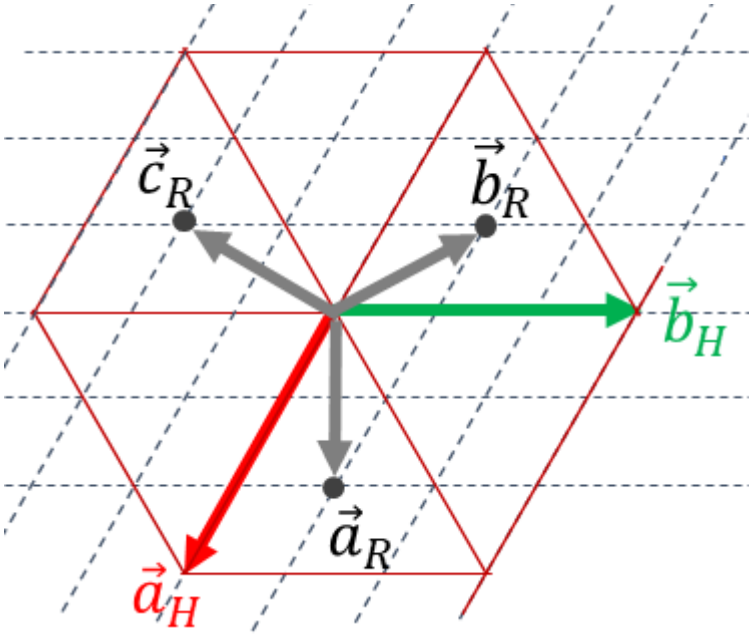
Odpowiedź na to pytanie wymaga transformacji współrzędnych z układu romboedrycznego do układu heksagonalnego. Załóżmy, że są one wzajemnie ustawione w wersji obwers. Wektory bazowe w układzie romboedrycznym osi oznaczmy $\vec{a}_R$, $\vec{b}_R$ i $\vec{c}_R$. Końce wszystkich tych wektorów znajdują się na wysokości 1/3 $\vec{c}_H$. W układzie osi heksagonalnych mamy wektory bazowe $\vec{a}_H$, $\vec{b}_H$ i $\vec{c}_H$.

Sytuację obrazuje poniższy rysunek, będący rzutem z góry na rozpatrywany układ:



Wektor $\vec{c}_H$ jest ustawiony prostopadle do rysunku i skierowany do góry (niewidoczny na rysunku). Dla ułatwienia pokazano linie współrzędnych heksagonalnych x i y dla ±1/3 i ±2/3.

Z rysunku można odczytać następujące relacje pomiędzy wektorami bazowymi w obu układach współrzędnych:

$\vec{a}_R$= 1/3 (2$\vec{a}_H$+ $\vec{b}_H$ + $\vec{c}_H$), (1.1)

$\vec{b}_R$= 1/3 (–$\vec{a}_H$+ $\vec{b}_H$ + $\vec{c}_H$),

$\vec{c}_R$= 1/3 (–$\vec{a}_H$ –2$\vec{b}_H$ + $\vec{c}_H$).

Można to zapisać w postaci macierzowej jako:

$$[\vec{a}_R \quad \vec{b}_R \quad \vec{c}_R] = [\vec{a}_H \quad \vec{b}_H \quad \vec{c}_H]\mathbf{P} = [\vec{a}_H \quad \vec{b}_H \quad \vec{c}_H]\frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad (1.2)$$

lub, po pomnożeniu z prawej strony przez macierz odwrotną do **P**:

$$[\vec{a}_R \quad \vec{b}_R \quad \vec{c}_R]\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} = [\vec{a}_H \quad \vec{b}_H \quad \vec{c}_H]. \qquad (1.3)$$

Zajmijmy się transformacją współrzędnych. Punkt *P* można wskazać w romboedrycznym układzie współrzędnych jako $x_R\vec{a}_R + y_R\vec{b}_R + z_R\vec{c}_R$ lub w heksagonalnymym układzie współrzędnych jako $x_H\vec{a}_H + y_H\vec{b}_H + z_H\vec{c}_H$. Te sumy wektorowe (trochę nieformalnie) można przedstawić jako mnożenie macierzowe.

$$P = \begin{bmatrix} \vec{a}_R & \vec{b}_R & \vec{c}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_R \\ y_R \\ z_R \end{bmatrix}, \qquad (1.4)$$

lub

$$P = \begin{bmatrix} \vec{a}_H & \vec{b}_H & \vec{c}_H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_H \\ y_H \\ z_H \end{bmatrix}, \qquad (1.5)$$

Oczywiście do równania (1.5) możemy wstawić macierz jednostkową, weźmy więc macierz postaci $\mathbf{E} = \mathbf{P}\mathbf{P}^{-1}$. Otrzymamy więc:

$$P = \begin{bmatrix} \vec{a}_H & \vec{b}_H & \vec{c}_H \end{bmatrix} \mathbf{P}\mathbf{P}^{-1} \begin{bmatrix} x_H \\ y_H \\ z_H \end{bmatrix}, \quad (1.6)$$

Wstawiając (1.2) do (1.6) i porównując wynik z (1.4) otrzymujemy relację pomiędzy współrzędnymi w starej i nowej bazie:

$$\begin{bmatrix} x_R \\ y_R \\ z_R \end{bmatrix} = \mathbf{P}^{-1} \begin{bmatrix} x_H \\ y_H \\ z_H \end{bmatrix}. \qquad (1.7)$$

Teraz już możemy zająć się operacją symetrii reprezentowaną macierzą **A**. W układzie romboedrycznym jest ona zdefiniowana równaniem

$$\begin{bmatrix} x'_R \\ y'_R \\ z'_R \end{bmatrix} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} x_R \\ y_R \\ z_R \end{bmatrix}, \qquad (1.8)$$

Aby przejść do nowych współrzędnych zastosujemy równanie (1.7) do obu wektorów współrzednych przed operacją symetrii i po.

Mamy więc

$$\mathbf{P}^{-1} \begin{bmatrix} x'_H \\ y'_H \\ z'_H \end{bmatrix} = \mathbf{A}\mathbf{P}^{-1} \begin{bmatrix} x_H \\ y_H \\ z_H \end{bmatrix},$$

czyli

$$\begin{bmatrix} x'_H \\ y'_H \\ z'_H \end{bmatrix} = \mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1} \begin{bmatrix} x_H \\ y_H \\ z_H \end{bmatrix}, \qquad (1.9)$$

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

W naszym przykładzie mamy

$$\mathbf{P} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}. \qquad (2.0)$$

Po wykonaniu odpowiednich mnożeń z macierzy

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

ostatecznie otrzymujemy

$$\mathbf{A}' = \mathbf{PAP^{-1}} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (2.1)$$

Można to przedstawić w postaci kodu symetrii dla położeń równoważnych jako (-y, x-y, z). Jest to odpowiedź na zadane pytanie.

Kodowi symetrii (z,x,y) w układzie współrzędnych romboedrycznych odpowiada kod (-y, x-y, z) w układzie heksagonalnym.