Korean J. Crystallography
Vol. 16, No. 1, pp.11~20, 2005

The Seventeen Plane Groups (Two-dimensional Space Groups)

金珍圭 · 金潤中 · 金榮相[a] · 高在中[a] · 姜相旭[a] · 韓元植[a] · 徐日煥[a]

Nano-物質環境科學部, 韓國基礎科學支援硏究院
[a]高麗大學校 新素材化學科 (瑞倉 campus)

The Seventeen Plane Groups (Two-dimensional Space Groups)

Jin-Gyu Kim, Youn-Joong Kim, Young-Sang Kim[a], Jaejung Ko[a], Sang Ook Kang[a], Won-Sik Han[a] and Il-Hwan Suh[a]

Division of Nano-Material & Environment Science, Korea Basic Science Institute 52 Yeoeun-Dong, Yusung-Gu, Daejeon 305-333, Korea
[a]Department of Material Chemistry, Korea University, 208 Seochang, Chochiwon, Chungnam 339-700, Korea

抄 錄

Two-dimensional lattice에 존재하는 6가지 基本對稱과 5개의 Bravais lattice를 유도하였고 10개의 two-dimensional point groups를 5개의 各 Bravais lattice에 따라 분류하였다. 마지막으로 10개 point groups에 속한 17 two-dimensional space groups를 고찰하였다.

Abstract

Six basic symmetries and five Bravais lattices existing in the two-dimensional lattice are derived and then ten two-dimensional point groups are classified by each of five Bravais lattices. Finally seventeen two-dimensional space groups belonging to the ten point groups are studied.

1. Two-dimensional Point Group

物體에서 임의의 한 축에 대하여 $2\pi/n$ 角度씩 n-回 回轉을 시킬 때마다 처음 物體와 自己一致 (self-coincidence) 또는 合同 (congruence)이 되면 그 軸을 n-回 回轉軸이라 한다.

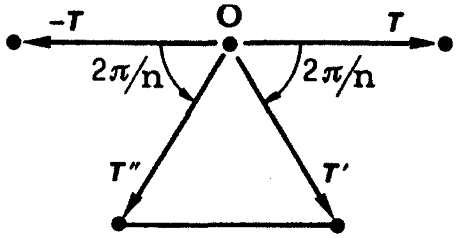


Fig. 1. Lattice points in a plane normal to the n-fold rotation axis passing through O.

Fig. 1에서 보는 바와 같이 two-dimensional lattice point들이 紙面에 垂直하게 n-fold rotation axis에 맞도록 配置되어 있다고 하자.

Lattice point의 조건이 “모든 lattice point는 same environment를 갖는다”는 것이므로 모든 다른 lattice point도 n-fold rotation axis이다.

Vector $\vec{T}$ 를 n-fold rotation axis에 垂直하며 O點을 通하는 한 줄의 period vector라 하자. 그러면 $\vec{T}$, $-\vec{T}$. $\vec{T}'$, $\vec{T}''$에도 lattice point들이 있을 것이며, $\vec{T}'-\vec{T}''$도 $\vec{T}$ 에 平行한 한 lattice vector이어야만 한다. 그러면 m를 integer라 할 때 다음이 成立한다.

$$\vec{T}' - \vec{T}'' = m\vec{T}$$
$$2\,T\cos(2\pi/n) = mT$$

Table 1. Rotation symmetries existing in two-dimensional lattice

m	$\cos 2\pi/n$	$2\pi/n$	n
−2	−1	180	2
−1	−1/2	120	3
0	0	90	4
+1	1/2	60	6
+2	1	360 또는 0	1

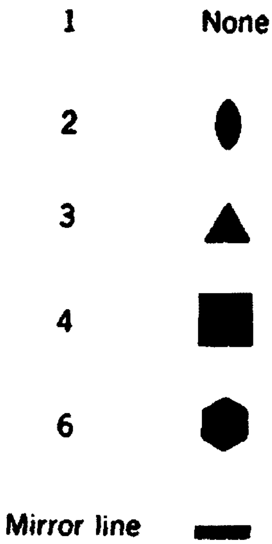


Fig. 2. The graphical symbols for symmetry operations.

또한, $-1 \leq \cos(2\pi/n)=m/2 \leq 1$ 이므로 n의 값은 Table 1과 같이 1, 2, 3, 4, 6로 制限된다.

따라서 two-dimensional lattice에는 1-, 2-, 3-, 4-, 6-fold rotation symmetry가 있으며 이 들에 mirror reflection (m)이 追加된다. 이들의 graphical symbol은 Fig. 2와 같다.

2. Oblique Lattice

한 two-dimensional lattice가 1-, 2-, 3-, 4-, 6-fold rotation 및 mirror symmetries 중 어느 것의 operation下에서 invariant 일 때 그 lattice는 invariant하게하는 symmetry를 갖는다고 한다.

일반적인 oblique lattice인 Fig. 3는 1-, 2-fold rotation symmetry하에서 invariant하다.

Fig. 3에서 보인 oblique lattice에서는 lattice

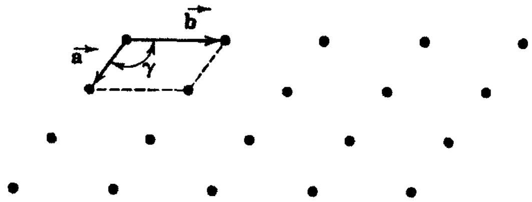


Fig. 3. General oblique lattice in two dimensions, showing a choice of the fundamental translation vector $\vec{a}$, $\vec{b}$ and a unit cell.

translation vectors의 크기 a, b와 그들間의 角 γ에 대한 제한이 없으므로 무한한 수의 lattice가 있을 수 있다. 이러한 일반적인 lattice를 oblique lattice라 한다. 이 oblique lattice는 임의의 lattice point에 대하여 1- 및 2-fold rotation symmetry를 만족하나 3-, 4-, 6-, 및 mirror symmetry는 허용하지 못한다.

3. Three Special Lattices

1-, 2-, 3-, 4-, 6-fold rotation 및 mirror symmetries 中에서 한개 이상의 operation하에서 invariant인 다른 lattice를 만들기 爲하여는 $\vec{a}$ 와 $\vec{b}$ 에 제한조건이 부과 되어야 한다. 이러한 제한조건하에서는 다음 Fig. 4에서 보인 3가지 다른 모양이 생기는데 이들을 special lattice type라 부른다.

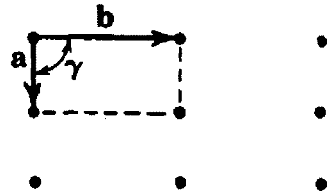
Fig. 4(a)는 $a \neq b$, $\gamma = 90°$인 rectangular lattice로 2-fold rotation 과 m-symmetries를 만족한다. Fig. 4(b)는 $a = b$, $\gamma = 90°$인 square lattice로 4-fold rotation 과 m-symmetries를 만족한다. Fig. 4(c)는 $a = b$, $\gamma = 120°$인 hexagonal lattice로 3-, 6-fold rotation 및 m-symmetries를 만족한다.

지금까지 two dimensional lattice에는 한 個의 oblique lattice와 3個의 special lattices가 存在可能함을 알았다.

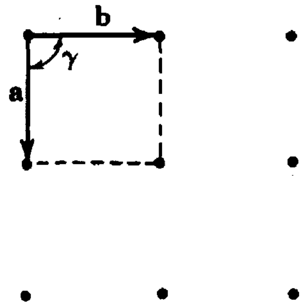
4. Bravais Lattice

(1) Two-dimensional lattice의 邊에는 lattice point를 놓을 수 없다.

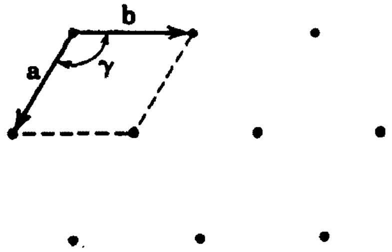
Fig. 5와 같은 two-dimensional lattice에서 邊上에 任意의 點 X_1이 있다면 $AX_1 \neq X_1B$이므로 點 X_1은 lattice point가 될 수 없다.



(a) Rectangular lattice, $a \neq b$, $\gamma = 90°$



(b) Square lattice, $a = b$, $\gamma = 90°$



(c) Hexagonal lattice, $a = b$, $\gamma = 120°$

Fig. 4. Special two-dimensional lattices. These three, together with the oblique lattice (Fig. 3) form the four two-dimensional Bravais lattices.

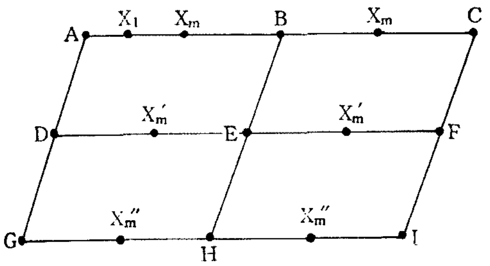


Fig. 5. Two dimensional lattice.

한 邊의 中心點에 lattice point X_m이 있다면 格子의 條件에 의하여 X_m', X_m''도 있어야 하는데 이때는 $AX_m=X_mB$이므로 lattice point의 條件을 滿足

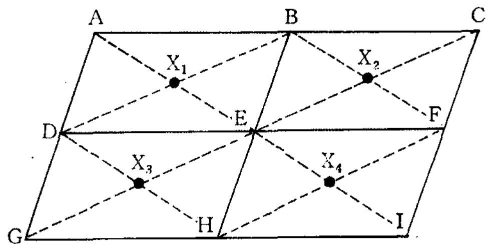


Fig. 6. Face-centered lattice.

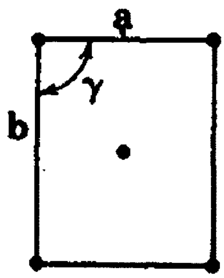


Fig. 7. C-entered rectangular lattice, a ≠ b, γ = 90°.

시키나 unit cell을 ABED 代身에 面積이 1/2로 줄어든 $AX_mX_m'D$로 잡으면 되므로 이것은 새로운 lattice가 될 수 없다.

(2) Two-dimensional lattice의 face center에 lattice point가 있을 수 있다.

Fig. 6와 같이 面上의 任意의 點은 lattice point의 條件을 滿足하지 않으나 對角線의 中心點 X_1, X_2, X_3, X_4는 格子點으로 合當하여 face center에 lattice point가 있는 face-centered unit cell ABED와 primitive cell BX_1EX_2의 두 가지 unit cell로 擇할 수 있다.

Fig. 4(a)의 rectangular lattice는 face center에 lattice point가 있어도 2-fold rotation과 mirror symmetries를 만족하므로 Fig. 7과 같이 rectangular lattice에서는 C-centered lattice가 가능하다.

Fig. 4(b)인 square lattice에서 face center에 lattice point를 놓으면 면적이 반으로 줄어든 새로운 square lattice가 생기므로 square lattice에는 centered lattice가 있을 수 없다. Fig. 4(c)의 hexagonal lattice에서 face center에 lattice point를 놓으면 3-fold 및 6-fold symmetry를 만족하지 못하여 face-center에 lattice point가 있을 수 없다.

Table 2. Lattice symmetry direction for two dimensions

Lattice	Symmetry direction (position in Hermann-Mauguin symbol)		
	Primary	Secondary	Tertiary
Two dimensions Oblique	Rotation point in plane		
Rectangular		[10]	[01]
Square		{[10], [01]}	{[1$\bar{1}$], [11]}
Hexagonal		{[10], [01], [$\bar{1}\bar{1}$]}	{[1$\bar{1}$], [12], [$\bar{2}\bar{1}$]}

따라서 two-dimensional lattice에서 oblique, square 및 hexagonal lattice에는 primitive 뿐이고 rectangular lattice에는 primitive와 C-centered lattice가 있을 수 있어 two-dimensional lattice에는 모두 5개의 Bravais lattice가 존재할 수 있다.

5. Ten two-dimensional Point Groups

Two-dimensions의 lattice symmetry direction은 Table 2와 같다.[1)]

Two-dimensional lattice에서 5개의 Bravais lattices와 Table 2의 symmetry direction을 考慮할 때 rotation 및 reflection operation의 허용되는 組合은 다음의 10개의 point groups를 생기게 하며, 이들 point group symbols는 Fig. 8에 나타내었다.[2)]

Table 3에는 five two-dimensional lattice types에 속한 point groups를 分類하여 나타내었다.

1, 2, 1 m, 2 mm, 4, 4 mm, 3, 3 m, 6, 6 mm.

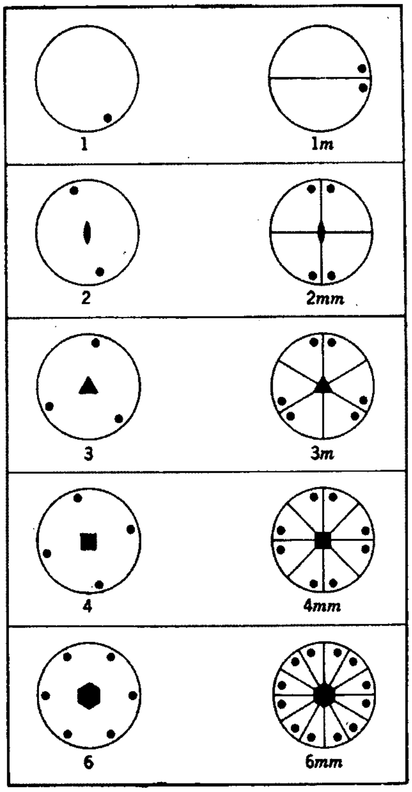


Fig. 8. The ten two-dimensional crystallographic point groups. Equivalent points are shown.

6. The 17 Plane Groups (Two-dimensional Space Groups)

지금까지 論한 two-dimensional lattice의 symmetry를 다음과 같이 요약할 수 있다.

(a) Two dimensional lattice에 있을 수 있는 5個의 rotation symmetries에 mirror symmetry를 합한

Table 3. The five two-dimensional lattice types and point groups

Lattice	cell parameters	acentric point group	centric point group	No. of point groups
oblique	$a \neq b,\ \gamma \neq 90°$	1	2	2
primitive rectangular	$a \neq b,\ \gamma = 90°$	m	2 mm	2
centered rectangular	$a \neq b,\ \gamma = 90°$	m	2 mm	
square	$a = b,\ \gamma = 90°$		4, 4 mm	2
hexagonal	$a = b,\ \gamma = 120°$	3, 3 m	6, 6 mm	4
No. of point groups		4	6	10

6개를 basic symmetry라 할 수 있다.

(b) Translational element들을 導入하면 한편으로는 5個 可能한 Bravais lattice들이 생기고 다른 한편으로는 한 개의 새로운 對稱要素인 glide line이 생긴다. 이 擴張된 集合의 各 對稱要素는 2×2 matrix와 2次元的인 column vector로써 나타낼 수 있다.

(c) Two-dimensional lattice의 週期性에서 結果되는 制限때문에 basic symmetry들의 10가지 組合만이 可能하며 이들은 10個 two-dimensional point groups이라 부른다.

(d) 상기 10個의 two-dimensional point groups와 5개의 Bravais lattices, 그리고 한개의 glide line을 조합하면 17개의 two-dimensional space groups가 유도된다. 따라서 各 point group은 一定數의 space group들로 擴張되며 또는 各 space group은 한 point group에 屬한다고 말할 수 있다. 故로 point group의 centric 및 noncentric 성질이 그대로 space group에 傳受되며, reflection condition은 translation symmetry를 包含한 space group에서만 나타난다.

모든 two-dimensional space groups의 symmetry elements와 general position에 관한 diagram은 International Tables for Crystallography에 자세히 기록되어 있다.[1)]

(1) Noncentric point group 1에서 유도되는 space group

(1.1) $P1(1)$ Oblique

Origin arbitrary

Coordinates: (1) x, y

$$F(hk) = \sum_{j=1}^{N} f_j \exp 2\pi i(hx_j + ky_j)$$
$$= \sum_{j=1}^{N} f_j \{\cos 2\pi(hx_j + ky_j) + i\sin 2\pi(hx_j + ky_j)\}$$
$$I(xy) = \left\{\sum_{j=1}^{N} f_j \cos 2\pi(hx + ky)\right\}^2 + \left\{\sum_{j=1}^{N} f_j \sin 2\pi(hx + ky)\right\}^2 = I(\bar{x}\ \ \bar{y})$$

$\therefore |F(hk)| = |F(\overline{hk})| \neq |F(\bar{h}k)|$가 성립하여 Patterson symmetry는 $P2$이다.

(2) Centric point group 2에서 유도되는 space group

(2.1) $P2(2)$ oblique

Origin at 2

Coordinates: (1) x, y (2) $\bar{x}$, $\bar{y}$

$$F(hk) = 2\sum_{j=1}^{N/2} f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j)$$
$$I(xy) = \left\{\sum_{j=1}^{N} f_j \cos 2\pi(hx + ky)\right\}^2 = I(\bar{x}\ \ \bar{y})$$

$|F(hk)| = |F(\overline{hk})| \neq |F(\bar{h}k)|$이 성립하여 Patterson symmetry는 $P2$이다.

(3) Acentric point group *m*에서 유도되는 space group

(3.1) $Pm(3)$ $P1m1$ Rectangular

Origin on m

$m//[10]$에 의하여 2개 좌표가 얻어진다.

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ y \end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $\bar{x}, y$

$$F(hk) = \sum_{j=1}^{N} f_j \{\exp 2\pi i(hx_j + ky_j) + \exp 2\pi i(-hx_j + ky_j)\}$$
$$= \sum_{j=1}^{N} f_j \exp 2\pi i k y_j \{\exp 2\pi h x_j + \exp 2\pi i(-hx_j)\}$$
$$= \sum_{j=1}^{N} f_j 2\cos 2\pi h x_j \exp 2\pi i k y_j$$
$$= \sum_{j=1}^{N} f_j 2\cos 2\pi h x_j (\cos 2\pi k y_i + i\sin 2\pi k y_j)$$
$$I(hk) = \sum_{j=1}^{N} f_j^2 4\cos^2 2\pi h x_j (\cos 2\pi k y_j + i\sin 2\pi k y_j)(\cos 2\pi k y_j - i\sin 2\pi k y_j)$$
$$= \sum_{j=1}^{N} f_j^2 4\cos^2 2\pi h x_j (\cos^2 2\pi k y_j + \sin^2 2\pi k y_j)$$

$I(hk) = I(\bar{h}\ \ \bar{k}) = I(\bar{h}\ \ k) = I(h\ \bar{k})$가 성립하는데 Patterson function은

$P(xy) = \frac{1}{A}\sum_{hk=-\infty}^{\infty}|F(hk)|^2 cos2\pi(hx+ky)$ 이므로 Patterson symmetry는 $P2mm$이다.

(3.2) Pg(4) $P1g1$ Rectangular

Origin on g

m를 glide line으로 바꾼 g//[10]에서 다음의 2개 좌표가 얻어진다.

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\ 1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\ y+1/2\end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $\bar{x}, y + 1/2$

$$F(hk) = \sum_{j=1}^{N} f_j\{\exp 2\pi i(hx_j + ky_j) + \exp 2\pi i(-hx_j + ky_j)\exp k\pi i\}$$
$$= \sum_{j=1}^{N} f_j 2\cos 2\pi hx_j \exp 2\pi iky_j \cos k\pi$$
$$I(hk) = \sum_{j=1}^{N} f_j^2 4\cos^2 2\pi hx_j(\cos^2 2\pi ky_j + \sin^2 2\pi ky_j)\cos^2 k\pi$$

$I(hk) = I(\bar{h}\ \bar{k}) = I(\bar{h}\ k) = I(h\ \bar{k})$가 성립하므로 Patterson symmetry는 $P2mm$이다. Reflection condition은 다음과 같다.

$$F(0k) = \sum_{j=1}^{N} f_j \exp 2\pi iky_j(1+\exp k\pi i) \neq 0 \quad \text{only}$$

when $k = 2n$.

(3.3) Cm(5) $C1m1$ Rectangular

Origin on m

General positions은 Pm + (1/2, 1/2)에서 얻어진다.

Coordinates: (1) x, y (2) $-x, y$ (3) $x + 1/2, y + 1/2$ (4) $-x + 1/2, y + 1/2$

$$F(hk)=\sum_{j=1}^{N} f_j[\exp 2\pi i(hx_j+ky_j)\{1+\exp\pi i(h+k)\} + \exp 2\pi i(-hx_j+ky_j)\{1+\exp\pi i(h+k)\}]$$
$$= \sum_{j=1}^{N} f_j[\{\exp 2\pi i(hx_j+ky_j) + \exp 2\pi i(-hx_j+ky_j)\}\{1+\exp\pi i(h+k)\}]$$
$$\neq 0 \text{ only when } h+k=2n.$$

(4) Centric point group 2*mm*에서 유도되는 space group

(4.1) $P2mm$(6) Rectangular

Origin at $2mm$

2//rotation point in plane에서 다음의 2개 좌표가 얻어지며

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}$$

m//[10]에서 다음의 두개 좌표가 추가된다.

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\ y\end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\\ -y\end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $-x, -y$ (3) $-x, y$ (4) $x, -y$

Patterson symmetry: $P2mm$

(4.2) $P2mg$(7) Rectangular

Origin at $21g$

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

2//rotation point in plane에서 다음의 두개좌표가 얻어지며

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}$$

m//[10]에서 m이 원점을 지난다면 다음이 얻어지는데

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\ y\end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\\ -y\end{bmatrix} \tag{4.1}$$

origin을 지나는 g//[01]에서 다음의 좌표가 나오므로

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x+1/2\\ -y\end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x+1/2\\ y\end{bmatrix} \tag{4.2}$$

Eq. (4.1)의 좌표들이 Eq. (4.2)의 것과 동일하게

되기 위하여는 mirror plane이 x = 1/4에 있어야 한다. 卽 m//[10] at x = 1/4에서 다음의 두개 좌표가 얻어진다.

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x+1/2\\ y\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x+1/2\\ -y\end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $-x, y$ (3) $-x + 1/2, y$ (4) $x + 1/2, -y$

$$F(hk) = 2\sum_{j=1}^{N/2} f_j\{\cos 2\pi(hx_j + ky_j) + \cos 2\pi i(hx + h/2 - ky)\}$$

Reflection은 $F(h0) = 2\sum_{j=1}^{N/2} f_j \cos 2\pi hx_j(1 + \cos h\pi i) \neq 0$ only when $h = 2n$이다.

※ $P2mg$의 a-軸과 b-軸을 바꾸면 $P2gm$으로 된다.

(4.3) $P2gg$(8) Rectangular

Origin at 2

원점을 지나는 2//rotation point in plane에서 다음의 두 좌표가 얻어지며

$$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}$$

g//[10]가 원점을 지난다면 다음이 얻어지고

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\ 1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\\ -y+1/2\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\ 1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\ y+1/2\end{bmatrix} \tag{4.3}$$

g//[01]가 원점을 지난다면 다음이 얻어지는데

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x+1/2\\ -y\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x+1/2\\ y\end{bmatrix} \tag{4.4}$$

Eq. (4.3)과 Eq. (4.4)가 일치하기 위하여는 g//[10]의 glide line은 x = 1/4에 그리고 g//[01]의 glide line은 y = 1/4에 놓여 있어야 한다. 즉

g//[10] at x = 1/4

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x+1/2\\ -y+1/2\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x+1/2\\ y+1/2\end{bmatrix}$$

g//[01] at y = 1/4

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x+1/2\\ -y+1/2\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\ 1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x+1/2\\ y+1/2\end{bmatrix}$$

따라서 4개의 coordinates는 다음이다.

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

$$F(hk) = 2\sum_{j=1}^{N/2} f_j\{\cos 2\pi(hx_j + ky_j) + \cos 2\pi i(hx_j + h/2 - ky_j + k/2)\}$$

Reflection conditions:

$$F(h0) = 2\sum_{j=1}^{N/2} f_j\{\cos 2\pi hx_j(1 + \cos h\pi i)\} \neq 0$$

only when $h = 2n$.

$$F(0k) = 2\sum_{j=1}^{N/2} f_j \cos 2\pi ky_j(1 + \cos k\pi i) \neq 0$$

only when $k = 2n$.

(4.4) $C2mm$(9) Rectangular

Origin at $2mm$

Coordinates는 $P2mm$ + (1/2, 1/2)에서 얻어지며 C-centered lattice 임으로 reflection conditions는 hk: $h + k = 2n$이다.

Coordinates: (1) x, y (2) $-x, -y$ (3) $-x, y$ (4) $x, -y$

Reflection conditions: hk: $h + k = 2n$

Patterson symmetry: $C2mm$

(5) Centric point group 4에서 유도되는 space group

(5.1) $P4$(10) Square

Origin at 4

Coordinates는 4//rotation point in plane의 matrix

으로부터 다음이 나온다.

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-y\\x\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x\\-y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}y\\-x\end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $-x, -y$ (3) $-y, x$ (4) $y, -x$

Structure factor는

$$F(hk) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} 2f_j\{\cos 2\pi(hx_j + ky_j) + \cos 2\pi(hy_j - kx_j)\}$$
$$= F(\bar{h}\ \bar{k}) = F(\bar{k}\ h) = F(k\ \bar{h})$$

고로 Patterson symmetry는 $P4$이다.

(6) Centric point group 4*mm*에서 유도되는 space group

(6.1) $P4mm(11)$ Square

Origin at $4mm$

Coordinates는 4//rotation point in plane으로부터 다음같이 4개가 나오며

$$\begin{array}{ccccc} & (1) & (3) & (2) & (4)\\ \begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}= & \begin{bmatrix}-y\\x\end{bmatrix}= & \begin{bmatrix}-x\\-y\end{bmatrix}= & \begin{bmatrix}y\\-x\end{bmatrix}\end{array}$$

m//[10]: $\begin{bmatrix}-1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$에서 다음의 4개의 coordinates가 추가되고

(5) $-x, y$ (7) y, x (6) $x, -y$ (8) $-y, -x$

m//[11]: $\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}$에서는 coordinates가 중복될 뿐이다.

Coordinates: (1) x, y (2) $-x, -y$ (3) $-y, x$ (4) $y, -x$
(5) $-x, y$ (6) $x, -y$ (7) y, x (8) $-y, -x$

(6.2) $P4gm(12)$ Point group: $4mm$ Square

Origin at $41g$

Coordinates는 4//rotation point in plane으로부터 다음같이 4개가 나오며

$$\begin{array}{ccccc} & (1) & (3) & (2) & (4)\\ \begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}= & \begin{bmatrix}-y\\x\end{bmatrix}= & \begin{bmatrix}-x\\-y\end{bmatrix}= & \begin{bmatrix}y\\-x\end{bmatrix}\end{array}$$

g//[10] at x = 1/4에서 다음의 4개 좌표가 추가된다.

$$\begin{array}{cccc} & (1) & & (6)\\ \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}= & & \begin{bmatrix}x+1/2\\-y+1/2\end{bmatrix}\\ & (2) & & (5)\\ \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}-x\\-y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}= & & \begin{bmatrix}-x+1/2\\y+1/2\end{bmatrix}\\ & (3) & & (8)\\ \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}-y\\x\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}= & & \begin{bmatrix}-y+1/2\\-x+1/2\end{bmatrix}\\ & (4) & & (7)\\ \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}y\\-x\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}= & & \begin{bmatrix}y+1/2\\x+1/2\end{bmatrix}\end{array}$$

Space-group diagram[1]에 나타난 m//[11] at x = 1/2 and y = 1/2에서 다음같이 중복된 좌표가 얻어지며

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\-1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-y+1/2\\-x+1/2\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\-1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-x\\-y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}y+1/2\\x+1/2\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\-1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-y\\x\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-x+1/2\\y+1/2\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\-1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y\\-x\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x+1/2\\-y+1/2\end{bmatrix}$$

또한 space-group diagram[1]에 나타난 g//[11]에서도 다음같이 중복된 좌표가 얻어진다.

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}1/2\\1/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}y+1/2\\x+1/2\end{bmatrix}$$

따라서 다음의 8개의 coordinates가 나온다:

(1) x, y (2) $-x, -y$ (3) $-y, x$ (4) $y, -x$
(5) $-x + 1/2, y + 1/2$ (6) $x + 1/2, -y + 1/2$
(7) $y + 1/2, x + 1/2$ (8) $-y + 1/2, -x + 1/2$

(7) Acentric point group 3에서 유도되는 space group

(7.1) $P3(13)$ Hexagonal

Origin at 3

Coordinates는 3//rotation point in plane으로부터 다음같이 3개가 나오며

$$\begin{array}{cccc} (1) & (2) & (3) & (1) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y \\ x-y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x+y \\ -x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $-y, x-y$ (3) $-x+y, -x$

Coordinate transformation matrix의 transpose의 inverse matrix가 Miller index의 transformation matrix 이다.[3)]

Coordinate transformation matrix가 $A = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ 이므로 $A^T = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}$이고 A^T의 cofactor $= \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$이며 $[A^T]^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$이다. 이 matrix로부터 다음의 equivalent reflection을 얻는다:

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} h \\ k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -h-k \\ h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k \\ -h-k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h \\ k \end{bmatrix}$$

Patterson function인 $P(xy) = \frac{1}{A}\sum_{hk=-\infty}^{\infty} |F(hk)|^2 \cos 2\pi (hx+ky)$에는 even function인 cosine이 있으므로 다음의 6개 reflections에 대하여 같은 $P(xy)$값을 얻는다.

$$\begin{bmatrix} h \\ k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -h-k \\ h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k \\ -h-k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -h \\ -k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h+k \\ -h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k \\ h+k \end{bmatrix}$$

따라서 Patterson symmetry는 $P6$이다. 이것은 (9.1) $P6$(16)의 것과 同一하다.

(8) Acentric point group $3m$에서 유도되는 space group

(8.1) $P3m1$(14) Hexagonal

Origin at $3m1$

Coordinates는 3//rotation point in plane으로부터 다음같이 3개가 나오며

$$\begin{array}{cccc} (1) & (2) & (3) & (1) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y \\ x-y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x+y \\ -x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

m//[10]로부터 다음의 3개가 추가 된다.

$$\begin{array}{cc} (1) & (5) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x+y \\ y \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{cc} (2) & (6) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -y \\ x-y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ x-y \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{cc} (3) & (4) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -x+y \\ -x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y \\ -x \end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $-y, x-y$ (3) $-x+y, -x$
(4) $-y, -x$ (5) $-x+y, y$ (6) $x, x-y$

(8.2) $P31m$(15) Hexagonal

Coordinates는 3//rotation point in plane으로부터 다음같이 3개가 나오며

$$\begin{array}{cccc} (1) & (2) & (3) & (1) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -y \\ x-y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x+y \\ -x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

m//[12]로부터 다음의 3개가 추가 된다.

$$\begin{array}{cc} (1) & (5) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x-y \\ -y \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{cc} (2) & (6) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -y \\ x-y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -x+y \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{cc} (3) & (4) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -x+y \\ -x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $-y, x-y$ (3) $-x+y, -x$
(4) y, x (5) $x-y, -y$ (6) $-x, -x+y$

(9) Centric point group 6에서 유도되는 space group

(9.1) $P6$(16) Hexagonal

Origin at 6

Coordinates는 6//rotation point in plane으로부터 다음같이 6개가 유도된다.

$$\begin{array}{cc} (1) & (6) \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x-y \\ x \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{cc} (2) & (4) \end{array}$$
$$= \begin{bmatrix} -y \\ x-y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{cc} (3) & (5) \end{array}$$
$$= \begin{bmatrix} -x+y \\ -x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ -x+y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $-y, x-y$ (3) $-x+y, -x$
(4) $-x, -y$ (5) $y, -x+y$ (6) $x-y, x$

Coordinate transformation matrix로부터 equivalent reflection을 구하자.

Coordinate transformation matrix가 $A = \begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$ 이므로 $A^T = \begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & 0\end{bmatrix}$이고 A^T의 cofactor $= \begin{bmatrix}0 & 1\\ -1 & 1\end{bmatrix}$ 이며 $[A^T]^{-1} = \begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$이다. 이 matrix로부터 다음의 equivalent reflection을 얻는다:

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}h\\ k\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-k\\ h+k\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-h-k\\ h\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}-h\\ -k\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}k\\ -h-k\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}h+k\\ -h\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}h\\ k\end{bmatrix}$$

따라서 Patterson symmetry는 $P6$이다.

(10) Centric point group 6*mm*에서 유도되는 space group

(10.1) *P*6*mm*(17) Hexagonal

Origin at 6*mm*

Coordinates는 6//rotation point in plane으로부터 다음같이 6개가 나오며

$$\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\overset{(1)}{\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}}=\overset{(6)}{\begin{bmatrix}x-y\\ x\end{bmatrix}}$$
$$=\overset{(2)}{\begin{bmatrix}-y\\ x-y\end{bmatrix}}=\overset{(4)}{\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}}$$
$$=\overset{(3)}{\begin{bmatrix}-x+y\\ -x\end{bmatrix}}=\overset{(5)}{\begin{bmatrix}y\\ -x+y\end{bmatrix}}=\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}$$

m//[10]로부터 다음의 6개가 추가 된다.

$$\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}\overset{(1)}{\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}}=\overset{(8)}{\begin{bmatrix}-x+y\\ y\end{bmatrix}}$$
$$\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}\overset{(2)}{\begin{bmatrix}-y\\ x-y\end{bmatrix}}=\overset{(9)}{\begin{bmatrix}x\\ x-y\end{bmatrix}}$$
$$\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}\overset{(3)}{\begin{bmatrix}-x+y\\ -x\end{bmatrix}}=\overset{(7)}{\begin{bmatrix}-y\\ -x\end{bmatrix}}$$
$$\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}\overset{(4)}{\begin{bmatrix}-x\\ -y\end{bmatrix}}=\overset{(11)}{\begin{bmatrix}x-y\\ -y\end{bmatrix}}$$
$$\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}\overset{(5)}{\begin{bmatrix}y\\ -x+y\end{bmatrix}}=\overset{(12)}{\begin{bmatrix}-x\\ -x+y\end{bmatrix}}$$
$$\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}\overset{(6)}{\begin{bmatrix}x-y\\ x\end{bmatrix}}=\overset{(10)}{\begin{bmatrix}y\\ x\end{bmatrix}}$$

m//[12]로부터는 다음과 같이 중복된 좌표가 나올 뿐이다.

$$\begin{bmatrix}1 & -1\\ 0 & -1\end{bmatrix}\overset{(1)}{\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}}=\overset{(11)}{\begin{bmatrix}x-y\\ -y\end{bmatrix}}$$
$$\begin{bmatrix}1 & -1\\ 0 & -1\end{bmatrix}\overset{(2)}{\begin{bmatrix}-y\\ x-y\end{bmatrix}}=\overset{(12)}{\begin{bmatrix}-x\\ -x+y\end{bmatrix}}$$
$$\begin{bmatrix}1 & -1\\ 0 & -1\end{bmatrix}\overset{(3)}{\begin{bmatrix}-x+y\\ -x\end{bmatrix}}=\overset{(10)}{\begin{bmatrix}y\\ x\end{bmatrix}}$$

Coordinates: (1) x, y (2) $-y, x-y$ (3) $-x+y, -x$
(4) $-x, -y$ (5) $y, -x+y$ (6) $x-y, x$
(7) $-y, -x$ (8) $-x+y, y$ (9) $x, x-y$
(10) y, x (11) $x-y, -y$ (12) $-x, -x+y$

References

1) International Tables for Crystallography, Vol. A. Edited by Theo Hahn, Fourth, revised edition, Kluwer Academic Publishers, p. 15 (1995).
2) Charles Kittel, Introduction to Solid state Physics. Second Edition, John Wiley & Sons, Inc. p. 7 (1956).
3) Suh, I.-H., Oh, I.-K., Yoon, Y. K. and Kim, M.-J., *J. of the Korean Physical Society*, **19**(4), 280-285 (1986).