

Zadatak. Tzv. opće pozicije u kristalnoj strukturi prostorne grupe $Pbcn$ (rompski sustav, dakle je kristalografska baza opća ortogonalna baza) mogu se zapisati kao (m, n, p) , $(m + 1/2, n + 1/2, p + 1/2)$, $(m + 1/2, n, p)$, $(m, n + 1/2, p)$, $(m, n, p + 1/2)$, $(m + 1/2, n + 1/2, p)$, $(m + 1/2, n, p + 1/2)$, $(m, n + 1/2, p + 1/2)$, gdje su m , n i l cijeli brojevi.

Zapišite jednu (ne-jediničnu) matricu koja (s obzirom na kristalografsku bazu) predstavlja linearan operator simetrije za ovu kristalnu rešetku, tj. takav da se prije i poslije njegovog djelovanja opće pozicije nalaze na istim mjestima.

Rješenje. Kristalografska baza je baza za $V^3(O)$, odnosno očigledno tražimo primjer matrice linearnog operatora $\hat{A} : V^3(O) \rightarrow V^3(O)$, dakle je tražena matrica $A \in M_3$. Budući da u ovom slučaju baza nije ortonormirana, ne možemo pretpostaviti da se radi o ortogonalnoj matrici.

S druge strane, znamo da su svi ne-jedinični linearni operatori simetrije na $V^3(O)$ centralne simetrije, zrcaljenja ili rotacije, ili pak kompozicije nekih od tih triju jednostavnijih tipova simetrija. Budući da rotacije nemaju „lijepu“ matrice u odnosu na baze koje nisu ortonormirane, pokušat ćemo ih „izbjeći“.¹

Centralna simetrija s obzirom na sve baze ima matricu $-I_3$. Zrcaljenja s obzirom na koordinatne ravnine u slučaju ortogonalnih baza imaju dijagonalne matrice kojima su dva elementa na dijagonali jednaki 1, a treći je -1 . Dakle, pokušamo s bilo kojom od tih četiriju matrica, npr. s

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

(matrica zrcaljenja s obzirom na (x, z) -ravninu). Sve što treba provjeriti je da djelovanjem tog operatora na radij-vektore točaka općeg položaja (dakle, množenjem A redom s matricama-stupcima koje sadrže njihove koordinate) ponovno dobivamo svih osam tipova radij-vektora (točaka).

Imamo redom

- $A \cdot [m, n, p]^t = [m, -n, p]^t$ (dakle, iz opće točke s cjelobrojnim koordinatama smo dobili opću točku s cjelobrojnim koordinatama),
- $A \cdot [m + 1/2, n + 1/2, p + 1/2]^t = [m + 1/2, -n - 1/2, p + 1/2]^t = [m + 1/2, (-n - 1) + 1/2, p + 1/2]^t$ (dakle, iz točke s cjelobrojnim koordinatama pomaknutim za $1/2$ smo dobili istu takvu),

¹U ovom konkretnom slučaju moglo bi se uzeti rotaciju za 180° oko jedne od koordinatnih osi jer takva, s obzirom na ortogonalnu bazu ima dijagonalnu matricu kojoj su dva elementa na dijagonali jednaki -1 , a treći je 1 — dokažite to sami.

- $A \cdot [m + 1/2, n + 1/2, p]^t = [m + 1/2, -n - 1/2, p]^t = [m + 1/2, (-n - 1) + 1/2, p]^t$, $A \cdot [m + 1/2, n, p + 1/2]^t = [m + 1/2, -n, p + 1/2]^t$, $A \cdot [m, n + 1/2, p + 1/2]^t = [m, -n - 1/2, p + 1/2] = [m + 1/2, (-n - 1) + 1/2, p + 1/2]^t$, (dakle, iz triju točaka s cjelobrojnim koordinatama od kojih su dvije pomaknute za $1/2$ smo dobili opet sva tri tipa),
- $A \cdot [m + 1/2, n, p]^t = [m + 1/2, -n, p]^t$, $A \cdot [m, n + 1/2, p]^t = [m, -n + 1/2, p]^t = [m, -(n - 1) + 1/2, p]^t$, $A \cdot [m, n, p + 1/2]^t = [m, -n, p + 1/2]^t$, (dakle, iz triju točaka s cjelobrojnim koordinatama od kojih je jedna pomaknuta za $1/2$ smo dobili opet sva tri tipa).

U ovom konkretnom slučaju funkcionirala bi bilo koja od spomenute četiri matrice (ili neka od triju matrica spomenutih u fusnoti).