

「空間群のプログラム TSPACE」正誤表 (第 4 版)

平成 23 年 11 月 1 日  
 大阪大学産業科学研究所 柳瀬章  
 大阪大学大学院基礎工学研究科 船島洋紀

ページ	行など	誤	正
v	下から 2 行目	wycfps.f	wycap.f
6	7 行目	より <b>小数</b> の	より <b>少数</b> の
6	17 行目	$\pm\pi/4$	$\pm\pi/2$
9	11 行目	同様に <b>15</b> 番は	同様に <b>17</b> 番は
12	表 2.3 の $D_{3d}$ の 2 行目	(15-17)	(15,17)
13	表 2.4 の $C_{4h}$	1,4,(21,24),25,(45,48)	1,4,21,24,25,28,45,48
13	表 2.4 の $C_4$	1,4,(21,24)	1,4,21,24
13	表 2.4 の $S_4$	1,4,(45,48)	1,4,45,48
23	11 行目	$\Omega_u\Omega_u = 2\Omega_E + 2\Omega_{C_3}$	$\Omega_u\Omega_u = 3\Omega_E + 3\Omega_{C_3}$
33	11 行目	行列表現 <b>は</b>	行列表現 <b>を</b>
39	式 (3.23) の右辺	$d_j \sum_{\lambda} C_{\mu,\nu} \chi_j(C_{\lambda})$	$d_j \sum_{\lambda} C_{\mu,\nu} n_{\lambda} \chi_j(C_{\lambda})$
44	7 行目	$O(\xi)$	$O(\xi_i)$
45	式 (3.39) の右辺	$\sum_{k=1}^{n_i^{j,k}} \langle \tau, i \  T^j \  \sigma, k \rangle_k \langle j, k, \lambda, \nu   k, i, \mu \rangle$	$\sum_{k=1}^{n_i^{j,k}} \langle \tau, i \  T^j \  \sigma, k \rangle_p \langle j, k, \lambda, \nu   i, \mu \rangle_p$
49	5 行目、左辺の第 3 因子	$\delta(x_q^{-1} b x_p)$	$\delta(x_q^{-1} b x_r)$
49	下から 9 行目	$\chi^{\lambda}(y^{-1} a y)$	$\chi_{\lambda}(y^{-1} a y)$
49	下から 5 行目	$p_x$	$\rho_x$
51	3 行目	$\sum_{\mu} w_{\lambda,\mu}^2$	$\sum_{\mu} \omega_{\lambda,\mu}^2$
63	(5.6) の 1 行目	$t_1 = -\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b$	$t_1 = \frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b$
65	9 行目	が <b>回映</b> の	が <b>鏡映以外の回映</b> の
76	11 行目	番号 <b>で</b>	番号 <b>を</b>
83	下から 7 行目	$2 \rightarrow z$	$3 \rightarrow z$
92	16 行目	説明 <b>の方</b> が	説明 <b>はこの方</b> が
93	14 行目	一般に斜 <b>向</b> 軸の	一般に斜 <b>交</b> 軸の
96	7 行目	<b>二</b> 方格子	<b>三</b> 方格子
105	9 行目	点群は <b>すべて</b>	<b>結晶</b> 点群は <b>すべて</b>
153	4 行目の最後の因子	$\exp[i\alpha(k+G) \cdot u_{\alpha}]$	$\exp[-i\alpha(k+G) \cdot u_{\alpha}]$
155	12 行目	$a^*, b^*, c^*$	$2\pi a^*, 2\pi b^*, 2\pi c^*$
155	14 行目	A には $a^*$ を	A には $2\pi a^*$ を
156	3 行目	<b>直</b> 行変換	<b>直</b> 交変換
159	24 行目	次の二つは (8.10) <b>は</b>	次の二つは (8.10) <b>の</b>
162	下から 10 行目	<b>原</b> 始位置	<b>原</b> 子位置
162	下から 10 行目	をもつ <b>原</b> 始	をもつ <b>原</b> 子
162	下から 3 行目	$O_h$ <b>は</b>	$O_h$ <b>の</b>
165	式 (8.12) の下	$\phi_{\mu,\nu}$ 作用して	$\phi_{\mu,\nu}$ に作用して
167	プログラム例 8.2 の 7 行目	INTEGER KP(2,500), INS(4,100)	INTEGER KP(2,500), INS(4,100), <b>ND(12)</b>

ページ	行など	誤	正
198	プログラム例 9.2 の 8 行目の下		READ(5,*) NKA を追加
224	2 行目	付 1.2.5 EULARH	付 1.2.5 EULERH
231	1 行目から 2 行目	この場合は NB,KABC は無視される。	この場合 NB は無視される。また、KABC=1 にしなければならない。
234	RECTAG の表	RECT(3,p)	RECT(4,p)
234	RECTAG の表	逆格子ベクトルの直交座標	逆格子ベクトルの直交座標、第 4 成分はその大きさ
237	TSBZEG の表	REC(3,14)	REC(4,14)
237	TSBZEG の表	上の逆格子ベクトルの直交座標	上の逆格子ベクトルの直交座標、第 4 成分はその大きさ
238	TSIREP の表	IV	IC
243	EQUIKK の表	NBB(3)	KBB(3)
244	CORRES の表	NBB(3)	KBB(3)
245	COMPAT の表	NBB(3) <sup>o</sup>	KBB(3) <sup>i</sup>
245	下から 2 行目	CMRTRV	CMPTRV
246	CMPTRV の表	NBB(3)	KBB(3)
249	CALL TSSWDS の下に		利用する COMMON 変数 /SPW/ および TSSLPW の内部変数
250	TSLCLA の説明の 5 行目	A(p) に, KO,U	A(p) に, KP,U
252	下から 2 行目	TSIRMI 回転行列	TSRMI 回転行列
253	TSRMI の表の下	r(MA,MB;J)	r(MA,MB;L)
257	面心立方格子の Q	$Q(1/2 + \xi \ 1/2 \ 1 - \xi)$	$Q(1/2 + \xi \ 1/2 \ 1/2 - \xi)$
258	六方格子の L	$L(1/2 \ 0 \ 0)$	$L(1/2 \ 0 \ 1/2)$
282	シュアの補題	Shuur's Lemma	Shur's Lemma

p169 の下から 8 行目の『TSLADS の』で始まる 5 行の文章を次のものに変えて下さい。

---

TSLADS の出力の見出しは 7 個の整数で、最初の数が既約表現の番号 IR、次はいつも 1,3 番目は JR,4 番目は原子の種類番号 IA である。5 番目は JR で指定された  $\Lambda$  の次元と、IA で指定された種類の原子の単位胞に含まれる数の積である。つまりこの 5 番目の数で与えられるだけの (8.11) の型のプロッホ関数が対称化の対象になる。次の 6 番目が、得られた対称化関数の数を与えている。最後の 7 番目は、6 番目の数を既約表現 IR の次元で割った数である。つまり、この数は何組みの対称化関数が得られたかを与えている。

---

その他、フロッピーに含まれている生成元のデータファイル generator の 218 番は Td3 となっていますが、これは Td4 の間違いです。web page のものは訂正済みです。