個体構造解析学　第6回

点群　変換行列

**対称操作と対称要素**

対称操作：ある操作を行い，元の形に重なる場合，その操作を対称操作と呼ぶ。

対称軸：物体をある角度回転させても元の形と一致する軸。

対称面：物体をこの面で鏡に映した場合，元の形と一致する面。

回映軸：回転と鏡映を組み合わせた軸。

対称心：物体の各点を中心に反転させた場合，元の形と一致する点。

**点群と結晶対称**

点群：不動点の周りの対称操作を組み合わせたもの。結晶の対称性を分類する際に用いる。全体で32種類存在する。

空間投影：結晶の対称性を表す手法として，球面投影やステレオ投影を使用する。

・球面投影：結晶の中心に半径1の球を置き，結晶面を法線で表す。

・ステレオ投影：球面投影を平面に図示する方法。北半球の点と南極点を結ぶ直線が赤道面と交わる点を示す。

**対称要素の記号と符合**

対称要素はHermann-Mauguin 記号やSchoenflies記号で表され，特殊符号も用いられる。

**主要な点群**

1．回反心のみを持つ点群: 例えば、図10のステレオ投影。

2．n回軸と2回軸が直交する点群: 例えば、点群222や422。

3．n回軸に垂直な対称面を持つ点群: 例えば、点群3/m。

4．n回軸に平行な対称面を持つ点群: 例えば、点群3m。

5．複数の対称軸や対称面を持つ点群: 例えば、点群mmmや点群432。

**行列と行列式**

物質の構造における対称性は，3次元空間における変換として3×３の行列で表される。行列から逆行列を求める方法は以下の通りである。

・行列式：置換に関する和を取る。

・逆行列：行列の要素から求める。

**映進面**

鏡映と平行移動の組み合わせで，特定の距離だけ移動する操作。

・a映進面: a軸方向に1/2周期移動。

・c映進面: c軸方向に1/2周期移動。