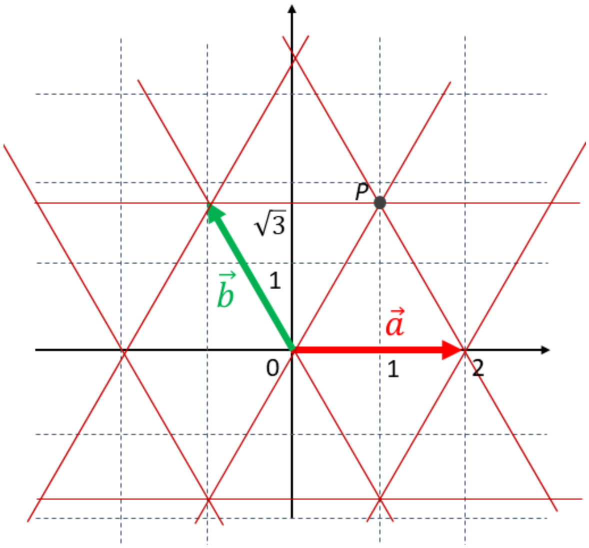
Odpowiedź na to pytanie wymaga transformacji współrzędnych z układu ortonormalnego do układu heksagonalnego. Dla wygody obierzmy wektory bazowe $\vec{\boldsymbol{a}}$ i $\vec{\boldsymbol{b}}$ długości 2 i ustawmy je pod kątem 120°. Biorąc długość boku równą dwa otrzymujemy współrzędną $y = \sqrt{3}$ jako wysokość trójkąta równoramiennego. Wektor $\vec{\boldsymbol{c}}$ będzie ustawiony prostopadle do nich i skierowany do góry (niewidoczny na rysunku).

Sytuację obrazuje poniższy rysunek:



Punkt P można wskazać w ortonormalnym układzie współrzędnych jako $x\vec{\boldsymbol{\imath}} + y\vec{\boldsymbol{\jmath}} + z\vec{\boldsymbol{k}}$ lub w nowym układzie współrzędnych jako $x_a\vec{\boldsymbol{a}} + y_b\vec{\boldsymbol{b}} + z_c\vec{\boldsymbol{c}}$. Te sumy wektorowe (trochę nieformalnie) można przedstawić jako mnożenie macierzowe.

$$P = [\vec{\boldsymbol{\imath}} \quad \vec{\boldsymbol{\jmath}} \quad \vec{\boldsymbol{k}}]\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \ (1.1) \ \text{lub} \quad P = [\vec{\boldsymbol{a}} \quad \vec{\boldsymbol{b}} \quad \vec{\boldsymbol{c}}]\begin{bmatrix} x_a \\ y_b \\ z_c \end{bmatrix} \ (1.2).$$

Oczywiście do równania (1.1) możemy wstawić macierz jednostkową, weźmy więc macierz postaci $\mathbf{E} = \mathbf{T}\mathbf{T}^{-1}$. Otrzymamy więc:

$$P = [\vec{\boldsymbol{\imath}} \quad \vec{\boldsymbol{\jmath}} \quad \vec{\boldsymbol{k}}]\mathbf{T}\mathbf{T}^{-1}\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}. \quad (1.3)$$

Teraz macierz **T** zdefiniujemy jako macierz transformacji wektorów bazowych, uwzględniając że $\vec{\boldsymbol{a}} = 2\vec{\boldsymbol{\imath}}$ oraz $\vec{\boldsymbol{b}} = -\vec{\boldsymbol{\imath}} + \sqrt{3}\vec{\boldsymbol{\jmath}}$ oraz $\vec{\boldsymbol{c}} = \vec{\boldsymbol{k}}$

$$[\vec{\boldsymbol{a}} \quad \vec{\boldsymbol{b}} \quad \vec{\boldsymbol{c}}] = [\vec{\boldsymbol{\imath}} \quad \vec{\boldsymbol{\jmath}} \quad \vec{\boldsymbol{k}}]\mathbf{T}, \qquad (1.4)$$

gdzie $[\vec{\boldsymbol{\imath}} \quad \vec{\boldsymbol{\jmath}} \quad \vec{\boldsymbol{k}}]\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = [\vec{\boldsymbol{\imath}} \quad \vec{\boldsymbol{\jmath}} \quad \vec{\boldsymbol{k}}]\mathbf{T}$

Wstawiając (1.4) do (1.3) otrzymujemy zgodnie z (1.2) relację pomiędzy współrzędnymi w starej i nowej bazie:

$$\begin{bmatrix} x_a \\ y_b \\ z_c \end{bmatrix} = \mathbf{T}^{-1}\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}. \ (1.5)$$

Po lewostronnym pomnożeniu przez T otrzymamy relację odwrotną:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \mathbf{T} \begin{bmatrix} x_a \\ y_b \\ z_c \end{bmatrix}. \quad (1.6)$$

Teraz w końcu możemy zająć się operacją symetrii o macierzy **A**. W układzie ortonormalnym jest ona zdefiniowana równaniem

$$\vec{\boldsymbol{r}}' = \mathbf{A}\vec{\boldsymbol{r}} \quad (1.7)$$

$$\vec{\boldsymbol{r}}' = \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix}, \quad \vec{\boldsymbol{r}} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}.$$

Aby przejść do nowych współrzędnych zastosujemy równanie (1.6) dla obu wektorów $\vec{\boldsymbol{r}}'$ oraz $\vec{\boldsymbol{r}}$.

Mamy więc

$$\mathbf{T} \begin{bmatrix} x'_a \\ y'_b \\ z'_c \end{bmatrix} = \mathbf{AT} \begin{bmatrix} x_a \\ y_b \\ z_c \end{bmatrix},$$

czyli

$$\begin{bmatrix} x'_a \\ y'_b \\ z'_c \end{bmatrix} = \mathbf{T^{-1}AT} \begin{bmatrix} x_a \\ y_b \\ z_c \end{bmatrix}, \quad (1.8)$$

Widać więc, że w miejsce macierzy $\mathbf{A}$ musimy wstawić macierz $\mathbf{T^{-1}AT}$.

W naszym przykładzie mamy

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{T^{-1}} = \begin{bmatrix} 1/2 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (1.9)$$

Po wykonaniu odpowiednich mnożeń otrzymujemy z macierzy

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

ostatecznie

$$\mathbf{A}' = \mathbf{T^{-1}AT} = \begin{bmatrix} \cos(\varphi) + \frac{1}{\sqrt{3}}\sin(\varphi) & -\frac{2}{\sqrt{3}}\sin(\varphi) & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{3}}\sin(\varphi) & \cos(\varphi) - \frac{1}{\sqrt{3}}\sin(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.10)$$

Jest to odpowiedź na zadane pytanie.

Sprawdzenie. Poprzez podstawienie wartości $\varphi = 120°, 180°, 60°$ otrzymamy spodziewane macierze operacji obrotu w układzie heksagonalnym (zawierające jedynie liczby całkowite).

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

Kąt $\varphi = 90°$ nie daje macierzy o współrzędnych całkowitych, co świadczy o braku operacji obrotu czterokrotnego o osi równoległej do osi c w układzie heksagonalnym (niezgodność z siecią translacyjną).