結晶軌道タイプについて

松本崧生(金沢大・理), H. Wondratschek (Karlsruhe Univ.)

空間群 G の操作で、実数から生じる実集合 ψ を結晶軌道と云う。どの軌道自身の固有は対称 E は、空間群であり、 G と等しいか、或は G の超群である ($E \supset G$)。特に $E \supset G$ は結晶軌道 ψ 、NCO (non-characteristic orbits) と云い、近年、これは全空間群の各ワイコフ位置ごとに全て導かれた (Engel, Matsumoto, Steinmann & Wondratschek, 1984)¹⁾。これは IT を補うことにもなり、利用されることが期待される。

NCO のリストには、軌道タイプが記されている。2つの軌道の固有は対称 E, E' とし、それぞれの席対称を S, S' とする。E の E' への、 S の S' へのアッフィン写像が存在するならば、この2つの軌道は同じ軌道タイプに属する。即ち、結晶軌道の固有対称の空間群と、その席対称群 (ワイコフ・セット) が同じであれば、同じ軌道タイプに属する。上述の NCO のリストでは、軌道タイプは、空間群 (多重度・ワイコフ・セット記号) で表示されている。勿論、席対称群も示せば丁寧な表現法となる。例えば、 $P2/m(40)$, $P2/m(2m, n)$, $P3/m(2i-e)$, $P3/m(1a-f)$ の席対称群は、それぞれ、1, m , 2, $2/m$ である。

軌道タイプは、平面で 30 種²⁾、空間で 427 (402) 種 [対称体の区別による] 存在する。この数は、lattice complexes^{Characteristic} と対応する。ただし、lattice complexes では、limiting complexes として他の軌道タイプも含んでいる。

軌道タイプ間の相互関係は、格子定数、座標パラメーターを特殊化することによって求められる。下図は、単斜晶系の 15 軌道タイプの相互関係を示し、下方向に特殊化され、対称は上昇する。

図. 単斜晶系における軌道タイプの相互関係.

1) E.M.S.W. 'The non-characteristic orbits of the space groups' (1984) Oldenbourg, München.

2) 松本・Wondratschek. (1980). 日本結晶学会講演要旨集.