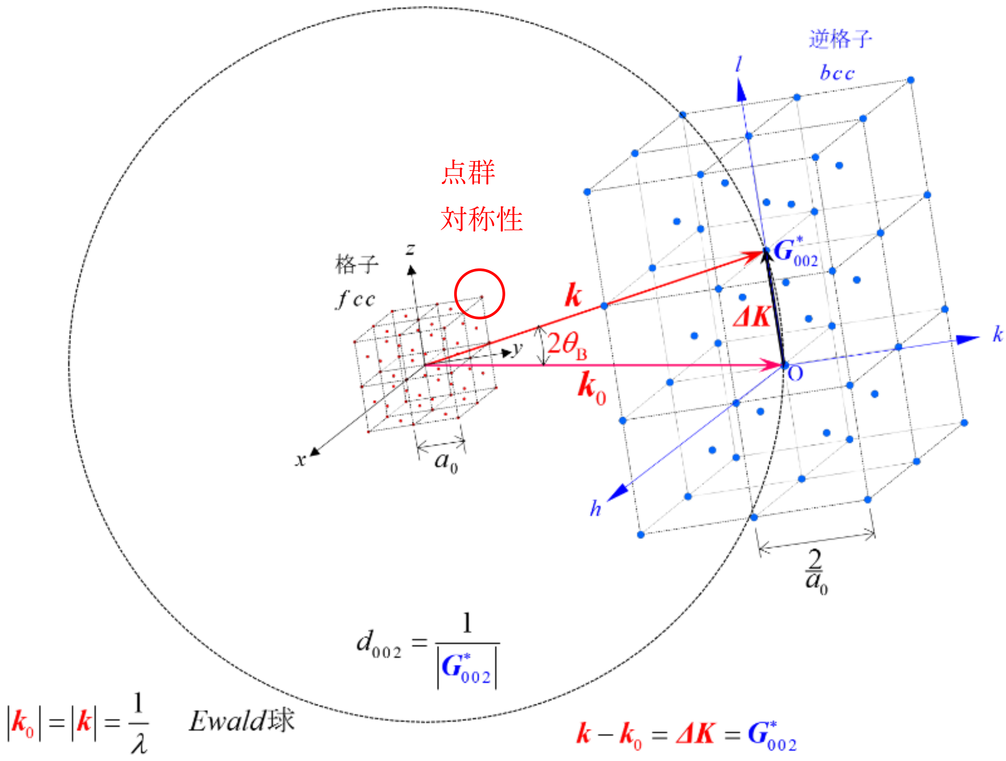

逆格子
bcc
点群
対称性
格子
fcc
G^*_{002}
k
ΔK
$2\theta_B$
k_0
O
a_0
$\frac{2}{a_0}$
$d_{002} = \frac{1}{|G^*_{002}|}$
$|k_0| = |k| = \frac{1}{\lambda}$
Ewald球
$k - k_0 = \Delta K = G^*_{002}$

対称性

§ 対称操作　symmetry operation

ある操作を行うともとの形に重なるとき，そのような操作を対称操作と呼ぶ.

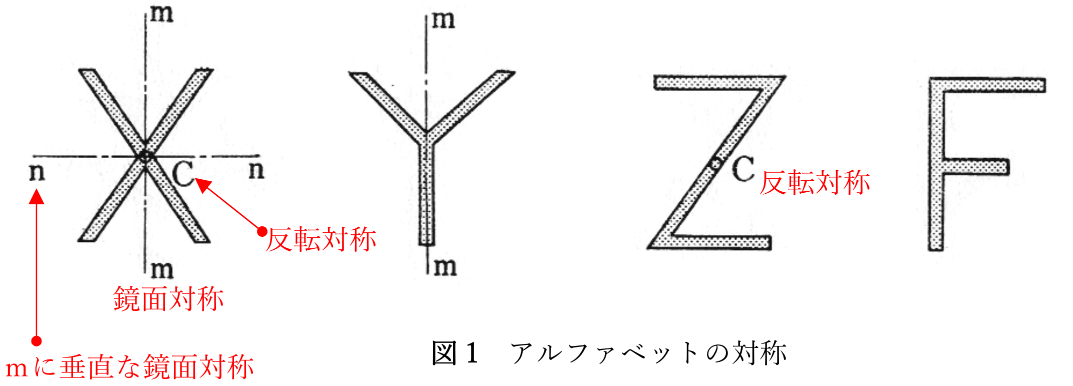
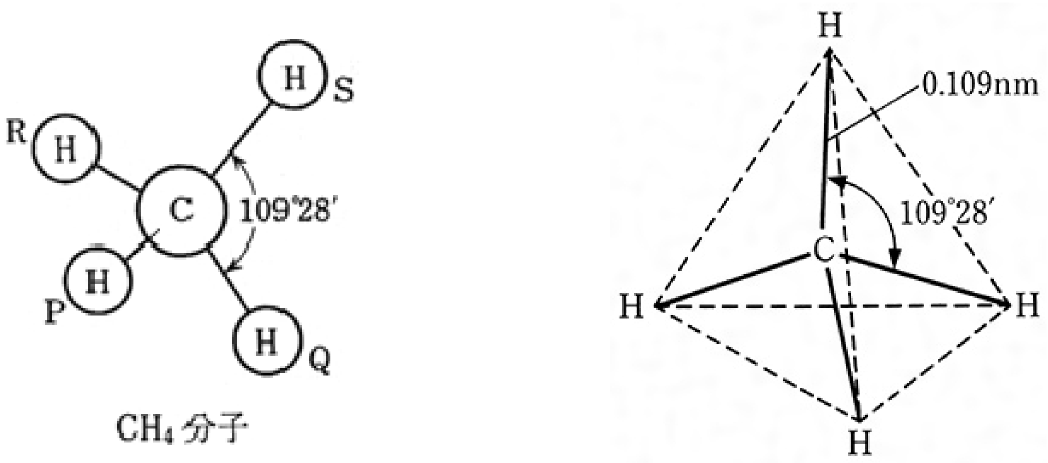


図 1　アルファベットの対称



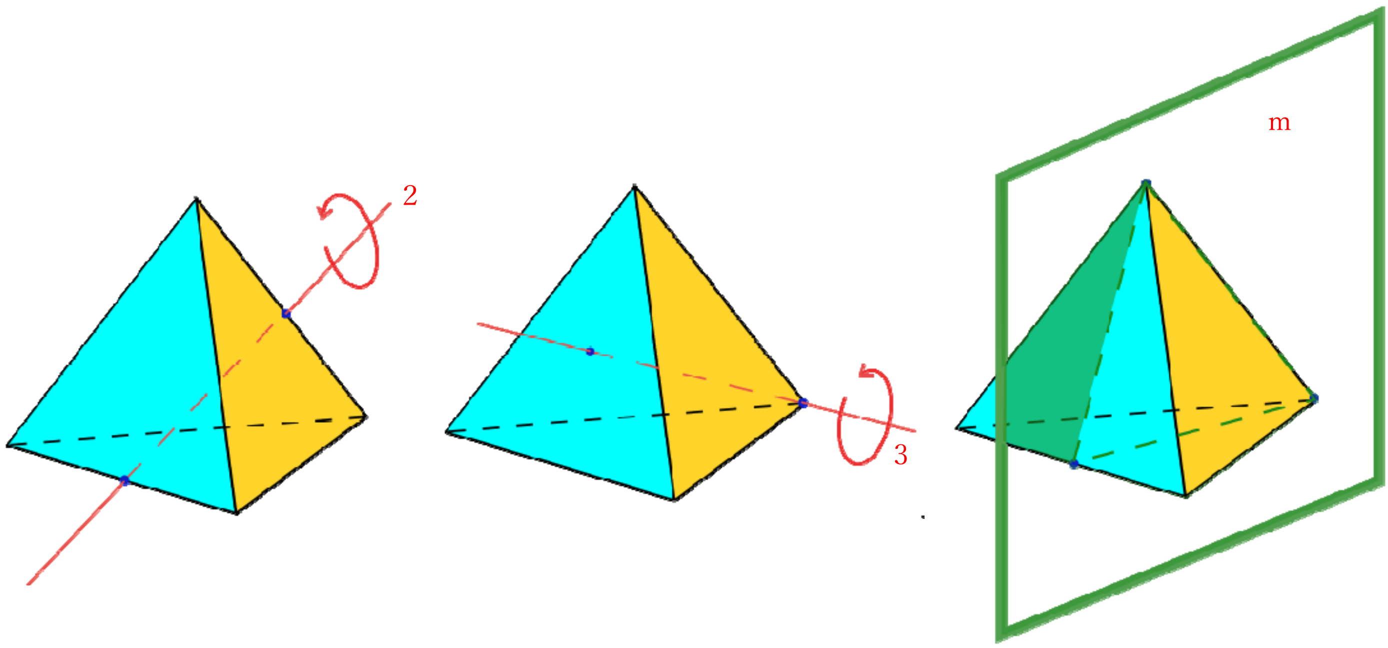
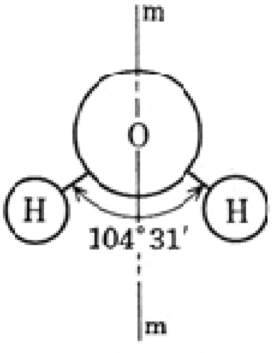
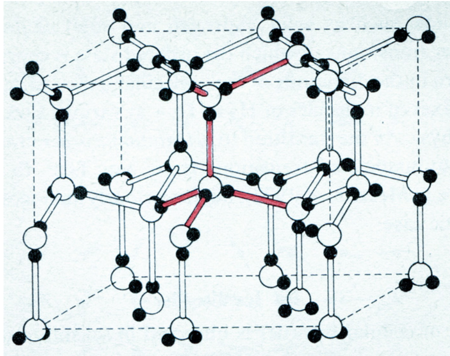
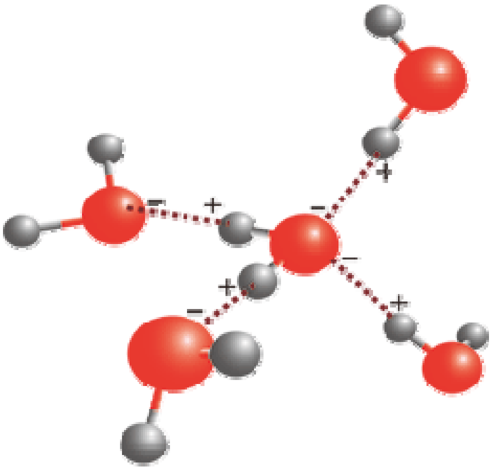


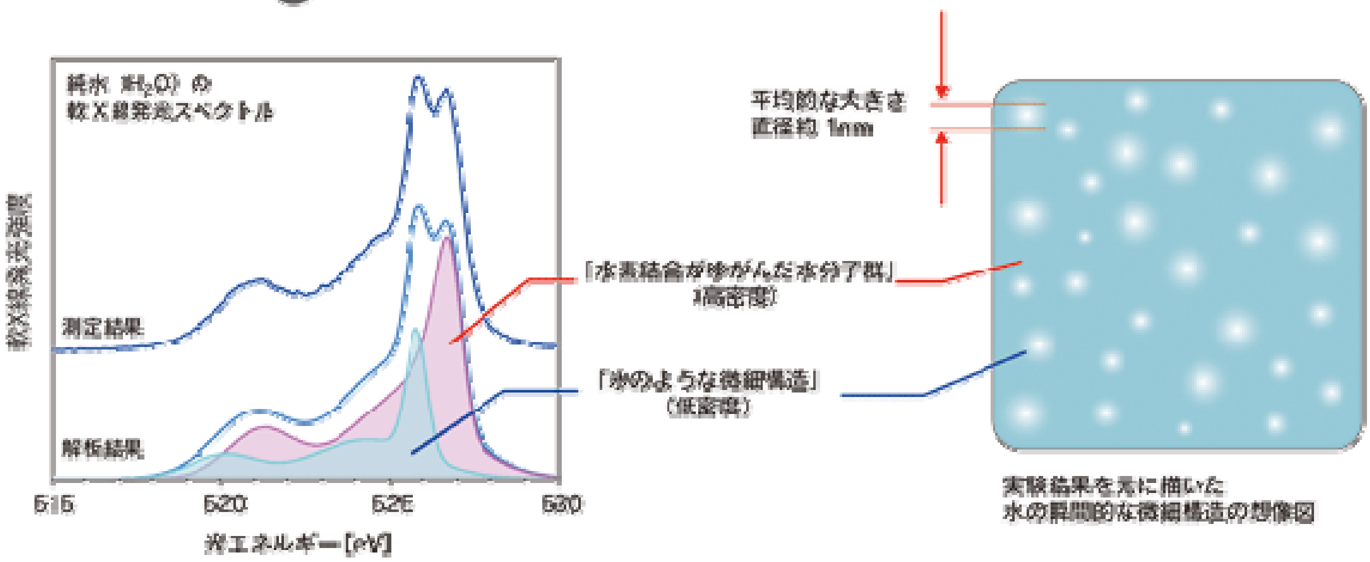
図 2　分子の対称性

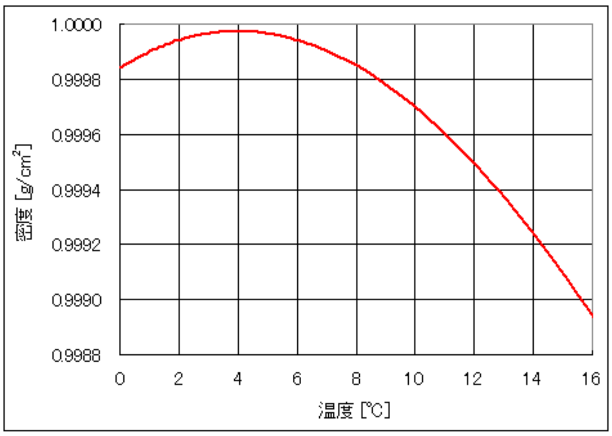

m
O
H
H
104°31′
m

H_2O分子






純水（H_2O）の
軟X線発光スペクトル
軟X線発光強度
測定結果
解析結果
515
520
525
530
発光エネルギー[eV]
平均的な大きさ
直径約 1nm
「水素結合がゆがんだ水分子群」
(高密度)
「氷のような微細構造」
(低密度)
実験結果を元に描いた
水の瞬間的な微細構造の想像図


1.0000
0.9998
0.9996
0.9994
0.9992
0.9990
0.9988
密度 [g/cm^3]
0
2
4
6
8
10
12
14
16
温度 [℃]

§　対称軸（axis of symmetry）　と　対称面（plane of symmetry）

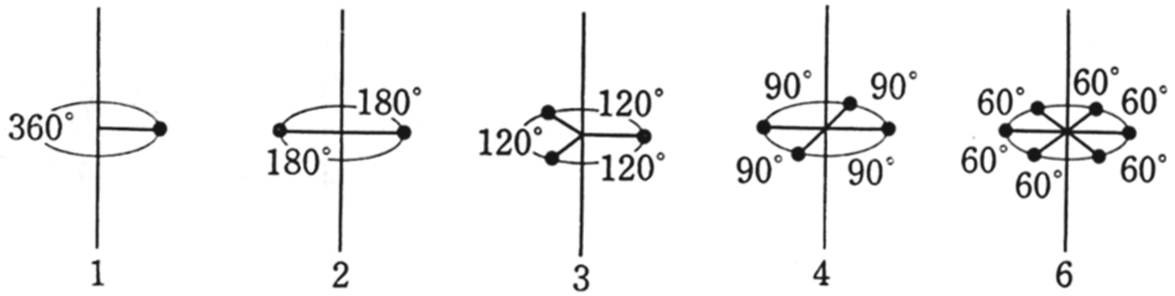


図 5　対称軸

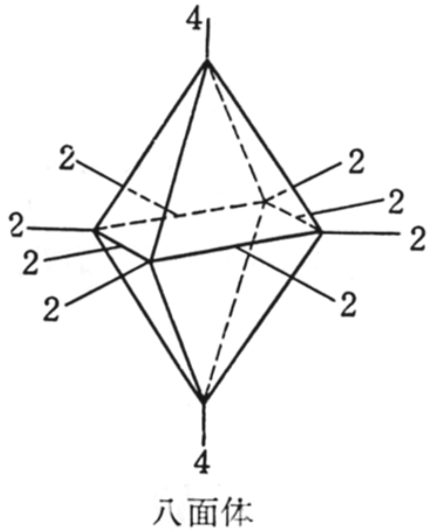


図 6　八面体の対称軸

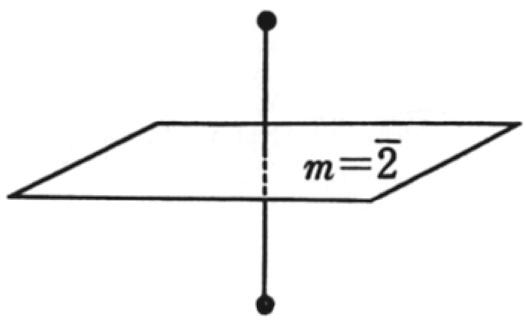


図 7　対称面（m）mirror

§　回映軸（rotation-reflection axis）

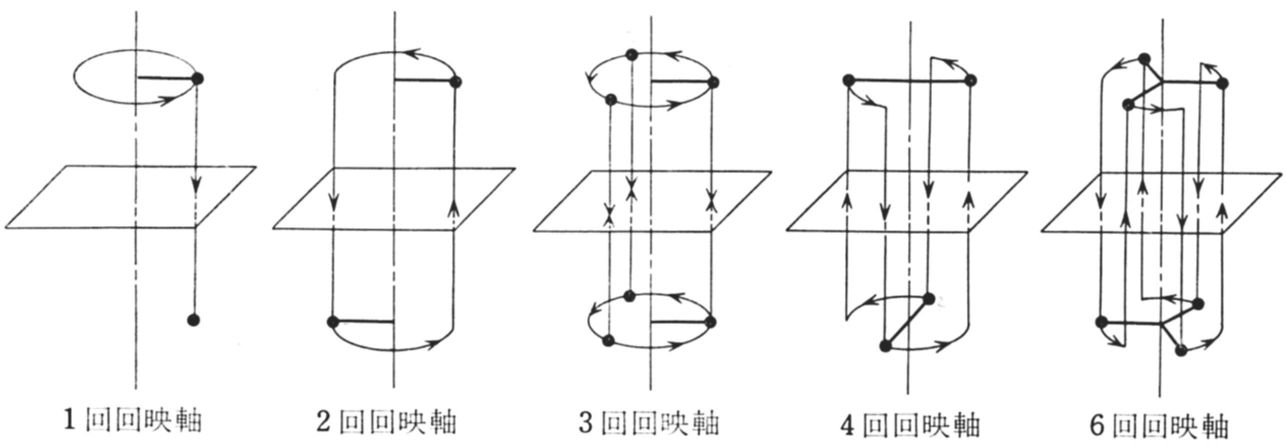


図 8　回映軸

§　対称心　(center of inversion)

$$\mathrm{A}\boldsymbol{r}=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-x\\ -y\\ -z\end{pmatrix}=-\boldsymbol{r}$$

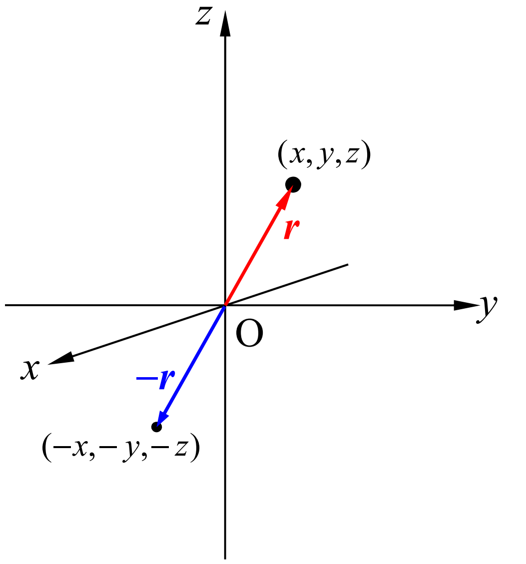


図 9　対称心

§　回反　(rotation-inversion)

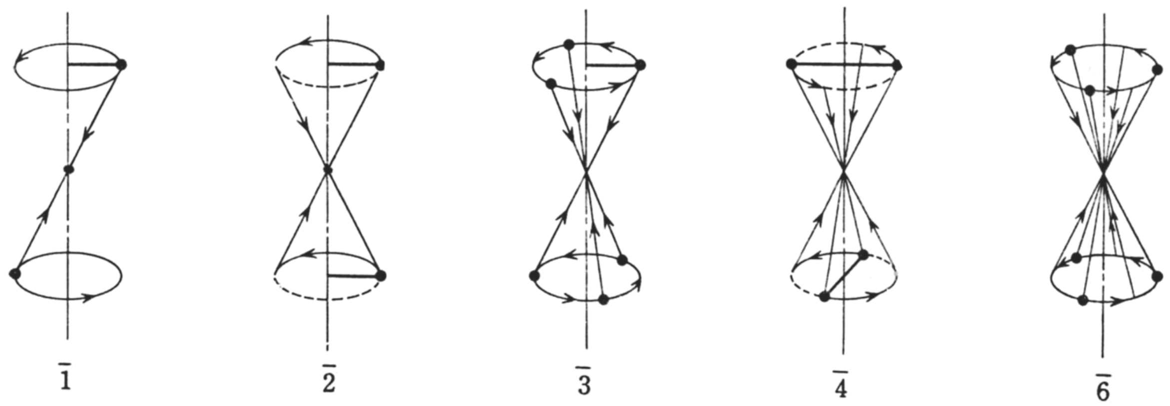


図 10　回反心，回反軸

§　対称要素

(対称軸：5）　＋　(対称面：1）　＋　(回映軸：5）　＋　(反転対称：1）　＋　(回反心：5）＝　合計 17
このうち，独立なものは＿＿＿＿種で，残りはその組み合わせで導かれる．
例えば，独立な対称要素を，対称軸：1，2，3，4，6，対称面：m，回反心：$\bar{1}$，$\bar{4}$　を選べば十分である．

1 回回映軸 ＝ m
2 回回映軸 ＝ $\bar{1}$ ＝ 反転対称
3 回回映軸 ＝ $3+m$
4 回回映軸 ＝ $\bar{4}$
6 回回映軸 ＝ $\bar{3}$ ＝ $3+\bar{1}$
$\bar{2}$ ＝ m
$\bar{6}$ ＝ $3+m$

対称軸		対称面	回映軸	反転対称	回反心＋回反軸
1	(C_1)	m (σ)	1 回回映軸 S_1	i	$\bar{1}$
2	(C_2)		2 回回映軸 S_2		$\bar{2}$
3	(C_3)		3 回回映軸 S_3		$\bar{3}$
4	(C_4)		4 回回映軸 S_4		$\bar{4}$
6	(C_6)		6 回回映軸 S_6		$\bar{6}$

§§　点群（point group)）と 晶族（crystal class）（結晶族（class of crystal symmetry)）

上述した_________種類の対称要素を組み合わせると不動点の周りに，__________種類の独立な種類の対称ができる．これらを点群（point group)と呼ぶ．これに従って，結晶の持つ対称性もまた _________種類　に分類される．その各々を結晶族，又は晶族と呼ぶ．この分類では巨視的な意味での結晶の対称を考えていて，空間格子の並進性は考慮していない．

§　空間投影

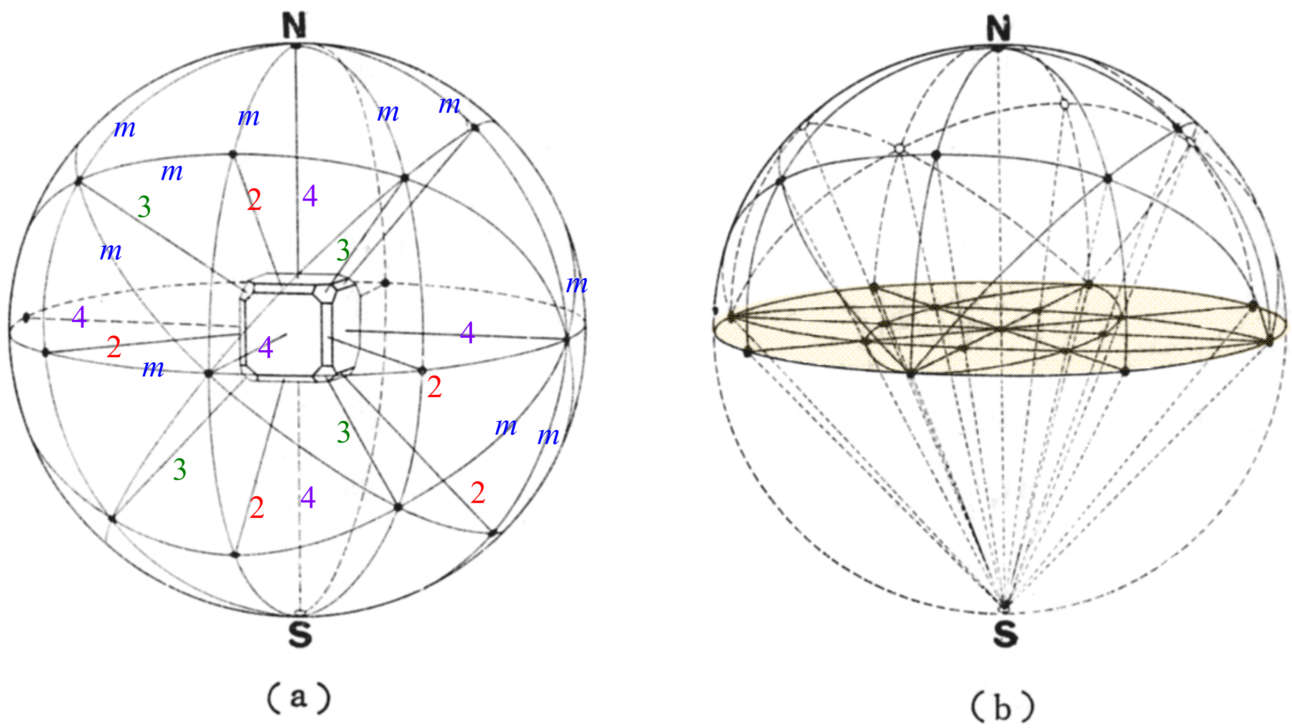


図 11　(a) 球面投影，　(b) ステレオ投影

(a) 球面投影　結晶の対称を表すのに空間投影を用いる．
　半径 1 の球の中心に結晶を置く．
　面の法線が球面と交わる点で結晶面を表す．
　球面上の二点間距離（大円に沿って測る）が面間角(rad)となる．

(b) ステレオ投影　球面投影を平面上に図示する方法．球面投影の北半球の点と南極点とを結ぶ直線が赤道面と交わる点をステレオ投影点と呼び，これを●で示す．
　一方，南半球上の点と北極点を結ぶ直線が赤道面と交わる投影点を○で示す．赤道面は円で示す．
　対称面 m となる大円＝太い実線，　対称面でない補助線＝細い実線又は破線　で示す．

§ 対称要素の記号と符号

表 1 にあるように，点群に含まれる対称要素は，

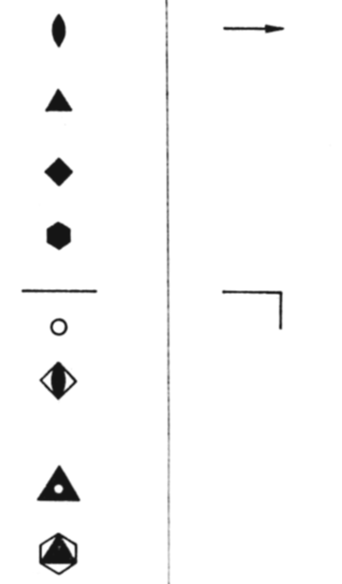
Hermann-Mauguin (H.M.)記号

あるいは，Schoenflies (S.)記号 により示す．

また，これらを図示するのに特殊符号（International Table） を用いる．

表 1　対称要素の記号と図示用の符号

対称要素	対称操作	H.M.の記号	S.の記号	符号 投影面に直交	号 投影面に平行
1 回対称軸	回転$\frac{2\pi}{1}$	1	C_1	なし	
2 回対称軸	回転$\frac{2\pi}{2}$	2	C_2		
3 回対称軸	回転$\frac{2\pi}{3}$	3	C_3		
4 回対称軸	回転$\frac{2\pi}{4}$	4	C_4		
6 回対称軸	回転$\frac{2\pi}{6}$	6	C_6		
対称面	反射	$m(\equiv\bar{2})$	C_s		
対称の中心	反転	$\bar{1}$	C_i		
4 回回反心	回転$\frac{2\pi}{4}$と反転	$\bar{4}$	S_4		
(独立でないもの)					
3 回回反軸	回転$\frac{2\pi}{3}$と反転	$\bar{3}$	$S_6\equiv C_{3i}$		
6 回回反軸	回転$\frac{2\pi}{6}$と反転	$\bar{6}(\equiv\frac{3}{m})$	$S_3\equiv C_{3h}$		



自習

https://www.youtube.com/watch?v=aKVaDVHR97M　　5:51

Assigning Point Groups to Molecules　　← 点群分類のフローチャート

§　３２種の点群

対称軸のみを対象要素とする点群（５種）

図５と同様である．図５をステレオ投影で示したものが図 12 である．

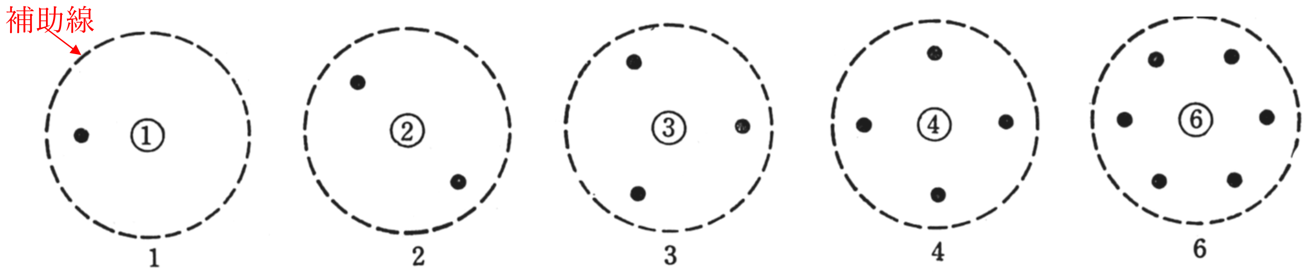


図 12

回反心のみを対象要素とする点群（5 種）

図 10 と同様である．図 10 をステレオ投影で示したものが図１３である．

3 / m は3回軸に垂直に対称面 m があることを示す．

↑3に⊥にm

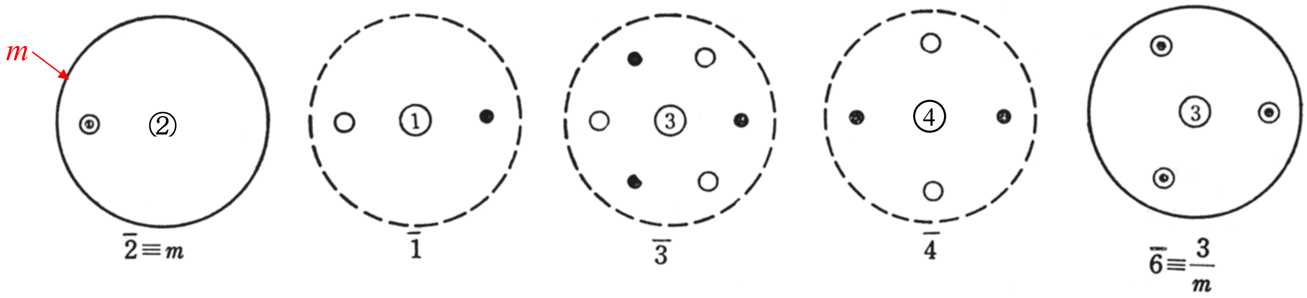


図 13

n 回軸と２ 回軸とが直交している点群（4 種）

２ 回軸に１本の２ 回軸を直交させると，必然的にこれら２本の２ 回軸に直交する３本目の２ 回軸があること

になる．これが点群 222 である．

3，４，６ 回軸に対して一本の２ 回軸を直交させると，それぞれ２，3，5本の２ 回軸が加わり，

点群 32，422，622 が生ずる．

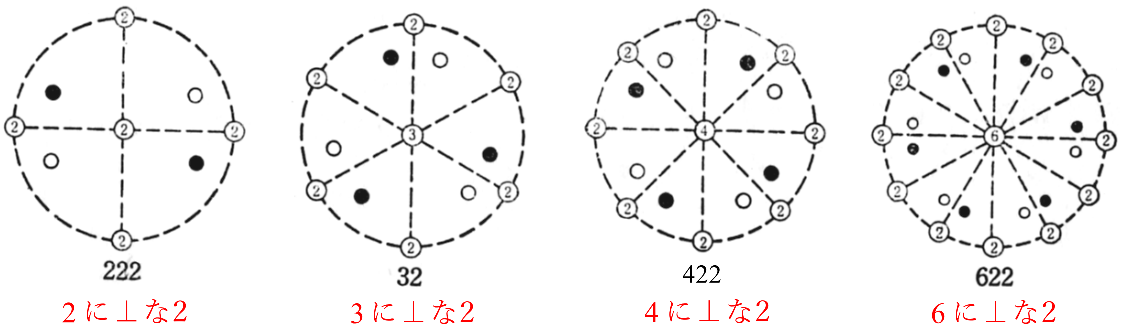
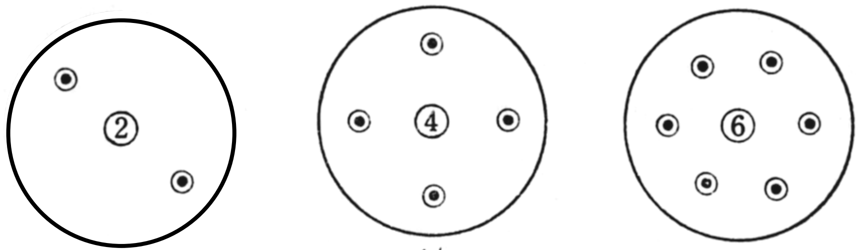


図 14

⊥

n 回軸に垂直な m を持つ点群（3 種）

3 / m はすでに図 13 に含まれている.



2 / m　　4 / m　　6 / m

2 に⊥な m　　4 に⊥な m　　6 に⊥な m

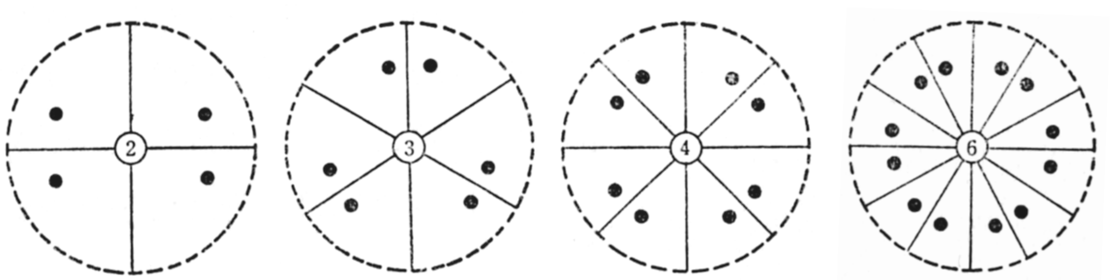
図 15

//

n 回軸に平行な m を持つ点群（4 種）

2 回軸に平行に m を置くと，必然的にこれに直交する m があることになり，点群 $2mm$ が生ずる.

3， 4， 6 回軸に対して平行に m を置くと，点群 $3m$， $4mm$， $6mm$ が生ずる.



$2mm$　　$3m$　　$4mm$　　$6mm$

2 に//な m　　3 に//な m　　4 に//な m　　6 に//な m

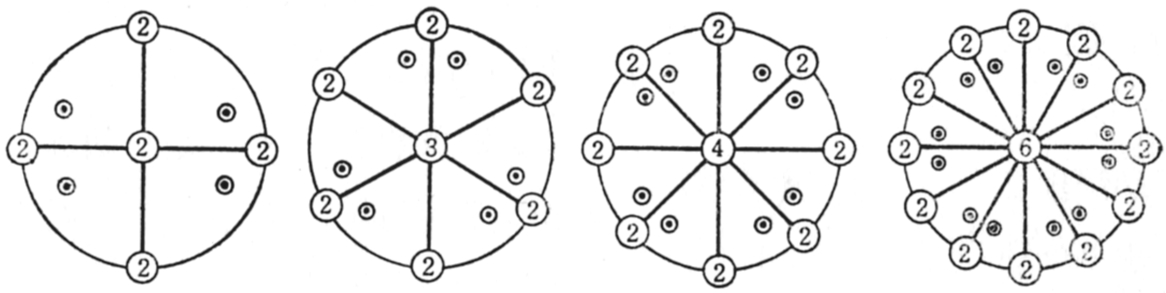
図 16

n 回軸と 2 回軸とが直交している点群 222，32，422，622（図 14）に n 回軸に垂直に m を入れた点群（4 種）

これは点群 $2mm$， $3m$， $4mm$， $6mm$ （図１６）において， n 回軸に垂直に m を入れたものと等価である.

222 に対する操作は結局， 2 本の対称軸を含む m が互いに直交した点群 mmm となる.

32 に対する操作では 6 回の回反軸に平行な 3 枚の m と回反軸に直交する 3 本の 2 回軸を持つ点群 $\bar{6}m2$ となる.



mmm　　$\bar{6}m2$　　$4/mmm$　　$6/mmm$

2 に⊥な 2　　3 に⊥な 2　　4 に⊥な 2　　6 に⊥な 2

図 17

点群 222，32（図１４）で水平な２ 回軸を二等分する m を入れた点群（図１８）

点群 222 に対するこの操作は，点群 $\bar{4}$ の４ 回回反軸に垂直に２ 回軸を入れたものと同じで，

４ 回回反軸を含む m ができる．点群 $\bar{3}$ の回反軸と平行に３枚の m を加えたものと同じである．

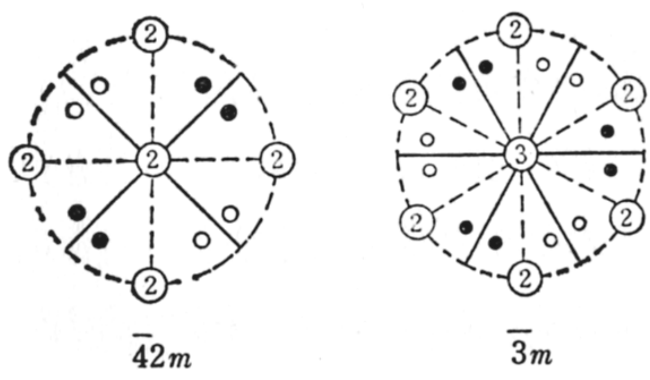


図 18

４本の3回軸が互いに109°28'16"（四面体角）を成して交差した点群（１種）及び

４本の3回軸が互いに70°31'44"（八面体角）を成して交差した点群（１種）(図 19)

点群 23 では互いに直交する３本の２ 回軸が出現する．

点群 432 では互いに直交する３本の４ 回軸が出現する．

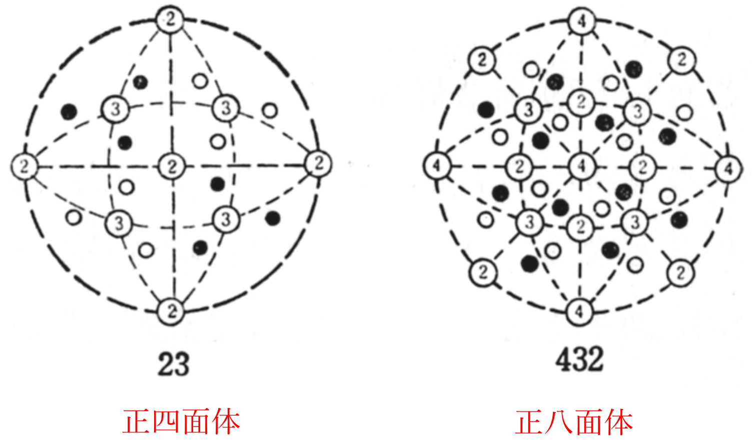


図 19

点群23，432 にいくつかのmを入れてできる点群　3 種（図 20）

点群23の 2 回軸に垂直にmを入れる→点群$m3$

点群23の 2 回軸を含み他の 2 回軸を二等分するmを入れる→点群$\bar{4}3m$（正四面体）

点群432 の 4 回軸に直交するmを加える，又は対称中心を加える→点群$m3m$（正八面体）

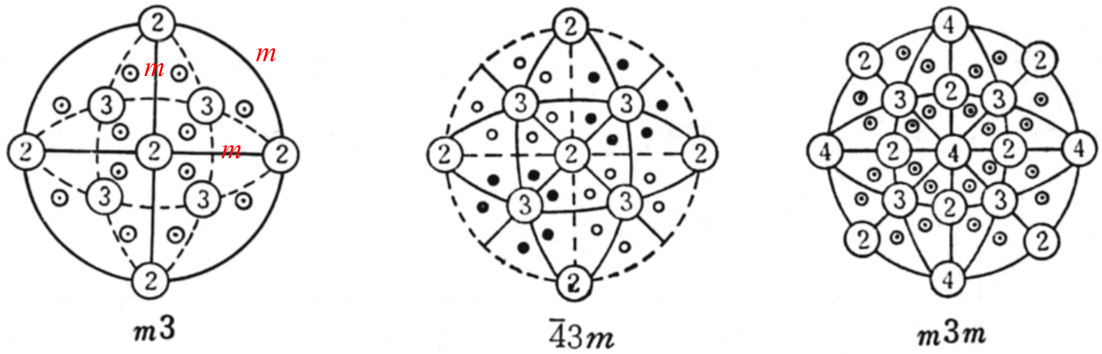
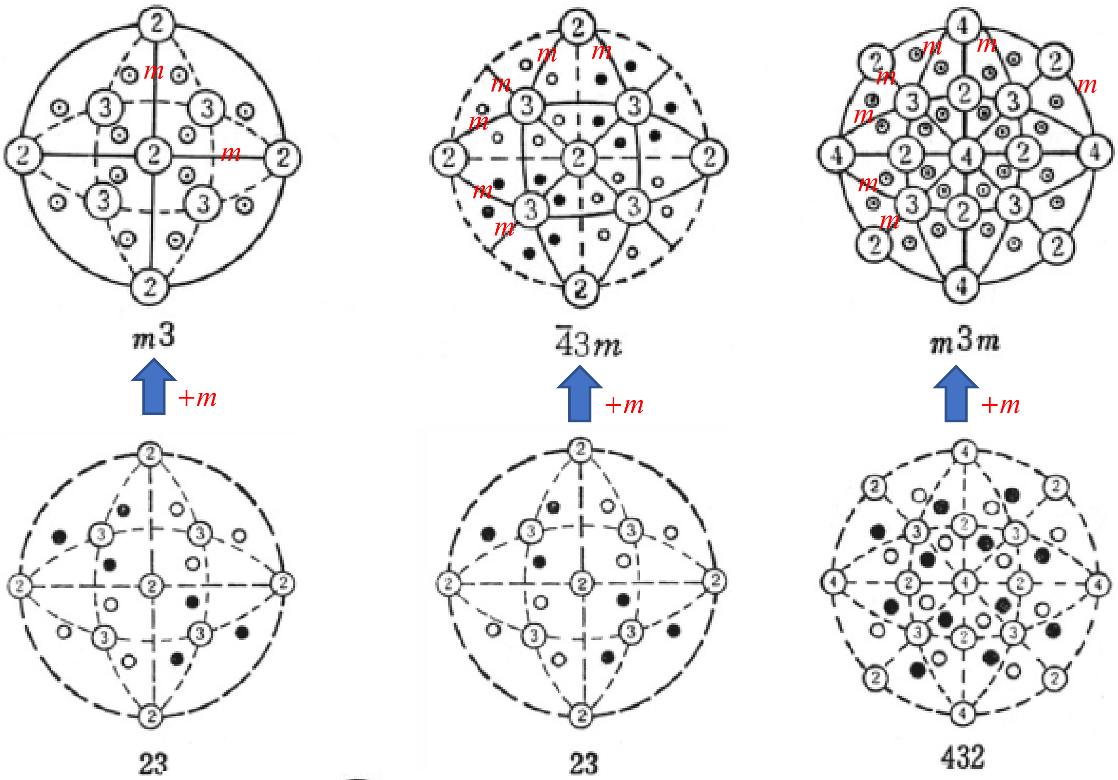
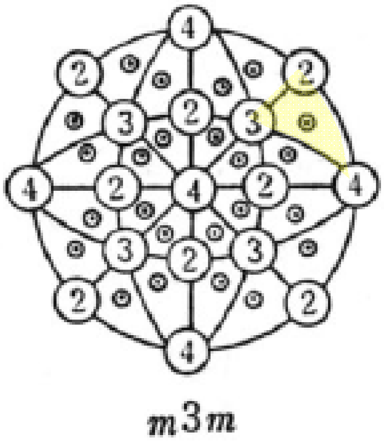


図 20

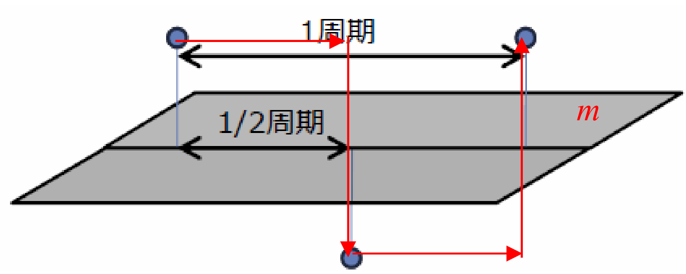




←点群$m3m$による等価な点はいくつある？

映進面　（glide plane）

鏡映に続いて，ある方向に $1/n$ 周期平行移動して図形を不変に保つ操作

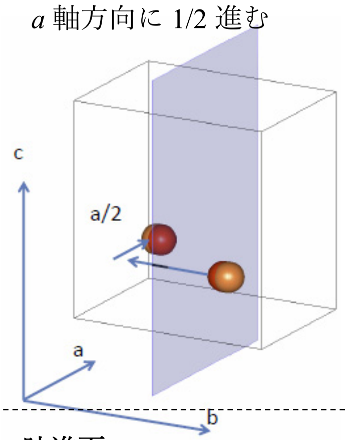


表記	鏡映面の方向	平行移動の方向と距離
a	a 軸に平行	a 軸の方向に 1/2 周期
b	b 軸に平行	b 軸の方向に 1/2 周期
c	c軸に平行	c軸の方向に 1/2 周期
n	a,b,c 軸などに垂直	面の法線と直交する 2 本に軸（あるいは合成軸）の対角線方向に 1/2 周期
e	a,b,c 軸などに垂直	面の法線と直交する 2 本に軸（あるいは合成軸）の対角線方向に 1/2 周期
d	a,b,c 軸などに垂直	面の法線と直交する 2 本に軸（あるいは合成軸）の対角線方向に 1/4 周期

a 映進面:

b 軸に垂直な鏡映の後に

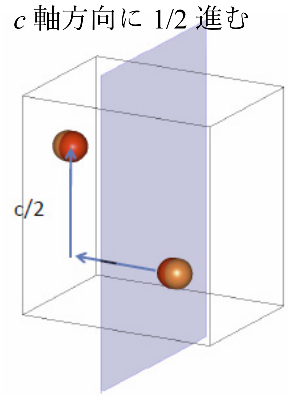
a 軸方向に 1/2 進む



c 映進面:

b 軸に垂直な鏡映の後に

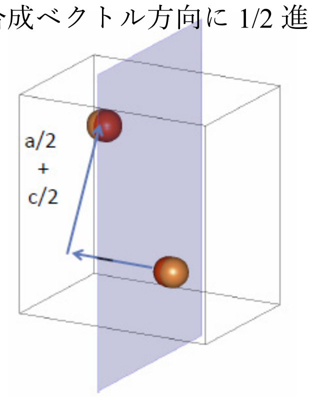
c 軸方向に 1/2 進む



n 映進面:

b 軸に垂直な鏡映の後に

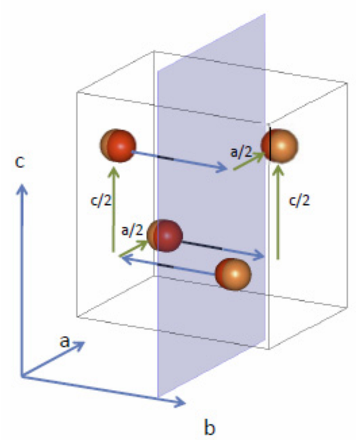
$a+c$ の合成ベクトル方向に 1/2 進む



e 映進面:

b 軸に垂直な鏡映の後に a 軸方向に 1/2 進み,

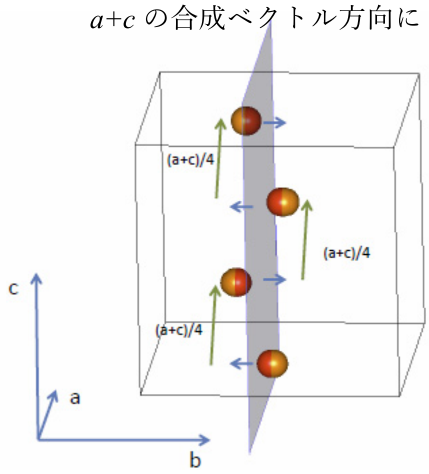
更に b 軸に垂直な鏡映の後に c 軸方向に 1/2 進む



d 映進面:

b 軸に垂直な鏡映の後に

$a+c$ の合成ベクトル方向に 1/4 進む



行列　行列式　逆行列　についての確認

物質の構造において，対称性をもつ，とは，ある軸を中心として回転したり，ある点を中心として反転したり，鏡に映す，など，ある操作（合同変換）の後にはじめの状態と同じ状態になることをいう．簡単な対称性の例としては，線対称や点対称がある．

https://www.google.com/search?client=firefox-b-d&q=%E5%AF%BE%E7%A7%B0%E6%80%A7

従って通常の3次元空間における変換は3×3の行列によって表現される．以下に行列から逆行列を求める方法を示す．

行列式

$$\det A=\det\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}=\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}=\sum_{\sigma\in S_n}\mathrm{sgn}(\sigma)\prod_{i=1}^{n}a_{i\sigma(i)}=\sum_{\sigma\in S_n}\mathrm{sgn}(\sigma)a_{1\sigma(1)}a_{2\sigma(2)}\cdots a_{n\sigma(n)}$$

ここで，$\sum_{\sigma\in S_n}$ は n 次のすべての置換に関して和を取ることを表す．

σ は n 次の置換(permutation)を表す．

例 $\sigma=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 3 & 5 & 4 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ \sigma(1) & \sigma(2) & \sigma(3) & \sigma(4) & \sigma(5) \end{pmatrix}$ は5次の置換の例

置換 σ により，$1\to2$，$2\to3$，$3\to5$，$4\to4$，$5\to1$ に移される．

これを $\sigma(1)=2$，$\sigma(2)=3$，$\sigma(3)=5$，$\sigma(4)=4$，$\sigma(5)=1$ と表す．

$\sigma_1=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}$, $\sigma_2=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 2 & 4 \end{pmatrix}$ とするとき，$\sigma_1\sigma_2=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}$

$\mathrm{sgn}(\sigma)$ は偶置換なら+1，奇置換なら−1　← 互換(transposition)の操作が偶数回か奇数回か

※　置換は互換の積で書ける．2と3を互換する（$2\mapsto3$）ことを $(2,3)$ と表すとすると

例えば $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\xrightarrow{(1,2)}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}\xrightarrow{(2,3)}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$　i.e., $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}=(1,2)(2,3)$

$$\det A=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}=a_{11}a_{22}a_{33}+a_{13}a_{21}a_{32}+a_{12}a_{23}a_{31}-a_{13}a_{22}a_{31}-a_{11}a_{23}a_{32}-a_{12}a_{21}a_{33}$$

$$=a_{11}a_{22}a_{33}+a_{21}a_{32}a_{13}+a_{31}a_{12}a_{23}-a_{13}a_{22}a_{31}-a_{23}a_{32}a_{11}-a_{33}a_{12}a_{21}$$

逆行列

$$\left(\mathrm{A}_{ij}\right)^{-1}=\frac{1}{\det\mathrm{A}}\left(\Delta_{ji}\right)$$ ：　行列 A の逆行列の i, j 成分は，$\left(\mathrm{A}_{ij}\right)^{-1}=\frac{1}{\det\mathrm{A}}\left(\Delta_{ji}\right)$

余因子: Δ_{ij} は A の i 行 j 列を除いた行列式を $(-1)^{i+j}$ 倍したもの

行列： $$\mathrm{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$ に対する逆行列を考える．

余因子: $$\Delta_{ij}\equiv(-1)^{i+j}\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1\,j-1} & a_{1\,j+1} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i-1\,1} & \cdots & a_{i-1\,j-1} & a_{i-1\,j+1} & \cdots & a_{i-1\,n} \\ a_{i+1\,1} & \cdots & a_{i+1\,j-1} & a_{i+1\,j+1} & \cdots & a_{i+1\,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj-1} & a_{nj+1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$ ←行列 A の i 行 j 列を除いた行列式を $(-1)^{i+j}$ 倍

注意　i と j が入れ替わっている！

i 行 j 列に Δ_{ji} が入る

余因子行列: $$\begin{array}{cc} & j \\ & \downarrow \\ {}^t\tilde{\mathrm{A}}= & \begin{pmatrix} & \vdots & & \\ \cdots & \Delta_{ji} & \cdots & \cdots \\ & \vdots & & \\ & \vdots & & \end{pmatrix} \leftarrow i \end{array} =\left(\Delta_{ji}\right)$$ ←余因子: Δ_{ij} を成分とする行列の転置行列

逆行列: $$\mathrm{A}^{-1}=\frac{1}{\det\mathrm{A}}{}^t\tilde{\mathrm{A}}=\frac{1}{\det\mathrm{A}}\left(\Delta_{ji}\right)$$