結晶の対称性と群

北海道大学大学院 理学院 数学専攻 修士 1 年

関 元樹

2017 年 6 月 24 日

1 はじめに

物理と数学は互いに影響し合って発展してきており，またこれからも発展していくであろうことは論を俟たない．具体的にお互いが関係している分野は多数存在するが，今回はその中でも，良い性質をもつゆえに固体物理の中でもよく調べられている結晶と，代数学を初めとする数学の諸分野で研究されている基本的な概念の 1 つである群とが対称性という点で結びついていることを紹介したい．

結晶とは原子や分子が 3 次元的にパターンをもって整列している固体をさす．古くは原子の存在が知られる以前から結晶学者は結晶の面間の角度を測定するなどして，結晶は特定のパターンが周期的の配列によって構成されていることを見いだしていた．現在では結晶の対称性は 14 個の Bravis 格子と 32 個の結晶点群を組み合わせた 230 個の結晶空間群によって完全に記述される．結晶点群は不動点を中心とする空間の形状を保存する変換操作のなす群である．その元は回転，鏡映，反転などの対称操作と，その対称操作の組み合わせからなる．また，その対称操作は線形変換の行列として表され，表現行列と呼ぶ．結晶点群を共役関係という同値関係で割った同値類は共役類とよばれ，表現行列の指標（トレース）で特徴付けられる．また，表現はより簡単な表現の組に約することができる場合があり，最も簡単な表現に分解したものを既約表現という．この既約表現は磁性などの物性と対応をつけられることが知られている．

また，結晶ではない分子もその対称性を点群などで分類することができ，電子雲の形状などと密接に関わりを持つ．

群は二項演算が入っている集合で，結合法則を満たし，単位元をもち，任意の元の逆元が存在する集合と演算の組である．上で挙げた結晶点群は群の公理を満たし，また既約表現に関する議論は数学の表現論と厳密に対応する．群は今回の対称性と結晶点群の議論のみならず，5 次以上の方程式の解の公式は存在しないことを示したことで有名な Galois 理論などを含む，数学・物理の広い分野で研究されている概念である．

また, 共役関係は数学でよく用いられる概念である同値関係の公理を満たす．同値類上の演算の well-defined 性は非自明であるため，数学でよく確認される議論の 1 つである．

2 講演内容

最初に結晶を軽く紹介した後，対称性について身近なものを用いながら，対称操作と対称要素，それらの簡単な記述法と命名法を述べて準備をする．その後，結晶点群について詳しく述べていくが，指標表を求めるところまでを軽い例題と演習を交えながら説明していく．既約表現論などには深くは立ち入らず，物理的な利点

についてのみ触れる．議論の所々で数学の概念や数学的に厳密な議論を取り入れ，物理と数学の関係性を見せながら進めていきたい．

前提知識としては多くを必要としないが，線型代数のうち線形変換に関する議論と，3 次元空間で図形を操作する能力は要求される．