

原 著

空間群 $P\bar{1}$ における楕円体の最密充填

谷 口 友 彦

四條畷学園大学 リハビリテーション学部

キーワード

最密充填, 楕円体, $P\bar{1}$, 接触環境, 層構造

要 旨

空間群 $P\bar{1}$ (三斜晶系) に属する単位格子内に 1 個の楕円体をもった場合の最密充填構造を, マイクロソフト社製 Excel と VBA を使って調べた. 最大充填率 74.05% を与える 16 種の楕円体が存在する. これらの楕円体は異なった接触環境にあり, いずれも 12 個の楕円体と接触している. 接触環境は格子軸の変換によって特定の接触環境に変えることができる. 接触環境を層の積み重ねからみると, 積み重ね方に 2 つのタイプがある. 第 1 のタイプは層内において 6 個の楕円体と接触した楕円体が上の層と下の層とでそれぞれ 3 個の楕円体と接触し, 第 2 のタイプは層内で 4 個の楕円体と接触した楕円体が上の層と下の層とでそれぞれ 4 個の楕円体と接触している.

1. はじめに

昭和 20 年代後半, パチンコゲームが大衆娯楽の市民権を確立しようとした頃, 遊技者の獲得した玉を数える道具として, 図 1 に示すような菱形の枡を使い, 例えば, 38 個の球を数える場合, 先ず枡の側壁に沿って 10 個の球を並べる. 次に, 並べた球の列に沿って現われる凹んだ部分に隙間のないように順次はめ込み, 2 列目の球を 10 個並べる. 同様にして 3 列目, 4 列目と並べて行き, 最後の 4 列目を満たすには 2 個足りないことから球数が 38 個であると数えた. 図 2 は並べた球の 1 部を模式的に示したもので, 球は壁面に沿った方向 (y 方向とする) に加え, 横方向 (x 方向とする) にも互いに接触して連

なり, その周期は x 方向と y 方向のいずれも球の半径の 2 倍となっている. ここで, x 方向と y 方向に連なった球の中心を繋ぐと図 2 の点線に示すような網目ができ, これに平行な球の層を考える.

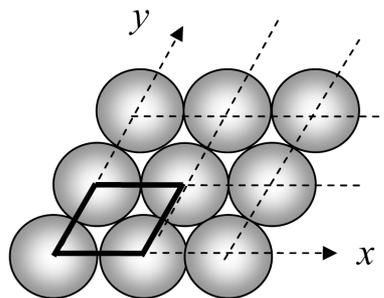


図 2 平面内での最も密な球の配列

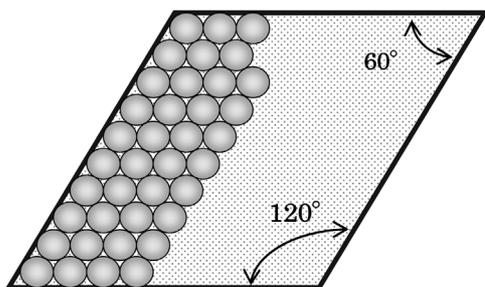


図 1 パチンコ玉の数を数える枡

次に, 先の層にこれと同じ層を隙間が最も少なくなるように重ねる. この操作を一定の方向 (z 方向) に沿って繰り返す. 図 3 は 3 層積み重ねたときの様子を示したものである. 図 4 は図 3 に示した配列の基本単位を取り出したもので, 8 個の球が菱面体と呼ばれる平行六面体を形成する. この平行六面体を単位格子とし, 格子軸の軸変換により立方最密構造としてよく知られている面心

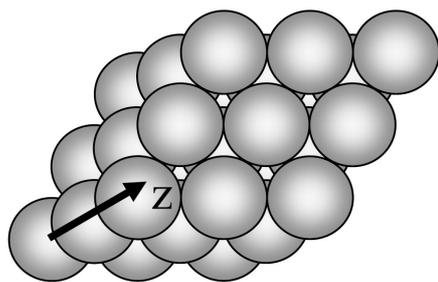


図3 3層重ねたときの球の配列

立方格子となり、例えば、金、銀、銅、アルミニウムなどの結晶構造でよく知られている。

図4に示す平行六面体を三斜晶系に属する格子と捉え、単位格子の格子軸をベクトル a, b, c とし、軸長を a, b, c で表し、 b と c, c と a, a と b のなす軸角をそれぞれ α, β, γ で表す。図4に示した球の配列の場合、軸長は全て球の半径の2倍となり、軸角は全て 60° となる。ここで、球の半径を r とすると、単位格子の体積は $4\sqrt{2} \cdot r^3$ で与えられ、球の体積は $4\pi r^3/3$ で与えられるから単位格子内に含まれる球の数が1個であることより、充填率（球の体積÷単位格子の体積）は立方最密構造のもつ74.05%となる。

図5は、球が互いに接している部分の断面図で、左図は層内で球の接触する断面を表し、右図は層間で接触する断面を表している。X, Y, Zは球Oの中心に原点をもつ直交系の座標軸で、ab面に垂直にZ軸をとり、X軸とY軸はab面内にありX軸はaに平行である。ここで、層間距離を d とすると、図5左図は $Z=0$ に中心をもつ球の切断面で、層内の球の接触断面を表わし、右図はZ

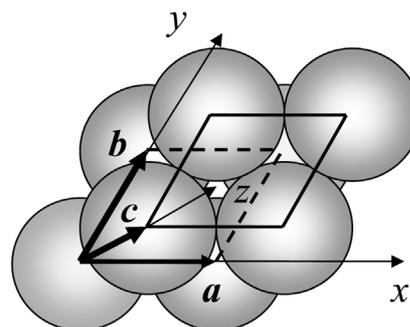


図4 層を重ねた場合の配列の基本単位（単位格子）と格子軸

$=d/2$ おける球の切断面で、層間の球の接触断面を表している。右図中、円Cは $Z=d$ に中心をもつ上層の球の切断面を、また、これら以外の円は $Z=0$ に中心をもつ球の切断面を表している。層内接触断面において円Oは周りの6個の円と接触し、周りの6個の円も互いに接触している。格子の断面積に対する球の断面積の比は90.69%と極めて高い密度を示している。このことより層内では、球Oが周りの6個の球と極めて密に取り囲まれていることが分かる。

次に、層間接触断面 ($Z=d/2$ の面) では、 $Z=0$ に中心をもつ球は、 $Z=d$ に中心をもつ上の層の3個の球で挟まれ、上層の球は $Z=0$ の層にある3個の球に挟まれているが、図中Bと記した部分に空孔が現われる。この位置は、立方最密構造の格子軸の中間位置に相当し、例えば、NaClの結晶のような場合、球を Cl^- イオンとすると Na^+ イオンはBで示した空孔に配置する。この空孔の存在によって、層間接触断面では格子の断面積に対する

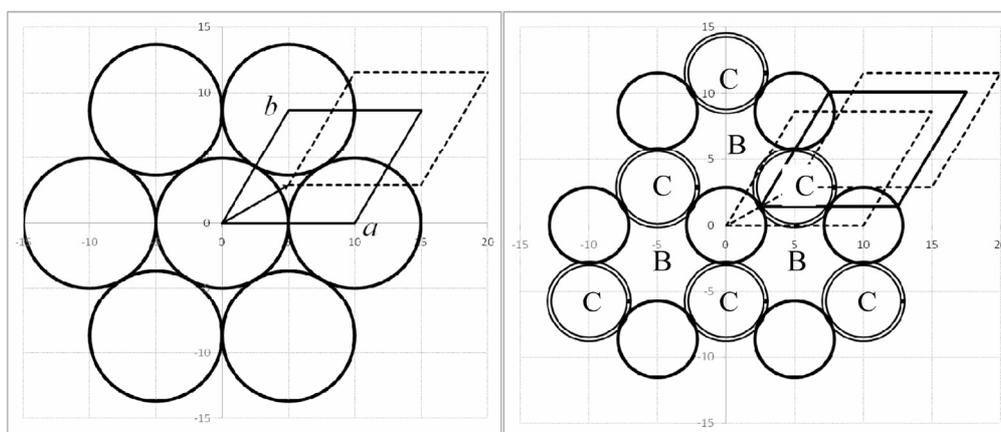


図5 層内の球の接触断面(左図)と層間の接触断面(右図) 実線の菱形はいずれも接触断面における格子の切断面である。Cは上層の球の切断面を、Bは空孔を表す。

球の断面積の比は 60.46%と層内接触断面に比べ可なり小さくなっている。

ここでは、与えられた三斜晶系に属する格子に同じ配向をもつ楕円体を詰め込みそのときの最密充填構造について、マイクロソフト社製の Excel および VBA (Visual Basic for Application) を使って調べた結果について報告する。

2. 楕円体の最密充填構造を求めるアルゴリズム

同じ配向をもつ楕円体が、 x 軸、 y 軸、 z 軸方向に沿ってそれぞれ a 、 b 、 c の周期で互いに接触して連なっているものとする。この配列から得られる単位格子の格子軸を表すベクトルを a 、 b 、 c とし、格子の軸長を a 、 b 、 c 、軸角を α 、 β 、 γ で表す (図 6 参照)。また、楕円体の中心を格子の原点に置くと、楕円体自身に対称心を有していることからこの楕円体の作る構造は空間群 $P\bar{1}$ に属する。この空間群のもつ対称要素は対称心のみで、その位置を図 7 に示した。

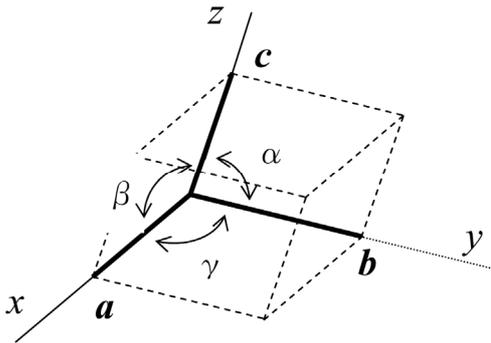


図 6 斜交座標軸 x, y, z と単位格子の格子軸 a, b, c 、軸角 α, β, γ の関係

格子の原点にある楕円体 ϵ_0 を次式のように表す。

$$\epsilon_0 = Ax^2 + By^2 + Cz^2 + 2Dxy + 2Eyz + 2Fzx - 1 = 0 \quad (1)$$

ここに、 A, B, C, D, E, F は楕円体を表す定数である。この楕円体に対して、 x 方向、 y 方向、 z 方向にそれぞれ p, q, r 、だけ平行移動した楕円体の式を次のように表わす。

$$\begin{aligned} \epsilon = & A(x-p)^2 + B(y-q)^2 + C(z-r)^2 + 2D(x-p) \\ & \times (y-q) + 2E(y-q)(z-r) + 2F(z-r)(x-p) \\ & - 1 = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

これら 2 つの楕円体が接触するための条件は次式で与えられる¹⁾。

$$Ap^2 + Bq^2 + Cr^2 + 2Dpq + 2Eqr + 2Frp - 4 = 0 \quad (3)$$

このとき、二つの楕円体の接点座標は、 $(p/2, q/2, r/2)$ で与えられ、この座標は(1)式より楕円体 ϵ_0 の表面上の一点であることが分かる。また、楕円体 ϵ_0 の中心を原点に置いているため、 p, q, r は格子点の位置を指し、楕円体の接点は格子点の間にある対称心の位置と一致する (図 7 参照)。表 1 に楕円体 ϵ_0 の周りにおける接触可能な楕円体を示した。ただし、対称心で関係づけられるも

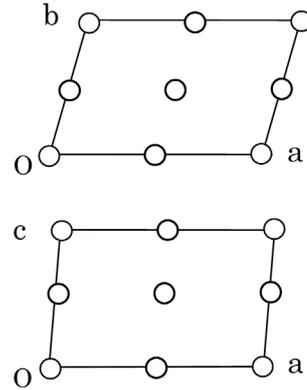


図 7 空間群 $P\bar{1}$ における対称要素 O は対称心を表す。
 ab 面内の対称心位置 (上図)、と ac 面内の対称心位置 (下図)

のは除いてある。

x 方向、 y 方向、 z 方向に連なる楕円体がそれぞれの方向で互いに接触していることから、楕円体 ϵ_0 に対して、 x 方向に a だけ平行移動した楕円体 $\epsilon(a, 0, 0)$ との接点は、 $x=a/2, y=z=0$ で与えられる対称心の位置と一致する。したがって 2 つの楕円体が接触する条件は(3)式より $Aa^2=4$ となり、 $A=(2/a)^2$ を得る。同様に、 y 方向に b だけ平行移動した楕円体 $\epsilon(0, b, 0)$ との接点は、 $y=b/2, x=z=0$ で与えられる対称心の位置と一致し、接触条件は $Bb^2=4$ となり、 $B=(2/b)^2$ を得る。また、 z 方向に c だけ進んだ楕円体 $\epsilon(0, 0, c)$ との接点は、 $z=c/2, x=y=0$ で与えられる対称心の位置であり、接触条件は $Cc^2=4$ となり、 $C=(2/c)^2$ を得る。ここで、球の最密構造の場合と同様に、これら 3 つの楕円体が楕円体 ϵ_0 と必ず接触するという条件を入れると、 A, B, C の値は格子定数の軸長 a, b, c によって定まり、(3)式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} (2/a)^2 p^2 + (2/b)^2 q^2 + (2/c)^2 r^2 + 2Dpq + 2Eqr \\ + 2Frp - 4 = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、接触する楕円体として先の 3 つの楕円体の外に

4番目の楕円体として $\varepsilon(a, b, 0)$ を選ぶならば、楕円体 ε_0 との接点は $x=a/2, y=b/2, z=0$ で与えられる対称心の位置であり、接触条件は、(4)より $Dab=-2$ を得る。また、4番目に接触する楕円体に $\varepsilon(-a, b, 0)$ を選ぶならば、楕円体 ε_0 との接点は $x=a/2, y=b/2, z=0$ であり、接触条件は、(4)より $Dab=2$ を得る。楕円体の回転に寄与するパラメータの1つである D は Dab として、 $2 \geq Dab \geq -2$ の範囲内で値を選ぶことにする。 E, F についても同様に、 E は Ebc として $\varepsilon(0, b, c)$ と $\varepsilon(0, -b, c)$ とから $2 \geq Ebc \geq -2$ の範囲内を、また、 F は Fca として、 $2 \geq Fca \geq -2$ の範囲内を選ぶことにする。楕円体の回転に寄与するパラメータ D, E, F は、 $2 \geq Dab, Ebc, Fca \geq -2$ の範囲内で与えられる Dab, Ebc, Fca の値の組み合わせを作り、楕円体 ε_0 が表1に示した楕円体のいずれとも互いに交わらないという条件を充たす組を探し出し、この条件を充たす楕円体の体積より充填率の最も大きいものを見つけ出す。計算は、 Dab, Ebc, Fca のそれぞれについて-2~2までの値を64等分し、 $65 \times 65 \times 65$ 組の値について最大の充填率を与える組を探した。主たる計算はVBAで行い、計算結果はExcelのSheet上に表示

した。計算に要した時間は10分以内であった(プロセッサ: Intel社製 Core 2 1.83 GHz CPU, メモリ: 2GB)。

3. 計算結果

三斜晶系に属する単位格子は格子軸を選ぶ自由度が高いため、計算モデル作成は軸長に $a \geq b \geq c$ の条件を、また軸角に $90 \geq \alpha, \beta, \gamma > 0$ の条件を設けた。最大充填率は何れのモデルについても16個見つかり、その値は球の立方最密構造と同じ74.05%であった。表2に最大充填率を与える16個の楕円体定数の組を $Aa^2, Bb^2, Cc^2, Dab, Ebc, Fca$ の値で示した。この表より Dab, Ebc, Fca のいずれもが-2, 0, 2のいずれかの値であり、これらの値が格子の軸長、軸角に依存しないことも計算モデルより分かった。ここで、 $Dab=Ebc=Fca=|2|$ を与える4組をType 1とし、 $Dab=0, Ebc=Fca=|2|$ を与える4組をType 2、 $Ebc=0, Dab=Fca=|2|$ の4組をType 3、 $Dab=Ebc=|2|, Fca=0$ を与える4組をType 4とした。更に、各Typeの4組にはi, ii, iii, ivを付し、16種の楕円体についてType 1-i からType 4-ivまで名付けた。

表1 接触可能な楕円体

$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(a, b, 0)$	$\varepsilon(-a, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, 0, c)$
$\varepsilon(a, b, c)$	$\varepsilon(a, -b, c)$	$\varepsilon(-a, b, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, b, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$

()内は、 x, y, z 軸方向への楕円体の平行移動量を表す。

表2 最大充填率 74.05% を与える楕円体定数

	Aa^2	Bb^2	Cc^2	Dab	Ebc	Fca
Type 1- i	4.00	4.00	4.00	2.00	2.00	2.00
Type 1- ii	4.00	4.00	4.00	-2.00	2.00	-2.00
Type 1- iii	4.00	4.00	4.00	-2.00	-2.00	2.00
Type 1- iv	4.00	4.00	4.00	2.00	-2.00	-2.00
Type 2- i	4.00	4.00	4.00	0.00	2.00	2.00
Type 2- ii	4.00	4.00	4.00	0.00	2.00	-2.00
Type 2- iii	4.00	4.00	4.00	0.00	-2.00	2.00
Type 2- iv	4.00	4.00	4.00	0.00	-2.00	-2.00
Type 3- i	4.00	4.00	4.00	2.00	0.00	2.00
Type 3- ii	4.00	4.00	4.00	-2.00	0.00	-2.00
Type 3- iii	4.00	4.00	4.00	-2.00	0.00	2.00
Type 3- iv	4.00	4.00	4.00	2.00	0.00	-2.00
Type 4- i	4.00	4.00	4.00	2.00	2.00	0.00
Type 4- ii	4.00	4.00	4.00	-2.00	2.00	0.00
Type 4- iii	4.00	4.00	4.00	-2.00	-2.00	0.00
Type 4- iv	4.00	4.00	4.00	2.00	-2.00	0.00

表3 計算例1：最大充填率74.05%を与える楕円体

格子定数： $a=13.000\text{\AA}$ $b=10.000\text{\AA}$ $c=7.000\text{\AA}$ $\alpha=75.0^\circ$ $\beta=80.0^\circ$ $\gamma=85.0^\circ$
 計算時間：7'42" Dab, Ebc, Fca の組数：65×65×65 ($2 \geq Dab, Ebc, Fca \geq -2$)

	主軸の長さ			体積	表面積比
	L_1	L_2	L_3		
Type 1- i	8.157	5.431	3.451	640.4	1.128
Type 1- ii	9.064	5.459	3.090		1.209
Type 1- iii	8.646	6.334	2.792		1.226
Type 1- iv	8.385	6.900	2.642		1.247
Type 2- i	8.502	5.194	3.462		1.147
Type 2- ii	9.092	5.381	3.125		1.207
Type 2- iii	8.838	6.135	2.819		1.230
Type 2- iv	10.410	5.431	2.704		1.349
Type 3- i	9.929	4.687	3.285		1.261
Type 3- ii	11.403	4.353	3.079		1.413
Type 3- iii	10.044	4.731	3.217		1.274
Type 3- iv	10.170	5.094	2.951		1.302
Type 4- i	9.275	4.824	3.417		1.203
Type 4- ii	9.497	4.786	3.364		1.222
Type 4- iii	10.841	4.993	2.825		1.372
Type 4- iv	9.454	5.844	2.767		1.272

表4 計算例2：最大充填率74.05%を与える楕円体

格子定数： $a=8.000\text{\AA}$ $b=8.000\text{\AA}$ $c=8.000\text{\AA}$ $\alpha=60.0^\circ$ $\beta=60.0^\circ$ $\gamma=60.0^\circ$
 計算時間：9'07" DEF の組数：65×65×65 ($2 \geq Dab, Ebc, Fca \geq -2$)

	主軸の長さ			体積	表面積比
	L_1	L_2	L_3		
Type 1- i	4.000	4.000	4.000	260.1	1.000
Type 1- ii	7.727	4.000	2.071		1.334
Type 1- iii					1.082
Type 1- iv					1.250
Type 2- i					1.723
Type 2- ii	7.140	4.000	2.241		1.082
Type 2- iii					1.250
Type 2- iv					1.723
Type 3- i					1.082
Type 3- ii	7.140	4.000	2.241		1.723
Type 3- iii					1.250
Type 3- iv					1.082
Type 4- i					1.250
Type 4- ii	10.355	2.828	2.185		1.723
Type 4- iii					1.250
Type 4- iv					1.082
Type 4- v				1.250	

表5 16タイプの楕円体接触環境

Type 1-i	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$
Type 1-ii	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, b, 0)$	$\varepsilon(a, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$
Type 1-iii	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, b, 0)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, b, c)$
Type 1-iv	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(a, 0, c)$	$\varepsilon(0, b, c)$
Type 2-i	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$	$\varepsilon(-a, -b, c)$
Type 2-ii	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$	$\varepsilon(a, -b, c)$
Type 2-iii	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, b, c)$	$\varepsilon(-a, b, c)$
Type 2-iv	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, 0, c)$	$\varepsilon(0, b, c)$	$\varepsilon(a, b, c)$
Type 3-i	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(-a, b, c)$
Type 3-ii	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, b, 0)$	$\varepsilon(a, 0, c)$	$\varepsilon(a, b, c)$
Type 3-iii	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, b, 0)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(-a, -b, c)$
Type 3-iv	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(a, 0, c)$	$\varepsilon(a, -b, c)$
Type 4-i	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(0, -b, c)$	$\varepsilon(a, -b, c)$
Type 4-ii	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, b, 0)$	$\varepsilon(0, -b, c)$	$\varepsilon(-a, -b, c)$
Type 4-iii	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, b, 0)$	$\varepsilon(0, b, c)$	$\varepsilon(a, b, c)$
Type 4-iv	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(0, b, c)$	$\varepsilon(-a, b, c)$

表3は、一般的な三斜晶系に属する格子の計算例を示したもので、楕円体の主軸の長さ L_1, L_2, L_3 および体積、表面積比を表した。表面積比は楕円体の軸比を表す指標として、同じ体積をもつ球の表面積に対する比率で表した。この表から、16タイプの楕円体の体積は同じであるが、軸長、表面積比が全て異なることを示しており、同じ格子に最大充填率を与える楕円体が16種類あることが分かった。

表4は球の最密充填を与える格子定数の場合で、格子定数が $a=b=c=8\text{\AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=60^\circ$ と特殊な例である。このため解となる楕円体は11種類に減少した。特に、Type 1-i は $Aa^2=Bb^2=Cc^2=4$, $Dab=Ebc=Fca=2$ の場合で、楕円体の3つの主軸の長さが等しく、表面積比も1となることより球を表していることが分かる。これ以外のタイプは全て楕円体であった。

表5は、16種類の楕円体の充填について、楕円体 ε_0 に接触する楕円体を示したもので、全て6個の楕円体と接触しており、この6個の楕円体と対称心で関係づけられる楕円体を含めると、12個の楕円体と接触していることになる。接触する楕円体は各タイプによって異なり、例えば、Type 1-i と Type 1-ii の接触環境の違いをみると、前者の $\varepsilon(a, -b, 0)$ と $\varepsilon(-a, 0, c)$ がそれぞれ後者では $\varepsilon(a, b, 0)$ と $\varepsilon(a, 0, c)$ となり、この接触環境の違いが楕円体の形の違いとなって現れていると考えられる。

4. 最密充填における接触環境

三斜晶系に属する格子の格子軸の採り方に高い自由度をもつこと、および計算例2で得られた楕円体のうちの Type 1-i が球であることから16種の接触環境を Type 1-i を基準とし、これらの関連を調べてみた。表6は格子軸の変換による接触環境の変化を表したものである。表6(a)は元の格子軸のうち1軸の向きを逆向きに採った場合と格子軸のうちいずれか2軸を交換する場合で、これらの軸変換によって格子の形は変わらない。表6(b)は格子軸の1軸を対角方向に採る場合で、この変換によって格子の形が変わる。ここで、格子軸 a, b, c に対して変換後の格子軸を a', b', c' とし、これらの格子定数を $a', b', c', \alpha', \beta', \gamma'$ で表すことにする

まず、1軸の向きを逆向きに採った場合の接触環境の変化について調べる(表6(a)参照)。Type 1-ii で a 軸の向きを $a' = -a$ と逆向きに採ると、軸長に変化はないが、軸角 β' が β の補角 $180-\beta$ に、また γ' が γ の補角 $180-\gamma$ に変わり、格子定数は次のように与えられる。

$$a' = a, b' = b, c' = c,$$

$$a' = a, \beta' = 180-\beta, \gamma' = 180-\gamma$$

この軸変換によって接触する楕円体のうち $\varepsilon(a, b, 0)$ と $\varepsilon(a, 0, c)$ がそれぞれ $\varepsilon(-a, b, 0)$ と $\varepsilon(-a, 0, c)$ に変わり、対称心の関係にある楕円体を考慮すると Type 1-i と同じ接触環境に変わる。

表6 軸変換による接触環境の変化

(a) 軸変換によって格子が変わらない場合

接触環境	軸の反転*	接触環境	軸の交換	接触環境
Type 1- i				Type 1- i
Type 1- ii	T1			
Type 1- iii	T2			
Type 1- iv	T3			
Type 2- i				Type 2- i
Type 2- ii	T1			
Type 2- iii	T2			
Type 2- iv	T3			
Type 3- i		Type 3- i	$a'=c, b=b, c'=a$	Type 2- i
Type 3- ii	T1			
Type 3- iii	T2			
Type 3- iv	T3			
Type 4- i		Type 4- i	$a'=a, b=c, c'=b$	Type 2- i
Type 4- ii	T1			
Type 4- iii	T2			
Type 4- iv	T3			

* T1 : $a'=-a, b=b, c'=c$
 T2 : $a'=a, b=-b, c'=c$
 T3 : $a'=a, b=b, c'=-c$

(b) 軸変換によって格子が変わる場合

接触環境	軸変換	接触環境
Type 2- i	$a'=-a+c, b=b, c'=c$	Type 1- i
Type 3- i	$a'=a, b=a-b, c'=c$	
Type 4- i	$a'=a, b=b, c'=b-c$	

同様に, Type 1-iiiは, $b'=-b$ によって, 変換後の格子定数は次のように与えられ,

$$a' = a, b' = b, c' = c,$$

$$\alpha' = 180 - \alpha, \beta' = \beta, \gamma' = 180 - \gamma$$

この軸変換によって接触する楕円体のうち $\varepsilon(a, b, 0)$ と $\varepsilon(0, b, c)$ がそれぞれ $\varepsilon(a, -b, 0)$ と $\varepsilon(0, -b, c)$ に変わり, 対称心の関係にあるものを考慮すると Type 1- i と同じ接触環境に変わる.

また, Type 1-ivは, $c'=-c$ によって, 変換後の格子定数は次のように与えられ,

$$a' = a, b' = b, c' = c,$$

$$\alpha' = 180 - \alpha, \beta' = 180 - \beta, \gamma' = \gamma$$

この軸変換によって接触する楕円体のうち $\varepsilon(a, 0, c)$ と $\varepsilon(0, b, c)$ がそれぞれ $\varepsilon(a, 0, -c)$ と $\varepsilon(0, b, -c)$ に変わり, 対称心の関係にあるものを考慮すると Type 1-

i と同じ接触環境に変わる. 同様の軸変換を Type 2, Type 3, Type 4 に属する ii, iii, iv について行くと, これらの接触環境はそれぞれの属する i と同じ接触環境に変わる (表 6(a)参照).

次に, 格子軸の交換による接触環境の変化について調べる (表 6(a)参照). Type 3- i の格子軸について, a 軸と c 軸を $a'=c, c'=a$ のように交換すると格子定数は次のように与えられる.

$$a' = c, b' = b, c' = a,$$

$$\alpha' = \gamma, \beta' = \beta, \gamma' = \alpha$$

この軸変換によって接触する楕円体のうち $\varepsilon(a, 0, 0)$, $\varepsilon(0, 0, c)$, $\varepsilon(a, -b, 0)$, $\varepsilon(-a, b, c)$ は, それぞれ $\varepsilon(0, 0, a)$, $\varepsilon(c, 0, 0)$, $\varepsilon(0, -b, a)$, $\varepsilon(c, b, -a)$ に変わり, 対称心の関係にあるものを考慮すると Type 2- i と同じ接触環境に変わる.

Type 4-i は b 軸と c 軸を $\mathbf{b}' = \mathbf{c}$, $\mathbf{c}' = \mathbf{b}$ のように交換すると格子定数は次のように与えられる.

$$\begin{aligned} a' &= a, \quad b' = c, \quad c' = b, \\ \alpha' &= \alpha, \quad \beta' = \gamma, \quad \gamma' = \beta \end{aligned}$$

この軸変換によって接触する楕円体のうち $\varepsilon(0, b, 0)$, $\varepsilon(0, 0, c)$, $\varepsilon(a, -b, 0)$, $\varepsilon(a, -b, c)$ がそれぞれ $\varepsilon(0, 0, b)$, $\varepsilon(0, c, 0)$, $\varepsilon(a, 0, -b)$, $\varepsilon(a, c, -b)$ に変り, 対称心の関係にあるものを考慮すると Type 2-i と同じ接触環境に変わる.

ここまで述べてきた接触環境の変化は, 軸変換によって単位格子の形に変化を与えなかった. このため変換された格子定数により得られる最密充填を与える 16 の楕円体は, 格子軸の変換に伴う接触環境の違いは認められるが, 元の格子から得られるものと全て同じであった.

表 6(b) に示すように, 格子軸のうち 1 軸を対角方向に採るような軸変換の場合, 単位格子の形に変化が現れる. まず, Type 2-i の場合, 1 軸を $\mathbf{a}' = -\mathbf{a} + \mathbf{c}$ に採り, 他の 2 軸については元の $\mathbf{b}' = \mathbf{b}$, $\mathbf{c}' = \mathbf{c}$ を採った場合, 変換後の格子軸は次のように与えられる.

$$\begin{aligned} a' &= |-\mathbf{a} + \mathbf{c}|, \quad b' = b, \quad c' = c, \\ \alpha' &= \alpha, \quad \beta' = \cos^{-1}[(-a \cdot \cos \beta + c) / a'], \\ \gamma' &= \cos^{-1}[-a \cdot \cos \gamma + c \cdot \cos \alpha] / a' \end{aligned}$$

ここに, $|-\mathbf{a} + \mathbf{c}|$ はベクトル $-\mathbf{a} + \mathbf{c}$ の絶対値を表し, このベクトルの大きさは次のように与えられる.

$$|-\mathbf{a} + \mathbf{c}| = (a^2 + c^2 - 2 a c \cos \beta)^{1/2}$$

この格子定数に対して表 5 に示す 6 個の接触楕円体 $\varepsilon(a, 0, 0)$, $\varepsilon(0, b, 0)$, $\varepsilon(0, 0, c)$, $\varepsilon(-a, 0, c)$, $\varepsilon(0, -b, c)$, $\varepsilon(-a, -b, c)$ は, それぞれ $\varepsilon(a', 0, 0)$, $\varepsilon(0, b', 0)$, $\varepsilon(0, 0, c')$, $\varepsilon(a', 0, 0)$, $\varepsilon(0, -b', c')$, $\varepsilon(a', -b', 0)$ に変り, Type 1-i と同等の接触環境を得る.

また, Type 3-i の場合, 格子軸を $\mathbf{b}' = \mathbf{a} - \mathbf{b}$ に採り, 他の 2 軸を元の軸のままにすると, 変換後の格子定数は次のように与えられる

$$\begin{aligned} a' &= a, \quad b' = |\mathbf{a} - \mathbf{b}|, \quad c' = c, \\ \alpha' &= \cos^{-1}[(a \cdot \cos \beta - b \cdot \cos \alpha) / b'], \quad \beta' = \beta, \\ \gamma' &= \cos^{-1}[(a - b \cdot \cos \gamma) / b'] \end{aligned}$$

ここに, $|\mathbf{a} - \mathbf{b}|$ はベクトル $\mathbf{a} - \mathbf{b}$ の絶対値で, このベクトルの大きさは次式で与えられる.

$$|\mathbf{a} - \mathbf{b}| = (a^2 + b^2 - 2 a b \cos \gamma)^{1/2}$$

この格子定数に対する Type 3-i にみられる接触楕円体 $\varepsilon(a, 0, 0)$, $\varepsilon(0, b, 0)$, $\varepsilon(0, 0, c)$, $\varepsilon(a, -b, 0)$, $\varepsilon(-a, 0, c)$, $\varepsilon(-a, b, c)$ は, それぞれ $\varepsilon(a', 0, 0)$,

$\varepsilon(a', -b', 0)$, $\varepsilon(0, 0, c')$, $\varepsilon(0, b', 0)$, $\varepsilon(-a', 0, c')$, $\varepsilon(0, -b', c')$ に変り, Type 1-i と同等の接触環境を得る.

同様に, Type 4-i の場合, 格子軸を $\mathbf{c}' = \mathbf{b} - \mathbf{c}$ に採り, 他の 2 軸を元の軸のままにすると, 変換後の格子定数は次のように与えられる

$$\begin{aligned} a' &= a, \quad b' = b, \quad c' = |\mathbf{b} - \mathbf{c}|, \\ \alpha' &= \cos^{-1}[(b - c \cdot \cos \alpha) / c'], \\ \beta' &= \cos^{-1}[(b \cdot \cos \gamma - c \cdot \cos \beta) / c'], \quad \gamma' = \gamma \end{aligned}$$

ここに, $|\mathbf{b} - \mathbf{c}|$ はベクトル $\mathbf{b} - \mathbf{c}$ の絶対値で, このベクトルの大きさは次式で与えられる.

$$|\mathbf{b} - \mathbf{c}| = (b^2 + c^2 - 2 b c \cos \alpha)^{1/2}$$

この格子定数に対する Type 4-i にみられる接触楕円体 $\varepsilon(a, 0, 0)$, $\varepsilon(0, b, 0)$, $\varepsilon(0, 0, c)$, $\varepsilon(a, -b, 0)$, $\varepsilon(0, -b, c)$, $\varepsilon(a, -b, c)$ はそれぞれ $\varepsilon(a', 0, 0)$, $\varepsilon(0, b', 0)$, $\varepsilon(0, b', -c')$, $\varepsilon(a', -b', 0)$, $\varepsilon(0, 0, c')$, $\varepsilon(a', 0, c')$ に変り, 軸変換によって Type 1-i と同等の接触環境を得る.

Type 2-i, Type 3-i, Type 4-i から Type 1-i への接触環境の変化が元の格子に対して 1 軸を対角方向に採ることにより実現するが, この場合, 格子の形が変わるため変換後の格子定数によって生ずる 16 の楕円体に元の格子と異なった楕円体が現われた. 以上のことから, Type 1 に見られる 4 つの接触環境と Type 2, Type 3, Type 4 に見られる 12 の接触環境とは与えられた格子に対して互いに独立したものであると考えられる.

5. 層構造からみた接触環境

4 で述べたように楕円体の接触環境が, Type 1 に属するものと他の Type 2, Type 3, Type 4 に属するものとは独立したものと考え, この違いを楕円体の作る層の積み重ねから調べた. 表 7 は, 表 5 に示した接触楕円体を層構造の考えから対称心で関係づけられる楕円体を考慮して再編成したものである. この表に掲げた ab-層, bc-層, ca-層はそれぞれ次のように定めた. ab-層は a 軸と b 軸の作る平面に平行な層を表し, bc-層は b 軸と c 軸の作る平面に平行な層を, また ca-層は c 軸と a 軸の作る平面に平行な層を表す. 表 7 は, Type 1-i, Type 2-i, Type 3-i, Type 4-i について, ab-層, bc-層, ca-層に分け, それぞれの層について層内と層間で接触する楕円体を示した.

Type 1-i の充填を ab-層の重なりから楕円体の接触をみると, 層内では表 7 に示した 3 個の楕円体とこれら

表7 各層からみた楕円体の層内および層間接触環境

	層内接触楕円体			上層との接触楕円体		
Type 1- i						
ab-層	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$
bc-層	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(a, 0, -c)$
ca-層	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(-a, b, 0)$	$\varepsilon(0, b, -c)$
Type 2- i						
ab-層	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$		$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$ $\varepsilon(-a, -b, c)$
bc-層	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(a, 0, -c)$	$\varepsilon(a, b, -c)$
ca-層	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, b, -c)$	$\varepsilon(a, b, -c)$
Type 3- i						
ab-層	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(-a, b, c)$
bc-層	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$		$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(a, 0, -c)$ $\varepsilon(a, -b, -c)$
ca-層	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(-a, 0, c)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(-a, b, 0)$	$\varepsilon(-a, b, c)$
Type 4- i						
ab-層	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$	$\varepsilon(a, -b, c)$
bc-層	$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$	$\varepsilon(0, -b, c)$	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(a, -b, 0)$	$\varepsilon(a, -b, c)$
ca-層	$\varepsilon(a, 0, 0)$	$\varepsilon(0, 0, c)$		$\varepsilon(0, b, 0)$	$\varepsilon(-a, b, 0)$	$\varepsilon(0, b, -c)$ $\varepsilon(-a, b, -c)$

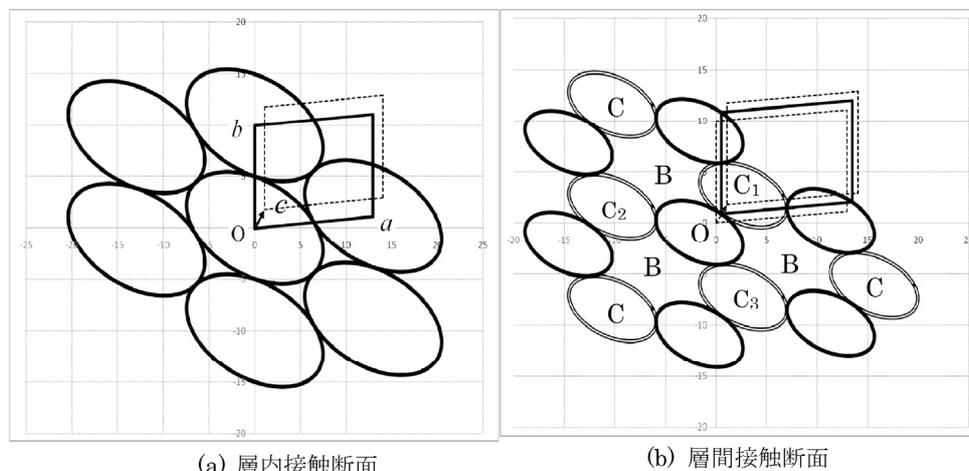


図8 Type 1- i の ab 層でみた楕円体の接触断面。 実線枠は接触断面における格子の切断面である。C および $C_{1\sim3}$ は上の層にある楕円体の切断面を、B は空孔を表す。

と対称心によって関係づけられる $\varepsilon(-a, 0, 0)$, $\varepsilon(0, -b, 0)$, $\varepsilon(-a, b, 0)$ の3個の計6個の楕円体のいずれとも接触している(図8(a)参照)。層間では表7に示した上の層にある3個とこれらと対称心で関係づけられる下の層の $\varepsilon(0, 0, -c)$, $\varepsilon(a, 0, -c)$, $\varepsilon(0, b, -c)$ で挟まれていることが分かる。図8(b)は上の層との層間接触断面を表わしたもので、C および $C_{1\sim3}$ は上の層の楕円体の切断面を表したもので、特に、 C_1 , C_2 , C_3 で表した楕

円はそれぞれ $\varepsilon(0, 0, c)$, $\varepsilon(-a, 0, c)$, $\varepsilon(0, -b, c)$ の切断面を表わしている。これら以外の楕円は層内の楕円体の切断面を表している。この図より、層内の楕円体が上の層の3個の楕円体に取り囲まれるように接触し、逆に、層内の3個の楕円体が上の層の楕円体を取り囲むように接触している。また、接触する2層内からそれぞれ3個ずつの楕円体が接触断面内で交互に接触して六員環を作り、その中央にBと記した空孔を作っている(図

8(b)参照)。この断面において格子枠の面積に対する楕円の占める割合が層内での90.69%に比べて60.46%と極めて小さくなっている。

また、bc-層の積み重ねから楕円体の接触をみると、層内では表7に示した3個と、これらと対称心で関係づけられる $\varepsilon(0, -b, 0)$, $\varepsilon(0, 0, -c)$, $\varepsilon(0, b, -c)$ の3個の計6個の楕円体で囲まれ、更に、層間ではこれも表7に示した上の層の3個と、これらと対称心で関係づけられる下の層の $\varepsilon(-a, 0, 0)$, $\varepsilon(-a, b, 0)$, $\varepsilon(-a, 0, c)$ で挟まれていることが分かる(表7参照)。

同様に、ca-層の積み重ねから楕円体の接触をみると、層内では表7に示した3個と、これらと対称心で関係づけられる $\varepsilon(-a, 0, 0)$, $\varepsilon(0, 0, -c)$, $\varepsilon(a, 0, -c)$ との6個で囲まれ、更に、層間ではこれも表7に示した上の層の3個と、これらと対称心で関係づけられる下の層の $\varepsilon(0, -b, 0)$, $\varepsilon(a, -b, 0)$, $\varepsilon(0, -b, c)$ で挟まれていることが分かる(表7参照)。以上のことより、Type 1-iでは、層の積み重ねからみた場合、何れの層からみても、層内では6個、層間では上の層の3個と下の層の3個の楕円体と接触し、合計12個の楕円体と接触することが分かった。また、Type 1に属する他のii, iii, ivもType 1-iと同様の層の接触関係をもっていることが分かった。

次に、Type 2-iの場合、bc-層およびca-層の重なりからみた楕円体の接触は、Type 1-iと同様に層内では

6個の楕円体と、また、層間では上層の3個とこれらと対称心で関係づけられる下層の3個とで接触している(表7参照)。しかし、ab-層の重なりから楕円体の接触をみると、層内では表7に示した2個にこれらと対称心によって関係づけられる $\varepsilon(-a, 0, 0)$, $\varepsilon(0, -b, 0)$ の2個の計4個の楕円体と接触して囲まれている(図9(a)参照)。層間では表7で示した上の層にある4個とこれらが対称心で関係づけられる下の層の $\varepsilon(0, 0, -c)$, $\varepsilon(a, 0, -c)$, $\varepsilon(0, b, -c)$, $\varepsilon(a, b, -c)$ で挟まれていることが分かる。図9(b)は上の層との層間接触断面を表しており、 C_1, C_2, C_3, C_4 で表した楕円はそれぞれ $\varepsilon(0, 0, c)$, $\varepsilon(-a, 0, c)$, $\varepsilon(0, -b, c)$, $\varepsilon(-a, -b, c)$ の切断面を表している。この図より層内の楕円体は上の層の4個によって取り囲まれるように接触し、逆に、層内の4個の楕円体が上層の楕円体を取り囲むように接触し、両層の楕円体が互いの窪みに挿し込んだ状態にある。また、Type 1-iのab-層の層間接触のような空孔は現れていない。この断面において格子枠の面積に対する楕円の占める割合は、層内および層間のいずれも78.54%であった。

Type 3-iをbc-層の重なりから、またType 4-iをca-層の重なりからみると、Type 2-iのab-層の重なりと同様に層内では4個の楕円体と接触し、層間では上層で4個と下層で4個と接触している。しかし、Type 2-iのab-層、Type 3-iのbc-層、Type 4-iのca-層以

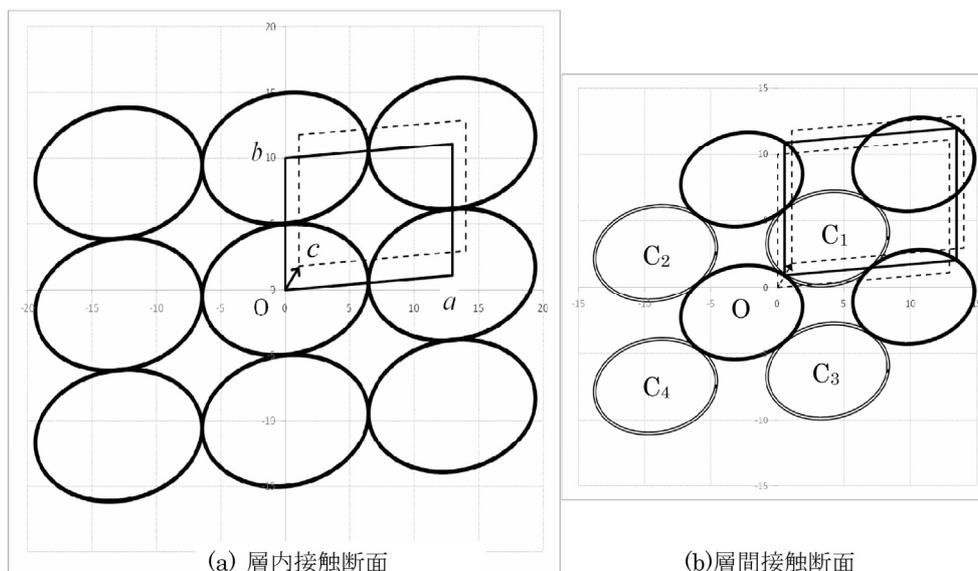


図9 Type 2-iのab層でみた楕円体の接触断面。実線枠は接触断面における格子の切断面である。 $C_1 \sim C_4$ は上の層にある楕円体の切断面を表す。

外の層の重なりからみると、いずれも層内で6個の楕円体と接触し、層間では上層と下層でそれぞれ3個の楕円体と接触し、上層と下層の楕円体は互いに対称心で関係づけられている。

以上のように16種の楕円体の充填構造を層構造からみた場合の楕円体の接触は、Type 1-iのab-層などでみられるように層内で6個の楕円体と接触した楕円体が層間では上層と下層でそれぞれ3個の楕円体と接触する型とType 2-iのab-層などでみられるように層内では4個のみの楕円体と接触し、層間でも上層と下層で4個ずつ接触する型のあることが分かった。

参考文献

1. Y. TAKAKI Mem Osaka Gakugei Univ. B14, 39-47(1965)

Closest Packing of Ellipsoid in Space Group $P\bar{1}$

Tomohiko Taniguchi

Shijonawate Gakuen University, Faculty of Rehabilitation

Key Words

Closest packing, ellipsoid, $P\bar{1}$, contact environment, layer structure

Abstract

The closest packing structure when having 1 ellipsoid in the unit cell which belongs to space group $P\bar{1}$ (Triclinic system), was checked using Excel made by Microsoft Corporation and VBA. 16 kinds of ellipsoid to which the closest packing rate 74.05% is given exist. These ellipsoids contact with 12 ellipsoids both in the different contact environments. It's possible to change the contact environment to the specific contact environment by a change in an axis of unit cell. When we look at the contact environments from stacking of layers, there are 2 types in stacking of layers. In the 1st type, the ellipsoid contacts with 6 ellipsoids in the layer and with 3 ellipsoids in an upper layer and a lower layer respectively. In the second type, the ellipsoid contacts with 4 ellipsoids in the layer and with 4 ellipsoids in an upper layer and a lower layer respectively.