

ホモメトリック構造

松本 崧生

金沢大学名誉教授、自宅、金沢市土清水 2-77

matsumoto.ty@gmail.com

Homometric structures

Takeo MATSUMOTO

Emeritus Professor Kanazawa University,

Private address: 920-0955 Tsuchisimizu 2-77, Kanazawa, Ishikawa, Japan

Abstract: The several structures having the same Patterson map are called homometric structures. The fundamental sets having the same vector set may be called homometric sets. (Patterson, Hosemann & Bagchi, Buerger etc.). The Patterson function always has centro-symmetry. Patterson studied cyclotomic sets by n equally spaced points on the circumference of the circle and connecting r of these points to form a distance set. This homometric structures relates the enhancement of diffraction symmetry (Sadanaga, Ohsumi, Iwasaki etc.). Here homometric triplets and quadruplets are reexamined. in order to find the enhanced structures.

Keywords: Patterson function, vector sets, homomeric structure, cyclotomic sets, enhancement of diffraction symmetry.

1. X線回折図形の対称問題

L. Pauling, M. D. Sappel (1930) は、bixbyite の結晶構造の回折図形と同じ別の構造を見つけた。I21/a3-(No.206, Th-7) の $24d$ $2 \times 0 \frac{1}{4}$ 位置で、 $+x$ と $-x$ の構造は異なるにもかかわらず、Patterson map は同じである。これを機に、Patterson らの研究が始まり、多くのことが明白となった。|Fhkl|2 が同じ Patterson map を示す (同じ原子間ベクトル集合) の異なる構造を homometric structure と呼び、幾何学的、代数的両面から探求した。

{Patterson(1939,1944), Hosemann & Bagchi(1952,1953,1954)}

2. フリーデル則と回折対称の上昇。

Friedel's law (1913) : 「結晶の X 線回折図形の対称 GD は、その結晶の幾何学的対称 GP に反転を加えたものである。」 (R. Sadanaga & K. Ohsumi (1979), Sadanaga et al.)

もし結晶 GP が対称心をもっておれば GD は GP に等しく、GP に対称心がない場合は、GD は GP と対称心との直積となり、GD は GP よりも対称が高い。

SiC polytype の一つ 10H 型の回折対称 GP が六方晶系にも拘らず、巨視的対称 GP は三方晶系であることが判明した (Ramsdell & Kohn, 1951)。雲母 10Tc3 polytype は GD が単斜晶系、GP

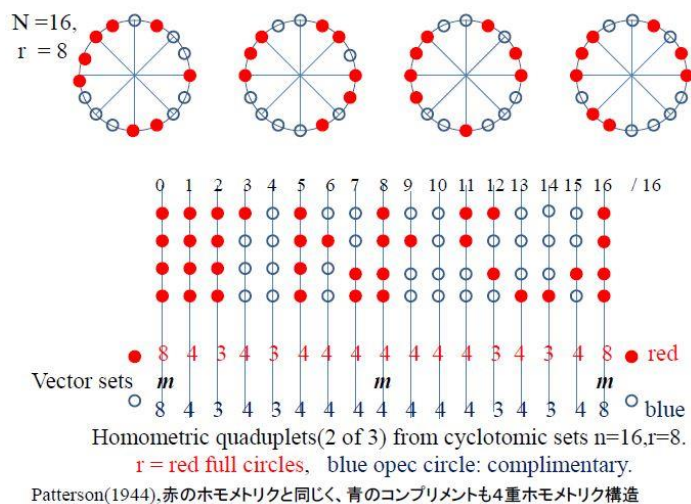
が三斜晶系である(Ross et al.,1966)。結晶のGDがフリーデル則の枠を超えて対称が高くなることを「回折対称の上昇」という。結晶学の常識に反するこの現象に対し、定永、大隅、岩崎、丸茂、松本、谷、Perez-MATO,Iglesiasらの貢献がある。

3.ベクトル対称

数個の点配列 (fundamental set) 結晶構造があれば、その原子間ベクトルを一点に集めた図形(vector set)ができる。実際の結晶によるX線回折に実験データから計算で得られるパタソン図形は、原子 $fA \times fB$ を過重したベクトルセットに対応する。ベクトルセットの対称GVをベクトル対称と呼べば、回折対称の代わりにベクトル対称GVを考察すればよい。フリーデルの法則を仮定すれば、X線回折強度 $|F|^2$ の分布は、結晶内原子間ベクトル集合のフーリエ変換である。回折の対称は、原子配列の対称ではなく、原子間ベクトル集合の対称と対応する。

4.三重、四重ホモメトリック構造

Pattersonが一次元の周期構造を円周上の点配列で表現しよう(cyclotomic sets)。原子間ベクトルは円弧の長さだが、その弦で考察してよい。円に内接する正n角形の頂点のどこかにrこの同種原子を重複せず配置する置き方を、そしてホモメトリックの組を系統的に導いた (n<16) (Patterson-Buerger rules)。三重、四重以上のホモメトリック組を再検討する。



参考文献

Martin J Buerger (1959), *Vector Space and its application in crystal-structure investigation*.New York, John Wiley & Sons, INC., London Chapman & Hall,LTD.
 M.J.Buerger:Zeit.Krist. (1976)143,79; (1977)145,371.:Can.Mineral.(1978)16, 301
 Chun Chieh:Zeit Krist. (1979) 150.261.

R.Hosemann & S.N.Bagchi:Acta Cryst. (1952) 5,749.(1953)6,318.,(1954) 7,237.
 H.IwasakiActa Cryst(1972),A28,253. :(1974) A30,173.: (1975)A31,S6.
 R.Sadanaga & K.Ohsumi: Acta.Cryst.(1975).A35,115. R.Sadanaga,K.Ohsumi & T.Matsumoto
 Proc.Japan Acad. (1973a, b) 49, 609:49, 618: R.Sadanaga & H.Takeda:Acta Cryst.(1968)B24, 144.
 定永両一「結晶学序説」岩波書店。 K.Tani, Mineral,Journ. (1981),10,296.
 T.Matsumoto, Acta Cryst. (1975)A31,S6:T.Matsumoto,K.Kihara,H.Iwasaki(1972).A30.107.
 A.L.Patterson:Nature (1939)143,939:Phys.Rev. (1944)65,195.
 J.M.Perez-MATO & J.E.Iglesias,ActaCryst(1977),A33,46