraum* von u und v.

Definition

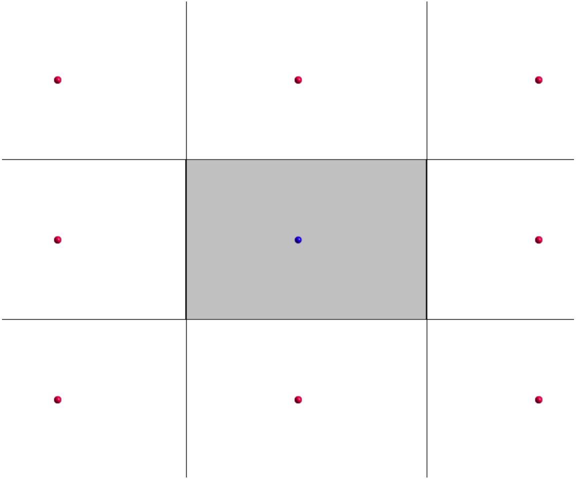
Sei $O \subseteq \mathbb{R}^n$ eine diskrete Menge und $u \in O$ ein Punkt. Dann nennen wir

$$D(u, O) := \{v \in \mathbb{R}^n \mid \forall w \in O \setminus \{u\} : d(u, v) \leq d(v, w)\}$$

die *Dirichletzelle* von u und O.

Oft nutzen wir die äquivalente Formulierung

$$D(u, O) = \bigcap_{w \in O, w \neq u} H^+(u, w).$$



Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe und $v \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor. Wir nennen v in *spezieller Lage* bzgl. Γ, falls

$$Stab_\Gamma(v) \neq \{Id\},$$

sonst nennen wir ihn in *allgemeiner Lage*.

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe und $v \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor. Wir nennen v in *spezieller Lage* bzgl. Γ, falls

$$Stab_\Gamma(v) \neq \{Id\},$$

sonst nennen wir ihn in *allgemeiner Lage*.

Theorem ([2, Thm. III.11 (ii)])

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe und $u \in \mathbb{R}^n$ in allgemeiner Lage. Dann ist $D(u, u^\Gamma)$ ein Fundamentalbereich von Γ.

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe und $v \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor. Wir nennen v in *spezieller Lage* bzgl. Γ, falls

$$Stab_\Gamma(v) \neq \{Id\},$$

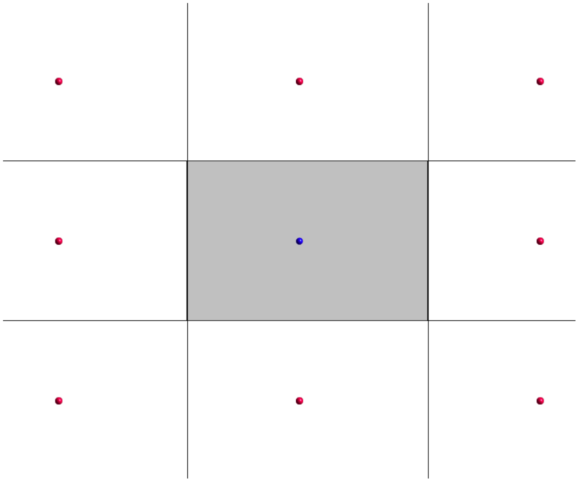
sonst nennen wir ihn in *allgemeiner Lage*.

Theorem ([2, Thm. III.11 (ii)])

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe und $u \in \mathbb{R}^n$ in allgemeiner Lage. Dann ist $D(u, u^\Gamma)$ ein Fundamentalbereich von Γ.

Erinnerung:

$$D(u, O) = \bigcap_{w \in O, w \neq u} H^+(u, w).$$



Problem

u^{Γ} ist unendlich.

Idee

Halbräume die von zwei weit entfernten Punkten aufgespannt werden, haben weniger Einfluss als Halbräume, die von nahe beieinander liegenden Punkten aufgespannt werden.

Idee

Halbräume die von zwei weit entfernten Punkten aufgespannt werden, haben weniger Einfluss als Halbräume, die von nahe beieinander liegenden Punkten aufgespannt werden.

Ansatz

Betrachte nur Isometrien, die einen Punkt nicht "zu weit weg" operieren.

Theorem

Sei $\Gamma \leq E(n)$ kristallographische Gruppe und $u \in \mathbb{R}^n$. Dann existiert ein $A \in \mathbb{N}$ sodass die Dirichletzelle $D(u, u^\Gamma)$ berechnet werden kann, als Schnitt der Halbräume $H^+(u, u^\gamma)$ für $\gamma \in \Gamma$ Wörter der Länge maximal $A + 1$.

Theorem

Sei $\Gamma \leq E(n)$ kristallographische Gruppe und $u \in \mathbb{R}^n$. Dann existiert ein $A \in \mathbb{N}$ sodass die Dirichletzelle $D(u, u^\Gamma)$ berechnet werden kann, als Schnitt der Halbräume $H^+(u, u^\gamma)$ für $\gamma \in \Gamma$ Wörter der Länge maximal $A + 1$.

Damit haben wir einen Zugang, um Fundamentalbereiche in endlichen Schritten (algorithmisch) zu bestimmen. Leider ist A im Allgemeinen nicht einfach bestimmbar.

Algorithm 3.1: Dirichlet Cell

Data: eine kristallographische Gruppe $\Gamma \leq E(n)$ und $u \in \mathbb{R}^n$, ein Punkt in allgemeiner Lage, sowie eine Menge *gens* an Erzeugern von Γ.
Result: *triangularComplex*, ein Fundamentalbereich.

```
fundamentalVolume ← Volumen eines Fundamentalbereichs;
currentWords ← gens
currentElementsInOrbit ← [u^γ | γ ∈ gens] ;
currentHalfspaces ← Halbräume H_{u,v} für alle v ∈ currentElementsInOrbit;
fundamentalDomainCandidate ← gegeben durch Schnitt von currentHalfspaces;
while vol(fundamentalDomainCandidate) < fundamentalVolume do
    currentWords ← [currentWords, [word · gen | word ∈ currentWords, gen ∈ gens]];
    for γ ∈ currentWords do
        Add(currentElementsInOrbit, u^γ);
    end
    currentHalfspaces ← Halbräume H_{u,v} für alle v ∈ currentWords;
    fundamentalDomainCandidate ← gegeben durch Schnitt von currentHalfspaces;
end
return fundamentalDomainCandidate;
```

Erweiterungen

[1] H Brown et al. *Crystallographic Groups of Four-dimensional Space*. John Wiley & Sons Inc, 1978. ISBN: 978-0471030959.

[2] Wilhelm Plesken. *Kristallographische Gruppen, Summer semester*. 1994.