『物質科学を学ぶ人の　空間群練習帳』問題解答

（2020 年 8 月 25 日現在）

1 章===

問題 1.1

$$|\mathbf{A}| = \sqrt{A_x{}^2 + A_y{}^2 + A_z{}^2} = a$$

$$|\mathbf{B}| = \sqrt{B_x{}^2 + B_y{}^2 + B_z{}^2} = b\sqrt{\cos^2\gamma + \sin^2\gamma} = b$$

$$|\mathbf{C}| = \sqrt{C_x{}^2 + C_y{}^2 + C_z{}^2} = c\sqrt{\cos^2\beta + \frac{(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma)^2}{\sin^2\gamma} + \sin^2\beta - \frac{(\cos\alpha - \cos\beta\cos\gamma)^2}{\sin^2\gamma}} = c$$

$$\frac{(\mathbf{A},\mathbf{B})}{|\mathbf{A}||\mathbf{B}|} = \cos\gamma$$

$$\frac{(\mathbf{B},\mathbf{C})}{|\mathbf{B}||\mathbf{C}|} = \cos\gamma\cos\beta + \cos\alpha - \cos\gamma\cos\beta = \cos\alpha$$

$$\frac{(\mathbf{C},\mathbf{A})}{|\mathbf{C}||\mathbf{A}|} = \cos\beta$$

問題 1.2

$V = A_x B_y C_z$ に注意すると

$$\mathbf{F}\mathbf{F}^{-1} = \begin{pmatrix} 1/A_x & -B_x C_z / V & (B_x C_y - B_y C_x)/V \\ 0 & 1/B_y & -A_x C_y / V \\ 0 & 0 & 1/C_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x & B_x & C_x \\ 0 & B_y & C_y \\ 0 & 0 & C_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

問題 1.3

正方晶では $a = b$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$, 立方晶では $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$より

$$\mathbf{F}_{\mathrm{t}} = \begin{pmatrix} 1/a & 0 & 0 \\ 0 & 1/a & 0 \\ 0 & 0 & 1/c \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_{\mathrm{c}} = \begin{pmatrix} 1/a & 0 & 0 \\ 0 & 1/a & 0 \\ 0 & 0 & 1/a \end{pmatrix}$$

問題 1.4

tC は, 底面積が 1/2 の tP に取り直すことができる。

問題 1.5

tF は，底面積が 1/2 の tI に取り直すことができる。

2 章==

問題 2.1

整数どうしの和は整数であり，また任意の整数 p, q, r について

・$(p+q)+r = p+(q+r)$ （結合則）

・$0+p = p+0 = p$ （単位元の存在）

・$p+(-p) = (-p)+p = 0$ （逆元の存在）

が成り立つ。なおこの場合は

$p+q = q+p$

なので可換群である。

問題 2.2

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\ X = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},\ Y = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

とすると，行列の乗算では結合則が成り立ち，かつ

$$EX = XE = X,\ EY = YE = Y,\ EE = E,\ XX = Y,\ YY = X,\ XY = E$$

より，乗算について閉じているとわかる。また上記関係より E は単位元であり，$X^{-1} = Y,\ Y^{-1} = X$ となるので逆元も存在する。

問題 2.3

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ C_3(z) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ C_3{}^2(z) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} & 0 \\ -\sqrt{3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

なので

$$E \circ C_3(z) = C_3(z) \circ E = C_3(z),\ E \circ C_3{}^2(z) = C_3{}^2(z) \circ E = C_3{}^2(z),$$

$$E \circ E = E,\ C_3(z) \circ C_3(z) = C_3{}^2(z),\ C_3{}^2(z) \circ C_3{}^2(z) = C_3(z),\ C_3(z) \circ C_3{}^2(z) = E$$

より，乗算について閉じているとわかる。E は単位元であり，$C_3(z)^{-1} = C_3{}^2(z),\ C_3{}^2(z)^{-1} = C_3(z)$ となるので逆元も存在する。

問題 2.4

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ i = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},\ C_2(z) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ \sigma_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

なので

$$E\circ i=i\circ E=i,\ E\circ C_2(z)=C_2(z)\circ E=C_2(z),\ E\circ\sigma_{xy}=\sigma_{xy}\circ E=\sigma_{xy},$$
$$E\circ E=E,\ i\circ i=E,\ C_2(z)\circ C_2(z)=E,\ \sigma_{xy}\circ\sigma_{xy}=E,\ i\circ C_2(z)=C_2(z)\circ i=\sigma_{xy},$$
$$i\circ\sigma_{xy}=\sigma_{xy}\circ i=C_2(z),\ C_2(z)\circ\sigma_{xy}=\sigma_{xy}\circ C_2(z)=E$$

より，乗算について閉じているとわかる。E は単位元であり，$i^{-1}=i,\ C_2{}^{-1}(z)=C_2(z),\ \sigma_{xy}{}^{-1}=\sigma_{xy}$ となるので逆元も存在する。

問題 2.5

$$S_4(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-y\\x\\-z\end{pmatrix}$$ より，$S_4{}^2(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}-x\\-y\\z\end{pmatrix}$, $S_4{}^3(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}y\\-x\\-z\end{pmatrix}$, $S_4{}^4(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$

$$C_{\bar{4}}(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y\\-x\\-z\end{pmatrix}$$ より，$C_{\bar{4}}{}^2(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}-x\\-y\\z\end{pmatrix}$, $C_{\bar{4}}{}^3(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}-y\\x\\-z\end{pmatrix}$, $C_{\bar{4}}{}^4(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$

以上より，S_4 と $C_{-4}{}^3(z)$, $S_4{}^3$ と $C_{-4}(z)$, $S_4{}^2$ と $C_{-4}{}^2(z)$によって移される点はそれぞれ等しい。

問題 2.6

$$(C_2(z)\,|\,\mathbf{o})\mathbf{x}=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\-y\\z\\1\end{pmatrix}$$ の座標部分は，$C_2(z)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\-y\\z\end{pmatrix}$ と同一である。

問題 2.7

$$(\sigma_{xy}\,|\,\mathbf{o})\mathbf{x}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\y\\-z\\1\end{pmatrix}$$

問題 2.8

$$(\sigma_{xy}\,|\,\mathbf{o})=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\quad (E\,|\,\mathbf{a}/2)=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

なので

$$(\sigma_{xy}\,|\,\mathbf{o})\circ(E\,|\,\mathbf{a}/2)=(E\,|\,\mathbf{a}/2)\circ(\sigma_{xy}\,|\,\mathbf{o})=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

となる。一般に

$$(E\,|\,\mathbf{b})\circ(P\,|\,\mathbf{q})-(P\,|\,\mathbf{q})\circ(E\,|\,\mathbf{b})=(O\,|\,(E-P)\mathbf{b}))$$

なので，$P\mathbf{b}=\mathbf{b}$ ならばこれらの変換は可換である。この問題では

$$P\mathbf{b}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/2\\0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1/2\\0\\0\end{pmatrix}=\mathbf{b}$$

なので，$(\sigma_{xy}\mid\mathbf{o})$と$(E\mid\mathbf{a}/2)$は可換となった。これは，$x$ 方向への平行移動は z 軸に垂直な鏡映によって影響を受けないことに対応している。

問題 2.9

$$(C_2(z)\,|\,\mathbf{o})=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\qquad(\sigma_{xy}\,|\,\mathbf{o})=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

より

$$(C_2(z)\,|\,\mathbf{o})\circ(\sigma_{xy}\,|\,\mathbf{o})=(\sigma_{xy}\,|\,\mathbf{o})\circ(C_2(z)\,|\,\mathbf{o})=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=(i\,|\,\mathbf{o})$$

3 章=====================================

問題 3.1

$$E=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ E_{\mathrm{A}}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&1/2\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ E_{\mathrm{B}}=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&0\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ E_{\mathrm{C}}=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&1/2\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

より

$$E_{\mathrm{A}}\circ E_{\mathrm{B}}=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&1/2\\0&0&1&1\\0&0&0&1\end{pmatrix}=E_{\mathrm{C}}$$

などの関係が得られる。並進部分は整数単位で加減しても等価であることに注意。

問題 3.2

$$E=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ E_{\mathrm{R}'}=\begin{pmatrix}1&0&0&2/3\\0&1&0&1/3\\0&0&1&1/3\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ E_{\mathrm{R}''}=\begin{pmatrix}1&0&0&1/3\\0&1&0&2/3\\0&0&1&2/3\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

より

$$E_{\mathrm{R}'}\circ E_{\mathrm{R}''}=\begin{pmatrix}1&0&0&1\\0&1&0&1\\0&0&1&1\\0&0&0&1\end{pmatrix}=E$$

などの関係が得られる。並進部分は整数単位で加減しても等価であることに注意。

問題 3.3

$t(u,0,w)\circ C_2(b:0,*,0)=C_2(b:u/2,*,w/2)$ より，b 軸上に 2 回軸があれば(½, 0, 0), (0, 0, ½), (½, 0, ½)を通り b 軸に平行な 2 回軸も存在する。

$t(u,v,0)\circ C_2(c:0,0,*)=C_2(c:u/2,v/2,*)$ より，c 軸上に 2 回軸があれば(½, 0, 0), (0, ½, 0), (½, ½, 0)を通り c 軸に平行な 2 回軸も存在する。

問題 3.4

例えば $C_2(a:*,0,0)=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ C_2(b:0,*,0)=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ より

$$C_2(a:*,0,0)\circ C_2(b:0,*,0)=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=C_2(c:0,0,*)$$

の関係が得られる。他も同様。

問題 3.5

$t(0,v,w)\circ 2_1(b:0,*,0)=2_1(b:u/2,*,w/2)$ より，b 軸上に 2_1 軸があれば(½, 0, 0), (0, 0, ½), (½, 0, ½)を通り b 軸に平行な 2_1 軸も存在する。

$t(u,v,0)\circ 2_1(c:0,0,*)=2_1(c:u/2,v/2,*)$ より，c 軸上に 2_1 軸があれば(½, 0, 0), (0, ½, 0), (½, ½, 0)を通り c 軸に平行な 2_1 軸も存在する。

問題 3.6

例えば $2_1(a:*,0,1/4)=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&-1&0&0\\0&0&-1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ 2_1(b:1/4,*,0)=\begin{pmatrix}-1&0&0&1/2\\0&1&0&1/2\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$ より

$$
2_1(a:*,0,1/4)\circ 2_1(b:1/4,*,0)=\begin{pmatrix}-1&0&0&1\\0&-1&0&-1/2\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}=2_1(c:0,1/4,*)
$$

の関係が得られる。他も同様。

問題 3.7

$$
C_2(a:*,v,w)=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&2v\\0&0&-1&2w\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ C_2(b:u',*,w')=\begin{pmatrix}-1&0&0&2u'\\0&1&0&0\\0&0&-1&2w'\\0&0&0&1\end{pmatrix}
$$
とすれば

$$
C_2(a:*,v,w)\circ C_2(b:u',*,w')=\begin{pmatrix}-1&0&0&2u'\\0&-1&0&2v\\0&0&1&2(w-w')\\0&0&0&1\end{pmatrix}
$$

となる。$w - w' =$ ¼となる組み合わせであれば，この結合は c 軸に平行な 2_1 らせんとなる。例えば{E, $C_2(a$: *, 0, ¼), $C_2(b$: 0, *, 0), $2_1(c$: 0, 0, *)}は群をつくる。

問題 3.8

$$
2_1(a:*,v,w)=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&-1&0&2v\\0&0&-1&2w\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ 2_1(b:u',*,w')=\begin{pmatrix}-1&0&0&2u'\\0&1&0&1/2\\0&0&-1&2w'\\0&0&0&1\end{pmatrix}
$$

とすれば

$$
2_1(a:*,v,w)\circ 2_1(b:u',*,w')=\begin{pmatrix}-1&0&0&2u'+1/2\\0&-1&0&2v-1/2\\0&0&1&2(w-w')\\0&0&0&1\end{pmatrix}
$$

となる。$w - w' = 0$（整数）となる組み合わせであれば，この結合は c 軸に平行な 2 回回転となる。例えば{E, $2_1(a$: *, ¼, 0), $2_1(b$: ¼, *, 0), $2_1(c$: 0, 0, *)}は群をつくる。

問題 3.9

例えば

$$
E_{\mathrm{C}}=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&1/2\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ 2_1(a:*,0,1/4)=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&-1&0&0\\0&0&-1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}
$$

より

$$E_\mathrm{C} \circ 2_1(a:*,0,1/4) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = C_2(a:*,1/4,1/4)$$

の関係が得られる。同様にして

$$E_\mathrm{C} \circ 2_1(b:1/4,*,0) = C_2(b:0,*,0),\ E_\mathrm{C} \circ 2_1(c:0,1/4,*) = 2_1(c:1/4,0,*)$$

が得られる。

{E, $C_2(a$: *, 1/4, 1/4), $C_2(b$: 0, *, 0), $2_1(c$: 0, 1/4, *), E_C, $2_1(a$: *, 0, 1/4), $2_1(b$: 1/4, *, 0), $2_1(c$: 1/4, 0, *)}の集合は，222_1 部分群を持っている（原点を(0, 1/4, 0)移動すると，問題 3.7 で例示した群と同じになる）。したがって，この群は $C222_1$ と書けばよく，$C2_12_12_1$ 群を加えるのは蛇足である。

問題 3.10

例えば

$$C_2(c:0,0,*) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ m(c) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

より

$$C_2(c:0,0,*) \circ m(c) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = i(0,0,0)$$

の関係が得られる。他も同様。

問題 3.11

$$2_1(b:u,*,w) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 2u \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 2w \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ m(vb) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2v \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

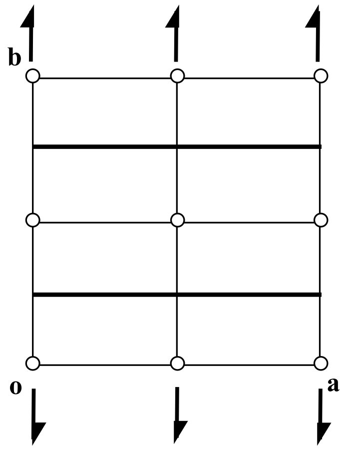
とすれば

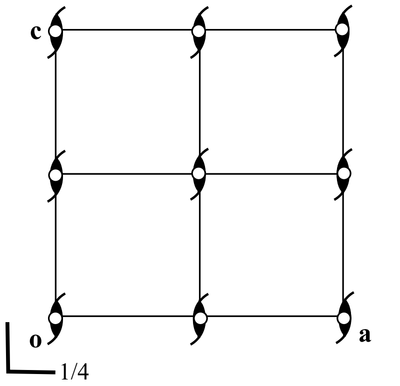
$$2_1(b:u,*,w) \circ m(vb) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 2u \\ 0 & -1 & 0 & 2v+1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 2w \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = i(u,v+1/4,w)$$

となる。例えば $u = 0$, $v = 1/4$, $w = 0$ とすれば，{E, $2_1(b$: 0, *, 0), $m(b/4)$, $i(0,0,0)$}の集合は群をつくる。

問題 3.12

例えば b 軸上に 2_1 軸がある群では以下のようになる。





問題 3.13

例えば

$$2_1(c:1/4,0,*)=\begin{pmatrix}-1&0&0&1/2\\0&-1&0&0\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ a(c/4)=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&0\\0&0&-1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

より

$$2_1(c:1/4,0,*)\circ a(c/4)=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&1\\0&0&0&1\end{pmatrix}=i(0,0,0)$$

の関係が得られる。他も同様。

問題 3.14

$$C_2(c:u,v,*)=\begin{pmatrix}-1&0&0&2u\\0&-1&0&2v\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\ a(wc)=\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&0\\0&0&-1&2w\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

とすれば

$$C_2(c:u,v,*)\circ a(wc)=\begin{pmatrix}-1&0&0&2u-1/2\\0&-1&0&2v\\0&0&-1&2w\\0&0&0&1\end{pmatrix}=i(u-1/4,v,w)$$

となる。例えば $u = 1/4$, $v = 0$, $w = 0$ とすれば，$\{E, C_2(c:\ 1/4, 0,*), a(c), i(0,0,0)\}$の集合は群をつくる。

問題 3.15

例えば

$$E_{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad 2_1(c:1/4,0,*) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

より

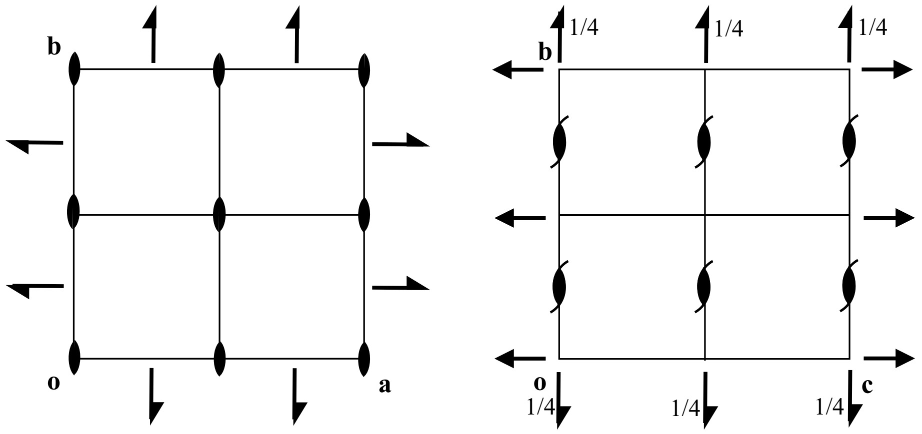
$$E_{\mathrm{A}} \circ 2_1(c:1/4,0,*) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = C_2(c:1/4,1/4,*)$$

の関係が得られる。同様にして，$E_{\mathrm{A}} \circ a(c/4) = n(c)$, $E_{\mathrm{C}} \circ i(0,0,0) = i(0,1/4,1/4)$ が得られる。
$\{E, 2_1(c{:}\ 1/4, 0, *), a(c/4), i(0,0,0), E_{\mathrm{A}}, C_2(c{:}\ 1/4, 1/4, *), n(c), i(0, 1/4, 1/4)\}$の集合は, $2/n$ 部分群に A 底心へのセンタリングを加えた集合と等しい。したがってこの群は $A2/n$ と書けばよく，$A2_1/a$ 群を加えるのは蛇足である。

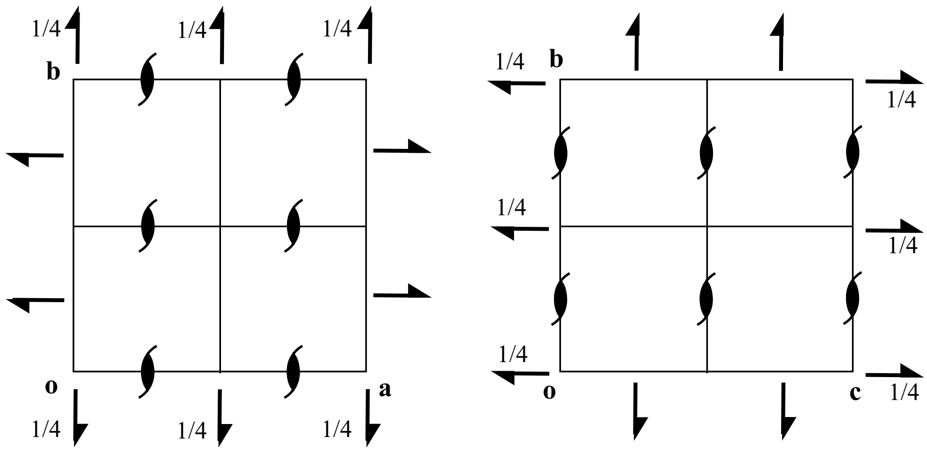
4 章==

問題 4.1

$P2_12_12$



$P2_12_12_1$ (origin choice (a))



問題 4.2

$C_2(c\text{: }0, 0, *)$で移される点を $\mathbf{x}'_{\text{old}}$ とする。

$\mathbf{x}'_{\text{old}} = C_2(c:0,0,*)\mathbf{x}_{\text{old}}$

両辺に軸変換行列をかける。

$(\mathbf{P}_{abc}^{bca}\,|\,\mathbf{o})\mathbf{x}'_{\text{old}} = (\mathbf{P}_{abc}^{bca}\,|\,\mathbf{o})C_2(c:0,0,*)\mathbf{x}_{\text{old}}$

式(4.3)を使う。

$\mathbf{x}'_{\text{new}} = (\mathbf{P}_{abc}^{bca}\,|\,\mathbf{o})C_2(c:0,0,*)(\mathbf{P}_{bca}^{abc}\,|\,\mathbf{o})\mathbf{x}_{\text{new}}$

問題 4.3

$$(\mathbf{P}_{abc}^{bca}\,|\,\mathbf{o})\circ m(a)\circ(\mathbf{P}_{bca}^{abc}\,|\,\mathbf{o}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m(b)$$

$$(\mathbf{P}_{abc}^{bca}\,|\,\mathbf{o})\circ m(b)\circ(\mathbf{P}_{bca}^{abc}\,|\,\mathbf{o}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = m(c)$$

問題 4.4

$$\mathbf{P}_{abc}^{cab} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},\ \mathbf{P}_{abc}^{a\bar{c}b} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},\ \mathbf{P}_{abc}^{ba\bar{c}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},\ \mathbf{P}_{abc}^{\bar{c}ba} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

問題 4.5

例えば#35 *Cmm*2 は，$(a, b, c)\to(b, c, a)$の変換によって

$E_{\text{C}} \to E_{\text{A}}$, $m(a) \to m(b)$, $m(b) \to m(c)$, $C_2(c) \to C_2(a)$

へと変わるので，*A*2*mm* と表記される。他も同様。

問題 4.6

例えば#39 *Abm*2 は，$(a, b, c) \to (b, c, a)$の変換によって

$E_A \to E_B$, $b(a) \to c(b)$, $m(b) \to m(c)$, $C_2(c) \to C_2(a)$

へと変わるので，*B*2*cm* と表記される。他も同様。

問題 4.7

例えば#55 *Pbam* では，以下の関係が成り立っている。

①	2_1 (*a*: *, ¼, 0)	2_1 (*b*: ¼, *, 0)	C_2 (*c*: 0, 0, *)
2_1 (*a*: *, ¼, 0)	*E*	C_2 (*c*: 0, 0, *)	2_1 (*b*: ¼, *, 0)
2_1 (*b*: ¼, *, 0)	C_2 (*c*: 0, 0, *)	*E*	2_1 (*a*: *, ¼, 0)
C_2 (*c*: 0, 0, *)	2_1 (*b*: ¼, *, 0)	2_1 (*a*: *, ¼, 0)	*E*

②	*b*(*a*/4)	*a*(*b*/4)	*m*(*c*)
2_1 (*a*: *, ¼, 0)	*i*	*m*(*c*)	*a*(*b*/4)
2_1 (*b*: ¼, *, 0)	*m*(*c*)	*i*	*b*(*a*/4)
C_2 (*c*: 0, 0, *)	*a*(*b*/4)	*b*(*a*/4)	*i*

③	*b*(*a*/4)	*a*(*b*/4)	*m*(*c*)
b(*a*/4)	*E*	C_2 (*c*: 0, 0, *)	2_1 (*b*: ¼, *, 0)
a(*b*/4)	C_2 (*c*: 0, 0, *)	*E*	2_1 (*a*: *, ¼, 0)
m(*c*)	2_1 (*b*: ¼, *, 0)	2_1 (*a*: *, ¼, 0)	*E*

問題 4.8

問題 2.8 より

$$E_C \circ M - M \circ E_C = \begin{pmatrix} O & (E-\sigma)\dfrac{(\mathbf{a}+\mathbf{b})}{2} \\ O & 1 \end{pmatrix}$$

である。

$$\begin{pmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm 1/2 \\ \pm 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

なので，面対称要素が $M(a)$, $M(b)$, $M(c)$のいずれであっても

$$\sigma \frac{(\mathbf{a}+\mathbf{b})}{2} = \frac{(\mathbf{a}+\mathbf{b})}{2}$$

が成り立つ。したがって E_C と $M(a)$, $M(b)$, $M(c)$は可換である。

$M'(a) \circ M'(a) = E_C \circ M(a) \circ E_C \circ M(a) = E_C \circ E_C \circ M(a) \circ M(a) = E \circ E = E$ となり，同様に

$M'(a) \circ M'(b) = M(a) \circ M(b)$

などが導かれる。したがって⑥の部分は次のようになる。

⑥	$M'(a)$	$M'(b)$	$M'(c)$
$M'(a)$	E	$II(c)$	$II(b)$
$M'(b)$	$II(c)$	E	$II(a)$
$M'(c)$	$II(b)$	$II(a)$	E

5 章==

問題 5.1

変換行列の意味は次の通り。

$\mathbf{F}$: 実格子上の点 $\mathbf{X}\rightarrow$ 分率座標上の点 $\mathbf{x}$　　$\mathbf{x}=\mathbf{FX}$　…(1)

$\Phi_z(\theta)$: 実格子上の点 $\mathbf{X}\rightarrow z$ 軸の周りにθ回転した点 $\mathbf{X}'$　　$\mathbf{\Phi}_z(\theta)\mathbf{X}=\mathbf{X}'$　…(2)

$\varphi(\theta)$: 分率座標上の点 $\mathbf{x}\rightarrow C_n$ 軸の周りに 2π/n 回転した点 $\mathbf{x}'$　　$\varphi(\theta)\mathbf{x}=\mathbf{x}'$　…(3)

式(3)の右辺の $\mathbf{x}'$を，式(1)を使って $\mathbf{FX}'$に置き換える。$\mathbf{X}'$に式(2)を代入する。$\mathbf{X}$ を式(1)を使って置き換える。

$$\begin{aligned}\varphi(\theta)\mathbf{x}&=\mathbf{x}'\\&=\mathbf{FX}'\\&=\mathbf{F\Phi}_z(\theta)\mathbf{X}\\&=\mathbf{F\Phi}_z(\theta)\mathbf{F}^{-1}\mathbf{x}\end{aligned}$$

問題 5.2

正方晶，立方晶では $A_x=B_y=a,\ B_x=0,\ C_x=C_y=0,\ C_z=c$ なので

$$\mathbf{F}=\begin{pmatrix}1/A_x & -B_xC_z/V & (B_xC_y-B_yC_x)/V\\ 0 & 1/B_y & -A_xC_y/V\\ 0 & 0 & 1/C_z\end{pmatrix}=\frac{1}{a}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&a/c\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F}^{-1}=\begin{pmatrix}a&0&0\\0&a&0\\0&0&c\end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\varphi(\theta)=\mathbf{F\Phi}_z(\theta)\mathbf{F}^{-1}&=\frac{1}{a}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&a/c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta&-\sin\theta&0\\\sin\theta&\cos\theta&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&0&0\\0&a&0\\0&0&c\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}\cos\theta&-\sin\theta&0\\\sin\theta&\cos\theta&0\\0&0&1\end{pmatrix}=\mathbf{\Phi}_z(\theta)\end{aligned}$$

となって，$\mathbf{F}$ は影響を及ぼさないことがわかる。

問題 5.3

3 章で扱った種々の対称操作は，いずれも対角行列で表される操作であった。実格子上の操作を $\mathbf{A}_{\mathrm{real}}$ と書けば，分率座標上の操作 $\mathbf{A}_{\mathrm{frac}}$ は以下のようになる。

$$\mathbf{A}_{\mathrm{frac}} = \mathbf{F}\mathbf{A}_{\mathrm{real}}\mathbf{F}^{-1} = \begin{pmatrix} 1/A_x & -B_xC_z/V & (B_xC_y - B_yC_x)/V \\ 0 & 1/B_y & -A_xC_y/V \\ 0 & 0 & 1/C_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_x & B_x & C_x \\ 0 & B_y & C_y \\ 0 & 0 & C_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_1 & \dfrac{B_x}{A_x}(a_1 - a_2) & \dfrac{C_x}{A_x}(a_1 - a_3) + \dfrac{B_xC_y}{A_xB_y}(a_3 - a_2) \\ 0 & a_2 & \dfrac{C_y}{B_y}(a_2 - a_3) \\ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix}$$

三斜晶系では対称操作は並進と反転のみで，それぞれ $a_1 = a_2 = a_3$ なので $\mathbf{A}_{\mathrm{real}} = \mathbf{A}_{\mathrm{frac}}$ である。

単斜晶系（b-unique）では，$B_x = 0, C_y = 0$ なので，$\mathbf{A}_{\mathrm{frac}}$ はさらに限定されて

$$\mathbf{A}_{\mathrm{frac}} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dfrac{C_x}{A_x}(a_1 - a_3) \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix}$$

となる。b 軸を主軸とする二回回転および鏡映では $a_1 = a_3$ なので $\mathbf{A}_{\mathrm{real}} = \mathbf{A}_{\mathrm{frac}}$ である。これらの対称操作と並進・反転の結合で生じる 2_1 らせん，映進も当然 $\mathbf{A}_{\mathrm{real}} = \mathbf{A}_{\mathrm{frac}}$ となる。

問題 5.4

$$C_4(c:u',v',*) = t(u',v',0) \circ C_4(c:0,0,*) \circ t(-u',-v',0)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & u' \\ 0 & 1 & 0 & v' \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -u' \\ 0 & 1 & 0 & -v' \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & u'+v' \\ 1 & 0 & 0 & -u'+v' \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

問題 5.5

ある点$(u', v', 0)$を中心とした 2 回回転は

$$C_2(c:u',v',*)\mathbf{x} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 2u' \\ 0 & -1 & 0 & 2v' \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix}$$

となる。したがって，2 回回転と並進の結合で派生する操作は，次のようになる。

$t(u,v,0) \circ C_2(c:0,0,*) = C_2(c:u/2,v/2,*)$

u, v がともに整数ならば，単位格子内で可能な u', v'の組み合わせは

$u' = 0, 1/2, v' = 0, 1/2$

であり，$(1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 0), (0, 1/2, 0)$を通る 2 回軸も存在する。

問題 5.6

三方晶，六方晶では $B_x = A_x/2$, $B_y = A_x\sqrt{3}/2$, $C_x = C_y = 0$ なので，$A_x = a$, $C_z = \mathrm{c}$ として $\mathbf{F}$, $\mathbf{F}^{-1}$ に代入する。

問題 5.7

$$\varphi_{\mathrm{h}}(\theta) = \mathbf{F}_{\mathrm{h}}\mathbf{\Phi}_z(\theta)\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}$$

$$= \begin{pmatrix} 1/a & \sqrt{3}/3a & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3}/3a & 0 \\ 0 & 0 & 1/c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & -a/2 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}a/2 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$$

を計算して与式を得る。

問題 5.8

#	$+x\text{-}y$	$+x$	$+z$	$C_6(c\text{: }0, 0, *)$
#	$-y$	$+x-y$	$+z$	$C_6^2(c\text{: }0, 0, *) = C_3(c\text{: }0, 0, *)$
#	$-x$	$-y$	$+z$	$C_6^3(c\text{: }0, 0, *) = C_2(c\text{: }0, 0, *)$
#	$-x+y$	$-x$	$+z$	$C_6^4(c\text{: }0, 0, *) = C_3^2(c\text{: }0, 0, *)$
#	$+y$	$-x+y$	$+z$	$C_6^5(c\text{: }0, 0, *)$
#	$+x$	$+y$	$+z$	$C_6^6(c\text{: }0, 0, *) = E$

問題 5.9

$$t(u,v,0)\circ C_3(c:0,0,*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & u \\ 0 & 1 & 0 & v \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & u \\ 1 & -1 & 0 & v \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

より，$u = u' + v'$, $v = -u' + 2v'$を満たす u', v'を求めると，$u' = \dfrac{2u - v}{3}$, $v' = \dfrac{u + v}{3}$ となる。

問題 5.10

$$\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}\begin{pmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -a/2 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}a/2 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a/2 \\ \sqrt{3}a/6 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}\begin{pmatrix} 1/3 \\ 2/3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -a/2 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}a/2 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/3 \\ 2/3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{3}a/3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

これらの点はO, $\vec{A}$, $\vec{A}+\vec{B}$，またはO, $\vec{B}$, $\vec{A}+\vec{B}$の三点を結んだ正三角形単位の中心である。

問題 5.11

実格子上の点 X が，z 軸上の 3_1 らせん操作によって移される点は

$$
\left(\varPhi_z\left(\frac{\pi}{3}\right)\middle|\mathbf{c}/3\right)\mathbf{X}=\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 & 0\\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & c/3\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}X\\ Y\\ Z\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-X/2-\sqrt{3}Y/2\\ \sqrt{3}X/2-Y/2\\ Z+c/3\\ 1\end{pmatrix}
$$

となる。これは，**X** を xz 面に鏡映してから 3_2 らせん操作を 2 回行って移される点

$$
\left(\varPhi_z\left(\frac{\pi}{3}\right)\middle|2\mathbf{c}/3\right)^2\circ(\sigma_{xz}\mid\mathbf{o})\mathbf{X}=\begin{pmatrix}-1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0\\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 4c/3\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}X\\ -Y\\ Z\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-X/2-\sqrt{3}Y/2\\ -\sqrt{3}X/2+Y/2\\ Z+4c/3\\ 1\end{pmatrix}
$$

$$
=(\sigma_{xz}\mid\mathbf{o})\circ\left(\varPhi_z\left(\frac{\pi}{3}\right)\middle|\mathbf{c}/3\right)\mathbf{X}
$$

と，xz 面に関して鏡像の関係になる。同様にして，3_1 らせん操作を 2 回行って移される点

$$
\left(\varPhi_z\left(\frac{\pi}{3}\right)\middle|\mathbf{c}/3\right)^2\mathbf{X}
$$

は，**X** を xz 面に鏡映してから 3_2 らせん操作を行って移される点

$$
\left(\varPhi_z\left(\frac{\pi}{3}\right)\middle|2\mathbf{c}/3\right)\circ(\sigma_{xz}\mid\mathbf{o})\mathbf{X}
$$

と，xz 面に関して鏡像の関係になる。

問題 5.12

表 5-2 を参照して各操作の累乗で生じる操作を考えると，以下のようになる。

3_2 らせん： (⅔, ⅓, 0)と(⅓, ⅔, 0)を通る 3_2 軸

4_2 らせん： (½, ½, 0)を通る 4_2 らせん軸， (½, 0, 0), (0, ½, 0)を通る 2 回軸

4_2 らせん： (½, ½, 0)を通る 4_3 らせん軸， (½, 0, 0), (0, ½, 0)を通る 2_1 軸

6_2 らせん： (⅔, ⅓, 0)と(⅓, ⅔, 0)を通る 3_2 軸，(½, 0, 0), (0, ½, 0), (½, ½, 0)を通る 2 回軸

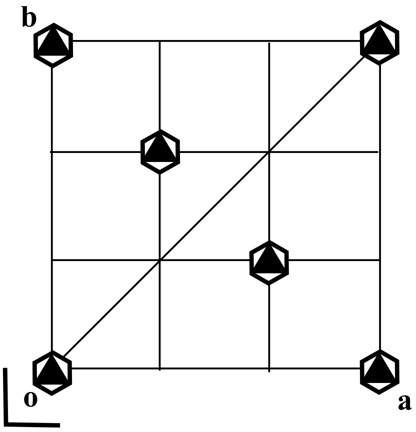
6_3 らせん： (⅔, ⅓, 0)と(⅓, ⅔, 0)を通る 3 回軸，(½, 0, 0), (0, ½, 0), (½, ½, 0)を通る 2_1 軸

6_4 らせん： (⅔, ⅓, 0)と(⅓, ⅔, 0)を通る 3_1 軸，(½, 0, 0), (0, ½, 0), (½, ½, 0)を通る 2 回軸

6_5 らせん： (⅔, ⅓, 0)と(⅓, ⅔, 0)を通る 3_2 軸，(½, 0, 0), (0, ½, 0), (½, ½, 0)を通る 2_1 軸

問題 5.13

#	$-x+y$	$-x$	$-z$	$C_{-6}(c\colon 0, 0, 0)$
#	$-y$	$+x-y$	$+z$	$C_{-6}^{2}(c\colon 0, 0, 0) = C_3(c\colon 0, 0, *)$
#	$+x$	$+y$	$-z$	$C_{-6}^{3}(c\colon 0, 0, 0) = m(c)$
#	$-x+y$	$-x$	$+z$	$C_{-6}^{4}(c\colon 0, 0, 0) = C_3^{2}(c\colon 0, 0, *)$
#	$-y$	$+x-y$	$-z$	$C_{-6}^{5}(c\colon 0, 0, 0)$
#	$+x$	$+y$	$+z$	$C_{-6}^{6}(c\colon 0, 0, 0)$



問題 5.14

求める変換は，**a**+**b** を a 軸に一致させるような変換（−π/4 回転）を施した後に a 軸の周りに C_2 回転させ，最後に a 軸を **a**+**b** に一致させるような変換（π/4 回転）を施す合成変換である。

$$C_2(a+b:0,0,0) = \left(\varphi_t\left(\frac{\pi}{4}\right)\middle|\mathbf{o}\right)\circ C_2(a:*,0,0)\circ\left(\varphi_t\left(\frac{\pi}{4}\right)\middle|\mathbf{o}\right)^{-1}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

問題 5.15

求める変換は，$C_2(a+b\text{: }0, 0, 0)$に続いて **a**+**b** 方向に 1/2 単位並進させる変換だから。

問題 5.16

a−**b** 上の 2_1 らせんを表す変換は

$$t(1/2,-1/2,0)\circ C_2(a-b:0,0,0) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1/2 \\ -1 & 0 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

であり，これが(u', u', w')を通るように平行移動すると，その変換は

$$2_1(a-b:u',u',w')\mathbf{x} = t(u',u',w')\circ 2_1(a-b:0,0,0)\circ t(-u',-u',-w')\mathbf{x}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1/2+2u' \\ -1 & 0 & 0 & -1/2+2u' \\ 0 & 0 & -1 & 2w' \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2+2u'-y \\ -1/2+2u'-x \\ 2w'-z \\ 1 \end{pmatrix}$$

と書ける。ここで $u' = ¼$とすると

$$
2_1(a-b:1/4,1/4,w')=\begin{pmatrix}0 & -1 & 0 & 1\\ -1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 2w'\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}
$$

となるので，(0, 0, w')を通る分角 2 回回転と等価であることがわかる。すなわち(¼, ¼, 0), (¾, ¾, 0), (¼, ¼, ½), (¾, ¾, ½)を通る 4 本の 2_1 軸は，原点を通る **a−b** 上の分角 2 回軸に付随した操作である。

問題 5.17

求める変換は，三方晶の配向-i と配向-ii における分角 2 回軸をあわせたものに等しい。例えば実格子上の 2**A**+**B**（$\sqrt{3}x+y$）方向に伸びている 2 回軸について，まず回転行列の部分を計算すると

$$
\mathbf{F}_\mathrm{h}\circ\Phi_z(\pi/6)\circ\Phi_x(\pi)\circ\Phi_z(-\pi/6)\circ\mathbf{F}_\mathrm{h}^{-1}
$$

$$
=\frac{1}{4}\mathbf{F}_\mathrm{h}\begin{pmatrix}\sqrt{3} & -1 & 0\\ 1 & \sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{3} & 1 & 0\\ -1 & \sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\mathbf{F}_\mathrm{h}^{-1}
$$

$$
=\begin{pmatrix}1/a & \sqrt{3}/3a & 0\\ 0 & 2\sqrt{3}/3a & 0\\ 0 & 0 & 1/c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & -a/2 & 0\\ 0 & \sqrt{3}a/2 & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 1 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}
$$

したがってアフィン変換の行列は

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

となる。他も同様にして

$$
\begin{pmatrix}1 & -1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0 & 0\\ -1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0 & -1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\begin{pmatrix}-1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}
$$

を得る。

問題 5.18

ヒントより，求める変換の回転行列の部分は，(1)c 軸周りの−45°回転，(2)b 軸周りの−α回転，(3)c 軸周りの 120°回転，(4) b 軸周りのα回転，(5) c 軸周りの 45°回転を連続で行った操作に等しい。

$$\varphi_c(\pi/4)\circ\varphi_b(\alpha)\circ\varphi_c(2\pi/3)\circ\varphi_b(-\alpha)\circ\varphi_c(-\pi/4)$$

$$=\varphi_c(\pi/4)\circ\begin{pmatrix}1/\sqrt{3} & 0 & \sqrt{2}/\sqrt{3}\\ 0 & 1 & 0\\ -\sqrt{2}/\sqrt{3} & 0 & 1/\sqrt{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/\sqrt{3} & 0 & -\sqrt{2}/\sqrt{3}\\ 0 & 1 & 0\\ \sqrt{2}/\sqrt{3} & 0 & 1/\sqrt{3}\end{pmatrix}\circ\varphi_c(-\pi/4)$$

$$=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0\\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0\\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

よって求めるアフィン変換は

$$C_3(a+b+c)=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

となる。

問題 5.19

$$C_3{}^3(a+b+c)=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

問題 5.20

求める変換は，$C_3(a+b+c)$に続いて **a**+**b**+**c** 方向に 1/3 単位並進させる変換だから。

問題 5.21

$$3_2(a+b+c:u',-u',0)=t(u',-u',0)\circ 3_2(a+b+c:0,0,0)\circ t(-u',u',0)$$

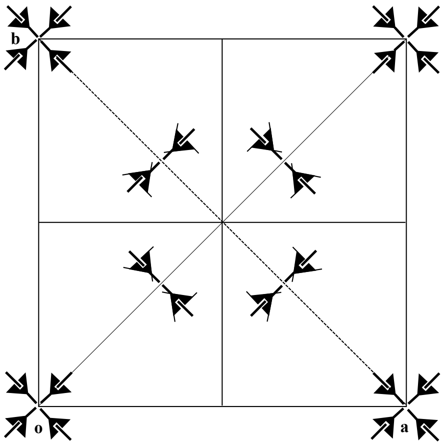
$$=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & u'\\ 0 & 1 & 0 & -u'\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 2/3\\ 1 & 0 & 0 & 2/3\\ 0 & 1 & 0 & 2/3\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & -u'\\ 0 & 1 & 0 & u'\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 2/3+u'\\ 1 & 0 & 0 & 2/3-2u'\\ 0 & 1 & 0 & 2/3+u'\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

この式で $u'=1/3$ とすると，$3_2(a+b+c:1/3,2/3,0)=t(1,0,1)\circ C_3(a+b+c:0,0,0)$ となって，対頂 3 回回転と単位並進との結合で表せる。したがって(1/3, 2/3, 0)を通る **a**+**b**+**c** 方向の対頂 3_2 らせん軸は，(0,0,0)を通る対頂 3 回軸に付随する対称要素である。他の点を通る 3_2 軸についても同様に示すことができる。

問題 5.22

下図参照。



問題 5.23

$$m(a-b) = i(0,0,0)\circ C_2(a-b:0)$$

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

$$m(a+b) = i(0,0,0)\circ C_2(a+b:0)$$

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

問題 5.24

原点を通り，**a**−**b** に垂直な c 映進面による変換は，$m(a-b)$と $t(0, 0, 1/2)$の結合なので

$$c(a-b) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と書ける。この映進面に平行で(1/4, 3/4, 0)を通る，**a**+**b**+**c** 方向の映進面は，点(x, y, z)を **a**−**b** 方向に¼平行移動させた後に $t(½, ½, ½)$ と $m(a-b)$を順に作用させ，再度 **a**−**b** 方向に−¼平行移動させればよい。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1/4 \\ 0 & 1 & 0 & 1/4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1/4 \\ 0 & 1 & 0 & -1/4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

この変換は $c(a-b)$に続いて $t(0,\ 1,\ 0)$を施すのと同じことだから，この映進面は $c(a-b)$映進面に付随する対称要素である。

問題 5.25

$m(b//a-b)$の鏡映部分の行列は

$$\mathbf{F}_{\mathrm{h}}\circ\Phi_z(\pi/6)\circ\sigma_{zx}\circ\Phi_z(-\pi/6)\circ\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}$$

$$=\frac{1}{4}\mathbf{F}_{\mathrm{h}}\begin{pmatrix}\sqrt{3} & -1 & 0\\ 1 & \sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{3} & 1 & 0\\ -1 & \sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}$$

$$=\begin{pmatrix}1/a & \sqrt{3}/3a & 0\\ 0 & 2\sqrt{3}/3a & 0\\ 0 & 0 & 1/c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & -a/2 & 0\\ 0 & \sqrt{3}a/2 & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 1 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

となるので，アフィン変換は

$$m(b//a-2b)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 1 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\ x-y\\ z\\ 1\end{pmatrix}$$

となる。$m(a+b)$の鏡映部分の行列は

$$\mathbf{F}_{\mathrm{h}}\circ\Phi_z(-\pi/6)\circ\sigma_{zx}\circ\Phi_z(\pi/6)\circ\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}$$

$$=\frac{1}{4}\mathbf{F}_{\mathrm{h}}\begin{pmatrix}\sqrt{3} & 1 & 0\\ -1 & \sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{3} & -1 & 0\\ 1 & \sqrt{3} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}$$

$$=\begin{pmatrix}1/a & \sqrt{3}/3a & 0\\ 0 & 2\sqrt{3}/3a & 0\\ 0 & 0 & 1/c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0\\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & -a/2 & 0\\ 0 & \sqrt{3}a/2 & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -1 & 0\\ -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

となるので，アフィン変換は

$$m(a+b)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}0 & -1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-y\\ -x\\ z\\ 1\end{pmatrix}$$

となる。以上より与えられた等価点が確かめられた。

問題 5.26

$m(a+2b// b)$の鏡映部分の行列は

$$\mathbf{F}_{\mathrm{h}}\circ\sigma_{zx}\circ\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}$$

$$=\begin{pmatrix}1/a & \sqrt{3}/3a & 0\\ 0 & 2\sqrt{3}/3a & 0\\ 0 & 0 & 1/c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & -a/2 & 0\\ 0 & \sqrt{3}a/2 & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & -1 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

となるので，アフィン変換は

$$m(a+2b//b)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}1&-1&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x-y\\-y\\z\\1\end{pmatrix}$$

となる。$m(a-b)$の鏡映部分の行列は

$$\mathbf{F}_{\mathrm{h}}\circ\Phi_z(-\pi/6)\circ\sigma_{zx}\circ\Phi_z(\pi/6)\circ\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}$$

$$=\frac{1}{4}\mathbf{F}_{\mathrm{h}}\begin{pmatrix}\sqrt{3}&1&0\\-1&\sqrt{3}&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{3}&-1&0\\1&\sqrt{3}&0\\0&0&1\end{pmatrix}\mathbf{F}_{\mathrm{h}}^{-1}$$

$$=\begin{pmatrix}1/a&\sqrt{3}/3a&0\\0&2\sqrt{3}/3a&0\\0&0&1/c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1/2&\sqrt{3}/2&0\\\sqrt{3}/2&1/2&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&-a/2&0\\0&\sqrt{3}a/2&0\\0&0&c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

となるので，アフィン変換は

$$m(a-b)\mathbf{x}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y\\x\\z\\1\end{pmatrix}$$

となる。以上より与えられた等価点が確かめられた。

問題 5.27

a−**b** に垂直で(1/4, 3/4, 0)を通る n 映進面による変換は，点(x, y, z)を **a**−**b** 方向に¼平行移動させた後に t(½, ½, 0) と $m(a-b)$を順に作用させ，再度 **a**−**b** 方向に−¼平行移動させればよい。

$$\begin{pmatrix}1&0&0&-1/4\\0&1&0&1/4\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&1/2\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0&1/4\\0&1&0&-1/4\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&1\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

この変換は $m(a-b)$に続いて t(0, 1, 0)を施すのと同じことだから，この映進面は $m(a-b)$映進面に付随する対称要素である。

a+**b** に垂直で(1/4, 1/4, 0)を通る n 映進面による変換は，点(x, y, z)を **a**+**b** 方向に¼平行移動させた後に t(½, -½, 0) と $m(a+b)$を順に作用させ，再度 **a**+**b** 方向に−¼平行移動させればよい。

$$\begin{pmatrix}1&0&0&-1/4\\0&1&0&-1/4\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&1&0&-1/2\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0&1/4\\0&1&0&1/4\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\-1&0&0&-1\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

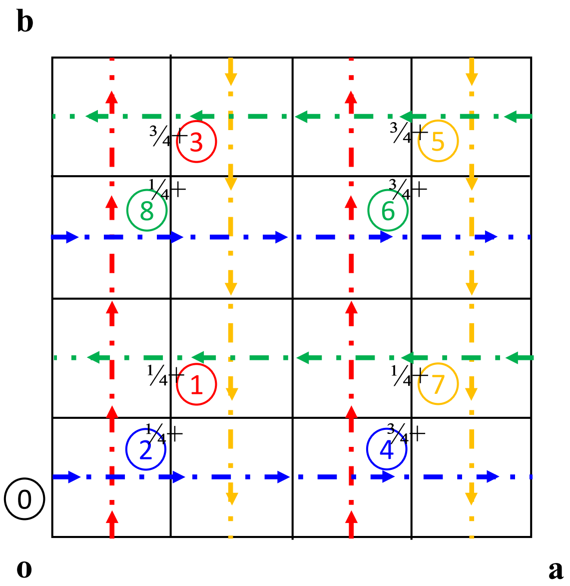
この変換は $m(a+b)$に続いて t(0, −1, 0)を施すのと同じことだから，この映進面は $m(a+b)$映進面に付随する対称要素である。

問題 5.28

$Fdd2$ 群の d 映進操作に以下のように番号を振る。

1	$\frac{1}{4}-x$	$\frac{1}{4}+y$	$\frac{1}{4}+z$	$d_+(a/8)$
2	$\frac{1}{4}+x$	$\frac{1}{4}-y$	$\frac{1}{4}+z$	$d_+(b/8)$
3	$\frac{1}{4}-x$	$\frac{3}{4}+y$	$\frac{3}{4}+z$	$d_+{}^3(a/8)$
4	$\frac{3}{4}+x$	$\frac{1}{4}-y$	$\frac{3}{4}+z$	$d_+{}^3(b/8)$
5	$\frac{3}{4}-x$	$\frac{3}{4}+y$	$\frac{3}{4}+z$	$d_-(3a/8)$
6	$\frac{3}{4}+x$	$\frac{3}{4}-y$	$\frac{3}{4}+z$	$d_-(3b/8)$
7	$\frac{3}{4}-x$	$\frac{1}{4}+y$	$\frac{1}{4}+z$	$d_-{}^3(3a/8)$
8	$\frac{1}{4}+x$	$\frac{3}{4}-y$	$\frac{1}{4}+z$	$d_-{}^3(3b/8)$

⓪で表した点が各番号の操作によって移される点を①，②，③…で表せば，以下の図のような配置になる（肩の数字は z 軸）。ここで，対称要素 $d_+(a/8)$, $d_+(b/8)$, $d_-(3a/8)$, $d_-(3b/8)$はそれぞれ赤，青，黄，緑の線で表しており，これらの映進面で移される点も同じ色で表している。



問題 5.29

F 格子の分率座標は，以下のように I 格子の分率座標に変換される。

$$\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{I}}=\mathbf{P}_{\mathrm{F}}^{\mathrm{I}}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{F}},\quad\begin{pmatrix}-1\\1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{I}}=\mathbf{P}_{\mathrm{F}}^{\mathrm{I}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{F}},\quad\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{I}}=\mathbf{P}_{\mathrm{F}}^{\mathrm{I}}\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{F}}$$

したがって

$$\begin{pmatrix}1&-1&0\\1&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}_{\mathrm{I}}=\mathbf{P}_{\mathrm{F}}^{\mathrm{I}}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}_{\mathrm{F}}\quad\Rightarrow\quad\mathbf{P}_{\mathrm{F}}^{\mathrm{I}}=\begin{pmatrix}1&-1&0\\1&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

となる。これは z 軸周りの$\pi/4$ 回転と$\sqrt{2}$ 倍操作の結合と等しい。座標軸を変換したとき，座標そのものは逆変換されることに注意。

$$(\mathbf{P}_{\mathrm{F}}^{\mathrm{I}})^{-1}=\mathbf{P}_{\mathrm{I}}^{\mathrm{F}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0\\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1 & 0\\ -1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix}$$

問題 5.30

$$d_+(u(a+b))_{\mathrm{I}}=(\mathbf{P}_{\mathrm{F}}^{\mathrm{I}}\,|\,\mathbf{o})d_+(ua)_{\mathrm{F}}(\mathbf{P}_{\mathrm{I}}^{\mathrm{F}}\,|\,\mathbf{o})$$
$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0 & 2u\\ 0 & 1 & 0 & 1/4\\ 0 & 0 & 1 & 1/4\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1 & 0 & 0\\ -1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -1 & 0 & -1/4+2u\\ -1 & 0 & 0 & 1/4+2u\\ 0 & 0 & 1 & 1/4\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$d_+(u(a-b))_{\mathrm{I}}=(\mathbf{P}_{\mathrm{F}}^{\mathrm{I}}\,|\,\mathbf{o})d_+(ub)_{\mathrm{F}}(\mathbf{P}_{\mathrm{I}}^{\mathrm{F}}\,|\,\mathbf{o})$$
$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 1/4\\ 0 & -1 & 0 & 2u\\ 0 & 0 & 1 & 1/4\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1 & 0 & 0\\ -1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0 & 1/4-2u\\ 1 & 0 & 0 & 1/4+2u\\ 0 & 0 & 1 & 1/4\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

6 章=======================================

問題 6.1

$P2_1/m$ 群の元に 4_1 操作を加えた集合の結合表をつくってみると，$i(0,0,0)\circ 4_1(c:0,0,*)=C_{\bar{4}}(c:0,0,3/8)$ により(0, 0, 3/8)を反転中心とする 4 回回反が生じ，$i(0,0,0)\circ 4_1{}^3(c:0,0,*)=C_{\bar{4}}{}^3(c:0,0,1/8)$ により(0, 0, 1/8)を反転中心とする 4 回回反が生じることがわかる。さらに，$C_{\bar{4}}(c:0,0,3/8)\circ C_{\bar{4}}{}^3(c:0,0,1/8)=t(0,0,1/2)$ となるので，この単位格子の c 軸ははもとの長さの 1/2 に取ることができる。このとき $4_1(c: 0,0,*)$は $4_2(c: 0,0,*)$に変わり，$C_{\bar{4}}(c:0,0,3/8)$ は $C_{\bar{4}}(c:0,0,3/4)$ に変わる。
このようにしてできる集合は，$P4_2/m$ 群をつくることになる。

問題 6.2

例えば

$$C_4(c:0,0,*)\circ C_2(a:*,0,0)=\begin{pmatrix}0 & -1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=C_2(a+b:0)$$

となる。他も同様。

問題 6.3

例えば

$$C_4(c:1/2,0,*)\circ 2_1(a:*,1/4,0)=\begin{pmatrix}0&-1&0&1/2\\1&0&0&1/2\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&-1&0&1/2\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=C_2(a+b:0)$$

となる。他も同様。

問題 6.4

例えば, 4_1(c: 0, 0, *)と C_2(a: *, 0, 1/4)では

$$4_1(c:0,0,*)\circ C_2(a:*,0,1/4)=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&1/4\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&-1&3/4\\0&0&0&1\end{pmatrix}=C_2(a+b:3/8)$$

$$C_2(a:*,0,1/4)\circ 4_1(c:0,0,*)=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&1/4\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&-1&1/4\\0&0&0&1\end{pmatrix}=C_2(a-b:1/8)$$

であり, 非可換だとわかる。他も同様。

問題 6.5

例えば#92 $P4_12_12$ では, 以下の関係が成り立っている。

①	4_1(*c*: 0, 1/2, *)	2_1(*c*: 0, 1/2, *)	4_1^3(*c*: 0, 1/2, *)
4_1(*c*: 0, 1/2, *)	2_1(*c*: 0, 1/2, *)	4_1^3(*c*: 0, 1/2, *)	*E*
2_1 (*c*: 0, 1/2, *)	4_1^3(*c*: 0, 1/2, *)	*E*	4_1(*c*: 0, 1/2, *)
4_1^3(*c*: 0, 1/2, *)	*E*	4_1(*c*: 0, 1/2, *)	2_1(*c*: 0, 1/2, *)

②	2_1(*a*: *, ¼, ⅜)	2_1(*b*: ¼, *, ⅛)	C_2(*a*+*b*: 0)	C_2(*a*−*b*: ¼)
4_1(*c*: 0, 1/2, *)	C_2(*a*+*b*: 0)	C_2(*a*−*b*: ¼)	2_1(*b*: ¼, *, ⅛)	2_1(*a*: *, ¼, ⅜)
2_1 (*c*: 0, 1/2, *)	2_1(*b*: ¼, *, ⅛)	2_1(*a*: *, ¼, ⅜)	C_2(*a*−*b*: ¼)	C_2(*a*+*b*: 0)
4_1^3(*c*: 0, 1/2, *)	C_2(*a*−*b*: ¼)	C_2(*a*+*b*: 0)	2_1(*a*: *, ¼, ⅜)	2_1(*b*: ¼, *, ⅛)

④	$2_1(a: *, \frac{1}{4}, \frac{3}{8})$	$2_1(b: \frac{1}{4}, *, \frac{1}{8})$	$C_2(a+b: 0)$	$C_2(a-b: \frac{1}{4})$
$2_1(a: *, \frac{1}{4}, \frac{3}{8})$	E	$2_1\ (c: 0, 1/2, *)$	$4_1^3(c: 0, 1/2, *)$	$4_1(c: 0, 1/2, *)$
$2_1(b: \frac{1}{4}, *, \frac{1}{8})$	$2_1\ (c: 0, 1/2, *)$	E	$4_1(c: 0, 1/2, *)$	$4_1^3(c: 0, 1/2, *)$
$C_2(a+b: 0)$	$4_1(c: 0, 1/2, *)$	$4_1^3(c: 0, 1/2, *)$	E	$2_1\ (c: 0, 1/2, *)$
$C_2(a-b: \frac{1}{4})$	$4_1^3(c: 0, 1/2, *)$	$4_1(c: 0, 1/2, *)$	$2_1\ (c: 0, 1/2, *)$	E

問題 6.6

$P4_2cm$ 群では

$$4_2(c:0,0,*)\circ c(b)=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&1\\0&0&0&1\end{pmatrix}=m(a-b)$$

$P4_2nm$ 群では

$$4_2(c:0,1/2,*)\circ n(b/4)=\begin{pmatrix}0&-1&0&1/2\\1&0&0&1/2\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0&1/2\\0&-1&0&1/2\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&1\\0&0&1&1\\0&0&0&1\end{pmatrix}=m(a-b)$$

などにより $m(a-b)$が発生する。

問題 6.7

例えば#105 $P4_2mc$ では

$$4_2(c:0,0,*)\circ m(a)=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}=c(a+b)$$

などにより $c(a+b)$が発生する。

問題 6.8

$I4_1md$ 群において

$$4_1(c:-1/4,0,*)\circ m(a)=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\1&0&0&1/2\\0&0&1&1/4\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\-1&0&0&1/2\\0&0&1&1/4\\0&0&0&1\end{pmatrix}=d_+((a+b)/8)$$

である。これを含め，$d_+((a+b)/8)$を生じる組み合わせは，以下の8通り。

$d_+((a+b)/8)$
$= 4_1(c:-1/4,1/4,*)\circ m(a)$
$= 4_1{}^3(c:-1/4,1/4,*)\circ n(b/4)$
$= 4_3(c:1/4,1/4,*)\circ n(a/4)$
$= 4_3{}^3(c:1/4,1/4,*)\circ m(b)$
$= m(b)\circ 4_1(c:-1/4,1/4,*)$
$= n(a/4)\circ 4_1{}^3(c:-1/4,1/4,*)$
$= n(b/4)\circ 4_3(c:1/4,1/4,*)$
$= m(a)\circ 4_3{}^3(c:1/4,1/4,*)$

同様にして

$d_+((a-b)/8)$	$d_-(3(a-b)/8)$	$d_-(3(a+b)/8)$
$= 4_1(c:-1/4,1/4,*)\circ m(b)$	$= 4_1(c:-1/4,1/4,*)\circ n(b/4)$	$= 4_1(c:-1/4,1/4,*)\circ n(a/4)$
$= 4_1{}^3(c:-1/4,1/4,*)\circ n(a/4)$	$= 4_1{}^3(c:-1/4,1/4,*)\circ m(a)$	$= 4_1{}^3(c:-1/4,1/4,*)\circ m(b)$
$= 4_3(c:1/4,1/4,*)\circ n(b/4)$	$= 4_3(c:1/4,1/4,*)\circ m(b)$	$= 4_3(c:1/4,1/4,*)\circ m(a)$
$= 4_3{}^3(c:1/4,1/4,*)\circ m(a)$	$= 4_3{}^3(c:1/4,1/4,*)\circ n(a/4)$	$= 4_3{}^3(c:1/4,1/4,*)\circ n(b/4)$
$= m(a)\circ 4_1(c:-1/4,1/4,*)$	$= n(a/4)\circ 4_1(c:-1/4,1/4,*)$	$= n(b/4)\circ 4_1(c:-1/4,1/4,*)$
$= n(b/4)\circ 4_1{}^3(c:-1/4,1/4,*)$	$= m(b)\circ 4_1{}^3(c:-1/4,1/4,*)$	$= m(a)\circ 4_1{}^3(c:-1/4,1/4,*)$
$= n(a/4)\circ 4_3(c:1/4,1/4,*)$	$= m(a)\circ 4_3(c:1/4,1/4,*)$	$= m(b)\circ 4_3(c:1/4,1/4,*)$
$= m(b)\circ 4_3{}^3(c:1/4,1/4,*)$	$= n(b/4)\circ 4_3{}^3(c:1/4,1/4,*)$	$= n(a/4)\circ 4_3{}^3(c:1/4,1/4,*)$

の関係が得られる。

$I4_1cd$ 群においても同様に計算する。

問題 6.9

例えば，下記の組み合わせがある。

$$C_2(b:*,0,1/4)\circ C_{\bar{4}}(c:0,0,0)=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}=c(a+b)$$

$$C_2(a:*,0,1/4)\circ C_{\bar{4}}(c:0,0,0)=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

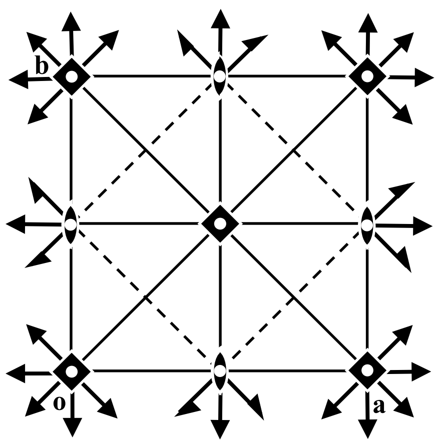
$$=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&1/2\\0&0&0&1\end{pmatrix}=c(a-b)$$

問題 6.10

	c	**a, b**					**a+b, a−b**		
	C_{-4} (C_2)	222 2_12_12	*mm*2	*ba*2	*cc*2	*nn*2	222 2_12_12	*mm*2 *nn*2	*cc*2 *n'n'*2
P−42*m*	○	△						○	
P−42*c*	○	△							○
$P{-}42_1m$	○	▽						○	
$P{-}42_1c$	○	▽							○
P−4*m*2	○		○				○		
P−4*c*2	○				○		○		
P−4*b*2	○			○			○		
P−4*n*2	○					○	○		
I−4*m*2	○		○			○	○		
I−4*c*2	○			○	○		○		
I−42*m*	○	△						○	○
I−42*d*	○								

問題 6.11

例えば#123 *P*4/*mmm* 群では対称要素の配置が下図のようになる。



この中で図 4-1 に示した関係にある面，軸，対称心を探しだせばよい。$\{m(a+b), C_2(a+b), i(0,0,0)\}$は $2/m$ 群をつくる。$\{n((a+b)/4), C_2(a+b), i(1/4,0,0)\}$は $2/n$ 群をつくる。$\{m(a+b), 2_1((a+b){:}\ 1/4, 0, 0), i(1/4,0,0)\}$は $2_1/m$ 群をつくる。$\{n((a+b)/4), 2_1((a+b){:}\ 1/4, 0, 0), i(0,0,0)\}$は $2_1/n$ 群をつくる。

問題 6.12

#149 $P312$ 群

	E	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	$C_2(a-b{:}0)$	$C_2(a+2b//b{:}0)$	$C_2(2a+b//a{:}0)$
E	E	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	$C_2(a-b{:}0)$	$C_2(a+2b//b{:}0)$	$C_2(2a+b//a{:}0)$
$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	E	$C_2(2a+b//a{:}0)$	$C_2(a-b{:}0)$	$C_2(a+2b//b{:}0)$
$C_3^2(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	E	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_2(a+2b//b{:}0)$	$C_2(2a+b//a{:}0)$	$C_2(a-b{:}0)$
$C_2(a-b{:}0)$	$C_2(a-b{:}0)$	$C_2(a+2b//b{:}0)$	$C_2(2a+b//a{:}0)$	E	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$
$C_2(a+2b//b{:}0)$	$C_2(a+2b//b{:}0)$	$C_2(2a+b//a{:}0)$	$C_2(a-b{:}0)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	E	$C_3(c{:}0,0,*)$
$C_2(2a+b//a{:}0)$	$C_2(2a+b//a{:}0)$	$C_2(a-b{:}0)$	$C_2(a+2b//b{:}0)$	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	E

#150 $P321$ 群

	E	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	$C_2(a+b{:}0)$	$C_2(a//2a-b{:}0)$	$C_2(b//a-2b{:}0)$
E	E	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0)$	$C_2(a+b{:}0)$	$C_2(a//2a-b{:}0)$	$C_2(b//a-2b{:}0)$
$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	E	$C_2(b//a-2b{:}0)$	$C_2(a+b{:}0)$	$C_2(a//2a-b{:}0)$
$C_3^2(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	E	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_2(a//2a-b{:}0)$	$C_2(b//a-2b{:}0)$	$C_2(a+b{:}0)$
$C_2(a+b{:}0)$	$C_2(a+b{:}0)$	$C_2(a//2a-b{:}0)$	$C_2(b//a\text{-}2b{:}0)$	E	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$
$C_2(a//2a-b{:}0)$	$C_2(a//2a\text{-}b{:}0)$	$C_2(b//a-2b{:}0)$	$C_2(a+b{:}0)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	E	$C_3(c{:}0,0,*)$
$C_2(b//a-2b{:}0)$	$C_2(b//a-2b{:}0)$	$C_2(a+b{:}0)$	$C_2(a//2a-b{:}0)$	$C_3(c{:}0,0,*)$	$C_3^2(c{:}0,0,*)$	E

問題 6.13

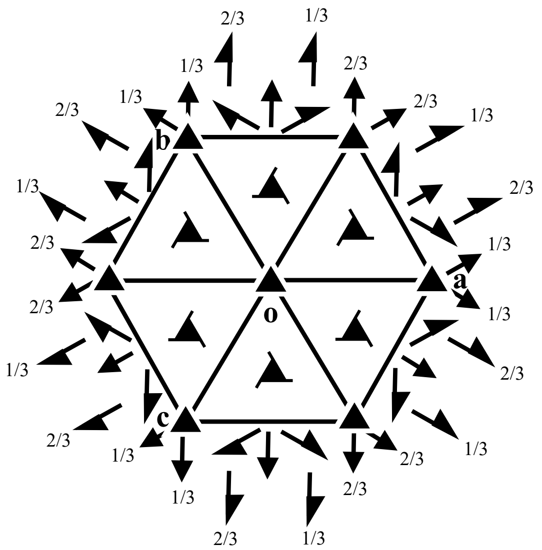
$$C_2(a-b:0)\circ m(a-b)=\begin{pmatrix}0&-1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=i(0,0,0)$$

$$C_2(a+2b//b:0)\circ m(a+2b//b)=\begin{pmatrix}-1&1&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&-1&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=i(0,0,0)$$

$$C_2(2a+b//a:0)\circ m(2a+b//a)=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\1&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=i(0,0,0)$$

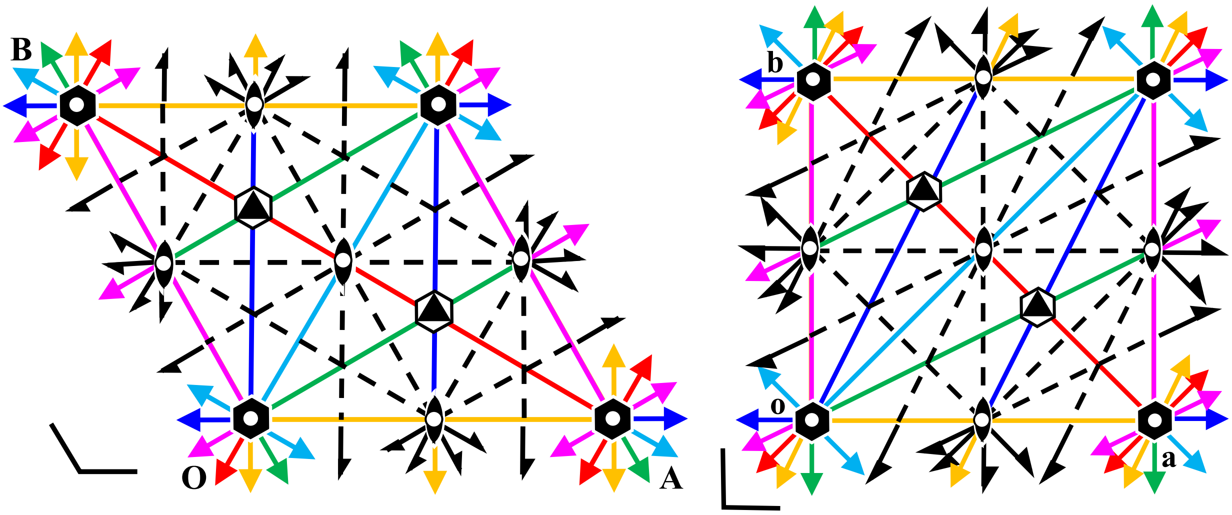
問題 6.14

図 6.6 の C_2 軸の中で単位格子内にあるもののみを残し，図 5.19 の C_3 軸，3_1 軸，3_2 軸を加えると，以下の図になる。



問題 6.15

下図のとおり。実格子上で直交する 2 回軸と鏡映面の組を同色で表した。



問題 6.16

対頂 3 回回転と, ½単位移動した対頂 3 回回転の二乗との結合によって下表のように 2_1 らせんが生じる。

	$C_3(a+b+c)$	$C_3(a-b-c)$	$C_3(-a+b-c)$	$C_3(-a-b+c)$
$C_3^2(a+b+c)$	E	$2_1(c$: 1/4, 0, *)	$2_1(a$: 1/4, 0, *)	$2_1(b$: 0, *, 1/4)
$C_3^2(a-b-c)$	$2_1(c$: 1/4, 0, *)	E	$2_1(b$: 0, *, 1/4)	$2_1(a$: *, 1/4, 0)
$C_3^2(-a+b-c)$	$2_1(a$: *, 1/4, 0)	$2_1(b$: 0, *, 1/4)	E	$2_1(c$: 1/4, 0, *)
$C_3^2(-a-b+c)$	$2_1(b$: 0, *, 1/4)	$2_1(a$: *, 1/4, 0)	$2_1(c$: 1/4, 0, *)	E

以上