Beiträge zur Algebra und Geometrie
6 (1977), 71–99

Zur Symmetriebeschreibung von OD-Kristallstrukturen[1]) durch Brandtsche und Ehresmannsche Gruppoide

KONRAD FICHTNER

1. Einleitung

Die Symmetrie einer dreidimensional-periodischen Kristall-Struktur kann durch eine Gruppe charakterisiert werden. Bei Kristallen, die aus übereinandergestapelten Schichten bestehen, kann eine einzelne Gruppe entweder nur die Symmetrie einer einzelnen Schicht oder die Symmetrien, die allen Schichten gemeinsam sind, erfassen. Es besteht aber das Bedürfnis, die Symmetrie jeder einzelnen Schicht und darüber hinaus die Symmetriebeziehungen der verschiedenen Schichten zueinander anzugeben. Das leisten Brandtsche und Ehresmannsche Gruppoide, wie sie in [4] zur Beschreibung sogenannter OD-Strukturen aus Schichten und zur Herleitung wesentlicher Eigenschaften dieser Strukturen verwendet werden.
Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, einen streng mathematischen Aufbau der Theorie der OD-Strukturen aus Schichten zu entwickeln — einerseits als Grundlage für die mathematische Formulierung von Problemen dieser Theorie und die Lösung dieser Probleme, andererseits als Modellfall für die Charakterisierung der Symmetrie von Kristallstrukturen, für die der Gruppenbegriff zu eng ist.
Es erweist sich als möglich, die grundlegenden Begriffe OD-Struktur und OD-Gruppoid in Analogie zum klassischen Fall dreidimensional-periodischer Kristall-Strukturen zu definieren und zu zeigen, daß die hier angegebene Definition den Forderungen an eine OD-Struktur in [4] gleichwertig ist (Abschnitt 7). Der klassische Fall ist in Abschnitt 6 kurz dargelegt. Die Abschnitte 8—10 behandeln Äquivalenzrelationen von OD-Gruppoiden. In den Abschnitten 2—4 werden eine Übersicht über die verwendeten Bezeichnungen, ferner Definitionen aus der Theorie der Transformationsgruppen des dreidimensionalen euklidischen Raums und der Theorie der Gruppoide angegeben. Der Begriff der geometrischen Äquivalenz (Abschnitt 5) ist einerseits geeignet, die Symmetriebeziehungen von Paaren benachbarter OD-Schichten zu charakterisieren, andererseits das wesentliche Hilfsmittel, um eine Klassifikation der OD-Gruppoide vorzunehmen. Probleme werden in Abschnitt 11 angegeben.

[1]) OD $\triangleq$ Order — Disorder; Strukturen, bei denen bestimmten Gesetzmäßigkeiten folgende Abweichungen von der dreidimensionalen Periodizität möglich sind.

2. Bezeichnungen und Definitionen

E	dreidimensionaler euklidischer Raum
B	Gruppe der Bewegungen von E
A	Gruppe der affinen Transformationen von E
T	Gruppe der Translationen von E
G	Symmetriegruppe einer Struktur
T_G	Gruppe aller Translationen aus G
f	Kristallstruktur, d. h. Funktion $f\colon E \to \{0, 1, \ldots, N\}$
x	Element von E
β	Element von B
$\alpha = (H, \mathfrak{t})$	Element von A, H homogener Anteil, $\mathfrak{t}$ translativer Anteil
$H = (a_{ik})$	Matrix
$\mathfrak{a}, \mathfrak{b}, \mathfrak{c}, \mathfrak{t}$	Vektoren
Z	Menge der ganzen rationalen Zahlen
i, j, k	Elemente von Z
$f(\beta x) \equiv f'(x)$	bedeutet: für alle $x \in E$ gilt $f(\beta x) = f'(x)$
$\boldsymbol{G}$	Gruppoid; Gruppoide werden mit Fettbuchstaben geschrieben
ob $\boldsymbol{G}$	Objektmenge von $\boldsymbol{G}$
mor $\boldsymbol{G}$	Morphismenmenge von $\boldsymbol{G}$
$[i, j]_{\boldsymbol{G}}$	Menge der Morphismen aus $\boldsymbol{G}$ von i und j
$\boldsymbol{B}$	Bewegungsgruppoid, dessen Elemente Tripel (i, j, β) sind mit $i, j \in Z$, $\beta \in B$
$\boldsymbol{A}$	Gruppoid der affinen Transformationen, dessen Elemente Tripel (i, j, α) sind mit $i, j \in Z$, $\alpha \in A$
$\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{G}}(i, i+1)$	zu den Objekten $i, i+1$ gehörendes volles Teilgruppoid von $\boldsymbol{G}$
$U(i)$	Untergruppe von B, die man für $i \in$ ob $\boldsymbol{G}$, $\boldsymbol{G} \subseteq \boldsymbol{B}$, aus $[i, i]_{\boldsymbol{G}}$ erhält, wenn man „vergißt“, daß die Morphismen an das Objekt i gebunden sind
$\boldsymbol{V}_1 \overset{\boldsymbol{G}}{\simeq} \boldsymbol{V}_2$	geometrische Äquivalenz der Gruppoide $\boldsymbol{V}_1$ und $\boldsymbol{V}_2$ in $\boldsymbol{G}$
$\emptyset$	leere Menge
$\in$	Element von
$\{x\}$	Menge, die das Element x enthält
$\wedge, \vee,$	Zeichen für Ausagen, logisches „und“ bzw. „oder“,
$\Rightarrow, \Leftrightarrow$	„folgt“, logische Gleichwertigkeit
αx, $\nu(i, j, \alpha)$	Der Wert einer Funktion für ein bestimmtes Argument wird — wie allgemein üblich — durch gewöhnliche Klammern bezeichnet, z. B. $f(x)$. Diese Klammern werden in zwei Fällen der Übersichtlichkeit halber weggelassen; bei Abbildungen $\alpha\colon E \to E$ wird anstelle von $\alpha(x)$ einfach αx geschrieben, und bei Elementen von mor $\boldsymbol{A}$ wird anstelle von $\nu\big((i, j, \alpha)\big)$ einfach $\nu(i, j, \alpha)$ geschrieben, z. B. $\nu\colon \boldsymbol{A} \to A$, $\nu(i, j, \alpha) = \alpha \in A$
$T_1/T_1 \cap T_2$	Faktorgruppe der Gruppe T_1 nach dem Durchschnitt der Untergruppen T_1 und T_2

3. Transformationsgruppen des euklidischen Raumes

Unter den Abbildungen des dreidimensionalen euklidischen Raumes auf sich interessieren uns die *affinen Abbildungen*, d. h. solche, die sich durch lineare Transformationen der Punktkoordinaten

$$x_i' = \sum_{k=1}^{3} a_{ik} x_k + t_i \qquad (i = 1, 2, 3)$$

mit det $(a_{ik}) \neq 0$ darstellen lassen (x_i' Koordinaten des Bildpunktes, x_i Koordinaten des Originalpunktes). $H = (a_{ik})$ heißt der *homogene Anteil der Transformation*, $\mathfrak{t} = (t_i)$ der *translative*.

Zwei Abbildungen $\alpha_1 : E \to E$, $\alpha_2 : E \to E$ lassen sich hintereinander ausführen. Wenn auf ein $x \in E$ zuerst α_1 angewendet wird und auf den Bildpunkt $\alpha_1 x$ dann die Abbildung α_2, so schreiben wir $\alpha_2\alpha_1 x$ für den neuen Bildpunkt. Die Abbildung $x \mapsto \alpha_2\alpha_1 x$ wird mit $\alpha_2\alpha_1$ bezeichnet. Mit dieser Hintereinanderausführung als Verknüpfung bilden die affinen Abbildungen von E eine Gruppe, die wir mit A bezeichnen.

Isometrische affine Abbildungen von E heißen *Bewegungen* von E. *Eigentliche Bewegungen* sind Bewegungen, für die det $(a_{ik}) > 0$ gilt. Die Menge B aller Bewegungen von E ist ebenfalls eine Gruppe. Der homogene Anteil einer Bewegung heißt auch *rotativer Anteil*. Affine Abbildungen mit

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

heißen *Translationen*. Eine Translation $\tau = (H, \mathfrak{t})$ ist also durch ihren Translationsvektor $\mathfrak{t}$ bestimmt; wir verwenden deshalb das Symbol $\tau_{\mathfrak{t}}$.

Drei Translationen heißen *linear abhängig* oder *komplanar*, wenn die zugehörigen Translationsvektoren in einer Ebene liegen. Entsprechend heißen zwei Translationen *kollinear*, wenn die zugehörigen Vektoren parallel sind.

4. Gruppoide

In diesem Abschnitt werden die in dieser Arbeit benötigten Grundlagen über Gruppoide zusammengestellt. Quellen sind dabei [11] und [17].

Ein Gruppoid G besteht aus

(i) **_einer Menge_ ob _G von Objekten i, j, k, ..._,**

(ii) **_einer Familie paarweise disjunkter Mengen_ $[i, j]_G$, wobei jedem Paar (i, j) von Objekten aus G eine solche (möglicherweise leere) Menge zugeordnet ist. Die Elemente von $[i, j]_G$ heißen Morphismen oder Abbildungen von i nach j.**

$\bigcup_{i,j \in \mathrm{ob}\, G} [i, j]_G = \mathrm{mor}\, G$ wird als Morphismenmenge von G bezeichnet.

(iii) **_einer Komposition von Morphismen_, d. h. einer Abbildung**

$[j, k]_G \times [i, j]_G \to [i, k]_G$

für jedes geordnete Tripel (i, j, k) von Objekten.

Für $g_2 \in [j, k]_G$, $g_1 \in [i, j]_G$ wird das Bild des Paares (g_2, g_1) mit $g_2 g_1$ (lies g_2 nach g_1) bezeichnet.
Diese Daten sind folgenden *Axiomen* unterworfen:

(1) *Assoziativität der Kompositionen:* Sind $g_3 g_2$ und $g_2 g_1$ erklärt, so gilt stets

$$(g_3 g_2)\, g_1 = g_3 (g_2 g_1).$$

Man kann daher auf die Klammern verzichten.

(2) *Identitäten* (Einselemente). Für jedes Objekt $i \in \operatorname{ob} G$ gibt es einen identischen Morphismus $1_i \in [i, i]_G$, für den

$$1_i g = g \quad \text{und} \quad g 1_i = g$$

stets gilt, wenn die linken Seiten erklärt sind.

(3) *Inverse Elemente.* Zu jedem Morphismus $g \in [i, j]_G$, $i, j \in \operatorname{ob} G$, gibt es eindeutig ein inverses Element $g^{-1} \in [j, i]_G$, so daß

$$g g^{-1} = 1_j \quad \text{und} \quad g^{-1} g = 1_i$$

ist.

Beispiele

1. Das *Bewegungsgruppoid* $\boldsymbol{B}$:

$$\operatorname{ob} \boldsymbol{B} = Z,$$
$$\operatorname{mor} \boldsymbol{B} = \{(i, j, \beta) \mid i, j \in Z \wedge \beta \in B\};$$

Komposition: $(j, k, \beta_2)\,(i, j, \beta_1) = (i, k, \beta_2 \beta_1)$.

2. Das *Gruppoid* $\boldsymbol{A}$ *der affinen Transformationen:*

$$\operatorname{ob} \boldsymbol{A} = Z,$$
$$\operatorname{mor} \boldsymbol{A} = \{(i, j, \alpha) \mid i, j \in Z \wedge \alpha \in A\};$$

Komposition: $(j, k, \alpha_2)\,(i, j, \alpha_1) = (i, k, \alpha_2 \alpha_1)$.

Ein *Teilgruppoid* $\boldsymbol{S}$ eines Gruppoids $\boldsymbol{G}$ ist ein Gruppoid, für das $\operatorname{ob} \boldsymbol{S} \subseteq \operatorname{ob} \boldsymbol{G}$ und $[i, j]_S \subseteq [i, j]_G$ für beliebige $i, j \in \operatorname{ob} \boldsymbol{S}$ gilt und ferner die Komposition je zweier Morphismen in $\boldsymbol{S}$ mit der in $\boldsymbol{G}$ übereinstimmt.
Ein Teilgruppoid $\boldsymbol{U}$ eines Gruppoids $\boldsymbol{G}$ heißt *Untergruppoid* von $\boldsymbol{G}$, wenn $\operatorname{ob} \boldsymbol{U} = \operatorname{ob} \boldsymbol{G}$ ist.
Ein Teilgruppoid $\boldsymbol{V}$ eines Gruppoids $\boldsymbol{G}$ heißt *voll*, wenn für $i, j \in \operatorname{ob} \boldsymbol{V}$ stets die Beziehung $[i, j]_V = [i, j]_G$ gilt. Falls $\boldsymbol{V}$ nur endlich viele Objekte $i_1, i_2, \ldots, i_n$ enthält, bezeichnen wir das volle Untergruppoid von $\boldsymbol{G}$ mit diesen Objekten mit $\boldsymbol{V}_G(i_1, i_2, \ldots, i_n)$.
Die zu einem Objekt $i \in \operatorname{ob} \boldsymbol{G}$ gehörende Morphismenmenge $[i, i]_G$ bildet mit der vom Gruppoid herrührenden Verknüpfung eine Gruppe. Mit $U_G(i)$ wird die Untergruppe von B bezeichnet, die dieser Gruppe in folgender Weise zugeordnet werden kann:

$$U_G(i) = \{\beta \in B \mid (i, i, \beta) \in [i, i]_G\}.$$

Brandtsche und Ehresmannsche Gruppoide. Man sagt, daß zwei Objekte i_1, i_2 eines Gruppoids $\boldsymbol{G}$ zum gleichen *Zusammenhangsbereich* von $\boldsymbol{G}$ gehören, wenn $[i_1, i_2]_G \neq \emptyset$ ist. Hat ein Gruppoid nur einen einzigen Zusammenhangsbereich, so heißt es Brandtsch, sonst heißt es Ehresmannsch. Die Maximalzahl M von Objekten $i_1, i_2, \ldots, i_M \in \text{ob}\, G$, so daß $[i_j, i_k]_G = \emptyset$ ist für alle j, k mit $1 \leqq j, k \leqq M$, $j \neq k$, heißt *Anzahl der Zusammenhangsbereiche von G.*

5. Geometrische Äquivalenz von Teilgruppoiden von A

Es sei ν: mor $A \to A$ diejenige Abbildung, die „vergißt", welche Objekte die Morphismen von A verbinden, für die also

$$(i, j, \alpha) \mapsto \alpha$$

gilt.

Definition 1. Die Teilgruppoide $V_1, V_2 \subseteq G \subseteq A$ heißen *geometrisch äquivalent in G*, in Zeichen $V_1 \overset{G}{\simeq} V_2$, genau dann, wenn es Abbildungen

$$F\colon V_1 \to V_2,$$
$$\omega\colon \text{ob}\, V_1 \to \text{mor}\, G$$

gibt, die die folgenden Bedingungen erfüllen:

(i) F ist eineindeutig und Abbildung auf (injektiv und surjektiv),

(ii) $F(1_i) = 1_{F(i)}$ für jedes $i \in \text{ob}\, V_1$,

(iii) $F(hg) = F(h)\, F(g)$, wenn $h, g \in \text{mor}\, V_1$ und hg in V_1 erklärt ist,

(iv) $\omega(i) \in [i, F(i)]_G$ für jedes $i \in \text{ob}\, V_1$,

(v) $\omega(j)\, g = F(g)\, \omega(i)$, wenn $g \in [i, j]_{V_1}$ ist,

(vi) $\nu(\omega(i)) = \nu(\omega(j))$ für $i, j \in \text{ob}\, V_1$.

Bemerkung zur Definition 1. Der hier verwendete Begriff der geometrischen Äquivalenz von Teilgruppoiden von A entspricht dem Begriff der Äquivalenz in [4]. Definition 1 ist eine Kombination von zwei kategorientheoretischen Begriffen, des Begriffs der Isomorphie von Kategorien [17, S. 7] und des Begriffs der natürlichen Transformation [11, S. 198], [17, S. 12] mit der speziellen Bedingung (vi). Mit diesen Begriffen kann Definition 1 folgendermaßen gefaßt werden: V_1 und V_2 heißen geometrisch äquivalent in G genau dann, wenn es einen Isomorphismus F: $V_1 \to V_2$ gibt und eine natürliche Transformation (I, ω, F) in der Menge $\mathfrak{N}(V_1, G)$ aller natürlichen Transformationen von V_1 in G derart, daß (vi) erfüllt ist (I: $V_1 \to G$ ist der Inklusionsfaktor).

Definition 1'. Die Teilgruppoide $V_1, V_2 \subseteq G \subseteq A$ heißen *geometrisch äquivalent in G bis auf Translationen*, wenn es Abbildungen

$$F\colon V_1 \to V_2,$$
$$\omega\colon \text{ob}\, V_1 \to \text{mor}\, G$$

derart gibt, daß die Bedingungen (i) bis (v) von Definition 1 gelten, sowie:

(vi') Für beliebige $i, j \in \text{ob}\, V_1$ stimmen die homogenen Anteile von $\nu(\omega(i))$ und $\nu(\omega(j))$ überein.

Definition 1''. Zwei Gruppoide $V_1, V_2 \subseteq G \subseteq A$ mit ob $V_1 = \{i, i+1, \ldots, i+k\}$ heißen in G *bis auf Bewegungen aus $B_i, B_{i+1}, \ldots, B_{i+k-1}$ geometrisch äquivalent*, wenn es Abbildungen

$$F\colon V_1 \to V_2,$$
$$\omega\colon \text{ob}\, V_1 \to \text{mor}\, G$$

derart gibt, daß die Bedingungen (i) bis (v) von Definition 1 gelten sowie:

(vi'') Es existieren Bewegungen $\beta_i \in B_i$, $\beta_{i+1} \in B_{i+1}, \ldots, \beta_{i+k-1} \in B_{i+k-1}$, so daß für alle j, $j = i, i+1, \ldots, i+k-1$,

$$\nu(\omega(j))\,\beta_j = \nu(\omega(j+1))$$

gilt.

6. Dreidimensional-periodische Kristallstrukturen und ihre Symmetriegruppen

Ein mathematisches Modell der Struktur eines Kristalls, der Atome oder Ionen von N chemischen Elementen enthält, ist die Funktion $f\colon E \to \{0, 1, 2, \ldots, N\}$ mit

$$f(x) = \begin{cases} n, & \text{falls } x \in E \text{ der Schwerpunkt eines Atoms des } n\text{-ten Elements} \\ & \text{ist, } 1 \leqq n \leqq N, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Symmetrieeigenschaften der Struktur werden durch die Menge ihrer Deckoperationen beschrieben, d. h. durch die Menge derjenigen Bewegungen $\beta \in B$, für die $f(\beta x) = f(x)$ für alle $x \in E$ gilt (im folgenden schreiben wir $f(\beta x) \equiv f(x)$ anstelle von „$f(\beta x) = f(x)$ für alle $x \in E$"). Es ist leicht zu sehen, daß die Deckoperationen einer Struktur mit der Hintereinanderausführung als Multiplikation eine Gruppe bilden, die Symmetriegruppe G der Struktur.

Die Idealstruktur eines Kristalls hat folgende Eigenschaft: Es existieren drei nichtkomplanare Translationen $\tau_{\mathfrak{a}}$, $\tau_{\mathfrak{b}}$, $\tau_{\mathfrak{c}}$, die Deckoperationen der Struktur sind:

$$f(\tau_{\mathfrak{a}}x) \equiv f(\tau_{\mathfrak{b}}x) \equiv f(\tau_{\mathfrak{c}}x) \equiv f(x). \tag{1}$$

Für jede andere Translation $\tau_{\mathfrak{t}}$, die ebenfalls Deckoperation der Struktur ist, ist $\mathfrak{t}$ eine ganzzahlige Linearkombination der Vektoren $\mathfrak{a}$, $\mathfrak{b}$, $\mathfrak{c}$.

Eine Gruppe $G \subset B$ mit der Eigenschaft (1) wird *kristallographische Bewegungsgruppe* oder auch *diskrete Bewegungsgruppe mit endlichem Fundamentalbereich* genannt. Eine solche Gruppe besitzt die folgenden Eigenschaften (vgl. [13, S. 32], [19, S. 95]):

(i) Um jeden Punkt $x \in E$ kann man eine Kugel $K(x)$ mit dem Radius $r(x)$ beschreiben, so daß für jedes $g \in G$ folgendes gilt: Entweder $g(x) = x$, oder $g(x)$ liegt außerhalb der Kugel $K(x)$.

(ii) Es gibt eine Kugel K im Raum E, so daß zu jedem Punkt $x \in E$ eine Bewegung $g \in G$ existiert, so daß $g(x)$ innerhalb von K liegt.

Die Symmetrie einer dreidimensional-periodischen Struktur wird meist durch die sogenannten Gitterkonstanten und die Raumgruppe angegeben. Zur Gruppe G haben diese beiden Angaben folgende Beziehung: Als *Gitterkonstanten* werden sechs Parameter bezeichnet, die Beträge von $\mathfrak{a}$, $\mathfrak{b}$, $\mathfrak{c}$ und die Winkel zwischen je zwei dieser Vektoren. Als zu G gehörende *Raumgruppe* wird die Klasse der diskreten Bewegungsgruppen

$$\{\alpha G \alpha^{-1} \mid \alpha \in A\} \tag{2}$$

bezeichnet. Es gibt 219 Raumgruppen. In der Kristallographie ist eine etwas feinere Klasseneinteilung üblich. Dazu läßt man in (2) nicht beliebige affine Transformationen zu, sondern nur solche mit positiver Determinante des homogenen Anteils von α. Man erhält 230 Raumgruppen.

Raumgruppe und Gitterkonstanten charakterisieren eine kristallographische Bewegungsgruppe G bis auf eine (eigentliche) Bewegung: Eine Gruppe G' hat genau dann die gleiche Raumgruppe und die gleichen Gitterkonstanten wie G, wenn es eine (eigentliche) Bewegung $\beta \in B$ gibt, so daß

$$G' = \beta G \beta^{-1}$$

ist. Diskrete Bewegungsgruppen, deren Translationsgruppe von zwei nichtkollinearen Translationen erzeugt wird, kann man ebenfalls bis auf eine Bewegung durch Gitterkonstanten und Raumgruppe (eine sogenannte *ebene Raumgruppe*) charakterisieren. Es gibt 80 ebene Raumgruppen, die z. B. in [4, S. 83—85] angegeben sind.

Punktgruppen. Einer Bewegung kann man ihren rotativen Anteil zuordnen. Mit dieser Zuordnung erhält man zu jeder Gruppe $G \subset B$ eine Gruppe G_0 von Matrizen, die isomorph zur Faktorgruppe von G nach T_G ist.
Als *Punktgruppe* einer kristallographischen Bewegungsgruppe G bezeichnet man die Klasse

$$\{(a_{ik})\, G_0 (a_{ik})^{-1} \mid \det(a_{ik}) \neq 0\}.$$

Es gibt 32 verschiedene Punktgruppen, die den sogenannten Kristallklassen entsprechen. Zwei Symmetriegruppen, die zur gleichen Raumgruppe gehören, haben auch die gleiche Punktgruppe.
Eine ausführliche Darstellung der mit diskreten Bewegungsgruppen zusammenhängenden Probleme einschließlich der Beweise ist in [1] enthalten. Hier wurden als Quellen außerdem [3, 12, 13, 16] verwendet.

7. Symmetriebeschreibung von OD-Strukturen

Die Idealstruktur von OD-Kristallen aus Schichten. In Analogie zu dem oben angegebenen Modell für eine dreidimensional-periodische Kristallstruktur kann man die Idealstruktur eines aus übereinandergestapelten Schichten L_j, $j = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ bestehenden OD-Kristalls durch eine Folge $(f_j)_{j \in Z}$ von Funktionen f_j: $E \to \{0, 1, \ldots, N\}$ beschreiben:

$$f_j(x) = \begin{cases} n, & \text{falls } x \text{ der Schwerpunkt eines Atoms der } n\text{-ten Atomsorte} \\ & \text{ist und dieses Atom zur } j\text{-ten Schicht gehört,} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Falls dieses Modell, bei dem jedes Atom durch einen einzigen mit einem Gewicht versehenen Punkt repräsentiert wird, sich als zu stark vereinfacht erweist, müssen die f_j komplizierter definiert werden. In jedem Fall ist es möglich, die Struktur eines OD-Kristalls durch geeignete Funktionen $f_j: E \to Z$ zu beschreiben. Diese Funktionen betrachten wir als gegeben. Uns interessiert deshalb hier auch nicht die Frage der sinnvollsten Einteilung eines OD-Kristalls in Schichten, die in praktischen Fällen natürlich außerordentlich wichtig ist.
Zur Formulierung des Begriffs OD-Struktur erweist sich eine Funktion

$$\chi: B \to \{0, +1, -1\}$$

als zweckmäßig. Für $\beta \in B$ setzen wir

$$\chi(\beta) = \begin{cases} +1 & \text{für} \quad \beta \tau_c \beta^{-1} = \tau_c, \\ -1 & \text{für} \quad \beta \tau_c \beta^{-1} = \tau_{-c}, \\ \ \ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dabei ist $\mathfrak{c} = \mathfrak{a} \times \mathfrak{b}$. Die Vektoren $\mathfrak{a}$, $\mathfrak{b}$ sind die Translationsvektoren zu den beiden Erzeugenden $\tau_\mathfrak{a}$, $\tau_\mathfrak{b}$ von $\bigcap_{j \in Z} T_j$ (siehe Definition 2, Bedingung 1 (ii)).

Leicht zu zeigen sind die Gleichungen

$$\chi(\beta^{-1}) = \chi(\beta), \tag{3}$$

$$\chi(\beta_2\beta_1) = \chi(\beta_2) \cdot \chi(\beta_1) \qquad \big(\chi(\beta_1) \neq 0\big). \tag{4}$$

Definition 2. Die *Idealstruktur eines OD-Kristalls*, kurz *OD-Struktur* genannt, ist nach [4] durch die folgenden drei Eigenschaften charakterisiert:

1. (i) Die zu jedem $j \in Z$ gehörende Gruppe T_j,

$$T_j = \{\tau \mid \tau \in T \wedge f_j(\tau x) \equiv f_j(x)\}$$

ist eine von zwei nicht-kollinearen Translationen erzeugte abelsche Gruppe.

(ii) $\bigcap_{j \in Z} T_j$ ist eine von zwei nicht-kollinearen Translationen $\tau_\mathfrak{a}$, $\tau_\mathfrak{b}$ erzeugte abelsche Gruppe.

2. Für $i, j \in Z$, $\beta \in B$ mit $f_j(\beta x) \equiv f_i(x)$ existieren $\beta', \beta'' \in B$ derart, daß

(i) für $\chi(\beta) = +1 \Rightarrow$

$$\begin{aligned}
&[f_j(\beta' x) \equiv f_i(x) \wedge f_{j+1}(\beta' x) \equiv f_{i+1}(x) \vee \\
&f_j(\beta' x) \equiv f_{i+1}(x) \wedge f_{j+1}(\beta' x) \equiv f_i(x)] \wedge \\
&[f_j(\beta'' x) \equiv f_i(x) \wedge f_{j-1}(\beta'' x) \equiv f_{i-1}(x) \vee \\
&f_j(\beta'' x) \equiv f_{i-1}(x) \wedge f_{j-1}(\beta'' x) \equiv f_i(x)],
\end{aligned}$$

(ii) für $\chi(\beta) = -1 \Rightarrow$

$$\begin{aligned}
&[f_j(\beta' x) \equiv f_i(x) \wedge f_{j+1}(\beta' x) \equiv f_{i-1}(x) \vee \\
&f_j(\beta' x) \equiv f_{i-1}(x) \wedge f_{j+1}(\beta' x) \equiv f_i(x)] \wedge \\
&[f_j(\beta'' x) \equiv f_i(x) \wedge f_{j-1}(\beta'' x) \equiv f_{i+1}(x) \vee \\
&f_j(\beta'' x) \equiv f_{i+1}(x) \wedge f_{j-1}(\beta'' x) \equiv f_i(x)].
\end{aligned}$$

3. Für $i, j \in Z$, $\beta \in B$ gilt

$$f_j(\beta x) \equiv f_i(x) \wedge f_{j+1}(\beta x) \equiv f_{i+1}(x) \Rightarrow \chi(\beta) = +1,$$
$$f_j(\beta x) \equiv f_i(x) \wedge f_{j+1}(\beta x) \equiv f_{i-1}(x) \Rightarrow \chi(\beta) = -1.$$

Bemerkungen zur Definition 2. Die erste Forderung bringt zum Ausdruck, daß jede Schicht in zwei verschiedenen Richtungen Translationen als Deckoperationen besitzt und daß es ferner Translationen in zwei verschiedenen Richtungen gibt, die Deckoperationen nicht nur für einzelne Schichten, sondern für die OD-Struktur als Ganzes sind.

Die zweite Forderung bedeutet, daß gleich aufgebaute Schichten (das heißt die zugehörigen Funktionen f_i und f_j lassen sich durch eine Bewegung ineinander überführen) zu den unmittelbar benachbarten Schichten gleiche Relativlage haben. Ausführlicher: Wenn es eine Deckoperation β gibt, die die i-te Schicht in die j-te Schicht überführt, gilt (i) für $\chi(\beta) = +1$: Es gibt Deckoperationen β' bzw. β'', die das Schichtpaar $(i, i+1)$ in das Schichtpaar $(j, j+1)$ bzw. das Schichtpaar $(i, i-1)$ in das Schichtpaar $(j, j-1)$ überführen; (ii) für $\chi(\beta) = -1$: Es gibt Deckoperationen β' bzw. β'', die das Schichtpaar $(i, i-1)$ in das Schichtpaar $(j, j+1)$ bzw. das Schichtpaar $(i, i+1)$ in das Schichtpaar $(j, j-1)$ überführen.

Die dritte Forderung ist eine Konsequenz, die sich aus der Voraussetzung ergibt, daß übereinandergestapelte Schichten vorliegen, also die $(i+1)$-te Schicht über der i-ten und die $(j+1)$-te Schicht über der j-ten liegt.

Aus Bedingung 1 ergibt sich, daß für $\beta \in B$ mit $f_j(\beta x) \equiv f_i(x)$ nur $\chi(\beta) = +1$ oder $\chi(\beta) = -1$ möglich ist, nicht aber $\chi(\beta) = 0$. Denn aus $f_j(\beta x) \equiv f_i(x)$ folgt $T_j = \beta T_i \beta^{-1}$. Da die zu $\mathfrak{a}$, $\mathfrak{b}$ gehörenden Translationen $\tau_{\mathfrak{a}}$, $\tau_{\mathfrak{b}}$ sowohl zu T_i als auch zu T_j gehören (Bedingung 1 (ii)), ist $\beta\tau_{\mathfrak{c}}\beta^{-1}$ gleich $\tau_{\mathfrak{c}}$ oder gleich $\tau_{-\mathfrak{c}}$.
Der Begriff „OD-Struktur" kann durch Modifizierung der Forderungen 1 bis 3 enger oder weiter gefaßt werden. Ferner können zusätzliche Forderungen aufgestellt werden.
Modifizierungen der Bedingung 1 (ii) sind

1. (ii)' Für $i, j \in Z$ gilt $T_i = T_j$.

1. (ii)'' Für jedes $i \in Z$ ist $T_i \cap T_{i+1}$ eine von zwei nichtkollinearen Translationen erzeugte abelsche Gruppe.

Sinnvolle zusätzliche Forderungen sind

4. M ist eine natürliche Zahl: Es gibt M Zahlen aus Z, $j_1, j_2, \ldots, j_M$, so daß für jedes $j \in Z$ genau ein m, $1 \leqq m \leqq M$, existiert mit $f_{j_m}(\beta x) \equiv f_j(x)$ für eine geeignete Bewegung β.

5. Für jedes $x \in E$ ist eine der drei folgenden Bedingungen erfüllt:
   (i) für alle $i \in Z$ ist $f_i(x) = 0$,
   (ii) es existiert genau ein $i \in Z$ mit $f_i(x) \neq 0$,
   (iii) es existiert genau ein $i \in Z$ mit $f_i(x) \neq 0$ und $f_{i+1}(x) \neq 0$ und $f_j(x) = 0$ für jedes j mit $j \neq i$ und $j \neq i + 1$.

In [5, S. 34] wird angenommen, daß die Forderungen 1(i), 1(ii), 2, 3, 4 gleichwertig sind zu den Forderungen 1(i), 1(ii)'', 2, 3, 4. Das in Abschnitt 10 angegebene Beispiel widerlegt diese Annahme.

OD-Gruppoide. Hinsichtlich der Symmetrie der einzelnen Schichten und hinsichtlich der Relativlage gleichgebauter Schichten wird eine OD-Struktur durch ein Gruppoid $\boldsymbol{G}$ beschrieben, das mit den f_j, $j \in Z$, folgendermaßen zusammenhängt:

$$\text{ob}\, \boldsymbol{G} = Z,$$
$$\text{mor}\, \boldsymbol{G} = \{(i, j, \beta) \mid i, j \in Z \wedge f_j(\beta x) \equiv f_i(x)\};$$

Komposition: $(j, k, \beta_2)\,(i, j, \beta_1) = (i, k, \beta_2\, \beta_1)$.

Alle derartigen Gruppoide $\boldsymbol{G}$ sind Untergruppoide des in Abschnitt 4 definierten Bewegungsgruppoids $\boldsymbol{B}$. Unter Berücksichtigung der Bedingungen 1 bis 3 von Definition 2 erhält man also: Die Symmetrie einer OD-Struktur wird durch ein Untergruppoid $\boldsymbol{G}$ des Bewegungsgruppoids $\boldsymbol{B}$ beschrieben, das die folgenden drei Eigenschaften hat:

1. (i) Für jedes $i \in Z$ ist T_i, $T_i = \{\tau \mid \tau \in T \wedge (i, i, \tau) \in \boldsymbol{G}\}$, eine von zwei nichtkollinearen Translationen erzeugte abelsche Gruppe.
   (ii) $\bigcap_{i \in Z} T_i$ ist eine von zwei nicht-kollinearen Translationen $\tau_{\mathfrak{a}}$, $\tau_{\mathfrak{b}}$ erzeugte abelsche Gruppe.

2. Für jedes $(i, j, \beta) \in \text{mor}\, \boldsymbol{G}$ gilt:
   (i) $\chi(\beta) = +1 \Rightarrow \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{G}}(i, i + 1) \overset{\boldsymbol{G}}{\simeq} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{G}}(j, j + 1) \wedge$
   $\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{G}}(i, i - 1) \overset{\boldsymbol{G}}{\simeq} \boldsymbol{V}_{\boldsymbol{G}}(j, j - 1)$,

(ii) $\chi(\beta) = -1 \quad V_G(i, i-1) \overset{G}{\simeq} V_G(j, j+1) \wedge$
$V_G(i, i+1) \overset{G}{\simeq} V_G(j, j-1)$.

3. $(i, j, \beta) \in G \wedge (i+1, j+1, \beta) \in G \Rightarrow \chi(\beta) = +1$,
$(i, j, \beta) \in G \wedge (i+1, j-1, \beta) \in G \Rightarrow \chi(\beta) = -1$.

$\chi\colon B \to \{0, +1, -1\}$ ist dabei die zu Beginn dieses Abschnitts definierte Funktion.

Definition 3. Untergruppoide von B mit den Eigenschaften 1 bis 3 werden *OD-Gruppoide* genannt.

Die zusätzliche Bedingung 4 lautet:

4. G besteht aus M Zusammenhangsbereichen, $M \geqq 1$ natürliche Zahl.

Die in den Definitionen 2 und 3 enthaltene mathematische Formulierung der Nachbarschaftsbedingung für OD-Schichten stimmt mit den aus physikalischen Überlegungen gewonnenen Forderungen in [4] überein. Um das zu zeigen, machen wir das folgende Gedankenexperiment: Wir nehmen an, daß zwei OD-Gruppoide G, G' bis zu einer Schicht k völlig übereinstimmen, und zeigen in Satz 1, daß allein aus den Bedingungen 1 bis 4 der Definition 3 folgt, daß die $(k+1)$-te Schicht und das Schichtpaar $(k, k+1)$ für beide OD-Gruppoide bis auf eine Bewegung übereinstimmen. Andererseits kann die Lage der $(k+1)$-ten Schicht von G und G' bei den Bedingungen 1 bis 4 der Definition 3 sich genauso unterscheiden, wie man das von den Forderungen in [4] erwartet.

Satz 1. *Es sei G ein OD-Gruppoid mit endlicher Zahl von Zusammenhangsbereichen und G' ein OD-Gruppoid, so daß für $i, j \leqq k$ gilt:*

$$(i, j, \beta) \in \operatorname{mor} G' \Leftrightarrow (i, j, \beta) \in \operatorname{mor} G.$$

Dann ist wenigstens eine der beiden folgenden Bedingungen erfüllt:

(i) *Es existiert ein $(k, k, \beta_1) \in \operatorname{mor} G$ mit $\chi(\beta) = +1$ und*

$(k+1, k+1, \beta) \in \operatorname{mor} G' \Leftrightarrow (k+1, k+1, \beta_1\beta\beta_1^{-1}) \in \operatorname{mor} G$,
$(k, k+1, \beta) \in \operatorname{mor} G' \Leftrightarrow (k, k+1, \beta_1\beta\beta_1^{-1}) \in \operatorname{mor} G$.

(ii) *Es existiert ein $(k, k+1, \beta_1) \in \operatorname{mor} G$ mit $\chi(\beta_1) = -1$ und*

$(k+1, k+1, \beta) \in \operatorname{mor} G' \Leftrightarrow (k, k, \beta_1\beta\beta_1^{-1}) \in \operatorname{mor} G$,
$(k, k+1, \beta) \in \operatorname{mor} G' \Leftrightarrow (k+1, k, \beta_1\beta\beta_1^{-1}) \in \operatorname{mor} G$.

Beweis. Aus der Endlichkeit der Anzahl der Zusammenhangsbereiche folgt nach den Beweisen von Satz 3 und Satz 4 (siehe unten), daß ein $i_0 \in Z$, $i_0 < k$, und ein $\beta \in B$ existieren, so daß $(i_0, k, \beta) \in G$ und $\chi(\beta) = +1$ ist. Nach Bedingung 2 von Definition 3 gilt

$$V_{G'}(k, k+1) \overset{G'}{\simeq} V_{G'}(i_0, i_0+1), \tag{5}$$

$$V_G(i_0, i_0+1) \overset{G}{\simeq} V_G(k, k+1). \tag{6}$$

Da $i_0 < k$ ist und da G und G' übereinstimmen, wenn die beteiligten Objekte $\leqq k$ sind, folgt

$$\left.\begin{aligned} &V_G(i_0, i_0+1) = V_{G'}(i_0, i_0+1),\\ &V_{G'}(k, k+1) \overset{B}{\simeq} V_G(k, k+1). \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

Es seien

$$F\colon \boldsymbol{V}_{G'}(k, k+1) \to \boldsymbol{V}_G(k, k+1),$$
$$\omega\colon \{k, k+1\} \to \operatorname{mor} \boldsymbol{B}$$

die nach Definition 1 zu der geometrischen Äquivalenz (7) gehörenden Abbildungen, die durch Kombination der entsprechenden Abbildungen von (5) und (6) entstanden sind.
Dann gilt $\omega(k) \in \boldsymbol{G}$, wegen der vorausgesetzten teilweisen Übereinstimmung von $\boldsymbol{G}$ und $\boldsymbol{G}'$.

(i) Es sei $\omega(k) \in [k, k]_G$, also $\omega(k) = (k, k, \beta_1)$ für eine gewisse Bewegung β_1. Nach (vi) aus Definition 1 ist $\omega(k+1) = (k+1, k+1, \beta_1)$. Folglich gilt nach (v) aus Definition 1 für jedes $(k+1, k+1, \beta) \in \operatorname{mor} \boldsymbol{G}'$

$$(k+1, k+1, \beta_1)\,(k+1, k+1, \beta) = F\big((k+1, k+1, \beta)\big)\,(k+1, k+1, \beta_1)$$
$$\Rightarrow F\big((k+1, k+1, \beta)\big) = (k+1, k+1, \beta_1\beta\beta_1^{-1}).$$

Für jedes $(k, k+1, \beta) \in \operatorname{mor} \boldsymbol{G}'$ gilt

$$(k+1, k+1, \beta_1)\,(k, k+1, \beta) = F\big((k, k+1, \beta)\big)\,(k, k, \beta_1)$$
$$\Rightarrow F\big((k, k+1, \beta)\big) = (k, k+1, \beta_1\beta\beta_1^{-1}).$$

Da β_1 das Produkt zweier Bewegungen ist, deren χ_G-Werte wegen Bedingung 3 von Definition 3 entweder gleichzeitig $+1$ oder gleichzeitig -1 sind, gilt $\chi(\beta_1) = 1$ nach (4).

(ii) Für $\omega(k) \in [k, k+1]_G$ läßt sich in ganz analoger Weise zeigen, daß die Bedingung (ii) von Satz 1 erfüllt ist.

8. Der Typ eines OD-Gruppoids

Für OD-Gruppoide sind verschiedene Klasseneinteilungen zweckmäßig, die teilweise den Klasseneinteilungen bei Symmetriegruppen entsprechen (z. B. den Begriffen Raumgruppe und Punktgruppe), teilweise neu sind und sich aus der Tatsache ergeben, daß es sich bei einem OD-Gruppoid nicht um ein einzelnes Objekt handelt, sondern um eine unendliche Menge von Objekten.
OD-Gruppoiden kann man einen „Typ" zuordnen. Ein einfache Definition dieses Begriffes, die auf den bisher verwendeten Begriffen und Bezeichnungen beruht, ist weiter unten angegeben (Definition 4'). Die zunächst angegebene Definition 4 ist komplizierter, hat aber den Vorteil, daß sie die Definition des Begriffes OD-Gruppoid-Familie vorbereitet. Für eine vorgegebene Anzahl M von Zusammenhangsbereichen hängt der Typ eines OD-Gruppoids davon ab, ob die Deckoperationen, die die Schichten ineinander überführen, Oberseite auf Oberseite oder Oberseite auf Unterseite abbilden.
Am Beispiel $M = 1$ läßt sich das am einfachsten erläutern. Falls die einzelne Schicht eine Deckoperation besitzt, die die Oberseite in die Unterseite überführt, also $(i, i, \beta) \in \operatorname{mor} \boldsymbol{G}$ mit $\chi_G(\beta) = -1$, symbolisieren wir die Schicht durch einen Doppelpfeil $\updownarrow$. Falls die Schicht keine solche Deckoperation besitzt, symbolisieren wir sie durch einen einfachen Pfeil $\uparrow$. Wie unten bewiesen wird, sind nur drei verschiedene Typen möglich (Abb. 1a—c). Alle anderen Typen, wie z. B. die in Abb. 1d, e charakterisierten, widersprechen der Bedingung 2 für OD-Gruppoide (Definition 2).

Die Funktion η. Für die Definition des Begriffs „Typ" führen wir eine Funktion $\eta\colon Z \to \{0, +1, -1\}$ ein. Es sei $j_1, j_2, \ldots, j_M$ ein Repräsentantensystem für die Zusammenhangsbereiche von G. $\eta(j_m)$, $1 \leqq m \leqq M$, wird folgendermaßen festgelegt:

$$\eta(j_m) = \begin{cases} 0, & \text{falls ein } (j_m, j_m, \beta) \in G \text{ mit } \chi(\beta) = -1 \text{ existiert,} \\ 1 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für jedes $j \in Z$ mit $(j, j_m, \beta) \in G$, $1 \leqq m \leqq M$, soll

$$\eta(j) = \eta(j_m) \cdot \chi(\beta) \tag{8}$$

gelten.

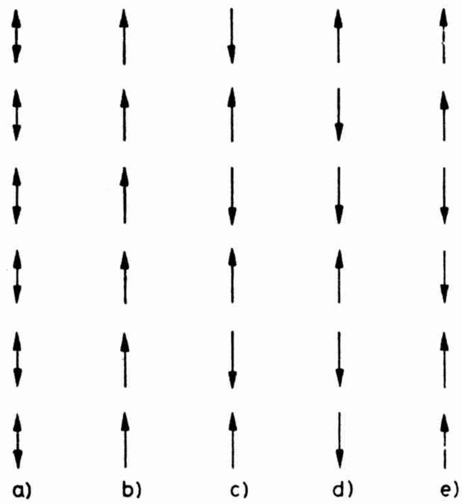

Abb 1. Schematische Darstellung von Strukturen aus einer Art von Schichten
a) OD-Struktur vom Typ I,
b) OD-Struktur vom Typ II,
c) OD-Struktur vom Typ III,
d), e) keine OD-Strukturen

Lemma 1. *Zu einem vorgegebenen Repräsentantensystem für die Zusammenhangsbereiche ist* η *eindeutig definiert.*

Beweis. Für jedes $j \in Z$ existiert genau ein m, $1 \leqq m \leqq M$, mit

$$\{\beta \mid \beta \in B \wedge (j, j_m, \beta) \in G\} \neq \emptyset.$$

Gilt $\eta(j_m) = 0$, so ist nach (8) auch $\eta(j) = 0$. Ist $\eta(j_m) = 1$, $(j, j_m, \beta) \in G$, (j, j_m, β') $\in G$, so folgt $(j_m, j_m, \beta'\beta^{-1}) \in G$ und wegen $\eta(j_m) = +1$ auch $\chi(\beta'\beta^{-1}) = 1$. Da $\chi(\beta') \neq 0$ und $\chi(\beta^{-1}) \neq 0$ ist (siehe Bemerkungen zu Definition 2), folgt aus (3) und (4) $\chi(\beta') = \chi(\beta)$.

Folgerung. Wenn $j_1, \ldots, j_M$ und $j'_1, \ldots, j'_M$ zwei Repräsentantensysteme für die Zusammenhangsbereiche des OD-Gruppoids sind und $\eta^{(1)}, \eta^{(2)}$ die zugehörigen Funktionen $Z \to \{0, +1, -1\}$ bezeichnen, besteht folgender Zusammenhang: Für alle Objekte j desselben Zusammenhangsbereichs von G gilt

entweder $\eta^{(1)}(j) = \eta^{(2)}(j)$
oder $\eta^{(1)}(j) = -\eta^{(2)}(j) \neq 0$.

Definition 4. Die OD-Gruppoide G_1 und G_2 heißen *vom gleichen Typ*, in Zeichen $G_1 \underset{T}{\sim} G_2$, genau dann, wenn es eine Abbildung $\varphi\colon Z \to Z$ gibt, die folgende Eigenschaften hat:

(i) φ ist bezüglich der in Z definierten Ordnung $\leqq$ ein Isomorphismus oder ein Antiisomorphismus.

(ii) Für jedes Paar $(i, j) \in Z \times Z$ gilt

$$[i, j]_{G_1} = \emptyset \Leftrightarrow [\varphi(i), \varphi(j)]_{G_2} = \emptyset .$$

(iii) Für jedes $i \in Z$ gilt

$$\eta_{G_1}(i) = 0 \Leftrightarrow \eta_{G_2}(\varphi(i)) = 0 .$$

(iv) Für jedes Paar $(i, j) \in Z \times Z$ gilt mit $[i, j]_{G_1} \neq \emptyset$ auch

$$\eta_{G_1}(i) = \eta_{G_1}(j) \Leftrightarrow \eta_{G_2}(\varphi(i)) = \eta_{G_2}(\varphi(j)) .$$

Bemerkung. Aus Bedingung (ii) folgt, daß zwei OD-Gruppoide vom gleichen Typ auch die gleiche Anzahl von Zusammenhangsbereichen haben. Ein Brandtsches und ein Ehresmannsches Gruppoid können daher nicht vom gleichen Typ sein.
Bedingung (ii) ist für Brandtsche OD-Gruppoide G_1 und G_2 offensichtlich erfüllt.

Lemma 2. *Die Relation $\underset{T}{\sim}$ ist eine Äquivalenzrelation.*

Beweis. Es ist zu zeigen, daß $\underset{T}{\sim}$ reflexiv, symmetrisch und transitiv ist.

$G \underset{T}{\sim} G$. Als $\varphi\colon Z \to Z$ nimmt man die identische Abbildung. Dann sind (i) und (ii) offensichtlich erfüllt. Wie man aus der Folgerung von Lemma 1 erkennt, sind (iii) und (iv) auch für die Wahl unterschiedlicher Repräsentantensysteme bei der Definition von η erfüllt.

$G_1 \underset{T}{\sim} G_2 \Rightarrow G_2 \underset{T}{\sim} G_1$. Die Bedingungen (i) bis (iii) aus Definition 4 sind bezüglich G_1 und G_2 offensichtlich symmetrisch. Die Bedingung (iv) ist es bestenfalls wegen der Bedingung (ii).

$G_1 \underset{T}{\sim} G_2 \wedge G_2 \underset{T}{\sim} G_3 \Rightarrow G_1 \underset{T}{\sim} G_3$. Wenn $\varphi_1\colon Z \to Z$ und $\varphi_2\colon Z \to Z$ die zu $G_1 \underset{T}{\sim} G_2$ und $G_2 \underset{T}{\sim} G_3$ gehörenden Abbildungen sind, für die jeweils die Bedingungen (i) bis (iv) gelten, dann ist $\varphi_2\varphi_1\colon Z \to Z$ eine Abbildung, die zeigt, daß $G_1 \underset{T}{\sim} G_3$ ist.

Die Frage, welche verschiedenen Äquivalenzklassen es bezüglich $\underset{T}{\sim}$ in Abhängigkeit von der Anzahl der Zussammenhangsbereiche von G gibt, wird in den folgenden drei Sätzen beantwortet.

Satz 2. *OD-Gruppoide mit einer unendlichen Anzahl von Zusammenhangsbereichen liegen bezüglich $\underset{T}{\sim}$ in drei Äquivalenzklassen. Jeder Zusammenhangsbereich enthält höchstens zwei Objekte. Die drei Typen können in folgender Weise charakterisiert werden:*

I. *Es existiert ein $i \in Z$, so daß $\eta(i) = 0$ ist.*

II. *Für alle $i \in Z$ gilt $\eta(i) \neq 0$.*
Für alle $i, j \in Z$, $i \neq j$, gilt $[i, j]_G = \emptyset$.

III. *Für alle $i \in Z$ gilt $\eta(i) \neq 0$.*
Es existieren $i, j \in Z$, $i \neq j$, für die $[i, j]_G \neq \emptyset$ ist.

Satz 3. *Die Menge der OD-Gruppoide mit M Zusammenhangsbereichen, $M > 1$, zerfällt bezüglich $\underset{T}{\sim}$ in vier Äquivalenzklassen. Diese vier Typen können wie folgt charak-*

terisiert werden:

I. *Es existieren $j \in Z$ mit $\eta(j) = 0$.*
Für jedes $j \in Z$ mit $\eta(j) = 0$ und für alle n, $0 < n < P$, gilt $\eta(j + n) \neq 0$. P ist dabei die kleinste natürliche Zahl, so daß für eine gewisse Zahl $i_0 \in Z$

$$[i_0, i_0 + P]_G \neq \emptyset \text{ und } \eta(i_0) = \eta(i_0 + P)$$

gilt.

II. *Für alle $j \in Z$ gilt $\eta(j) \neq 0$. Es existiert ein $i \in Z$, so daß für beliebige $j_1, j_2 \in Z$ mit $j_1 \neq j_2$, $i \leqq j_1, j_2 < i + P$ die Beziehung $[j_1, j_2]_G = \emptyset$ gilt.*

III. *Für alle $j \in Z$ gilt $\eta(j) \neq 0$.*
Für alle $i \in Z$ existiert mindestens ein Paar $(j_1, j_2) \in Z \times Z$ mit $j_1 \neq j_2$ und $i \leqq j_1, j_2 < i + P$, so daß $[j_1, j_2]_G \neq \emptyset$ ist.

IV. *Es gibt $j_1, j_2 \in Z$, so daß $\eta(j_1) = \eta(j_2) = 0$ und $1 \leqq j_2 - j_1 < P$ ist.*

Satz 4. *OD-Gruppoide mit einem einzigen Zusammenhangsbereich bilden bezüglich $\underset{T}{\sim}$ drei Äquivalenzklassen, die wie die Typen* I, II, III *von Satz 3 charakterisiert werden können.*

Beweis der Sätze 2 bis 4. Aus den Bedingungen 2 und 3 der Definition 3 lassen sich die folgenden Eigenschaften von OD-Gruppoiden mit Hilfe vollständiger Induktion herleiten. Es sei G ein OD-Gruppoid und $i, j, j_1, n \in Z$. Wir schreiben $[i, j]$ anstelle von $[i, j]_G$. Dann gilt

$$[i, j] \neq \emptyset \wedge \eta(i) = \eta(j) \Rightarrow [i + n, j + n] \neq \emptyset \wedge \eta(i + n) = \eta(j + n), \tag{9}$$

$$[i, j] \neq \emptyset \wedge \eta(i) = -\eta(j) \Rightarrow [i + n, j - n] \neq \emptyset \wedge \eta(i + n) = -\eta(j - n), \tag{10}$$

$$[i, j] \neq \emptyset \wedge \eta(i) = \eta(j) \Rightarrow [j_1, j_1 + n(j - i)] \neq \emptyset \wedge \eta(j_1) = \eta\big(j_1 + n(j - i)\big), \tag{11}$$

$$\eta(i) = 0 \Rightarrow [i + n, i - n] \neq \emptyset \wedge \eta(i + n) = -\eta(i - n), \tag{12}$$

$$\eta(i) = \eta(j) = 0 \Rightarrow [j_1, j_1 + 2n(j - i)] \neq \emptyset, \tag{13}$$

$$i \neq j \wedge [i, j] \neq \emptyset \wedge \eta(i) = \eta(j) \Rightarrow G \text{ besteht aus höchstens } j - i \text{ Zusammenhangsbereichen,} \tag{14}$$

$$i \neq j \wedge \eta(i) = \eta(j) = 0 \Rightarrow G \text{ besteht aus höchstens } j - i + 1 \text{ Zusammenhangsbereichen.} \tag{15}$$

Wie die Eigenschaften (9) bis (13) bewiesen werden können, soll am Beispiel (10) gezeigt werden. Für (9) und (11) bis (13) wird der Beweis ausgelassen. (14) folgt unmittelbar aus (11); (15) folgt aus (12) und (13).

Beweis von (10). Für $n = 0$ ist die rechte Seite von (10) identisch mit der linken. (10) ist in diesem Fall also trivialerweise richtig. Wir nehmen an, daß (10) für $n = m$ richtig ist. Es gilt also $[i + m, j - m] \neq \emptyset$ und $\eta(i + m) = -\eta(j - m)$. Nach Definition von η gibt es ein $\beta \in B$, so daß $(i + m, j - m, \beta) \in G$ und $\chi(\beta) = -1$ ist. Wegen Bedingung 2 (ii) von Definition 3 gilt

$$V_G(i + m, i + m + 1) \overset{G}{\simeq} V_G(j - m, j - m - 1).$$

Nach Definition der geometrischen Äquivalenz existiert ein $\beta_1 \in B$, so daß entweder

$$(i + m, j - m, \beta_1) \in G \quad \text{und} \quad (i + m + 1, j - m - 1, \beta_1) \in G$$

oder

$$(i + m, j - m - 1, \beta_1) \in G \quad \text{und} \quad (i + m + 1, j - m, \beta_1) \in G$$

ist. Im ersten Fall gilt also $[i + m + 1, j - m - 1] \neq \emptyset$, und nach Definition von η ist $\eta(i + m + 1) = \eta(j - m - 1) \cdot \chi(\beta_1)$. Wegen Bedingung 3 aus Definition 3 ist $\chi(\beta_1) = -1$ und folglich $\eta(i + m + 1) = -\eta(j - m - 1)$. Im zweiten Fall gilt $[i + m + 1, j - m] \neq \emptyset$, $[j - m, i + m] \neq \emptyset$, $[i + m, j - m - 1] \neq \emptyset$ und damit $[i + m + 1, j - m - 1] \neq \emptyset$.
Aus der Definition von η ergibt sich

$$\eta(j - m - 1) = \eta(i + m) \cdot \chi(\beta_1),$$

$$\eta(i + m + 1) = \eta(j - m) \cdot \chi(\beta_1).$$

Zusammen mit der Induktionsannahme $\eta(i + m) = -\eta(j - m)$ erhält man aus diesen Gleichungen wieder $\eta(i + m + 1) = -\eta(j - m - 1)$.

Beweis von Satz 2. Die Forderung, daß die Anzahl der Zusammenhangsbereiche unendlich ist, hat zur Folge, daß es nach (15)

höchstens ein $i \in Z$ mit $\eta(i) = 0$ gibt (16)

und daß nach (14)

jeder Zusammenhangsbereich höchstens zwei Objekte enthält und falls er zwei Objekte enthält, diese unterschiedliche η-Werte haben. (17)

Wegen (16) und (17) ist die Bedingung (iv) von Definition 4 für OD-Gruppoide mit einer unendlichen Anzahl von Zusammenhangsbereichen trivialerweise erfüllt.
Unmittelbar aus Definition 4 folgt, daß zwei OD-Gruppoide, die zwei verschiedene der Bedingungen I, II, III von Satz 2 erfüllen, bezüglich $\underset{T}{\sim}$ nicht äquivalent sein können.
Erfüllen andererseits G_1 und G_2 beide die Bedingung I und ist $\eta_{G_1}(i_1) = 0$, $\eta_{G_2}(i_2) = 0$, so definieren wir $\varphi\colon Z \to Z$ durch $\varphi(j) = j + i_2 - i_1$. φ ist ein Ordnungsisomorphismus. Wegen (12) und (17) ist (ii) von Definition 4 erfüllt. Wegen (16) gilt (iii).
Wenn G_1 und G_2 beide die Bedingung II erfüllen, gelten (i) bis (iii) offensichtlich für die Zuordnung $\varphi(j) = j$, $j \in Z$.
Für jedes G, das die Bedingung III erfüllt, gibt es $i, j \in Z$ mit $[i, j] \neq \emptyset$ und wegen (17) $\eta(i) = -\eta(j)$. $i-j$ ist ungerade, denn sonst wäre nach (10) $\eta\left(\frac{i+j}{2}\right) = 0$ für $n = \frac{j-i}{2}$ im Widerspruch zu III. Für $k = i + \frac{j - i - 1}{2}$ gilt $\eta(k) = -\eta(k + 1)$.
Wenn die OD-Gruppoide G_1 und G_2 beide III erfüllen, definieren wir $\varphi(j) = j + k_2 - k_1$, wenn $k_1, k_2 \in Z$ so beschaffen sind, daß

$$\eta_{G_1}(k_1) = -\eta_{G_1}(k_1 + 1) \quad \text{und} \quad \eta_{G_2}(k_2) = -\eta_{G_2}(k_2 + 1)$$

st. φ ist ein Ordnungsisomorphismus. Nach (10) und (17) ist (ii) von Definition 4 erfüllt. (iii) ist trivialerweise erfüllt. Satz 2 ist bewiesen, wenn wir uns noch davon überzeugen, daß keine dieser drei Äquivalenzklassen leer ist. Die drei Typen von OD-Gruppoiden mit unendlicher Anzahl von Zusammenhangsbereichen kann man durch Tabelle 1 charakterisieren. Die Funktion ϱ: ob $G \to Z$ kennzeichnet dabei die Zugehörigkeit zu Zusammenhangsbereichen (zwei Objekte haben den gleichen ϱ-Wert, wenn sie zum gleichen Zusammenhangsbereich gehören).

Tabelle 1. Die drei Typen von OD-Gruppoiden mit einer unendlichen Anzahl von Zusammenhangsbereichen (vgl. Beweis von Satz 2)

Typ I

Objekt	...	$i_1 - n$	...	$i_1 - 2$	$i_1 - 1$	i_1	$i_1 + 1$	$i_1 + 2$	...	$i_1 + n$	...
ϱ (Objekt)	...	$n + 1$	...	3	2	1	2	3	...	$n + 1$	...
η (Objekt)	...	-1	...	-1	-1	0	1	1	...	1	...

Typ II

Objekt	...	$-n$	...	-2	-1	0	1	2	...	n	...
ϱ (Objekt)	...	$-n$	...	-2	-1	0	1	2	...	n	...
η (Objekt)	...	1	...	1	1	1	1	1	...	1	...

Typ III

Objekt	...	$k - n$	...	$k - 1$	k	$k + 1$	$k + 2$	...	$k + n$	...
ϱ (Objekt)	...	$n + 1$	...	2	1	1	2	...	n	...
η (Objekt)	...	-1	...	-1	-1	1	1	...	1	...

Beweis von Satz 3. Ein OD-Gruppoid, das genau M Zusammenhangsbereiche hat, muß genau eine der Bedingungen I bis IV aus Satz 3 erfüllen. Wenn zwei OD-Gruppoide G_1 und G_2 verschiedene Bedingungen erfüllen, führt die Annahme $G_1 \underset{T}{\sim} G_2$ zu einem Widerspruch. An welchen der Eigenschaften (i) bis (iv) von Definition 4 sich dieser Widerspruch zeigt, ist aus Tabelle 2 ersichtlich. In der Diagonale dieser Tabelle ist eingetragen, wie φ definiert werden kann, wenn G_1 und G_2 dieselbe Bedingung I bis IV erfüllen. (In der Tabelle steht $\varphi(j)$, $j \in Z$.) Dabei sind $i_1, i_2 \in Z$ beliebig mit $\eta_{G_1}(i_1) = 0$, $\eta_{G_2}(i_2) = 0$, $k_1, k_2 \in Z$, mit

$$[k_1, k_1 + 1] \neq \emptyset \quad \text{und} \quad \eta_{G_1}(k_1) = -\eta_{G_1}(k_1 + 1),$$
$$[k_2, k_2 + 1] \neq \emptyset \quad \text{und} \quad \eta_{G_2}(k_2) = -\eta_{G_2}(k_2 + 1).$$

Die Existenz derartiger Zahlen i_1, i_2 folgt unmittelbar aus I bzw. IV. Den Nachweis, daß Zahlen k_1, k_2 existieren, kann man analog zur entsprechenden Aussage im Beweis von Satz 2, III erbringen.

Tabelle 2. Zum Beweis von Satz 3

	I	II	III	IV
I	$j + i_2 - i_1$	(iii)	(iii)	(iii), (ii)
II	(iii)	j	(ii), (iv)	(iii)
III	(iii)	(ii), (iv)	$j + k_2 - k_1$	(iii)
IV	(ii), (iii)	(iii)	(iii)	$j + i_2 - i_1$

Offensichtlich ist φ in jedem der Fälle I bis IV ein Ordnungsisomorphismus. Die Erfülltheit der Bedingungen (ii) bis (iv) von Definition 4 ist gezeigt, wenn wir nachweisen, daß in jedem der Fälle I bis IV die Zahl P invariant ist, d. h. gleich für alle OD-Gruppoide mit M Zusammenhangsbereichen, die der gleichen Bedingung I bis IV genügen.

Zunächst folgt nach (9) aus $[i_0, i_0 + P] \neq \emptyset$ und $\eta(i_0) = \eta(i_0 + P)$ für beliebiges $i \in Z$, $[i, i + P] \neq \emptyset$,

$$\eta(i) = \eta(i + P).$$

Es ist im

Fall I: $P = 2M - 1$ wegen (10),
Fall II: $P = M$ wegen (14),
Fall III: $P = 2M$ wegen (10),
Fall IV: $P = 2M - 2$ wegen (12).

Analog zum Beweis von Satz 2 werden die vier Typen von OD-Gruppoiden mit M Zusammenhangsbereichen in Tabelle 3 charakterisiert.

Beweis von Satz 4. Da die Bedingungen I, II und III von Satz 4 mit den entsprechenden Bedingungen von Satz 3 übereinstimmen, ist bereits gezeigt, daß höch-

Tabelle 3. Die vier Typen von OD-Gruppoiden mit M Zusammenhangsbereichen (vgl. Beweis von Satz 3)

Typ I

Objekt	...	i	$i+1$	...	$i+M-1$	$i+M$	...	$i+2M-2$	$i+2M-1$	...
ϱ (Objekt)	...	1	2	...	M	M	...	2	1	...
η (Objekt)	...	0	1	...	1	−1	...	−1	0	...

Typ II

Objekt	...	i	$i+1$	...	$i+M-1$	$i+M$	...
ϱ (Objekt)	...	1	2	...	M	1	...
η (Objekt)	...	1	1	...	1	1	...

Typ III

Objekt	...	i	$i+1$	...	$i+M-1$	$i+M$	...	$i+2M-1$	$i+2M$	...
ϱ (Objekt)	...	1	2	...	M	M	...	1	1	...
η (Objekt)	...	1	1	...	1	−1	...	−1	1	...

Typ IV

Objekt	...	i	$i+1$	...	$i+M-2$	$i+M-1$	$i+M$	...	$i+2M-2$	$i+2M-1$	...
ϱ (Objekt)	...	1	2	...	$M-1$	M	$M-1$	...	1	2	...
η (Objekt)	...	0	1	...	1	0	−1	...	0	1	...

stens vier Typen auftreten können. Aus Tabelle 3 ist ersichtlich, daß die ersten drei auch bei Beschränkung auf einen einzigen Zusammenhangsbereich existieren, nicht aber Typ IV von Satz 3.

Satz 5. *Der Begriff „Typ eines OD-Gruppoids mit M Zusammenhangsbereichen" entspricht dem Begriff „Kategorie einer OD-Struktur aus M Arten von Schichten" aus* [4, S. 24–25, S. 64–67].

Beweis. Der Beweis von Satz 5 ergibt sich aus einem Vergleich von Tabelle IX aus [4, S. 67] mit Tabelle 3 der vorliegenden Arbeit.

Aus dem Beweis der Sätze 2 bis 4 folgt, daß der Begriff „Typ eines OD-Gruppoids" auch folgendermaßen gleichwertig zu Definition 4 festgelegt werden kann.

Definition 4'. Der *Typ eines OD-Gruppoids* G mit einer endlichen Anzahl von Zusammenhangsbereichen wird festgelegt durch

(i) die Anzahl M der Zusammenhangsbereiche von G,

(ii) die Existenz oder Nichtexistenz von Zahlen $i \in Z$, für die $(i, i, \beta) \in G$ mit $\chi(\beta) = -1$ ist,

(iii) die kleinste Zahl $P > 0$, für die $(0, P, \beta) \in G$ mit $\chi(\beta) = +1$ ist.

Der Begriff „Typ eines OD-Gruppoids" wurde hier als eine Verfeinerung der Einteilung nach der Anzahl M von Zusammenhangsbereichen eingeführt. Analog zum Begriff „Kategorie von OD-Strukturen" in [4] ist es möglich, die vier Typen unabhängig von der Anzahl der Zusammenhangsbereiche zu definieren, so daß dann also auch OD-Gruppoide mit verschiedener Anzahl von Zusammenhangsbereichen denselben Typ haben können.

Es sei G ein OD-Gruppoid.

Der Typ I liegt genau dann vor, wenn ein $j_1 \in Z$ existiert, so daß $\eta_G(j_1) = 0$ und für jedes $j \in Z$ mit $\eta_G(j) = 0$ auch $[j, j_1]_G \neq \emptyset$ gilt.

Der Typ II liegt genau dann vor, wenn $\chi(\beta) = +1$ für jeden Morphismus $(i, i, \beta) \in G$ gilt.

Der Typ III liegt vor genau dann, wenn $\eta_G(j) \neq 0$ für jedes $j \in Z$ gilt und Morphismen $(i, j, \beta) \in G$ mit $\chi(\beta) = -1$ existieren.

Der Typ IV liegt genau dann vor, wenn Zahlen $j_1, j_2 \in Z$ mit $\eta_G(j_1) = \eta_G(j_2) = 0$ existieren, so daß $[j_1, j_2]_G = \emptyset$ ist.

9. OD-Gruppoid-Familien

In diesem Abschnitt soll die Klasseneinteilung nach Typen von OD-Gruppoiden verfeinert werden. Die zugehörige Äquivalenzrelation in der Menge aller OD-Gruppoide soll mit $\underset{F}{\sim}$ bzw. $\underset{F1}{\sim}$ bezeichnet werden. Dieser Begriff hat für OD-Gruppoide eine analoge Bedeutung wie der Begriff Raumgruppe für kristallographische Bewegungsgruppen (vgl. Abschnitt 6).

Definition 5. Zwei OD-Gruppoide G_1, G_2 heißen genau dann *äquivalent bezüglich* $\underset{F}{\sim}$, wenn eine Abbildung $\varphi\colon Z \to Z$ existiert, so daß außer (i) bis (iv) von Definition 4 noch die folgende Bedingung erfüllt ist:

(v) Für jedes $i \in Z$ ist das volle Teilgruppoid $V_{G_1}(i, i+1)$ in A geometrisch äquivalent bis auf Translationen zum vollen Teilgruppoid $V_{G_2}(\varphi(i), \varphi(i+1))$, wobei für die zugehörige Abbildung

$$F_i: V_{G_1}(i, i+1) \to V_{G_2}(\varphi(i), \varphi(i+1)) \tag{18}$$

noch gilt:

$$[i, i+1]_{G_1} = \emptyset \Rightarrow F_i(i) = \varphi(i). \tag{19}$$

Bemerkungen zu Definition 5. Es läßt sich zeigen, daß (iii) aus (v) folgt. Für Brandtsche OD-Gruppoide folgt (iv) ebenfalls aus (v).

In [4] ist der Begriff der OD-Gruppoid-Familie folgendermaßen eingeführt. Ausgehend von einer OD-Struktur wird zu einer Familie von OD-Strukturen übergegangen. Eine OD-Struktur gehört zu dieser Familie, wenn zu jedem ihrer Schichtpaare in der Ausgangsstruktur ein Schichtpaar existiert, aus dem es durch eine Bewegung hervorgeht.
Von der Familie von OD-Strukturen gelangt man zur OD-Gruppoid-Familie, indem man die Struktur (d. h. die speziellen Funktionen f_j) „vergißt" und vom Unterschied in Translationsanteilen von Symmetrieoperationen abstrahiert.
Für Brandtsche OD-Gruppoide vom Typ I und II stimmt Definition 5 mit dem entsprechenden Begriff aus [4] überein. Für Brandtsche OD-Gruppoide vom Typ III und für Ehresmannsche OD-Gruppoide ist der in [4] eingeführte Begriff der OD-Gruppoid-Familie feiner als der von Definition 5. Weiter unten wird deshalb in Definition 5′ der Begriff der OD-Gruppoid-Familie in Übereinstimmung mit [4] festgelegt. Zunächst werden aber einige Invarianten einer OD-Gruppoid-Familie angegeben.

Satz 6. *Es sei* $G_1 \underset{F}{\sim} G_2$, $\varphi: Z \to Z$ *die zugehörige Abbildung und* $i \in Z$. *Dann gilt*

(i) *Die OD-Gruppoide* G_1, G_2 *sind vom gleichen Typ.*

(ii) *Die zu* i *und* $\varphi(i)$ *gehörenden maximalen Untergruppen* $U_{G_1}(i)$ *und* $U_{G_2}(\varphi(i))$ *haben die gleiche ebene Raumgruppe.*

(iii) *Es sei* $\omega_i: \{i, i+1\} \to A$ *die nach den Definitionen* 5 *und* 1′ *zu jedem* $i \in Z$ *gehörende Abbildung und*

$$\nu(\omega_i(i)) = \alpha_i \in A, \qquad \alpha_i = (H_i, t_i).$$

Dann gibt es für beliebige $j, k \in Z$ *und geeignet gewählte* α_i *eine Matrix* M_{jk}, *so daß*

$$H_j = M_{jk} H_k \quad \textit{und} \quad |\det(M_{jk})| = 1 \tag{20}$$

ist.

(iv) *Es seien* T_{i-1}, T_i, T_{i+1}, $T'_{\varphi(i-1)}$, $T'_{\varphi(i)}$, $T'_{\varphi(i+1)}$ *die Untergruppen aller Translationen von* $U_{G_1}(i-1)$, $U_{G_1}(i)$, $U_{G_1}(i+1)$, $U_{G_2}(\varphi(i-1))$, $U_{G_2}(\varphi(i))$ *bzw.* $U_{G_2}(\varphi(i+1))$. *Dann gelten die folgenden Isomorphien:*

$$T_i/T_i \cap T_{i+1} \cong T'_{\varphi(i)}/T'_{\varphi(i)} \cap T'_{\varphi(i+1)}, \tag{21}$$

$$T_i/T_i \cap T_{i-1} \cong T'_{\varphi(i)}/T'_{\varphi(i)} \cap T'_{\varphi(i-1)}. \tag{22}$$

Bevor wir Satz 6 beweisen, wollen wir ihn kommentieren. Dieser Satz gestattet es, die durch die Relation $\underset{F}{\sim}$ bewirkte Klasseneinteilung einzuschätzen.

(i) sagt nichts weiter, als daß die durch $\underset{F}{\sim}$ bewirkte Klasseneinteilung eine mindestens ebenso feine Klasseneinteilung wie $\underset{T}{\sim}$ ist.

Daß die ebenen Raumgruppen einander entsprechender Objekte zweier bezüglich $\underset{F}{\sim}$ äquivalenter OD-Gruppoide gleich sind, ist eine Minimalforderung für eine Klasseneinteilung, die dem Raumgruppenbegriff dreidimensional-periodischer Kristallstrukturen entsprechen soll.

(iii) und (iv) sagen aus, daß die Klasseneinteilung bei $\underset{F}{\sim}$ ziemlich fein ist, für manche Zwecke vielleicht zu fein. Aus (iii) folgt z. B., daß für $G_1 \underset{F}{\sim} G_2$, $i, j \in Z$,

$$\frac{I_{G_1}(i)}{I_{G_2}(\varphi(i))} = \frac{I_{G_1}(j)}{I_{G_2}(\varphi(j))}$$

gilt. $I_{G_1}(i)$ bezeichnet dabei den Flächeninhalt der primitiven Elementarmasche der i-ten Schicht von G_1. Das bedeutet, daß es für $M \geqq 2$ unendlich viele OD-Gruppoid-Familien mit M Zusammenhangsbereichen gibt.

Aus (iv) kann man Aussagen über die möglichen Lagen der $(i+1)$-ten Schicht bei fixierter i-ter Schicht folgern (vgl. Satz 1). Aus (iv) folgt auch, daß es für $M = 1$ unendlich viele OD-Gruppoid-Familien gibt.

Beweis von Satz 6. (i) folgt unmittelbar aus den Definitionen 4 und 5.

(ii) ist gezeigt, wenn wir nachweisen, daß für jedes $i \in Z$ eine affine Abbildung γ_i existiert, für die

$$U_{G_1}(i) = \gamma_i U_{G_2}(\varphi(i))\, \gamma_i^{-1}$$

ist. Nach Definition 1′ heißt geometrische Äquivalenz von $V_{G_1}(i, i+1)$ und $V_{G_2}(\varphi(i), \varphi(i+1))$ insbesondere, daß

$$U_{G_1}(i+1) = \bar{\alpha}_i^{-1} U_{G_2}(\varphi(i+1))\, \bar{\alpha}_i \tag{23}$$

oder

$$U_{G_1}(i+1) = \bar{\alpha}_i^{-1} U_{G_2}(\varphi(i))\, \bar{\alpha}_i \tag{24}$$

ist. Dabei ist $\bar{\alpha}_i = \nu(\omega_i(i+1))$.

Falls $[\varphi(i), \varphi(i+1)]_{G_2} = \emptyset$ ist, gilt nach (18) und (19) sowie Definition 4 (ii) Gleichung (23). Ist $[\varphi(i), \varphi(i+1)]_{G_2} \neq \emptyset$, $(\varphi(i), \varphi(i+1), \bar{\beta}) \in [\varphi(i), \varphi(i+1)]_{G_2}$, so folgt

$$U_{G_2}(\varphi(i)) = \bar{\beta}^{-1} U_{G_2}(\varphi(i+1))\, \bar{\beta}\,.$$

Die Gültigkeit von (24) hat damit die Gültigkeit von

$$U_{G_1}(i+1) = \bar{\alpha}_i^{-1} \bar{\beta}^{-1} U_{G_2}(\varphi(i+1))\, \bar{\beta}\bar{\alpha}_i \tag{25}$$

zur Folge. Da für jedes $i \in Z$ wenigstens eine der Gleichungen (23), (25) erfüllt ist, ist (ii) bewiesen.

Entsprechend zu (23) und (25) überlegt man, daß

$$U_{G_1}(i+1) = \alpha_{i+1}^{-1} U_{G_2}(\varphi(i+1))\, \alpha_{i+1} \tag{26}$$

ist oder ein $\beta \in B$ existiert, so daß

$$U_{G_1}(i+1) = \alpha_{i+1}^{-1} \beta^{-1} U_{G_2}(\varphi(i+1))\, \beta\alpha_{i+1} \tag{27}$$

ist. Wenn wir anstelle von $U_{G_2}(\varphi(i+1))$ kurz U schreiben, ergibt sich aus (23), (25), (26), (27), daß immer eine der folgenden vier Gleichungen erfüllt ist:

$$\bar{\alpha}_i^{-1} U \bar{\alpha}_i = \alpha_{i+1}^{-1} U \alpha_{i+1}\,, \tag{28}$$

$$\bar{\alpha}_i^{-1} \bar{\beta}^{-1}\, U \bar{\beta} \bar{\alpha}_i = \alpha_{i+1}^{-1} U \alpha_{i+1}\,, \tag{29}$$

$$\bar{\alpha}_i^{-1} U \bar{\alpha}_i = \alpha_{i+1}^{-1} \beta^{-1} U \beta \alpha_{i+1}\,, \tag{30}$$

$$\bar{\alpha}_i^{-1} \bar{\beta}^{-1} U \bar{\beta} \bar{\alpha}_i = \alpha_{i+1}^{-1} \beta^{-1} U \beta \alpha_{i+1}\,. \tag{31}$$

Aus (28) folgt

$$(\alpha_{i+1}\bar{\alpha}_i^{-1})\, U(\alpha_{i+1}\bar{\alpha}_i^{-1})^{-1} = U\,. \tag{32}$$

Da bei der Transformation mit $(\alpha_{i+1}\bar{\alpha}_i^{-1})$ die Gruppe von Translationen $T'_{\varphi(i+1)} \subset U = U_{G_2}(\varphi(i+1))$ auf sich abgebildet wird, muß die affine Abbildung $(\alpha_{i+1}\bar{\alpha}_i^{-1})$ den Flächeninhalt der Elementarmasche von U unverändert lassen. Er ändert sich folglich bei α_{i+1} um denselben Faktor wie bei $\bar{\alpha}_i$. Da die $U_{G_1}(i)$ ebene Symmetriegruppen sind, kann für die H_i gefordert werden, daß die Längen von Vektoren parallel zu $\mathfrak{a} \times \mathfrak{b}$ unverändert bleiben. Für die Matrix $M_i = H_{i+1}\, H_i^{-1}$ folgt, daß

$$H_{i+1} = M_i H_i \quad \text{und} \quad |\det (M_i)| = 1 \tag{33}$$

ist. Analog läßt sich (33) auch aus (29) bis (31) ableiten. Durch sukzessives Einsetzen folgert man aus (33) die Gleichung (20). Damit ist (iii) bewiesen.

Von (iv) zeigen wir nur (21); die Gleichung (22) beweist man in gleicher Weise. Angenommen, es sei $F_i(i) = \varphi(i)$. Dann folgt analog zur Herleitung von (23)

$$\alpha_i T_i \alpha_i^{-1} = T'_{\varphi(i)}\,, \tag{34}$$

$$\bar{\alpha}_i T_{i+1} \bar{\alpha}_i^{-1} = T'_{\varphi(i+1)}\,, \tag{35}$$

wobei sich α_i und $\bar{\alpha}_i$ nach Voraussetzung (Definition 1') höchstens hinsichtlich des translativen Anteils unterscheiden. Nach [1, S. 101] hängt aber bei den durch α_i und $\bar{\alpha}_i$ vermittelten Isomorphismen (34), (35) das Resultat nur vom homogenen Teil der affinen Abbildung ab. Deshalb gilt

$$\alpha_i(T_i \cap T_{i+1})\, \alpha_i^{-1} = T'_{\varphi(i)} \cap T'_{\varphi(i+1)}\,. \tag{36}$$

Aus (34) und (36) folgt als Spezialfall des zweiten Isomorphiesatzes [16, S. 847]

$$T_i/T_i \cap T_{i+1} \cong T'_{\varphi(i)}/T'_{\varphi(i)} \cap T'_{\varphi(i+1)}\,, \tag{37}$$

also gerade die Gleichung (21).

Es sei jetzt $F_i(i) = \varphi(i+1)$. Dann ist nach (19) $[i, i+1] \neq \emptyset$, und analog zu (37) zeigt man

$$T_i/T_i \cap T_{i+1} \cong T_{\varphi(i)}/T'_{\varphi(i)} \cap T'_{\varphi(i+1)}\,. \tag{38}$$

Zu jeweils zwei erzeugenden Translationen von T_i, T_{i+1} und $T_i \cap T_{i+1}$ mögen die Vektoren $\mathfrak{a}_i, \mathfrak{b}_i$; $\mathfrak{a}_{i+1}, \mathfrak{b}_{i+1}$ und $\mathfrak{a}_{i,i+1}, \mathfrak{b}_{i,i+1}$ gehören, die Parallelogramme der Flächen I_i, I_{i+1} und $I_{i,i+1}$ aufspannen. Man überlegt sich unschwer, daß

$$\text{ord}\,(T_{i+1}/T_i \cap T_{i+1}) = \frac{I_{i,i+1}}{I_{i+1}} \tag{39}$$

und entsprechend

$$\text{ord}\,(T_{i+1}/T_i \cap T_{i+1}) = \frac{I_{i,i+1}}{I_i} \tag{40}$$

ist. Aus $[i, i+1]_{G_1} \neq \emptyset$ folgt $I_i = I_{i+1}$ und damit

$$\text{ord}\,(T_i/T_i \cap T_{i+1}) = \text{ord}\,(T_{i+1}/T_i \cap T_{i+1})\,. \tag{41}$$

Aus (41) werden wir folgern, daß $T_i/T_i \cap T_{i+1}$ und $T_{i+1}/T_i \cap T_{i+1}$ zyklische Gruppen sind. Eine zyklische Gruppe ist aber durch ihre Ordnung bis auf Isomorphie bestimmt. Aus (38) und (41) folgt damit auch in diesem Fall (21).

Beweis, daß $T_i/T_i \cap T_{i+1}$ und $T_{i+1}/T_i \cap T_{i+1}$ zyklische Gruppen sind. Zunächst wollen wir unsere Bezeichnungsweise vereinfachen. Statt T_i und T_{i+1} schreiben wir T_1 bzw. T_2. T_Q sei eine der Gruppen $T_i/T_i \cap T_{i+1}$ und $T_{i+1}/T_i \cap T_{i+1}$. Für $\mathfrak{a}_{i,i+1}$ und $\mathfrak{b}_{i,i+1}$ schreiben wir einfach $\mathfrak{a}, \mathfrak{b}$. Es sei $f = \text{ord}\, T_Q$.

(i) Es sei q eine Primzahl, die f teilt. Dann gibt es in T_Q ein Element der Ordnung q, und es gibt Zahlen k_1, l_1 mit $0 \leqq k_1, l_1 \leqq q$, so daß der Vektor

$$\frac{1}{q}(k_1\mathfrak{a} + l_1\mathfrak{b})$$

dieses Element repräsentiert.

(ii) Es sei T'_Q die Quotientengruppe von T_1 oder T_2 nach einer Untergruppe, die von den zu $\mathfrak{a}' = \frac{\mathfrak{a}}{f_1}$ und $\mathfrak{b}' = \frac{\mathfrak{b}}{f_2}$ gehörenden Translationen erzeugt wird. Es sei $f_3 = \operatorname{ord}(T'_Q)$, und es gelte: Wenn ein Vektor ein Element von T'_Q repräsentiert und parallel zu $\mathfrak{a}$ oder $\mathfrak{b}$ ist, dann repräsentiert er das Nullelement von T'_Q.
Dann folgt, daß T'_Q zyklisch ist und das erzeugende Element von T'_Q durch einen Vektor

$$\frac{1}{f_3}\mathfrak{a}' + \frac{l}{f_3}\mathfrak{b}', \qquad 0 < l < f_3,$$

repräsentiert wird, wobei l und f_3 teilerfremd sind. Das sieht man, wenn man ein Element von T'_Q betrachtet, das durch einen Vektor repräsentiert wird mit möglichst kleiner von Null verschiedener Komponente in $\mathfrak{a}$-Richtung. Dann ist diese Komponente $\frac{1}{f_3}\mathfrak{a}'$, denn sonst gäbe es mindestens zwei Vektoren, die verschiedene Elemente von T'_Q repräsentieren, aber die gleiche Komponente in $\mathfrak{a}$-Richtung haben. Das hätte zur Folge, daß es ein von Null verschiedenes Element in T'_Q gäbe, das durch einen Vektor parallel zu $\mathfrak{b}$ repräsentiert wird — im Widerspruch zu unserer Annahme. Falls f_3 und l nicht teilerfremd wären, gäbe es ein vom Nullelement verschiedenes Element von T'_Q, das durch einen Vektor parallel zu $\mathfrak{a}$ repräsentiert wird.

(iii) Es sei T_Q nicht zyklisch und $f = f_1 \cdot f_2 \cdot f_3$, wobei $\frac{1}{f_1}\mathfrak{a}$ und $\frac{1}{f_2}\mathfrak{b}$ Elemente von T_Q repräsentieren und f_1, f_2 maximal sind.
Wir zeigen, daß es eine Primzahl q gibt, die sowohl f_1 als auch f_2 teilt. Daraus folgt, daß für beliebige Zahlen k, l mit $0 \leqq k, l < q$, $k + l \neq 0$, der Vektor

$$\frac{k}{q}\mathfrak{a} + \frac{l}{q}\mathfrak{b}$$

ein vom Nullelement verschiedenes Element von T_Q repräsentiert. Falls $f_3 = 1$ ist, erzeugen die zu den Vektoren $\frac{1}{f_1}\mathfrak{a}$ und $\frac{1}{f_2}\mathfrak{b}$ gehörenden Elemente von T_Q die Gruppe T_Q. Damit

$$\frac{1}{f_1}\mathfrak{a} + \frac{1}{f_2}\mathfrak{b}$$

nicht die ganze Gruppe T_Q erzeugt (T_Q war als nicht zyklisch vorausgesetzt), muß es eine Primzahl q geben, die sowohl f_1 als auch f_2 teilt.
Falls $f_3 \neq 1$ ist, betrachten wir die Quotientengruppe T'_Q, die in (ii) definiert ist. Es gilt $\operatorname{ord}(T'_Q) = f_3$. Nach (ii) ist T'_Q eine zyklische Gruppe, deren erzeugendes Element durch den Vektor

$$\frac{1}{f_1 f_3}\mathfrak{a} + \frac{l}{f_2 f_3}\mathfrak{b}, \qquad 0 < l < f_3,$$

repräsentiert wird, wobei l und f_3 teilerfremd sind. Damit wird T_Q erzeugt durch Elemente mit den repräsentierenden Vektoren

$$\frac{1}{f_1}\mathfrak{a}, \quad \frac{1}{f_2}\mathfrak{b}, \quad \frac{1}{f_1 f_3}\mathfrak{a} + \frac{l}{f_2 f_3}\mathfrak{b}.$$

Wegen der Teilerfremdheit von l und f_3 gibt es eine ganze rationale Zahl m, so daß die Zahl $l + mf_3$ teilerfremd zu f_2 ist.
Das zu dem Vektor

$$\frac{1}{f_1 f_3}\mathfrak{a} + \frac{l}{f_2 f_3}\mathfrak{b} + \frac{m}{f_2}\mathfrak{b}$$

gehörende Element von T_Q hat nur dann eine kleinere Ordnung als f, wenn es eine Primzahl q gibt, die sowohl f_1 als auch f_2 teilt.

(iv) Es sei eine der Gruppen $T_1/T_1 \cap T_2$ und $T_2/T_1 \cap T_2$ nicht zyklisch, beispielsweise die erste. Dann folgt nach (iii), daß es eine Primzahl q gibt, die f teilt und so beschaffen ist, daß für beliebige Zahlen k, l, $0 \leqq k, l < q$, $k + l \neq 0$, der Vektor $\frac{k}{q}\mathfrak{a} + \frac{l}{q}\mathfrak{b}$ ein vom Nullelement verschiedenes Element von $T_1/T_1 \cap T_2$ repräsentiert.
Aus (i), angewandt auf $T_2/T_1 \cap T_2$ folgt, daß ein vom Nullelement verschiedenes Element von $T_2/T_1 \cap T_2$ repräsentiert wird durch einen Vektor $\frac{k_1}{q}\mathfrak{a} + \frac{l_1}{q}\mathfrak{b}$ für gewisse Zahlen k_1, l_1, $0 \leqq k_1, l_1 < q$.
Das heißt, es gibt Zahlen q, k_1, l_1, so daß der Vektor $\frac{k_1}{q}\mathfrak{a} + \frac{l_1}{q}\mathfrak{b}$ vom Nullelement verschiedene Elemente in $T_1/T_1 \cap T_2$ und in $T_2/T_1 \cap T_2$ repräsentiert. Das ist unmöglich. Deshalb muß $T_1/T_1 \cap T_2$ zyklisch sein.
Ebenso muß $T_2/T_1 \cap T_2$ zyklisch sein.[1])

Definition 5'. Zwei OD-Gruppoide $\boldsymbol{G}_1$, $\boldsymbol{G}_2$ heißen genau dann *äquivalent bezüglich* $\underset{F1}{\sim}$, wenn eine Zahl $i \in Z$ existiert, so daß das volle Teilgruppoid $\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{G}_1}(0, 1, \ldots, P)$ von $\boldsymbol{G}_1$ (Definition von P siehe Satz 3) in $\boldsymbol{A}$ bis auf Bewegungen aus $B_0, B_1, \ldots, B_{P-1}$ geometrisch äquivalent ist zum vollen Teilgruppoid $\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{G}_2}(i, i + 1, \ldots, i + P)$ von $\boldsymbol{G}_2$. Dabei gilt

$$\begin{aligned} B_j = T \cdot \{\beta \mid (j, j, \beta) \in \boldsymbol{G}_1 \wedge \chi(\beta) = +1 \\ \vee \beta = \bar{\beta} \cdot \bar{\beta} \wedge (j + 1, j, \bar{\beta}) \in \boldsymbol{G}_1 \wedge \chi(\bar{\beta}) = -1\}. \end{aligned}$$

10. Punktgruppe und Superpositionsgruppe eines OD-Gruppoids. OD-Gruppoide von maximalem Ordnungsgrad

Jedem OD-Gruppoid $\boldsymbol{G}$ kann man zwei Gruppen zuordnen:

Definition 6. Die *Superpositionsgruppe* G_s des OD-Gruppoids $\boldsymbol{G}$ ist diejenige Gruppe, die von der Menge aller zu Morphismen von $\boldsymbol{G}$ gehörenden Bewegungen erzeugt wird,

$$G_s = \langle\{\beta \mid (i, j, \beta) \in \boldsymbol{G}\}\rangle.$$

[1]) Anmerkung bei der Korrektur: Der Beweis zu Teil (iv) dieses Satzes läßt sich vereinfachen, wenn man einen Satz über die Untergruppen freier abelscher Gruppen (vgl. [15, S. 120]) benutzt.

Definition 7. Nimmt man von jedem Morphismus $(i, j, \beta) \in \boldsymbol{G}$ den rotativen Anteil H der Bewegung β, so erzeugt die Menge aller dieser H eine Matrizengruppe G_0,

$$G_0 = \langle \{H \mid (i, j, (H, \mathfrak{t})) \in \boldsymbol{G}\} \rangle.$$

Als *Punktgruppe* des OD-Gruppoids $\boldsymbol{G}$ bezeichnet man die Klasse aller G mit

$$G = (a_{ik})\, G_0 (a_{ik})^{-1}$$

für eine gewisse Matrix (a_{ik}) mit det $(a_{ik}) \neq 0$. Offensichtlich gilt: Wenn G_s eine kristallographische Bewegungsgruppe von E ist, dann ist die Punktgruppe von G_s gerade die Punktgruppe des OD-Gruppoids $\boldsymbol{G}$ (vgl. Abschnitt 6). Daß die Umkehrung: „Wenn G_0 zu einer der 32 kristallographischen Punktgruppen gehört, ist G_s eine kristallographische Bewegungsgruppe" nicht richtig ist, ergibt sich aus dem folgenden Satz.

Satz 7. *Falls für ein OD-Gruppoid $\boldsymbol{G}$ die Bedingung* 1(ii)′ *aus Abschnitt* 7 *gilt, d. h., wenn für beliebige $i, j \in Z$ stets $T_i = T_j = T_{\boldsymbol{G}}$ ist, dann ist die Punktgruppe von $\boldsymbol{G}$ eine der* 32 *kristallographischen Punktgruppen.*
Falls 1(ii)′ *gilt, ist die Gruppe G_s genau dann eine kristallographische Bewegungsgruppe von E, wenn*

(i) *$\boldsymbol{G}$ aus einer endlichen Anzahl von Zusammenhangsbereichen besteht,*

(ii) *für jede Translation $\tau_{\mathfrak{t}} = \beta_1\beta_2 \cdots \beta_k$ mit $(i_1, j_1, \beta_1), \ldots, (i_k, j_k, \beta_k) \in \boldsymbol{G}$, für die $\mathfrak{t}$ in der von $\mathfrak{a}$ und $\mathfrak{b}$ aufgespannten Ebene liegt, die Komponenten von $\mathfrak{t}$ in $\mathfrak{a}$- und $\mathfrak{b}$-Richtung rationale Vielfache von $\mathfrak{a}$ bzw. $\mathfrak{b}$ sind. Dabei sind $\tau_{\mathfrak{a}}$ und $\tau_{\mathfrak{b}}$ zwei die Translationsgruppe $T_{\boldsymbol{G}}$ erzeugende Translationen.*

Beweis. Wegen der Bedingung 1(ii)′ muß für jedes $\big(i, j, (H, \mathfrak{t})\big) \in \boldsymbol{G}$ die Operation H die Translationsgruppe $T_{\boldsymbol{G}}$ in sich überführen. Je nachdem, ob $T_{\boldsymbol{G}}$ die Translationsgruppe eines allgemeinen, rechtwinkligen, quadratischen oder hexagonalen Netzes ist, ist G_0 eine Untergruppe von 2/m, mmm, 4/mmm oder 6/mmm. In Frage kommen also die nichtkubischen Kristallklassen.
Für den zweiten Teil von Satz 7 müssen wir zeigen, daß die Bedingungen (i), (ii) notwendig und hinreichend dafür sind, daß die Untergruppe T_s der Translationen von G_s von drei nicht-komplanaren Translationen erzeugt wird.
(i) ist notwendig und hinreichend dafür, daß überhaupt in G_s eine Translation existiert, die aus der von $\mathfrak{a}$ und $\mathfrak{b}$ aufgespannten Ebene herausführt. Die Notwendigkeit folgt unmittelbar aus Satz 2.
Daß (i) auch hinreichend für die Existenz einer solchen Translation ist, sieht man folgendermaßen: Wegen der Endlichkeit der Anzahl der Zusammenhangsbereiche ist

$$Z_{i_0} = \{j \mid [j, i_0] \neq \emptyset\}$$

eine unendliche Menge für mindestens ein $i_0 \in Z$. Für $j \in Z_{i_0}$, $(j, i_0, \beta) \in \boldsymbol{G}$ und $\beta = (H, \mathfrak{t})$ ist $H \in G_0$ nach Definition von G_0. Oben wurde gezeigt, daß G_0 endlich ist. Deshalb existieren $j_1, j_2 \in Z_{i_0}$ mit $j_1 < j_2$, $(j_1, i_0, \beta_1) \in \boldsymbol{G}$, $(j_2, i_0, \beta_2) \in \boldsymbol{G}$, $\beta_1 = (H_1, \mathfrak{t}_1)$, $\beta_2 = (H_2, \mathfrak{t}_2)$, für die $H_1 = H_2$ gilt. Dann ist aber $\beta_1^{-1}\beta_2 = \tau$ eine Translation, die wegen $j_1 \neq j_2$ aus der von $\mathfrak{a}$ und $\mathfrak{b}$ aufgespannten Ebene herausführt:

$$(j_2, i_0, \beta_2)^{-1} \cdot (j_1, i_0, \beta_1) = (j_1, j_2, \tau) \in \boldsymbol{G}.$$

Die Notwendigkeit der Bedingung (ii) ist offensichtlich. Der Beweis, daß (i) und (ii) hinreichend ist dafür, daß G_s eine kristallographische Bewegungsgruppe ist, soll nicht

in allen Einzelheiten ausgeführt werden. Insbesondere verfolgen wir bei Fallunterscheidungen nur eine der analogen Möglichkeiten.
Es sei

$$B_1 = \{\beta \mid \beta \in B \wedge (i_1, i_2, \beta) \in \boldsymbol{G} \wedge j_1 \leqq i_1, i_2 \leqq j_2\}.$$

Dabei sind j_1, j_2 Objekte von $\boldsymbol{G}$, für die $j_1 \neq j_2$ und eine Translation $\tau \in T$ existiert mit $(j_1, j_2, \tau) \in \boldsymbol{G}$.
Da für jedes $i \in Z$ die Faktorgruppe $G_i/T_{\boldsymbol{G}}$ endlich ist, existiert in B_1 eine endliche Teilmenge B_2, so daß

$$B_1 = B_2 \cdot T_{\boldsymbol{G}} = T_{\boldsymbol{G}} \cdot B_2$$

ist. Wir wollen zunächst zeigen, daß für jedes $(i, j, \beta) \in \boldsymbol{G}$ sich die Bewegung β als Produkt von Bewegungen aus B_1 schreiben läßt. Dazu reicht es aus, diese Behauptung für alle $(i, j_0, \beta) \in \boldsymbol{G}$ mit $i \in Z$, $j_1 \leqq j_0 \leqq j_2$ zu zeigen, denn zu jedem $(i, j, \beta) \in \boldsymbol{G}$ existiert ein j_0, $j_1 \leqq j_0 \leqq j_2$, und β_1, β_2, so daß $(i, j_0, \beta_1) \in \boldsymbol{G}$, $(j_0, j, \beta_2) \in \boldsymbol{G}$ und $\beta = \beta_2\beta_1$ ist.

Induktionsannahme. Es sei $i > j_1$, und die Behauptung sei richtig für beliebige $(i - 1, j, \beta') \in \boldsymbol{G}$ mit $j_1 \leqq j \leqq j_2$.
Wegen $(i, j_0, \beta) \in \boldsymbol{G}$ folgt nach Bedingung 2 von Definition 3, daß ein β' existiert, so daß (für $\chi(\beta) = +1$)

$$(i - 1, j_0 - 1, \beta') \in \boldsymbol{G} \quad \text{und} \quad (i, j_0, \beta') \in \boldsymbol{G}$$

oder

$$(i - 1, j_0, \beta') \in \boldsymbol{G} \quad \text{und} \quad (i, j_0 - 1, \beta') \in \boldsymbol{G}$$

ist. Wir nehmen an, daß $j_0 > j_1$ und daß das erste gilt. (Alle anderen Möglichkeiten, auch die für $\chi(\beta) = -1$, können ähnlich diskutiert werden.) Dann gilt für β' die Induktionsvoraussetzung, d. h. $\beta' = \beta'_n \cdots \beta'_1$ mit $\beta'_n, \ldots, \beta'_1 \in B_1$. Da $\boldsymbol{G}$ ein Gruppoid ist, folgt aus $(i, j_0, \beta') \in \boldsymbol{G}$, $(i, j_0, \beta) \in \boldsymbol{G}$ die Existenz eines $(j_0, j_0, \beta_{n+1}) \in \boldsymbol{G}$, so daß

$$(i, j_0, \beta) = (j_0, j_0, \beta'_{n+1}) \cdot (i, j_0, \beta')$$

und folglich $\beta = \beta'_{n+1}\beta'_n \cdots \beta'_1$ gilt. Wegen $\beta'_{n+1} \in B_1$ ist das die gesuchte Produktdarstellung.
Analog zeigt man die Existenz einer solchen Produktdarstellung für $i \leqq j_1$ bei der Annahme, daß eine solche Darstellung für alle β' existiert, wenn $(i + 1, j, \beta') \in \boldsymbol{G}$ ist.
Es sei P die Menge derjenigen endlichen Folgen von Elementen von B_1, für die das Produkt der Elemente jedes Ausschnitts der Folge eine Bewegung liefert, die keine Translation ist.
Es sei P_R ein Repräsentantensystem von P in folgendem Sinne: Zwei Folgen betrachten wir als nicht wesentlich verschieden, wenn sich die entsprechenden Glieder jeweils nur um eine Translation unterscheiden.
P_R ist eine endliche Menge, da G_0 nach dem ersten Teil von Satz 7 eine endliche Gruppe ist. Es folgt, daß T_{G_s}, die Menge aller Translationen von G_s, endlich erzeugbar ist, denn ein Erzeugendensystem von T_{G_s} erhalten wir, wenn wir aus der Menge

$$M = \{\tau_{\mathfrak{a}}, \tau_{\mathfrak{b}}\} \cup B_2 \cdot B(P_R) \cup B(P_R) \cdot B_2$$

alle Translationen auswählen. Dabei ist $B(P_R)$ die Menge aller Bewegungen, die man erhält, wenn man in P_R die Glieder der Folgen multipliziert:

$$B(P_R) = \{\beta \mid \beta = \beta_k \cdots \beta_1 \text{ für } (\beta_k, \ldots, \beta_1) \in P_R\}.$$

M ist endlich. Deshalb ist auch die Menge T_M aller Translationen von M endlich. Aus Bedingung 2 von Definition 3 folgt (vgl. Tabelle 3), daß in T_{G_s} ein $\tau_{\min}$ existiert, dessen Translationskomponente in Richtung von $\mathfrak{c} = \mathfrak{a} \times \mathfrak{b}$ positiv und minimal ist. Jede Translation von T_{G_s} unterscheidet sich von einem Vielfachen von $\tau_{\min}$ höchstens um eine Translation in der von $\mathfrak{a}$ und $\mathfrak{b}$ aufgespannten Ebene. Zusammen mit der Tatsache, daß T_{G_s} endlich erzeugbar ist, ergibt das: Die Untergruppe von T_{G_s} der in der von $\mathfrak{a}$ und $\mathfrak{b}$ aufgespannten Ebene liegenden Translationen von T_{G_s} ist endlich erzeugbar. Da nach Voraussetzung der Vektor jeder Translation eines derartigen Erzeugendensystems rationale Komponenten in $\mathfrak{a}$- und in $\mathfrak{b}$-Richtung besitzt, gibt es natürliche Zahlen m und n, so daß diese Untergruppe in der von $\tau_{\frac{\mathfrak{a}}{m}}$ und $\tau_{\frac{\mathfrak{b}}{n}}$ erzeugten Gruppe von Translationen liegt. Nach einem bekannten Satz der Theorie der abelschen Gruppen ([14], S. 122) wird diese Untergruppe durch zwei Translationen $\tau_{\tilde{\mathfrak{a}}}$, $\tau_{\tilde{\mathfrak{b}}}$ erzeugt. Damit wird T_{G_s} von $\tau_{\min}$, $\tau_{\tilde{\mathfrak{a}}}$, $\tau_{\tilde{\mathfrak{b}}}$ erzeugt.

Wie das folgende Beispiel zeigt, ist die Gruppe G_0 nicht für jedes OD-Gruppoid eine der 32 kristallographischen Punktgruppen (dann kann G_s natürlich auch keine kristallographische Bewegungsgruppe sein).

Beispiel. Es sei G ein Brandtsches OD-Gruppoid mit quadratischem Translationsnetz der Einzelschicht, die als Symmetrien außer den Translationen noch die Spiegelung an einer Ebene parallel zu den Translationen besitzt. Die Schicht L_1 gehe aus L_0 durch eine Drehung um einen Winkel ϑ mit $\tan \frac{\vartheta}{2} = \frac{1}{2}$ und anschließender Translation längs der Drehachse hervor (Drehachse senkrecht zu den Translationen der Schicht).

Dann gilt

1. Das zugehörige OD-Gruppoid ist vom Typ I.

2. Die Punktgruppe enthält eine Drehung um den Winkel ϑ ($\approx 53°$) und kann damit keine kristallographische Punktgruppe sein.

3. Je zwei benachbarte Schichten haben ein quadratisches Translationsnetz gemeinsam. Die Bedingung 1 (ii)'' der Definitionen 2 und 3 ist damit erfüllt.
   Die Vektoren

   $$\mathfrak{a} = 2\mathfrak{a}_0 + \mathfrak{b}_0 = 2\mathfrak{a}_1 - \mathfrak{b}_1,$$

   $$\mathfrak{b} = 2\mathfrak{b}_0 - \mathfrak{a}_0 = 2\mathfrak{b}_1 + \mathfrak{a}_1$$

   sind Basisvektoren dieses gemeinsamen Netzes der Schichten L_0 und L_1.

4. Für das OD-Gruppoid mit diesem Schichtpaar, für das die geradzahligen und die ungeradzahligen Schichten jeweils für sich translationsäquivalent sind, ist die Bedingung 1 (ii) aus Abschnitt 7 erfüllt.
   Dagegen ist für ein OD-Gruppoid, bei dem $(j, j+1, \beta_0) \in G$ für alle j gilt (β_0 ist die oben angegebene Schraubung um den Winkel ϑ) die Bedingung 1 (ii) nicht erfüllt. (Es sei $\mathfrak{a}^*$ ein kürzester Vektor, der allen Schichten gemeinsam ist. Dann muß der Vektor $\tilde{\mathfrak{a}}$, den man aus $\mathfrak{a}^*$ durch Drehung um den Winkel ϑ erhält, ebenfalls

allen Schichten gemeinsam sein. Folglich ist auch $\tilde{\mathfrak{a}} - \mathfrak{a}^*$ ein allen Schichten gemeinsamer Translationsvektor. $\tilde{\mathfrak{a}} - \mathfrak{a}^*$ ist kürzer als $\mathfrak{a}^*$ im Widerspruch zu unserer Voraussetzung über $\mathfrak{a}^*$.)

Unter den OD-Strukturen sind die sogenannten OD-Strukturen von maximalem Ordnungsgrad [4, 5, 10] besonders wichtig.

Definition 8. G_1 hat einen höheren *Ordnungsgrad* als G_2, wenn eine Zahl $n_0 \in Z$, $n_0 > 0$, existiert, so daß folgendes gilt:

(i) Für jedes $i \in Z$ und jedes n, mit $0 \leqq n \leqq n_0$, gibt es ein $j \in Z$, so daß $V_{G_1}(i, i+1, \ldots, i+n)$ geometrisch äquivalent zu $V_{G_2}(j, j+1, \ldots, j+n)$ ist.

(ii) Es gibt ein $j_0 \in Z$, so daß für jedes $i \in Z$ das Teilgruppoid $V_{G_2}(j_0, j_0+1, \ldots, j_0+n_0)$ nicht zu $V_{G_1}(i, i+1, \ldots, i+n_0)$ geometrisch äquivalent ist.

In Zeichen schreiben wir $G_1 \overset{\circ}{>} G_2$.

Bezüglich der Relation $\overset{\circ}{>}$ maximale Elemente heißen OD-Gruppoide von *maximalem Ordnungsgrad.*

Aus Definition 8 folgt unmittelbar, daß die Relation $\overset{\circ}{>}$ transitiv und antisymmetrisch ist. Damit liegt eine Halbordnungsrelation vor.
Aus [10, Sätze 5, 7, 10] folgt

Satz 8. *Für ein Brandtsches OD-Gruppoid G_2, für das die Bedingung* 2 (ii)′ *aus Definition* 3 *erfüllt ist, gilt:*
G_2 ist von maximalem Ordnungsgrad genau dann, wenn für $n_0 = 8$ kein G_1 existiert, so daß die Bedingungen (i) *und* (ii) *aus Definition* 8 *erfüllt sind.*

In [6] sind weitere notwendige und hinreichende Bedingungen angegeben dafür, daß ein OD-Gruppoid von maximalem Ordnungsgrad ist. Aus diesen Resultaten folgt auch, daß für ein beliebiges OD-Gruppoid G stets ein OD-Gruppoid G_M von maximalem Ordnungsgrad existiert, so daß $G \overset{\circ}{\leqq} G_M$ ist.

11. Abschließende Bemerkungen

Im Zusammenhang mit dem Ausbau der mathematischen Grundlagen der OD-Theorie stehen folgende Aufgaben und Probleme:

1. Angabe eines Verfahrens für die Ableitung der OD-Gruppoid-Familien unter gewissen einschränkenden Bedingungen. In [4] ist eine Tabelle der Brandtschen OD-Gruppoide für gleiche Translationsgruppen der Schichten enthalten. Diese Tabelle enthält einige Lücken (vgl. [7]). In [7] ist das prinzipielle Vorgehen für ein solches Verfahren skizziert.

2. Untersuchung des Zusammenhangs zwischen OD-Gruppoid und Superpositionsgruppe. Insbesondere interessiert, inwieweit das OD-Gruppoid durch die Superpositionsgruppe bestimmt ist.

3. Analog zur Charakterisierung einer kristallographischen Gruppe bis auf eine (eigentliche) Bewegung durch Raumgruppe und Gitterkonstanten (vgl. Abschnitt 2) ist ein OD-Gruppoid bis auf eine (eigentliche) Bewegung durch die OD-Gruppoid-Familie und durch gewisse Parameter zu kennzeichnen. Beispiele für eine derartige Charakterisierung existieren für gewisse Klassen von Polytypensubstanzen ([8, 9]).

4. B. S. SCHEIN (Saratow) hat darauf hingewiesen, daß man die Symmetrien von OD-Strukturen auch durch induktive Gruppoide, die ihnen zugeordneten Pseudogruppen (siehe [11]) oder durch inverse Halbgruppen (vgl. [2]) beschreiben kann. Eine derartige Beschreibung könnte vorteilhaft für die Untersuchung der OD-Gruppoide von maximalem Ordnungsgrad sein.
5. Es ist zu untersuchen, welche sinnvollen Äquivalenzrelationen man angeben kann, derart, daß die zugehörigen Klasseneinteilungen einerseits gröber sind als die nach OD-Gruppoid-Familien, andererseits feiner als die nach Typen.
6. In [20] wird eine Darstellungstheorie für Brandtsche Gruppoide entwickelt. Dabei wird vorausgesetzt, daß das Brandtsche Gruppoid zu je zwei Objekten eine globale Symmetrieoperation besitzt, die diese Objekte ineinander überführt. Diese Bedingung ist bei OD-Gruppoiden eine sehr starke Forderung, der nicht einmal alle Brandtschen Gruppoide von maximalem Ordnungsgrad genügen. Es ist zu klären, ob diese Darstellungstheorie so modifiziert werden kann, daß sie für größere Klassen von OD-Gruppoiden sinnvoll ist.
7. In dieser Arbeit ist stets vorausgesetzt, daß der dreidimensionale euklidische Raum vorliegt und die einzelnen Objekte der Gruppoide zwei nichtkollineare Translationen als Symmetrieoperationen besitzen.
   Es ist zu untersuchen, inwieweit eine Verallgemeinerung der Begriffe und Aussagen möglich und richtig ist für den n-dimensionalen euklidischen Raum und Objekte der Gruppoide, die $n - 1$ linear unabhängige Translationen als Symmetrieoperationen besitzen.
8. In [18] wird eine fehlgeordnete Struktur untersucht, die aus Stäben aufgebaut ist. Das zugehörige Gruppoid hat also Objekte, die nur in einer Richtung des Raums periodisch sind. Während bei Schichten die Frage der Nachbarschaft klar ist, denn jede Schicht hat bei Übereinanderstapelung naturgemäß zwei Nachbarn, wird diese Frage bei Stäben komplizierter. In [18] z. B. bilden die Stäbe die Eckpunkte eines aus Sechsecken bestehenden regulären Mosaiks; jeder Stab hat also drei Stäbe als Nachbarn. Über allgemeinere Möglichkeiten der Anordnung der Stäbe gibt die Theorie der homogenen Mosaike [14] Auskunft.

Der Verfasser dankt Frau Professor BOLL-DORNBERGER und Frau GRELL für eine kritische Durchsicht des Manuskripts und für zahlreiche wertvolle Hinweise.

LITERATUR

[1] BURCKHARDT, J. J.: Die Bewegungsgruppen der Kristallographie. Verlag Birkhäuser, Basel 1947.

[2] CLIFFORD, A. H., and G. B. PRESTON: The Algebraic Theory of Semigroups. Amer. Math. Soc., Providence, R.I., 1967.

[3] COXETER, H. S. M.: Introduction to Geometry. John Wiley & Sons Inc., New York—London 1961.

[4] DORNBERGER-SCHIFF, K.: Grundzüge einer Theorie der OD-Strukturen aus Schichten. Akademie-Verlag, Berlin 1964.

[5] DORNBERGER-SCHIFF, K.: Lehrgang über OD-Strukturen, Akademie-Verlag, Berlin 1966.

[6] DORNBERGER-SCHIFF, K.: Properties of MDO-Polytypes (Simple or Regular Polytypes) and Procedures for their Derivation (in Vorbereitung).

[7] DORNBERGER-SCHIFF, K., and K. FICHTNER: On the Symmetry of OD-Structures Consisting of Equivalent Layers, Kristall u. Technik 7 (1972), 1035—1056.

[8] DORNBERGER-SCHIFF, K., and S. ĎUROVIČ: OD-Interpretation of Kaolinite Type Structures, I. Symmetry of Kaolinite Packets and their Stacking Possibilities, II. Systematic Derivation of MDO-Structures. Clays and Clay Minerals (im Druck).
[9] DORNBERGER-SCHIFF, K., and S. ĎUROVIČ: Proposal for General Principles for the Construction of Complete Polytype Symbols, Vorschlag an die "Joint Commission of the IUCr and the IAM" unter W. BAILEY.
[10] FICHTNER, K.: Zur Existenz von Gruppoiden verschiedenen Ordnungsgrades bei OD-Strukturen aus gleichartigen Schichten, Wiss. Z. TU Dresden *14* (1965), 1—13.
[11] HASSE, M., und L. MICHLER: Theorie der Kategorien. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1966.
[12] International Tables for X-Ray-Crystallography, Vol. I. Symmetry Groups. Kynoch Press, Birmingham 1952.
[13] Копцик, В.А.: Шубниковские группы, Изд. Моск. ун-та, Москва 1966.
[14] KRÖTENHEERDT, O.: Die homogenen Mosaike n-ter Ordnung in der euklidischen Ebene I—III. Wiss. Z. Martin-Luther-Univ. Halle-Wittenberg, Math.-naturwiss. Reihe, *18* (1969), 273—290; *19* (1970), 19—38, 97—122.
[15] Курош, А. Г.: Теория групп, Наука, Москва 1967.
[16] NAAS, J., und H. L. SCHMID: Mathematisches Wörterbuch, Akademie-Verlag, Berlin 1965.
[17] SCHUBERT, H.: Kategorien I/II, Akademie-Verlag, Berlin 1970.
[18] SEDLACEK, P.: Struktur- und Anordnungsprinzip der Stäbe des zweidimensional fehlgeordneten $TiBe_{12}$ (in Vorbereitung).
[19] SPEISER, A.: Die Theorie der Gruppen von endlicher Ordnung. 4. Aufl. Birkhäuser Verlag, Basel—Stuttgart 1956.
[20] WECHLER, W.: Zur Symmetriebeschreibung physikalischer Systeme. Studien zur Algebra und ihre Anwendungen. Akademie-Verlag, Berlin 1972, S. 103—123.

Manuskripteingang: 3. 9. 1975

VERFASSER:

KONRAD FICHTNER, Zentralinstitut für physikalische Chemie der Akademie der Wissenschaften der DDR