

配位多面体を用いた任意結晶面の表面構造可視化

○戸張博章、野口文雄、小林秀彦

埼玉大学工学部応用化学科(〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保255)

【目的】 当研究室では、ユーザーが指定する任意結晶面からなる結晶多面体に原子球をパッキングして描画する機能を搭載した結晶構造表示ソフトウェアを開発した。しかし複合酸化物やゼオライトのような複雑な結晶の場合、原子球による結晶パッキング描画では結晶面の構造を視覚化するのは困難であった。そこで、配位多面体をパッキングできる機能を追加した。

【方法】 無機結晶データベース(ICSD: Inorganic Crystal Structure Database)から出力されるCIF(Crystallographic Information File)から格子定数を読み込み、逆格子ベクトルを計算した。ユーザーが指定する結晶多面体の体中心(ウルフ点)から結晶表面に至る層数、結晶面指数の情報および逆格子ベクトルを用いて、結晶多面体の各結晶面の平面方程式を連立させ、結晶多面体の各頂点座標を求めた。一方、ユーザーが各配位中心原子を指定し、これを取り巻く多数の原子に至る距離をソートし、各配位多面体の頂点座標を認識させた。これらの配位多面体を結晶多面体の内部に効率よく多数描画するために、各結晶面で定まる2次元単位格子の基本並進ベクトルを用いて、配位多面体のデータを並進増殖させて、配位多面体によるパッキング描画を実現した。

【結果】 晶相を{110}面、{001}面とするスピネルのパッキング描画では、ユーザー指定の結晶面をサブレイヤーごとに点線矢印方向にマニピュレートすると、{110}面では MgO_4 四面体と AlO_6 八面体が混在する層があることが分かった(図1)。ゼオライトYは、 TO_4 四面体(TはAl、Si)が頂点酸素を共有し、三次元的に連鎖したアルミノケイ酸塩であり、{110}面において反対側に通じている細孔を多数確認できた(図2)。複合硫化物の Al_2BaS_4 では、 Ba^{2+} を配位中心とした BaS_{12} 二十面体、 BaS_6 八面体があることが分かった(図3)。これらの配位多面体は正多面体ではなく、それらは稜共有していることが読み取れた。配位多面体みの描画(図1)や配位多面体と無関係な原子球(図3の Al^{3+})を併せた配位多面体表示が可能であり、各種結晶における任意結晶面の表面構造を可視化できた。

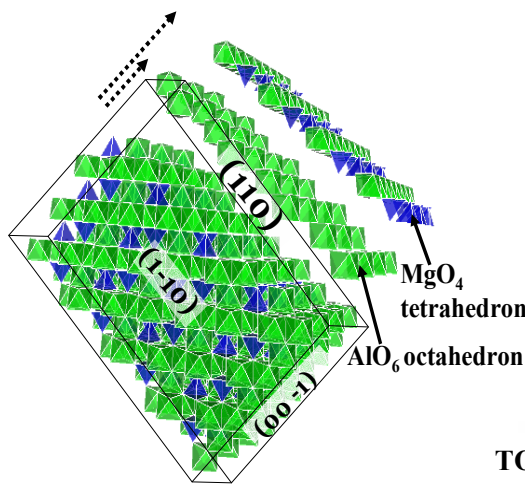


図1 スピネル($MgAl_2O_4$)の配位多面体パッキングと層のマニピュレーション

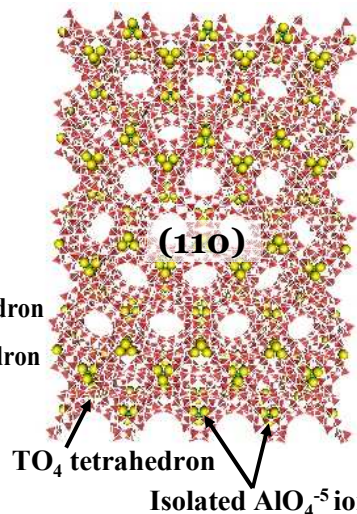


図2 ゼオライトYの配位多面体パッキング

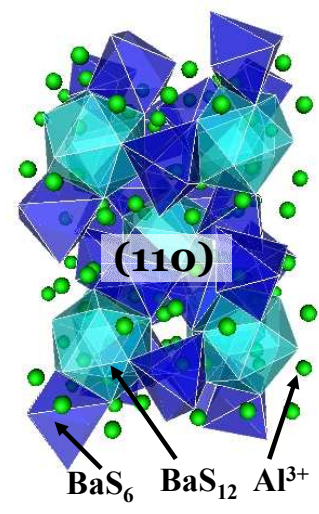


図3 Al_2BaS_4 の配位多面体パッキング