

ロシアで発展した結晶群とその一般化

谷克彦

----(1)----

◆結晶群の一般化とは

群 G は、その部分群 H に関して剰余類の直和に展開（ラグランジュ展開）できる：

$$G = a_1H + a_2H + \dots + a_rH, \quad a_j \in G$$

G の位数を g , H の位数を h とすると, $r = g/h$ すなわち, r は部分群 H の指数である.

特に, H が正規部分群: $\forall a_j \in G$ に対し, $a_jHa_j^{-1} = H$ (すなわち, $a_jH = Ha_j$)である場合が重要で, このと

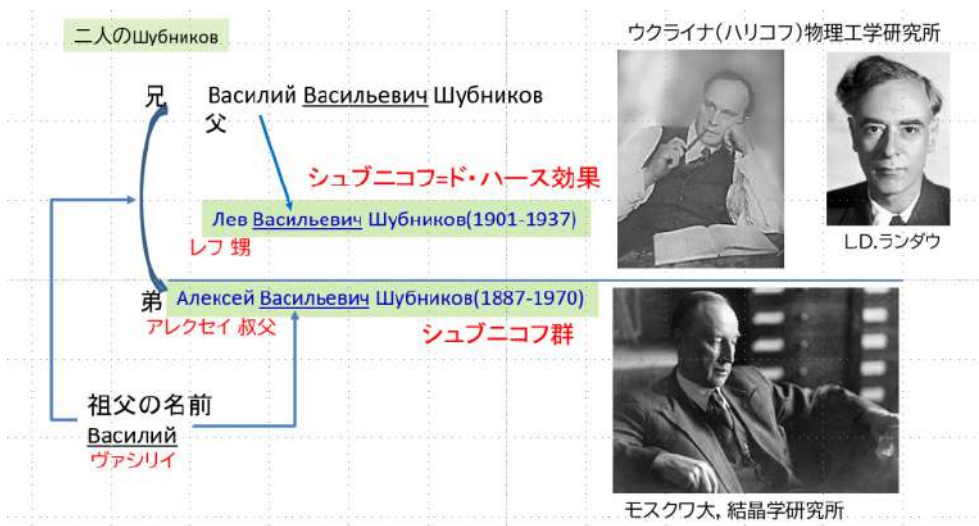
きは, 剰余類全体 $\{a_1H, a_2H, \dots, a_rH\}$ は群(商群) G/H をなす: $\{a_1H, a_2H, \dots, a_rH\} = G/H$

これを, 群 G は, H を法として, 代表系の群 $\{a_1, a_2, \dots, a_r\}$ に縮小される(H を核に準同型写像される)という:

$$G^* = \{a_1, a_2, \dots, a_r\} \simeq G/H$$

この原理に基づき, 群 G は正規部分群 H を法(核)として, 小さい群に還元できる. 逆に, 正規部分群を何らかの群で拡大し大きな群に戻すことができる. 群 G は幾何学空間内で作用する対称変換の群であったとしても, この拡大に使う群に色置換群などの幾何空間と別次元の空間に作用する対称変換を導入することで, 古典群からの一般化の道が開かれる. 幾何学空間の位置を替えずに, 黒/白(あるいは+/-)という2値の変換(反対称変換とよぶ)を導入したのがアレクセイ・シュブニコフ(1945)である. 反対称の概念を, 幾何学空間とは異なる性質次元に導入して, 古典群(幾何学空間の対称性)の拡大として定式化した. 反対称概念は, ドイツの数学者ヘーシュ(1929)も導入したが, 古典群の高次元化に視点があり結晶学者の注目を惹かなかった. 幾何空間に物理的な変化を付与して, 対称性を豊かにする応用的な価値に注目したのがソ連の結晶学派であった.

◆2人のシュブニコフ



レフ・シュブニコフ(1901-1937)甥とA.V.シュブニコフ(1887-1970)叔父で14歳上. シュブニコフ群のシュブニコフはアレクセイ・シュブニコフ. シュブニコフ=ド・ハース効果に名を残したレフ・シュブニコフとは別人(二人とも優れた物理学者). 二人の父称が同じヴァシリイなので兄弟かと思ったが, 実は, 甥と叔父の関係であった. レフの父(アレクセイの兄)であり, この兄弟の父の名はヴァシリイである. さらに, レフの父(アレクセイの兄)の名もヴァシリイであり, 彼らの父と同じであったのだ.

シュブニコフ群は今回の主題なので後ほど詳しく取り上げる. ここでは, 甥のレフ・シュブニコフの悲劇的な生涯を紹介する. 彼は, レニングラードのオブレイモフの研究室で金属の完全結晶成長の仕事をし, ビスマス単結晶作製の仕事でライデン, ドハース研究所へ呼ばれる(1926-1930). 純度を上げる方法でビスマスの良い結晶を作り, シュブニコフ=ド・ハース効果を発見した(ビスマスの電気抵抗は磁場印加で増大するのは既知). 磁気抵抗の精密な測定は, 格子振動による電子散乱をとめる必要があり極低温での測定になる. 結晶中の欠陥や不純物でも電子は散乱されるから欠陥のない結晶が必要である. 純度を上げる方法で良い結晶を作り, レフは磁気抵抗が印加磁場強度の逆数に比例する周波数で振動することを発見したのだった. シュブニコフ=ド・ハース効果は, フェルミ面の形の影響を受けて起こる現象である.

ヨッフェ(1880ウクライナ生まれ, レントゲンの弟子)は, 「ソビエト政権(1917樹立)の最初の10年間の物理学はモスクワとレニングラードに集中させたが, 今や分散の時が来た. 産業と結びつく必要のある研究所は工場が存在する場所, 産業のある場所になければならない」と主張し, 1928年のハリコフ物理工学研究所創設につながった.

レフ・シュブニコフは、帰国しここで極低温研究所を立ち上げ、活発な研究が行われた（1930年代）。ハリコフの物理工学研究所、ハリコフ大には、L.D.ランダウもいた。

ランダウの教育方針は、彼の作成した「理論ミニマム」をマスターすること。最初にランダウの「理論ミニマム」に合格したのは、カンパニエーツ、続いて、リフシッツだった。カンパニエーツは「理論物理学」、リフシッツはランダウと共著の「理論物理学教程」の著者。これらは日本でも著名な良書である。

ランダウとシュブニコフは親友であったが、どちらもレフ（トルストイもレフ、ライオンの意）と同じ名前であり、痩せたレフと太ったレフと呼ばれていた。ハリコフの研究所にはドイツの研究者もおり、オランダのライデンなど海外の研究所との交流も盛んだった。ヨッフエの後の科学アカデミーの管理は中央からの制御される状況になり、軍事研究に巻き込まれた。おりしも、第2次世界大戦前のスターリンによる粛清が始まる時期であった。

1937年8月6日、L.V.シュブニコフは、L.D.ランダウと一緒にクリミアで休暇を過ごした戻った日に逮捕され、スターリンによる粛清の犠牲者となる。いわれのない破壊活動の罪で起訴され、11月10日に銃殺刑になった。記録は改竄され、死体もわからず、未亡人は彼が1945年死んだと知らされた。1956年に至りL.D.ランダウらにより名誉回復が行われた。そのとき、ランダウが軍の検察官あてに出した書類を引用する：「彼の研究論文の多くは画期的な古典であります。彼がソ連のこの分野の創設者の一人であったことを考えると、低温物理学の分野での彼の破壊活動について話すのはまったくばかげています。彼の熱烈な愛国心は、彼がソ連での仕事のためにオランダでの仕事を自発的に辞めたという事実によって強調されています。L.V.シュブニコフの早すぎる死によって国内科学に引き起こされた損害はどんなに過大評価しても言い尽くせないほどです」

引用：

<http://www.ilt.kharkov.ua/bvi/info/shubnikov/shubnikov.html>

subnikov-100 www.ilt.kharkov.ua

物性研究(2018.5)斯波 弘行.

ヨッフエ回想記；玉木英彦訳

👍 0 🗨️ 0

引用する

 返事を書く

 編集

メニュー

SGK通信（毎週火曜日更新）

note記事

メルマガ記事

旧ブログ

No.502 ★ロシアで発展した結晶群とその一般化（2）

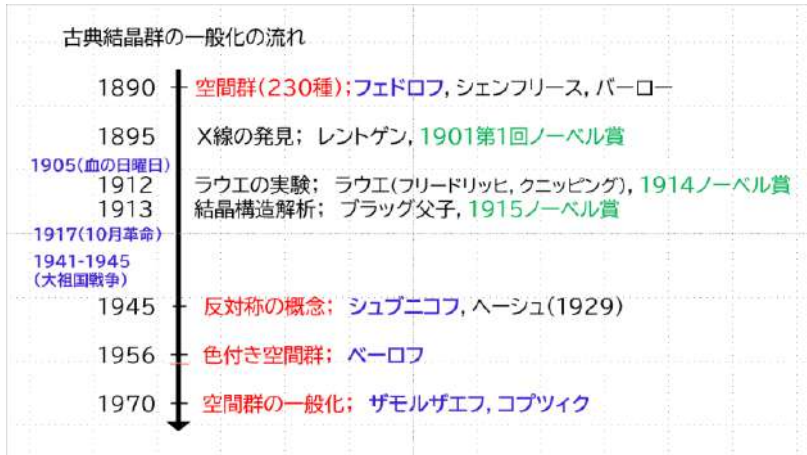
投稿日時: 2023/12/13 システム管理者

----(2)----

◆古典結晶空間群

3次元の結晶空間群が230種あることの数え上げは、1890年ごろ、フェドロフ(ペテルスブルグ大, 鉱物学), シェンフリース(フランクフルト大, 数学), バーロー(ロンドンの事業家)により, それぞれ独立に達成された。これは, X線の発見以前の19世紀末の数学的業績で, X線の発見で幕を開け20世紀に発展する結晶構造解析の基礎となった。

*1) ⇒空間群は, 構造解析にどのように役立つか



フェドロフの数え上げ方法を理解し易くするために, まず, 2次元の結晶空間で説明しよう。2次元の結晶空間群(平面群), つまり, 壁紙模様の対称群は17種類ある。結晶空間=周期的な空間, つまり, 単位胞が隙間なく繰り返して並んでいる空間は, 「単位胞でデジタル化された空間」と言える。2次元結晶空間は, 1つのタイル(単位胞に相当)で, タイル張りされた平面である。

●2次元は表面だけの世界で, 表面には裏表の区別はない。3次元にいる我々は, 平面に裏表の2面があると思うかも知れぬが, その場合は「層」と言い「表面」とは言わない。

従って, 2次元結晶群である壁紙模様は表面だけの平面で, 表面を裏返す操作は, 2次元結晶群にはあり得ない。

●表面をタイル張りすれば, 必ず周期が生じるわけではない。ペンローズ・タイリングがその例だが, 非周期的なタイル張りもいくつか存在する。

結晶空間の定義には周期性が必須で, ペンローズ・タイリングのような構造をもつ物質は「結晶」の範疇ではなく, 「準結晶」と呼ばれる。

*2) ⇒非周期タイリング

◆フェドロフの数え上げ方法

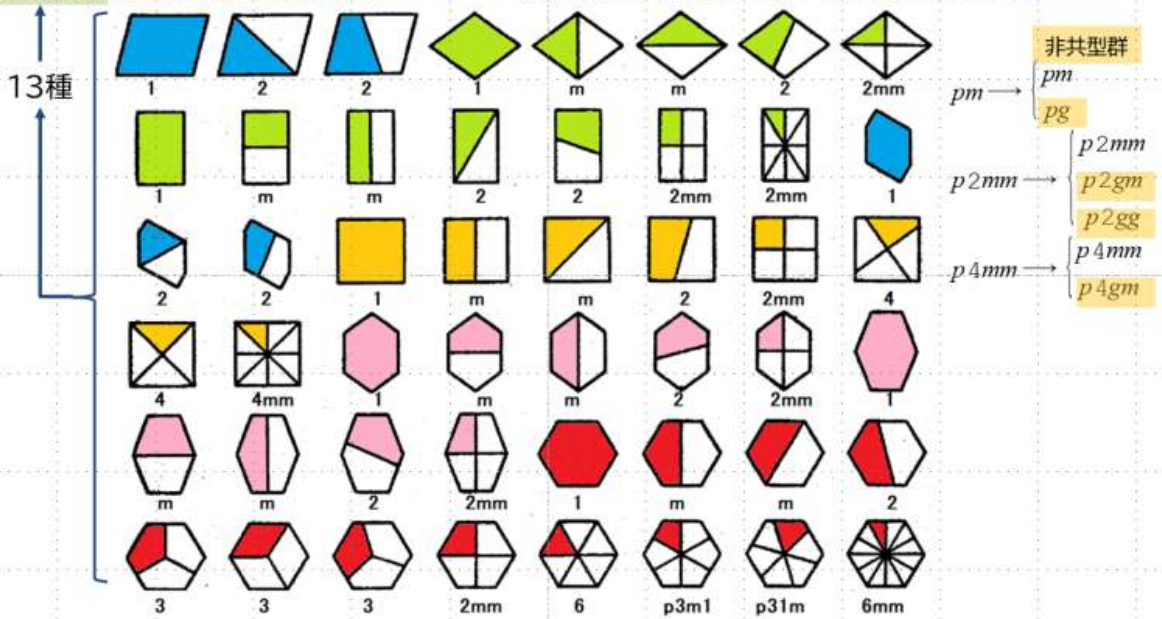
周期的な平面タイル張りが可能なタイルの形は**平行多角形**で, **平行4角形**, **および**, **平行6角形**がある。

対称性で, 平行多角形を分類すると: **一般的な平行4角形**, **ひし形**, **長方形**, **正方形**; **一般的な平行6角形**, **つぶされた正六角形**, **正六角形**: がある。

これら7種類の有限図形を, 等価な部分に分割する。図の一覧を以下に掲載した。これらの分割様式を対称性で分類すると, 共型群13種が得られる。さらに, このうちの3種の共型群からは, 非共型群4種が導けるので, 計17種の2次元空間群(壁紙模様)が得られる。*) ⇒共型, 非共型の解説(3)

フェドロフらは, 3次元空間群の導出で同様な方法を用いた。2次元では平行多角形から出発したが, 3次元ではフェドロフの平行多面体5種から出発する。

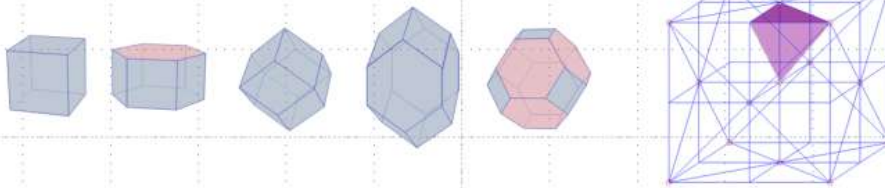
共型(symmorphic)群を求めると (非共型群4種を導き)平面群は全部で17種



7種類のタイルを等価な部分に分割した一覧

3次元空間群

空間充填のできるフェドロフの平行多面体5種



これを、等価な部分(非対称要素)に分割する。

共型群73種 → 非共型群157種 → 230種(対掌体は区別している)

(注)非共型: 点群成分と並進成分とが結合した対称操作を含む空間群
らせん軸, 映進面など

5種のフェドロフ平行多面体を分割して73種の共型群を得る

◆結晶空間群

並進群 = 独立な並進ベクトルの1次結合が生成する群

結晶空間(周期的な空間)は、単位胞でデジタル化した空間なので、単位胞を格子点で代表すれば結晶格子が得られる。

点群 = 1点を特異点とする対称操作の組合せが作る群。

点群と結晶空間の周期性(結晶格子)とが両立しなければならないので、回転対称操作には制限が生じ、このような点群は**結晶点群**と呼ばれる: 回転対称操作は、2回軸, 3回軸, 4回軸, 6回軸に限られる。

●古典結晶群は、「幾何空間」内の対称変換のみで生成されるのだが、幾何空間に特性次元(色がその代表)を付与した「超幾何(色付き幾何空間)」内の対称変換を考え、黑白群, 色付き群, および、群の一般化へと発展した。*) ⇒第2部

●互いに双対な図形の対称性は同一。従って、Fourier変換で結ばれる双対空間の対称性は同一である。結晶構造とそのX線散乱振幅はFourier変換で結ばれるから、対称性は同一である。しかし、結晶とそのX線回折強度像(散乱振幅の絶対値の2乗)の対称性は、同一ではなく、X線回折強度像の対称性は結晶の対称性よりも上昇し

得る。これは、ピエール・キュリーの因果律の例でもある。*3) ⇒X線の散乱

●鏡映操作と回転操作には本質的な違いがある：3次元空間の鏡映像（互いにキラル）は3次元空間内の運動で物体に重ねることができない（ただし、次元を1つ上げた4次元空間ならばこれは可能）。3次元点群の対称操作は、3次の直交行列で表現できるが、その行列式が；回転操作では+1、鏡映操作や対称心であることに違いがある。

回転操作の例 $\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$: 鏡映操作の例 $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

◆今回必要となる群概念ミニマム

群, 部分群, 正規部分群, 共役類, 群の拡大, 準同型, 同型.
対称性の高低と部分群の列（正規列, 非正規列）.

●群の定義

$G = \{a, b, c, \dots\}$ 集合Gが群と呼ばれるのは、次の公理を満たす場合である：

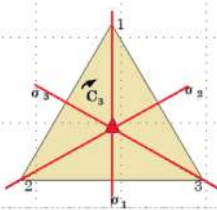
- 0) $\forall a, b \in G \rightarrow a \cdot b \in G$ 任意の2元に2項演算が定義される.
- 1) $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$ 結合律
- 2) $(a \cdot e) = e \cdot a = a$ e : 単位元, 左単位元
ある元 e (ただ一つ) が存在し, すべての $\forall a \in G$ に対して成立.
- 3) $(a \cdot x) = x \cdot a = e$ $x = a^{-1}$: a の逆元, 左逆元
 $a \in G$ に対して, x が (ただ一つ) 存在する.

1)~3)を群の公理という.

群の公理中の (ただ一つ) というのは、公理に含めなくてもよい (導くことができる) .

(2次元図形)正三角形⇒3次の対称群(置換群)

乗積表で確認：群の定義, 部分群.



1	2	3	E
1	3	2	σ_1
3	2	1	σ_2
2	1	3	σ_3
2	3	1	C_3
3	1	2	C_3^2

対称操作の表

← 2次元は(表裏のない)単一表面

↓後先→	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
E	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_3	σ_1	σ_2
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_2	σ_3	σ_1
σ_1	σ_1	σ_2	σ_3	E	C_3	C_3^2
σ_2	σ_2	σ_3	σ_1	C_3^2	E	C_3
σ_3	σ_3	σ_1	σ_2	C_3	C_3^2	E

乗積表(演算の積)

乗積表で確認すること:

- ・群を作る。3次の対称群(有限群, 位数は6)
- ・可換群(Abel群)ではない.
- ・自明でない部分群はいくつあるか:4
- ・正規部分群: $\{E, C_3, C_3^2\}$

●正規部分群の定義

群Hが群Gの正規部分群 ($H \triangleleft G$) であるとは、
任意の $a \in G$ に対して $aHa^{-1} = H$, (つまり, $aH = Ha$) となることである.

群GがAbel群ならば、すべての部分群は正規である.

2つの自明な正規部分群 (自分自身と $\{e\}$) 以外に、正規部分群を持たない群を「単純群」という。(単純群の定義)

正規部分群に関する2つの左剰余類の積では、 $aH \cdot bH = a \cdot bH$ が成立する。従って正規部分群を法(写像の核)として商群 G/H が作れる。

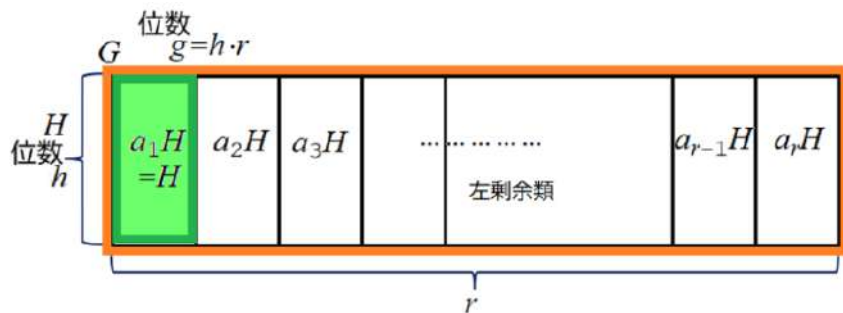
群Gの非正規な部分群Hに関してもラグランジュ展開(直和分解)は作れるが、剰余類の積を行うと、バラけてしまい結果は1つの剰余類に収まらない。

●ラグランジュ展開： $G \supset H$ のとき

$G = a_1H \cup a_2H \cup \dots \cup a_rH, a_1 = 1$

G は、適当な $a_i \in G$ を r 個選び、 r 個の剰余類の直和に展開される。 r は意に決まる。

$r = g/h$ (ここで、 g : G の位数、 h : H の位数、 r : 部分群の指数)



【演習】

点群 $4mm$ には、 $2mm$ あるいは 4 や 2 が正規部分群として含まれる。点群 $4mm$ の正規部分群を核として準同型写像すると、点群 $4mm$ は商群に還元できる： $4mm/2mm \cong 4 \pmod{2}$, $4mm/4 \cong m$, $4mm/2 \cong 4mm \pmod{2}$ 。部分群 m は正規部分群ではないので、ラグランジュ展開はできるが、剰余類は群をなさない。このように、大きな群は、その正規部分群を、何らかの部分群（あるいは正規部分群）で拡大した構造になっている。

非正規の部分群を、何らかの非正規部分群で拡大した構造は、非正規の拡大という。非正規拡大は難問。例えば、部分群 K の共役集合の重畳という構造をもつ代数系（特殊な亜群）などがある。*) \Rightarrow 今回は除外

点群 $4mm$ の乗積表

後先	1	C_4	C_4^{-1}	C_2	m_x	m_y	m_a	m_b
1	1	C_4	C_4^{-1}	C_2	m_x	m_y	m_a	m_b
C_4	C_4	C_2	1	C_4^{-1}	m_a	m_b	m_y	m_x
C_4^{-1}	C_4^{-1}	1	C_2	C_4	m_b	m_a	m_x	m_y
C_2	C_2	C_4^{-1}	C_4	1	m_y	m_x	m_b	m_a
m_x	m_x	m_b	m_a	m_y	1	C_2	C_4^{-1}	C_4
m_y	m_y	m_a	m_b	m_x	C_2	1	C_4	C_4^{-1}
m_a	m_a	m_x	m_y	m_b	C_4	C_4	1	C_2
m_b	m_b	m_y	m_x	m_a	C_4^{-1}	C_4^{-1}	C_2	1

正規部分群
 $4mm = \{1, C_4, C_2, C_4^{-1}, m_x, m_y, m_a, m_b\}$
 $2mm = \{1, C_2, m_x, m_y\}, \{1, C_2, m_a, m_b\}$
 $4 = \{1, C_4, C_2, C_4^{-1}\}$
 $2 = \{1, C_2\}$
 部分群
 $m = \{1, m_x\}, \{1, m_y\}, \{1, m_a\}, \{1, m_b\}$

【定義】 正規部分群 $H \triangleleft G$ とは
 $\forall a \in G$ に対して、 $aHa^{-1} = H$
 (あるいは、 $aH = Ha$)

正規列 ↓

位数

8
4
2
1

$C_4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, C_4^2 = C_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}, C_4^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$
 $m_x = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}, m_y = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}, m_a = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, m_b = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \end{pmatrix}$

●共役類

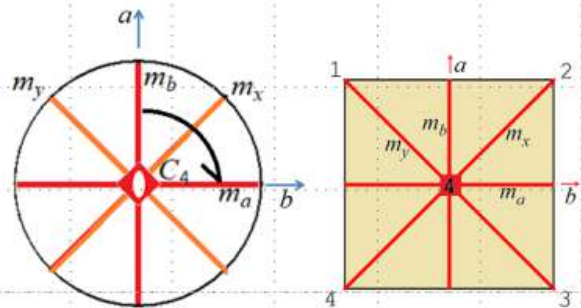
群Gの元 g', g は, $g' = aga^{-1}$, ($a \in G$) のとき, 互いに共役 $g' \sim g$ という. 互いに共役という関係は同値関係である.

集合 $S \subset G$ に対して, aSa^{-1} , ($a \in G$) となる集合は, 集合 S と共役な集合である. S が部分群であれば, aSa^{-1} は S に共役な部分群である. 物理的な効果が同等な対称操作は同じ共役類に属することがわかる.

例として, 表中に点群 $4mm$ の共役類を色分けで表示した.

点群 $4mm$ の共役類を調べる

$ghg^{-1} h$	1	C_4	C_4^{-1}	C_2	m_x	m_y	m_a	m_b
$1h1$	1	C_4	C_4^{-1}	C_2	m_x	m_y	m_a	m_b
$C_4hC_4^{-1}$	1	C_4	C_4^{-1}	C_2	m_y	m_x	m_b	m_a
$C_4^{-1}hC_4$	1	C_4	C_4^{-1}	C_2	m_y	m_x	m_b	m_a
C_2hC_2	1	C_4	C_4^{-1}	C_2	m_x	m_y	m_a	m_b
m_xhm_x	1	C_4^{-1}	C_4	C_2	m_x	m_y	m_a	m_b
m_yhm_y	1	C_4^{-1}	C_4	C_2	m_y	m_x	m_b	m_a
$m_a hm_a$	1	C_4^{-1}	C_4	C_2	m_x	m_y	m_a	m_b
$m_b hm_b$	1	C_4^{-1}	C_4	C_2	m_y	m_x	m_b	m_a



$4mm = \{1\} \cup \{C_4, C_4^{-1}\} \cup \{C_2\} \cup \{m_x, m_y\} \cup \{m_a, m_b\}$ ← 互いに共役という同値関係で同値類別

$$4mm = \{1\} + 2\{C_4\} + \{C_2\} + 2\{m_x\} + 2\{m_a\}$$

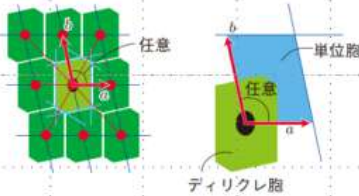
◆群の行列表現には、今回は深入りしない

異値の既約表現の数は共役類の数だけある。例えば、シクロブタジエン(点群 $4mm$)の π 電子系の分子軌道(4つのC原子の原子軌道の線形結合)の永年方程式(固有値問題)を解き、エネルギー準位などが求まる。あるいは、4つの原子軌道関数を基底にして作った分子軌道(点群 $4mm$)の正則表現を簡約して、それに含まれる既約表現を求めるのだが、各既約表現はエネルギー準位に対応する。*4) ⇒群の表現

◆結晶空間群の作り方

●格子を、対称性で分類したものが**ブラベー格子**で、2次元ブラベー格子は5種類ある。2次元には、互いに独立な並進ベクトル2つがとれる。この2つの並進ベクトルの組を対称性で分類する。格子点間の垂直2等分線で囲まれる図形を「**ディリクレ胞**」というが、「ディリクレ胞」の形で分類したと思うとわかり易い。

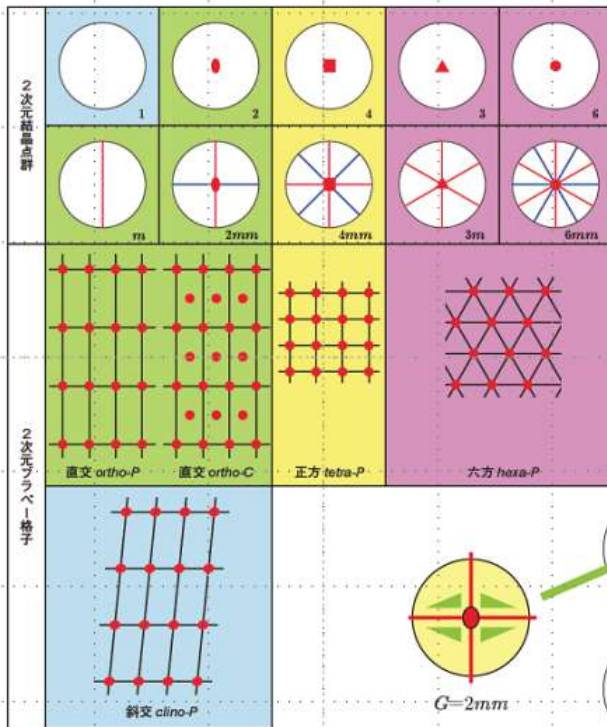
2次元ブラベー格子 5種



「美しい幾何学」p.55(技術評論社)より

晶系	単位胞	ブラベー格子	非直交式表示	直交式表示	点群	空間群
6方	2×正三角形		(a/a)	ρ	6mm 6 3m 3	$\rho 6/mmm$ $\rho 6$ $\rho 3m1, \rho 31/m$ $\rho 3$
正方	正方形		(a/a)	ρ	4mm 4	$\rho 4mm, \rho 4gm$ $\rho 4$
直方	長方形(2点胞) 菱形(1点胞)		$(c/b:a)$ $(\frac{b+a}{2}, \frac{b-a}{2})$	c	2mm m	$c 2mm$ cm $\rho 2mm, \rho 2ms, \rho 2gg$ $\rho m, \rho g$
斜方	長方形		(b/a)	ρ		
斜方	平行4辺形		(b/a)	ρ	2 1	$\rho 2$ $\rho 1$

並進群を点群で拡大して空間群を得る



No.503 ★ロシアで発展した結晶群とその一般化（3）

投稿日時: 2023/12/18 システム管理者

----(3)----

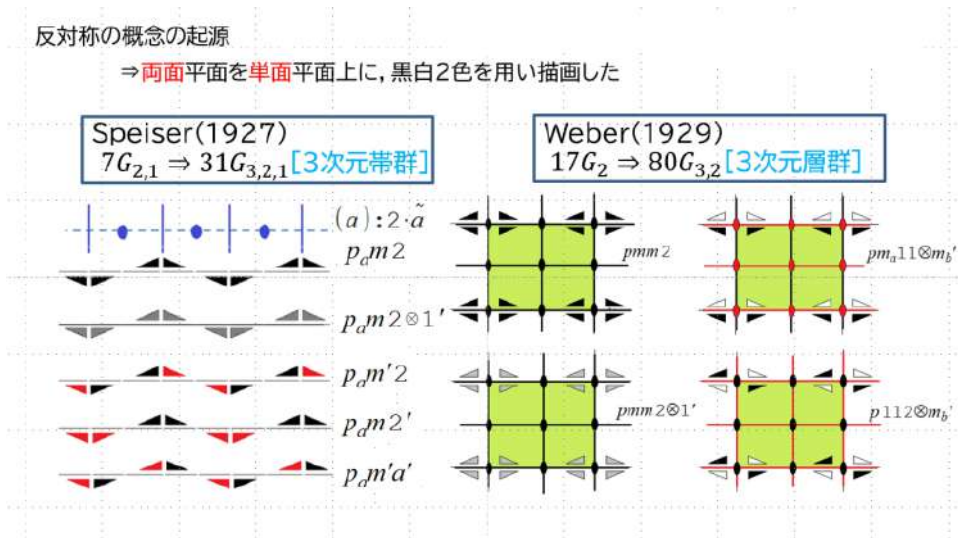
◆この起こり（前期）：シュブニコフの反対称概念の発見（1945）まで

ヘーシHeeschとシュブニコフShubnikovは、シュパイサーSpeiserが1927年に提案した G_{321} 群 [3次元帯群] の解釈と、その2年後にウェーバーWeberが G_{32} 群 [3次元層群] が描いた図 [黒-白2色を使い、単面平面上に両面平面を描画--色の違いで厚み方向の幾何学次元を表す] のアイデアに深い感銘を受け、その結果、独立して、反対称の概念の厳密な定義にたどり着いた。

1945年にシュブニコフが定義した反恒等元 $\{1'\}$ とは、幾何空間には作用せず（位置を変えず）に、黒-白の色だけを反転する演算である。

古典群に含まれる位数2の元に色の反転 $1'$ を結合した演算（例えば、 $2', m'$ ）で、始めの群を置き換えると黒白2色群を得る： $p_a m 2 \Rightarrow p_a m' 2, p_a m 2', p_a m' 2' : p m m 2 \Rightarrow p m' m 2', p m' m' 2$ 。

特に、反恒等元 $1'$ を、古典群の単位元1に結合すると、灰色群（元の群の2倍の位数）が生じる。



単面平面（壁紙）の対称群から双面平面（層平面）の対称群を導く方法論は、「群の拡大理論」を基礎としている。

反対称群（シュブニコフ）2値の色（+/-）の反転を古典群の位数2の対称操作に結合したように、対称操作の位数と矛盾なく整合の取れる複色色の巡回置換などを結合した演算で置き換えると、多色群が得られる：幾何空間の対称操作に特性次元の変換を結び付けて、色付き対称群（ベーロフ）や、さらなる群の一般化が発展した。この方法論は、低次元空間の対称群から高次元空間の対称群を導くのにも有用であった。

●数学と物理学の立場の違い

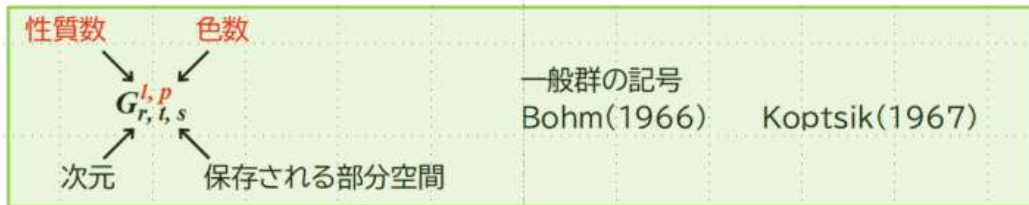
Heinrich Heesch（ドイツの数学者）の関心は、高次元幾何空間の空間群にあった（この時代のドイツ、スイスの数学者の関心事は、 n 次元の結晶空間群は有限個かというHilbert問題の一つに関するものであった）。

20世紀初頭の結晶学者は、帯群、層群などの空間群の内部の群に興味を持っていた。

幾何学空間次元だけでなく、特性次元（=色）を付与して、対称性をより豊かにする（特性も記述する）という応用的な価値に注目したのは、A.V.Shubnikov(ソビエトの結晶学者)であった。

ソビエト結晶学派は、対称性の理論の改良は、自然科学の実践で機能するか、将来的に機能する場合にのみ価値があると考えている。

（注）一般群の記号について



空間次元	空間次元					反対称次元	空間次元	空間次元					反対称次元
	4	3	2	1	0	2 ⁰		4	3	2	1	0	2 ⁰
$G_{3,0}^1$	122	31	5	2	0	0	$G_{3,0}$	227	32	10	2	1	0
$G_{3,1}^1$	394	31	7			1	$G_{3,1}$	75	7	2			1
$G_{3,2}^1$	528	80				2	$G_{3,2}$	80	17				2
G_3^1	1651					3	G_3	1651	230				3
						周期次元		4895					周期次元

◆空間群内部の小さい群「帯群, 層群」

●2次元平面の表裏 (2次元平面群 G_2 と3次元中の層群 $G_{3,2}$)

2次元平面に裏表があると思いますか？それともないと思いますか？

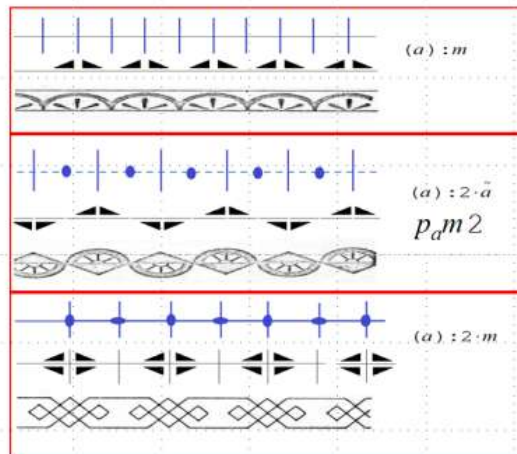
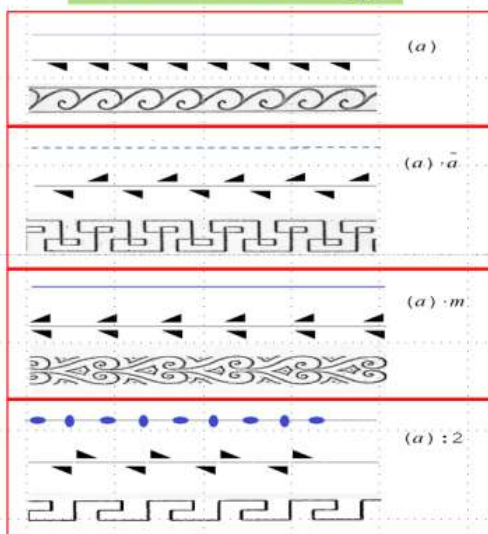
2次元とは厚み方向の次元がない世界。3次元に慣れ親しんだ我々は内部があつての表面ですが、2次元世界では表面だけで内部はない。表側面や裏側面の区別が生じるのは、私たちの住む3次元世界に2次元平面を持ち込むからで、2次元世界には、単面平面しか存在できない。

●周期的な2次元平面とは、面内に2つの独立な並進ベクトル a, b があり、この2つのベクトルで挟まれる平行4辺形を単位胞 (単位タイル) として、平面を張り詰めた構造である。周期的な2次元平面の対称性 (平面群という) は17種類ある [17種類の壁紙模様]。⇒17 G_2

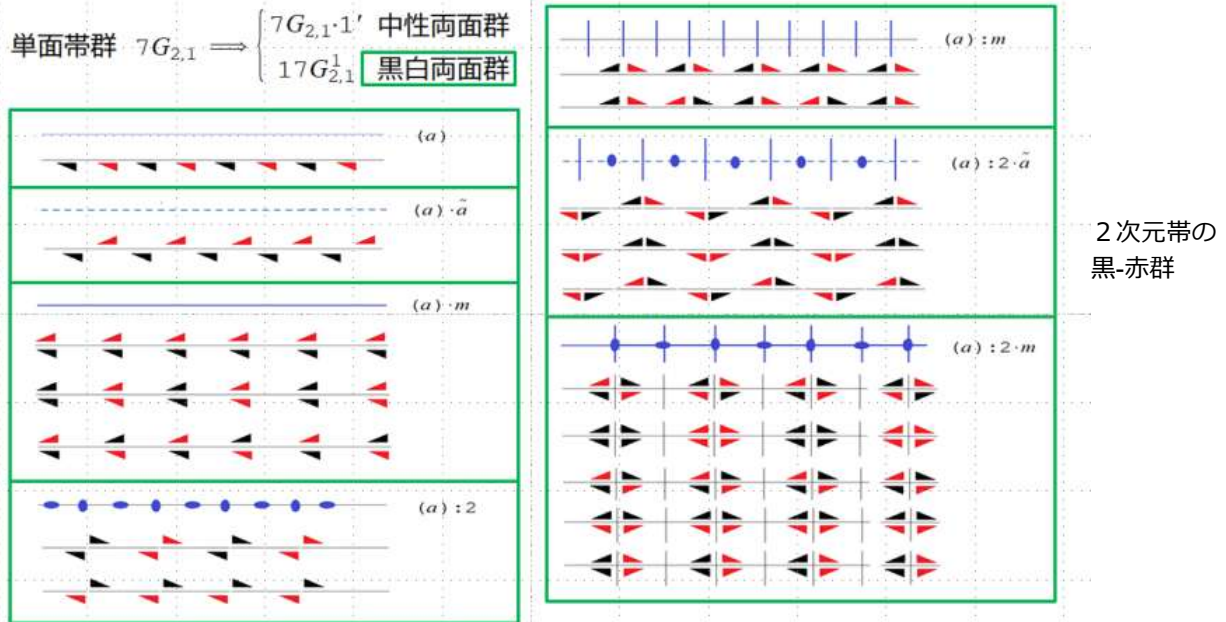
我々の居る3次元世界の中で、2次元平面を見たときに、表側面と裏側面の区別が生じます。このような双面2次元平面を「層」と呼ぶ。⇒80 $G_{3,2}$

層の2次元周期的模様の対称性 (空間群) は、80種類ある。もちろん、80種類のうちに (単面) 2次元周期的模様の対称群 (平面群) 17種類は含まれる。

7種類の単面帯群 $G_{2,1}$



2次元帯の古典群 (1色)



2次元帯の反対称群31個の内訳は、古典（1色）群7個+灰色群（シニア群とも呼ばれる）7個+黒-白群（ジュニア群とも呼ばれる）17個である。

◆ $17G_2$ から、どのようにして $80G_{3,2}$ が得られるか。

第1の方法：層の内部に、対称心、鏡映面（あるいは、映進面）、2回軸（あるいは、2回らせん軸）、などの、位数2の対称操作を導入し、片面の世界を他の面の世界に写像する。つまり、片面のみの壁紙模様の17種類の平面群と、層の内部に置いた位数2の対称群との直積で「層の空間群」生成する。

第2の方法：2次元（片面）平面群の生成元の一部を、表面と裏面の間を変換するものに変える〔回転対称軸を位数2のらせん軸に、鏡映面を映進面に〕

こうして、17種類の平面群から80種類の層の空間群を導くことができる。層の対称性（空間群）をすべて導くことは、1930年代にドイツの科学者；Hermann, Weber, Alexanderらによって完了した。

●層に対する空間群など、何に 응용できるのかと思う方もおられるかも知れない。層の対称性（空間群）は、表面や界面の記述に用いることができ、結晶学では液晶構造、ドメイン界面、双晶、エピタキシャル接合の研究に、物理化学では単分子層や薄膜の研究に、生物学では膜構造やその他の生体組織の研究に 응용される。また、建築芸術においても、透かし彫りの格子構造、覆い、フェンス、看板などのデザインに 응용される。

それにもましてこの概念が重要なのは、層の空間群は、それを含む3次元空間群の内部構造の理解に直結し、群の拡大理論を基礎に、反対称などの新たな概念を導入するのに役立った。

G_3 に2値(黒白)の超幾何学次元1つの追加 $G_3^{1,2}$ は、幾何学次元の増加 $G_{4,3}$ の1部

$$230G_3 \text{ (3次元空間群)} \longrightarrow 1651G_3^1 \text{ (3次元黒白空間群)} \longrightarrow G_{4,3} \text{ (4次元空間群の一部)}$$

$$230\Pi(G_3) + 230C + 119M = 1651G_3^1$$

$$17G_2 \text{ (2次元平面群)} \longrightarrow 80G_2^1 = G_{3,2} \text{ (両面層群)} \longrightarrow 528G_{3,2}^1 \text{ (3次元層黒白群)}$$

$$17\Pi(G_2) + 17C + 46M = 80G_2^1$$

$$75G_{3,1} \text{ (丸棒群)} \longrightarrow 394G_{3,1}^1 \text{ (丸棒黒白群)}$$

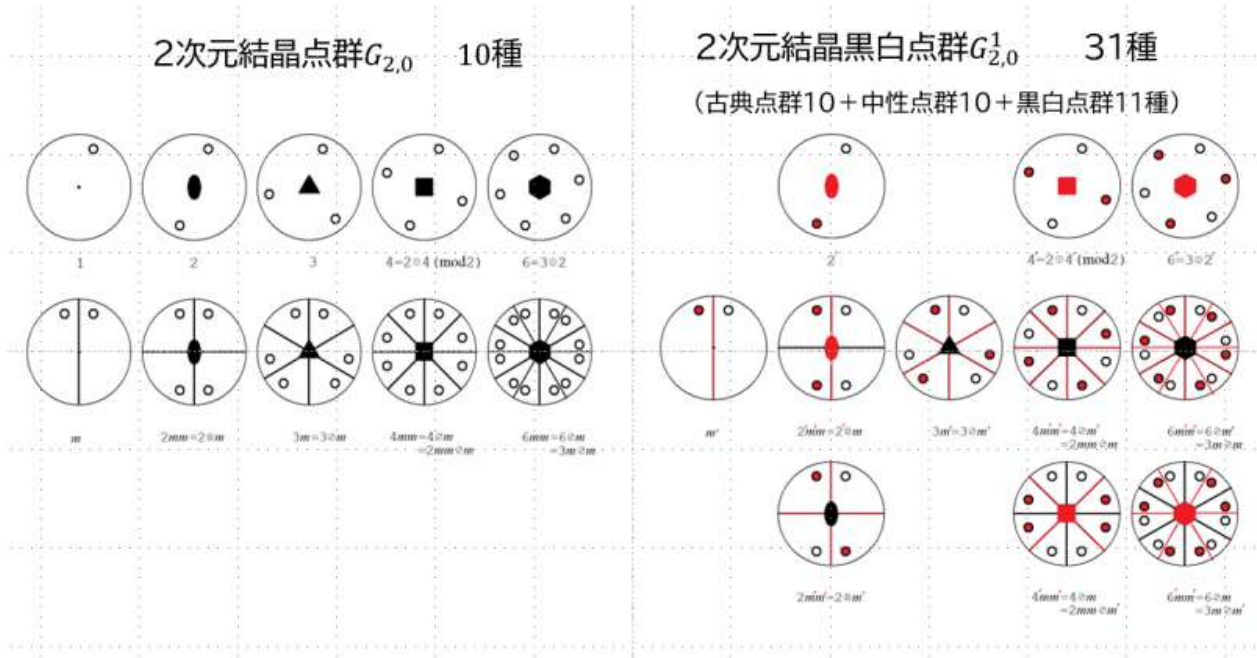
$$32G_{3,0} \text{ (3次元点群)} \longrightarrow 122G_{3,0}^1 \text{ (3次元黒白点群)} \longrightarrow G_{4,3,0} \text{ (4次元点群の一部)}$$

31の帯群 G_{321} , 80の層群 G_{32} , 75の丸棒群 G_{31} は, 230のフェドロフ群の部分群 [特異 (不変) 平面や特異直線を持つ] として導出された.

1930年, 数学者Heeschは, 17の層の2次元Fedorov群 G_2 から, 80の層群 G_{32} (2次元群の黒-白群 G_2^1) を導出 : 230のフェドロフ群 G_3 から, 4次元の"超層"群 G_{43} (3次元の黒-白群 G_3^1)の導出 :

同時に, 32の結晶点群 G_{30} から, 122の4次元の点群 G_{430} (黒-白3次元群 G_{30}^1) を導出した.

3次元の空間群230 G_3 に, 色特性の次元を加えて (反対称, 色付き対称) G_3^1 を考えると, これは4次元空間群の一部 $G_{4,3}$ と解釈できる.



2次元結晶点群から2次元結晶黒-白点群を導く

2次元黒-白結晶点群31種の内訳は : 古典 (1色) 群10種 + 灰色群 (シニア群) 10種 + 黒-白群 (ジュニア群) 11種

◆ (例) Escher作品について

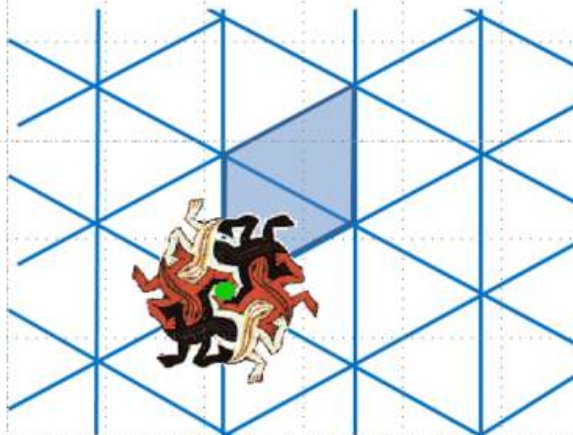
結晶空間=デジタル空間

3色群 $P6^{(3)}$



M.C. Escher

結晶空間=周期的=デジタル(離散的)
蜥蜴(モチーフ)6匹で単位胞
空間群=並進群×点群



このエッシャー作品(1943年)は、色の区別をしないで純幾何空間的に見れば、1つの蜥蜴のモチーフで平面が埋め尽くされている。蜥蜴の左手の集まる点には6回回転軸6がある:

色を区別する超幾何空間的に見れば、3色の巡回置換が空間の3回軸と結合しており(これを $6^{(3)}$ と表示)、かつ、色を保存する2回回転軸と共存している。格子は単純な三角格子である。

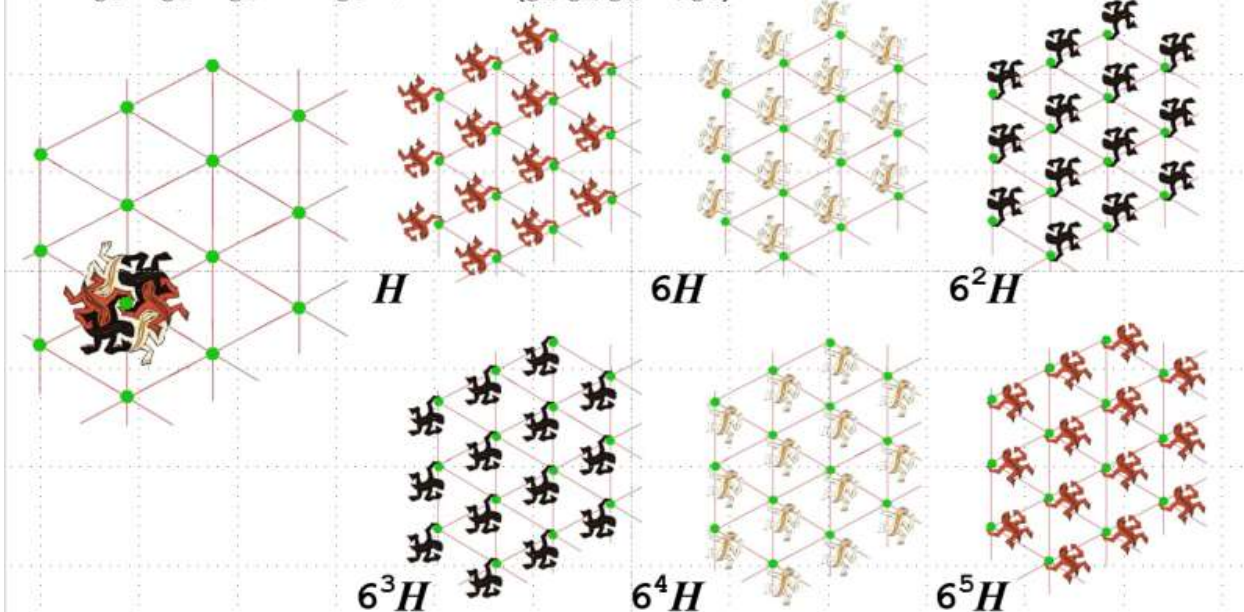
したがって、色の見分けをしなければ古典群 $P6(G_2)$ 、色の見分けをすれば、 $P6^{(3)}(G_2^{1,3})$ の3色群である。

この3色群は、純幾何空間的に見れば、らせん軸 6_3 があると見て3次元空間の G_3 に属する $P6_3$ とも解釈でき、これら両者の群は互いに同型である: $P6^{(3)} \cong P6_3$ 。興味深いことに、Escherがこの作品を発表したのは Shubunikovの反対称概念の発見よりも早いことだ。

空間群 G には正規部分群として並進群 H が含まれる。 H に関するラグランジュ展開の各剰余類を図解すれば、すべての格子点に1つの向きの蜥蜴1匹が配置された格子6種類である。並進群 H を法として同値とは、無限に繰り返す全格子点に散らばっている蜥蜴を1つの格子点の周りに集めることである。これが代表元系で、点群 $\{1, 6, 6^2, \dots, 6^5\} = G^*$ に同型な群に還元される。

$G \triangleright H$ (正規部分群)のとき,

$$G = g_1 H \cup g_2 H \cup g_3 H \cup \dots \cup g_6 H, \quad G/H = \{g_1, g_2, g_3, \dots, g_6\} = G^*$$



◆次回：1970以降 群の一般化 (ザモルザエフ, コプツィク) \Rightarrow (4)

幾何空間だけの対称群は、「古典対称群」と呼ばれます。幾何空間の各点に特性（例えば、色、符号など）を付与した空間の対称群は、「反対称群、色付き対称群、一般化群」などと呼ばれ種々あります。これらは、強誘電体、磁性体などの物質の性質の記述に応用できます。

References;

Шубников и Копцик, Симметрия в науке и искусстве (1972)

Shubnikov and Koptsik; Symmetry in science and art (1974)

Вайнштейн, Современная кристаллография, том 1(1979)

Заморзаев и др.; Симметрия, ее обобщения и приложения(1978)

Zamorzaev; generalized antisymmetry, Comput.Math.Applic. Vol.16,No.5-8,p555(1988)

👍 0 🗨️ 0

引用する

メニュー

----(4)----

群を積に分解しその生成群を調べたり，逆に2つの群の積で大きな群を生成したりするとき，群の直積 $H \times A$ や半直積 $H \rtimes A$ が役に立つ（ここに，群 H は群 G の正規部分群，群 A は部分群：直積は部分群 A も正規部分群である特殊な場合に成立する）。

直積 $H \times A$ は， $h_i \in H, a_j \in A$ とし，ペア $\{h_i a_j\}$ を元として構成される群だが，任意の元 $h_i a_j, h_k a_l$ がいつも可換とは限らないので，一般には，積則は半直積になる。

2つの群（例えば，結晶構造とそれを舞台に発現する特性の対称性）の関係を研究するときにもこの方法は応用される。

●ピエール・キュリーの原理（1894）

対称性 G_{p_i} の現象が起こるのは，対称性 G_{p_i} （または，その部分群）の舞台で可能である。

これは，「原因はすべて結果に反映されるべきである」という因果律である。 $G_{p_i} \supseteq G_{\text{cryst}} = \cap G_{p_i}$

結晶とX線回折強度像の対称性の関係は，ピエール・キュリーの原理の一部であり，非正規の群の拡大問題として解決されるべきである。

●前回（3）概略したが，特性次元を幾何学次元空間に付け加えた空間（色付き空間）へ群を拡大するとき，外部半直積が登場する。さらに一般化を進めるためにリース積が必要になる。2つの非正規部分群による非正規の拡大である場合は，これは非常に困難な課題である。

群の同型定理を基礎とする拡大理論と結晶学の関係は，数学と応用現場が互いに影響しあつてともに発展してきた良い事例である。

■半直積

群 H, A および群準同型 $f : A \mapsto \text{Aut} H$ (H を自分の上で変換する) が与えられたとする ($a_j \in A$ の H への作用 f を f_{a_j} と表す)。

このとき直積集合 $H \times A$ に，積則

$$(h_i a_j) \cdot (h_k a_l) := (h_i f_{a_j}(h_k) a_j a_l) \text{ を適用すると } H \times A \text{ は群をなす。}$$

(1) 任意の元 $a_j h_k$ は，一般には可換でない $a_j h_k \neq h_k a_j$ のだが， H が正規部分群であれば，適当な $f_{a_j}(h_k) \in H$ があり， $a_j h_k = f_{a_j}(h_k) a_j$ と書ける。

この群を H の A による半直積といい， $H \rtimes A$ と表す。群 H も群 A が群 G の部分群ならば， $H \rtimes A$ は内部半直積という。

(2) もし， H の元と A の元が可換（群 H も A も正規部分群の場合）であれば，任意の $a_j h_k$ は可換であり，直積の積則 $(h_i a_j)(h_k a_l) = (h_i h_k a_j a_l)$ のままで群をなす。直積は， f_{a_j} を恒等写像 f_1 とした半直積の特殊な場合と見做せる。

$$h_i, h_k \in H, a_j, a_l \in A$$

$$h_i a_j \cdot h_k a_l = h_i (a_j h_k a_j^{-1}) a_j a_l = h_i h_k^{a_j} a_j a_l$$

$$h_k^{a_j} \in H$$

■応用例：結晶群 $4mm$ は，群 4 と群 m の半直積。

$$G = 4mm = \{1, 4, 4^2, 4^3, m_x, m_y, m_a, m_b\}$$

$$G \supset H = 4 = \{1, 4, 4^2, 4^3\}, \quad G \supset A = m = \{1, m\} \quad (\text{ここで用いた } \supset \text{ は部分群の意})$$

$$1 \cdot \{1, 4, 4^2, 4^3\} = 4, \quad m \cdot \{1, 4, 4^2, 4^3\} = \{1, 4^3, 4^2, 4\} = 4 \quad \text{群 } A = \{1, m\} \text{ は群 } 4 \text{ の自己同型写像}$$

$$4mm = 4 \times m (= H \rtimes A)$$

■外部半直積

2つの群 H と A （与えられた群の部分群である必要はない）と群準同型 $f : A \mapsto \text{Aut} H$ が与えられると，内部半直積の場合と同様に， f に関する H と A の外部半直積と呼ばれる新しい群 $H \rtimes A$ を構成することができる。これにより，幾何学空間と異なる次元を付与した空間へ群の拡張ができる。

■リース積 (wreath product)

群論のリース積は，半直積の積則をさらに拡張したものである。

G と A をそれぞれ群， X を左 G 集合 (G の要素 g が X の左から作用する) とする。この状況下で，群準同型

$f : X \mapsto \text{Aut} A$ を考える。この写像の集合 $f \in W$ を用い，半直積 $W \rtimes G$ が定義でき，これを A の G による非制限リース積という。 G は W に群同型である。 $(g \cdot f)(x) = f(g^{-1} \cdot x)$

- リース積は理解しにくいですが、龍孫江の数学日誌に良い解説があります。

群論：群のリース積の構成



<https://note.com/ron1827/n/nd464de95a750>

■リース積の応用

リース積では $g \in G$ も $f \in W$ も左 G 集合 X に作用する写像 (演算子) と理解する。

非正規の拡大の例に、Van der Waerden-Bruckhardt の群 $G_{WB}^{(p)}$ がある。この群は、3項記号 $G/H'/H$ で定義されるが、ここで、古典群 $G \leftrightarrow G_{WB}^{(p)}$; 指数 p の部分群 $H' \subset G$ は、性質 (色) i を保存する部分群 $H_i^{(p)} \subset G_{WB}^{(p)}$ に同型対応する ; 正規部分群 $H = G \cap G_{WB}^{(p)}$ (古典部分群 $H \triangleleft G^{(p)}$ を作っている) は、 H' のすべての共役部分群の共通部分によって決定される $H = \bigcap gH'g^{-1}, g \in G$ 。

色群 $G_{WB}^{(p)} = g_1H_i^{(p)} \cup g_2H_i^{(p)} \cup \dots \cup g_pH_i^{(p)}$ は、部分群 $H_i^{(p)}$ を、剰余類の代表系

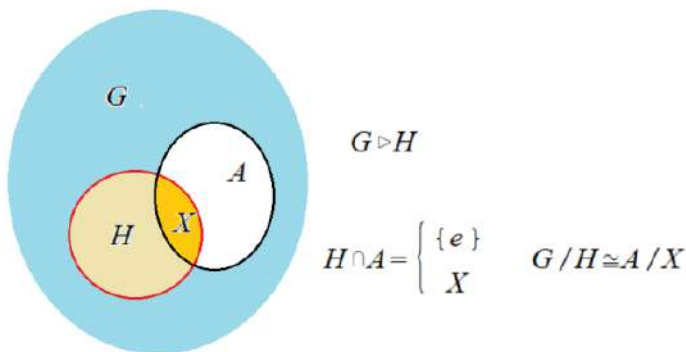
$G^{(p)*} = \{g_1, g_2^{(p)}, \dots, g_p^{(p)}\}$ で拡大したものと表現されるが、一般には群を成さない。 $G_{WB}^{(p)}$ で作用する性質 p 個の置換は、 g_i を左から乗じることによる左剰余類 g_kH' の置換である :

$$g_i^{(p)} = g_i p_i = p_i g_i, \quad p_i = \begin{pmatrix} g_1H' & g_2H' & \dots & g_pH' \\ g_i g_1H' & g_i g_2H' & \dots & g_i g_pH' \end{pmatrix}$$

P -対称の Zamorzaev 群は、対応する図形の一般点がそれぞれ1色に塗られる場合には、色群のすべての型を包含する。このようなすべての群 $G^{(p)}$ をその生成群 G から、次の手段により導くことができる :

- 1) $H = G^{(p)} \cap G = G^*$ は $G^{(p)}$ の古典的部分群、 $Q = G^{(p)} \cap P$ は色置換の部分群として、 $G/H \leftrightarrow P/Q$ となるようなそれぞれの中の正規部分群 H と Q を探す。
- 2) 同型 $G/H \leftrightarrow P/Q$ の確立と同型対応する剰余類 $gH \leftrightarrow \varepsilon Q$ の対積を作る。
- 3) 得られた積を集める : $G^{(p)} = \bigcup gH \cdot \varepsilon Q$

この説明枠外に、Wittke-Garrido 色対称群と複素関数の Ewald-Bienenstock 対称群が存在する。これらの場合には、色変化の規則は、変換だけでなく、図形中の点の取り方にも依存する、すなわち、対応する色変換は局所的となる。



●References

色群の一般化には ; Niggli, Wondratschek, Wittke, Van der Waerden, Burckhardt, Pawley, Mackay, Zamorzaev, Koptsikなどが係わっている。

Shubnikov and Koptsik; Symmetry in science and art (1974)


V.A.Koptsik; Generalized symmetry in crystal physics; Comput. Math. Applic. Vol.16, No.5-8, pp.407-424, 1988

A.M.Zamorzaev; Generalized antisymmetry; Comput. Math. Applic. Vol.16, No.5-8, pp.555-562, 1988

Alexandre Lungu; Zamorzaev's P-symmetry and its further generalizations; 2002; Moldova State University

👍 0 🔄 0

メニュー

SCK通信 (毎週火曜日更新) 

note記事

メルマガ記事

旧ブログ