

対称の上昇 数学月間の会、 松本崧生 金沢大学名誉教授

令和3年8月7日

### 1. 結晶軌道 Crystallographic orbits of the space group

20世紀の末、空間群が導かれ、整理されたが、群の内部構造については未解決のままであった、Niggli は生成空間群より高い対称を示す結晶軌道を導くことが重要であると問題的提起したのが、1890年代?である。これの突破口を H. Wondratschek が切り開き、松本・Wondratschek が、NCO (Non characteristic orbits) の可能な超格子を導き、これを用いて、空間群のNCOの導出が開始された。Steinmann, Engel も加わり、独日スイス3国の共同研究で、10数年をかけて完成した。但し、同一の crystal family 内に限られたものである。〈今回は省略〉

**Engel, P., Matsumoto, T., Steinmann, G., Wondratschek, H. (2015)**

**The Non-characteristic Orbits of the Space Groups, pp. 1-218.**

Zeitschrift für Kristallography/Supplement, Hardcover, 226 pages, \$154.00.

Hard Cover : \$ 154. ≈ 154 X 110.88

= 17,076.円 ≈ 1万7千円 (2021.7.20.)

### 2. ホモメトリク構造、ホモメトリク対 Homometric structure, Homometric pair

同一でない点配列で、同じ Patterson map を示す構造をホモメトリク構造、ホモメトリー という。

点群の対称操作1個につき、逆空間内の等価反射が、1:1に対応する。逆空間内の対称は、結晶の点群と同形の群を作り、32種存在する。同一の点群でも、結晶軸に対する対称要素の配置の相違の為、等価反射の指数が異なる場合がある。4-2m, 4m-2等5組に注意し、37種考慮すること。

$|F(hkl)| = |F(-h -k -l)|$  で、逆空間に点対称, 対称中心(-1) が表れる。

{岩崎準、結晶解析における偽対称と偽構造(1954)日本結晶学会誌 16,155.}

### 3. 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  $G_D$  回折対称は、その結晶の巨視的対称  $G_P$  点群に反転を加えたものである。

(R.Sadanaga & K.Ohsumi(1979), Sadanaga et al.)

もし結晶  $G_P$  が対称心(1-)をもっておれば、 $G_D$  は  $G_P$  に等しく、 $G_P$  に対称心(1-)が無い場合  $G_D$  は  $G_P$  と対称心(1-)と  $n$  直積となり、 $G_D$  は  $G_P$  より高い対称を示す。

SiC polytype の一つ 10H 型の巨視的対称は  $G_P$  は三方晶系だが、回折対称  $G_D$  は六方晶系である。〔Ramsdell & Kohn,1951〕

雲母 10Tc<sub>3</sub> polytype は  $G_P$  が三斜晶系、 $G_D$  は単射晶系である。

〔Ross et al.1966〕

結晶の  $G_D$  が Friedel 則の枠を超えて対称が高くなることを

回折対称の上昇, **Enhancement of diffraction symmetry** という。〔定永両一 〕

この常識に反する現象に対し、定永、大隅、岩崎、丸茂、松本、谷、Perez-MATO, Iglesias 等の貢献があります。

#### 4. X 線回折図形の対称問題

L.Pauling, M.D.Sappe(1930)は、bixbyite の結晶構造の結晶構造と同じ別の構造をみつけた。I2<sub>1</sub>/a3- (IT.No.206, Th-7)の、24 d 2, x 0 ¼ の位置で、+x と -x の構造は異なるにも関わらず、Patterson map は同じである。これを機に、Patterson 等の研究が始まり、多くの事が明白となった。

|F<sub>hkl</sub>|<sup>2</sup> が同じ Patterson map を示す異なる構造、(同じ原子間ベクトル集合)を **Homometric structure** とよび、幾何学的、代数的両面から探求された。

〔Patterson(1939,1944),Hosemann & Bagchi(1952,1953,1954)〕

#### 5. Type I, Type II, Type III の 4 重ホモメトリク構造

ホモメトリク構造につき、長崎、仙台に始まり、形の科学会、鉱物・結晶学会等で発表してきました。古典的問題ですが、回折対称の上昇問題と関連して、検討を続けている。3-types の 4 重ホモメトリク構造の円周上の点配列、n=16, r=8: 色付き、黒、(n-r) : 無色、他色 「cyclotomic sets」につき、又 ホモメトリク・セット を示す予定です。Type II で楽しみましょう!

**新型コロナウイルスの猖獗、収まりますよに！！**