Orbit class の分類 — 30 平面軌道型の関係

松本毅生 (金沢大学・理), H. Wondratschek (Karlsruhe Univ.)

空間群、 R の対称操作により、一点 X から生成する点集合 $\{X\}$ は、 R における X の結晶軌道、 $O = R \cdot X = \{r \cdot X \mid r \in R\}$ と呼ばれる。その生成空間群 R 以外に、 O の固有の空間群 E が、 $\{X\}$ の全ての対称操作の集合として定義される。一般に $E \geq R$ が成り立つ。(H.W. '76)

結晶軌道の分類は、 O の生成空間群でなく、その固有対称群を用いて可能となる。軌道の固有空間群を E とすると、 (O, E) とアффイン的関係にある全軌道の Wyckoff class は、軌道型 (orbit class または type) 。

表 30 Orbit types in the plane

Oblique (2)	Rectangular (9)	Square (7)	Hexagonal (12)
$L_m (=2.p2)$ 1.p2	$L_o (=2mm.p2mm)$ $L_r (=2mm.c2mm)$ m.p2mm m.p2mg m.c2mm 1.p2mm 1.p2mg 1.p2gg 1.c2mm	$L_s (=4mm.p4mm)$ 1m1.p4mm 11m.p4mm m.p4gm 1.p4 1.p4mm 1.p4gm	$L_h (=6mm.p6mm)$ 3m.p6mm 2mm.p6mm 11m.p6mm 1m1.p6mm m.p3m1 m.p31m 1.p3 1.p3m1 1.p31m 1.p6 1.p6mm

と云われる。即ち、2つの軌道の固有空間群と固有席対称性が同値であれば、同じ軌道型に属する。その記号は、席対称、空間群で記し、格子型のみ例外的に、 L にサフィックスを付けて用いる。² R における30種の軌道型を表に示す。これらの分類、相互関係は、次の2種に大別されよう。I) 同一 crystal family 内での分類

II) 晶系に1分けられ、

一般的な分類

前者I) の例として、Oblique 及び Rectangular 晶系の軌道型の関係を表に示す。下方ほど、同一晶系内で、 x, y の座標値が特殊化され、自由度が減少する。後者II) は、前者I) に、更に、格子パラメータも入れて考慮するものである。(例えば $L_m \rightarrow L_o, L_r$)

表 図 Oblique 及び Rectangular systems における軌道型の関係