琉球大学学術リポジトリ

ABC属，AB_2属，及びA_3属の結晶構造

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 琉球大学理学部 公開日: 2008-10-30 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 細谷, 将彦, Hosoya, Masahiko メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/20.500.12000/7710

ABC 属，AB_2属，及び A_3属の結晶構造

細谷　将彦

Crystal Structures of Genus ABC, AB_2, and A_3

Masahiko HOSOYA*

According to the classification principle of the crystal structures given in the previous paper (Masahiko HOSOYA : Bussei Kenkyu, **34** (1980) 297 (in Japanese)), enumeration of the species in genus ABC, AB_2, and A_3 is carried out. Their numbers are 44, 124, and 107 respectively. Atomic arrangements in the unit cells are shown in tables and figures for all the species.

以前の論文[1]で示した結晶構造の分類法に基き，ABC 属，AB_2属，及び A_3属の結晶構造の種を数え上げた。それぞれ44種，124種，及び107種となった。ABC 属の種の単位胞内の原子の配列を Table 1 と Fig. 1 に示す。同じく AB_2属については Table 2 と Fig. 2 に示す。A_3属についてはほとんどの種が AB_2属の種の A 原子と B 原子を同一視することによって得られるので，Table 3 にこの対応を示す。なおこの同一視によって A 属になるものもあるのでそれも掲げてある。A_3属のうちこの対応によっては得られない種だけを Table 4 と Fig. 3 に示す。

種の名称のつけ方は前の論文[1]の方法とほぼ同様であるが，次の二点だけがちがう。まず三つの記号（①自由度，②空間群の国際記号，③識別番号）の間の区切りを「・」（中黒）から「：」（コロン）に改めた。また③の番号のつけ方は研究者の自由にまかせず，次の規則によることにした。まず慣習的単位胞 1 個あたりの見かけの原子数（単位胞の内部及び境界面上の全ての原子の数）のより少ないものにより小さな番号を与える。この際境界面上の原子は等価なものも重復して数える。この数が同じならばその単位胞内で最も多く原子をのせている回転主軸上の原子数（これも境界面上のものは重復して数える）のより少ないものにより小さな番号を与える。これでも決着がつかなければ次に最も多く原子数をのせている回転主軸上の原子数で同様に判定し，以下これを続ける。なおこの際の単位胞は必らず頂点に A 原子をおき，他の原子の位置はこの番号をできるだけ小さくするように選ぶものとする。（この変更により前の論文[1]の AB 属の種 4・Pmm 2・1，4・Pmm 2・2，4・Pmm 2・3 はそれぞれ 4：Pmm2：2，4：Pmm 2：3，4：Pmm 2：1 という記号を与えられる。他の種は全て中黒がコロンに変わるだけである。）

これまでにわかった結果をまとめると結晶構造の分類表は Table 5 のようになる。

受付：1981年10月31日

* Dept. of Physics, University of the Ryukyus.

Table 1 Atomic positions in the conventional unit cells of the species in genus ABC. (Atom A is located at the origin.)

Species	B atom	C atom	Species	B atom	C atom
1 : $F\bar{4}3m$	(¼, ¼, ¼)	(¾, ¼, ¼)	4 : P2/m : 3	(½, 0, 0)	(½, ½, 0)
2 : $P\bar{6}m2$: 1	(⅓, ⅓, 0)	(⅔, ⅔, ½)	5 : Imm2 : 1	(0, ½, z_1)	(0, ½, z_2)
2 : $P\bar{6}m2$: 2	(⅓, ⅓, 0)	(⅓, ⅓, ½)	5 : Imm2 : 2	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
2 : $P\bar{6}m2$: 3	(⅓, ⅓, 0)	(⅔, ⅔, 0)	5 : Fmm2	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
2 : P4/mmm	(½, ½, 0)	(½, ½, ½)	5 : Amm2 : 1	(½, 0, z_1)	(½, 0, z_2)
2 : $I\bar{4}m2$	(0, ½, ¼)	(½, 0, ¾)	5 : Amm2 : 2	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
3 : Immm	(0, ½, 0)	(½, ½, 0)	5 : Cmm2 : 1	(½, 0, z_1)	(½, 0, z_2)
3 : Cmmm	(0, 0, ½)	(½, 0, ½)	5 : Cmm2 : 2	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
3 : Pmmm : 1	(½, ½, 0)	(½, ½, ½)	5 : Pmm2 : 1	(½, ½, z_1)	(½, ½, z_2)
3 : Pmmm : 2	(½, ½, 0)	(½, 0, ½)	5 : Pmm2 : 2	(½, 0, z_1)	(0, ½, z_2)
3 : Pmmm : 3	(½, 0, 0)	(½, 0, ½)	5 : Pmm2 : 3	(½, 0, z_1)	(½, 0, z_2)
3 : F222	(¼, ¼, ¼)	(¾, ¼, ¼)	5 : Pmm2 : 4	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
4 : P6mm	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)	6 : B2 : 1	(0, ½, z_1)	(0, ½, z_2)
4 : R3m	(x_1, x_1, x_1)	(x_2, x_2, x_2)	6 : B2 : 2	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
4 : P3m1 : 1	(⅓, ⅓, z_1)	(⅔, ⅔, z_2)	6 : P2 : 1	(½, ½, z_1)	(½, ½, z_2)
4 : P3m1 : 2	(⅓, ⅓, z_1)	(⅓, ⅓, z_2)	6 : P2 : 2	(0, ½, z_1)	(½, ½, z_2)
4 : I4mm	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)	6 : P2 : 3	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
4 : P4mm : 1	(½, ½, z_1)	(½, ½, z_2)	6 : $P\bar{1}$	(0, ½, ½)	(½, ½, ½)
4 : P4mm : 2	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)	8 : Bm	(x_1, y_1, 0)	(x_2, y_2, 0)
4 : B2/m	(0, ½, 0)	(½, ½, 0)	8 : Pm : 1	(x_1, y_1, ½)	(x_2, y_2, ½)
4 : P2/m : 1	(½, 0, ½)	(½, ½, ½)	8 : Pm : 2	(x_1, y_1, 0)	(x_2, y_2, 0)
4 : P2/m : 2	(½, ½, 0)	(½, ½, ½)	12 : P1	(x_1, y_1, z_1)	(x_2, y_2, z_2)

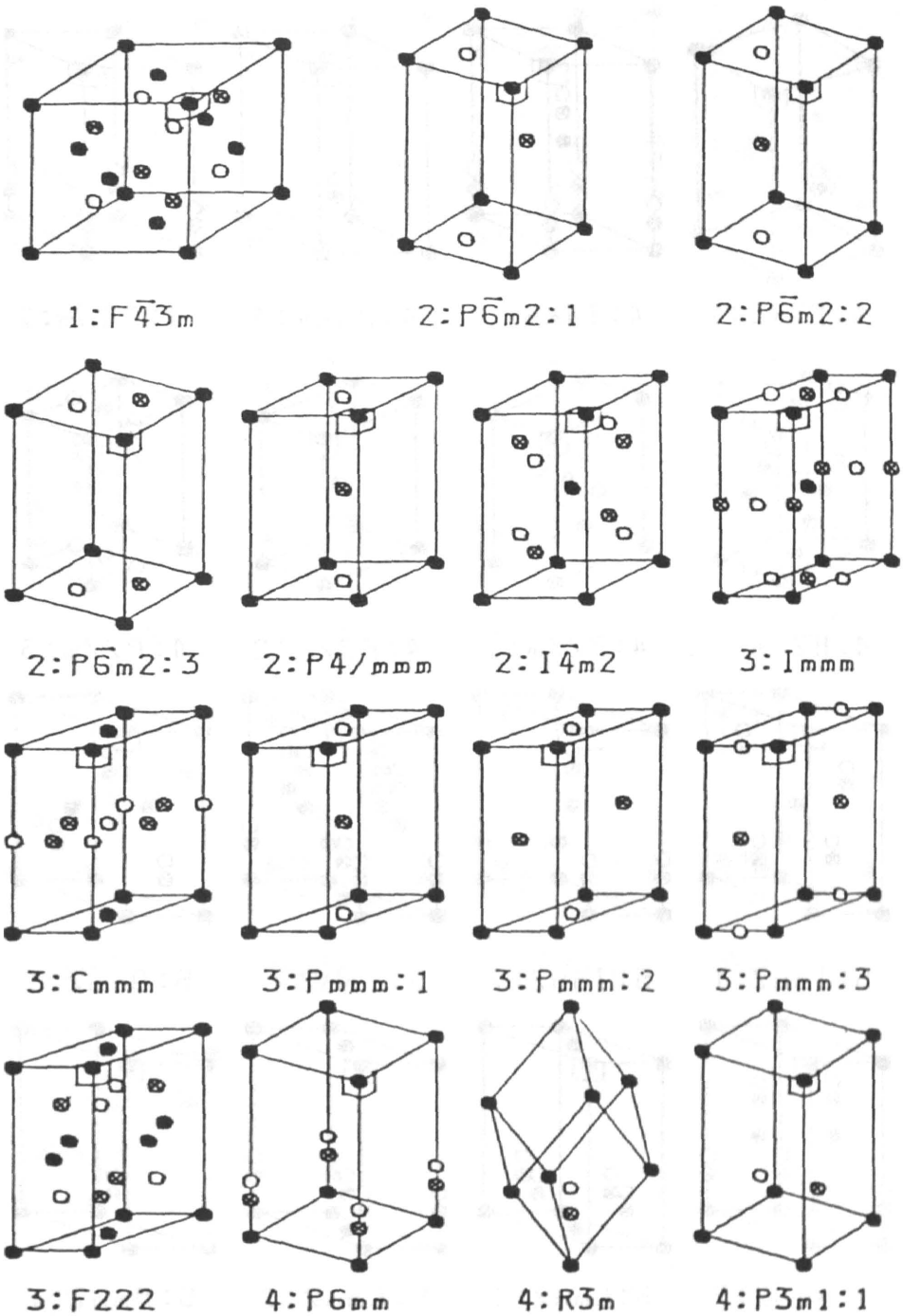

Fig. 1　Species in genus ABC.

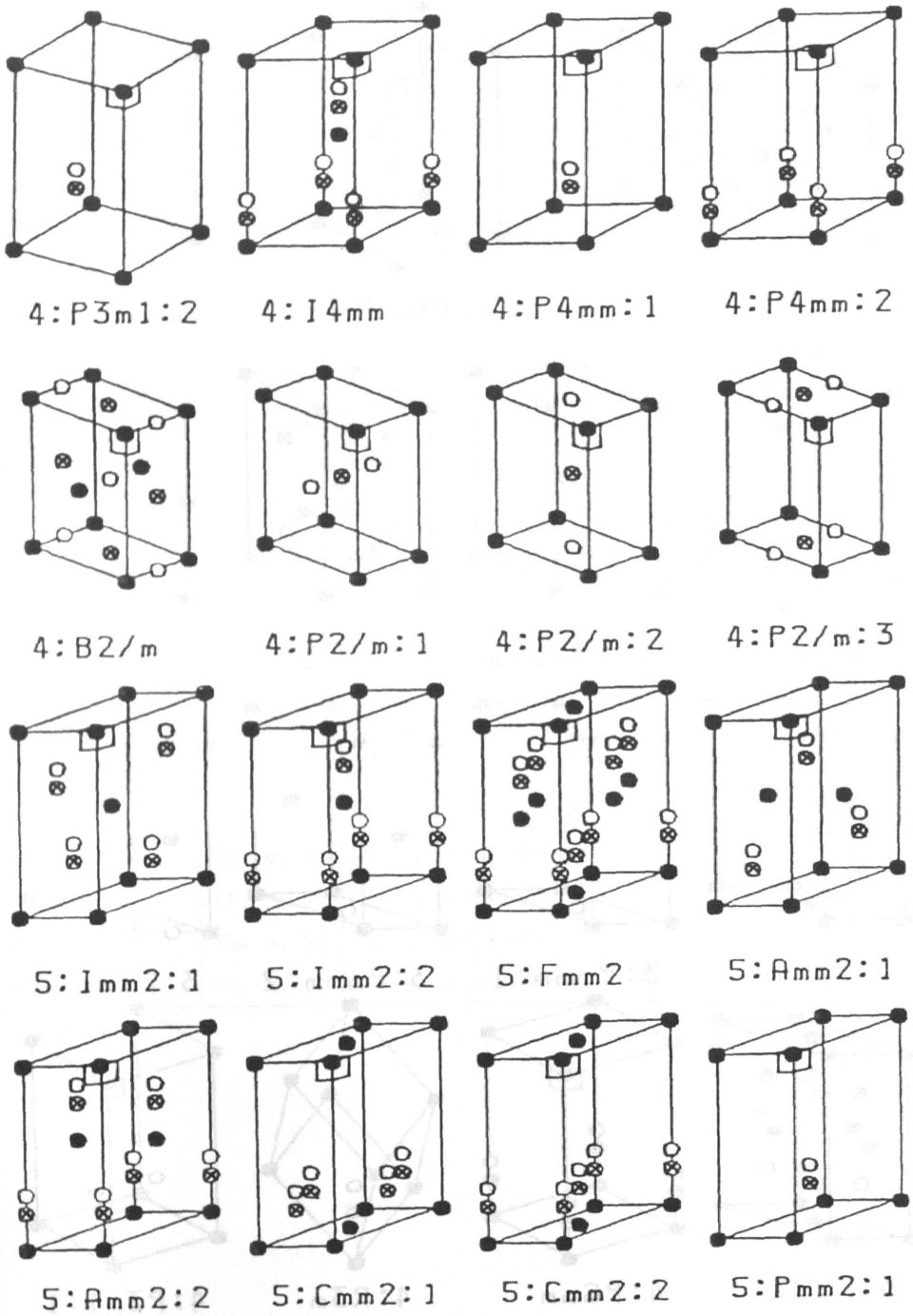

Fig. 1 (Continued)

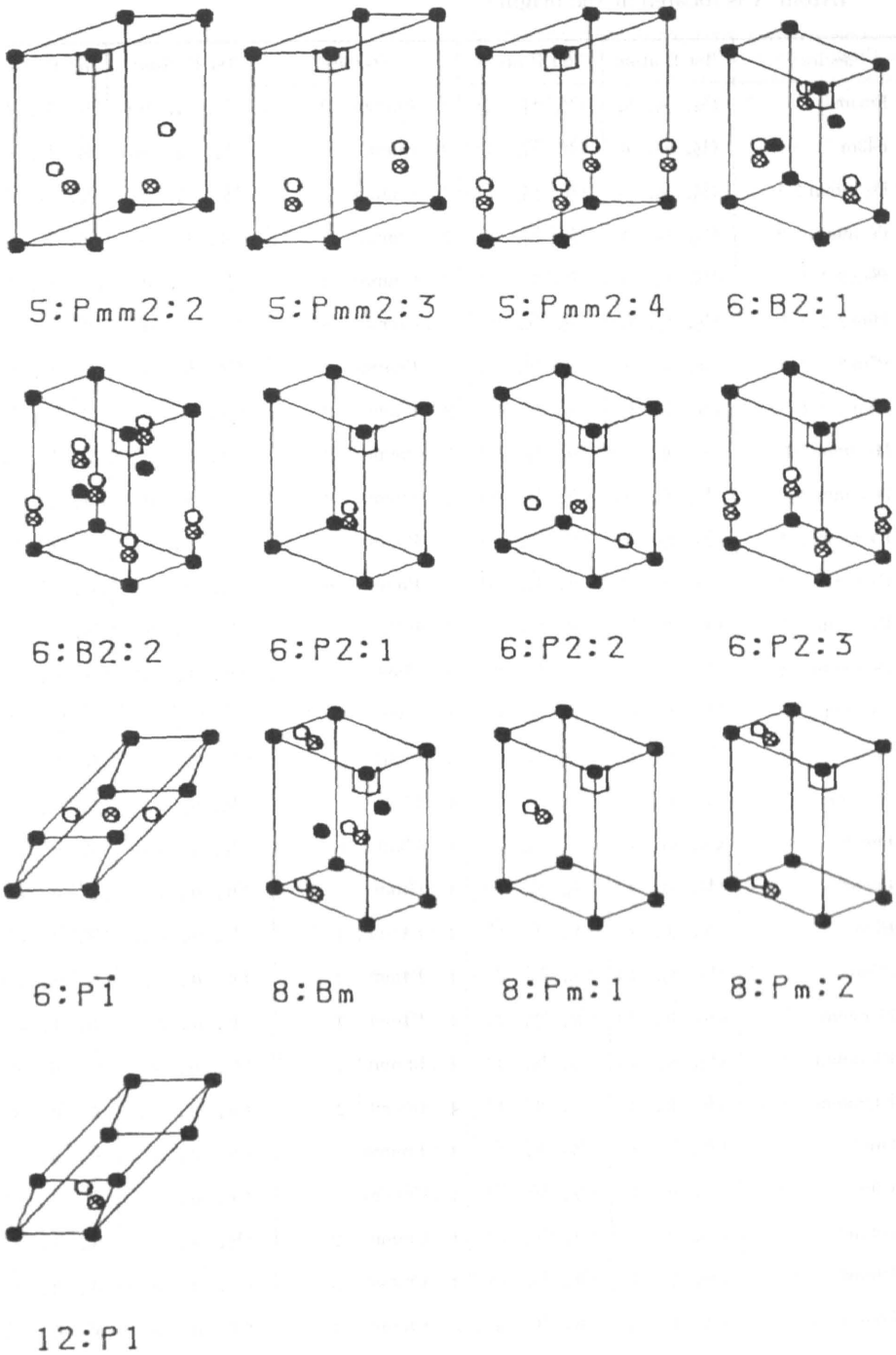

Fig. 1 (Continued)

Table 2 Atomic positions in the conventional unit cells of the species in genus AB_2. (Atom A is located at the origin.)

Species	1st B atom	2nd B atom	Species	1st B atom	2nd B atom
1 : Fm3m	(¼, ¼, ¼)	(¾, ¼, ¼)	3 : Fmmm : 2	(¼, ¼, 0)	(¾, ¼, 0)
1 : F$\bar{4}$3m	(½, ½, 0)	(¾, ¼, ¼)	3 : Cmmm : 1	(¼, ¼, ½)	(¾, ¼, ½)
2 : P6/mmm : 1	(⅓, ⅓, ½)	(⅔, ⅔, ½)	3 : Cmmm : 2	(¼, ¼, 0)	(¾, ¼, 0)
2 : P6/mmm : 2	(⅓, ⅓, 0)	(⅔, ⅔, 0)	3 : Cmmm : 3	(0, 0, ½)	(½, 0, ½)
2 : P$\bar{6}$m 2 : 1	(⅓, ⅓, 0)	(⅔, ⅔, ½)	3 : Cmmm : 4	(½, 0, 0)	(½, 0, ½)
2 : P$\bar{6}$m 2 : 2	(⅓, ⅓, 0)	(⅓, ⅓, ½)	3 : Cmmm : 5	(½, 0, 0)	(0, 0, ½)
2 : P$\bar{6}$m 2 : 3	(0, 0, ½)	(⅓, ⅓, ½)	3 : Pmmm : 1	(½, ½, 0)	(½, ½, ½)
2 : P$\bar{6}$m 2 : 4	(0, 0, ½)	(⅓, ⅓, 0)	3 : Pmmm : 2	(½, ½, 0)	(½, 0, ½)
2 : I4/mmm : 1	(½, 0, ¼)	(0, ½, ¼)	3 : Pmmm : 3	(0, 0, ½)	(½, ½, ½)
2 : I4/mmm : 2	(½, 0, 0)	(0, ½, 0)	3 : Pmmm : 4	(½, ½, 0)	(0, 0, ½)
2 : P4/mmm : 1	(½, ½, 0)	(½, ½, ½)	3 : Pmmm : 5	(½, 0, 0)	(½, 0, ½)
2 : P4/mmm : 2	(½, 0, ½)	(0, ½, ½)	3 : Pmmm : 6	(½, 0, 0)	(0, ½, 0)
2 : P4/mmm : 3	(0, 0, ½)	(½, ½, ½)	3 : F222	(½, 0, 0)	(¾, ¼, ¼)
2 : P4/mmm : 4	(0, 0, ½)	(½, ½, 0)	4 : P6mm	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
2 : P4/mmm : 5	(½, 0, 0)	(0, ½, 0)	4 : R3m	(x_1, x_1, x_1)	(x_2, x_2, x_2)
2 : I$\bar{4}$m2	(½, ½, 0)	(0, ½, ¼)	4 : P3m1 : 1	(⅓, ⅓, z_1)	(⅔, ⅔, z_2)
3 : P6/mmm	(0, 0, z)	(0, 0, $\bar{z}$)	4 : P3m1 : 2	(⅓, ⅓, z_1)	(⅓, ⅓, z_2)
3 : P$\bar{6}$m2	(⅓, ⅓, z)	(⅓, ⅓, $\bar{z}$)	4 : P3m1 : 3	(0, 0, z_1)	(⅓, ⅓, z_2)
3 : P6mm	(⅓, ⅓, z)	(⅔, ⅔, z)	4 : I4mm	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
3 : R$\bar{3}$m	(x, x, x)	($\bar{x}$, $\bar{x}$, $\bar{x}$)	4 : P4mm : 1	(½, ½, z_1)	(½, ½, z_2)
3 : P$\bar{3}$m1	(⅓, ⅓, z)	(⅔, ⅔, $\bar{z}$)	4 : P4mm : 2	(0, 0, z_1)	(½, ½, z_2)
3 : I4/mmm	(0, 0, z)	(0, 0, $\bar{z}$)	4 : P4mm : 3	(0, 0, z_1)	(0, 0, z_2)
3 : P4/mmm : 1	(½, ½, z)	(½, ½, $\bar{z}$)	4 : Immm : 1	(½, 0, z)	(½, 0, $\bar{z}$)
3 : P4/mmm : 2	(0, 0, z)	(0, 0, $\bar{z}$)	4 : Immm : 2	(0, 0, z)	(0, 0, $\bar{z}$)
3 : I$\bar{4}$m2	(0, ½, z)	(½, 0, $\bar{z}$)	4 : Fmmm	(0, 0, z)	(0, 0, $\bar{z}$)
3 : P$\bar{4}$m2	(½, 0, z)	(0, ½, $\bar{z}$)	4 : Cmmm : 1	(x, 0, ½)	($\bar{x}$, 0, ½)
3 : I4mm	(½, 0, z)	(0, ½, z)	4 : Cmmm : 2	(½, 0, z)	(½, 0, $\bar{z}$)
3 : P4mm	(½, 0, z)	(0, ½, z)	4 : Cmmm : 3	(0, 0, z)	(0, 0, $\bar{z}$)
3 : Immm : 1	(½, 0, ¼)	(0, ½, ¼)	4 : Cmmm : 4	(x, 0, 0)	($\bar{x}$, 0, 0)
3 : Immm : 2	(½, 0, 0)	(0, ½, 0)	4 : Pmmm : 1	(½, ½, z)	(½, ½, $\bar{z}$)
3 : Fmmm : 1	(¼, ¼, ¼)	(¾, ¼, ¼)	4 : Pmmm : 2	(½, 0, z)	(½, 0, $\bar{z}$)

Table 2　(Continued)

Species	1st B atom	2nd B atom	Species	1st B atom	2nd B atom
4 : Pmmm : 3	$(0, 0, z)$	$(0, 0, \bar{z})$	5 : Pmm2 : 4	$(x, 0, z)$	$(\bar{x}, 0, z)$
4 : Imm2	$(\frac{1}{2}, 0, z)$	$(0, \frac{1}{2}, z)$	5 : Pmm2 : 5	$(\frac{1}{2}, 0, z_1)$	$(0, \frac{1}{2}, z_2)$
4 : Fmm2	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z)$	$(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, z)$	5 : Pmm2 : 6	$(\frac{1}{2}, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, 0, z_2)$
4 : Cmm2	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z)$	$(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, z)$	5 : Pmm2 : 7	$(0, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z_2)$
4 : B2/m : 1	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	5 : Pmm2 : 8	$(0, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, 0, z_2)$
4 : B2/m : 2	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	5 : Pmm2 : 9	$(0, 0, z_1)$	$(0, 0, z_2)$
4 : P2/m : 1	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	5 : B2/m : 1	$(0, \frac{1}{2}, z)$	$(0, \frac{1}{2}, \bar{z})$
4 : P2/m : 2	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	5 : B2/m : 2	$(0, 0, z)$	$(0, 0, \bar{z})$
4 : P2/m : 3	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$	5 : P2/m : 1	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z})$
4 : P2/m : 4	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	5 : P2/m : 2	$(0, 0, z)$	$(0, 0, \bar{z})$
4 : P2/m : 5	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	6 : B2/m	$(x, y, 0)$	$(\bar{x}, \bar{y}, 0)$
4 : P2/m : 6	$(0, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$	6 : P2/m : 1	$(x, y, \frac{1}{2})$	$(\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2})$
5 : Imm2 : 1	$(x, 0, z)$	$(\bar{x}, 0, z)$	6 : P2/m : 2	$(x, y, 0)$	$(\bar{x}, \bar{y}, 0)$
5 : Imm2 : 2	$(\frac{1}{2}, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, 0, z_2)$	6 : B2 : 1	$(0, \frac{1}{2}, z_1)$	$(0, \frac{1}{2}, z_2)$
5 : Imm2 : 3	$(0, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, 0, z_2)$	6 : B2 : 2	$(0, 0, z_1)$	$(0, \frac{1}{2}, z_2)$
5 : Imm2 : 4	$(0, 0, z_1)$	$(0, 0, z_2)$	6 : B2 : 3	$(0, 0, z_1)$	$(0, 0, z_2)$
5 : Fmm2 : 1	$(x, 0, z)$	$(\bar{x}, 0, z)$	6 : P2 : 1	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z_1)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z_2)$
5 : Fmm2 : 2	$(0, 0, z_1)$	$(0, 0, z_2)$	6 : P2 : 2	$(\frac{1}{2}, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z_2)$
5 : Amm2 : 1	$(\frac{1}{2}, y, z)$	$(\frac{1}{2}, \bar{y}, \bar{z})$	6 : P2 : 3	$(0, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z_2)$
5 : Amm2 : 2	$(x, 0, z)$	$(\bar{x}, 0, \bar{z})$	6 : P2 : 4	$(0, 0, z_1)$	$(0, 0, z_2)$
5 : Amm2 : 3	$(\frac{1}{2}, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, 0, z_2)$	6 : $P\bar{1}$	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
5 : Amm2 : 4	$(0, y, z)$	$(0, \bar{y}, \bar{z})$	7 : Bm	(x, y, z)	$(x, y, \bar{z})$
5 : Amm2 : 5	$(0, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, 0, z_2)$	7 : Pm	(x, y, z)	$(x, y, \bar{z})$
5 : Amm2 : 6	$(0, 0, z_1)$	$(0, 0, z_2)$	7 : B2	(x, y, z)	$(\bar{x}, \bar{y}, z)$
5 : Cmm2 : 1	$(0, y, z)$	$(0, \bar{y}, z)$	7 : P2	(x, y, z)	$(\bar{x}, \bar{y}, z)$
5 : Cmm2 : 2	$(\frac{1}{2}, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, 0, z_2)$	8 : Bm	$(x_1, y_1, 0)$	$(x_2, y_2, 0)$
5 : Cmm2 : 3	$(0, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, 0, z_2)$	8 : Pm : 1	$(x_1, y_1, \frac{1}{2})$	$(x_2, y_2, \frac{1}{2})$
5 : Cmm2 : 4	$(0, 0, z_1)$	$(0, 0, z_2)$	8 : Pm : 2	$(x_1, y_1, 0)$	$(x_2, y_2, \frac{1}{2})$
5 : Pmm2 : 1	$(\frac{1}{2}, y, z)$	$(\frac{1}{2}, \bar{y}, z)$	8 : Pm : 3	$(x_1, y_1, 0)$	$(x_2, y_2, 0)$
5 : Pmm2 : 2	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z_1)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z_2)$	9 : $P\bar{1}$	(x, y, z)	$(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$
5 : Pmm2 : 3	$(\frac{1}{2}, 0, z_1)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z_2)$	12 : P1	(x_1, y_1, z_1)	(x_2, y_2, z_2)

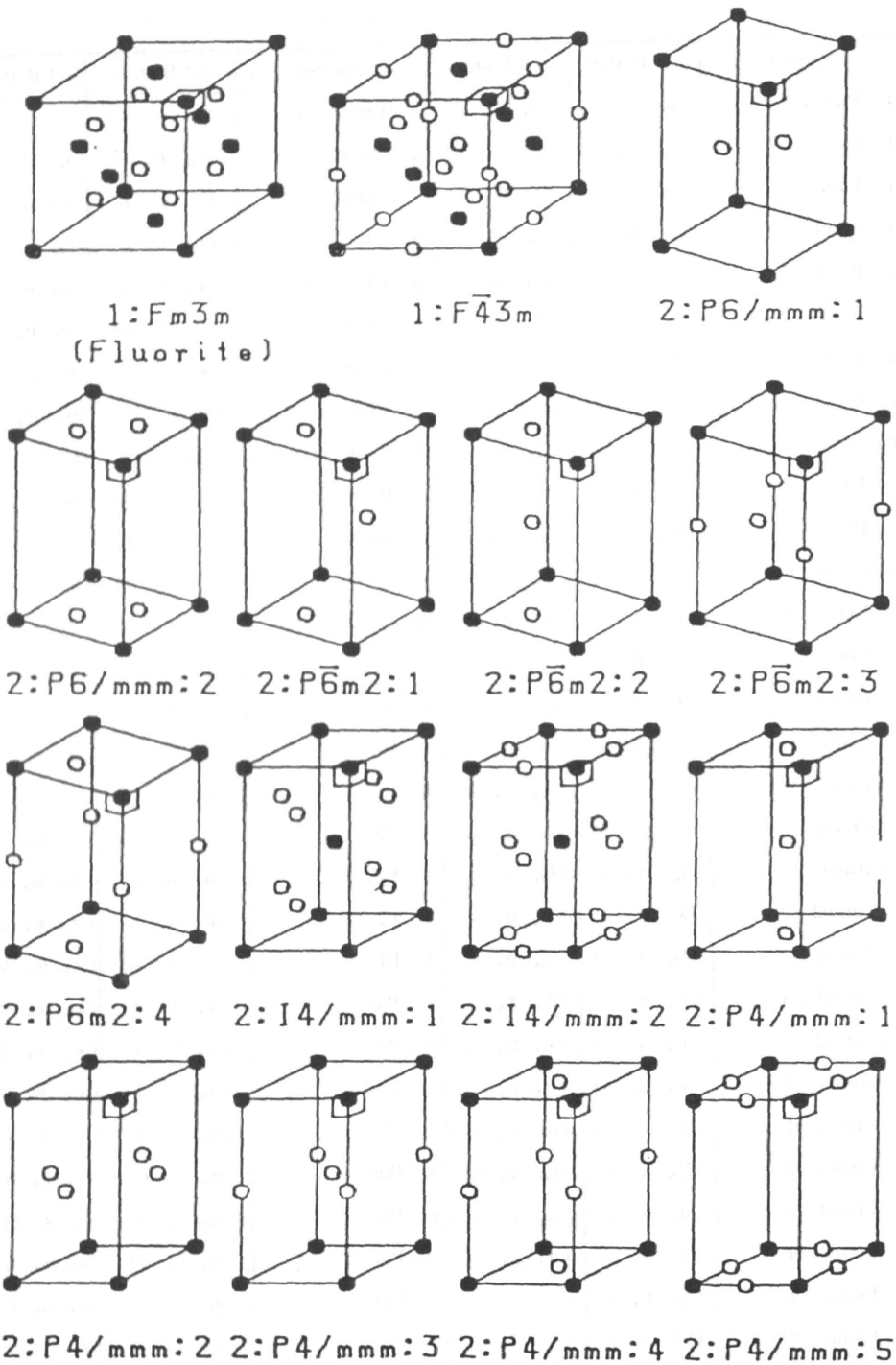

Fig. 2 Species in genus AB_2.

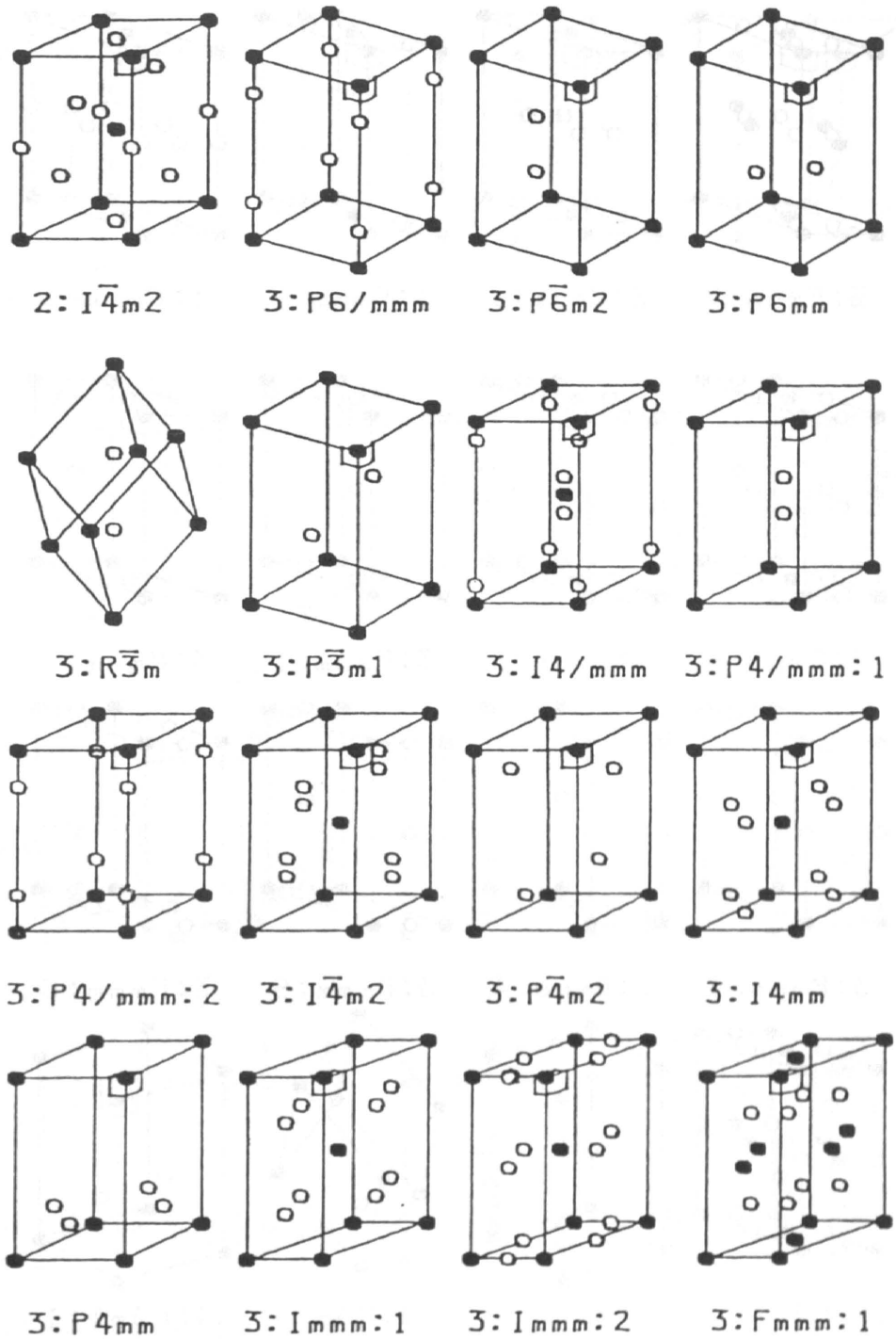

Fig. 2 (Continued)

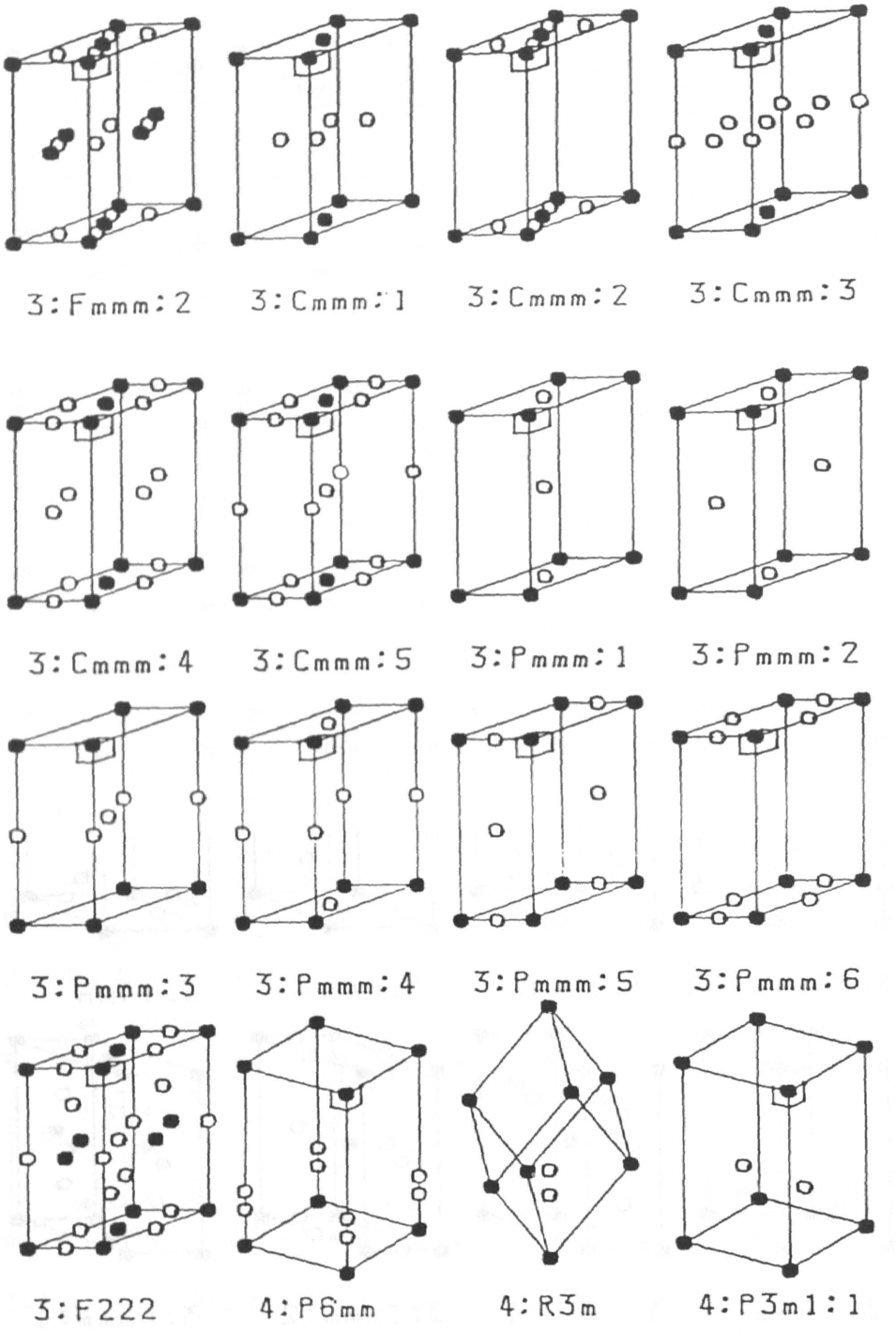

Fig. 2 (Continued)

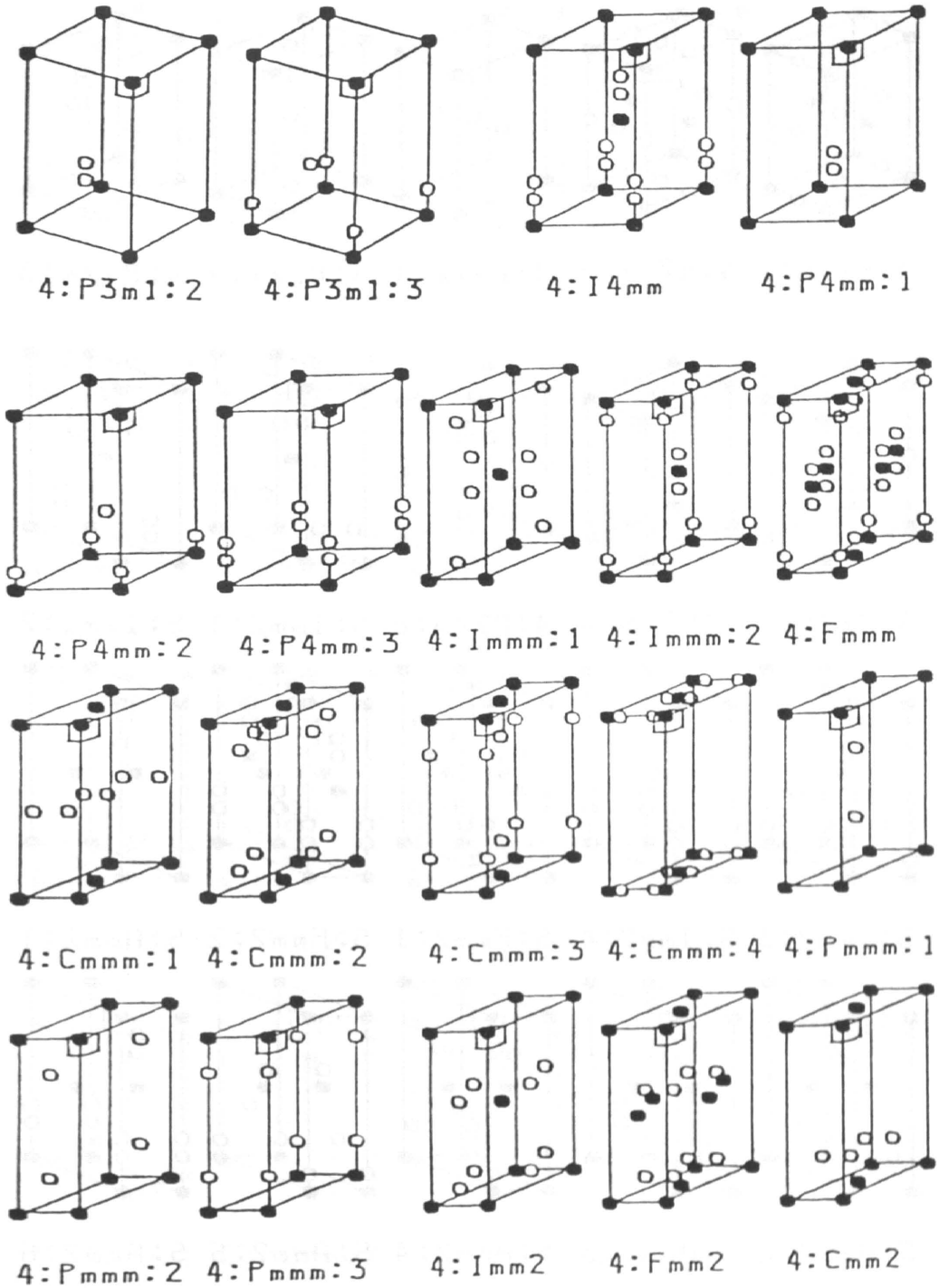

Fig. 2 (Continued)

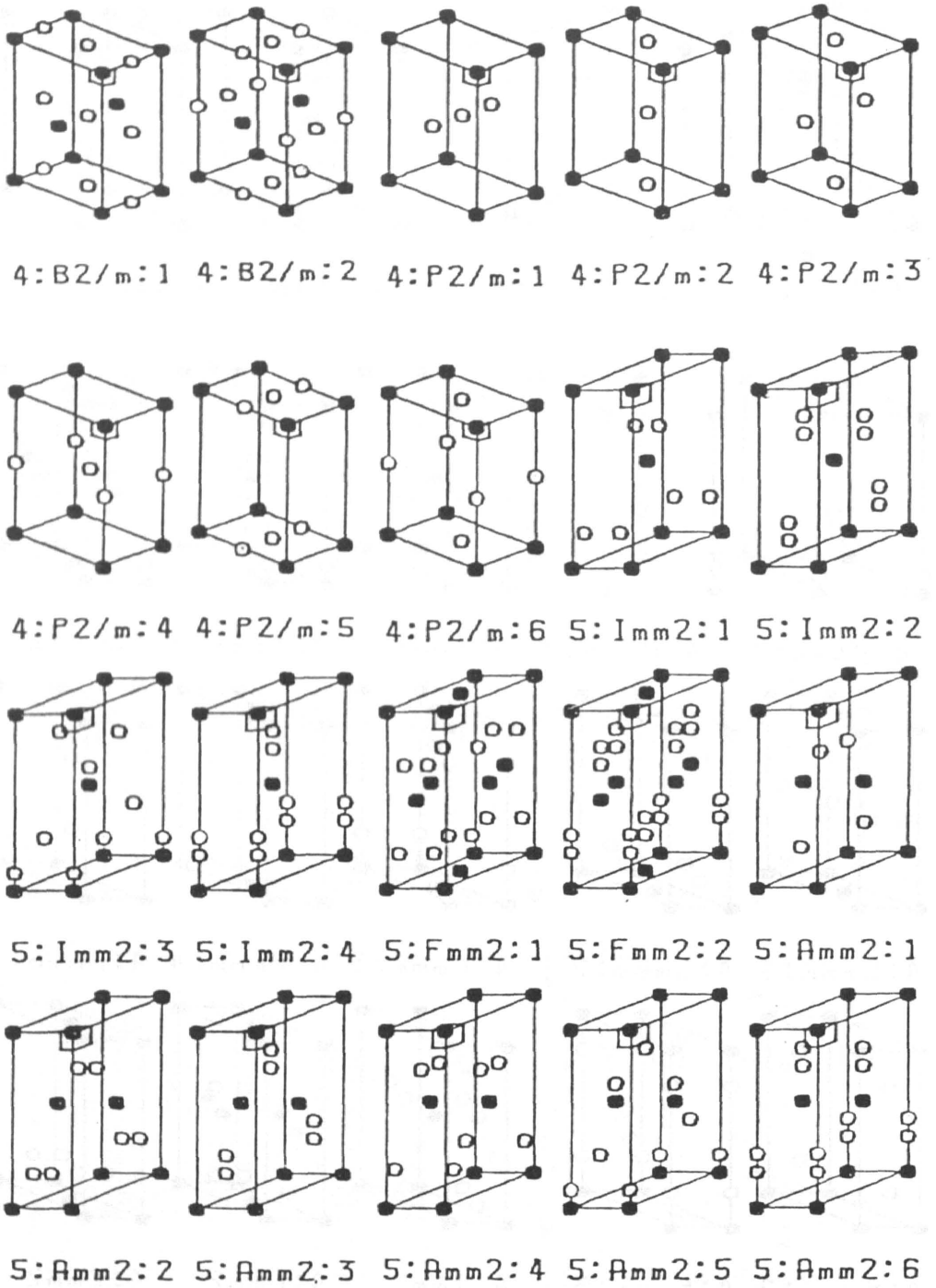

Fig. 2 (Continued)

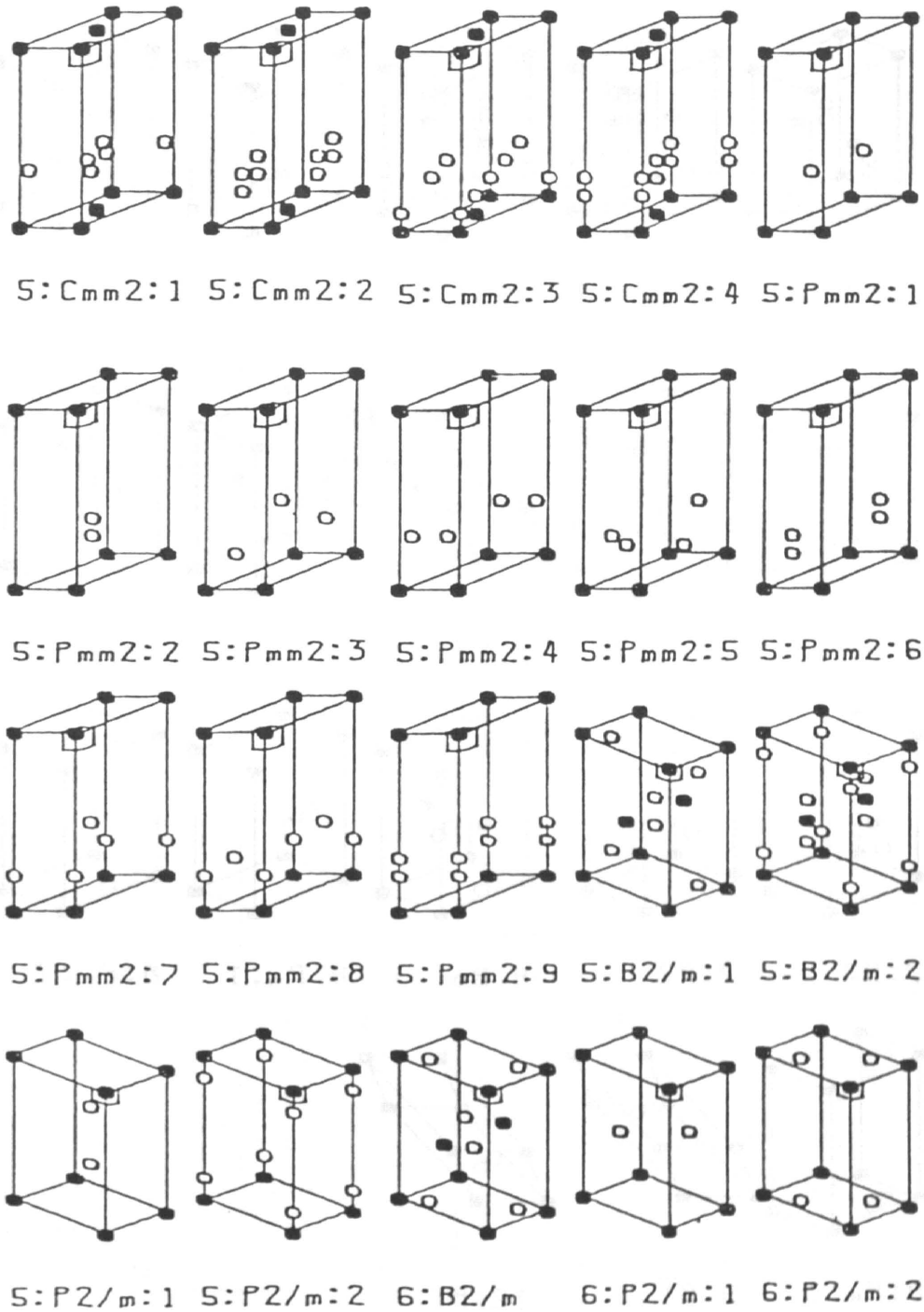

Fig. 2　(Continued)

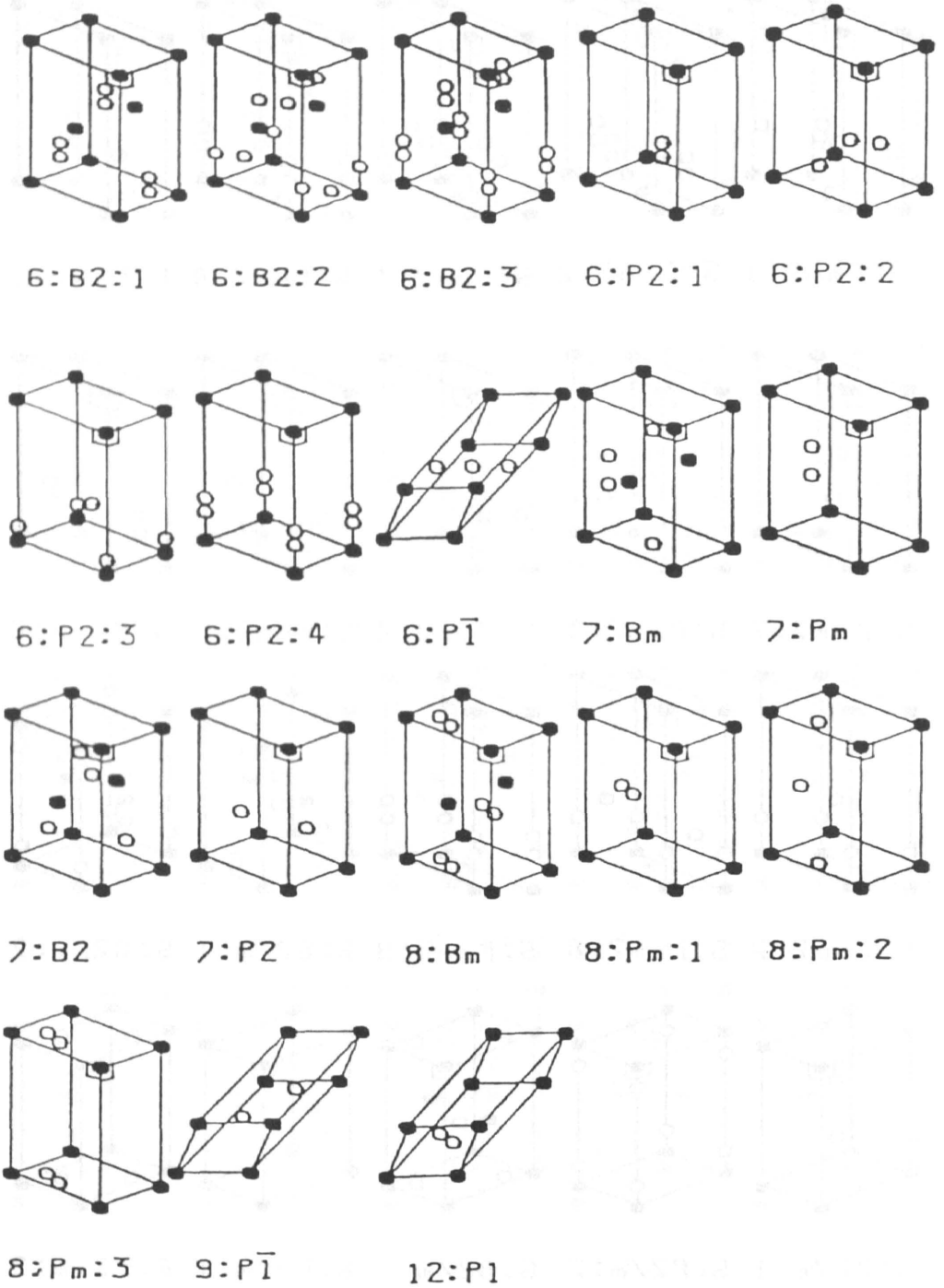

Fig. 2 (Continued)

Table 3　Correspondence of the species in genus AB_2 to those in genus A_3 and A.

Species of Genus AB_2	Species of Genus A_3
1 : Fm3m 1 : F$\bar{4}$3m	1 : Fm3m
2 : P6/mmm : 1 2 : P$\bar{6}$m2 : 1	2 : P6/mmm
2 : P$\bar{6}$m2 : 2 2 : P$\bar{6}$m2 : 3 2 : P$\bar{6}$m2 : 4	2 : P$\bar{6}$m2
2 : I4/mmm : 1 2 : I$\bar{4}$m2	2 : I4/mmm : 1
2 : I4/mmm : 2	2 : I4/mmm : 2
2 : P4/mmm : 1 2 : P4/mmm : 3 2 : P4/mmm : 4	2 : P4/mmm : 1
2 : P4/mmm : 2	2 : P4/mmm : 2
2 : P4/mmm : 5	2 : P4/mmm : 3
3 : P6/mmm	3 : P6/mmm
3 : P$\bar{6}$m2	3 : P$\bar{6}$m2 : 1
3 : P6mm	3 : P6mm
3 : R$\bar{3}$m	3 : R$\bar{3}$m
3 : P$\bar{3}$m1	3 : P$\bar{3}$m1
3 : I4/mmm	3 : I4/mmm
3 : P4/mmm : 1	3 : P4/mmm : 1
3 : P4/mmm : 2	3 : P4/mmm : 2
3 : I$\bar{4}$m2	3 : I$\bar{4}$m2
3 : P$\bar{4}$m2	3 : P$\bar{4}$m2
3 : I4mm	3 : I4mm
3 : P4mm	3 : P4mm
3 : Immm : 1	3 : Immm : 1
3 : Immm : 2	3 : Immm : 2
3 : Fmmm : 1 3 : F222	3 : Fmmm : 1
3 : Fmmm : 2	3 : Fmmm : 2
3 : Cmmm : 1	3 : Cmmm : 1

Species of Genus AB_2	Species of Genus A_3
3 : Cmmm : 2	3 : Cmmm : 2
3 : Cmmm : 3 3 : Cmmm : 4 3 : Cmmm : 5	3 : Cmmm : 3
3 : Pmmm : 1 3 : Pmmm : 3 3 : Pmmm : 4	3 : Pmmm : 1
3 : Pmmm : 2	3 : Pmmm : 2
3 : Pmmm : 5	3 : Pmmm : 3
3 : Pmmm : 6	3 : Pmmm : 4
4 : P6mm	4 : P6mm
4 : R3m	4 : R3m
4 : P3m1 : 1	4 : P3m1 : 1
4 : P3m1 : 2 4 : P3m1 : 3	4 : P3m1 : 2
4 : I4mm	4 : I4mm
4 : P4mm : 1 4 : P4mm : 2	4 : P4mm : 1
4 : P4mm : 3	4 : P4mm : 2
4 : Immm : 1	4 : Immm : 1
4 : Immm : 2	4 : Immm : 2
4 : Fmmm	4 : Fmmm
4 : Cmmm : 1	4 : Cmmm : 1
4 : Cmmm : 2	4 : Cmmm : 2
4 : Cmmm : 3	4 : Cmmm : 3
4 : Cmmm : 4	4 : Cmmm : 4
4 : Pmmm : 1	4 : Pmmm : 1
4 : Pmmm : 2	4 : Pmmm : 2
4 : Pmmm : 3	4 : Pmmm : 3
4 : Imm2	4 : Imm2
4 : Fmm2	4 : Fmm2
4 : Cmm2	4 : Cmm2

Table 3 (Continued)

Species of Genus AB_2	Species of Genus A_3
4 : B2/m : 1 4 : B2/m : 2	4 : B2/m
4 : P2/m : 1 4 : P2/m : 3	4 : P2/m : 1
4 : P2/m : 2 4 : P2/m : 4 4 : P2/m : 6	4 : P2/m : 2
4 : P2/m : 5	4 : P2/m : 3
5 : Imm2 : 1	5 : Imm2 : 1
5 : Imm2 : 2 5 : Imm2 : 3	5 : Imm2 : 2
5 : Imm2 : 4	5 : Imm2 : 3
5 : Fmm2 : 1	5 : Fmm2 : 1
5 : Fmm2 : 2	5 : Fmm2 : 2
5 : Amm2 : 1	5 : Amm2 : 1
5 : Amm2 : 2	5 : Amm2 : 2
5 : Amm2 : 3 5 : Amm2 : 5	5 : Amm2 : 3
5 : Amm2 : 4	5 : Amm2 : 4
5 : Amm2 : 6	5 : Amm2 : 5
5 : Cmm2 : 1	5 : Cmm2 : 1
5 : Cmm2 : 2 5 : Cmm2 : 3	5 : Cmm2 : 2
5 : Cmm2 : 4	5 : Cmm2 : 3
5 : Pmm2 : 1	5 : Pmm2 : 1
5 : Pmm2 : 2 5 : Pmm2 : 7	5 : Pmm2 : 2
5 : Pmm2 : 3 5 : Pmm2 : 5	5 : Pmm2 : 3
5 : Pmm2 : 4	5 : Pmm2 : 4
5 : Pmm2 : 6 5 : Pmm2 : 8	5 : Pmm2 : 5

Species of Genus AB_2	Species of Genus A_3
5 : Pmm2 : 9	5 : Pmm2 : 6
5 : B2/m : 1	5 : B2/m : 1
5 : B2/m : 2	5 : B2/m : 2
5 : P2/m : 1	5 : P2/m : 1
5 : P2/m : 2	5 : P2/m : 2
6 : B2/m	6 : B2/m
6 : P2/m : 1	6 : P2/m : 1
6 : P2/m : 2	6 : P2/m : 2
6 : B2 : 1 6 : B2 : 2	6 : B2 : 1
6 : B2 : 3	6 : B2 : 2
6 : P2 : 1 6 : P2 : 3	6 : P2 : 1
6 : P2 : 2	6 : P2 : 2
6 : P2 : 4	6 : P2 : 3
6 : P$\bar{1}$	6 : P$\bar{1}$
7 : Bm	7 : Bm
7 : Pm	7 : Pm
7 : B2	7 : B2
7 : P2	7 : P2
8 : Bm	8 : Bm
8 : Pm : 1 8 : Pm : 2	8 : Pm : 1
8 : Pm : 3	8 : Pm : 2
9 : P$\bar{1}$	9 : P$\bar{1}$
12 : P1	12 : P1

Species of Genus AB_2	Species of Genus A
2 : P/6mmm : 2	2 : P6/mmm

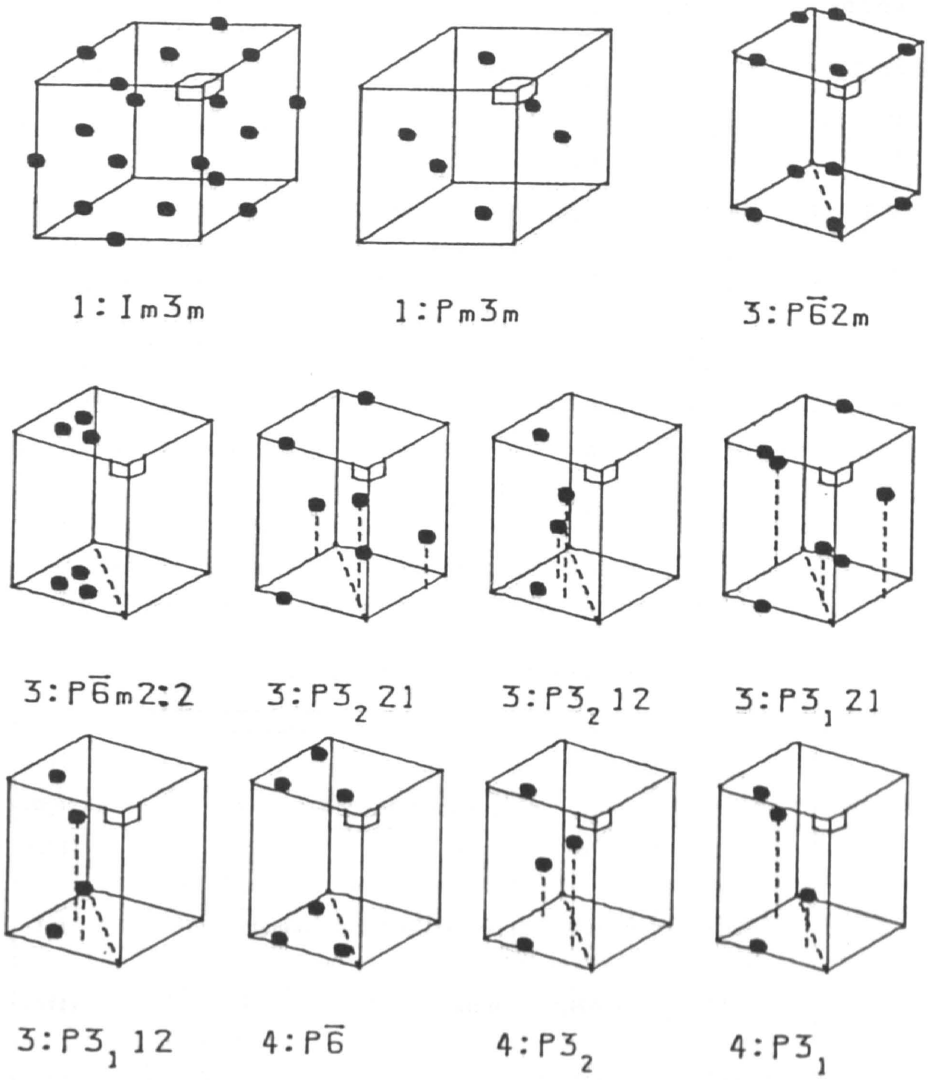

Fig. 3　Species in genus A_3 which have no corresponding species in genus AB_2. Note that no atom exists at the corners of the unit cell.

Table 4 Atomic positions in the conventional unit cells of species in genus A_3 which have no corresponding species in genus AB_2.

Species	1st atom	2nd atom	3rd atom
1 : Im 3 m	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	$(0, 0, \frac{1}{2})$
1 : Pm 3 m	$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
3 : $P\bar{6}$ 2 m	$(x, 0, 0)$	$(\bar{x}, x, 0)$	$(0, \bar{x}, 0)$
3 : $P\bar{6}$ m 2 : 2	$(x, x, 0)$	$(2\bar{x}, x, 0)$	$(x, 2\bar{x}, 0)$
3 : $P3_2 21$	$(x, 0, 0)$	$(\bar{x}, x, \frac{2}{3})$	$(0, \bar{x}, \frac{1}{3})$
3 : $P3_2 12$	$(x, x, 0)$	$(2\bar{x}, x, \frac{2}{3})$	$(x, 2\bar{x}, \frac{1}{3})$
3 : $P3_1 21$	$(x, 0, 0)$	$(\bar{x}, x, \frac{1}{3})$	$(0, \bar{x}, \frac{2}{3})$
3 : $P3_1 12$	$(x, x, 0)$	$(2\bar{x}, x, \frac{1}{3})$	$(x, 2\bar{x}, \frac{2}{3})$
4 : $P\bar{6}$	$(x, y, 0)$	$(\bar{x}+\bar{y}, x, 0)$	$(y, \bar{x}+\bar{y}, 0)$
4 : $P3_2$	$(x, y, 0)$	$(\bar{x}+\bar{y}, x, \frac{2}{3})$	$(y, \bar{x}+\bar{y}, \frac{1}{3})$
4 : $P3_1$	$(x, y, 0)$	$(\bar{x}+\bar{y}, x, \frac{1}{3})$	$(y, \bar{x}+\bar{y}, \frac{2}{3})$

Table 5. Outline of classification table of crystal structures.

Order	Family	Genus	Species	
1	A	A	f.c.c., b.c.c., s.c., ……	(14)
		A_2	diamond, h.c.p., ……	(29)
		A_3	……	(107)
2	AB	AB	NaCl, CsCl, zinc-blende, ……	(51)
3	AB_2	AB_2	fluorite, ……	(124)
	ABC	ABC	…	(44)
4	AB_3	AB_3		

文　　献

1）細谷将彦：「結晶構造の体系的分類」物性研究　34（1980）297。