

種々の結晶記述法

代表的なものを記した。これらが全てというわけではないし、またこれらの記述だけで結晶構造の全てを表現できるわけでもないが、おおよその情報がつかめるので便利。

1. Strukturbericht Symbol / Strukturbericht Designation

1-1 単体 「A〇〇」で表す(〇〇は数字)。

例：「A1」はFCCの単体。Au、Ag、Cuなど。

「A2」はBCCの単体。 α Fe、W、V(バナジウム)など。

「A3」はHCPの単体。 α Ti、Zn、Mgなど

「A4」はダイヤモンド構造。Si、Cなど

「A6」はグラファイト

1-2 構成元素が 1 : 1 の比でできた2元系は「B〇〇」で表す。

B1 : NaCl 型 **B2** : CsCl 型 B3 : ZnS 型

1-3 構成元素が 1 : 2 の比でできた2元系化合物は「C〇〇」で表す。

C1 : CaF₂ 型 C14 : MgZn₂ 型 C15 : MgCu₂ 型

1-4 構成元素の比が 1:1 でも 1:2 でも無い2元系化合物「D〇〇」で表す。

D0₃ : Fe₃Al D0₈ : Fe₇W₆…など

1-5 構成元素が三つ以上「E〇〇」、一般的な合金「L〇〇」、…複雑なものにはさらにF~Kなどで表記。その他、L₁₂型等がある。

こういう考え方で分類を行なうと、どこに分類してよいか判らない化合物が出てくる。また当然ながら、記号が不足してくる。分類の考え方としてはあまり良いとは言えないが、使われた歴史が長いことと、特殊なもの以外はこの方法で分類できる場合が多いため、たくさんの材料がこの表記で表せてしまう。この理由により、今でも頻繁に使われる分類法である。なお、英文字に続く〇〇の数値(番号?)に厳密な規則性は無いので気にしなくてもよい。

2. プロトタイプで分類した場合の記述法

単体 → Cu型(FCC)、W型(BCC)、Mg型(HCP)

化合物 → NaCl型、ダイヤモンド型、… など

これはラクでいいが、プロトタイプの詳細を知っていないとイメージできない(同じタイプが少ない場合や複雑なものの場合も同様。「Fe₇W₆型」などと聞いてもわからない人が大半であろう)。

3. 対称操作による分類その1: Schoenflies(シェーンフリース)の記号による記述

3次元における対称操作は、

E — 何もしない

i — 反転

C_n — 2 π /n回転(真性回転)

σ — 鏡映 → σ_h (鏡は水平面) σ_v (鏡が垂直面) σ_d (鏡は対角平面)

S_n — 回映($\sigma_h C_n$ と同じ)

などの組み合わせで分類する。この表記法は、並進対称性をあまり考えないで良い場合(たとえば分子の対称性等を論じるとき等)によく用いられるので、有機屋さんが好んで使う。

4. 対称操作による分類その2: Hermann-Mauguin(ヘルマン・モーガン)の記号による記述

対象操作を記号で表し、その組み合わせをそのまま分類名とする方法。

マグネシウムは“**P 6₃ m m c**” → P(単純格子) + 6₃らせん軸 + 鏡面2つ + cグライド面

FCCのCuやAuは、“**F m -3 m**” → F(面心格子) + 3回回反軸 + 鏡面2つ

固体の結晶は並進対称性を持つので、無機材料屋さんたちは、先に述べたシェーフリースの記号よりもこちらをよく使う

5. Pearson Symbol(ピアソンの記号)による記述

これも結晶の形を反映した記述法の一つである。記述形式は → 「○△数値」

○: 英小文字(1文字)で、7結晶系を表す。六方晶と菱面体は同じ記号で表記するので文字は6種である。

a: 三斜晶(triclinic)	m: 単斜晶(monoclinic)
o: 直方晶(orthorhombic)	t: 正方晶(tetragonal)
h: 六方晶(hexagonal)と菱面体晶	c: 立方晶(cubic)

△: 英大文字(1文字)で格子のタイプを表す

P: 単純格子 I: 体心格子 F: 面心格子 R: 菱面体格子 C: 底心または側心(一面心)格子

数値: 単位胞内に含まれる原子の数。原子の種類は区別しないで数える。単純単位胞でない場合(すなわち単位胞中に複数の格子点がある上記の I、F、C の場合)は、「単位胞の中にある格子点の数 × 基本構造を構成する原子の数」となる。

例

銅 cF4: 面心格子には格子点が4つあり、それに銅原子が1個乗っているので、 $4 \times 1 = 4$

NaCl cF8: ブラベー格子は面心なので格子点4個。これに Cl と Na が1個ずつあるので $4 \times 2 = 8$

課題: 以下の4物質の結晶構造について、Pearson Symbol を記せ

[1] ダイヤモンド、 [2] CsCl、 [3] α鉄、 [4] CaF₂

[5] チタン酸バリウム(「ペロブスカイト構造」)