Korean J. Crystallography
Vol. 13, No. 2, pp.73~81, 2002

Triclinic과 Monoclinic Systems에 屬한 Space Groups의 誘導

金麟會[a] · 姜相旭[b] · 金文執[c] · 徐日煥[d]

[a]建陽大學校 化學科, [b]高麗大學校 素材化學科, [c]順天鄉大學校 物理學科, [d]忠南大學校 物理學科

The Derivation of the Space Groups in Triclinic and Monoclinic Systems

Inn Hoe Kim[a], Sang Ook Kang[b], Moon-Jib Kim[c] and Il-Hwan Suh[d]

[a]*Department of Chemistry, Konyang University, Nonsan 320-711, Korea*
[b]*Department of Material Chemistry, Korea University, 208 Seochang, Chochiwon, Chung-nam 339-700, Korea*
[c]*Department of Physics, Soonchunhyang University, Asan 336-600, Korea*
[d]*Department of Physics, Chungnam National University, Daejeon 305-764, Korea*

Triclinic system에는 2個의 point group들 1, $\bar{1}$, 그리고 monoclinic system에는 3個의 point groups, 2, m, 2/m 가 있는데 [1)] point group들 1, 2, m은 polar point group이고 이 中의 1, 2는 enantiomorphous point group이며 point group들 $\bar{1}$와 2/m은 centric point group으로 Laue group이라 일컬어진다.[2-4)]

本 解說文에서는 point group들 1, $\bar{1}$에서 나오는 2個의 space group들과 point group들 2, m, 2/m에서 誘導되는 13個의 space group들의 座標들을 誘導하였다. Monoclinic system에서는 unique axis b 만을 다루었고, 그리고 space group No. 14은 3가지로 解析하였으며 나머지는 standard space group 만을 다루었다.

모든 space group diagram은 "International Tables for Crystallography, Volume A edited by Theo Hahn, Third revised edition published for The International Union of Crystallography by Kluwer Academic Publishers, 1992"에 記載되어 있다.

[1] Point group 1에서 誘導되는 space group

Space group No. 1, $P1$

Origin arbitrary

任意의 origin을 지나는 <u>**1-fold axis**</u>의 다음의 matrix 表現에서 한 個의 座標가 나오므로

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1)\ x, y, z$$

multiplicity Z = 1 이며 x, y, z는 任意의 값을 가지며 mirror symmetry가 없으므로 $P1$은 polar 및 enantiomorphous space group이다.

[2] Point group $\bar{1}$에서 誘導되는 space group

Space group No. 2, $P\bar{1}$

Origin at $\bar{1}$

Origin을 지나는 <u>**Center of symmetry**</u>의 matrix 表現에서는 다음의 두 座標가 나와서

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)\ x, y, z \quad (2)\ -x, -y, -z$$

multiplicity Z = 2 이며 $P\bar{1}$는 x, y, z가 固定된 값을 갖는 centrosymmetric space group이다.

[3] Point group 2에서 誘導되는 space groups

Space group No. 3, $P2$

Origin on 2

x = z = 0를 지나는 **2-fold axis**의 다음 matrix 表現에서 두 個의 座標가 나와서

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)\ x, y, z\ (2)\ -x, y, -z$$

multiplicity Z = 2이며 y가 任意이고 mirror symmetry가 없어 *P*2는 polar 및 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 4, $P2_1$

Origin on 2_1

x = z = 0를 지나는 **2_1-screw axis**의 matrix 表現에서 다음의 두 座標가 나와서

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) −x, y + 1/2, −z

multiplicity Z = 2이며 y가 任意이고 mirror symmetry가 없어 $P2_1$는 polar 및 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 5, $C2 = C2_1$

Origin on 2

x = z = 0를 지나는 **2-fold axis**에서 다음 2個 座標가 誘導되며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)\ x, y, z\ (2)\ -x, y, -z$$

이들 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하므로서 다음의 2個의 座標가 追加 된다.

(3) x + 1/2, y + 1/2, z (4) −x + 1/2, y + 1/2, −z

上記 座標들은 다음의 方法으로도 誘導된다.

x = 1/4과 z = 0를 지나는 **2_1 screw axis**에서 다음 2個의 座標가 誘導되며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (4) −x + 1/2, y + 1/2, −z

이들 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 上記와 同一한 두 座標가 追加 된다.

(3) x + 1/2, y + 1/2, z (2) −x, y, −z

$\therefore\ C2 = C2_1$

따라서 multiplicity Z = 4이며 y 座標는 任意이고 mirror symmetry가 없어 $C_2 = C2_1$는 polar 및 enantiomorphous space group이다.

[4] Point group m에서 誘導되는 space groups

Space group No. 6, *Pm*

Origin on mirror plane m

Origin을 지나는 **m-plane**의 matrix 表現에서 다음 두 座標가 나오므로

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)\ x, y, z\ (2)\ x, -y, z$$

multiplicity Z = 2이며 x와 z가 任意이고 mirror symmetry가 있어 *Pm*은 polar space group이다.

Space group No. 7, *Pc*

Origin on glide plane c

Origin을 지나는 **c-glide plane**의 matrix 表現에서 다음의 두 座標가 誘導되므로

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) x, −y, z + 1/2

multiplicity Z = 2이며 x와 z가 任意이고 mirror symmetry가 있어 *Pc*는 polar space group이다.

Space group No. 8, $Cm = Ca$

Origin on mirror plane m

Origin을 지나는 **m-plane**의 다음 matrix 表現에서 나온 두 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하여 다음의 4個의 座標가 생긴다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1)\ x, y, z\ (2)\ x, -y, z$$

(3) $1/2 + x,\ 1/2 + y,\ z$ (4) $1/2 + x,\ 1/2 - y,\ z$

이들 座標를 다른 方法으로 誘導하기 爲하여 y = 1/4 에 있는 **a-glide plane**을 擇하면 다음 matrix 表現에서 두 個의 座標가 誘導되며 이 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 上記와 同一하다

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (4) $1/2 + x,\ 1/2 - y,\ z$

(3) $1/2 + x,\ 1/2 + y,\ z$ (2) $x, -y, z$

$\therefore\ Cm = Ca$

multiplicity Z = 4이며 x와 z가 任意이고 mirror symmetry가 있어 $Cm = Ca$는 polar space group이다.

Space group No. 9, $Cc = Cn$

Origin on glide plane c

Origin을 지나는 **c-glide plane**의 matrix 表現에서 誘導되는 두 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하여 다음의 4個의 座標가 생긴다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) $x, -y, z + 1/2$ (3) $1/2 + x,\ 1/2 + y,\ z$

(4) $1/2 + x,\ 1/2 - y,\ 1/2 + z$

이들 座標는 다음의 方法으로도 誘導할 수 있다.

y = 1/4에 있는 n-glide plane을 擇하면 다음 matrix 表現에서 두 個의 座標가 誘導되며 이 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 上記와 同一한 座標가 얻어진다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (4) $1/2 + x,\ 1/2 - y,\ 1/2 + z$

(3) $1/2 + x,\ 1/2 + y,\ z$ (2) $x, -y, z + 1/2$

$\therefore\ Cc = Cn$

따라서 multiplicity Z = 4이며 x와 z가 任意이고 mirror symmetry가 있어 $Cc = Cn$는 polar space group이다.

[5] Point group 2/m에서 誘導되는 space groups

Laue group인 2/m에서 誘導되는 space group은 모두 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 10, $P2/m$

Origin at center (2/m)

Origin을 지나는 **2-fold axis**의 matrix에서 다음 두 個의 座標가 나오고

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)\ x, y, z\ (2)\ -x, y, -z$$

이들 座標를 origin을 지나는 m-plane의 matrix에 操作함으로서 또 다른 두 個의 座標가 誘導되어

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3)\ x, -y, z\ (4)\ -x, -y, -z$$

multiplicity Z = 4이며 $P2/m$은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 11, $P2_1/m$

Origin at $\bar{1}$ on 2_1

Origin을 지나는 **2_1-screw axis**에서 다음의 2個

座標가 나오며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) −x, y + 1/2, −z

이들 座標를 y = 1/4에 있는 m-plane에서 다음의 두 個 座標가 追加된다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(4) x, −y + 1/2, z (3) −x, −y, −z

故로 multiplicity Z = 4이며 $P2_1/m$는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 12, $C2/m = C2_1/a = C2_1/m = C2/a$

Origin at center (2/m)

Origin을 지나는 **2-fold axis**의 matrix에서 다음 두 個의 座標가 나오고

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$ (1) x, y, z (2) −x, y, −z

이들 座標를 origin을 지나는 **m-plane**의 matrix에 操作함으로 또 다른 두 個의 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$ (3) −x, −y, −z (4) x, −y, z

이들 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 다음의 8個의 座標가 생긴다.

(5) x + 1/2, y + 1/2, z (6) −x + 1/2, y + 1/2, −z
(7) −x + 1/2, −y + 1/2, −z (8) x + 1/2, −y + 1/2, z

故로 multiplicity Z = 8이며 $C2/m$은 centrosymmetric space group이다.

이들 座標들은 다음같이도 誘導된다.

x = 1/4 및 z = 0를 지나는 **2_1-screw axis**에서 다음의 2個 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (6) −x + 1/2, y + 1/2, −z

이들 座標를 y = 1/4에 있는 **a-glide plane**에 操作하여 다음의 2個 座標가 얻어지는데

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(8) x + 1/2, −y + 1/2, z (3) −x, −y, −z

이들 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 上記의 8個의 座標가 생긴다.

$\therefore\ C2/m = C2_1/a$

이들 座標들은 다음같이도 誘導된다.

x = 1/4 및 z = 0를 지나는 **2_1-screw axis**에서 다음의 2個 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (6) −x + 1/2, y + 1/2, −z

이들 座標를 origin을 지나는 **m-plane**의 matrix에 操作하면 또 다른 두 個의 座標가 誘導되고

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$ (4) x, −y, z (7) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

이들 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 上記의 8個의 座標가 생긴다.

$\therefore\ C2/m = C2_1/a = C2_1/m$

이들 座標들은 다음같이도 誘導된다.

Origin을 지나는 **2-fold axis**의 matrix에서 다음 두 個의 座標가 나오고

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$ (1) x, y, z (2) −x, y, −z

이들 座標를 y = 1/4에 있는 **a-glide plane**에 操作하여 다음의 2個 座標가 얻어지는데

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(8) x + 1/2, −y + 1/2, z (7) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

이들 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 上記의 8個의 座標가 생긴다.

$$\therefore\ C2/m = C2_1/a = C2_1/m = C2/a$$

Space group No. 13, *P2/c*

Origin at $\bar{1}$ on glide plane c

x = 0 및 z = 1/4를 지나는 **2-fold axis**에서 다음의 2個 座標가 얻어지며:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) −x, y, −z + 1/2

이들 座標에, origin을 지나는 **c-glide plane**의 對稱을 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加된다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(4) x, −y, z + 1/2 (3) −x, −y, −z

故로 multiplicity Z = 4이며 *P2/c*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 14, *P2₁/c*

Origin at $\bar{1}$

Point group 2/m에서 2 → 2_1 그리고 m → c-glide로 바꾼 것이다.

이 space group에 있는 symmetry는 1, $\bar{1}$, 2_1, c-glide plane이다.

한 space group에서 두 個의 symmetry operation을 繼續 施行하면 그 space group에 있는 다른 symmetry가 되어야한다는 rule을 適用하여 symmetry의 位置를 定한다.

어느 space group에서나 가장 symmetry가 높은 inversion center는 origin에 있어야 한다.

本 space group에 있는 symmetry $\bar{1}$에 c-glide plane을 operate 해보자

$$\begin{array}{cc} \bar{1} & \text{c-glide plane} \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix} \end{array}$$

2_1-screw axis 이어야함

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

상기 rule에 依하여 마지막 matrix가 $P2_1/c$에 있는 2_1-screw axis가 되기 爲하여는 y에 1/2가 加해져야 하므로 c-glide plane이 y = 1/4에 있어야 하고, 또한 z에 1/2가 加해져 있으니 이렇게 되기 爲하여는 b-axis에 平行한 2_1-screw axis는 x = 0, z = 1/4에 있어야 한다.

다음에는 本 space group에 있는 symmetry $\bar{1}$에 2_1-screw를 operate 해보자

$$\begin{array}{cc} \bar{1} & 2_1\text{-screw axis} \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

c-glide plane 이어야함

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

上記 rule에 依하여 마지막 matrix가 $P2_1/c$에 있는 c-glide plane이기 爲하여는 2_1-screw axis가 x = 0, z = 1/4에 있어서 z에 1/2이 加해져야하며, y에 1/2가 加해지기 爲하여는 c-glide plane이 y = 1/4에 있어야 한다.

따라서 座標는 다음같이 얻어진다.

x = 0, z = 1/4를 지나는 **2_1-screw axis**에서 다음의 2個 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) −x, y + 1/2, −z + 1/2

이들 座標를 y = 1/4에 있는 **c-glide plane**의 다음 matrix 表現에 操作하면 다음의 2個 座標가 誘導된다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(3) −x, −y, −z (4) x, −y + 1/2, z + 1/2

故로 multiplicity Z = 4 이며 $P2_1/c$는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 14, $P2_1/a$

Origin at $\bar{1}$

2/m에서 2 → 2_1 그리고 m → a-glide로 바꾼 것이다.

이 space group에 있는 symmetry는 1, $\bar{1}$, 2_1, a-glide plane이다.

한 space group에서 두 個의 symmetry operation을 繼續 施行하면 그 space group에 있는 다른 symmetry가 되어야한다는 rule을 適用하여 symmetry의 位置를 定한다.

어느 space group에서나 가장 symmetry가 높은 inversion center는 origin에 있어야 한다.

본 space group에 있는 symmetry $\bar{1}$에 a-glide plane을 operate 해보자

$\bar{1}$ a-glide plane

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2_1-screw axis 이어야함

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

상기 rule에 依하여 마지막 matrix가 $P2_1/a$에 있는 2_1-screw axis가 되기 爲하여는 y에 1/2가 加해져야 하므로 a-glide plane이 y = 1/4에 있어야 하고, 또한 x에 1/2가 加해져 있으니 이렇게 되기 爲하여는 b-axis에 parallel한 2_1-screw axis는 x = 1/4과 z = 0를 지나야 한다.

다음에는 本 space group에 있는 symmetry $\bar{1}$에 2_1-screw axis를 operate 해보자

$\bar{1}$ 2_1-screw axis

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

a-glide plane 이어야함

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

上記 rule에 依하여 마지막 matrix가 $P2_1/a$에 있는 a-glide plane이기 爲하여는 2_1-screw axis가 x = 1/4, z = 0에 있어서 x에 1/2이 加해져야하며, y에 1/2가 加해지기 爲하여는 a-glide plane이 y = 1/4에 있어야 한다.

따라서 座標는 다음같이 求해진다.

x = 1/4 및 z = 0를 지나는 **2_1-screw axis**에서 다음의 두 個 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) x − 1/2, y + 1/2, −z

이들 座標에 y = 1/4에 있는 **a-glide plane**의 對稱 matrix를 操作하면 다음의 2個의 座標가 追加된다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(3) −x, −y, −z (4) x + 1/2, y + 1/2, z

故로 multiplicity Z = 4이며 $P2_1/a$는 centrosymmetric space group이다.

$P2_1/c$를 다음같이 axis transformation하면 $P2_1/a$가 얻어진다:

$$\begin{array}{ccc} P2_1/c & & P2_1/a \\ \begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\-1&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}c\\b\\-a-c\end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix}a'\\b'\\c'\end{pmatrix}\end{array}$$

Space group No. 14, $P2_1/n$

Origin at $\bar{1}$

Point group 2/m에서 2 → 2_1 그리고 m → n-glide plane으로 바꾼 것이다.

이 space group에 있는 symmetry는 1, $\bar{1}$, 2_1, n-glide plane이다.

한 space group에서 두 個의 symmetry operation을 繼續 施行하면 그 space group에 있는 다른 symmetry가 되어야한다는 rule을 適用하여 symmetry의 位置를 定한다.

어느 space group에서나 가장 symmetry가 높은 inversion center는 origin에 있어야 한다.

本 space group에 있는 symmetry $\bar{1}$에 n-glide plane을 operate 해보자

$$\begin{array}{cc} \bar{1} & \text{n-glide plane} \end{array}$$

$$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/2\\0\\1/2\end{pmatrix}$$

2_1-screw axis 이어야함

$$=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/2\\0\\1/2\end{pmatrix}$$

上記 rule에 依하여 마지막 matrix가 $P2_1/n$에 있는 2_1-screw axis가 되기 爲하여는 y에 1/2가 加해져야 하므로 n-glide plane이 y = 1/4에 있어야 하고, 또한 x와 z에 各各 1/2가 加해져 있으니 이렇게 되기 爲하여는 2_1-screw axis는 x = 1/4과 z = 1/4를 지나야 한다.

다음에는 本 space group에 있는 symmetry $\bar{1}$에 2_1-screw를 operate 해보자

$$\begin{array}{cc} \bar{1} & 2_1\text{-screw axis} \end{array}$$

$$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/2\\0\\1/2\end{pmatrix}$$

n-glide plane 이어야함

$$=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/2\\0\\1/2\end{pmatrix}$$

上記 rule에 依하여 마지막 matrix가 $P2_1/n$에 있는 n-glide plane이기 爲하여는 2_1-screw axis가 x = 1/4, z = 1/4에 있어서 x와 z에 各各 1/2이 加해져야 하며, y에 1/2가 加해지기 爲하여는 n-glide plane이 y = 1/4에 있어야 한다.

따라서 座標는 다음같이 얻어진다.

x = 1/4, z = 1/4를 지나는 **2_1-screw axis**에서 다음의 2個 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/2\\1/2\\1/2\end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2

이들 座標에, y = 1/4에 있는 **n-glide plane**의 對稱 matrix를 操作하면 다음의 2個 座標가 追加된다.

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/2\\1/2\\1/2\end{pmatrix}$$

(3) −x, −y, −z (4) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2

故로 multiplicity Z = 4이며 $P2_1/n$는 centrosymmetric space group이다.

$P2_1/c$를 다음같이 axis transformation하면 $P2_1/n$가 얻어진다:

$$\begin{array}{ccc} P2_1/c & & P2_1/n \\ \begin{pmatrix}-0&0&-1\\0&1&0\\1&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-a-c\\b\\a\end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix}a'\\b'\\c'\end{pmatrix}\end{array}$$

Space group No. 15, $C2/c = C2_1/n = C2_1/c = C_2/n$

Origin at $\bar{1}$ on glide plane c

x = 0 및 z = 1/4을 지나는 **2-fold axis**에서 다음의 2個 座標가 나오며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) −x, y, −z + 1/2

이들 座標를 origin을 지나는 **c-glide plane**의 對稱 matrix에 操作하면 다음의 다른 2個 座標가 나온다:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(3) −x, −y, −z (4) x, −y, z + 1/2

上記 4個 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 다음의 4個의 座標가 追加된다

(5) x + 1/2, y + 1/2, z (6) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2

(7) −x + 1/2, −y + 1/2, −z (8) x + 1/2, −y − 1/2, z + 1/2

따라서 multiplicity Z = 8이며 $C2/c$는 centrosymmetric space group이다.

이들 8個 座標들은 다음같이도 얻어진다.

x = 1/4 및 z = 1/4을 지나는 **2_1-screw**에서 다음의 2個 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (6) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2

이들 座標를 y = 1/4을 지나는 **n-glide plane**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 얻어진다

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(3) −x, −y, −z (8) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2

上記 4個 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 다음의 4個의 座標가 追加된다.

(5) x + 1/2, y + 1/2, z (2) −x, y, −z + 1/2

(7) −x + 1/2, −y + 1/2, −z (4) x, −y, z + 1/2

∴ $C2/c = C2_1/n$

이들 8個 座標들은 다음같이도 얻어진다.

x = 1/4 및 z = 1/4을 지나는 **2_1-screw**에서 다음의 2個 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (6) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2

이들 座標들을 origin을 지나는 **c-glide plane**에 操作함으로서 다음의 다른 2個 座標가 얻어진다

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(4) x, −y, z + 1/2 (7) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 4個 座標에 C-centered lattice의 좌표 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 다음의 4個의 座標가 追加된다.

(5) x + 1/2, y + 1/2, z (2) −x, y, −z + 1/2

(8) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2 (3) −x, −y, −z

∴ $C2/c = C2_1/n = C2_1/c$

다음 같은 方法으로도 얻어진다.

x = 0 및 z = 1/4을 지나는 **2-fold axis**에서 다음의 2個 座標가 나오며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) −x, y, −z + 1/2

이들 座標를 y = 1/4을 지나는 **n-glide plane**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 얻어진다

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

(8) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2 (7) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 4個 座標에 C-centered lattice의 座標 (0 0 0)와 (1/2 1/2 0)를 加하면 다음의 4個의 座標가 追加된다

(5) x + 1/2, y + 1/2, z (6) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2
(4) x, −y, z + 1/2 (2) −x, y, −z + 1/2
$\therefore\ C2/c = C2_1/n = C2_1/c = C2/n$

참고문헌

1) 徐日煥, 金文執, 基礎結晶學과 Weissenberg, De Jong-Bouman, Buerger precession 寫眞法, p. 37, 淸文閣 (1995).
2). 徐日煥, 金文執, X-線單結晶構造解析, pp. 92-95, 북스힐 (2001).
3) Suh, I.-H., Park, K. H., Jensen, W. P. and Lewis, D. E. *Journal of Chemical Education.*, **74**, 800 (1997).
4) 金麟會, 徐承郁, 徐日煥. 거울像 異性質體와 絶對構造, *Korean Journal of Crystallography*, **13**(1), 1 (2002).