

§ § 結晶構造

§ 結晶構造 とは 空間格子 + 単位構造

固体、特に結晶では、原子あるいは原子集団（分子）が3次的に規則正しく配列している。

結晶中のある部分を単位にとって、それを繰り返し平行移動してゆくことで空間全体を過不足なく埋め尽くすことができる。

並進対称 (translational symmetry)

結晶中任意の二点を考え、それらの周囲の原子配列状況が全く同じである時、これらの点を結ぶベクトル $\mathbf{R}_{n_1 n_2 n_3}$ を並進ベクトル(translational vectors)と呼ぶ。

$$\mathbf{R}_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} \quad \text{ここで, } n_1, n_2, n_3 \text{ 任意の整数, } \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \text{ は基本並進ベクトル} \quad (1)$$

結晶中の特定の位置 \mathbf{r} を並進させた位置を \mathbf{r}' とすると

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{R}_{n_1 n_2 n_3} \quad (2)$$

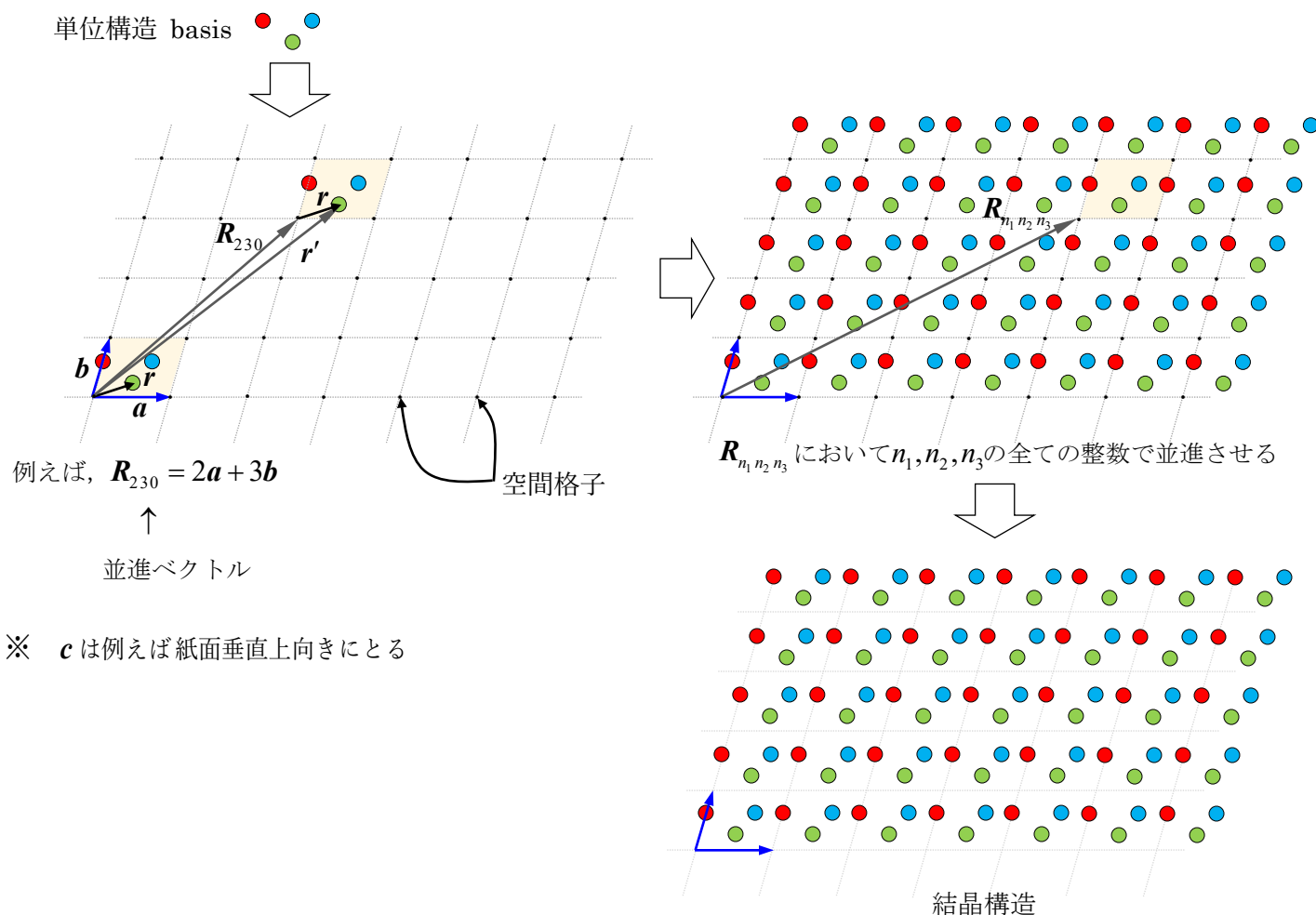
\mathbf{r}' 周辺の原子配列は位置 \mathbf{r} の周辺と全く同じである。

このような \mathbf{r}' が周期的に配列して結晶空間ができる = 空間格子

空間格子は純粋に幾何学的概念である。

空間格子の各点に単位構造（下部構造 or 基本構造(basis)）を置くと結晶構造(Crystal lattice)となる。

この時一般には対称性は低下する。単位構造は1個または複数の原子から構成される。



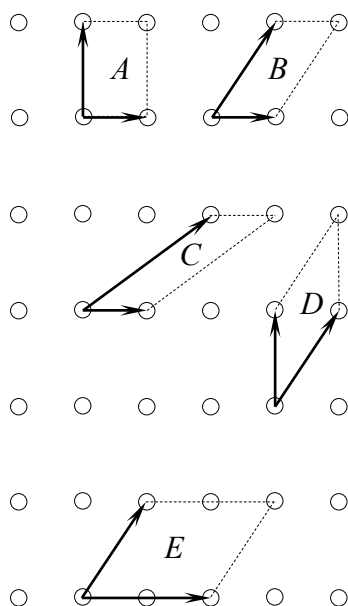
※ \mathbf{c} は例えば紙面垂直上向きにとる

単位胞の基本並進ベクトル a, b, c の選び方

r の点に等価なすべての点が r' の組の中に含まれるように a, b, c を選ぶとき, a, b, c と r は primitive (単純) であるという.

そのような a, b, c を稜とする平行六面体を単純単位胞(primitive unit cell)と呼ぶ.

同じ空間格子に対して単純単位胞の選び方は無数にある. それらの中でも空間格子の対称性を良くあらわすものが選ばれる.



A, B, C, D すべて primitive unit cell

E は non-primitive unit cell の例

これらの内どれが最も対称性を表しているか?

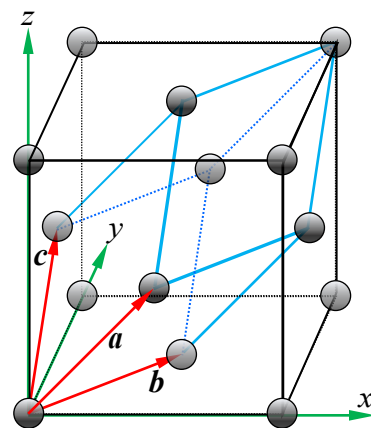
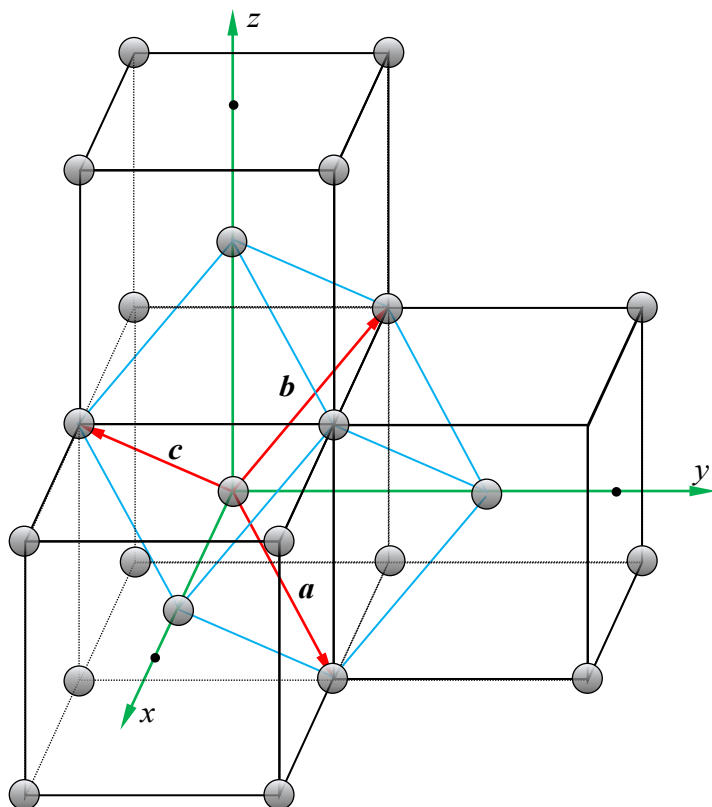


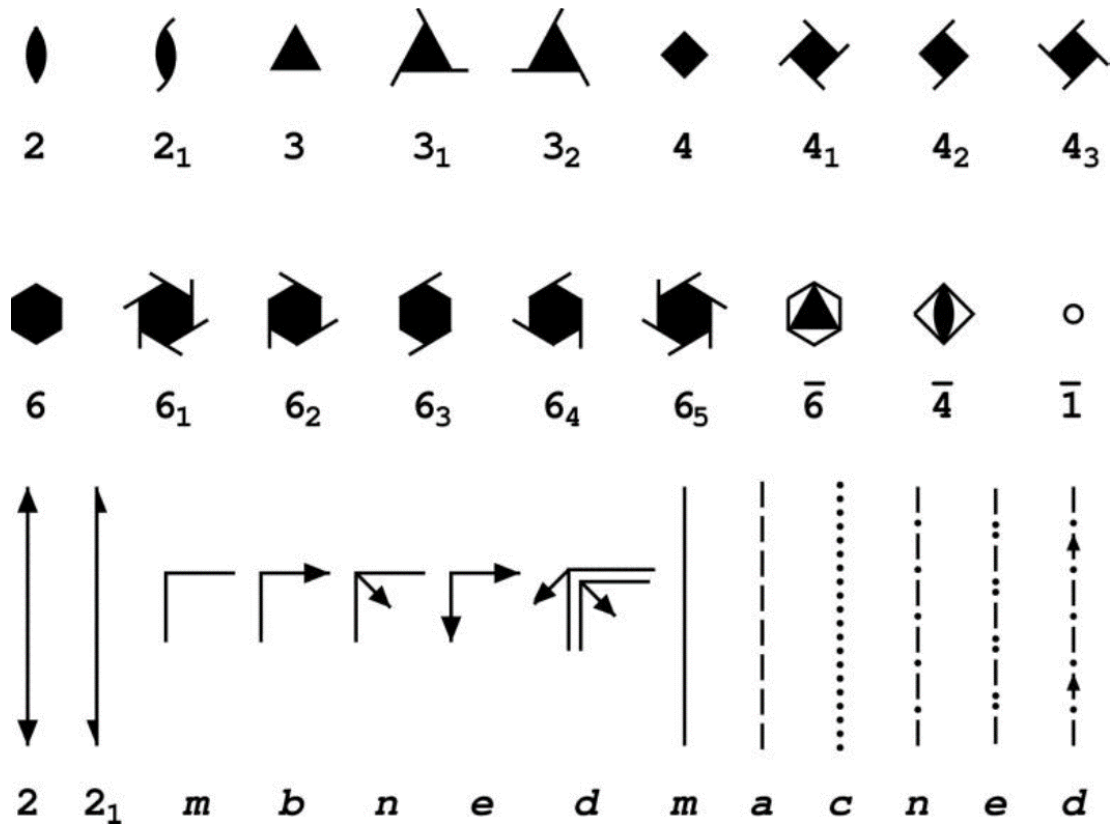
おそらく A である

Primitive でない単位胞を選んで, 結晶の本質を表す場合.


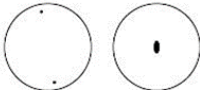
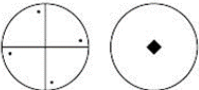
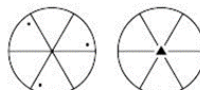
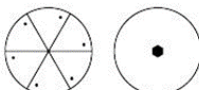
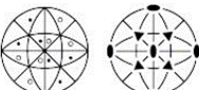
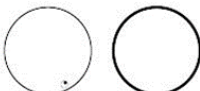
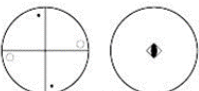



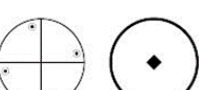
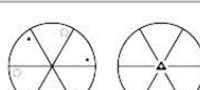


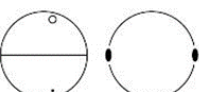

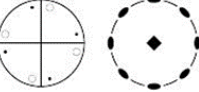
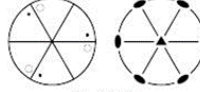

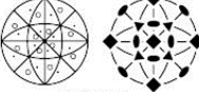


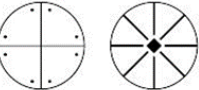
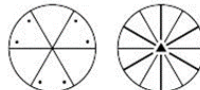
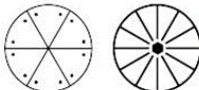
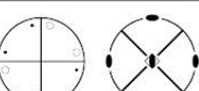
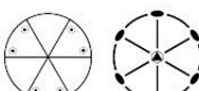
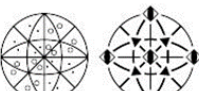
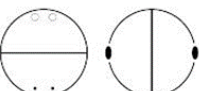
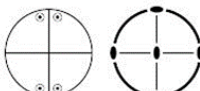
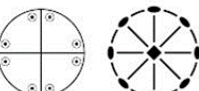
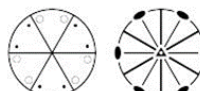
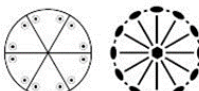
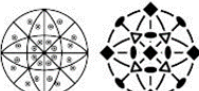
面心立方格子の単純単位胞は菱面体(rhombohedral) $\alpha = 60^\circ$ である.

体心立方格子の単純単位胞は菱面体 $\alpha = 109^\circ 28'$ である.





対称性の記号

三斜晶系	単斜晶系(c 主軸)	正方晶系	三方晶系	六方晶系	立方晶系
 $C_1(1)$	 $C_2(2)$	 $C_4(4)$	 $C_3(3)$	 $C_6(6)$	 $T(23)$
—	 $C_s(m(=2))$	 $S_4(4)$	—	 $C_{3h}(6)$	—
 $C_1(1)$	 $C_{2h}(2/m)$	 $C_{4h}(4/m)$	 $S_6(3)$	 $C_{6h}(6/m)$	 $T_h(m3)$
単斜晶系(b 主軸)	斜方晶系				
 $C_2(2)$	 $D_2(222)$	 $D_4(422)$	 $D_3(32)$	 $D_6(622)$	 $O(432)$
 $C_s(m)$	 $C_{2v}(mm2)$	 $C_{4v}(4mm)$	 $C_{3v}(3m)$	 $C_{6v}(6mm)$	—
—	—	 $D_{2d}(42m)$	—	 $D_{3h}(6m2)$	 $T_d(43m)$
 $C_{2h}(2/m)$	 $D_{2h}(mmm)$	 $D_{4h}(4/mmm)$	 $D_{3d}(3m)$	 $D_{6h}(6/mmm)$	 $O_h(m3m)$

32 個の結晶点群とステレオ図

§ 空間群

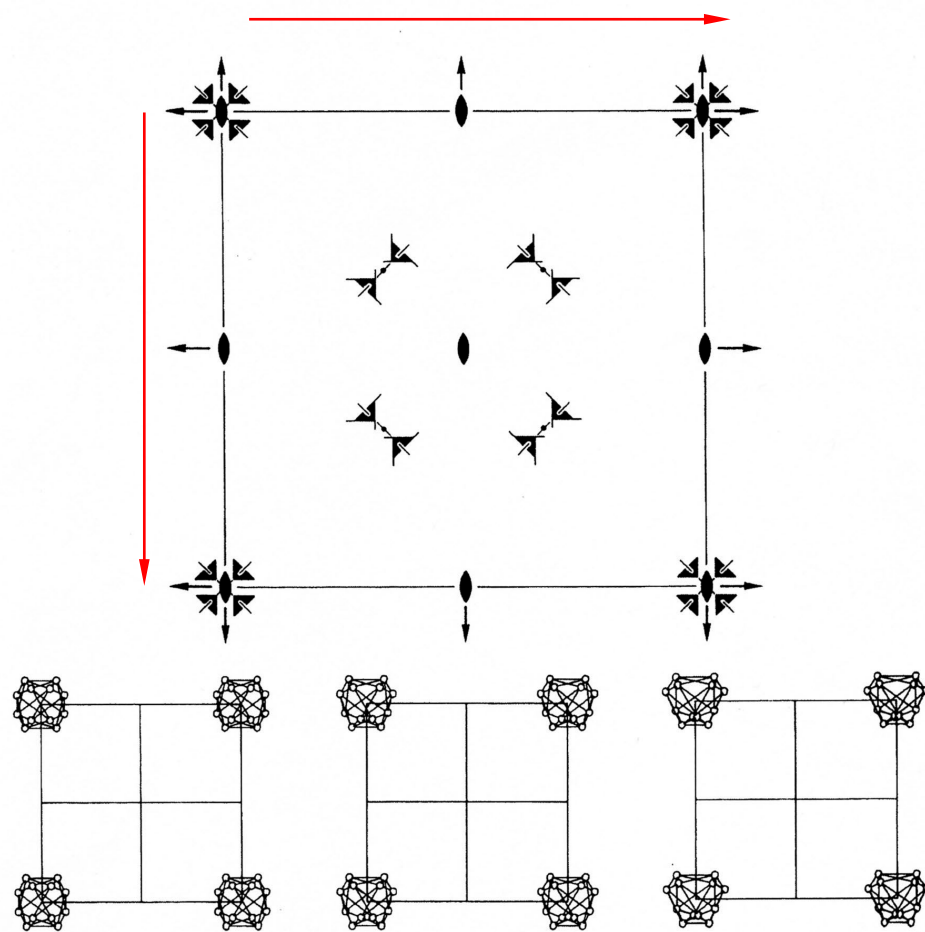
14 種のブラベー格子に 32 種の点群及び並進を含む対称要素を組み合わせた場合の配置 = 230 種の空間群

表 6.2 晶系と点群および空間群

結晶系	点群	空間群
三斜晶系 (triclinic)	1 $\bar{1}$	$P1$ $P\bar{1}$
単斜晶系 (monoclinic)	2 m $2/m$	$P2, P2_1, C2$ Pm, Pc, Cm, Cc $P2/m, P2_1/m, C2/m, P2/c, P2_1/c, C2/c$
斜方晶系 (orthorhombic)	222 $mm2$ mmm	$P222, P222_1, P2_12_12, P2_12_12_1, C222_1, C222, F222, I222, I2_12_12_1$ $Pmm2, Pmc2_1, Pcc2, Pma2_1, Pca2_1, Pnc2_1, Pmn2_1, Pba2, Pna2_1, Pnn2,$ $Cmm2, Cmc2_1, Ccc2, Amm2, Abm2, Ama2,$ $Aba2, Fmm2, Fdd2, Imm2, Iba2, Ima2$ $Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna,$ $Pmna, Pcca, Pbam, Pccn, Pbcm, Pnnm, Pmmn, Pbcn, Pbca, Pnma,$ $Cmcm, Cmca, Cmmm, Cccm, Cmma, Ccca, Fmmm, Fddd,$ $Immm, Ibam, Ibca, Imma$
正方晶系 (tetragonal)	4 $\bar{4}$ $4/m$ 422 $4mm$ $\bar{4}2m$ $4/mmm$	$P4, P4_1, P4_2, P4_3, I4, I4_1$ $P\bar{4}, I\bar{4}$ $P4/m, P4_2/m, P4/n, P4_2/n, I4/m, I4_1/a$ $P422, P42_12, P4_122, P4_12_12, P4_222, P4_22_12$ $P4_322, P4_32_12, I422, I4_122$ $P4mm, P4bm, P4_2cm, P4_2nm, P4cc, P4nc,$ $P4_2mc, P4_2bc, I4mn, I4cm, I4_1md, I4cd$ $P\bar{4}2m, P\bar{4}2c, P\bar{4}2_1m, P\bar{4}2_1c, P\bar{4}m2, P\bar{4}c2,$ $P\bar{4}b2, P\bar{4}n2, I\bar{4}m2, I\bar{4}c2, I\bar{4}2m, I\bar{4}2d$ $P4/mmm, P4/mcc, P4/nbm, P4/nnc, P4/mbm,$ $P4/mnc, P4/nmm, P4/ncc, P4_2/mmc, P4_2/mcm,$ $P4_2/nbc, P4_2/nnm, P4_2/mbc, P4_2/mnm, P4_2/nmc,$ $P4_2/ncm, I4/mmm, I4/mcm, I4_1/amd, I4_1/acd$
三方晶系- 六方晶系 (trigonal- hexagonal)	3 $\bar{3}$ 32 $3m$ $\bar{3}m$ 6 $\bar{6}$ $6/m$ 622 $6mm$ $\bar{6}m$ $6/mmm$	$P3, P3_1, P3_2, R3$ $P\bar{3}, R\bar{3}$ $P312, P321, P3_112, P3_121, P3_212, P3_221, R32$ $P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c$ $P\bar{3}1m, P\bar{3}1c, P\bar{3}m1, P\bar{3}c1, R\bar{3}m, R\bar{3}c$ $P6, P6_1, P6_5, P6_3, P6_2, P6_4$ $P\bar{6}$ $P6/m, P6_3/m$ $P622, P6_122, P6_522, P6_222, P6_422, P6_322$ $P6mm, P6cc, P6_3cm, P6_3mc$ $P\bar{6}2m, P\bar{6}c2, P\bar{6}2m, P\bar{6}2c,$ $P6/mmm, P6/mcc, P6_3/mcm, P6_3/mmc$
立方晶系 (cubic)	23 $m\bar{3}$ 432 $\bar{4}3m$ $m\bar{3}m$	$P23, F23, I23, P2_13, I2_13$ $Pm\bar{3}, Pn\bar{3}, Fm\bar{3}, Fd\bar{3}, Im\bar{3}, Pa\bar{3}, Ia\bar{3}$ $P432, P4_232, F432, F4_132, I432, P4_332, P4_132, I4_132$ $P\bar{4}3m, F\bar{4}3m, I\bar{4}3m, P\bar{4}3n, F\bar{4}3c, I\bar{4}3d$ $Pm\bar{3}m, Pn\bar{3}n, Pm\bar{3}n, Pn\bar{3}m, Fm\bar{3}m, Fm\bar{3}c,$ $Fd\bar{3}m, Fd\bar{3}c, Im\bar{3}m, Ia\bar{3}d$

***P*23**

No. 195

T*¹**P*23****23****Cubic**Patterson symmetry ***Pm* $\bar{3}$** **Origin at 23**

Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1; 0 \leq z \leq \frac{1}{2}; y \leq 1-x; z \leq \min(x, y)$
Vertices $0, 0, 0 \quad 1, 0, 0 \quad 0, 1, 0 \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Symmetry operations

- | | | | |
|------------------------------|---|---|---|
| (1) 1 | (2) 2 $0, 0, z$ | (3) 2 $0, y, 0$ | (4) 2 $x, 0, 0$ |
| (5) 3 ⁺ x, x, x | (6) 3 ⁺ \bar{x}, x, \bar{x} | (7) 3 ⁺ x, \bar{x}, \bar{x} | (8) 3 ⁺ \bar{x}, \bar{x}, x |
| (9) 3 ⁻ x, x, x | (10) 3 ⁻ x, \bar{x}, \bar{x} | (11) 3 ⁻ \bar{x}, \bar{x}, x | (12) 3 ⁻ \bar{x}, x, \bar{x} |

CONTINUED

No. 195

P23

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3); (5)**Positions**Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

 h, k, l cyclically permutable

General:

no conditions

12	j	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) \bar{x}, y, \bar{z}	(4) x, \bar{y}, \bar{z}
			(5) z, x, y	(6) z, \bar{x}, \bar{y}	(7) \bar{z}, \bar{x}, y	(8) \bar{z}, x, \bar{y}
			(9) y, z, x	(10) \bar{y}, z, \bar{x}	(11) y, \bar{z}, \bar{x}	(12) \bar{y}, \bar{z}, x

Special: no extra conditions

6	i	2..	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$
6	h	2..	$x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, 0$	$0, x, \frac{1}{2}$	$0, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, x$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{x}$
6	g	2..	$x, 0, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, 0$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, 0$	$0, \frac{1}{2}, x$	$0, \frac{1}{2}, \bar{x}$
6	f	2..	$x, 0, 0$	$\bar{x}, 0, 0$	$0, x, 0$	$0, \bar{x}, 0$	$0, 0, x$	$0, 0, \bar{x}$
4	e	.3.	x, x, x	\bar{x}, \bar{x}, x	\bar{x}, x, \bar{x}	x, \bar{x}, \bar{x}		
3	d	222..	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$			
3	c	222..	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$			
1	b	23.	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$					
1	a	23.	$0, 0, 0$					

Symmetry of special projectionsAlong $[001]$ $p2mm$ $\mathbf{a}' = \mathbf{a}$ $\mathbf{b}' = \mathbf{b}$ Origin at $0, 0, z$ Along $[111]$ $p3$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{3}(2\mathbf{a} - \mathbf{b} - \mathbf{c})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{3}(-\mathbf{a} + 2\mathbf{b} - \mathbf{c})$ Origin at x, x, x Along $[110]$ $p1m1$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{2}(-\mathbf{a} + \mathbf{b})$ $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$ Origin at $x, x, 0$ **Maximal non-isomorphic subgroups**

I	[3] $P21$ ($P222, 16$)	1; 2; 3; 4
	[4] $P13$ ($R3, 146$)	1; 5; 9
	[4] $P13$ ($R3, 146$)	1; 6; 12
	[4] $P13$ ($R3, 146$)	1; 7; 10
	[4] $P13$ ($R3, 146$)	1; 8; 11

IIa none**IIb** [2] $F23$ ($\mathbf{a}' = 2\mathbf{a}, \mathbf{b}' = 2\mathbf{b}, \mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (196); [4] $I2_3$ ($\mathbf{a}' = 2\mathbf{a}, \mathbf{b}' = 2\mathbf{b}, \mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (199); [4] $I23$ ($\mathbf{a}' = 2\mathbf{a}, \mathbf{b}' = 2\mathbf{b}, \mathbf{c}' = 2\mathbf{c}$) (197)**Maximal isomorphic subgroups of lowest index****IIc** [27] $P23$ ($\mathbf{a}' = 3\mathbf{a}, \mathbf{b}' = 3\mathbf{b}, \mathbf{c}' = 3\mathbf{c}$) (195)**Minimal non-isomorphic supergroups****I** [2] $Pm\bar{3}$ (200); [2] $Pn\bar{3}$ (201); [2] $P432$ (207); [2] $P4_32$ (208); [2] $P\bar{4}3m$ (215); [2] $P\bar{4}3n$ (218)**II** [2] $I23$ (197); [4] $F23$ (196)

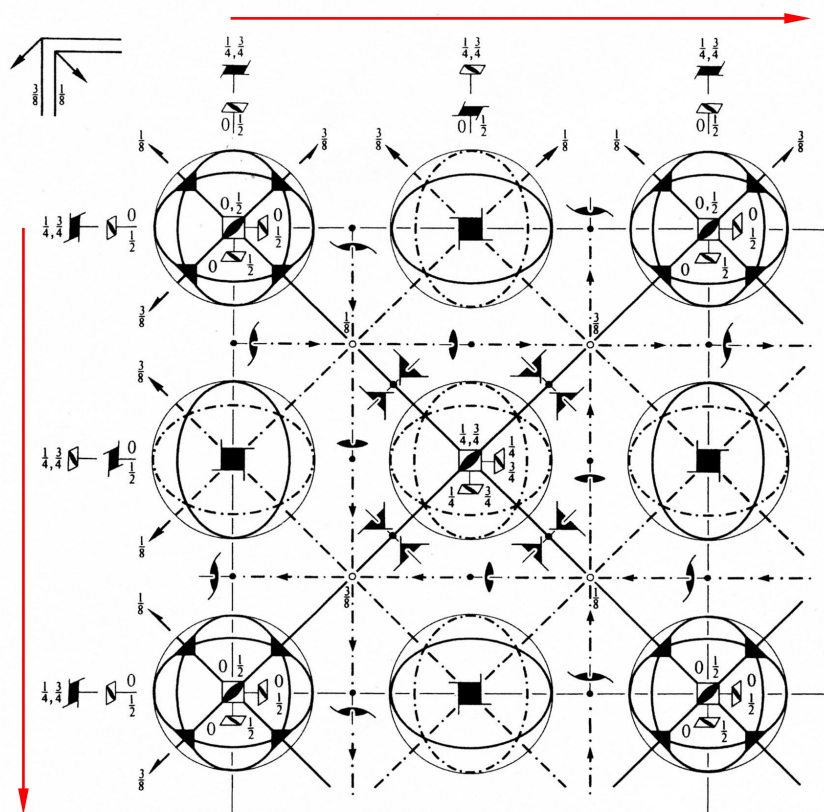
$Fd\bar{3}m$ O_h^7 $m\bar{3}m$

Cubic

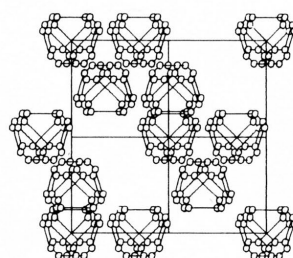
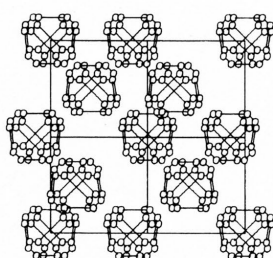
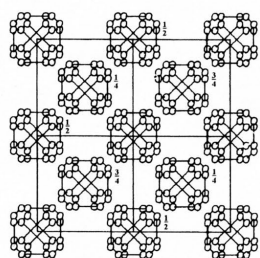
No. 227

 $F 4_1/d \bar{3} 2/m$ Patterson symmetry $Fm\bar{3}m$

ORIGIN CHOICE 1



Upper left quadrant only

Origin at $\bar{4}3m$, at $-\frac{1}{8}, -\frac{1}{8}, -\frac{1}{8}$ from centre ($\bar{3}m$)Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{8}; -\frac{1}{8} \leq z \leq \frac{1}{8}; y \leq \min(\frac{1}{2}-x, x); -y \leq z \leq y$ Vertices $0, 0, 0 \quad \frac{1}{2}, 0, 0 \quad \frac{3}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \quad \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \quad \frac{3}{8}, \frac{1}{8}, -\frac{1}{8} \quad \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, -\frac{1}{8}$

Symmetry operations

(given on page 699)

CONTINUED

No. 227

 $Fd\bar{3}m$ **Generators selected** (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$; $t(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$; (2); (3); (5); (13); (25)**Positions**Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

(0,0,0)+ (0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$)+ ($\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$)+ ($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 0)+

Reflection conditions

 h, k, l permutable

General:

192	i	1	(1) x, y, z	(2) $\bar{x}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}$	(4) $x + \frac{1}{2}, \bar{y}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	hkl : $h+k=2n$ and $h+l, k+l=2n$
			(5) z, x, y	(6) $z + \frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	(7) $\bar{z}, \bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	(8) $\bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{y}$	Ok : $k+l=4n$ and $k, l=2n$
			(9) y, z, x	(10) $\bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, \bar{x}$	(11) $y + \frac{1}{2}, \bar{z}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	(12) $\bar{y}, \bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$	hhl : $h+l=2n$ $h00$: $h=4n$
			(13) $y + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{3}{4}$	(14) $\bar{y} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}$	(15) $y + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{3}{4}, z + \frac{3}{4}$	(16) $\bar{y} + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, z + \frac{1}{4}$	
			(17) $x + \frac{3}{4}, z + \frac{1}{4}, \bar{y} + \frac{3}{4}$	(18) $\bar{x} + \frac{1}{4}, z + \frac{3}{4}, y + \frac{1}{4}$	(19) $\bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}, \bar{y} + \frac{1}{4}$	(20) $x + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{3}{4}, y + \frac{3}{4}$	
			(21) $z + \frac{1}{4}, y + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{3}{4}$	(22) $z + \frac{3}{4}, \bar{y} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{4}$	(23) $\bar{z} + \frac{1}{4}, y + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$	(24) $\bar{z} + \frac{3}{4}, \bar{y} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	
			(25) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(26) $x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(27) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(28) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	
			(29) $\bar{z} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{3}{4}, \bar{y} + \frac{1}{4}$	(30) $\bar{z} + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, y + \frac{1}{4}$	(31) $z + \frac{1}{4}, x + \frac{3}{4}, \bar{y} + \frac{1}{4}$	(32) $z + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, y + \frac{1}{4}$	
			(33) $\bar{y} + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	(34) $y + \frac{3}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{4}$	(35) $\bar{y} + \frac{3}{4}, z + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{4}$	(36) $y + \frac{1}{4}, z + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	
			(37) $\bar{y} + \frac{3}{4}, \bar{x}, z + \frac{1}{2}$	(38) y, x, z	(39) $\bar{y}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(40) $y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z}$	
			(41) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z}, y + \frac{1}{2}$	(42) $x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{y}$	(43) x, z, y	(44) $\bar{x}, z + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	
			(45) $\bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{y}, x + \frac{1}{2}$	(46) $\bar{z}, y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	(47) $z + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{x}$	(48) z, y, x	

Special: as above, plus

96	h	$\dots 2$	$\frac{1}{8}, y, \bar{y} + \frac{1}{4}$ $\bar{y} + \frac{1}{4}, \frac{7}{8}, y$ $y, \bar{y} + \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$ $\frac{1}{8}, \bar{y} + \frac{1}{4}, y$ $y, \frac{1}{8}, \bar{y} + \frac{1}{4}$ $\bar{y} + \frac{1}{4}, y, \frac{1}{8}$	$\frac{7}{8}, \bar{y} + \frac{1}{4}, \bar{y} + \frac{1}{4}$ $\bar{y} + \frac{1}{4}, \frac{7}{8}, \bar{y} + \frac{1}{2}$ $\bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{7}{8}$ $\frac{3}{8}, y + \frac{1}{4}, y + \frac{1}{2}$ $y + \frac{1}{2}, \frac{3}{8}, y + \frac{1}{4}$ $y + \frac{1}{4}, y + \frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}, y + \frac{1}{2}, y + \frac{3}{4}$ $y + \frac{1}{4}, \frac{3}{8}, y + \frac{1}{2}$ $y + \frac{1}{2}, y + \frac{3}{4}, \frac{3}{8}$ $\frac{7}{8}, \bar{y} + \frac{3}{4}, \bar{y} + \frac{1}{2}$ $\bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{7}{8}, \bar{y} + \frac{3}{4}$ $\bar{y} + \frac{1}{4}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$\frac{5}{8}, \bar{y}, y + \frac{1}{4}$ $y + \frac{1}{4}, \frac{5}{8}, \bar{y}$ $\bar{y}, y + \frac{1}{4}, \frac{5}{8}$ $\frac{5}{8}, y + \frac{1}{4}, \bar{y}$ $\bar{y}, \frac{5}{8}, y + \frac{1}{4}$ $y + \frac{1}{4}, \bar{y}, \frac{5}{8}$	no extra conditions		
96	g	$\dots m$	x, x, z z, x, x x, z, x $x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}$ $x + \frac{1}{4}, z + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{3}{4}$ $z + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	$\bar{x}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $z + \frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{x} + \frac{1}{2}$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, \bar{x}$ $\bar{x} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}$ $\bar{x} + \frac{3}{4}, z + \frac{1}{4}, x + \frac{3}{4}$ $z + \frac{3}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, x + \frac{3}{4}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z}$ $\bar{z}, \bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$ $x + \frac{1}{2}, \bar{z}, \bar{x} + \frac{1}{2}$ $x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, z + \frac{1}{4}$ $\bar{x} + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$ $\bar{z} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{4}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ $\bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{x}$ $\bar{x}, \bar{z} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$ $\bar{x} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{4}, z + \frac{1}{4}$ $x + \frac{1}{4}, \bar{z} + \frac{1}{4}, x + \frac{1}{4}$ $\bar{z} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	no extra conditions		
48	f	$2 \dots mm$	$x, 0, 0$ $\frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$0, x, 0$ $x + \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$ $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$	$0, 0, x$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$ $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, x + \frac{3}{4}$	$hkl : h = 2n + 1$ or $h + k + l = 4$
32	e	$\dots 3m$	x, x, x $\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{x}$ $x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{3}{4}$ $x + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$	$\bar{x}, \bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$ $x + \frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{x} + \frac{1}{2}$ $\bar{x} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}, \bar{x} + \frac{1}{4}$ $\bar{x} + \frac{3}{4}, x + \frac{3}{4}, x + \frac{1}{4}$				no extra conditions	
16	d	$\dots \bar{3}m$	$\frac{5}{8}, \frac{5}{8}, \frac{5}{8}$ $\frac{3}{8}, \frac{7}{8}, \frac{1}{8}$ $\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}, \frac{7}{8}, \frac{1}{8}$ $\frac{7}{8}, \frac{1}{8}, \frac{3}{8}$ $\frac{5}{8}, \frac{5}{8}, \frac{5}{8}$	$\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{7}{8}$ $\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{7}{8}$ $\frac{5}{8}, \frac{5}{8}, \frac{5}{8}$			$hkl : h = 2n + 1$ or $h, k, l = 4n + 2$ or $h, k, l = 4n$	
16	c	$\dots \bar{3}m$	$\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$ $\frac{7}{8}, \frac{3}{8}, \frac{5}{8}$ $\frac{3}{8}, \frac{5}{8}, \frac{7}{8}$	$\frac{7}{8}, \frac{3}{8}, \frac{5}{8}$ $\frac{5}{8}, \frac{7}{8}, \frac{3}{8}$ $\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$	$\frac{5}{8}, \frac{7}{8}, \frac{3}{8}$ $\frac{3}{8}, \frac{5}{8}, \frac{7}{8}$ $\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}$			$hkl : h = 2n + 1$ or $h + k + l = 4$	
8	b	$\dots \bar{4}3m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ $\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$					
8	a	$\dots \bar{4}3m$	$0, 0, 0$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$					

Symmetry of special projectionsAlong [001] $p4mm$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{2}(\mathbf{a} - \mathbf{b})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{2}(\mathbf{a} + \mathbf{b})$

Origin at 0, 0, z

Along [111] $p6mm$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{3}(2\mathbf{a} - \mathbf{b} - \mathbf{c})$ $\mathbf{b}' = \frac{1}{3}(-\mathbf{a} + 2\mathbf{b} - \mathbf{c})$

Origin at x, x, x

Along [110] $c2mm$ $\mathbf{a}' = \frac{1}{2}(-\mathbf{a} + \mathbf{b})$ $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$ Origin at x, x, $\frac{1}{2}$

§ § 結晶による波の回折条件

§ 波の回折

結晶中の原子間距離 $\sim 10^{-8} \text{ cm} = 1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$

これと同程度、又はそれ以下の波長の波で回折現象は顕著となる。

X線 $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ 電磁波 電界－電子 クーロン相互作用

熱中性子 $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ 物質波 中性子－原子核 磁気モーメント

電子線 $\lambda \sim 0.05 \sim 0.01 \text{ \AA}$ 物質波 電子－原子の電子＋原子核 クーロン相互作用

物質波： ド・ブロイ $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$ h : プランク定数 (3)

$d \sin \gamma = \lambda$ において、 $d = 0.2 \text{ nm}$ として回折角 γ を計算すると、

電子線の場合： $\gamma = \sin^{-1} \frac{\lambda}{d} \approx \frac{\lambda}{d} = \frac{0.001 \text{ nm}}{0.2 \text{ nm}} = 0.0005 \text{ rad} = 0.29^\circ \rightarrow \text{前方散乱} \rightarrow \text{透過型電子顕微鏡}$

X線の場合： $\gamma \approx \frac{\lambda}{d} = \frac{0.154 \text{ nm}}{0.2 \text{ nm}} = 0.879 \text{ rad} = 50.3^\circ \rightarrow \text{正確な角度測定} \rightarrow \text{正確な格子定数}$

§ ラウエ条件

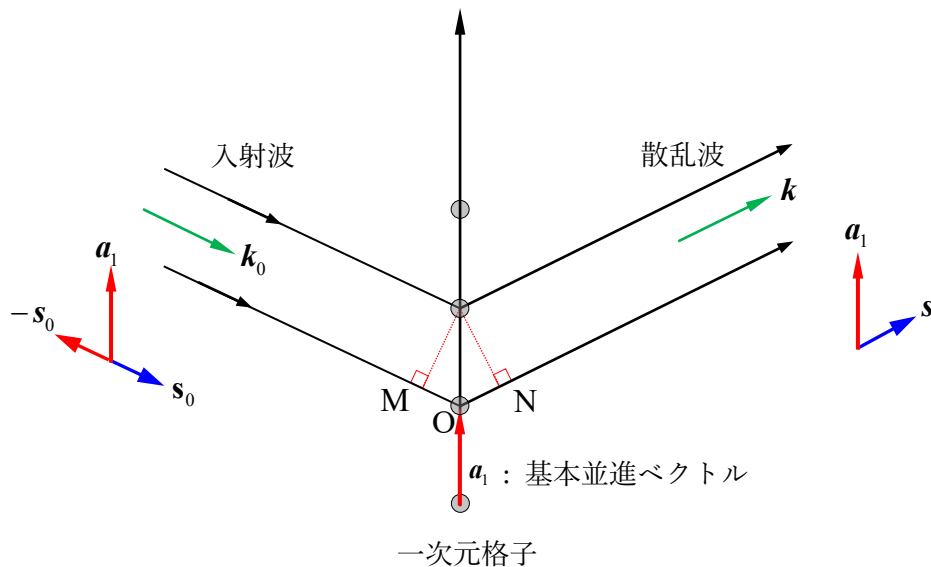
入射波の波数ベクトルを \mathbf{k}_0 , 散乱波の波数ベクトルを \mathbf{k} とする. もちろん $|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}| = \frac{1}{\lambda}$, λ は波長である.

● 一次元

波の行路差: Δ が波長 λ の整数 n 倍の時に散乱波は強め合う

$\mathbf{s}_0 = \lambda \mathbf{k}_0$ 及び $\mathbf{s} = \lambda \mathbf{k}$ は単位ベクトル

$$\Delta = \overline{OM} + \overline{ON} = (-\mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{a}_1 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{a}_1 = (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{a}_1 = n\lambda$$



● 三次元

\mathbf{a}_1 以外の $\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ についても同様の条件となるので,

3つの独立な条件が, 同時に満足される向きに波は強く回折する.

$$(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{a}_1 = h\lambda$$

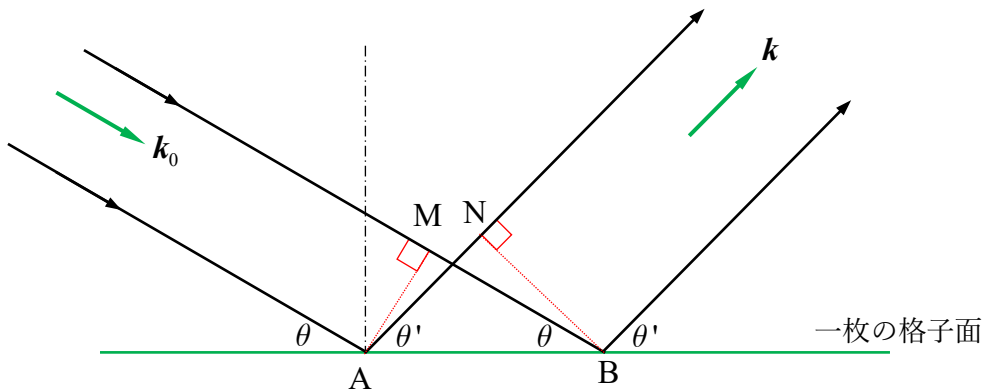
$$(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{a}_2 = k\lambda$$

$$(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{a}_3 = l\lambda \quad \text{ここで } h, k, l \text{ は整数} \quad (4)$$

↑ ラウエ条件 かなり厳しい条件!!

§ ブラッグ条件

回折を格子面からの反射と考えて回折条件の別な表現を与えることができる。

● 一枚の格子面からの反射 → $\theta = \theta'$ 

格子面と入射波の進行方向のなす角を θ とする。

鏡面反射の方向に散乱される波は位相が同じで必ず強め合う。

$$\therefore \text{行路差} : \Delta = \overline{AN} - \overline{BM} = \overline{AB}(\cos \theta' - \cos \theta) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \theta = \theta'$$

即ち $\theta = \theta'$ の時には \overline{AB} の大小にかかわらず行路差は常にゼロとなり必ず強め合う。

● 平行な格子面からの反射 → $2d \sin \theta = \lambda$

ある格子面と平行で面間隔 d 隔てた格子面からの反射波も同様に反射する

$$\text{行路差} : \Delta = \overline{OA} + \overline{OB} = 2d \sin \theta = n\lambda \quad \text{ここで } n \text{ は整数} \quad \text{Bragg 条件} \quad (5)$$

の時に 2 枚の格子面からの反射波の位相はそろって強め合う。

