空間群対称な実空間/波数空間のセル分割について

塩崎　謙

April 21, 2021

Gを空間群とする．実空間，波数空間の空間群対称なセル分割で，特に，全てのセルにおいて不要な分割が存在しない基本領域となっているようなものを構成したい．以下の手法は，実空間でも波数空間においても適用できる．空間3次元の場合に説明する．要点だけ書き，細かい実装については省略する．

数値計算上で有用な事実として，同一のpセルの検索においては，各pセルはpセルの中点の座標で一意的に指定できることに注意する．

基本領域の角の点集合（凸包が基本領域となるような点集合）は得られているものとする．[1]

- 3セル（基本領域）の境界2セルの集合に対して，等価な2セルの検索—

  基本領域の各境界面σ^aは境界に沿って並べられた点の集合$\sigma^a = (p_1^a, p_2^a, \dots, p_n^a)$で指定されているものとする．

  まず，対称性で移り合う面$\sigma^a = g(\sigma^b), g \in G$を検索する．面$\sigma^a$の中点を用いて検索すれば良い．代表の境界面$\sigma_a$と群元$g \in G$を記録する．

- 境界面σの分割—

  軌道の代表面σに注目する．

  対称性は，σ内部の点を別のσ内部の点に移す可能性がある．言い換えると，σ内部に対称点，あるいは対称線が存在する．空間群対称性の場合は，考えてみると，σが基本領域の境界面である条件から，そのような対称点/対称線は，σ内の座標をx, y，σに垂直な方向の座標をzと書くと，反転$(x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$の反転中心であるか，あるいは，２回回転$(x, y, z) \mapsto (x, -y, -z)$の2回回転軸であることが分かる．なぜなら，この２つの可能性以外の場合は，面σに垂直な鏡映面が存在するため．

  以上を踏まえると，面σの対称な分割は以下のように実行できる．

  - 面σは境界に沿って並べられた点の集合$\sigma = (p_1, p_2, \dots, p_n)$で指定されているものとする．
  - まず，面σの一般点の小群G_{GP}を計算する．２回回転軸に乗っていない点を一つ選べば良いので，例えば，$p = p_1 + 0.1 \times (p_2 - p_1) + 0.01 \times (p_3 - p_1)$として，点$p$の小群として小群$G_p$とすれば良い．
  - 次に，面σの中点$p_M = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n p_i$の小群$G_{p_M}$を計算する．
  - $G_p = G_{p_M}$であれば面σそのものが2セルであり，分割の必要はない． $G_p \neq G_{p_M}$の場合は，面σを以下に従って２分割する．
  - 線分$p_i p_{i+1}$の中点$\frac{p_i + p_{i+1}}{2}$を加えることにより，２回回転軸を尽くすことができる． $p'_{2j-1} = p_j, p'_{2j} = (p_j + p_{j+1})/2, (j = 1, \dots, n)$として$(p_{n+1} = p_1)$と書いた，$2n$点からなる点集合$\{p'_1, \dots, p'_{2n}\}$を構成する．面$\sigma$内部，２回回転軸上，かつ中点でない点として，点$q_j = (p'_j + p_M)/2, (j = 1, \dots, n)$上の小群$G_{q_j}$を計算する．

[1]例えば，リンク先に説明がある．http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~ken.shiozaki/doc/FD.pdf

- 全ての$j = 1, \ldots, n$に対して$G_{q_j} \neq G_{p_M}$であれば，p_Mは反転中心である．適当に面σを反転対称に 2 分割する．
- あるjに対して$G_{q_j} = G_{p_M}$であれば，点p'_jを含む 2 回回転軸で面σを分割する．

得られた 2 セルに対して群元gによる軌道を構成することにより，空間群対称な2セルの集合が得られる．

- 2セルの境界1セルの集合に対して，等価な1セルの検索—

  まず，2セルの境界の1セルを全て計算する．この際，重複を除く．また，次の3つの線分$((0,0,0),(2,0,0))$, $((0,0,0),(1,0,0))$, $((2,0,0),(1,0,0))$のように，他の線分の対によって中点で細分化される1セルについても消去する．

  空間群作用で移り合う1セルを検索し，代表1セルと群元$g \in G$を記録する．

- 境界1セルの空間群対称な分割—

  代表の境界1セルを$l = (p_1, p_2)$とする．線分lは反転対称点で2分割される可能性がある．これは，中点と一般点（例えば，点$p_1 + 0.1 \times (p_2 - p_1)$）で小群を比較することにより，判定できる．2分割される場合は，1セルを$(p_1, (p_1 + p_2)/2), (p_2, (p_1 + p_2)/2)$と分割する．

  得られた1セルに対して群元gによる軌道を構成することにより，空間群対称な1セルの集合が得られる．

- 0セルの構成—

  1セルの境界として0セルが得られる．

以上の構成により，空間群対称なセル分割が得られる．得られたnセルは，n+1個の点$(p_1, \ldots, p_{n+1})$で指定され，点$p_1, \ldots, p_{n+1}$の順番は空間群対称性を満たすように構成される．