Korean J. Crystallography
Vol. 14, No. 2, pp.115~121, 2003

강좌

결정족 - 점군
Crystal Class - Point Group

김 호 성
전남대학교 공과대학 신소재공학부

1. 서 론

대칭이라는 말은 주변에서 쉽게 사용되는 말이지만 대칭이라는 것을 설명하라고 하면 조금은 어색해하거나 자신이 생각한 그림을 떠올리며 그것을 설명하고자 하는 경우를 많이 보게 된다. 결정학에서 대칭을 통해 3차원 공간에서 다양한 구조를 유한한 범주로 분류하고 복잡한 구조와 이와 관련된 정보 등을 비교적 간단히 이해할 수 있어 대단히 중요한 개념이다. 대칭은 다음과 같이 표현할 수 있다.

"대칭이란 변환에 대해 불변을 의미한다."

대칭에 대한 이러한 표현은 조금은 추상적으로 느낄 수도 있지만 대칭의 특성을 잘 표현한 것이다. 예를 들면 하나의 정삼각형이 있다고 하자. 그 정삼각형의 중심을 지나면서 그 삼각형에 수직인 방향을 회전축으로 하여 120°를 회전시켰다고 하자. 분명 그 삼각형에 회전이라는 변환을 시켰는데 정삼각형의 대칭적 형상에 의해 회전 전후는 구별이 되지 않아 변화가 없는 것으로 인식된다. 이렇게 변화를 주었지만 변화가 없는 것 그것이 대칭이다.

변환에 대해 불변일 수 있는 변환은 다양하지만 가장 기본적인 대칭을 표현하면 점대칭, 회전, 그리고 병진이다. 따라서 대칭의 가장 기본적인 요소는 점대칭, 회전, 그리고 병진이다. 이들 대칭요소를 결합함으로써 다양한 대칭을 얻을 수 있다. 병진은 평행이동을 시키는 것인데 병진에 의해 불변이기 위해서는 무한히 많은 반복이 가정되어야 한다. 예를 들어 바둑판의 경우 한 칸을 병진시키면 대부분의 점은 구별할 수 없이 동일하나 병진 방향의 가장자리는 새로운 점과 선이 생기거나 사라져 불변이 성립하지 않는다. 따라서 병진이 성립하기 위해서는 바둑판의 크기가 무한히 커야 한다는 것을 의미한다. 여기서는 병진을 고려하지 않은 대칭을 다룰 것이다. 병진을 고려하지 않은 대칭은 한 점을 중심으로한 주위공간의 대칭을 나타내는 것으로 결정학에서는 결정외형의 대칭을 나타내는 것으로 결정족(crystal class)라고 하고 수학에서는 점군(point group)이라고 한다.

2. 결정학적 대칭요소

결정 (crystal)이라는 말은 희랍에서 수정 (quartz)을 표현하는 말에서 비롯되었다. 물질의 구성에 대해 잘 알려지지 않았을 때 자연산 결정의 면각이 일정하다는 관찰을 통해 결정의 내부에는 무엇인가 주기적인 배열을 하고 있을 것이라는 추측을 하였고 20세기에 들어와 X-선 회절을 통해 결정은 원자가 주기적으로 배열된 상태라는 것을 알게 되었다. 결정과 관련된 모든 것은 주기적인 특성의 제약을 받게 된다. 따라서 결정학적 대칭은 결정의 주기적인 특성에 위배되지 않는 대칭을 의미한다.

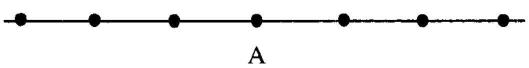
앞에서 언급한 것과 같이 여기서 살펴볼 대칭의 기본적인 요소는 점대칭과 회전이다. 점대칭은 주기적인 공간이든 그렇지 않은 공간이든 가능하지만 회전은 주기적인 공간에 존재할 수 있는 것과 그렇지 않은 것이 있다. 먼저 점대칭부터 살펴보기로 한다.

한 점을 중심으로 점대칭이 있다면 임의의 위치에 대한 상황이 그 점의 반대편에도 상황이 똑같

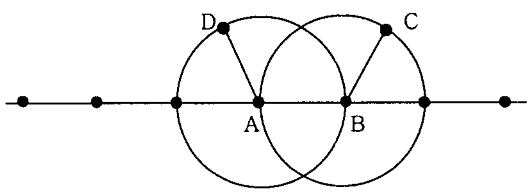
다는 것을 의미한다. 간단한 예로 오른손 왼손을 손바닥을 마주보게 하는데 가운데 손가락끝을 반대편 손의 손목위에 두게 되면 두 손 사이의 가운데에 점대칭이 있게 된다. 즉, 그 점을 중심으로 왼손이 점대칭되면 오른손이 되고 오른손이 점대칭되면 왼손이 된다. 그런데 오른손과 왼손은 겹쳐지지 않는다. 즉, 엄지손가락에서 새끼손가락까지를 일치시키면 왼손의 손등은 왼쪽을 향하고 오른손의 손등은 오른쪽을 향해있어 오른손과 왼손은 겹쳐지지 않는다. 점대칭을 짝수번 시키면 원래 상태가 되어 겹쳐지지만 홀수번 시키면 오른손 왼손과 같이 겹쳐지지 않는 상태가 된다. 이러한 관계를 좌형우형 (enatiomorphism)이라 한다. 원점을 중심으로 한 점대칭에 대한 행렬표현은 다음과 같다.

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

회전은 회전축의 방향과 회전각으로 표현된다. 회전축의 최소 회전각이 2π/n일 때 그 회전축을 n회 회전축(n fold rotation axis)이라고 하는데 여기서 n은 자연수이다. 주기적인 공간인 결정 내에 어떠한 회전축이 존재할 수 있는지에 대해 살펴보기로 한다. 아래 그림과 같이 n회 회전축인 A가 결정내에 있다면 결정의 주기성에 의해 동일한 회전축이 주기적으로 존재한다.



다음 그림에서 회전축 A와 B가 가장 가까운 병진에 의한 n회 회전축이라고 하고 회전축 A에 의해 회전축 B가 회전된 위치에 회전축 D가 있고 회전축 B에 의해 회전축 A가 회전된 위치에 회전축 C가 있다고 하자.



대칭에 의해 회전축 A, B, C, D는 모두 동일한 n회 회전축이므로 ∠ABC = ∠BAD = 2π/n이다. 회전축 사이에 가장 가까운 거리를 $\overline{AB}$ = a라 두면, 회전축의 주기적인 배열에 의해 $\overline{CD}$는 a의 정수배가 되어야 한다. 만일 그렇지 않다면 C, D는 A, B사이의 최소 변진에 대한 대칭에 어긋나게 된다. 따라서, $\overline{CD}$ = a − 2cos 2π/n = ka이다. 여기서 k는 정수이다. 이 조건은 회전축이 주기적인 공간에서 가질 수 있는 회전각에 대한 제약이며 이는 다음과 같이 요약될 수 있다.

$$-1 \le \cos\frac{2\pi}{n} = \frac{1-k}{2} \le 2$$

k	3	2	1	0	−1
cos 2π/n	−1	−1/2	0	1/2	1
n	2	3	4	6	1

이렇게 결정된 회전축은 1, 2, 3, 4, 6회 회전축이다. 원점을 통과하는 회전축이 uvw 방향이고 회전각이 θ인 회전에 대한 행렬은 다음과 같다.[1)]

$$\begin{pmatrix} u^2(1-\cos\theta)+\cos\theta, & vu(1-\cos\theta)+w\sin\theta, & wu(1-\cos\theta)-v\sin\theta \\ uv(1-\cos\theta)-w\sin\theta, & v^2(1-\cos\theta)+\cos\theta, & wv(1-\cos\theta)+u\sin\theta \\ uw(1-\cos\theta)+v\sin\theta, & vw(1-\cos\theta)-u\sin\theta, & w^2(1-\cos\theta)+\cos\theta \end{pmatrix}$$

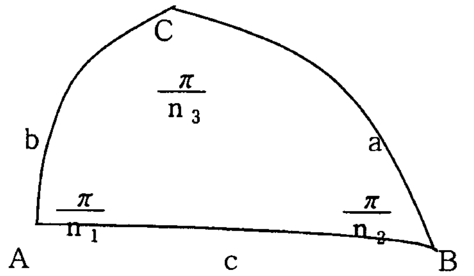
여기서 $u^2 + v^2 + w^2 = 1$이다.

지금까지 살펴본 바로 결정학적 대칭요소는 점대칭과 1, 2, 3, 4, 6회 회전이다. 이들을 서로 결합하여 여러 가지 대칭을 얻을 수 있는데 먼저 회전 사이의 결합을 살펴보고 다음으로 회전과 점대칭의 결합을 통해 얻을 수 있는 회영, 그리고 회전과 회영의 결합에 대해 살펴보기로 한다.

3. 회전의 결합

한 점에 서로 다른 방향의 회전이 결합되어 대

칭을 나타낼 수 있다. 여기서는 어떠한 회전들이 서로 결합이 가능하며 어떠한 각도로 회전들이 결합 할 수 있는지 알아본다. 반지름이 1인 하나의 구를 생각하고 우리가 대칭을 고려할려고 하는 점을 구의 중심에 두자. 하나의 회전축의 연장은 그 구 위에 한 점으로 표시되는데 그 회전축의 방향은 그 점과 기준구의 중심을 잇는 방향이다. 아래 그림의 A, B, C는 가장 가까운 세 회전축이 기준구 위에 나타나는 점을 의미한다.



세점 A, B, C를 곡선으로 연결하였는데 이 곡선을 그 구의 대원의 일부라 하면 위에 표시한 그림은 구면 삼각형을 나타낸다. 아래에 사용된 구면삼각형에 대한 내용은 일반 기하학책에서 쉽게 찾아볼 수 있다. 회전축 A, B, C를 각각 n_1, n_2, n_3 회 회전이라고 하면 구면 삼각형 ABC 의 꼭지각은 각각 π/n_1, π/n_2, π/n_3이다. 구면 삼각형의 내각의 합은 π에서 3π 범위를 가지므로 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\pi < \frac{\pi}{n_1} + \frac{\pi}{n_2} + \frac{\pi}{n_3} \leq 3\pi$$

$n_1 \geq n_2 \geq n_3$라 하여 위의 조건을 만족하는 n_1, n_2, n_3를 다음과 같이 구할 수 있다. 만일, n_3가 1일 경우 C의 꼭지각은 π이며 이 경우 구면삼각형은 두 개의 대원으로 이루어진다. 그러면 A와 구의 중심 그리고 B는 동일 직선위에 있게 되고 $n_1 = n_2$이고 이는 단일 회전축을 의미한다. n_3가 1보다 큰 경우에 대해 정리하면 다음과 같다.

n_1	n_2	n_3	결정학적 표현
2	2	2	222
3	2	2	32
4	2	2	422
6	2	2	622
3	3	2	23
4	3	2	432

이렇게 얻어진 회전축의 결합은 모두 6개이다. 회전은 결합이 가능한 조합이 있을 뿐만 아니라 결합각 또한 특별한 값을 가져야 결합이 가능하다. 결합각은 위 그림에서 구면삼각형의 변의 길이인 호의 길이를 의미한다. 이를 알아 보기 위해서는 구면삼각법을 이용한다. 위 표에서 모든 경우 2-회축이 포함되므로 최소한 한 꼭지각은 직각임을 알 수 있다. 따라서 다음과 같은 구면삼각형의 공식을 사용하면 회전축 사이의 결합각을 알 수 있다.

구면삼각형의 sine 법칙

$$\frac{\sin a}{\sin A} = \frac{\sin b}{\sin B} = \frac{\sin c}{\sin C}$$

직각구면삼각형의 cosine 법칙

$$\cos a = \frac{\cos A}{\sin B}$$

여기서 꼭지각 A, B, C 중 C가 직각이고 a, b, c는 꼭지점 A, B, C와 마주보는 변의 길이이다. 예를 들어 432의 $n_1 = 4$, $\angle A = \pi/4$이고 $n_2 = 3$, $\angle B = \pi/3$이며 $n_3 = 2$, $\angle C = \pi/2$이다. 따라서 다음과 같이 a, b, c를 결정할 수 있다.

$$a = \cos^{-1}\left(\frac{\cos\frac{\pi}{4}}{\sin\frac{\pi}{3}}\right) = \cos^{-1}\left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\right)$$

a = 0.61548 rad. = 35.264 deg.

$$b = \sin^{-1}\left(\sin\frac{\pi}{3} \cdot \frac{\sin 0.61548}{\sin\frac{\pi}{4}}\right)$$

b = π/4 rad. = 45 deg.

$$c = \sin^{-1}\left(\sin\frac{\pi}{2} \cdot \frac{\sin 0.61548}{\sin\frac{\pi}{4}}\right)$$

c = 0.95532 rad. = 54.735 deg.

같은 방법으로 위에서 구한 회전축의 결합들에 대해 결합각을 구하면 다음 표와 같다.

	회전축	결합각	회전축	결합각	회전축	결합각
222	2-2	90°	2-2	90°	2-2	90°
32	2-2	60°	2-3	90°	2-3	90°
422	2-2	45°	2-4	90°	2-4	90°
622	2-2	30°	2-6	90°	2-6	90°
23	2-3	54.735°	2-3	54.735°	3-3	70.529°
432	2-3	35.264°	2-4	45°	3-4	54.735°

여기서, 432의 C는 2회 회전이고 b가 $\pi/4$이므로 A가 C에 의해 회전되면 A와 직교하는 4회 회전이 있고 B에 의해 서로 직교하는 동일한 3개의 4회 회전이 있음을 알 수 있다. 23의 경우 2회 회전축과 3회 회전축의 결합각이 432에서 4회 회전축과 3회 회전축과의 결합각이 54.735°로 같으므로 서로 직교하는 동일한 3개의 2회 회전이 있음을 알 수 있다. 따라서 이들을 입방정계(Cubic System)로 분류한다. 222, 32, 422, 622 등도 사방정계(Orthorhombic System), 삼방정계(Trigonal System), 정방정계(Tetragonal System), 육방정계(Hexagonal System) 등으로 분류한다. 즉, 결정계(Crystal System)의 분류가 회전의 결합과 밀접한 관계가 있다.

결정학적 회전이 아닌 경우에도 동일한 규칙으로 결합이 가능하며 다음과 같은 것이 있다.

n22 : n = 5, 7, 8, 9, ...

532 : 이를 icosahedral symmetry라 하고 235로 표현한다.

이 경우에도 회전축 사이의 결합각은 위와 동일한 방법으로 구할 수 있다.

4. 회전과 점대칭의 결합

회전과 점대칭이 결합되어 하나의 대칭을 나타낼 수 있으며 이를 회영(roto-inversion)이라고 한다. 회전을 나타내는 행렬을 R이라고 하고 점대칭을 나타내는 행렬을 V라고 하면 회영을 나타내는 행렬 S는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$S = VR = RV = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r_{11} & -r_{12} & -r_{13} \\ -r_{21} & -r_{22} & -r_{23} \\ -r_{31} & -r_{32} & -r_{33} \end{pmatrix}$$

R이 n회 회전축일 경우 S를 $\bar{n}$이라고 한다. 따라서 회영은 $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$ 등 6가지가 존재한다. 여기서 $\bar{1}$를 점대칭(inversion) 또는 대칭중심(center of symmetry)이라 하고 $\bar{2}$를 거울(mirror)이라 하고 m으로 표현한다. 원점을 통과하는 회영축이 uvw 방향이고 회전각이 θ인 회영에 대한 행렬표현은 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} u^2(\cos\theta-1)-\cos\theta, & vu(\cos\theta-1)-w\sin\theta, & wu(\cos\theta-1)+v\sin\theta \\ uv(\cos\theta-1)+w\sin\theta, & v^2(\cos\theta-1)-\cos\theta, & wv(\cos\theta-1)-u\sin\theta \\ uw(\cos\theta-1)-v\sin\theta, & vw(\cos\theta-1)+u\sin\theta, & w^2(\cos\theta-1)-\cos\theta \end{pmatrix}$$

여기서 $u^2 + v^2 + w^2 = 1$이다.

5. 회전과 회영의 결합 그리고 결정족

회전의 결합과 마찬가지로 회영의 결합도 가능하다. 이 경우 좌형우형을 고려하면 인근에서 결합되는 3개의 축중에서 회영은 짝수개 이어야 한다. 즉, 3개 중 하나는 회전이어야 하고 두 개가 회영인 형태로만 결합이 가능하다. 이 경우에 결합에 대한 조건은 회전의 결합조건과 동일하며 결합각 또한 동일하다. 이를 나열하면 다음의 표와 같다.

n_1	n_2	n_3	$\bar{n}_1\bar{n}_2n_3$	$\bar{n}_1n_2\bar{n}_3$	$n_1\bar{n}_2\bar{n}_3$
2	2	2	$\bar{2}\bar{2}2$*	$\bar{2}2\bar{2}$*	$2\bar{2}\bar{2}$*
3	2	2	$\bar{3}\bar{2}2$*	$\bar{3}2\bar{2}$*	$3\bar{2}\bar{2}$
4	2	2	$\bar{4}\bar{2}2$*	$\bar{4}2\bar{2}$*	$4\bar{2}\bar{2}$
6	2	2	$\bar{6}\bar{2}2$*	$\bar{6}2\bar{2}$*	$6\bar{2}\bar{2}$
3	3	2	$\bar{3}\bar{3}2$*	$\bar{3}2\bar{2}$*	$3\bar{2}\bar{2}$*
4	3	2	$\bar{4}\bar{3}2$*	$\bar{4}3\bar{2}$	$4\bar{3}\bar{2}$*

표에서 *의 표시가 있는 것들은 동일한 대칭을 나타내는 것이다. 즉, $\bar{2}\bar{2}2$와 $\bar{2}2\bar{2}$와 $2\bar{2}\bar{2}$는 모두 동일한 대칭이다. 따라서 회전축과 회영축의 결합에서 10개의 대칭을 얻을 수 있다. 지금까지 얻은 대칭은 점대칭을 포함하는 것도 있지만 점대칭을 포함하지 않는 경우도 있다. 점대칭을 포함하지 않는 경우에 점대칭을 포함시켜 새로운 대칭을 얻을 수 있다. 이렇게 얻은 모든 대칭을 결정학적 표현으로 정리하면 다음과 같다.

단일 축			축 결합		
회전축	회영축	점대칭 포함	회전축	회전축 - 회영축	점대칭 포함
1	i ($\bar{1}$)	-	222	2mm ($2\bar{2}\bar{2}$, $\bar{2}2\bar{2}$, $\bar{2}\bar{2}2$)	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
2	m ($\bar{2}$)	$\frac{2}{m}$	32 (322)	3m ($3\bar{2}\bar{2}$), $\bar{3}\frac{2}{m}$ ($\bar{3}\bar{2}2$, $\bar{3}2\bar{2}$)	-
			422	4mm ($4\bar{2}\bar{2}$), $\bar{4}2$mm ($\bar{4}\bar{2}2$, $\bar{4}2\bar{2}$)	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
3	$\bar{3}$	-			
			622	6mm ($6\bar{2}\bar{2}$), $\bar{6}2$mm ($\bar{6}\bar{2}2$, $\bar{6}2\bar{2}$)	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
4	$\bar{4}$	$\frac{4}{m}$	23 (332)	$\frac{2}{m}\bar{3}$ ($\bar{3}\bar{3}2$, $\bar{3}3\bar{2}$, $3\bar{3}\bar{2}$)	-
6	$\bar{6}$	$\frac{2}{m}$	432	$\bar{4}3$m ($\bar{4}3\bar{2}$), $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ ($\bar{4}\bar{3}2$, $4\bar{3}\bar{2}$)	-

표가 조금 복잡해 보이는데 괄호안의 것은 지금까지 사용했던 표현이고 괄호밖의 표현은 결정학에서 보편적으로 사용하는 표기이다. 이렇게 얻은 대칭은 모두 32개이며 이들 32의 대칭을 각각 결정족(Crystal Class)이라고 하고 또한 점군(Point Group)이라고 한다. 이들 중 점대칭이 있는 11개의 결정족을 특히 Laue Class라 한다. 병진이 포함되지 않은 이들 대칭은 결정외형 뿐만 아니라 결정의 물성을 이해하는 데에도 매우 중요한 역할을 한다. 이들 대칭을 결정계별로 분류하여 정리하면 다음과 같다.

결정계	점대칭이 없는 결정족	점대칭이 있는 결정족
Triclinic	1	$\bar{1}$
Monoclinic	2, m	$\frac{2}{m}$
Orthorhombic	222, 2mm	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ (=mmm)
Trigonal	3, 32, 3m	$\bar{3}$, $\bar{3}\frac{2}{m}$
Hexagonal	6, $\bar{6}$, 622, 6mm, $\bar{6}2$m	$\frac{6}{m}$, $\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ (=6/mmm)
Tetragonal	4, $\bar{4}$, 422, 4mm, $\bar{4}2$m	$\frac{4}{m}$, $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ (=4/mmm)
Cubic	23, 432, $\bar{4}3$m	$\frac{2}{m}\bar{3}$ (=m3), $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ (=m3m)

표에서 괄호안의 것은 간략하게 표현할 때 사용하는 표기이다.

6. 점 군

결정학을 처음 배웠을 때 32개의 결정족, 즉 점군을 32개를 하나로 묶어 그룹지운 것으로 오해한 적이 있다. 점군의 군(群)은 대수학에서 정의된 군(group)을 의미한다. 따라서 32개의 대칭은 각각이 하나의 점군인 것이다. 대수학에서 군은 19세기에 정립된 것으로 대수학의 꽃이라고 한다. 군이 처음 도입되었을 때 군에 대한 적절한 예로써 대칭이 사용되었으며 군과 대칭은 서로 상보적인 관계에서 발전하게 되었던 것이다.

군은 원소들 사이에 특정한 연산이 정의되어 있는 집합이며 G 가 군이면 다음을 만족한다.

* 항등원이 존재한다.

$\exists e: g_i e = e g_i = g_i, \ \forall g_i \in G$

* 역원이 존재한다.

$\forall g_i \in G \Rightarrow \exists g_i^{-1} \in G: g_i^{-1} g_i = g_i g_i^{-1} = e$

* 결합법칙이 성립한다.

$\forall g_i, g_j, g_k \in G \Rightarrow (g_i g_j) g_k = g_i (g_j g_k)$

* 연산에 닫혀있다.

$\forall g_i, g_j \in G \Rightarrow g_i g_j \in G$

점군에서 원소는 각 변환을 나타내는 행렬이고 원소들 사이의 연산은 행렬곱이다. 예를들어 점군 2에 대해 2회 회전축에 대해 고려해 보자. 회전각은 π이며 회전축의 방향을 (0, 0, 1)로 하면 이에 대한 행렬은 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} 0^2(1-\cos\pi)+\cos\pi, & 0\cdot 0(1-\cos\pi)-1\sin\pi, & 0\cdot 1(1-\cos\pi)+0\sin\pi, \\ 0\cdot 0(1-\cos\pi)+1\sin\pi, & 0^2(1-\cos\pi)+\cos\pi, & 0\cdot 1(1-\cos\pi)-0\sin\pi, \\ 1\cdot 0(1-\cos\pi)-\nu\sin\pi & 1\cdot 0(1-\cos\pi)+0\sin\pi & 1^2(1-\cos\pi)+\cos\pi \end{pmatrix}$$

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

그리고 이 행렬을 제곱하면 다음과 같이 항등행렬이 된다.

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

따라서 점군 2는 두 개의 행렬을 원소로 하는 군이다. 그리고 위에서 언급한 4가지 조건을 모두 만족함을 알 수 있다.

점군 $\bar{2}$에 대해서는 위와 같은 방법으로 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\begin{pmatrix} 0^2(\cos\pi-1)-\cos\pi, & 0\cdot 0(\cos\pi-1)+1\sin\pi, & 0\cdot 1(\cos\pi-1)-0\sin\pi, \\ 0\cdot 0(\cos\pi-1)-1\sin\pi, & 0^2(\cos\pi-1)-\cos\pi, & 0\cdot 1(\cos\pi-1)+0\sin\pi, \\ 1\cdot 0(\cos\pi-1)+\nu\sin\pi & 1\cdot 0(\cos\pi-1)-0\sin\pi & 1^2(\cos\pi-1)-\cos\pi \end{pmatrix}$$

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

마찬가지로 이 행렬을 제곱하면 다음과 같이 항등행렬이 된다.

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

점군 2에 점대칭을 포함시키는 것은 점대칭원소를 넣고 연산에 닫혀있다는 성질을 이용하면 점군 2가 점대칭을 가져 생기는 점군 2/m의 원소를 다음과 같이 얻을 수 있다.

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

따라서 점군 2/m의 원소는 다음과 같이 모두 4개이다.

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

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

이는 점군 $\bar{2}$에 점대칭을 추가하여 얻는 결과와 같다. 같은 방식으로 32개의 점군 각각의 원소를 모두 구할 수 있다.

점군 2의 모든 원소는 점군 2/m에 들어있다. 따

라서 집합의 포함관계로부터 점군 2는 점군 2/m의 하군(subgroup)이고 점군 2/m는 점군 2의 상군(supergroup)이다. 점군 $\bar{2}$의 경우도 모든 원소도 점군 2/m에 들어 있으므로 점군 2/m와의 관계가 같다. 군에서 이러한 관계를 상하군 관계라 하며, 이와 같은 방법으로 32개의 각 점군들 사이에는 포함관계의 유무를 고려할 수 있으며 이에 대한 자료는 참고문헌에 잘 설명되어 있다.[2)]

대칭을 군으로 표현하면 대칭에 대해 좀 더 엄밀히 접근할 수 있으며 3차원 이외의 차원에 대한 대칭에 대해서도 논리적 접근이 가능하고 고차원의 경우 대칭의 개수가 유한한 경우 각 대칭을 나열할 수 있다. 점군에 대한 좀 더 엄밀한 수학적 방법은 참고문헌을 참조할 수 있다.[3)]

참고문헌

1) 김호성, "정20면체 쌍정의 전자회절", 부록B, 서울대학교 박사학위논문 (1989).
2) 정수진, "결정학개론", 반도출판사 (1997).
3) Altmann, S. L. and Herring, Peter, "Point Group Theory", Clarendon PressOxford (1994).