

ロシアで発展した結晶群とその一般化

- 結晶空間群 ϕ ← E.S.フェドロフ(1890)

第1部 古典結晶群(幾何空間の対称変換)

- 反対称群 \mathcal{L} ← A.V.シュブニコフ(1945)

第2部 古典結晶群の一般化(色付き空間の対称変換)

- 色付き空間群 \mathcal{L} ← N.V.ベーロフ

- 空間群の一般化 ← A.M.ザモルザエフ

← V.A.コプツィク

幾何空間次元とは異なる特性次元を追加

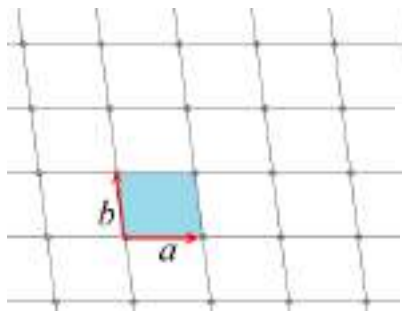
幾何空間次元の追加は高次元化という

- ① シュブニコフが導入した「反対称」概念で、結晶群の一般化が始まる。ここで、群の理論「正規拡大」が、どのように使われているだろうか。
- ② 群論と結晶物理は相互に影響を与えながら発展して来た。
- ③ 群論と言えばガロア理論だが、数学のための群論は理解より、結晶(具体的な場)を踏まえて、学ぶ方が理解し易い[数学月間流]。
- ④ 2次元の簡単な例で仕組みを理解しよう。

プレゼン狙いと方針

[予備知識]

結晶空間 = 周期的なユークリッド空間(デジタル化された空間)

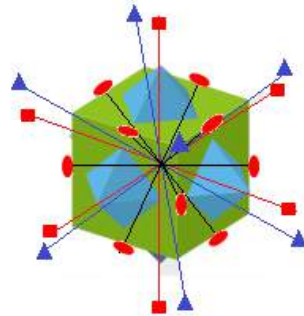
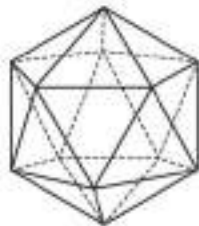


並進群(格子点) $R_{nmp} = n \cdot \vec{a} + m \cdot \vec{b} + p \cdot \vec{c}$

結晶点群 = 1点を不動点にする対称操作の群

空間周期性と両立できる回転対称には制限がある。

準結晶は正20面体の点群対称だが、5次元格子なら両立できる。



古典結晶群 → 色付き結晶空間群 → 一般化

1890 — 空間群(230種); フェドロフ, シェンフリース, バーロー

1895 — X線の発見; レントゲン, 1901第1回ノーベル賞

1905(血の日曜日)

1912 — ラウエの実験; ラウエ(フリードリッヒ, クニッピング), 1914ノーベル賞

1913 — 結晶構造解析; ブラッグ父子, 1915ノーベル賞

1917(10月革命)

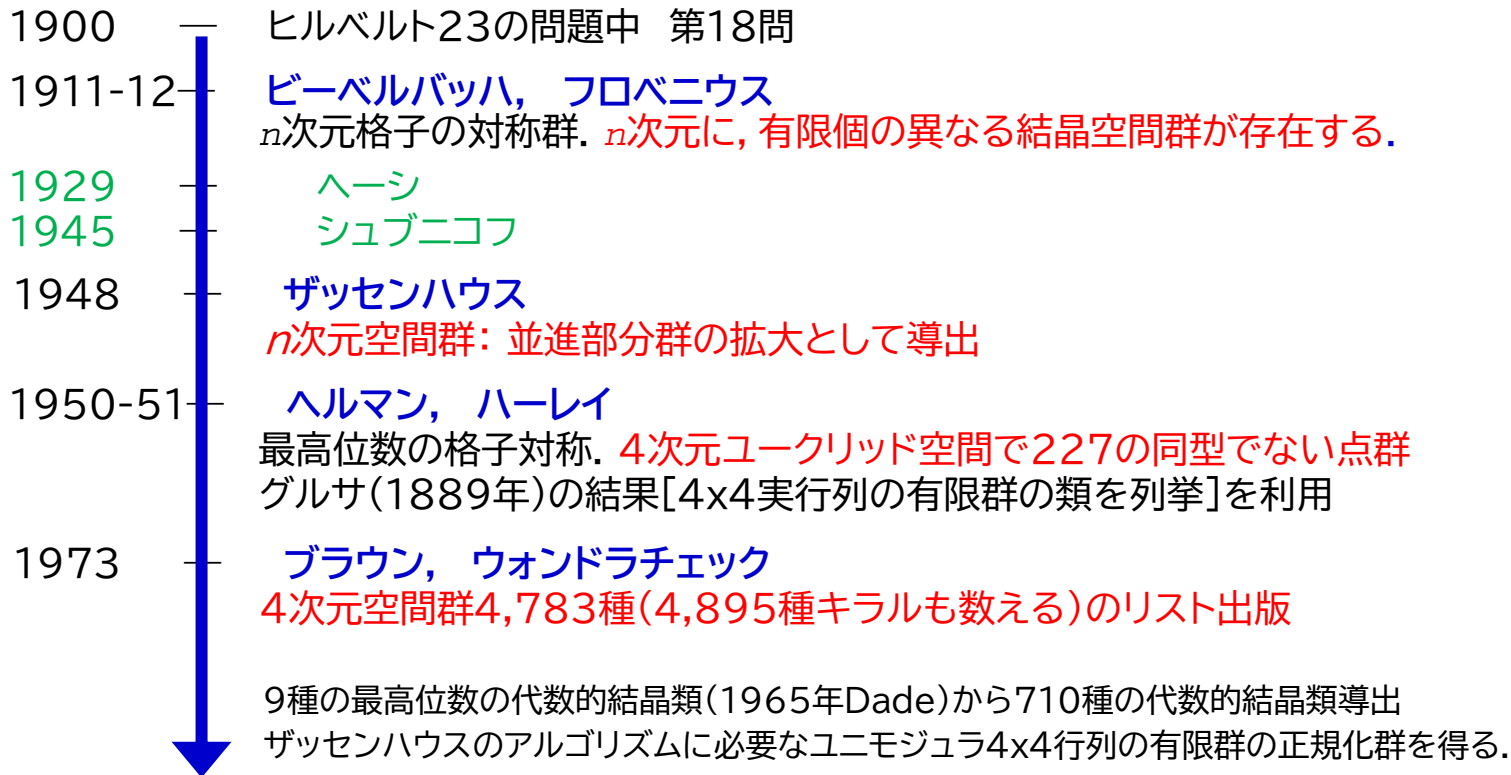
1941-1945(大祖国戦争)

1945 — 反対称の概念; シュブニコフ, ヘーシュ(1929)

1956 — 色付き空間群; ベーロフ

1970 — 空間群の一般化; ザモルザエフ, コプツィク

結晶空間群 → 高次元化 → 一般化



- Heinrich Heesch(1929)

BieberbachとFrobenius

n次元空間群は有限個か(Hilbertの第18問)

⇒ ドイツ, スイスの数学者の関心事

高次元結晶空間

帯群, 層群など空間群内の「小群」構成 (20世紀初頭の研究)

- A.V.Shubnikov(1945)

「反対称」を, 物理性質次元による古典群の拡大として定式化.

幾何空間に物理的な変化を付与し, 特性の対称性を扱う応用的価値に注目した.

黑白群(Shubnikov), 多色群(Belov)

⇒ ソビエト結晶学派の思想

対称性理論は, それが自然科学の実践で機能するか, 将来的に機能する場合に価値がある.

高次元空間群



一般化



色付空間群

A.Φ.ヨツフェ アブラム Фёдорович Ио́ффе(1880-1960)

ウクライナ生まれのソ連の物理学者

1902年にペテルブルグ工業大学卒業後、レントゲンの弟子

1918年:ヨツフェ物理学技術研究所(ペテルブルグ)

ソビエト政権の最初の10年間の物理学はモスクワとレニングラードに集中した。
今や分散の時だ。産業と結びつく必要のある研究所は工場(産業)が存在する場所になければならない。⇒1928年, ハリコフ物理工学研究所創設

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にはランダウもいた。



スターリン時代のユダヤ人狩りの対象となり, 1950年にその地位を追われる。
1952-1954年にはソ連科学アカデミーの半導体関連部門を監督し,
1954年にはこれを半導体研究所として独立させた。

二人のШубников

ウクライナ(ハリコフ)物理工学研究所

兄
父
Васи́лий Васи́льевич Шубников

シュブニコフ=ド・ハース効果

Лев Васи́льевич Шубников(1901-1937)

レフ 甥

銃殺



L.D.ランダウ

弟
Алексе́й Васи́льевич Шубников(1887-1970)

アレクセイ 叔父

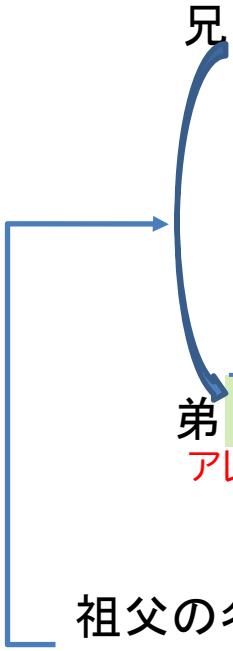
シュブニコフ群



モスクワ大, 結晶学研究所

祖父の名前

Васи́лий
ヴァシリイ



E.S. Федоров (1853-1919)

ペテルブルグ工科大学, 化学
1880年ペテルブルグ鉱山大学, 結晶学
(Горный Институт)
貴族, 革命家
1905年ペテルブルグ鉱山大学, 学長

血の日曜日事件(1905), 2月革命(1917)



Trans. Mineral. Society
St. Petersburg, 1891

N.V. Бероф (1891-1982)

ペテルブルグ工科大学. 鉱物
シュブニコフが設立した新しい結晶学研究所入所,
X線部門の責任者
ゴーリキ大



ザモルザエフ (1927-1997)

- ・1950年:レニングラード州立大学卒
幾何学(A.D.アレクサンドロフ)
 - ・1953年:新設のキシネフ大学(モルドバ)へ
 - ・離散幾何学のソ連2番目のセンターとなる。
(ステクロフ数学研究所(モスクワ)に次ぐ)
- B.N.デローネなど



コプツィク(1924-2005)

モスクワ州立大学, 物理学
結晶学研究所(モスクワ)
シュブニコフの後継者

Crystallographic groups of four-dimensional space
Brown, Bulow, Neubuser, Wondratschek & Zassenhaus (1978)



Hans Wondratschek (1925-2014)

鉱物学
カールスルーエ大

[定義]群

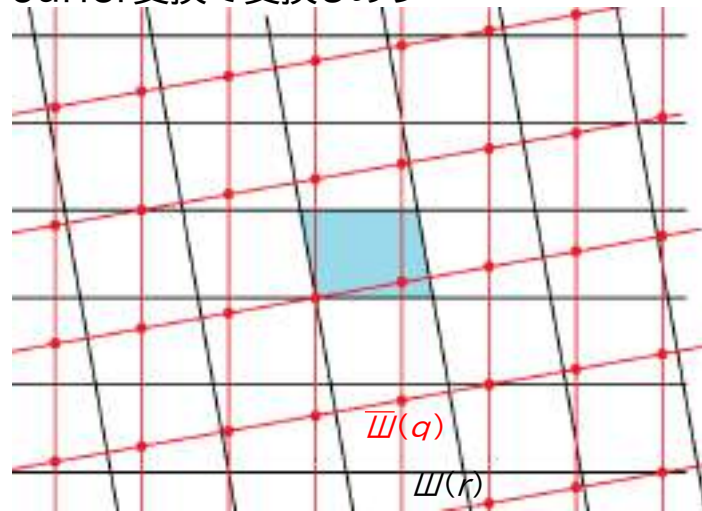
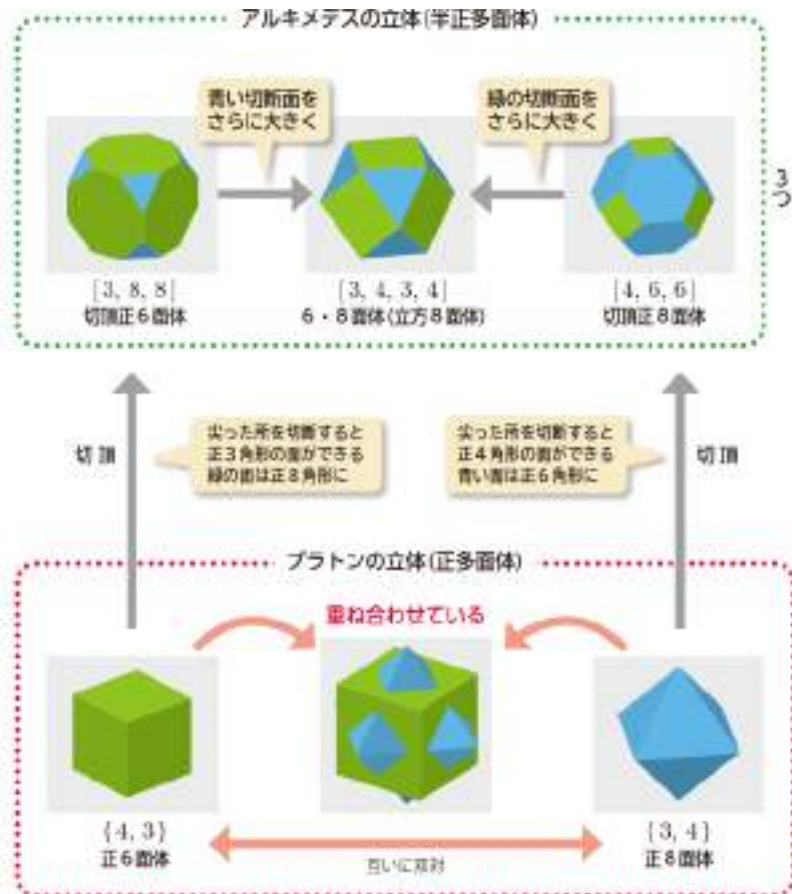
$G = \{a, b, c, \dots\}$ 集合 G が群と呼ばれるのは、次の公理を満たす場合である:

- 0) $\forall a, b \in G \rightarrow a \cdot b \in G$ 任意の2元に2項演算 \cdot 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 $e \cdot a = a$ が成り立つ.
- 3) $a \cdot x = x \cdot a = e$ x : a の逆元 a^{-1} , 左逆元
 $\forall a \in G$ 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).

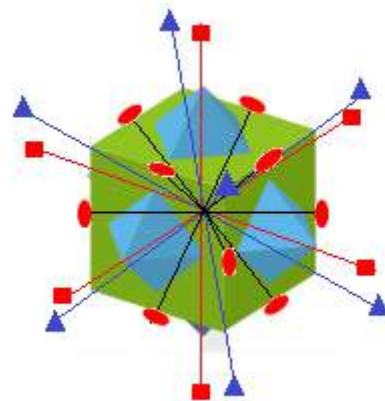
互いに双対な図形の対称性は同一 双対空間はFourier変換で変換しあう



対称操作

(鏡映面は省略した)

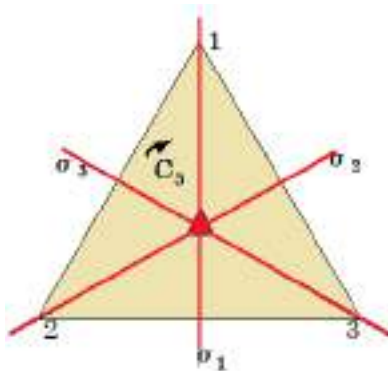
- 4回対称軸 3本
- 3回対称軸 4本
- 2回対称軸 6本
- 鏡映面は略



点群 432
正8面体群

(2次元図形)正3角形⇒3次の対称群(置換群)

$$3m = 3 \times m$$



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)

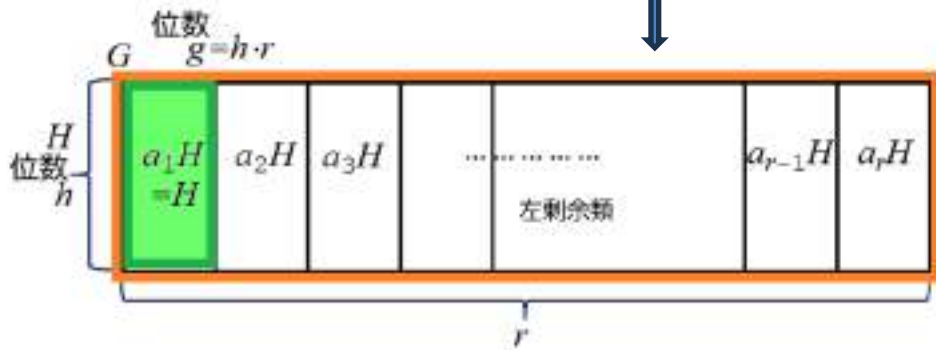
乗積表で確認すること:

- 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
- 正規部分群: $\{E, C_3, C_3^2\}$

ラグランジュ展開: H (位数 h) は G (位数 g) の部分群; 部分群の指数 $r = g/h$

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

適当な $a_i \in G$ を r 個選び, r 個の剰余類の直和で表現できる. r は一意に決まる.



$$G/H \cong \{a_1, a_2, a_3, \dots, a_r\} \cong G^*, \quad G = H \otimes G^*$$

群 H を群 G^* で拡大して群 G を得る.

[定義] 正規部分群

$\forall a \in G$ に対して, $aHa^{-1} = H$ (あるいは, $aH = Ha$) であるとき, 部分群 H は正規であるという.

$G \triangleright H$ と表記する.

・2つの左剰余類の積に関して, $aH \cdot bH = abH$ が成立する.

$G \triangleright H$ のときに, 剰余類全体は, H を法(写像の核)とする群 G/H (商群) をなす.

(注) 部分群 H が正規部分群でない場合も, 剰余類展開はできるが, 剰余類は群をなさない.

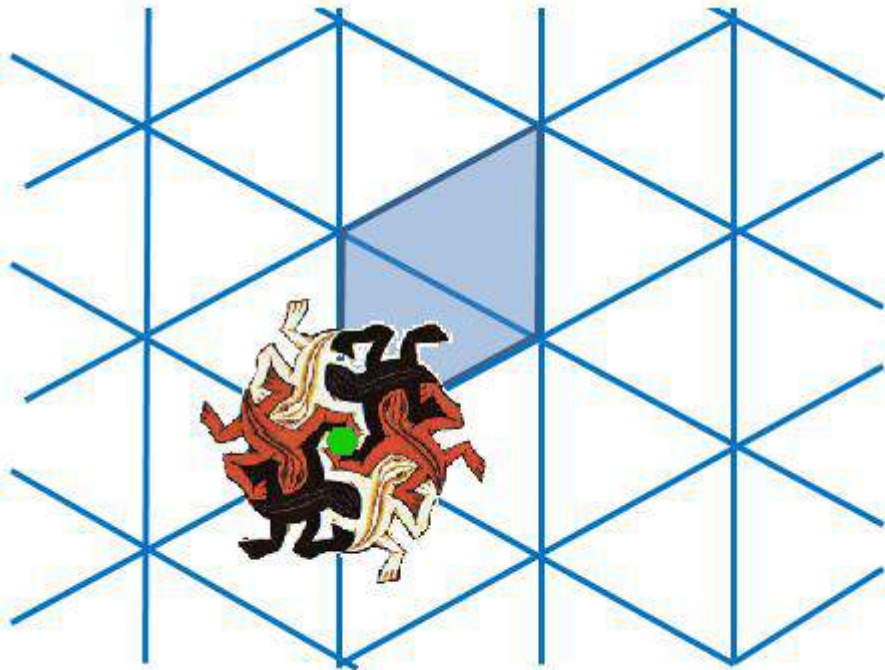
結晶空間 = デジタル空間

3色群 $P6^{(3)}$



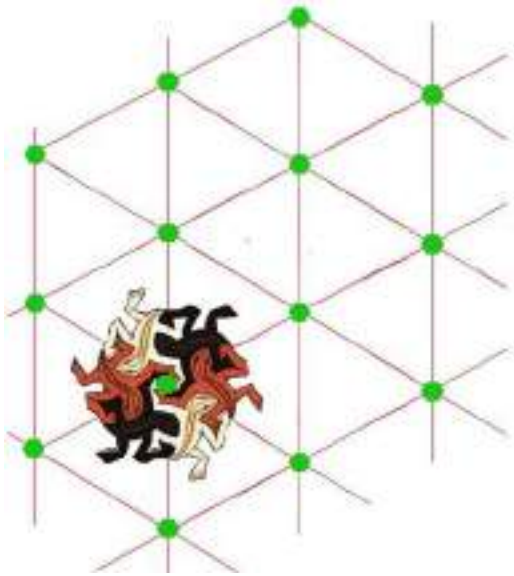
M.C. Escher

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 \times 点群

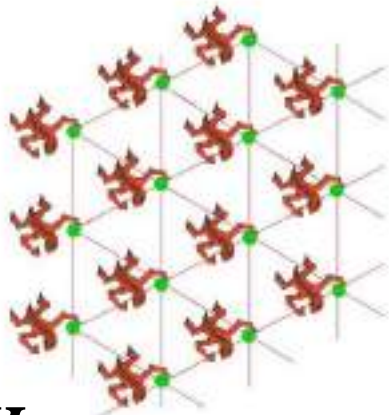


$G \triangleright H$ (正規部分群) のとき,

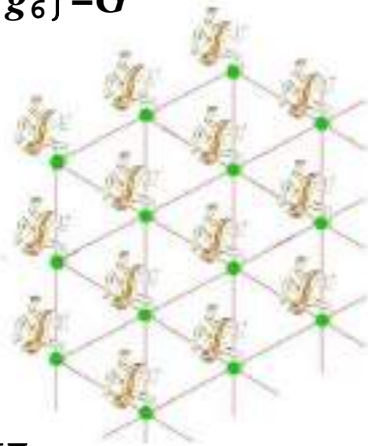
$$G = g_1 H \cup g_2 H \cup g_3 H \cup \dots \cup g_6 H, \quad G/H = \{g_1, g_2, g_3, \dots, g_6\} = G^*$$



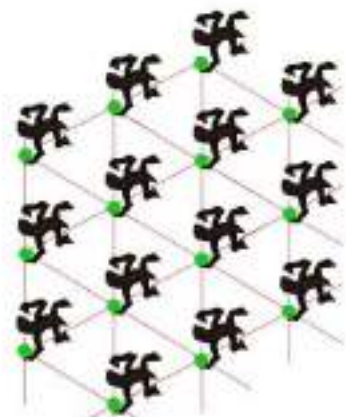
H



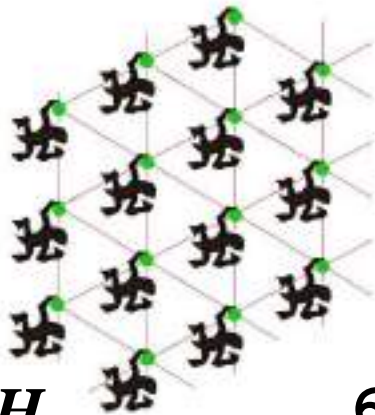
$6H$



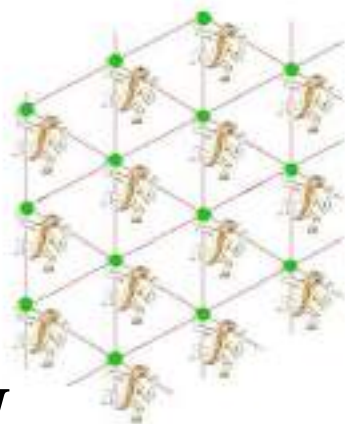
6^2H



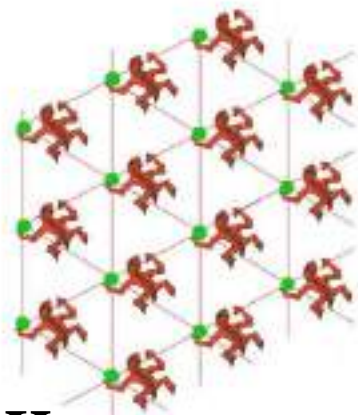
6^3H



6^4H



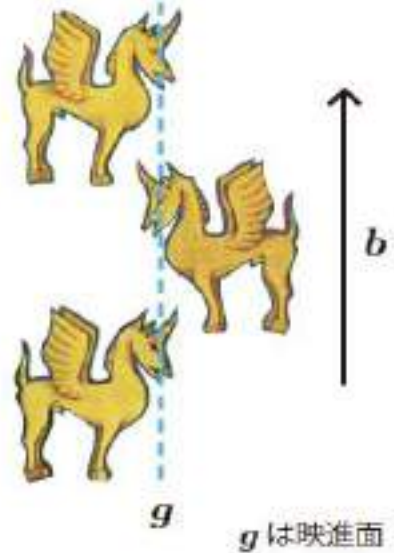
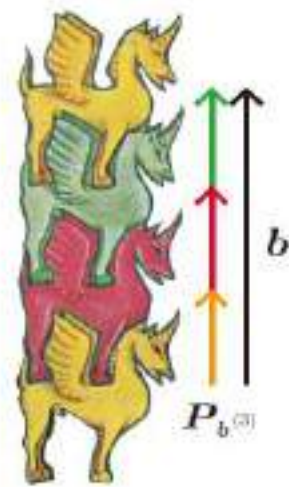
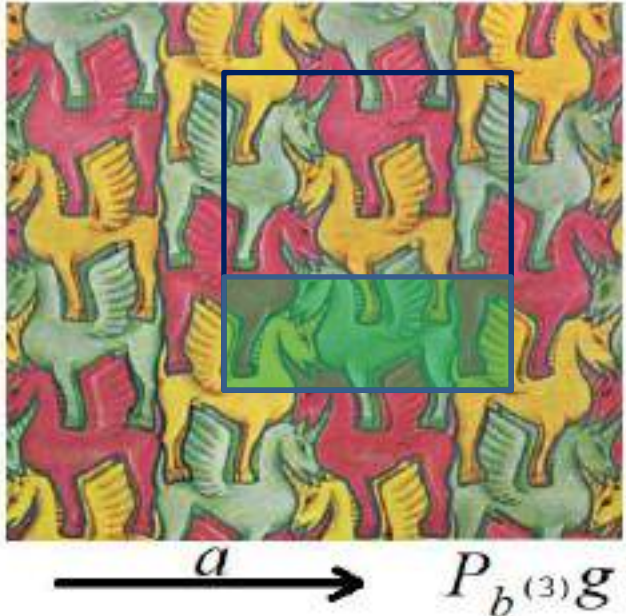
6^5H



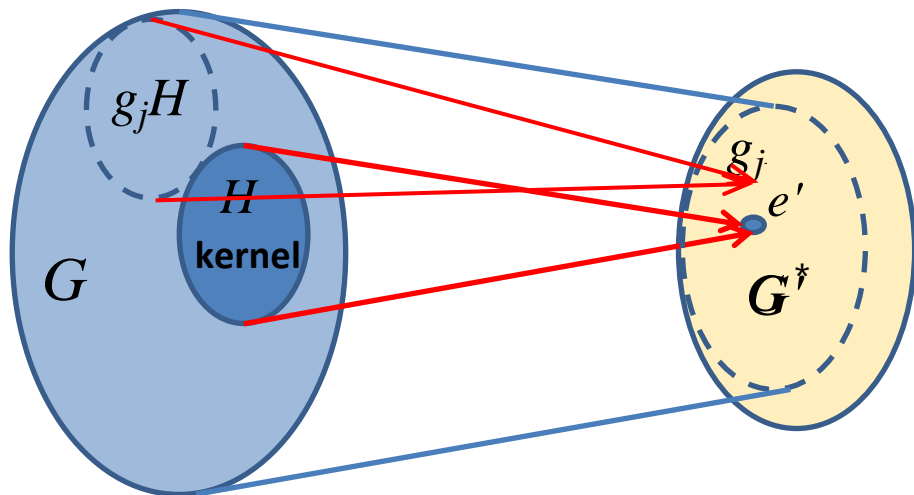
$$G_2^{1,3}$$

色付き平面群 $P_{b^{(3)}}g$ (Escher作品) 3色置換の原因が並進部分にある例

3色並進群 $b^{(3)}$ を, 点群 $\{m\} = \{g\} \pmod{b}$ により拡大



群の正規な拡大



$$G = g_1 H \cup g_2 H \cup \dots \cup g_s H$$

$G \triangleright H$ (正規部分群)ならば,

$$G/H = \{g_1, g_2, \dots, g_s\} = G^*, \quad G^* \cap H = \{e = g_1\}$$

[正規部分群の定義]

$$\forall g \in G \text{ に対し, } gH = Hg \text{ (あるいは } gHg^{-1} = H)$$

$g_i H \cdot g_j H = g_i g_j H$ となるので,

剰余類が群をなし商群 G/H が作れる.

正規部分群 H を部分群 G^* で拡大して群 G を得る:

$$G = H \otimes G^* \text{ 直積 } h_i g_i \cdot h_j g_j = h_i h_j g_i g_j \quad \Leftarrow G^* \triangleleft G$$

$$G = H \circ G^* \text{ 半直積 } h_i g_i \cdot h_j g_j = h_i h_j^{g_i} g_i g_j \quad (h_j^{g_i} \equiv g_i h_j g_i^{-1}) \quad \Leftarrow G^* \subset G$$

$$G = H \odot G^H \text{ 条件積} \quad G^H \simeq G^* \pmod{H}$$

点群 $4mm$ の乗積表

$$4mm = 4 \circ m = 2mm \circ C_4 \pmod{C_2}$$

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

$$m = \{1, m_x\}, \{1, m_y\}, \{1, m_a\}, \{1, m_b\}$$

モジュラス群

$$C_4 \pmod{C_2}$$

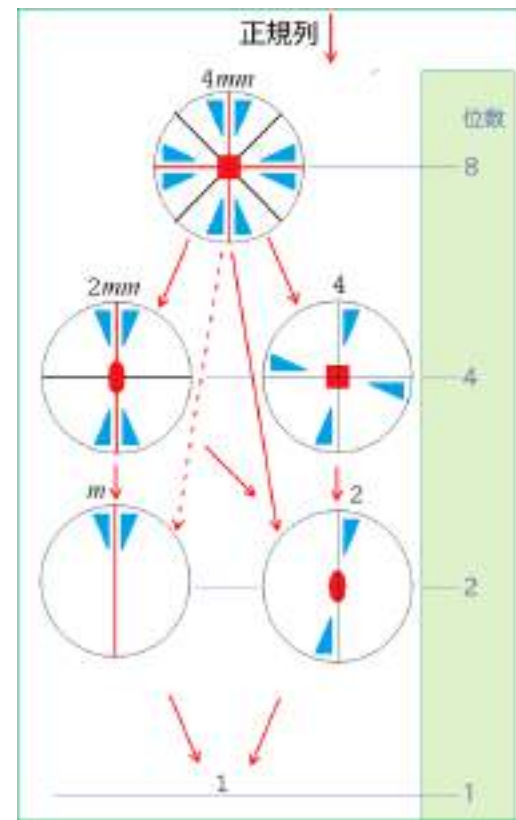
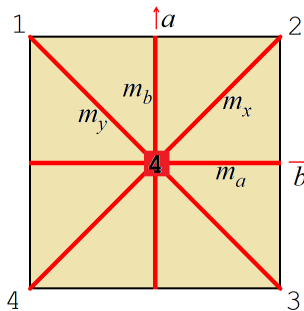
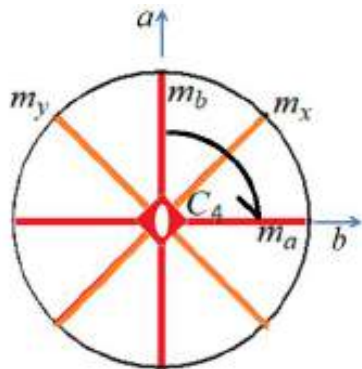
[定義] 正規部分群 $H \triangleleft G$ とは

$$\forall a \in G \text{ に対して, } aHa^{-1} = H$$

(あるいは, $aH = Ha$)

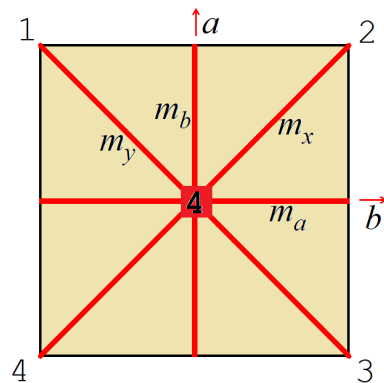
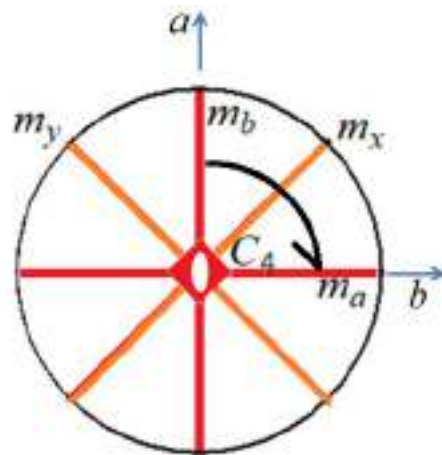
$$C_4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, C_4^2 = C_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}, C_4^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

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



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

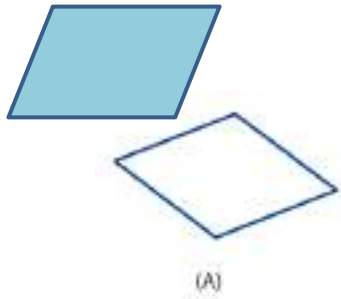
$$4mm = \{1\} + 2\{C_4\} + \{C_2\} + 2\{m_x\} + 2\{m_a\}$$

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。

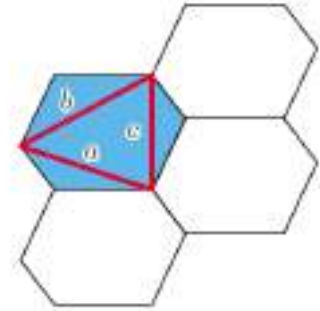
4つのCの原子軌道関数を基底にして作った分子軌道(点群 $4mm$)の正則表現を簡約して、それに含まれる既約表現を求める(各既約表現はエネルギー準位に対応)。

有限群の異なる既約表現の個数は共役類の個数に等しい

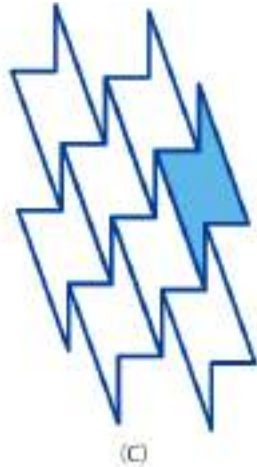
平面充填ができる**平行多边形**は、4边形と6边形



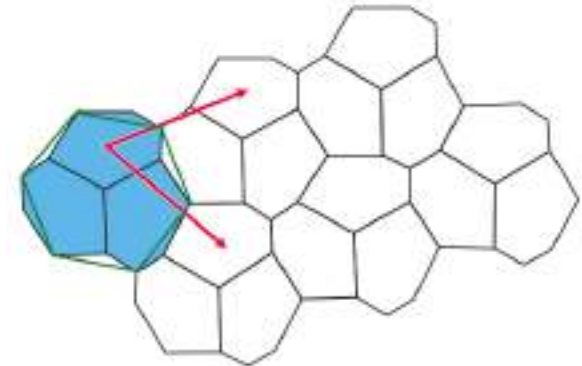
Escherのモチーフ



a, b, c のうちで独立な並進ベクトルは2つ



Taniのモチーフ



1種類のモチーフが3つ集まって平行12边形(平行6边形)を作り、平面を充填する例。

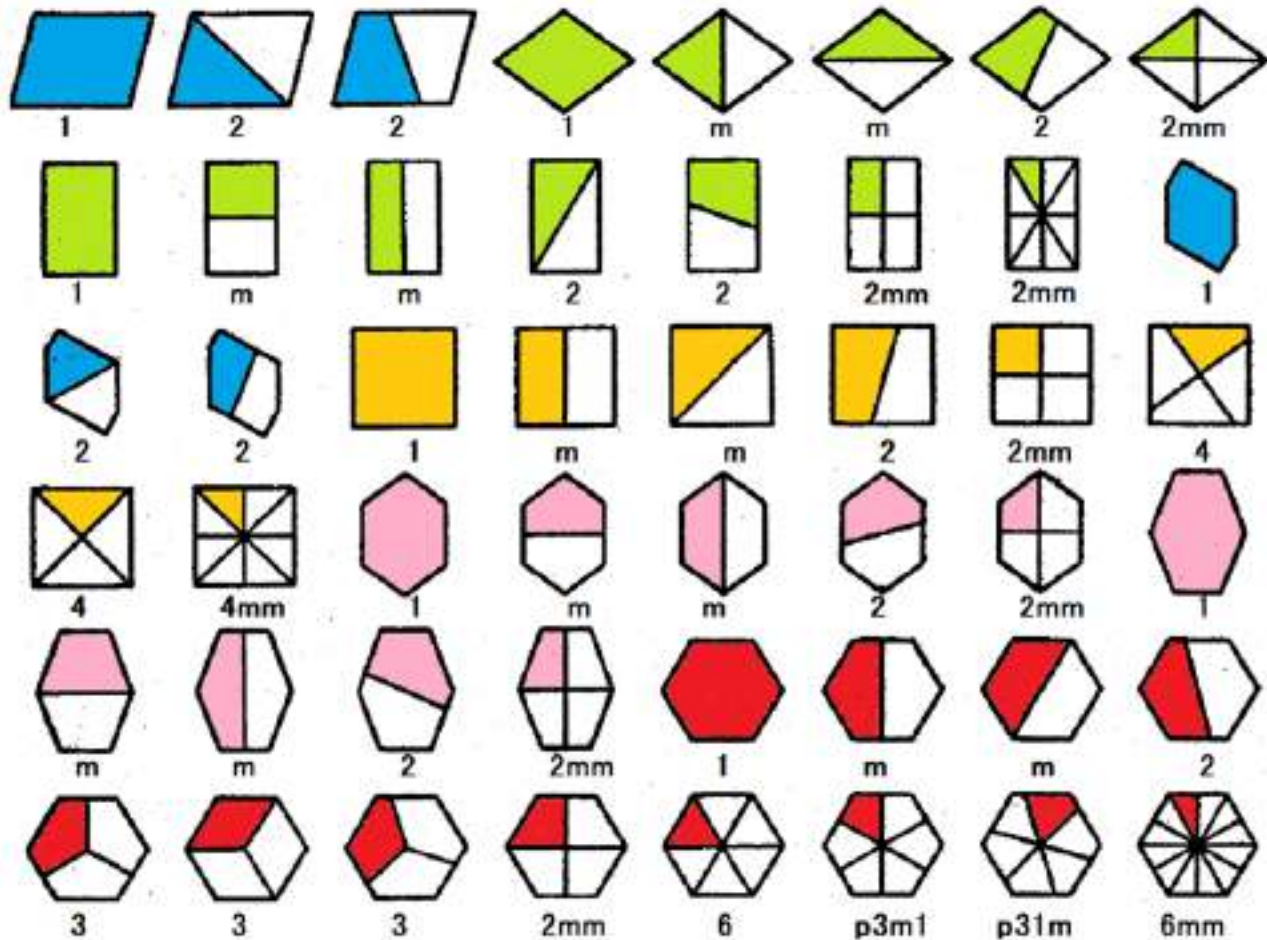
美しい幾何学(技術評論社),p.68,69より

(注)非周期タイリングも可能だがここでは扱わない

共型(symmorphic)群を求める

(非共型群4種を導き)平面群は全部で17種

13種



非共型群

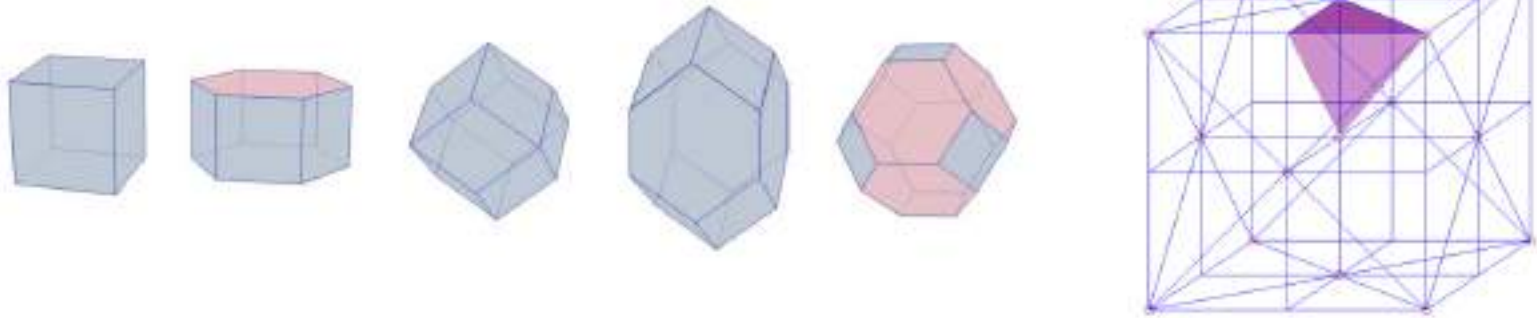
$pm \rightarrow \begin{cases} pm \\ pg \end{cases}$

$p2mm \rightarrow \begin{cases} p2mm \\ p2gm \\ p2gg \end{cases}$

$p4mm \rightarrow \begin{cases} p4mm \\ p4gm \end{cases}$

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



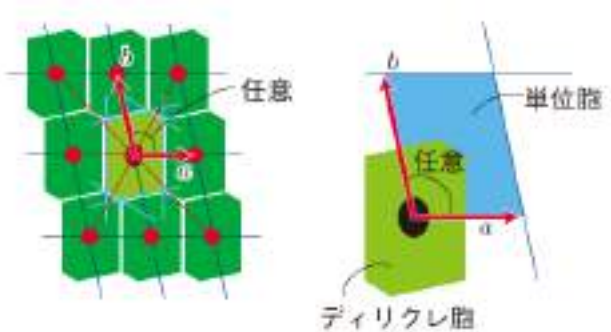
これを, 等価な部分(非対称要素)に分割する.

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

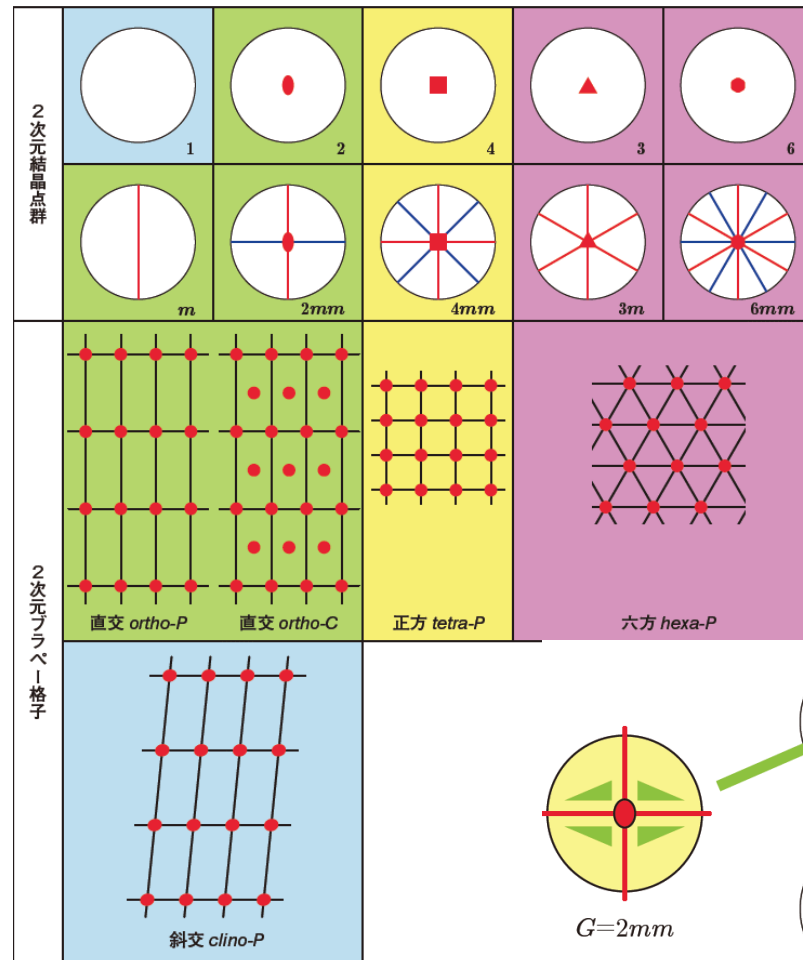
2次元ブラベー格子 5種

晶系	単位胞	ブラベー格子	非座標式表示	座標式表示	点群	空間群
6方	2×正3角形		(a/a)	p	6mm 6 3m 3	$p6mm$ $p6$ $p3m1, p31m$ $p3$
正方	正方形		$(a:a)$	p	4mm 4	$p4mm, p4gm$ $p4$
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	$c2mm$ cm $p2mm, p2mg, p2gg$ pm, pg
	長方形		$(b:a)$	p		
斜方	平行4辺形		(b/a)	p	2 1	$p2$ $p1$



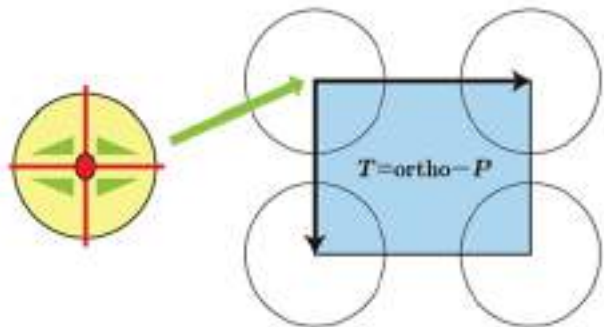
「美しい幾何学」p.55(技術評論社)より

並進群を点群で拡大して空間群を得る



格子点 に点群を配置し平面群を作る

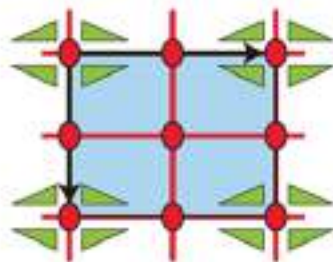
映進 g は 2 回 続 け る と 格 子 分 移 動 $g^2=1 \pmod{T}$



点群
 $G^*=2mm=[1, 2, m_a, m_b]$

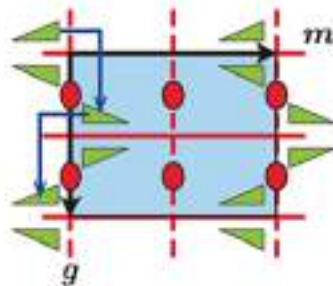
並進群
 $T=\{\vec{a}, \vec{b}\}$

$P2mm$



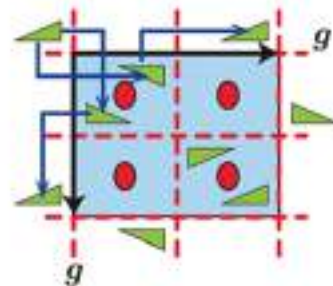
$P2mm=T \otimes 2mm$

$P2mg$



$P2mg=T \otimes 2mg \pmod{T}$

$P2gg$



$P2gg=T \otimes 2gg \pmod{T}$

共型

$P2mm$

非共型

$P2mg$

$P2gg$

平面群 ϕ

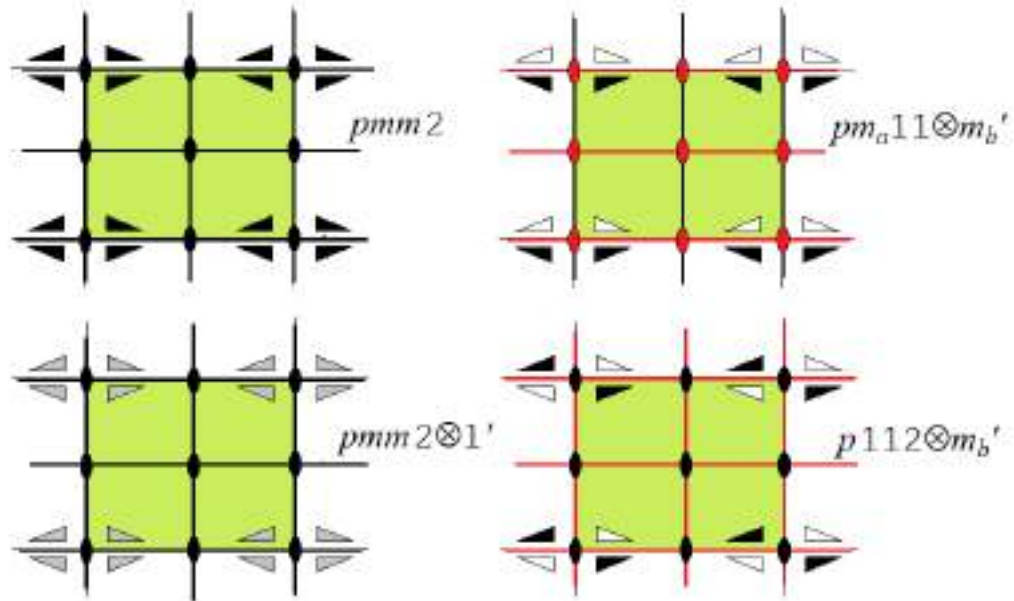
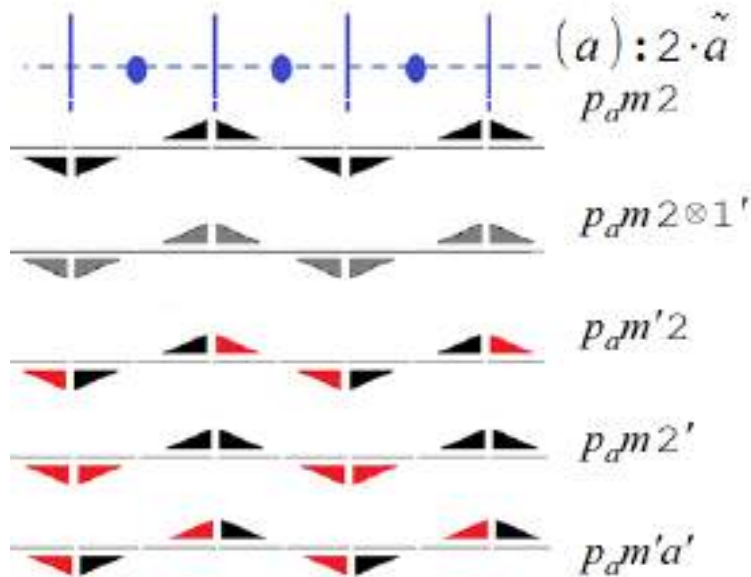
は、格子分移動した点は同値という見方をすると、 $2mm$ に帰着する。
 $(\text{mod } T)$ 点群 G^*

反対称概念の起源

⇒ 両面平面を単面平面上に、黑白2色を用い描画した

Speiser(1927)
 $7G_{2,1} \Rightarrow 31G_{3,2,1}$ [3次元帯群]

Weber(1929)
 $17G_2 \Rightarrow 80G_{3,2}$ [3次元層群]



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

$$230G_3 \text{ (3次元空間群)} \longrightarrow 1651G_3^1 \text{ (3次元黒白空間群)} \longrightarrow G_{4,3} \text{ (4次元空間群の1部)}$$
$$230\Pi(G_3) + 230C + 119M = 1651G_3^1$$

$$17G_2 \text{ (2次元平面群)} \longrightarrow 80G_2^1 = G_{3,2} \text{ (両面層群)} \longrightarrow 528G_{3,2}^1 \text{ (3次元層黒白群)}$$
$$17\Pi(G_2) + 17C + 46M = 80G_2^1$$

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

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

性質数 色数



次元 保存される部分空間

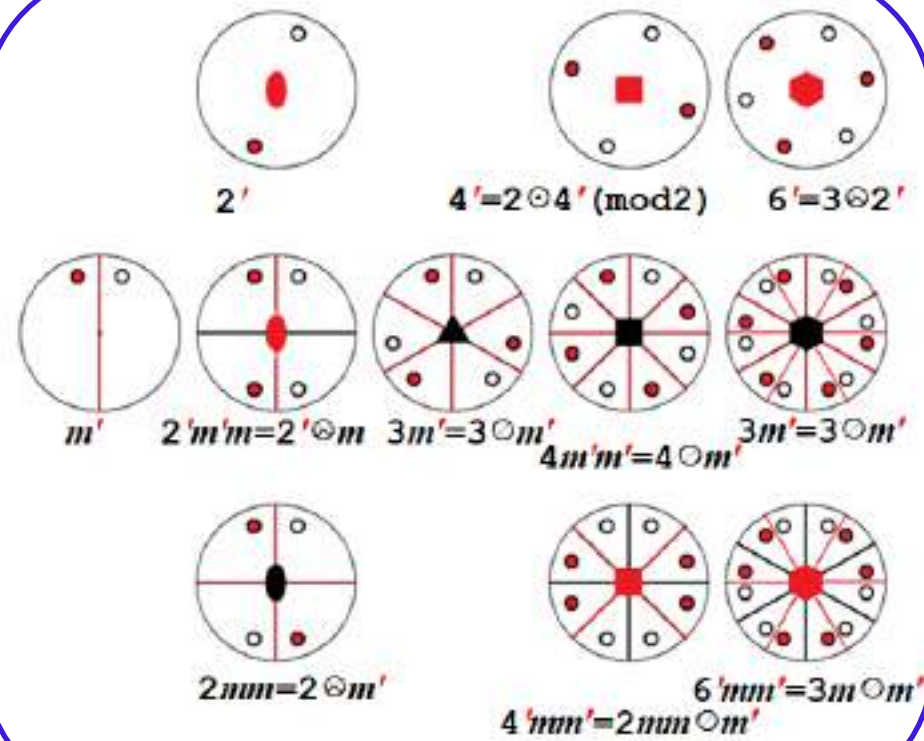
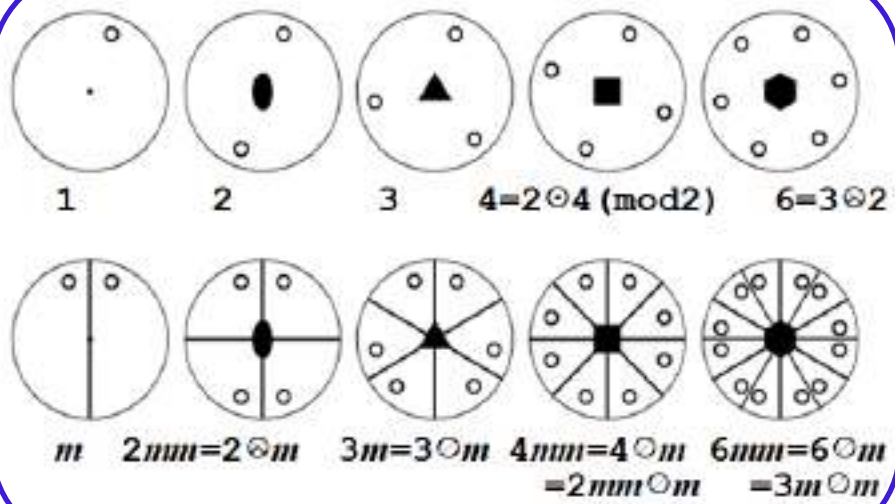
一般群の記号

Bohm(1966)

Koptsik(1967)

空間次元	4	3	2	1	0	反対称次元	空間次元	4	3	2	1	0	反対称次元
$G_{3,0}^1$	122	31	5	2	0	2 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

$10G_{2,0}$ (2次元点群) \rightarrow $31G_{2,0}^1$ (2次元黑白点群) (古典点群 $10I$ + 中性点群 $10C$ + 黑白点群 $11M$)



半直積 $G = \{HA\} = H \rtimes A$ の積則 $G \triangleright H$

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

$$a_j h_k a_j^{-1} = h_k^{a_j} \in H \quad h_k \longrightarrow h_k^{a_j}$$

$$A \longrightarrow \text{Aut}H$$

直積は $h_i a_j \cdot h_k a_l = h_i h_k a_j a_l$

($a_j h_k = h_k a_j$, すなわち, $G \triangleright H$ かつ $G \triangleright A$ のとき)

半直積の一般化(リース積)
非正規の拡大へ

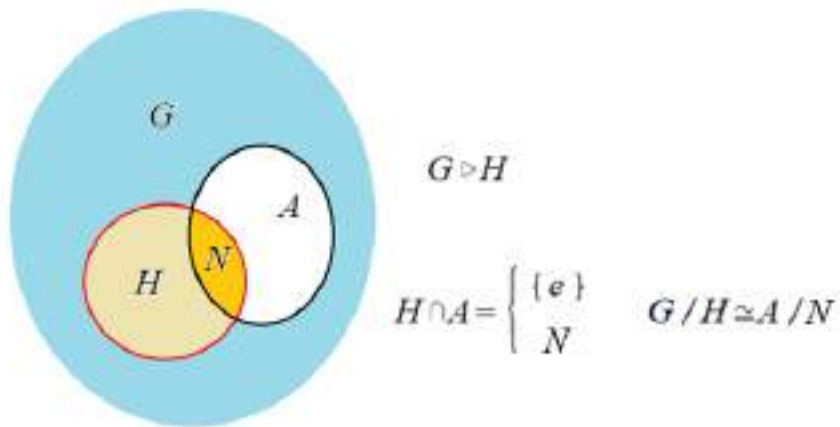
H, A : 群, X : 左 H 集合. $\psi, \phi \in W : \psi(X) = A$ とする.

W は群をなし, H は W に群の同型として左から作用する.

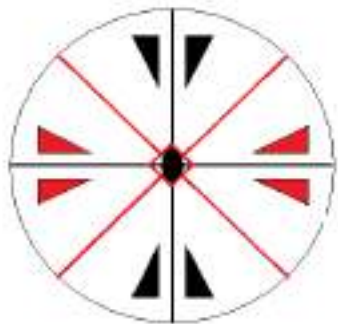
$$(h \cdot \psi)(x) = \psi(h^{-1} \cdot x)$$

[定義] 半直積 $W \circ H$ を A の H による非制限リース積という

$$H \longrightarrow \text{Aut}W$$



4mm / 2mm 反对称点群 4mm / 4



$$4mm = 2mm \odot 4' \pmod{2}$$



$$4mm = 4 \odot m'$$

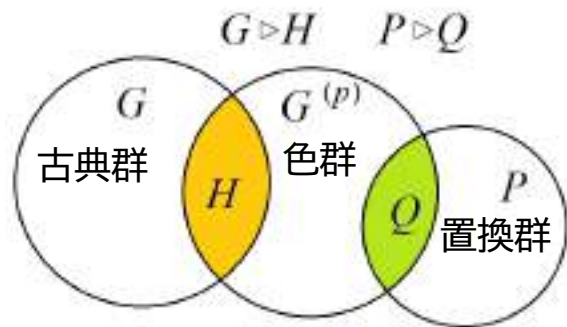
4色点群 4mm / 2



$$4mm = 2 \odot 4^{(12)(34)} \pmod{2}$$

$$4mm = 2 \odot m^{(13)(24)} m^{(13)(24)}$$

色群の導出アルゴリズム



$$G/H \longleftrightarrow P/Q$$

$$G^{(p)} = \{gH \cdot \varepsilon Q\}$$

色および高次元空間群の応用

(3+d)次元空間群

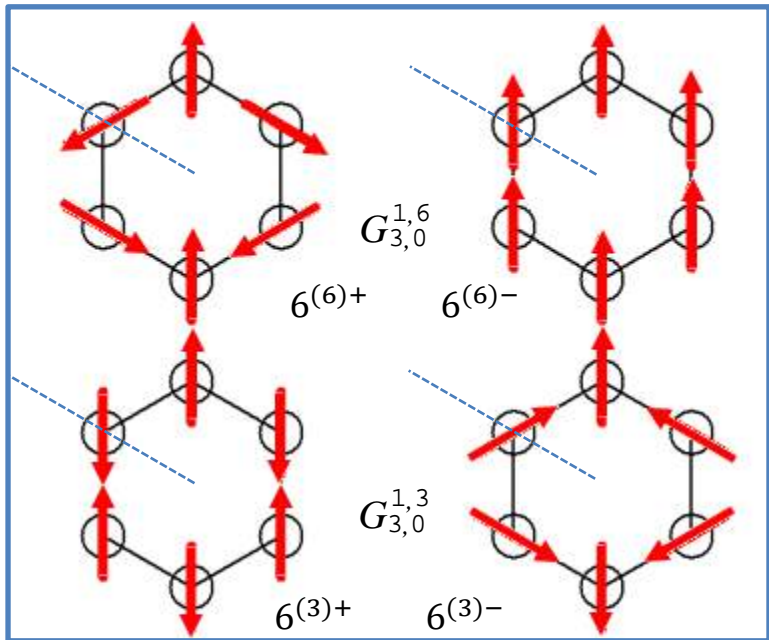
- 非整合結晶相, 変調構造, 複合分子系の記述
- 準結晶(正20面体の周期的なパッキングは可能か)
- 結晶場におけるエネルギー準位の分裂
- 反磁性相の記述
- 結晶とそこを舞台に発現する現象の対称性(注*)

(注*)ピエール・キュリーの原理(1894) $G_{p_i} \supseteq G_{\text{cryst}} = \cap G_{p_i}$

対称性 G_{p_i} の現象 i 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.

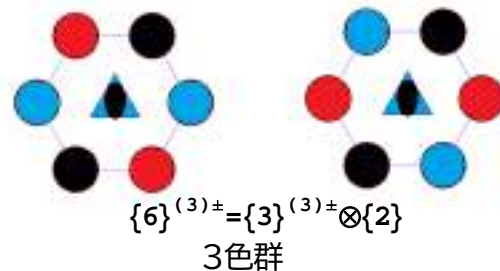
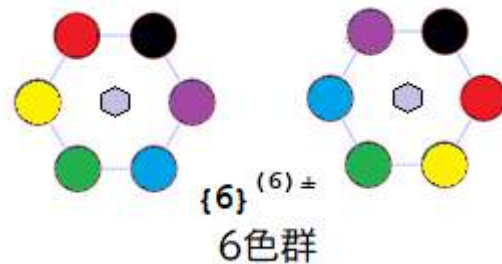
「原因はすべて結果に反映されるべきである」という因果律

古典群6の磁気解釈例



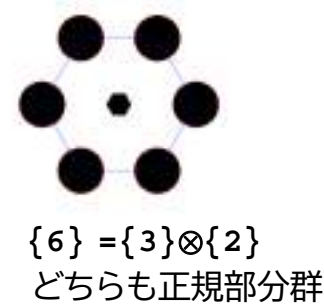
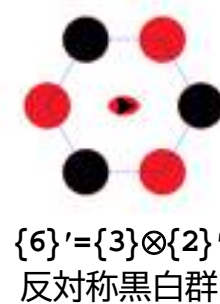
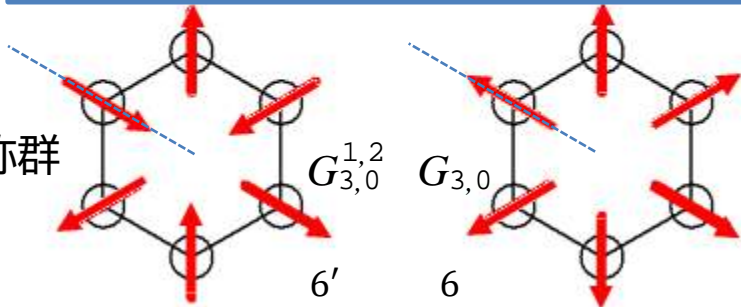
6色群

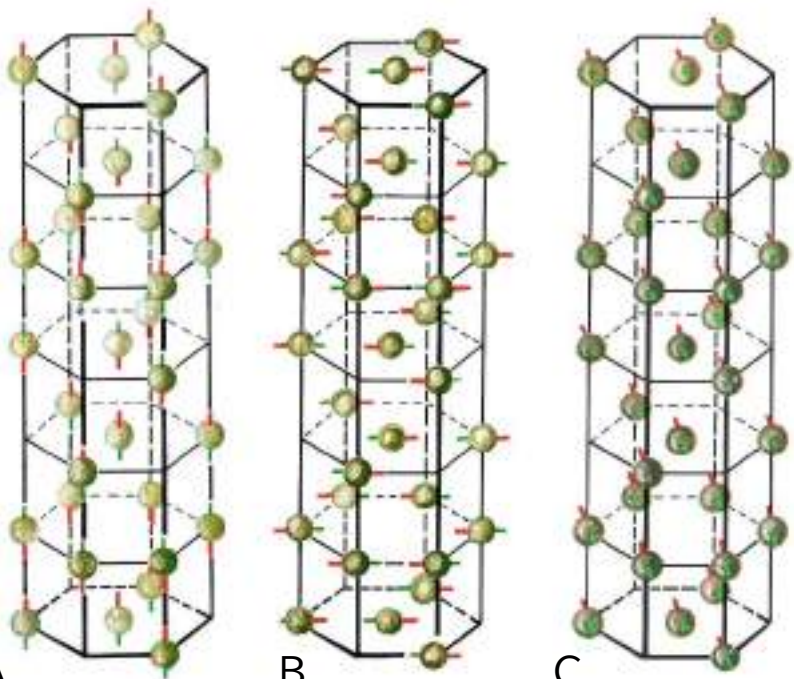
3色群



反対称群

古典群






A

B

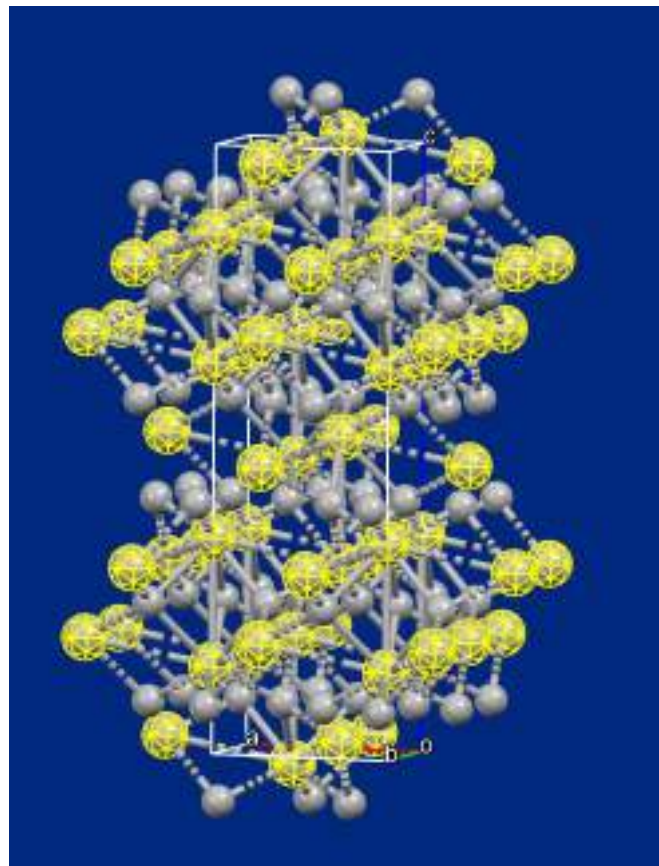
C

磁気モーメントは軸性ベクトルのため
→ではなく  を用いた.

A 反強磁性相 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ($t < -20^\circ\text{C}$)

B 反強磁性相 コランダム型構造で実現

C 強磁性相 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ($-20 < t < 675^\circ\text{C}$)



$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ の結晶構造からFe原子のみ抽出