Korean J. Crystallography
Vol. 13, No. 3/4, pp.109~147, 2002

Orthorhombic System에 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]順天鄕大學校 物理學科,
[d]忠南大學校 物理學科

The Derivation of the Space Groups in Orthorhombic System

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, Chochiwon, Chungnam 339-700, Korea
[c]Department of Physics, Soonchunhyang University, Asan 336-745, Korea
[d]Department of Physics, Chungnam National University, Daejeon 305-764, Korea

Orthorhombic system에는 enantiomorphous point group인 2 2 2, polar point group인 *m m* 2, 그리고 Laue group인 *m m m* 等 3個의 point group들이 있다.[1-5]

本 解說文에서는 point group 2 2 2에서 誘導되는 9個 space group들, point group *m m* 2에서 誘導되는 22個의 space group들 및 point group *m m m*에서 誘導되는 28個의 space group들等 總 59個 space group들의 coordinate들을 求하였다. 이 過程에서 symmetry들의 位置는 "한 space group에 있는 symmetry들을 곱하면 그 space group에 있는 다른 symmetry가 되어야한다"는 rule을 適用하여 定하였다.

Hermann-Mauguin symbol로 表示된 space group은 두 部分으로 構成되어 있어 첫 번째 部分은 大文字로 表示한 Bravais lattice이며, 두 번째 部分은 lattice symmetry를 나타내는데, orthorhombic system에서는 [100] 方向을 向한 primary, [010] 方向을 向한 secondary 그리고 [001] 方向을 向한 tertiary 等 세 種類의 symmetry로 分類된다. 또한 point group *m m m*에서 誘導되는 space group들은 short international(Herman-Mauguin) symbol과 full international(Hermann-Mauguin) symbol의 두 가지로 나타내었으며, 많은 space group들이 full symbol에 있는 것보다 더 많은 symmetry들을 包含하고 있다(Table 4.3.1).[1)]

모든 space group diagram은 "International Tables for Crystallography, Volume A[1)]"에 記載되어 있다.

[1] Point group 2 2 2에서 誘導되는 space groups

Point group 2 2 2에서 誘導되는 모든 space group은 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 16, *P* 2 2 2

Origin at 2 2 2

本 space group에서는 lattice symmetry 2 2 2와 origin (000)點의 symmetry 2 2 2가 같다.

Origin을 지나는 2//[100]와 2//[010]를 곱하면 다음 式같이 origin을 지나는 2//[001]이 誘導되어 이들 3個 symmetry는 各各 a, b, c-軸上에 있음을 알 수 있다.

$$\begin{array}{ccccc} 2//[100] & & 2//[010] & & 2//[001] \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

本 space group에서와 같이 **lattice symmetry와 origin (000)點의 symmetry가 같을 때는 恒常 primary, secondary, tertiary symmetry direction들이 a-, b-, c-軸과 一致한다.**

座標는 다음같이 얻어진다. **2//[001]**의 symmetry matrix에서 다음 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 **2//[010]**에 代入함으로서 다음 2個의 座標가 追加되고

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

이들 座標를 **2//[100]**에 代入하면 同一한 座標가 얻어진다.

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

따라서 multiplicity Z = 4이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 *P* 2 2 2는 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 17, *P* 2 2 2_1

Origin at 2 1 2_1

Origin을 지나는 2//[100]과 2_1//[001]를 곱하면 다음 式같이 z = 1/4를 지나는 2//[010]이 나온다.

$$\underset{2//[100]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} \underset{2_1//[001]}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}}$$

$$\overset{2//[010]\ \text{at}\ z = 1/4}{= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}}$$

그러면 **2_1//[001]**에서 다음 2個 座標가 나오고

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

(1) x, y, z (2) −x, −y, z + 1/2

이들 座標를 **2//[010] at z = 1/4**에 代入함으로서 다음 2個의 座標가 追加되며

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

(3) −x, y, −z + 1/2 (4) x, −y, −z

이들 座標를 **2//[100]**에 代入하면 上記와 同一한 座標가 얻어져서 multiplicity Z = 4이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 *P* 2 2 2_1은 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 18, P 2_1 2_1 2

Origin at intersection of 2 with perpendicular plane containing 2_1 axes

本 space group에 있는 2_1//[100]과 2_1//[010]를 곱하여 origin을 지나는 2//[001]을 얻기 爲하여는 다음 式과같이 2_1//[100]이 y = 1/4를 그리고 2_1//[010]이 x = 1/4를 지나야 한다:

$$\underset{2_1//[100]\ \text{at}\ y = 1/4}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}} \underset{2_1//[010]\ \text{at}\ x = 1/4}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}}$$

$$\overset{2//[001]}{= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

위 式의 **2//[001]**에서 다음 2個 座標가 나오고

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

이들 座標를 **2//[010]** at z = 1/4에 代入함으로서 다음 2個의 座標가 追加되며

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

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

이들 座標를 **2_1//[100] at y = 1/4**에 代入하면 上記와 同一한 座標가 얻어져서

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

multiplicity Z = 4 이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 $P\ 2_1\ 2_1\ 2$는 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 19, $P\ 2_1\ 2_1\ 2_1$

Origin at midpoint of three non-intersecting pairs of parallel 2_1 axes

本 space group에 있는 2_1//[100]와 2_1//[010]를 곱하여 2_1//[001]이 나오려면 다음 式과 같이 2_1//[100]는 y = 1/4, 2_1//[010]는 z = 1/4, 그리고 2_1//[001]은 x = 1/4를 지나야한다.

$$\underset{2_1//[100]\text{ at } y=1/4}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}} \underset{2_1//[010]\text{ at } z=1/4}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}}$$

$$2_1//[001] \text{ at } x = 1/4$$

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

그러면 다음같이 symmetry **2_1[001] at x = 1/4**에서 두 個의 座標가 나오며

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z + 1/2

이들 座標들을 **2_1//[010] at z = 1/4**에 代入하면 두 個의 座標가 追加되고

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

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

이들 座標를 **2_1//[100] at y = 1/4**에 代入하면 上記와 同一한 座標가 얻어져서

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

multiplicity Z = 4 이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 $P\ 2_1\ 2_1\ 2_1$는 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 20, $C\ 2\ 2\ 2_1 = C\ 2_1\ 2_1\ 2_1$

Origin at 2 1 2_1

Space group No. 17, $P\ 2\ 2\ 2_1$ + C-center에 依하여 다음의 8個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z + 1/2 (3) −x, y, −z + 1/2
(4) x, −y, −z (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 + 1/2
(8) x + 1/2, −y + 1/2, −z
∴ $C\ 2\ 2\ 2_1$

Space group diagram[1]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다, 即 다음같이 **2_1//[001]**에서 2個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x, −y, z + 1/2

다음같이 **2_1//[010] at x = z = 1/4**에서 2個 座標가 追加되며

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

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

2_1//[100] at y = 1/4에서는 위와 同一한 座標가 얻어진다.

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

上記 4個 座標에 C-center (1/2, 1/2, 0)을 加하면 8個의 座標 모두가 얻어진다.

(5) x + 1/2, y + 1/2, z
(6) −x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2
(3) −x, y, −z + 1/2 (4) x, −y, −z.
∴ $C\ 2\ 2\ 2_1 = C\ 2_1\ 2_1\ 2_1$

故로 multiplicity Z = 8이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 $C\ 2\ 2\ 2_1 = C\ 2_1\ 2_1\ 2_1$은 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 21, $C\ 2\ 2\ 2 = C\ 2_1\ 2_1\ 2$
Origin at 2 2 2
Space group No. 16, *P* 2 2 2 + C-center에 依하여 다음의 8個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) −x, y, −z
(4) x, −y, −z (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
∴ *C* 2 2 2

Space group diagram[1]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다, 卽 다음의 **2//[001]**에서 2個 座標가 얻어지고

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

다음의 **2_1//[010] at x = 1/4**에서 2個 座標가 追加되며

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

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

2_1//[100] at y = 1/4에서는 위와 同一한 座標가 얻어진다.

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

上記 4個 座標에 C-center (1/2, 1/2, 0)을 加하면 8個의 座標 모두가 얻어진다.

(5) x + 1/2, y + 1/2, z (6) −x + 1/2, −y + 1/2, z
(3) −x, y, −z (4) x, −y, −z
∴ $C\ 2\ 2\ 2 = C\ 2_1\ 2_1\ 2$

故로 multiplicity Z = 8이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 $C\ 2\ 2\ 2 = C\ 2_1\ 2_1\ 2$은 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 22, $F\ 2\ 2\ 2 = F\ 2_1\ 2_1\ 2 = F\ 2_1\ 2\ 2_1 = F\ 2\ 2_1\ 2_1$
Origin at 2 2 2
Space group No. 16, *P* 2 2 2 + F-center에 依하여 다음의 16個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) −x, y, −z
(4) x, −y, −z (5) x, y + 1/2, z + 1/2
(6) −x, −y + 1/2, z + 1/2 (7) −x, y + 1/2, −z + 1/2
(8) x, −y + 1/2, −z + 1/2 (9) x + 1/2, y, z + 1/2
(10) −x + 1/2, −y, z + 1/2 (11) −x + 1/2, y, −z + 1/2
(12) x + 1/2, −y, −z + 1/2 (13) x + 1/2, y + 1/2, z
(14) −x + 1/2, −y + 1/2, z (15) −x + 1/2, y + 1/2, −z
(16) x + 1/2, −y + 1/2, −z
∴ *F* 2 2 2

Space group diagram[1]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다.
卽 **2//[001]**에서 2個 座標가 얻어지며

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

2_1//[010]에는 2가지가 있을 수 있다.

(첫째) **2_1//[010] at x = 1/4**에서 얻어지는 2個 座標

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

(15) −x + 1/2, y + 1/2, −z (16) x + 1/2, −y + 1/2, −z

(둘째) **2_1//[010] at z = 1/4**에서 얻어지는 2個 座標

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

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

또한 2_1//[100]에도 2가지가 있을 수 있다.
(첫째) 2_1//[100] at y = 1/4에서 얻어지는 2個 座標

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

(16) x + 1/2, −y + 1/2, −z (15) −x + 1/2, y + 1/2, −z

(둘째) 2_1//[100] at z = 1/4에서 얻어지는 2個 座標

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

(12) x + 1/2, −y, −z + 1/2 (11) −x + 1/2, y, −z + 1/2

結局 **2//[001]**에서 얻어지는 2個 座標와 **2_1//[010]**나 **2_1//[100]** 中 하나를 擇하고 그 擇한 것에 있는 두가지 方法中의 任意의 하나에서 얻어지는 2個 座標를 追加한 4個 座標에 F-center를 加하면 16個의 座標 모두가 얻어진다.

∴ $F\,2\,2\,2 = F\,2_1\,2_1\,2$

以上의 論理로 미루어 $F\,2\,2\,2 = F\,2_1\,2_1\,2 = F\,2_1\,2\,2_1 = F\,2\,2_1\,2_1$가 成立함을 알 수 있다. 故로 multiplicity Z = 16이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 $F\,2\,2\,2 = F\,2_1\,2_1\,2 = F\,2_1\,2\,2_1 = F\,2_1\,2\,2_1$은 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 23, $I\,2\,2\,2 = I\,2_1\,2_1\,2_1$

Origin at 2 2 2

Space group No. 16, $P\,2\,2\,2$ + I-center에 依하여 다음의 8個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) −x, y, −z
(4) x, −y, −z (5) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
(6) −x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2
(7) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2
(8) x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2
∴ $I\,2\,2\,2$

Space group diagram[1)]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다.

卽 **2_1//[001] at x = y = 1/4**에서 2個 座標가 얻어지고

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

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

다음의 **2_1//[010] at x = z = 1/4**에서 2個 座標가 追加되며

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

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

2_1//[100] at y = z = 1/4에서 4個 座標가 追加되어 8個의 座標 모두가 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 (3) −x, y, −z
(2) −x, −y, z (5) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
∴ $I\,2\,2\,2 = I\,2_1\,2_1\,2_1$

故로 multiplicity Z = 8이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 $I\,2\,2\,2 = I\,2_1\,2_1\,2_1$은 enantiomorphous space group이다.

Space group No. 24, $I\,2_1\,2_1\,2_1 = I\,2\,2\,2$

Origin at midpoint of three non-intersecting pairs of parallel 2 axes

Space group No. 19, $P\ 2_1\ 2_1\ 2_1$ + I-center에 依하여 다음의 8個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z + 1/2
(3) −x, y + 1/2, −z + 1/2 (4) x + 1/2, −y + 1/2, −z
(5) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2 (6) −x, −y + 1/2, z
(7) −x + 1/2, y, −z (8) x, −y, −z + 1/2
$\therefore I\ 2_1\ 2_1\ 2_1$

Space group diagram[1]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다.

即 **2//[001] at y = 1/4**에서 2個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (6) −x, −y + 1/2, z

다음의 **2//[010] at x = 1/4**에서 2個 座標가 追加되며

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

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

2//[100] at z = 1/4에서는 同一한 座標가 얻어진다.

上記 4個 座標에 C-center (1/2, 1/2, 0)을 加하면 8個의 座標 모두가 얻어진다.

$\therefore I\ 2_1\ 2_1\ 2_1 = I\ 2\ 2\ 2$

故로 multiplicity Z = 8이며 모든 座標를 合하면 零이 되고 *m*-symmetry가 없어 $I\ 2_1\ 2_1\ 2_1 = I\ 2\ 2\ 2$은 enantiomorphous space group이다.

[2] Point group *m m* 2에서 誘導되는 space groups

Point group *m m* 2에서 誘導되는 space group들은 모두 polar space group이다.

Space group No. 25, *P m m* 2

Origin on *m m* 2

本 space group에서는 lattice symmetry와 origin (000)點의 symmetry가 같다. 따라서 primary, secondary, tertiary symmetry direction들이 a-, b-, c-軸上에 있다.

2//[001]에서 다음 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 ***m*//[010]**에 操作함으로서 다음 두 座標가 追加되고

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

***m*//[100]**에서는 同一한 座標가 얻어진다.

따라서 multiplicity Z = 4이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가질 수 있어서 space group *P m m* 2은 polar space group이다.

Space group No. 26, $P\ m\ c\ 2_1$

Origin on $m\ c\ 2_1$

本 space group에서 lattice symmetry와 origin (000)點의 symmetry가 같다.

2_1//[001]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들을 ***c*//[010]**에 代入함으로서 다음의 두 座標가 追加되어

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

(3) x, −y, z + 1/2 (4) −x, y, z

multiplicity Z = 4이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $P\ m\ c\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 27, $P\ c\ c\ 2$

Origin on $c\ c\ 2$

本 space group에서 lattice symmetry와 origin (000)點의 symmetry가 같다.

<u>2//[001]</u>에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

이 2個 座標를 symmetry **<u>*c*//[010]</u>**에 代入함으로서 다음의 2個 座標가 追加되고

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

(3) x, −y, 1/2 +z (4) −x, y, 1/2 + z

<u>*c*//[100]</u>에서는 同一한 座標가 얻어진다.

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

故로 multiplicity Z = 4 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $P\ c\ c\ 2$은 polar space group이다.

Space group No. 28, $P\ m\ a\ 2$

Origin on $1\ a\ 2$

Origin을 지나는 *a*//[010]과 2//[001]를 곱하면 다음 式같이 x = 1/4를 지나는 *m*//[100]이 얻어진다.

$$\begin{array}{cc} a//[010] & 2//[001] \end{array}$$

$$\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}\right] \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$m//[100] \text{ at } x = 1/4$$

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

그러면 **<u>2//[001]</u>**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

<u>*a*//[010]</u>에서 다음의 2個 座標가 追加되고

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

(3) x + 1/2, −y, z (4) −x + 1/2, y, z

<u>*m*//[100] at x = 1/4</u>에서는 同一한 座標가 얻어진다.

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

故로 multiplicity Z = 4 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $P\ m\ a\ 2$은 polar space group이다.

Space group No. 29, $P\ c\ a\ 2_1$

Origin on $1\ a\ 2_1$

Origin을 지나는 *a*//[010]와 2_1//[001]를 곱하면 다음 式같이 x = 1/4을 지나는 *c*//[100]이 된다.

$$\begin{array}{cc} a//[010] & 2_1//[001] \end{array}$$

$$\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}\right] \left[\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}\right]$$

$$c//[100] \text{ at } x = 1/4$$

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

그러면 **<u>2_1//[001]</u>**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

a//[010]에서 다음의 2個 座標가 追加되어

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

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

multiplicity Z = 4 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group *P c a* 2_1은 polar space group이다.

Space group No. 30, *P n c* 2

Origin on *n* 1 2

Origin을 지나는 *n*//[100]과 2//[001]에서 다음 式같이 y = 1/4을 지나는 *c*//[010]이 나온다.

n//[100] *c*//[010] at y = 1/4

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

c//[010] at y = 1/4 2//[001]

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

그러면 **2//[001]**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 ***c*//[010] at y = 1/4**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되어

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

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

multiplicity Z = 4 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group *P n c* 2은 polar space group이다.

Space group No. 31, *P m n* 2_1

Origin on *m n* 1

Origin을 지나는 *m*//[100]과 *n*//[010]에서 x = 1/4를 지나는 2_1//[001]이 誘導 된다.

m//[100] *n*//[010]

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

2_1//[001] at x = 1/4

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

그러면 **2_1//[001] at x = 1/4**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z + 1/2

이들 座標를 ***n*//[010]**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되어

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

(3) x + 1/2, −y, z + 1/2 (4) −x, y, z

multiplicity Z = 4 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group *P m n* 2_1은 polar space group이다.

Space group No. 32, *P b a* 2

Origin on 1 1 2

本 space group에 있는 *b*//[100]와 *a*//[010]를 곱한 結果가 origin을 지나는 2//[001]로 되기 爲하여는 다음 式같이 *b*//[100]이 x = 1/4을 지나고 *a*//[010]가 y = 1/4을 지나야 된다.

b//[100] at x = 1/4

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

$a//[010]$ at y=1/4 $\qquad$ $2//[001]$

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

그러면 **2//[001]**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 ***a*//[010] at y = 1/4**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되고

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

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

***b*//[010] at x = 1/4**에서는 同一한 座標가 얻어진다.

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

따라서 multiplicity Z = 4 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group *P b a* 2은 polar space group이다.

Space group No. 33, $P\ n\ a\ 2_1$

Origin on $1\ 1\ 2_1$

本 space group에 있는 *n*//[100]과 *a*//[010]을 곱한 結果가 origin을 지나는 2_1//[001]로 되려면 다음과 같이 *n*//[100]이 x = 1/4을 지나고 *a*//[010]이 y = 1/4을 지나면 된다.

n//[100] at x = 1/4 $\qquad$ *a*//[010] at y = 1/4

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

$2_1//[001]$

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

그러면 **2_1//[001]**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 ***a*//[010] at y = 1/4**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되고

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

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

***n*//[010] at x = 1/4**에서는 同一한 座標가 얻어진다.

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

따라서 multiplicity Z = 4 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $P\ n\ a\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 34, $P\ n\ n\ 2$

Origin on 112

本 space group에 있는 *n*//[100]과 *n*//[010]를 곱한 結果가 origin을 지나는 2//[001]로 되려면 다음과같이 *n*//[100]이 x = 1/4을 그리고 *n*//[010]이 y = 1/4을 지나면 된다.

n//[100] at x = 1/4

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

n//[010] at y = 1/4 $\qquad$ 2//[001]

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

그러면 **2//[001]**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 ***n*//[010] at y = 1/4**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되어

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

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

multiplicity Z = 4 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group *P n n* 2은 polar space group이다.

Space group No. 35, $C\ m\ m\ 2 = C\ b\ a\ 2$
Origin *m m* 2
Space group No. 25 *P m m* 2 + C-center에 依하여 다음의 8個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) x, −y, z (4) −x, y, z
(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
$\therefore C\ m\ m\ 2$

Space group diagram[1]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다.
即 **2//[001]**에서 2個 座標가 얻어지고

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

다음의 ***a*//[010] at y = 1/4**에서 2個 座標가 追加되며

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

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

다음의 ***b*//[100] at x = 1/4**에서는 同一한 效果를 준다.

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

上記 4個 座標에 C-center (1/2, 1/2, 0)을 加하면 8個의 座標 모두가 얻어진다.

$\therefore C\ m\ m\ 2 = C\ b\ a\ 2$

故로 multiplicity Z = 8이며 z가 任意의 값을 갖고, *m*-symmetry가 있어 $C\ m\ m\ 2 = C\ b\ a\ 2$은 polar space group이다.

Space group No. 36, $C\ m\ c\ 2_1 = C\ b\ n\ 2_1$
Origin on $m\ c\ 2_1$
Space group No. 26, $P\ m\ c\ 2_1$ + C-center에 依하여 다음의 8個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z + 1/2 (3) x, −y, z + 1/2
(4) −x, y, z (5) x + 1/2, y + 1/2, z
(6) −x + 1/2, −y + 1/2, 1/2 + z
(7) x + 1/2, −y + 1/2, 1/2 + z
(8) −x + 1/2, y + 1/2, z
$\therefore C\ m\ c\ 2_1$

Space group diagram[1]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다, 即 다음의 **2_1//[001]**에서 2個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x, −y, z + 1/2

다음의 ***n*//[010] at y = 1/4**에서 2個 座標가 追加되며

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

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

다음의 ***b*//[100] at x = 1/4**에서는 同一한 效果를 준다.

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

上記 4個 座標에 C-center (1/2, 1/2, 0)을 加하면 8個의 座標 모두가 얻어진다.

$\therefore\ C\ m\ c\ 2_1 = C\ b\ n\ 2_1$

故로 multiplicity Z = 8이며 z가 任意의 값을 갖고, *m*-symmetry가 있어 $C\ m\ c\ 2_1 = C\ b\ n\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 37, $C\ c\ c\ 2 = C\ n\ n\ 2$

Origin on $c\ c\ 2$

Space group No. 27, $P\ c\ c\ 2$ + C-center에 依하여 다음의 8個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) x, −y, z + 1/2
(4) −x, y, z + 1/2 (5) x + 1/2, y + 1/2, z
(6) −x + 1/2, −y + 1/2, z
(7) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2
(8) −x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
$\therefore\ C\ c\ c\ 2$

Space group diagram[1)]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다, 卽 다음의 **2//[001]**에서 2個 座標가 얻어지고

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

다음의 ***n*//[010] at y = 1/4**에서 2個 座標가 追加되며

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

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

다음의 **n//[100] at x = 1/4**에서는 위와 同一한 座標가 나온다.

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

上記 4個 座標에 C-center (1/2, 1/2, 0)을 加하면 8個의 座標 모두가 얻어진다.

$\therefore\ C\ c\ c\ 2 = C\ n\ n\ 2$

故로 multiplicity Z = 8이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意임으로 space group $C\ c\ c\ 2 = C\ n\ n\ 2$은 polar space group이다.

Space group No. 38, $A\ m\ m\ 2 = A\ n\ c\ 2_1$

Origin on $m\ m\ 2$

Space group No. 25, $P\ m\ m\ 2$ + A-center에 依하여 다음의 8個의 座標가 얻어진다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) x, −y, z (4) −x, y, z
(5) x, y + 1/2, z + 1/2 (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2
(7) x, −y + 1/2, z + 1/2 (8) −x, y + 1/2, z + 1/2
$\therefore\ A\ m\ m\ 2$

Space group diagram[1)]을 參照하면 上記 座標들은 다음같이도 얻어진다.

卽 **2_1//[001] at y = 1/4**에서 2個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (7) −x, −y + 1/2, z + 1/2

다음의 ***c*//[010] at y = 1/4**에서 2個 座標가 追加되며

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

(6) x, −y + 1/2, z + 1/2 (4) −x, y, z

다음의 ***n*//[100]**에서 나머지 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標들을 얻는다.

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

(8) −x, y + 1/2, z + 1/2 (3) x, −y, z (2) −x, −y, z
(5) x, y + 1/2, z + 1/2
$\therefore A\ m\ m\ 2 = A\ n\ c\ 2_1$

故로 multiplicity Z = 8 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意임으로 space group $A\ m\ m\ 2 = A\ n\ c\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 39, $A\ b\ m\ 2 = A\ b\ c\ 2 = A\ c\ c\ 2_1$
Origin on $b\ c\ 2$
Origin을 지나는 *b*//[100]와 2//[001]로부터 다음과 같이 y = 1/4을 지나는 *m*//[010]이 나온다.

b//[100]

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

m//[010] at y = 1/4 2//[001]

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

그러면 **2//[001]**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 ***m*//[010] at y = 1/4**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

(3) x, −y + 1/2, z (4) −x, y + 1/2, z

b//[100]에서는 上記와 重複된 座標를 얻는다.

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

上記 4個 座標들에 A-center (0 1/2 1/2)를 加하면 다음의 8個 座標가 얻어진다:

(5) x, y + 1/2, z + 1/2 (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2
(7) x, −y, z + 1/2 (8) −x, y, z + 1/2
$\therefore A\ b\ m\ 2$

이들 座標들은 다음의 2가지 方法으로도 얻어진다.
(첫째). **2//[001]**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

(1) x, y, z (2) −x, −y, z

이들 座標를 ***c*//[010]**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되어

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

(7) x, −y, z + 1/2 (8) −x, y, z + 1/2

이들 4個 座標를 ***b*//[100]**에 操作함으로서 8個의 座標가 모두 얻어진다.

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

(4) −x, y + 1/2, z (3) x, −y + 1/2, z
(6) −x, −y + 1/2, z + 1/2 (5) x, y + 1/2, z + 1/2
$\therefore A\ b\ m\ 2 = A\ b\ c\ 2$

(둘째). **2_1//[001] at y = 1/4**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

(1) x, y, z (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2

이들 座標를 ***c*//[010]**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되어

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

(7) x, −y, z + 1/2 (4) −x, y + 1/2, z

이들 座標를 ***c*//[100]**에 操作함으로서 8個 座標가 모두 얻어진다.

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

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

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

$\therefore A\ b\ m\ 2 = A\ b\ c\ 2 = A\ c\ c\ 2_1$

故로 multiplicity Z = 8 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $A\ b\ m\ 2 = A\ b\ c\ 2 = A\ c\ c\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 40, $A\ m\ a\ 2 = A\ n\ n\ 2_1$

Origin on $1\ a\ 2$

Origin을 지나는 *a*//[010]와 2//[001]로부터 다음과 같이 x = 1/4을 지나는 *m*//[100]을 얻는다.

m//[100] at x = 1/4

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

$$\underset{a//[010]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}} = \underset{2//[001]}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

그러면 **2//[001]**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 ***a*//[010]**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

(3) x + 1/2, −y, z (4) −x + 1/2, y, z

***m*//[010] at x = 1/4**에서는 위와 同一한 座標가 얻어진다.

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

上記 4個 座標들은 A-center (0 1/2 1/2)를 加하면 모두 8個 座標가 얻어진다:

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

(7) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2

(8) −x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2

$\therefore A\ m\ a\ 2$

이들 座標는 다음같이도 얻어진다.

그러면 **2_1//[001] at y = 1/4**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

(1) x, y, z (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2

이들 座標를 ***n*//[010] at y = 1/4**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

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

이들 4개 座標를 ***n*//[100] at x = 1/4**에 操作함으로서 모두 8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 (3) x + 1/2, −y, z

(2) −x, −y, z (5) x, y + 1/2, z + 1/2

$\therefore A\ m\ a\ 2 = A\ n\ n\ 2_1$

따라서 multiplicity Z = 8 이며 *m*-symmetry가 있고

z가 任意의 값을 가지므로 space group $A\ m\ a\ 2 = A\ n\ n\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 41, $A\ b\ a\ 2 = A\ b\ n\ 2 = A\ c\ n\ 2_1$

Origin on $1\ n\ 2$

Origin을 지나지 않는 b//[100]과 a//[010], 그리고 origin을 지나는 2//[001]으로부터 다음과 같이 b//[100]는 x = 1/4를 그리고 a//[010]은 y = 1/4를 通過함을 알수있다.

b//[100] at x = 1/4

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

a//[010] at y = 1/4 2//[001]

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

또한 origin을 지나는 n//[010]과 2//[001]로부터 x = 1/4를 지나는 c//[100]이 얻어진다.

n//[010]

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

2//[001] c//[100] at x = 1/4

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

그러면 **2//[001]**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 ***a*//[010] at y = 1/4**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

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

上記 4個 座標들에 A-center (0 1/2 1/2)를 加하면 다음의 8個 座標가 얻어진다:

(5) x, y + 1/2, z + 1/2 (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2
(7) x + 1/2, −y, z + 1/2 (8) −x + 1/2, y, z + 1/2
$\therefore A\ b\ a\ 2$

이들 座標들은 다음의 2가지 다른 方法으로도 얻어진다.

(첫째). **2//[001]**에서 다음의 2個 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 ***n*//[010]**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

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

이들 4個 座標를 ***b*//[100] at x = 1/4**에 操作함으로서 모두 8個 座標가 얻어진다.

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

(4) −x + 1/2, y + 1/2, z (3) x + 1/2, −y + 1/2, z
(6) −x, −y + 1/2, z + 1/2 (5) x, y + 1/2, z + 1/2
$\therefore A\ b\ a\ 2 = A\ b\ n\ 2$

(둘째). **2_1//[001] at y = 1/4**에서 다음의 2個 座標가 나오고

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

(1) x, y, z (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2

이들 座標를 ***n*//[010]**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

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

이들 4個 座標를 ***c//[100] at x = 1/4***에 操作함으로서 모두 8個 座標가 얻어진다.

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

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

(2) −x, −y, z (5) x, y + 1/2, z + 1/2

$\therefore A\ b\ a\ 2 = A\ b\ n\ 2 = A\ c\ n\ 2_1$

故로 multiplicity Z = 8 이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $A\ b\ a\ 2 = A\ b\ n\ 2 = A\ c\ n\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 42, $F\ m\ m\ 2 = F\ b\ a\ 2 = F\ c\ n\ 2_1$

Origin on $m\ m\ 2$

Space group No. 25, $P\ m\ m\ 2$ + F-center에 依하여 다음 같은 16個의 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) x, −y, z (4) −x, y, z
(5) x, y + 1/2, z + 1/2 (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2
(7) x, −y + 1/2, z + 1/2 (8) −x, y + 1/2, z + 1/2
(9) x + 1/2, y, z + 1/2 (10) −x + 1/2, −y, z + 1/2
(11) x + 1/2, −y, z + 1/2 (12) −x + 1/2, y, z + 1/2
(13) x + 1/2, y + 1/2, z (14) −x + 1/2, −y + 1/2, z
(15) x + 1/2, −y + 1/2, z (16) −x + 1/2, y + 1/2, z

$\therefore F\ m\ m\ 2$

이들 座標들은 다음같이 3가지 다른 方法으로도 얻어진다

(첫째). **2//[001]**에서 다음 같은 2個 座標가 얻어지고

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

이들 座標를 ***a//[010] at y = 1/4***에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

(15) x + 1/2, −y + 1/2, z (16) −x + 1/2, y + 1/2, z

이들 4個 座標를 ***b//[100] at x = 1/4***에 操作하면 위와같은 4個 座標가 얻어진다.

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

上記 4個 座標에 F-center를 加하면 16個의 座標가 얻어진다.

$\therefore F\ m\ m\ 2 = F\ b\ a\ 2$

(둘째). **2_1//[001] at y = 1/4**에서 다음 같은 2個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2

이들 座標를 ***c//[010] at y = 1/4***에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

(7) x, −y + 1/2, z + 1/2 (4) −x, y, z

이들 4個 座標를 ***n//[100]***에 操作함으로서 모두 8個 座標가 얻어진다.

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

(8) −x, y + 1/2, z + 1/2 (3) x, −y, z

(2) −x, -y, z (5) x, y + 1/2, z + 1/2

上記 8個 座標에 F-center를 加하면 16가지 다른

座標가 얻어진다.

$\therefore\ F\,m\,m\,2 = F\,b\,a\,2 = F\,n\,c\,2_1$

(셋째). **2_1//[001] at y = 1/4**에서 다음 같은 2個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2

이들 座標를 ***n*//[010]**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

(11) x + 1/2, −y, z + 1/2 (16) −x + 1/2, y + 1/2, z

이들 4個 座標를 ***c*//[100] at y = 1/4**에 操作함으로서 모두 8個 座標가 얻어진다.

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

(8) −x, y + 1/2, z + 1/2 (3) x, −y, z
(14) −x + 1/2, −y + 1/2, z (9) x + 1/2, y, z + 1/2

上記 8個 座標에 F-center를 加하면 16가지 다른 座標가 얻어진다.

$\therefore\ F\,m\,m\,2 = F\,b\,a\,2 = F\,n\,c\,2_1 = F\,c\,n\,2_1$

故로 multiplicity Z = 16이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $F\,m\,m\,2 = F\,b\,a\,2 = F\,n\,c\,2_1 = F\,c\,n\,2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 43, $F\,d\,d\,2 = F\,d\,d\,2_1$
Origin on 1 1 2

本 space group에는 origin의 指定에서 얻어지는 2//[001]을 包含하여 space group diagram[1]으로부터 알 수 있는 다음과 같은 8가지 symmetry들이 있다. 特記할 것은 **diamond glide plane은 centered cell들에서만 있고 그 symbol에서 보이는 두 가지 arrow의 方向으로 恒常 双(pairs of planes)으로 나타난다는 것이다.**

$$2//[001]:\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$2_1//[001]\text{ at }y = 1/4:\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

$$2_1//[001]\text{ at }x = 1/4:\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix};$$

$$2//[001]\text{ at }x = y = 1/4:\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$d//[100]\text{ at }x = 1/8:\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix};$$

$$d//[100]\text{ at }x = 3/8:\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ -1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$$d//[010]\text{ at }y = 1/8:\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix};$$

$$d//[010]\text{ at }y = 3/8:\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1/4 \\ 3/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

이들 symmetry들 中에서 두 個 以上씩 곱하면 그 space group에 있는 다른 symmetry가 되어야한다는 rule에 따라 그 symmetry들의 位置가 定해진다. 여기서는 몇가지 例를 보이겠다.

(1) *d*//[100] at x = 1/8 *d*//[010] at y = 1/8

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

2//[001] + B-center or 2_1//[001] at x = 1/4

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

(2) *d*//[100] at x = 1/8 2//[001] at x = y = 1/4

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

d//[010] at y = 1/8

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

(3) *d*//[100] at x = 1/8 *d*//[100] at x = 3/8

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ -1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

B-center

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

座標는 다음같이 얻어진다. **2//[001]** 인 다음의 symmetry matrix에서 두 個의 座標가 나오며

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

이 두 座標를 ***d*//[010] at y = 1/8**의 다음 symmetry matrix에 代入하면 두 個의 座標가 追加되며

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

(3) x + 1/4, −y + 1/4, z + 1/4

(4) −x + 1/4, y + 1/4, z + 1/4

이들 4個 座標에 F-center를 加하면 다음같이 모두 16個의 座標가 誘導된다:

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

(7) x + 1/4, −y + 3/4, z + 3/4

(8) −x + 1/4, y + 3/4, z + 3/4 (9) x + 1/2, y, z + 1/2

(10) −x + 1/2, −y, z + 1/2

(11) x + 3/4, −y + 1/4, z + 3/4

(12) −x + 3/4, y + 1/4, z + 3/4

(13) x + 1/2, y + 1/2, z (14) −x + 1/2, −y + 1/2, z

(15) x + 3/4, −y + 3/4, z + 1/4

(16) −x + 3/4, y + 3/4, z + 1/4

d//[010] at y = 1/8 代身에 ***d*//[010] at y = 3/8**을 使用하여도 類似한 結果가 얻어진다.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1/4 \\ 3/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

(1) → (15) x + 3/4, −y + 3/4, z + 1/4

(2) → (16) −x + 3/4, y + 3/4, z + 1/4

***d*//[100] at x = 1/8**을 使用하여도 類似한 結果가 얻어진다.

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

(1) → (4) −x + 1/4, y + 1/4, z + 1/4

(2) → (3) x + 1/4, −y + 1/4, z + 1/4

***d*//[100] at x = 3/8**을 使用하여도 類似한 結果가 얻어진다.

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ -1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

(1) → (16) −x + 3/4, y + 3/4, z + 1/4

(2) → (15) x + 3/4, −y + 3/4, z + 1/4

∴ $F\,d\,d\,2$

이들 座標들은 다음같이도 얻어진다.

2_1//[001] at y = 1/4에서 다음 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 (6) −x, −y + 1/2, z + 1/2

이 두 座標를 <u>***d//*[010] at y = 1/8**</u>의 다음 symmetry matrix에 代入하면 두 個의 座標가 追加되며

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

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

이들 4個 座標에 F-center를 加하면 上記의 16個의 座標가 誘導된다:

$\therefore F\ d\ d\ 2 = F\ d\ d\ 2_1$

따라서 multiplicity Z = 16이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 *space group F d d 2* = *F d d* 2_1은 polar space group이다.

Space group No. 44, $I\ m\ m\ 2 = I\ n\ n\ 2_1$
Origin on *m m* 2
Space group No. 25, *P m m* 2 + I-center를 加하면 다음의 8個 座標를 얻는다:

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) x, −y, z (4) −x, y, z
(5) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
(6) −x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2
(7) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2
(8) −x + 1/2, y + 1/2, z − 1/2
$\therefore I\ m\ m\ 2$

이들 座標는 다음같이도 얻어진다.
<u>**2_1//[001] at x = y = 1/4**</u>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

위의 2個 座標를 <u>***n//*[010] at y = 1/4**</u>에 代入하면 다음의 2個 座標가 얻어지며

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

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

上記 4個 座標에 I-center를 加하면 다음의 8個 座標를 얻는다

$\therefore I\ m\ m\ 2 = I\ n\ n\ 2_1$

따라서 multiplicity Z = 8이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $I\ m\ m\ 2 = I\ n\ n\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 45, $I\ b\ a\ 2 = I\ c\ c\ 2_1$
Origin on *c c* 2
Space group No. 32, P b a 2 + I-center에 依하여 다음의 8個 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) x + 1/2, −y + 1/2, z
(4) −x + 1/2, y + 1/2, z (5) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
(6) −x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2 (7) x, −y, z + 1/2
(8) −x, y, z + 1/2
$\therefore I\ b\ a\ 2$

이들 座標들은 다음같이도 얻어진다:
<u>**2_1//[001] at x = y = 1/4**</u>에 依하여 다음의 2個의 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

上記 2個 座標를 <u>***c*/[010]**</u>에 代入하면 2個 座標가 追加되고

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

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

上記 4個 座標를 <u>***c*/[100]**</u>에 代入하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 된다.

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

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

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

$\therefore$ $I\ b\ a\ 2 = I\ c\ c\ 2_1$

따라서 multiplicity Z = 8이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $I\ b\ a\ 2 = I\ c\ c\ 2_1$은 polar space group이다.

Space group No. 46, $I\ m\ a\ 2 = I\ n\ c\ 2_1$

Origin on *n a* 2

Space group No. 28, *P m a* 2 + I-center에 依하여 다음의 8個 座標가 얻어진다.

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

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

(6) −x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2

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

$\therefore$ *I m a* 2

이들 座標들은 다음같이도 얻어진다.

2_1//[001] at x = y = 1/4에 依하여 다음의 2個의 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

上記 2個 座標를 ***c*/[010] at y = 1/4**에 代入하여 2個 座標가 追加되고

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

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

上記 4個 座標를 ***n*/[100]**에 代入하여 4個 座標가 追加되며 모두 8個의 座標로 된다

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

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

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

$\therefore$ $I\ m\ a\ 2 = I\ n\ c\ 2_1$

따라서 multiplicity Z = 8이며 *m*-symmetry가 있고 z가 任意의 값을 가지므로 space group $I\ m\ a\ 2 = I\ n\ c\ 2_1$은 polar space group이다.

[3] Point group *m m m*에서 誘導되는 space groups

Point group mmm은 Laue group에 屬함으로 이 point group에서 誘導되는 모든 space group은 centrosymmetry(= inversion center = center of symmetry)를 갖는다.

Space group No. 47, *P m m m* (*P*2/*m* 2/*m* 2/*m*)

Origin at centre (*m m m*)

本 space group에서는 lattice symmetry와 origin의 symmetry가 同一하다.

Origin을 지나는 *m*//[100]에서 (1) x, y, z (8) −x, y, z가 誘導되고 origin을 지나는 *m*//[010]에서 (7) x, −y, z (2) −x, −y, z되며 이들 4個 座標를 origin을 지나는 *m*//[001] 에 代入함으로서 (6) x, y, −z (3) −x, y, −z (4) x, −y, −z (5) −x, −y, −z 등이 얻어져 multiplicity Z = 8이며 座標間에 inversion center가 있어 *P m m m*은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 48, *P n n n* (*P*2/*n* 2/*n* 2/*n*)

Origin choice 1

Origin at 2 2 2, at 1/4, 1/4, 1/4 from $\bar{1}$

n//[100] 및 *n*//[010]과 origin을 지나는 2//[001] 間의 다음 關係로부터 *n*//[100]은 x = 1/4을, 그리고 *n*//[010]이 y = 1/4를 지남을 알수 있다.

n//[100] at x = 1/4 *n*//[010] at y = 1/4

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

2//[001]

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

또한 다음과 같이 *n*//[100]이 x = 1/4를 지나고 *n*//[001]이 z = 1/4을 지나면 origin을 지나는 2//[010]도 얻어진다.

n//[100] at x = 1/4 *n*//[001] at z = 1/4

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

2//[010]

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

Origin을 지나는 2//[100]은 y = 1/4을 지나는 *n*//[010]과 z = 1/4를 지나는 *n*//[001]를 곱하면 얻어진다.

n//[010] at y = 1/4

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

n//[001] at z = 1/4 2//[100]

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

그러면 **2//[001]**에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

이들 座標를 **2//[010]**에 操作함으로서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

이들 4個 座標를 ***n*//[100] at x = 1/4**의 matrix에 代入하면 4個 座標가 追加되어

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

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

multiplicity Z = 8이며 (1/4, 1/4, 1/4) 點에 inversion center가 있어 *P n n n*은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 48, *P n n n* (*P*2/*n* 2/*n* 2/*n*)
origin choice 2
Origin at $\bar{1}$ at *n n n*, at −1/4, −1/4, −1/4 from 222
Origin을 지나는 *n*//[100]과 *n*//[010]를 곱하여 다음같이 x = y = 1/4를 지나는 2//[001]을 얻는다.

n//[100] *n*//[010]

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

2//[001] at x = 1/4, y = 1/4

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

2//[001] at x = 1/4 and y = 1/4의 다음 matrix에서

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y + 1/2, z

origin을 지나는 ***n*//[010]**에서 다음의 2個 座標가

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

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

上記 4個 座標에 inversion center를 operate하면 다음의 4個 座標가 追加된다.

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

(5) −x, −y, −z (6) x + 1/2, y + 1/2, −z
(3) −x + 1/2, y, −z + 1/2 (4) x, −y + 1/2, −z + 1/2

따라서 multiplicity Z = 8 이며, 座標間에 inversion center가 있어 *P n n n*은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 49, *P c c m* (*P*2/*c* 2/*c* 2/*m*)
Origin at centre (2/*m*) at *c c* 2/*m*
다음 式으로부터 3個 symmetry들 *c*//[100], *c*//[010], 2//[001]가 모두 origin을 지남을 알수 있다.

$$\begin{array}{c} c//[100] \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\underset{c//[010]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}} = \underset{2//[001]}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

따라서 **2//[001]**에서 다음의 두 個 座標가 얻어지고

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

***c*//[010]**에서 다음의 두 個 座標가 追加되며

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

(7) x, −y, z + 1/2 (8) −x, y, z + 1/2

***c*//[010]**에서는 上記와 같은 座標들이 얻어진다.

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

上記의 4個 座標에 inversion center를 操作하면 새로운 4개 座標가 追加되어

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

(5) −x, −y, −z (6) x, y, −z (3) −x, y, −z + 1/2
(4) x, −y, −z + 1/2

multiplicity Z = 8이며, 座標間에 inversion center가 있어 *P c c m*은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 50, *P b a n* (*P*2/*b* 2/*a* 2/*n*)
Origin choice 1
Origin at 2 2 2/*n*, at 1/4, 1/4, 0 from $\bar{1}$
Origin을 지나지 않는 *b*//[100]과 *a*//[010], 그리고 origin을 지나는 2//[001]로부터 다음과 같이 *b*//[100]이 x = 1/4을 지나고, *a*//[010]가 y = 1/4을 지남을 알수있다.

$$\begin{array}{c} b//[100] \text{ at } x = 1/4 \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\underset{a//[010] \text{ at } y = 1/4}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}} = \underset{2//[001]}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

Origin을 지나는 2//[001]에 orgin을 지나는 *n*//[001]을 곱하면 다음같이 (1/4, 1/4, 0)에 있는 $\bar{1}$이 얻어진다.

$$\underset{2//[001]}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}} \underset{n//[100]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at (1/4, 1/4, 0)

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

2//[001]에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

***a*//[010] at y = 1/4**에서 다음의 2個 座標가 追加되며

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

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

***b*//[100] at x = 1/4**에서 다음의 4個 座標가 追加되어 모두 8個로 된다.

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

(8) −x + 1/2, y + 1/2, z (5) −x + 1/2, −y + 1/2, −z
(2) −x, −y, z (3) −x, y, −z

따라서 multiplicity Z = 8 이며, 點(1/4, 1/4, 0)에 inversion center가 있어 *P b a n* (Origin choice 1)은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 50, *P b a n* (*P*2/*b* 2/*a* 2/*n*)
Origin choice 2
Origin at $\bar{1}$ at *b a n*, at −1/4, −1/4, 0 from 2 2 2
Origin을 지나는 *b*//[100]에 *a*//[010]를 곱하면 다음의 結果와 같이 x = y = 1/4에 있는 2//[001]을 얻는다.

$$\begin{array}{cc} b//[100] & a//[010] \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

2//[001] at x = y = 1/4

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

다음같이 $\bar{1}$에 x = y = 1/4를 지나는 2//[001]를 곱하면 *n*//[001]을 얻는다

$$\begin{array}{cc} \bar{1} & 2//[001] \text{ at } x = y = 1/4 \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$$n//[001] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2//[001] at x = 1/4 and y = 1/4에서 다음의 두 座標가 나오며

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y + 1/2, z

***a*//[010]**에서 다음의 두 座標가 追加되고

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

(7) x + 1/2, −y, z (8) −x, y + 1/2, z

上記 4個 座標에 inversion center를 operate하면 모두 8個의 座標로 되어

(5) −x, −y, −z (6) x + 1/2, y + 1/2, −z
(3) −x + 1/2, y, −z (4) x, −y + 1/2, −z

multiplicity Z = 8이며, 座標間에 inversion center가 있어 *P b a n* (Origin choice 2)은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 51, *P m m a* (*P*2$_1$/*m* 2/*m* 2/*a*)
Origin at centre (2/*m*) at 2$_1$ 2/*m a*

Origin을 지나는 $2_1//[100]$과 $2//[010]$을 곱하면 x = 1/4를 지나는 $2//[010]$가 얻어지며

$$\underset{2_1//[100]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}} \underset{2//[010]}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}$$

$$2//[001] \text{ at } x = 1/4$$

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

origin을 지나는 $2_1//[100]$과 $m//[010]$을 곱하면 $a//[001]$가 얻어진다.

$$\underset{2_1//[100]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}} \underset{m//[010]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

$$a//[001]$$

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

Origin에 있는 $\bar{1}$에 $2_1//[100]$을 곱하면 x = 1/4를 지나는 $m//[100]$를 얻는다:

$$\underset{\bar{1}}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} \underset{2_1//[100]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}}$$

$$m//[100] \text{ at } x = 1/4$$

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

그러면 **<u>2//[001] at x = 1/4</u>**에서 다음의 두 座標가 나오고

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z

위의 2個 座標를 **<u>2//[010]</u>**에 代入하여 다음의 두 座標가 追加되며

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

(3) −x, y, −z (4) x + 1/2, −y, −z

上記 4個 座標를 **<u>inversion center</u>**에 操作하면 다음의 4個 座標가 追加되어

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

multiplicity Z = 8이며 *P m m a*은 centrosymmetric space group이다.

이제부터는 **<u>"한 space group에 있는 symmetry들을 곱하면 그 space group에 있는 다른 symmetry가 되어야한다는 rule"</u>**을 適用하여 symmetry들의 位置는 定하는 過程을 種種 省略하고 바로 各 space group에 있는 座標를 찾는다.

Space group No. 52, *P n n a* ($P2/n\ 2_1/n\ 2/a$)
Origin at $\bar{1}$ on *n* 1 *a*

Space group diagram[1]에 있는 **<u>2//[001] at x = 1/4</u>**에 依하여 2個의 座標가 얻어진다:

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z

上記 2個 座標를 **<u>$2_1//[010]$ at x = z = 1/4</u>**에 代入하여 다른 2個의 座標가 얻어지고

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

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

<u>inversion center</u>에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8이며 *P n n a*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 53, $P\ m\ n\ a$ ($P2/m\ 2/n\ 2_1/a$)
Origin at centre (2/*m*) at 2/*m n* 1
Space group diagram[1)]에 있는 ***a*//[001] at z = 1/4**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지며

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z + 1/2

上記 2個 座標를 **2/[010] at x = z = 1/4**에 代入하여 2個 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8이며 *P m n a*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 54, $P\ c\ c\ a$ ($P2_1/c\ 2/c\ 2/a$)
Origin at $\bar{1}$ on 1 *c a*
Space group diagram[1)]에 있는 **2//[001] at x = 1/4**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z

2//[010] at z = 1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8이며 *P c c a*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 55, $P\ b\ a\ m$ ($P2_1/b\ 2_1/a\ 2/m$)
Origin at centre (2/*m*)
Space group diagram[1)]에 있는 **2//[001]**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

2_1//[010] at x = 1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8이며 *P b a m*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 56, $P\ c\ c\ n$ ($P2_1/c\ 2_1/c\ 2/n$)
Origin at $\bar{1}$ on 1 1 *n*
Space group diagram[1)]에 있는 **2//[001] at x = y = 1/4**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y + 1/2, z

2_1//[010] at z = 1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8이며 *P c c n*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 57, *P b c m* (*P*2/*b* 2_1/*c* 2_1/*m*)
Origin at $\bar{1}$ on *b* 1 2_1
Space group diagram[1)]에 있는 **2_1//[001]**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x, −y, z + 1/2

2_1//[010] at z = 1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8이며 *P b c m*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 58, *P n n m* (*P*2_1/*n* 2_1/*n* 2/*m*)
Origin at centre (2/*m*)
Space group diagram[1)]에 있는 **2//[001]**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

2_1//[010] at x = z = 1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8이며 *P n n m*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 59, *P m m n* (*P*2_1/*m* 2_1/*m* 2/*n*)
Origin choice 1
Origin at *m m* 2/*n*, at 1/4, 1/4, 0 from $\bar{1}$
Space group diagram[1)]에 있는 **2//[001]**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

2_1//[010] at x = 1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

$\bar{1}$ at x = y = 1/4에 依하여 다음의 4個의 座標가 追加되며

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

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

multiplicity Z = 8이며, 點(1/4, 1/4, 0)에 inversion center가 있어 *P m m n*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 59, *P m m n* (*P*2_1/*m* 2_1/*m* 2/*n*)
Origin choice 2
Origin at $\bar{1}$ at 2_1 2_1 *n*, at −1/4, −1/4, 0 from *m m* 2
Space group diagram[1)]에 있는 **2//[001] at x = y = 1/4**에 依하여 다음의 2個의 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

2_1//[010]에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8 이며 *P m m n*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 60, *P b c n* ($P2_1/b\ 2/c\ 2_1/n$)
Origin at $\bar{1}$ on 1 *c* 1

Space group diagram[1)]에 있는 **2_1//[001] at x = y = 1/4**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

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

2//[010] at z = 1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8 이며 *P b c n*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 61, *P b c a* ($P2_1/b\ 2_1/c\ 2_1/a$)
Origin at $\bar{1}$

Space group diagram[1)]에 있는 **2_1//[001] at x = 1/4**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z + 1/2

2_1//[010] at z = 1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8 이며 *P b c a*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 62, *P n m a* ($P2_1/n\ 2_1/m\ 2_1/a$)
Origin at $\bar{1}$ on 1 2_1 1

Space group diagram[1)]에 있는 **2_1//[001] at x=1/4**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z + 1/2

2_1//[010]에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8 이며 *P n m a*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 63, *C m c m* ($C2/m\ 2/c\ 2_1/m$)
Origin at centre (2/*m*) at 2/*m c* 2_1

Space group diagram[1)]에 있는 **2_1//[001]**에 依하여 다음의 2個의 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x, −y, z + 1/2

2//[010] at c=1/4에 依하여 다음의 2個의 座標가 追加되며

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

(3) −x, y, −z + 1/2 (4) x, −y, −z

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되어 모두 8個의 座標로 되어 multiplicity Z = 8이며 *C m c m*는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 64, *C m c a* (*C*2/*m* 2/*c* 2_1/*a*)

Origin at centre (2/*m*) at 2/*m n* 1

Space group diagram[1)]에 있는 다음의 **2_1//[001] at y = 1/4**의 symmetry matrix에서 2個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x, −y + 1/2, z + 1/2

上記 2個 座標를 다음의 **2_1//[010] at z = 1/4**의 symmetry matrix에 代入하여 2個 座標가 얻어지며

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

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

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되며 **C-centered lattice**에 依하여 모두 16個의 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x, −y + 1/2, z + 1/2
(3) −x, y + 1/2, −z + 1/2 (4) x, −y, −z
(5) −x, −y, −z (6) x, y + 1/2, −z + 1/2
(7) x, −y + 1/2, z + 1/2 (8) −x, y, z
(9) x + 1/2, y + 1/2, z (10) −x + 1/2, −y, z + 1/2
(11) −x + 1/2, y, −z + 1/2 (12) x + 1/2, −y + 1/2, −z
(13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z
(14) x + 1/2, y, −z + 1/2 (15) x + 1/2, −y, z + 1/2
(16) −x + 1/2, y + 1/2, z

이들 座標들은 다음의 2가지 方法으로도 얻어진다.

(첫째). ***a*//[001] at z = 1/4**에서 두 個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (14) x + 1/2, y, −z + 1/2

上記 2個 座標를 ***c*//[010] at y = 1/4**에 代入하여 2個 座標가 追加되는데

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

(7) x, −y + 1/2, z + 1/2 (12) x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 4個 座標를 *m*//[100]에 代入하면 4 個 座標가 追加되어 모두 8個로 된다.

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

(8) −x, y, z (11) −x + 1/2, y, −z + 1/2
(2) −x, −y + 1/2, z + 1/2 (13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 8個 座標에 C-center를 加하면 8個의 座標가 追加되어 모두 16個로 된다.

∴ *C m c a*

(둘째). ***b*//[001] at z = 1/4**에서 두 個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (6) x, y + 1/2, −z + 1/2

上記 2個 座標를 ***c*//[010] at y = 1/4**에 代入하여 2個 座標가 追加되고

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

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

上記 4個 座標를 ***m//*[100]**에 代入하면 4 個 座標가 追加되어 모두 8個로 된다.

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

(8) −x, y, z (11) −x, y + 1/2, −z + 1/2
(2) −x, −y + 1/2, z + 1/2 (13) −x, −y, −z

上記 8個 座標에 C-center를 加하면 8個의 座標가 追加되어 모두 16個로 된다.

∴ $C\ m\ c\ a = C\ m\ c\ b$

故로 multiplicity Z = 16이며 $C\ m\ c\ a = C\ m\ c\ b$는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 65, $C\ m\ m\ m = C\ b\ a\ n$
Origin at centre (*m m m*)
Space group No. 47, *P m m m* + C-center에 依하여 다음의 16個 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) −x, y, −z (4) x, −y, −z
(5) −x, −y, −z (6) x, y, −z (7) x, −y, z (8) −x, y, z
(9) x + 1/2, y + 1/2, z (10) −x + 1/2, −y + 1/2, z
(11) −x + 1/2, y + 1/2, −z (12) x + 1/2, −y + 1/2, −z
(13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z (14) x + 1/2, y + 1/2, −z
(15) x + 1/2, −y + 1/2, z (16) −x + 1/2, y + 1/2, z
∴ $C\ m\ m\ m$

이들 座標는 다음 方法으로도 얻어진다.

***n//*[001]**의 symmetry matrix에서 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 (14) x + 1/2, y + 1/2, −z

***a//*[010] at y = 1/4**의 symmetry matrix에서 2個 座標가 얻어지며

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

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

***b//*[100] at x = 1/4**의 symmetry matrix에서 2個 座標가 얻어지며

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

(16) −x + 1/2, y + 1/2, z (3) −x, y, −z
(2) −x, −y, z (13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 8個 座標에 C-center를 加하면 16個 座標가 얻어진다.

∴ $C\ m\ m\ m = C\ b\ a\ n$

따라서 multiplicity Z = 16이며, 座標間에 inversion center가 있어 $C\ m\ m\ m = C\ b\ a\ n$은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 66, $C\ c\ c\ m = C\ n\ n\ n$
Origin at centre (2/*m*) at *c c* 2/*m*
Space group No. 49, *P c c m* + C-center에 依하여 16個의 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x, −y z (3) −x, y, −z + 1/2
(4) x, −y, −z + 1/2 (5) −x, −y, −z (6) x, y, −z
(7) x, −y, z + 1/2 (8) −x, y, z + 1/2
(9) x + 1/2, y + 1/2, z (10) −x + 1/2, −y + 1/2 z
(11) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2
(12) x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2
(13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z (14) x + 1/2, y + 1/2, −z
(15) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2
(16) −x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
∴ $C\ c\ c\ m$

이들 座標들은 다음같이도 얻어진다.

***n//*[001]**의 symmetry matrix에서 2個 座標가 얻

어지고

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

(1) x, y, z (14) x + 1/2, y + 1/2, −z

***n//*[010] at y = 1/4**의 symmetry matrix에서 2個 座標가 얻어지며

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

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

***n//*[100] at x = 1/4**의 symmetry matrix에서 4個 座標가 追加된다.

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

(16) −x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2 (3) −x, y, −z + 1/2
(2) −x, −y, z (13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 8個 座標에 C-center를 加하면 16個 座標가 얻어진다.

∴ *C c c m* = *C n n n*

따라서 Multiplicity Z = 16이며, 座標間에 inversion center가 있어 *C c c m* = *C n n n*은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 67, *C m m a* = *C b a b* (C2/*m* 2/*m* 2/*a*)

Origin at centre (2/*m*) at 2/*m* 2_1/*a a*

Space group diagram[1)]에 있는 **2//[001] at y = 1/4**에서 다음의 2 個 座標가 얻어지고

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

(1) x, y, z (2) −x, −y + 1/2, z

上記 2個 座標를 **2_1//[010]**에 代入하여 다음의 2 個 座標가 얻어지며

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

(3) −x, y + 1/2, −z (4) x, −y, −z

inversion center에 依하여 4個 座標가 追加되고

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

C-centered lattice에 依하여 모두 16個의 座標가 얻어진다.

(9) x + 1/2, y + 1/2, z (10) −x + 1/2, −y, z
(11) −x + 1/2, y, −z (12) x + 1/2, −y + 1/2, −z
(13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z (14) x + 1/2, y, −z
(15) x + 1/2, −y, z (16) −x + 1/2, y + 1/2, z

이들 座標들은 다음같이 2가지 方法으로도 얻어진다.

(첫째). ***a//*[001]**에서 다음의 2 個 座標가 얻어지며

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

(1) x, y, z (6) x + 1/2, y, −z

上記 2個 座標를 ***m//*[010] at y = 1/4**에 代入하여 다음의 2 個 座標가 얻어지고

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

(7) x, −y + 1/2, z (15) x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 4個 座標를 ***m//*[100]**에 代入하여 다음의 4 個 座標가 얻어지며

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

(8) −x, y, z (11) −x + 1/2, y, −z
(2) −x, −y + 1/2, z (10) −x + 1/2, −y, −z

上記 座標에 C-center를 加하므로서 모두 16個의 座標가 얻어진다.

∴ $C\ m\ m\ a$

(둘째). ***b//[001]***에서 다음의 2 個 座標가 얻어지며

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

(1) x, y, z (6) x, y + 1/2, −z

上記 2個 座標를 ***a//[010]***에 代入하여 다음의 2 個 座標가 얻어지고

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

(15) x + 1/2, −y, z (12) x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 4個 座標를 ***b//[100] at x = 1/4***에 代入하여 다음의 4 個 座標가 얻어지며

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

(16) −x + 1/2, y + 1/2, z (11) −x + 1/2, y, −z
(2) −x, −y + 1/2, z (5) −x, −y, −z

上記 座標에 C-center를 加하므로서 모두 16個의 座標가 얻어진다.

∴ $C\ m\ m\ a = C\ b\ a\ b$

故로 multiplicity Z = 16이며 $C\ m\ m\ a = C\ b\ a\ b$는 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 68, $C\ c\ c\ a = C\ n\ n\ b$ ($C2/c\ 2/c\ 2/c$)
Origin Choice 1
Origin at 2 2 2 at $2/n\ 2/n$ 2, at 0, 1/4, 1/4 from $\bar{1}$

座標들은 다음같이 2가지 方法으로 誘導할수 있다:
(첫째). ***a//[001] at z = 1/4***에서 다음같이 2個 座標가 얻어지며

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

(1) x, y, z (6) x + 1/2, y, −z + 1/2

上記 2個 座標를 ***c//[010] at y = 1/4***에 代入하여 다음의 2 個 座標가 追加되고

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

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

上記 4個 座標를 ***c//[100] at x = 1/4***에 代入하여 다음의 4 個 座標가 얻어지며

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

(8) −x + 1/2, y, z + 1/2 (3) −x, y, −z
(2) −x + 1/2, −y + 1/2, z (5) −x −y + 1/2, −z + 1/2

以上 8個 座標에 C-center를 加하면 16個의 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y + 1/2, z (3) −x, y, −z
(4) x + 1/2, −y + 1/2, −z (5) −x, −y + 1/2, −z + 1/2
(6) x + 1/2, y, −z + 1/2 (7) x, −y + 1/2, z + 1/2
(8) −x + 1/2, y, z + 1/2 (9) x + 1/2, y + 1/2, z
(10) −x, −y, z (11) −x + 1/2, y + 1/2, −z
(12) x, −y, −z (13) −x + 1/2, −y, −z + 1/2
(14) x, y + 1/2, −z + 1/2 (15) x + 1/2, −y, z + 1/2
(16) −x, y + 1/2, z + 1/2
∴ $C\ c\ c\ a$

(둘째). ***b//[001] at z = 1/4***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 (6) x, y + 1/2, −z + 1/2

上記 2個 座標를 ***n*//[010]**에 代入하여 다음의 2 個 座標가 追加되고

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

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

上記 4個 座標를 ***n*//[100]**에 代入하여 다음의 4 個 座標가 얻어지며

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

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

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

上記 座標에 C-center를 加하여 모두 16個의 座標가 얻어진다.

∴ *C c c a* = *C n n b*

따라서 multiplicity Z = 16 이며, inversion center가 (1/4, 0, 1/4)와 (0, 1/4, 1/4)에 있어 *C c c a* = *C n n b*은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 68, *C c c a* = *C n n b* (*C*2/*c* 2/*c* 2/*c*)

Origin Choice 2

Origin at $\bar{1}$ at *n c a*, at 0, −1/4, −1/4 from 2 2 2

Space group No. 54 *P c c a* + C-centered lattice에 依하여 16個의 座標가 얻어진다.

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

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

(6) x + 1/2, y, −z (7) x, −y, z + 1/2

(8) −x + 1/2, y, z + 1/2 (9) x + 1/2, y + 1/2, z

(10) −x, −y + 1/2, z (11) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2

(12) x, −y + 1/2, −z + 1/2 (13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

(14) x, y + 1/2, −z (15) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2

(16) −x, y + 1/2, z + 1/2

∴ *C c c a*

이들 座標는 다음같이도 얻어진다.

Space group diagram[1]에서 ***b*//[001]**에서 다음의 2 個 座標가 얻어지며

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

(1) x, y, z (14) x, y + 1/2, −z

上記 2個 座標를 ***n*//[010] at y = 1/4**에 代入하여 다음의 2 個 座標가 얻어지고

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

(15) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2

(4) x + 1/2, −y, −z + 1/2

上記 4個 座標를 ***n*//[100]**에 代入하여 다음의 4 個 座標가 얻어지며

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

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

(2) −x + 1/2, −y, z (13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

上記 座標에 C-centered lattice에 依하여 모두 16 個의 座標가 얻어진다.

∴ *C c c a* = *C n n b*

따라서 multiplicity Z = 16이며, 座標間에 inversion center가 있어 *C c c a* = *C n n b*은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 69, *F m m m* = *F b a n* = *F n c b* = *F c n a*

Origin at centre (*m m m*)

Space group No. 47, *P m m m* + F-center에 依하여 32個의 座標가 얻어진다.

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

(5) −x, −y, −z (6) x, y, −z (7) x, −y, z (8) −x, y, z

(9) x, y + 1/2, z + 1/2 (10) −x, −y + 1/2, z + 1/2
(11) −x, y + 1/2, −z + 1/2 (12) x, −y + 1/2, −z + 1/2
(13) −x, −y + 1/2, −z + 1/2 (14) x, y + 1/2, −z + 1/2
(15) x, −y + 1/2, z + 1/2 (16) −x, y + 1/2, z + 1/2
(17) x + 1/2, y, z + 1/2 (18) −x + 1/2, −y, z + 1/2
(19) −x + 1/2, y, −z + 1/2 (20) x + 1/2, −y, −z + 1/2
(21) −x + 1/2, −y, −z + 1/2 (22) x + 1/2, y, −z + 1/2
(23) x + 1/2, −y, z + 1/2 (24) −x + 1/2, y, z + 1/2
(25) x + 1/2, y + 1/2, z (26) −x + 1/2, −y + 1/2, z
(27) −x + 1/2, y + 1/2, −z (28) x + 1/2, −y + 1/2, −z
(29) −x + 1/2, −y + 1/2, −z (30) x + 1/2, y + 1/2, −z
(31) x + 1/2, −y + 1/2, z (32) −x + 1/2, y + 1/2, z
∴ *F m m m*

이들 座標는 다음의 3가지 方法으로도 얻어진다.

(첫째). ***n//*[001]**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 (30) x + 1/2, y + 1/2, −z

上記 2個 座標를 ***a//*[010] at y = 1/4**에 代入하여 다음의 2 個 座標가 얻어지고

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

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

上記 4個 座標를 ***b//*[100] at x = 1/4**에 代入하여 다음의 4 개 座標가 얻어지며

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

(32) −x + 1/2, y + 1/2, z (3) −x, y, −z
(2) −x, −y, z (29) −x + 1/2, −y + 1/2, −z

Inversion center와 F-centered lattice에 依하여 32個의 座標를 얻는다.

(둘째). ***b//*[001] at z = 1/4**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 (14) x, y + 1/2, −z + 1/2

上記 2個 座標를 ***c//*[010] at y = 1/4**에 代入하여 다음의 2 개 座標가 얻어지고

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

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

上記 4個 座標를 ***n//*[100]**에 代入하여 다음의 4 個 座標가 얻어지며

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

(16) −x, y + 1/2, z + 1/2 (3) −x, y, −z
(2) −x, −y, z (13) −x, −y + 1/2, −z + 1/2

Inversion center와 F-centered lattice에 依하여 32개의 좌표를 얻는다.

(셋째). ***a//*[001] at z = 1/4**에서 다음의 2 個 座標가 얻어지며

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

(1) x, y, z (22) x + 1/2, y, −z + 1/2

上記 2個 座標를 ***n//*[010]**에 代入하여 다음의 2 個 座標가 얻어지며

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

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

上記 4個 座標를 ***c//*[100] ay x = 1/4**에 代入하여

다음의 4 個 座標가 얻어지고

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

(24) −x + 1/2, y, z + 1/2 (3) −x, y, −z
(2) −x, −y, z (21) −x + 1/2, −y, −z + 1/2

Inversion center와 F-centered lattice에 依하여 32個의 座標를 얻는다.

따라서 multiplicity Z = 32 이며, 座標間에 inversion center가 있어 space group *F m m m* = *F b a n* = *F n c b* = *F c n a*은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 70, *F d d d* (*F2/d 2/d 2/d*)
Origin choice 1
Origin at 2 2 2, at −1/8, −1/8, −1/8 from $\bar{1}$
Origin을 지나는 2 2 2사이에는 다음 關係가 있고

$$\underset{2//[100]}{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} \underset{2//[010]}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} = \underset{2//[001]}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

다음 같이 (1/8, 1/8, 1/8)를 지나는 $\bar{1}$과 2//[100], 2//[010], 2//[001]들 사이에서 diamond glide plane들이 誘導된다.

$\bar{1}$ at x = y = z = 1/8 2//[100]

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

d//[100] at x = 1/8

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at x = y = z = 1/8 2//[010]

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

d//[010] at y = 1/8

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at x = y = z = 1/8 2//[001]

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

d//[001] at z = 1/8

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

2//[100] *d*//[100] at x = 1/8

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ -1/4 \\ -1/4 \end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at x = 1/8 & y = z = 3/8

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 3/4 \\ 3/4 \end{pmatrix}$$

2//[010] *d*//[010] at y = 1/8

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1/4 \\ 1/4 \\ -1/4 \end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at y = 1/8 & x = z = 3/8

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ 1/4 \\ 3/4 \end{pmatrix}$$

2//[001] *d*//[001] at z = 1/8

$$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/4\\1/4\\1/4\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}-1/4\\-1/4\\1/4\end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at x = y = 3/8 & z = 1/8

$$=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}3/4\\3/4\\1/4\end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at x = y = 3/8 & z = 1/8 2//[100]

$$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}3/4\\3/4\\1/4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}3/4\\3/4\\1/4\end{pmatrix}$$

d//[100] at x = 3/8

$$=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}3/4\\-1/4\\1/4\end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at x = y = 3/8 & z = 1/8 2//[010]

$$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}3/4\\3/4\\1/4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}3/4\\3/4\\1/4\end{pmatrix}$$

d//[010] at y = 3/8

$$=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}-1/4\\3/4\\1/4\end{pmatrix}$$

$\bar{1}$ at x = 1/8 & y = z = 3/8 2//[001]

$$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/4\\3/4\\3/4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/4\\3/4\\3/4\end{pmatrix}$$

d//[001] at z = 3/8

$$=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/4\\-1/4\\3/4\end{pmatrix}$$

따라서 **2//[001]**인 다음의 symmetry matrix에서 두 個의 座標가 나오고

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

위의 2個 座標를 **2//[010]**의 symmetry matrix에 代入하여 다음의 2個 座標가 追加되며

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

위의 4個 座標들을 ***d*//[001] at z = 1/8**의 다음 symmetry matrix에 代入하면 다음의 4 個의 座標가 追加된다:

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1/4\\1/4\\1/4\end{pmatrix}$$

(5) −x + 1/4, −y + 1/4, −z + 1/4
(6) x + 1/4, y + 1/4, −z + 1/4
(7) x + 1/4, −y + 1/4, z + 1/4
(8) −x + 1/4, y + 1/4, z + 1/4

이들 8個 座標에 F-center를 加하면 모두 32個의 座標가 誘導된다:

따라서 multiplicity Z = 32 이며, inversion center가 (1/4, 1/4, 1/4) 點에 있어 space group *F d d d* (origin choice 1)은 centrosymmetric space group 이다.

Space group No. 70, *F d d d* (*F*2/*d* 2/*d* 2/*d*)
Origin choice 2

Origin at $\bar{1}$ at *d d d*, at 1/8, 1/8, 1/8 from 2 2 2

Origin의 指定으로부터 다음의 symmetry matrix 가 存在함을 알수 있다.

$$\bar{1}: \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$d//[100]: \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$$d//[010]: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 0 \\ 1/4 \end{pmatrix};$$

$$d//[001]: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$2//[100] \text{ at } y = z = 1/8: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix};$$

$$2//[010] \text{ at } x = z = 1/8: \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 0 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$$2//[001] \text{ at } x = y = 1/8: \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

上記 symmetry matrix들로부터 다음의 symmetry 들을 誘導할수 있다:

$$\underset{\bar{1}}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} \underset{d//[100]}{\left[\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}\right]}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ -1/4 \\ -1/4 \end{pmatrix}$$

2//[100] at y = z = 3/8

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 3/4 \\ 3/4 \end{pmatrix}$$

$$\underset{\bar{1}}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} \underset{d//[010]}{\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 0 \\ 1/4 \end{pmatrix}\right]}$$

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1/4 \\ 0 \\ -1/4 \end{pmatrix}$$

2//[010] at x = z = 3/8

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ 0 \\ 3/4 \end{pmatrix}$$

$$\underset{\bar{1}}{\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}} \underset{d//[001]}{\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 0 \end{pmatrix}\right]}$$

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1/4 \\ -1/4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2//[001] at x = y = 3/8

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ 3/4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\underset{2//[001] \text{ at } x = y = 1/8}{\left[\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 0 \end{pmatrix}\right]} \underset{d//[010]}{\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 0 \\ 1/4 \end{pmatrix}\right]}$$

d//[100] at x = 1/4

$$= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

$$\underset{2//[100] \text{ at } y = z = 1/8}{\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}\right]} \underset{d//[001]}{\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 0 \end{pmatrix}\right]}$$

d//[010] at y = 1/4

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/2 \\ -1/4 \end{pmatrix}$$

2//[010] at z = x = 1/8 d//[001]

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1/4 \\ 0 \\ 1/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

d//[001] at z = 1/4

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1/4 \\ 1/4 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

2//[001] at x = y = 3/8의 다음의 symmetry matrix에서 다음의 2個 座標가 나오며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ 3/4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(1) x, y, z (2) −x + 3/4, −y + 3/4, z

2//[010] at x = z = 3/8의 다음의 symmetry matrix에 座標 (1)을 代入하여 다음을 얻으며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3/4 \\ 0 \\ 3/4 \end{pmatrix}$$

(3) −x + 3/4, y, −z + 3/4

2//[100] at y = z = 3/8의 다음의 symmetry matrix에 座標 (2)을 代入하여 다음을 얻는다:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 3/4 \\ 3/4 \end{pmatrix}$$

(4) x, −y + 3/4, −z + 3/4

이들 4個 座標에 inversion center를 操作하면 다음의 4個 座標가 追加 되고

(5) −x, −y, −z (6) x + 1/4, −y + 1/4, −z
(7) x + 1/4, −y, z + 1/4 (8) −x, y + 1/4, z + 1/4

이들 8個 座標에 F-center를 加하면 모두 32個의 座標가 誘導된다. 따라서 multiplicity Z = 32이며 *F d d d*은 centrosymmetric space group 이다.

Space group No. 71, *I m m m* = *I n n n*

Origin at centre (*m m m*)

Space group No. 47 *P m m m* + I-center에 依하여 16個 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) −x, y, −z (4) x, −y, −z
(5) −x, −y, −z (6) x, y, −z (7) x, −y, z (8) −z, y, z
(9) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
(10) −x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2
(11) −x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2
(12) x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2
(13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2
(14) x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2
(15) x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2
(16) −x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
∴ *I m m m*

이들 座標들은 다음같이도 얻어진다

***n*//[001] at z = 1/4**의 다음의 symmetry matrix에서 다음의 2個 座標가 나오고

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

(1) x, y, z (14) x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2

上記 2個 座標를 ***n*//[010] at y = 1/4**의 다음의 symmetry matrix에 代入하여 다음을 얻으며

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

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

上記 4個 座標를 ***n*//[100] at x = 1/4**의 다음의 symmetry matrix에 代入하여 다음을 얻는다:

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

(16) −x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2 (3) −x, y, −z
(2) −x, −y, z (13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2

Inversion center에 依하여 8個의 座標가 追加된다.

$\therefore I\ m\ m\ m = I\ n\ n\ n$

故로 multiplicity Z = 16 이며, 座標간에 inversion center가 있어 $I\ m\ m\ m = I\ n\ n\ n$은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 72, $I\ b\ a\ m = I\ c\ c\ n$

Origin at centre (2/*m*) at *c c* 2/*m*

Space group No. 55, $P\ b\ a\ m$ + I-center 에 依하여 다음의 16個의 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x, −y, z (3) −x + 1/2, y + 1/2, −z
(4) x + 1/2, −y + 1/2, −z (5) −x, −y, −z
(6) x, y, −z (7) x + 1/2, −y + 1/2, z
(8) −x + 1/2, y + 1/2, z (9) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
(10) −x + 1/2, −y + 1/2, z + 1/2 (11) −x, y, −z + 1/2
(12) x, −y, −z + 1/2 (13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2
(14) x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2 (15) x, −y, z + 1/2
(16) −x, y, z + 1/2

$\therefore I\ b\ a\ m$

이들 座標들은 다음같이도 얻어진다

Space group diagram[1]에서 ***n*//[001] at z = 1/4**의 다음의 symmetry matrix에서 다음의 2個 座標가 나오며

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

(1) x, y, z (14) x + 1/2, y + 1/2, −z + 1/2

上記 2個 座標를 ***c*//[010]**의 다음의 symmetry matrix에 代入하여 다음을 얻으며

나오며

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

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

上記 4個 座標를 ***c*//[100]**의 다음의 symmetry matrix에 代入하여 다음을 얻는다:

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

(16) −x, y, z + 1/2 (3) −x + 1/2, y + 1/2, −z
(2) −x, −y, z (13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2

Inversion center에 依하여 8個의 座標가 追加된다.

$\therefore I\ b\ a\ m = I\ c\ c\ n$

따라서 multiplicity Z = 16 이며, origin에 $\bar{1}$이 있어 $I\ b\ a\ m = I\ c\ c\ n$은 centrosymmetric space group 이다.

Space group No. 73, $I\ b\ c\ a = I\ c\ a\ b$

Origin at $\bar{1}$ at *c a b*

Space group No. 61, $P\ b\ c\ a$ + I-center에 依하여 16個 座標가 얻어진다.

(1) x, y, z (2) −x + 1/2, −y, z + 1/2
(3) −x, y + 1/2, −z + 1/2 (4) x + 1/2, −y + 1/2, −z
(5) −x, −y, −z (6) x + 1/2, y, −z + 1/2
(7) x, −y + 1/2, z + 1/2 (8) −x + 1/2, y + 1/2, z
(9) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2 (10) −x, −y + 1/2, z
(11) −x + 1/2, y, −z (12) x, −y, −z + 1/2
(13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2 (14) x, y + 1/2, −z
(15) x + 1/2, −y, z (16) −x, y, z + 1/2

이들 座標들은 다음같이도 얻어진다.

***b*//[001]**의 다음의 symmetry matrix에서 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 (14) x, y + 1/2, −z

上記 2個 座標를 ***a*//[010]**의 다음의 symmetry matrix에 代入하여 다음을 얻으며

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

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

上記 4個 座標를 ***c//*[100]**의 다음의 symmetry matrix에 代入하여 다음을 얻는다:

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

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

Inversion center에 依하여 8個의 座標가 追加된다.

∴ $I\ b\ c\ a = I\ c\ a\ b$

따라서 multiplicity Z = 16이며, origin에 $\bar{1}$이 있어 $I\ b\ c\ a = I\ c\ a\ b$은 centrosymmetric space group이다.

Space group No. 74, $I\ m\ m\ a = I\ n\ n\ b$ ($I2_1/m\ 2_1/m\ 2_1/a$)

Origin at centre (2/*m*) at $2/m\ 2_1/n\ b$

Space group diagram[1]에 있는 ***m//*[100]**의 다음 symmetry matrix에서 다음의 2個 座標가 얻어지며

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$ (1) x, y, z (8) −x, y, z

위의 座標를 ***m//*[010] at *y* = 1/4**의 symmetry matrix에 代入하여 다음의 두 個 座標가 追加된다.

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

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

이들 4個 座標에 inversion center와 I-centered lattice의 symmetry를 適用하면 모두 16個의 座標가 誘導된다.

(1) x, y, z (2) −x, −y + 1/2, z (3) −x, y + 1/2, −z
(4) x, −y, −z (5) −x, −y, −z (6) x, y + 1/2, −z
(7) x, −y + 1/2, z (8) −x, y, z
(9) x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2
(10) −x + 1/2, −y, z + 1/2 (11) −x + 1/2, y, −z + 1/2
(12) x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2
(13) −x + 1/2, −y + 1/2, −z + 1/2
(14) x + 1/2, y, −z + 1/2 (15) x + 1/2, −y, z + 1/2
(16) −x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2

***a//*[001] at *z* = 1/4**에서는 위와 重複되는 座標만이 얻어진다.

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

∴ $I\ m\ m\ a$

이들 座標들은 다음같이도 얻어진다.

***b//*[001]**의 다음의 symmetry matrix에서 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 (6) x, y + 1/2, −z

上記 2個 座標를 ***n//*[010]**의 다음의 symmetry matrix에 代入하여 다음을 얻으며

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

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

上記 4個 座標를 ***n//*[100] at *x* = 1/4**의 다음의 symmetry matrix에 代入하여 다음을 얻는다:

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

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

I-center를 加하면 8個의 座標가 追加된다.

$\therefore\ I\ m\ m\ a = I\ n\ n\ b$

따라서 multiplicity Z = 16이며, origin에 $\bar{1}$이 있어 $I\ m\ m\ a = I\ n\ n\ b$은 centrosymmetric space group이다.

참고문헌

1) Theo Hahn, International Tables for Crystallography, Volume A, Third revised edition published for The International Union of Crystallography by Kluwer Academic Publishers (1992).
2) 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).
3) 徐日煥, 金文執, X-線單結晶構造解析, pp. 92-95, 북스힐 (2001).
4) Suh, I.-H., Park, K. H., Jensen, W. P. & Lewis, D. E. Journal of Chemical Education. 74, 800-805 (1997).
5) 金麟會, 徐承郁, 徐日煥. 거울像 異性質體와 絶對構造, Korean Journal of Crystallography, Vol. 13, No. 1, pp. 1-11 (2002).