

單斜晶系の 非標準空間群을 標準空間群으로 變換

吳美蘭 · 金勁翰 · 徐日煥

忠南大學校 物理學科, 大田 305-764

Transformation from Non-Standard Space Groups to Standard Ones of Monoclinic System

Mi-Ran Oh, Kyung-Han Kim & Il-Hwan Suh

Department of Physics, Chungnam National University, Taejon, 305-764 Korea

요 약

單斜結晶에서 非標準空間群의 單位胞 資料, Miller 指數 그리고 原子座標들을 標準空間群의 것 의로의 變換過程과 그들의 標準偏差의 計算過程을 提示하고 computer program化 하였다. 이 program들은 7個 結晶系 모두에게 應用할 수 있다.

Abstract

The transformation processes from unit cell data, Miller indices and atomic coordinates of non-standard space groups to the ones of the standard space groups in monoclinic system and the calculation processes of their standard deviations have been shown and computerized. The computer programs can be applied to all the seven crystal systems.

序 論

230個 空間群中 거의 2/3가 單位胞軸의 設定 方法에 따라 여러 가지 다른 空間群記號로 表示된다.^(1,2)

單結晶의 X-線 回折強度를 測定하기 前에 먼저 對象 試料의 cell data인 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ 를 決定해야 한다. Cell data는 4-circle X-ray

diffractometer로 定하게 되는데, 이 diffractometer가 때때로 格子軸을 非標準의으로 設定한다.

Acta Crystallographica, Section C에서는 特別한 理由가 없는 限 標準設定으로 決定構造를 解析하여 論文을 投稿하도록 強力히 要求한다.

따라서 本 論文에서는 monoclinic에서 非標準 設定의 cell data, Miller 指數 및 原子 座標를 標準 設定의 것으로 變換하는 matrix를 提示하고

이를 computer program化 하였으며 變換된 cell data와 原子座標들의 estimated standard deviation의 計算 過程도 computer program化 하였다.

理論

한 物理量 Q가 $Q=f(a, b, c, \dots)$ 라는 關係가 있어 a, b, c...를 直接 測定해서 間接的으로 決定되는 境遇 Q의 標準偏差 σ_Q 는 다음으로 表示된다.³⁾

$$\sigma^2_Q = \left(\frac{\partial Q}{\partial a}\right)^2 \sigma_a^2 + \left(\frac{\partial Q}{\partial b}\right)^2 \sigma_b^2 + \left(\frac{\partial Q}{\partial c}\right)^2 \sigma_c^2 + \dots$$

여기서 $\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c$ 는 a, b, c의 標準偏差이다.

(1) 單位胞軸의 變換

서로 다른 單位胞間의 軸變換 matrix P가

$$P = \begin{bmatrix} m_1 & m_2 & m_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \\ q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix}$$

라면 第 1 cell에서 第 2 cell로의 軸變換은 다음과 같다.

$$\vec{a}_2 = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{b}_1 + m_3 \vec{c}_1$$

$$\vec{b}_2 = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{b}_1 + n_3 \vec{c}_1$$

$$\vec{c}_2 = q_1 \vec{a}_1 + q_2 \vec{b}_1 + q_3 \vec{c}_1$$

第 2 cell data 中 a_2, α_2 및 V_2 만의 standard deviation 計算節次를 나타내면 다음과 같다.

$$a_2 = (\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2)^{1/2} \\ = (m_1^2 a_1^2 + m_2^2 b_1^2 + m_3^2 c_1^2 + 2m_1 m_2 a_1 b_1 \cos \gamma \\ + 2m_2 m_3 b_1 c_1 \cos \alpha + 2m_1 m_3 a_1 c_1 \cos \beta)^{1/2}$$

$$\sigma_{a_2}^2 = \left(\frac{\partial a_2}{\partial a_1}\right)^2 \sigma_{a_1}^2 + \left(\frac{\partial a_2}{\partial b_1}\right)^2 \sigma_{b_1}^2 + \left(\frac{\partial a_2}{\partial c_1}\right)^2 \sigma_{c_1}^2$$

$$+ \left(\frac{\partial a_2}{\partial \alpha_1}\right)^2 \sigma_{\alpha_1}^2 + \left(\frac{\partial a_2}{\partial \beta_1}\right)^2 \sigma_{\beta_1}^2 + \left(\frac{\partial a_2}{\partial \gamma_1}\right)^2 \sigma_{\gamma_1}^2$$

$$\alpha_2 = a \cos \left(\frac{\vec{b}_2 \cdot \vec{c}_2}{|b_2| |c_2|} \right)$$

$$\sigma_{\alpha_2}^2 = \left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial a_1}\right)^2 \sigma_{a_1}^2 + \left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial b_1}\right)^2 \sigma_{b_1}^2 + \left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial c_1}\right)^2 \sigma_{c_1}^2$$

$$+ \left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial \alpha_1}\right)^2 \sigma_{\alpha_1}^2 + \left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial \beta_1}\right)^2 \sigma_{\beta_1}^2 + \left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial \gamma_1}\right)^2 \sigma_{\gamma_1}^2$$

$$V_2 = a_2 b_2 c_2 (1 - \cos^2 \alpha_2 - \cos^2 \beta_2 - \cos^2 \gamma_2 + 2 \cos \alpha_2 \cos \beta_2 \cos \gamma_2)^{1/2}$$

$$\sigma_{V_2}^2 = \left(\frac{\partial V_2}{\partial a_2}\right)^2 \sigma_{a_2}^2 + \left(\frac{\partial V_2}{\partial b_2}\right)^2 \sigma_{b_2}^2 + \left(\frac{\partial V_2}{\partial c_2}\right)^2 \sigma_{c_2}^2$$

$$+ \left(\frac{\partial V_2}{\partial \alpha_2}\right)^2 \sigma_{\alpha_2}^2 + \left(\frac{\partial V_2}{\partial \beta_2}\right)^2 \sigma_{\beta_2}^2 + \left(\frac{\partial V_2}{\partial \gamma_2}\right)^2 \sigma_{\gamma_2}^2$$

(2) Miller 指數 變換

Miller 指數의 變換은 다음과 같이 matrix P의 操作으로 이루어진다.⁽⁴⁾

$$h_2 = m_1 h_1 + m_2 k_1 + m_3 l_1$$

$$k_2 = n_1 h_1 + n_2 k_1 + n_3 l_1$$

$$l_2 = q_1 h_1 + q_2 k_1 + q_3 l_1$$

Miller 指數는 測定量이 아니므로 標準偏差가 없다.

(3) 原子座標의 變換

$$[P^T]^{-1} = \begin{bmatrix} s_1 & s_2 & s_3 \\ t_1 & t_2 & t_3 \\ u_1 & u_2 & u_3 \end{bmatrix}$$

라면 cell 1의 原子座標로부터 cell 2의 原子座標로의 變換은⁽⁴⁾ 다음과 같다.

$$x_2 = s_1 x_1 + s_2 y_1 + s_3 z_1$$

$$y_2 = t_1 x_1 + t_2 y_1 + t_3 z_1$$

$$z_2 = u_1 x_1 + u_2 y_1 + u_3 z_1$$

原子的 座標 x, y, z 은 scalar量이므로 x_2 의 標 index의 變換 program MILLERTR 그리고 座標變換 program COORDTR이 作成되었다.

$$\sigma_{x_2}^2 = s_1^2 \sigma_{x_1} + s_2^2 \sigma_{y_1} + s_3^2 \sigma_{z_1}$$

3. 結論

Cell data의 變換 program CELLTR 와 Miller Table 1에는 b-軸이 唯一軸인 單斜晶系の 13

Table 1. Transformations matrices from cell data, Miller indices and atomic coordinates of non-standard space groups to the ones of the standard space groups in monoclinic system (b-axis unique).

Space group number, standard space group & reflection conditions	Non-standard space group & reflection conditions	Transformation matrix [P] of cell data & Miller indices	Transformation matrix $[P^T]^{-1}$ of atomic coordinates
# 5 C2 hkl: h+k=2n h0l: h=2n	A2 hkl: k+1=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	h0l: l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	I2 hkl: h+k+1=2n h0l: h+l=2n	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
# 7 Pc h0l: l=2n	Pa h0l: h=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	h0l: h=2n	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
	Pn h0l: h+l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
# 8 Cm hkl: h+k=2n h0l: h=2n	Am hkl: k+1=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	h0l: l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	Im hkl: h+k+1=2n h0l: h+l=2n	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$

# 9 Cc hkl: h+k=2n h0l: h, l=2n	Aa hkl: k+l=2n h0l: h, l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	An hkl: k+l=2n h0l: h, l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	Ia hkl: h+k+l=2n h0l: h, l=2n	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
# 12 C2/m hkl: h+k=2n h0l: h=2n	A2/m hkl: k+l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
		$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
# 13 P2/c h0l: l=2n	P2/a h0l: h=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
		$\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
	P2/n h0l: h+l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
# 14 P2 ₁ /c h0l: l=2n 0k0: k=2n	P2 ₁ /n h0l: h=2n 0k0: k=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
		$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
	P2 ₁ /n h0l: h+l=2n 0k0: k=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

# 15 C2/c hkl: h+k=2n h0l: h, l=2n	A2/a hkl: k+l=2n h0l: h, l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	A2/n hkl:k+l=2n h0l: h, l=2n	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
	C2/n hkl: h+k=2n h0l: h, l=2n	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
	I2/a hkl: h+k+l=2n h0l: h, l=2n	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
	I2/c hkl: h+k+l=2n h0l: h, l=2n	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

個 空間群들 中에서 非標準 空間群을 갖는 8個 空間群 各各에 對하여 可能한 非標準 空間 群을 提示하였으며 이들을 標準空間群으로 變換하는 行列들이 보여져 있다.

Table 1의 第1列(column)에는 空間群 番號와 標準空間群 그리고 그 空間群을 決定하는 回折條件이 있으며 第2列에는 非標準 空間群과 그 空間群의 回折條件이 보여져 있다. 第3列에는 第2列에 있는 非標準 空間群의 cell data와 Miller 指數를 第1列에 있는 標準空間群의 것으로 變換하는 matrix P가 그리고 第4列에는 第2列에 있는 非標準 空間群의 原子座標를 標準空間群의 것으로 變換하는 matrix $[P^T]^{-1}$ 가 보여져 있다.

Cell data, Miller 指數 그리고 原子座標 各各의 變換 computer programs인 CELLTR, MILLERTR, COORDTR*들은 單斜晶系뿐만 아니라 모든 決定系에 適用된다.

* The computer programs can be obtained through Suh.

參考文獻

- 1) Norman F.M. Henry & Kathleen Lonsdale, International Tables for X-ray Crystallography, Vol. 1, pp. 545-553, The Kynoch Press, Birmingham, England, 1969.
- 2) Theo Hahn, international Tables for Crystallography, Vol. A, pp. 106-189, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston/London, 1992.
- 3) Philip R. Blevington, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, pp. 56-60, McGRAW-HILL Book Company, 1969.
- 4) Il-Hwan Suh & Moon-Jib Kim, Fundamental Crystallography and Weissenberg, de-Jong Bouman, Buerger Precession Photography, pp. 81-84, Cheong Moon Gak, 1995.