17 listopada 2023

Odpowiedź do zadania 43

Rozpatrzmy najpierw pozycję równoważną $\bar{z}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$. Operacja symetrii przez nią opisana składa się z przekształcenia symetrii punktowej i translacyjnej. Część punktową możemy opisać za pomocą macierzy

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{1}$$

Wyznacznik tej macierzy wynosi 1, więc mamy do czynienia z obrotem właściwym. Rowiązując równanie własne

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

otrzymujemy kierunek osi obrotu $[10\bar{1}]$. Natomiast posługując się równaniem na ślad macierzy obrotu $2\cos\varphi+1=-1$ uzyskujemy informację o kącie obrotu, który w tym wypadku wynosi $\varphi = 180°$. Mamy więc do czynienia z osią dwukrotną, ale pozostaje do ustalenia czy jest to oś zwykła, czy śrubowa. Stosując powtórnie przekształcenie $\bar{z}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$ do pozycji x', y', z', gdzie $x' = \bar{z}+\frac{1}{2}$, $y' = \bar{y}+\frac{1}{2}$, $z' = \bar{z}+\frac{1}{2}$, otrzymujemy pozycję x, y, z, co oznacza powrót do punku wyjściowego, mamy więc do czynienia ze zwykłą osią obrotu. Pozostaje jeszcze do ustalenia jej położenie w układzie współrzędnych. Wiemy, że punkty na zwykłej osi obrotu są punktami stałymi tej operacji, co oznacza, że współrzędne tych punktów nie zmieniają się pod wpływem wykonanej operacji. A zatem punkty leżące na osi muszą spełniać następujący układ równań:

$$\begin{cases} -z+\dfrac{1}{2} = x \\ -y+\dfrac{1}{2} = y \\ -x+\dfrac{1}{2} = z. \end{cases}$$

Ponieważ równanie pierwsze i trzecie są identyczne, możemy przyjąć jedną zmieną jako parametr i np. położyć niewiadomą $z=0$. W konsekwencji z pierwszych dwu równań otrzymujemy $y=\frac{1}{4}$ oraz $x=\frac{1}{2}$. W ten sposób znaleźlismy punkt przecięcia naszej osi obrotu z płaszczyzną XY $(z=0)$, który w tej płaszczyźnie ma współrzędne $(\frac{1}{2}, \frac{1}{4})$. To jednoznacznie opisuje operację symetrii przedstawioną za pomocą pozycji równoważnej $\bar{z}+\frac{1}{2}, \bar{y}+\frac{1}{2}, \bar{x}+\frac{1}{2}$.

Podobnie postępujemy w przypadku pozycji $y+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, z+\frac{1}{2}$. Tym razem macierz opisująca punktową część przekształcenia ma postać

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2}$$

i jej wyznacznik wynosi -1. Jeżeli pomożymy tę macierz przez macierz inwersji, to otrzymamy macierz

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

która opisuje obrót właściwy. Posługując się równaniem na ślad macierzy, stwierdzamy, że jest to obrót o $\varphi = 180°$, a rozwiązując równanie własne otrzymujemy kierunek osi $[1\bar{1}0]$. Ponieważ złożenie inwersji z obrotem o 180° daje odbicie zwierciadlane, to wyjściowa macierz (2) musi opisywać odbicie zwierciadlane względem płaszczyzny prostopadłej do kierunku $[1\bar{1}0]$. Postać macierzy (2) wskazuje, że mamy do czynienia z układem krystalograficznym, w którym parametry sieciowe spełniają równanie $a = b$. Stąd możemy wywnioskować, że wektor translacji występujący w części translacyjnej $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$ jest równoległy do tej płaszczyzny, stanowi więc wektor poślizu. Mamy więc do czynienia z płaszczyzną poślizgu przechodzącą przez początek układu współrzędnych i prostopadłą do kierunku $[1\bar{1}0]$, co wyczerpująco opisuje operację symetrii reprezentowaną przez pozycję równoważną $y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$.

Jeśli idzie o przynależność tych operacji do układu krystalograficznego, to jak zostało już powiedziane macierz (2) implikuje równość $a = b$, natomiast postać macierzy (1) implikuje równość $a = c$. To wskazuje, że operacje wymienione w pytaniu mogą stanowić elementy grupy przestrzennej należącej do układu regularnego lub romboedrycznego.