

---

## 2 次元空間群

東北大学 金属材料研究所 花田 貴

2020 年 12 月 17 日



# Contents:

第 1 章	2 次元空間群	1
1.1	2 次元空間群 . . . . .	1



# 第 1 章

## 2 次元空間群

### 1.1 2 次元空間群

単位格子 右向き水平が  $a$  軸、上向き斜めまたは垂直が  $b$  軸。

太線は鏡映面、破線は glide 面 (ある原子のこの面についての鏡映操作に続いて、この面と表面に平行に  $1/2$  格子分移動した位置に同等の原子がある)。

楕円は 2 回対称軸、三角は 3 回対称軸、四角は 4 回対称軸、六角は 6 回対称軸。

鏡映面上にある原子は鏡映面に沿ってしか変位できない。

回転対称軸上にある原子は表面垂直方向しか変位できない。

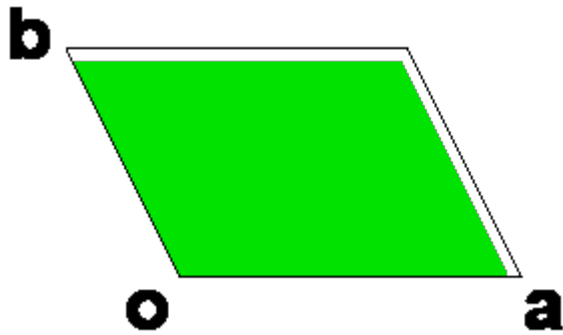
鏡映面上と回転対称軸上にある原子は、対称操作で単位胞内に拡張される同等な原子数  $n$  (以下個別に  $n$  倍で示す) が少なくなる。

以下に、入力ファイルに書く nsg の番号と空間群を示す。単位格子の中で、例えば、赤で示した鏡映面および回転対称軸上と緑の領域にある原子だけ座標を入力すれば良い。(別の同等な領域でも良い)

Si(001)1x1 のように  $a = b$  であっても 4 回対称  $p4xx$  ではなく、2 回対称  $p2xx$  のことがあるので注意。

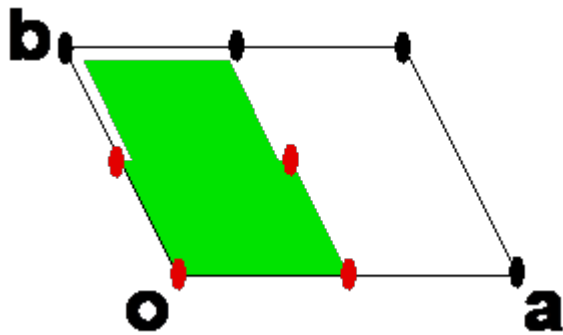
$a = b$  は必要条件であり、十分条件ではない。

$nsg = 1, p1 \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) \neq 90^\circ$



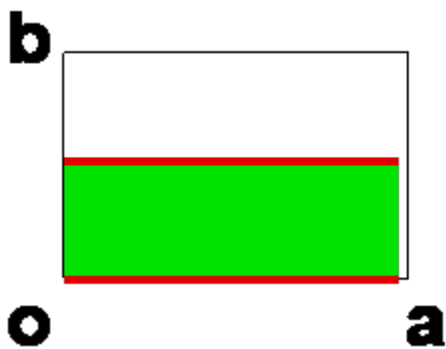
すべて 1 倍

$nsg = 2, p211 \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) \neq 90^\circ$



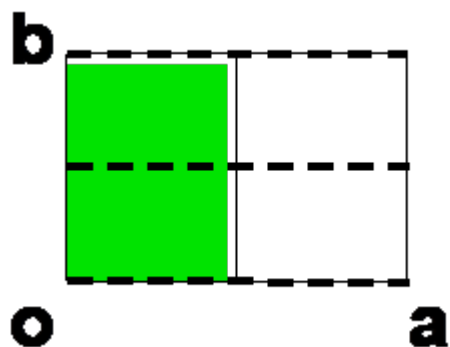
2 回中心は 1 倍、他は 2 倍

$nsg = 3, p1m1 \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



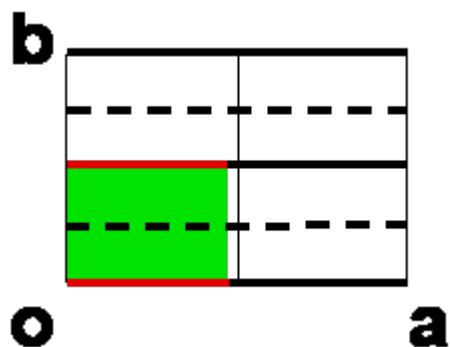
鏡映面は 1 倍、他は 2 倍

$nsg = 4, p1g1 \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



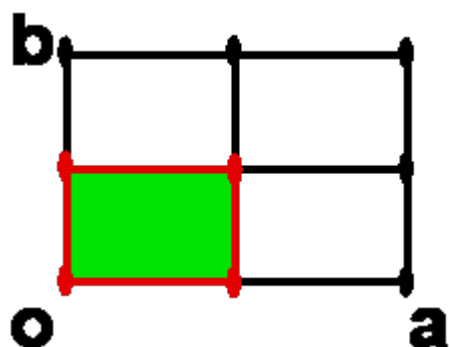
すべて 2 倍

$nsg = 5, c1m1 \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



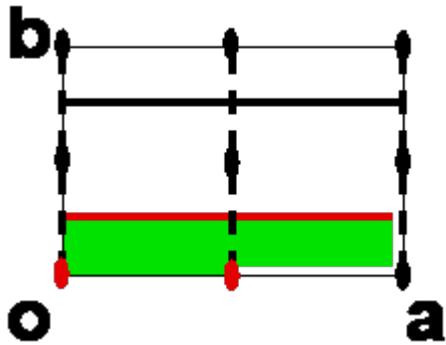
鏡映面 2 倍、他は 4 倍

$nsg = 6, p2mm \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



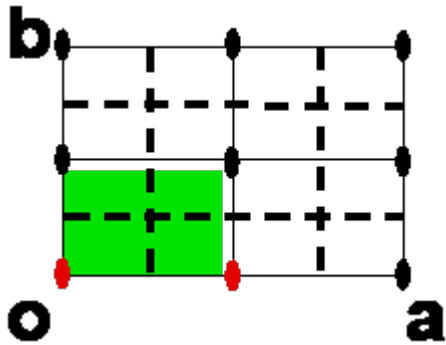
2 回中心は 1 倍、鏡映面は 2 倍、他は 4 倍

$nsg = 7, p2mg \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



2 回中心は 2 倍、鏡映面は 2 倍、他は 4 倍

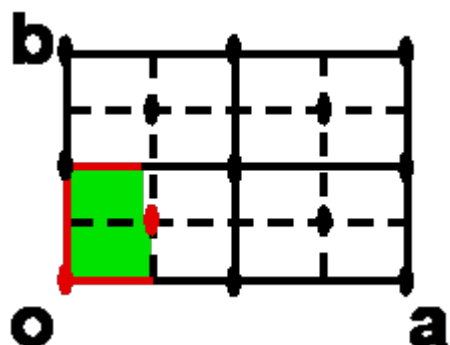
$nsg = 8, p2gg \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



2 回中心は 2 倍、他は 4 倍

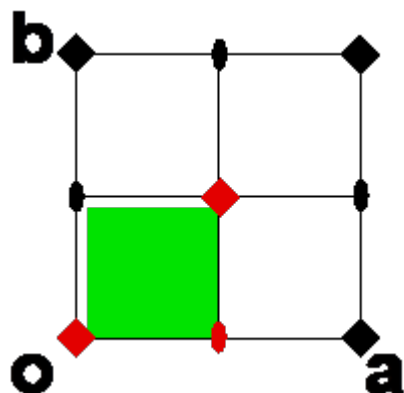


$nsg = 9, c2mm \quad a \neq b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



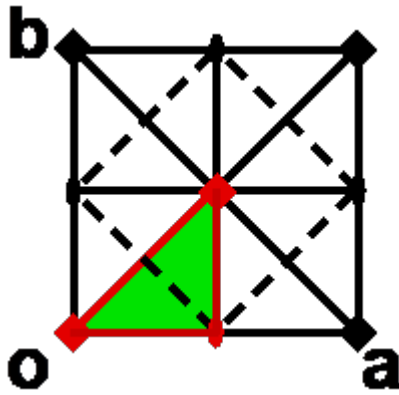
鏡映面が交差する 2 回中心は 2 倍、glide 面が交差する 2 回中心は 4 倍、鏡映面は 4 倍、他は 8 倍

$nsg = 10, p4 \quad a = b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



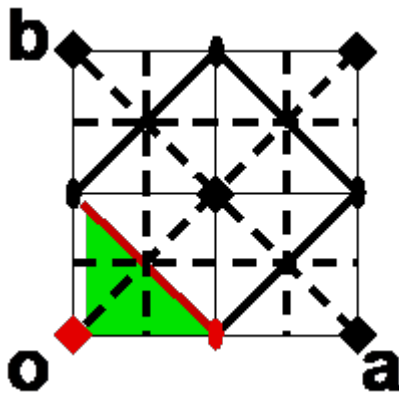
4 回中心は 1 倍、2 回中心は 2 倍、他は 4 倍

$nsg = 11, p4mm$      $a = b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



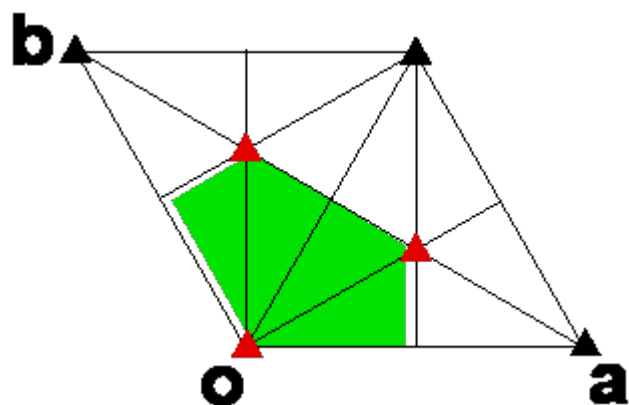
4回中心は1倍、2回中心は2倍、鏡映面は4倍、他は8倍

$nsg = 12, p4gm$      $a = b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 90^\circ$



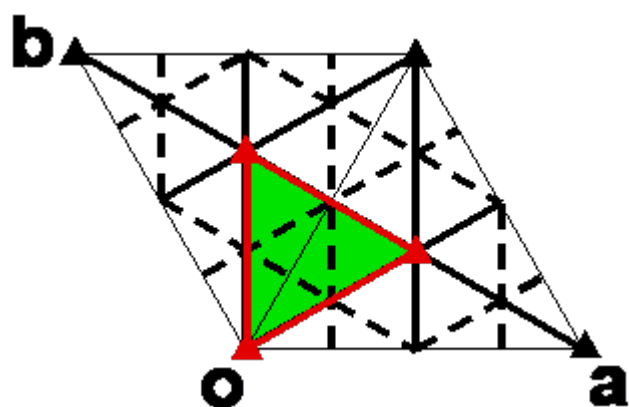
4回中心は2倍、2回中心は2倍、鏡映面は4倍、他は8倍

$nsg = 13, p3 \quad a = b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 120^\circ$



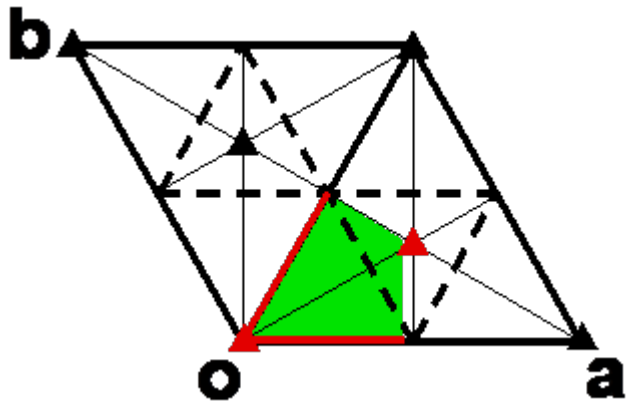
3回中心は1倍、他は3倍

$nsg = 14, p3m1 \quad a = b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 120^\circ$



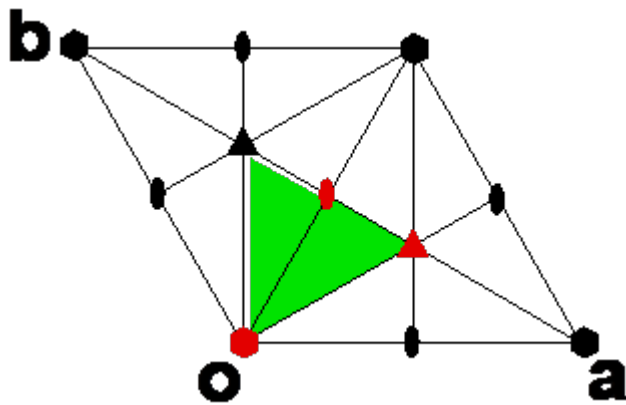
3回中心は1倍、鏡映面は3倍、他は6倍

$nsg = 15, p31m \quad a = b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 120^\circ$



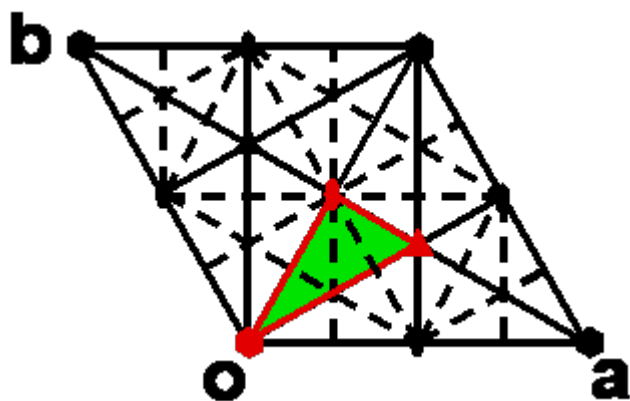
原点 O の 3 回中心は 1 倍、他の 3 回中心は 2 倍、鏡映面は 3 倍、他は 6 倍

$nsg = 16, p6 \quad a = b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 120^\circ$



6 回中心は 1 倍、3 回中心は 2 倍、2 回中心は 3 倍、他は 6 倍

$nsg = 17, p6mm \quad a = b, \quad \gamma(a,b \text{ のなす角}) = 120^\circ$



6回中心は1倍、3回中心は2倍、2回中心は3倍、鏡映面は6倍、他は12倍