

無機化学 I

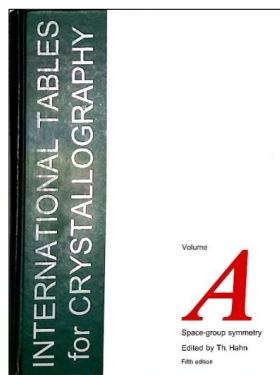
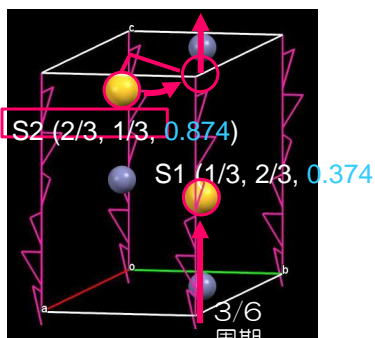
- Inorganic Chemistry I -

第8回 対称性と結晶構造

東京工業大学 元素戦略研究センター
高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所
山浦淳一

1

本日の要点と目標



結晶内の原子がどのような
規則に従って
配置されているかを理解する

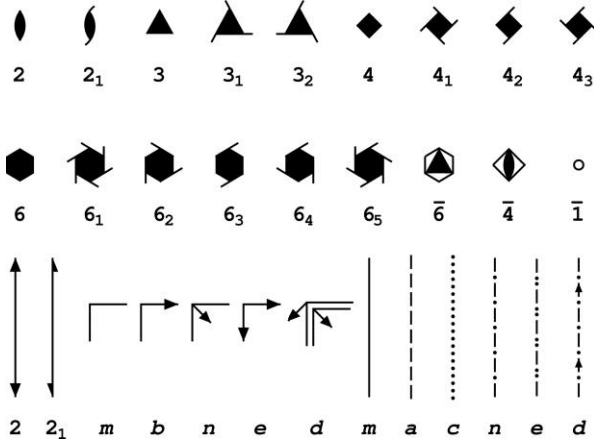
対称性を記述する
最高に便利な道具を
使いこなす準備をする

2

空間群とは

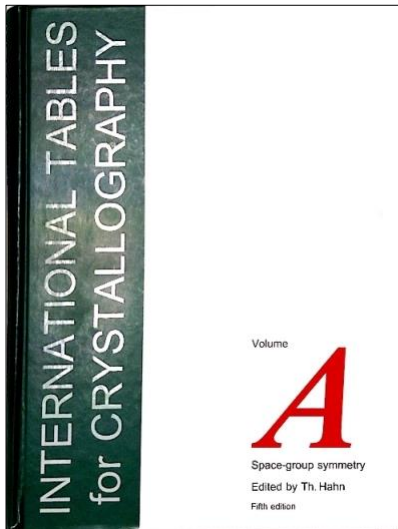
空間群

対称性表現のあらゆる組み合わせを
検討すると230通りに分類される (230しかない!!)



3

結晶構造を結晶化学の作法で表現する



International Tables for Crystallography

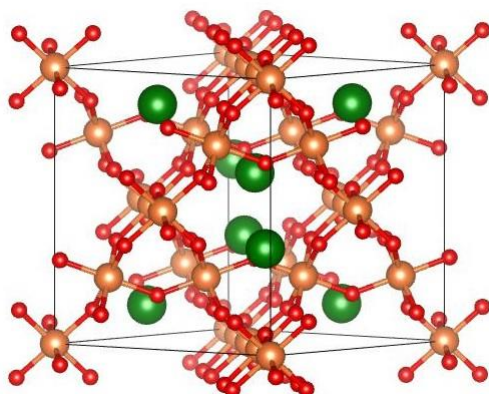
- 結晶に関する辞典(A~G)
- A&A1 空間群に関するもの
- 極めて便利な道具

空間群: 結晶の対称性に関する
記述で230種類ある

とても便利で不可欠な道具

キーワード: 空間群は230種類

道具を使えないとどうなるか

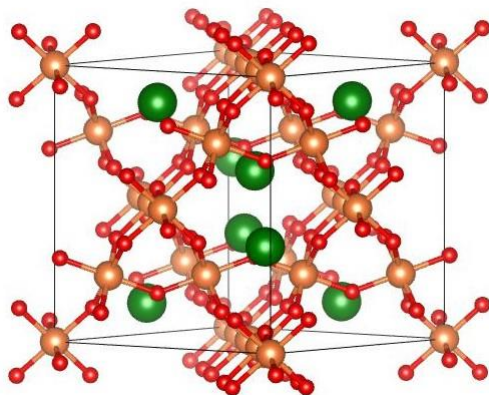


$K_8Os_{16}O_{48}$ パイロクロア鉱物
超伝導体

72原子全ての位置を入力する必要

	x	y	z		x	y	z
K1	0.375	0.375	0.375	O13	0.625	0.935	0.625
K2	0.625	0.625	0.625	O14	0.375	0.064	0.375
K3	0.375	0.875	0.875	O15	0.125	0.814	0.625
K4	0.625	0.125	0.125	O16	0.875	0.185	0.375
K5	0.875	0.875	0.375	O17	0.125	0.125	0.314
K6	0.125	0.125	0.625	O18	0.875	0.875	0.685
K7	0.875	0.375	0.875	O19	0.125	0.625	0.435
K8	0.125	0.625	0.125	O20	0.875	0.375	0.564
Os1	0.000	0.000	0.000	O21	0.625	0.625	0.935
Os2	0.750	0.250	0.500	O22	0.375	0.375	0.064
Os3	0.250	0.750	0.500	O23	0.625	0.125	0.814
Os4	0.250	0.500	0.750	O24	0.375	0.875	0.185
Os5	0.750	0.500	0.250	O25	0.875	0.564	0.375
Os6	0.500	0.750	0.250	O26	0.125	0.435	0.625
Os7	0.500	0.250	0.750	O27	0.375	0.185	0.875
Os8	0.000	0.500	0.500	O28	0.625	0.814	0.125
Os9	0.750	0.750	0.000	O29	0.185	0.875	0.375
Os10	0.250	0.250	0.000	O30	0.814	0.125	0.625
Os11	0.250	0.000	0.250	O31	0.564	0.375	0.875
Os12	0.750	0.000	0.750	O32	0.435	0.625	0.125
Os13	0.500	0.000	0.500	O33	0.875	0.375	0.185
Os14	0.000	0.750	0.750	O34	0.125	0.625	0.814
Os15	0.000	0.250	0.250	O35	0.375	0.875	0.564
Os16	0.500	0.500	0.000	O36	0.625	0.125	0.435
O1	0.314	0.125	0.125	O37	0.314	0.625	0.625
O2	0.685	0.875	0.875	O38	0.685	0.375	0.375
O3	0.435	0.125	0.625	O39	0.935	0.125	0.125
O4	0.564	0.875	0.375	O40	0.064	0.875	0.875
O5	0.935	0.625	0.625	O41	0.125	0.125	0.935
O6	0.064	0.375	0.375	O42	0.875	0.875	0.064
O7	0.814	0.625	0.125	O43	0.625	0.625	0.314
O8	0.185	0.375	0.875	O44	0.375	0.375	0.685
O9	0.125	0.314	0.125	O45	0.875	0.064	0.875
O10	0.875	0.685	0.875	O46	0.125	0.935	0.125
O11	0.625	0.435	0.125	O47	0.375	0.685	0.375
O12	0.375	0.564	0.875	O48	0.625	0.314	0.625

道具を使えないとどうなるか

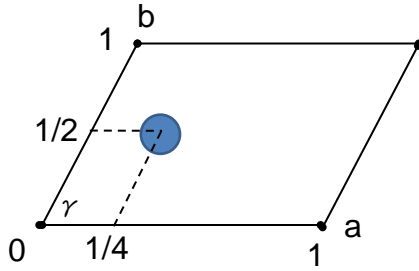


$K_8Os_{16}O_{48}$ パイロクロア鉱物
超伝導体

対称性を使えば3原子分でよい

	x	y	z
K	0.375	0.375	0.375
Os	0.000	0.000	0.000
O	0.314	0.125	0.125

分率表示



原子座標は分率表示
(Fractional coordinates)

左図の場合
 $X = 0.25, y = 0.5$ となる
(格子定数= a, b 軸長に
関係なく)

3次元直交座標上(x/a)での
実際の位置は
 $a = 10 \text{ \AA}, b = 8 \text{ \AA}, \gamma = 60^\circ$
の場合、
 $x = 0.25a + 0.5b \cdot \cos 60^\circ$
 $= 4.5 \text{ \AA}$
 $y = 0.5b = 4 \text{ \AA}$

結晶構造を結晶化学の作法で表現する

International Tables for Crystallography (2009), Vol. A, Space group 186, pp. 584-585

$P6_3mc$ No. 186 **1** C_{6v}^4 $P6_3mc$ **1** $6mm$ **1** Hexagonal **1** $P6_3/mmm$ **1** $P6_3/mmm$

2

Origin on $3m$ in 6_3mc
Asymmetric unit $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1; x \neq (1-y)/2; y \neq 4z/3$
Vertices $0, 0, 1; 1, 0, 1; 0, 1, 1; 1, 1, 1$

Symmetry operations

(1) E	(2) $C_6: 0, 0, z$	(3) $C_3: 0, 0, z$	(4) $C_2: 0, 0, z$
(5) $C_6^5: 1, 0, z$	(6) $C_3^2: 0, 0, z$	(7) $C_2^5: 1, 0, z$	(8) $C_2^4: 0, 0, z$
(9) $\sigma_h: x, x, z$	(10) $\sigma_d: x, 0, z$	(11) $C_6^2: x, 0, z$	(12) $C_6^4: 0, x, z$

CONTINUED **3** No. 186 $P6_3mc$

Generators selected (1); (1,0,0); (0,1,0); (0,0,1); (2); (4); (7)

Position	Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	Coordinates	Reflection conditions
12 d 1	(1) x, y, z	(2) x, y, z	(3) x, y, z	(4) x, y, z	(5) x, y, z
6 c 2m	x, x, z	$x, 2x, z$	$2x, x, z$	x, x, z	$x, 2x, z$
2 b 3m	$1, 1, z$	$1, 1, z$	$1, 1, z$	$1, 1, z$	$1, 1, z$
2 a 3m	$0, 0, z$	$0, 0, z$	$0, 0, z$	$0, 0, z$	$0, 0, z$

Symmetry of special projections

Along [001] plane	$a' = a, b' = b$	Along [100] pl	$a' = a, b' = 2a$	$b' = c$	Along [110] plm	$a' = 2b, b' = c$
Origin at 0,0,z		Origin at 0,0,z		Origin at 0,0,z	Origin at x,z,0	

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $P6_3(P6_3, 173)$ 1, 2, 3, 4, 5, 6
 [3] $P3_1(P3_1, 150)$ 1, 2, 3, 10, 11, 12
 [4] $P3m1(P3m, 156)$ 1, 2, 3, 7, 8, 9
 [5] $[P2, mc(C2c, 2, 30)]$ 1, 4, 7, 10
 [6] $[P2, mc(C2c, 2, 30)]$ 1, 4, 8, 11
 [7] $[P2, mc(C2c, 2, 30)]$ 1, 4, 9, 12

IIa none
IIb [3] $[P6_3, mc(C6, 3b) - 3b] P6_3, cm, 183$

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

Ic [3] $[P6_3, mc(C6, 3b) - 3b] P6_3, mc(C6, 3b) - 3b, 186$

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $P6_3/mmm(194)$
II [3] $[P6_3, mc(C6, 3b), 183]$; [2] $[P6_3, mc(C6, 3b) - 3b] 183$

3箇所だけ注目すればよい

Copyright © 2006 International Union of Crystallography 584

585

1 空間群の表記

No. 186 $P6_3mc$

186番目の空間群

単純格子

c軸に沿った
 6_3 らせん軸

a, b軸に垂直な
鏡映面(mirror)

a-b, a+2b軸に
垂直なc映進面

9

2 対称操作の地図

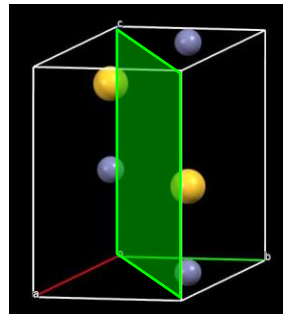
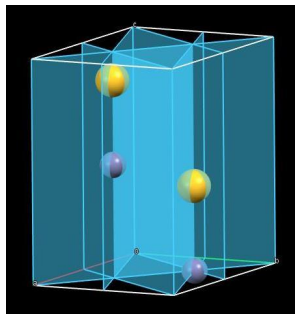
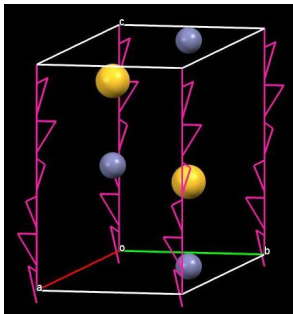
$P6_3mc$

a →
← b

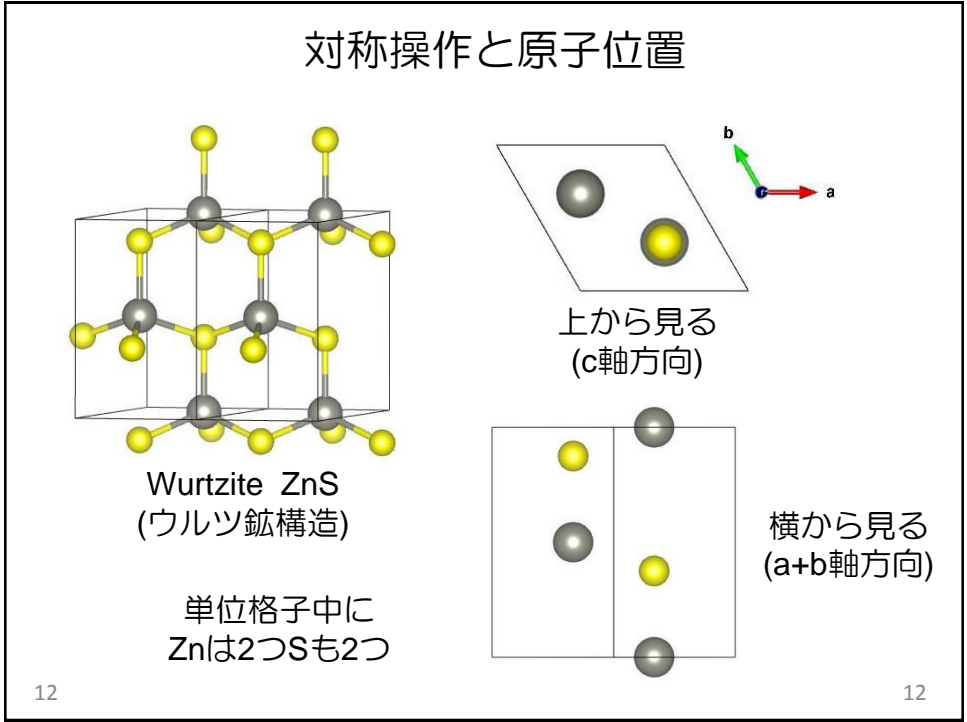
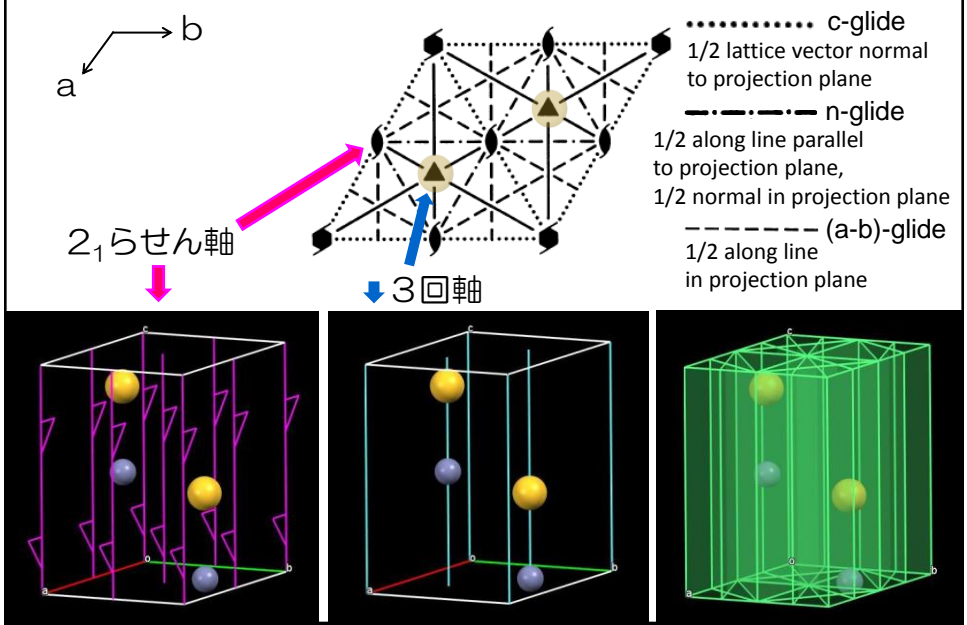
6_3 らせん軸

鏡映面(m)

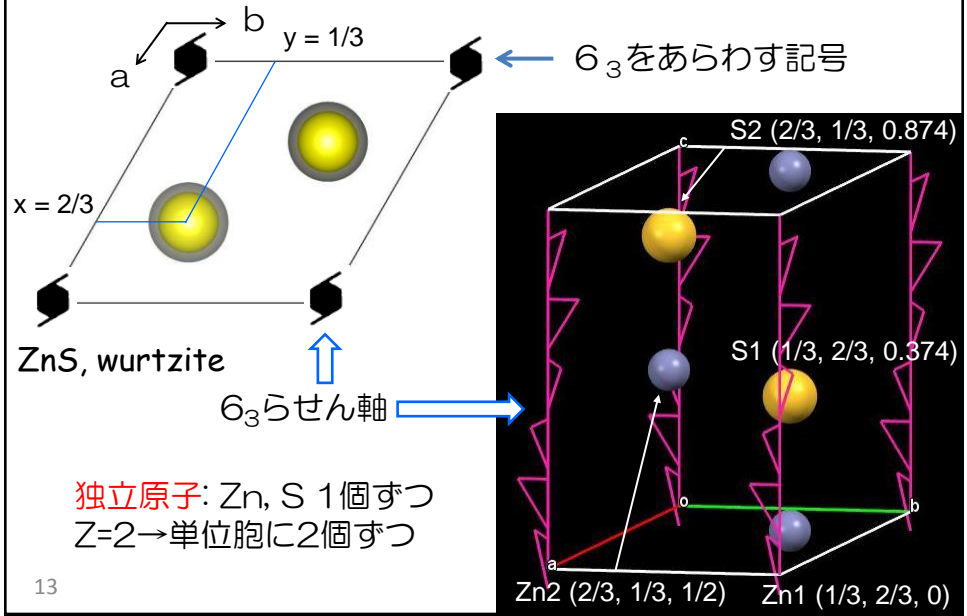
c映進面



対称操作の地図

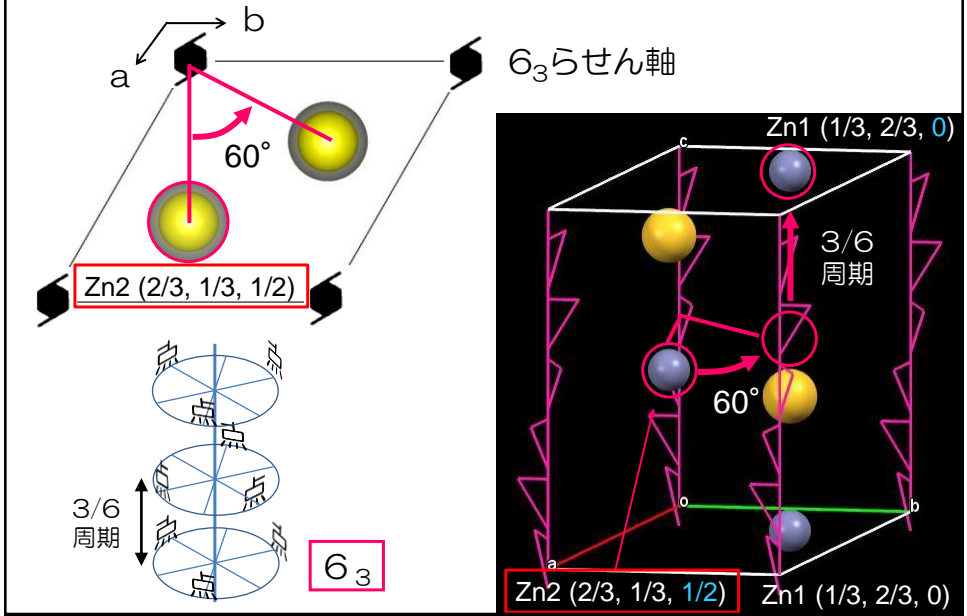


対称操作と原子位置

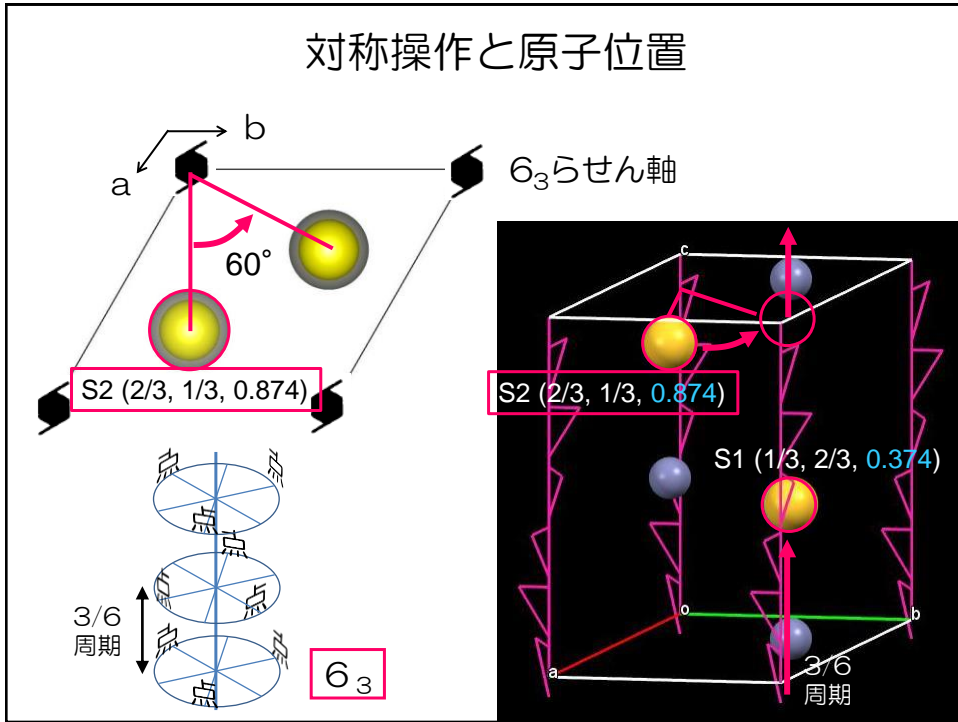


13

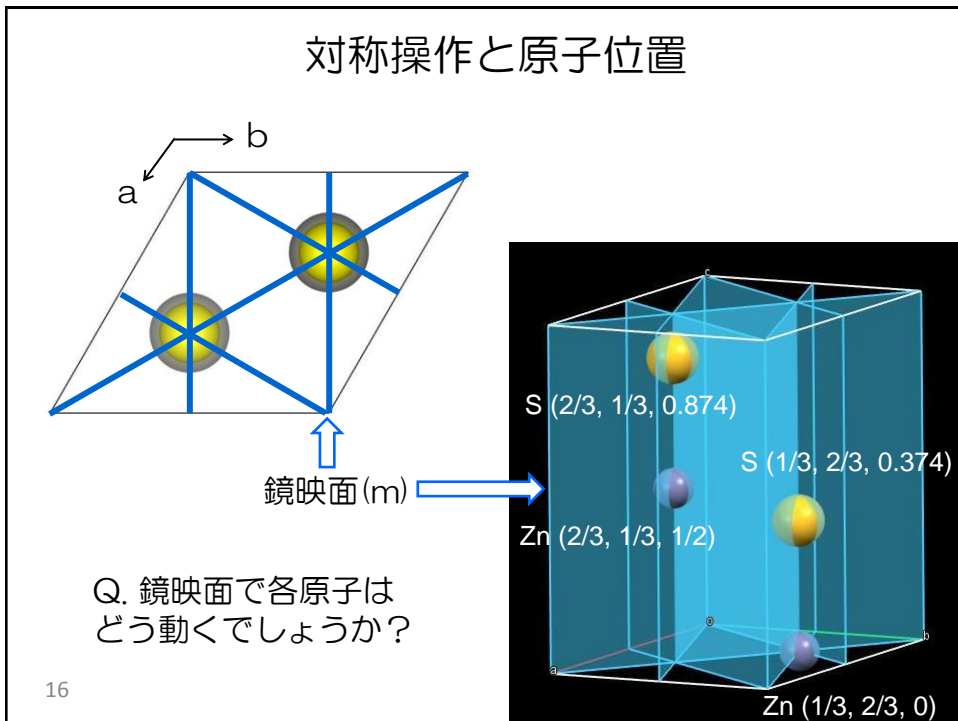
対称操作と原子位置



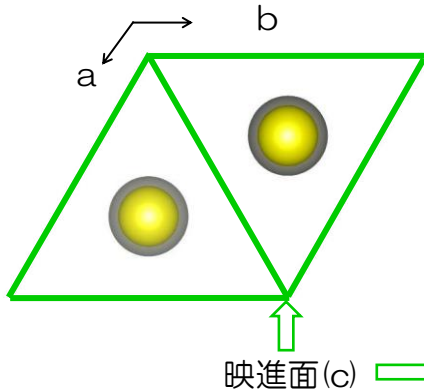
対称操作と原子位置



対称操作と原子位置

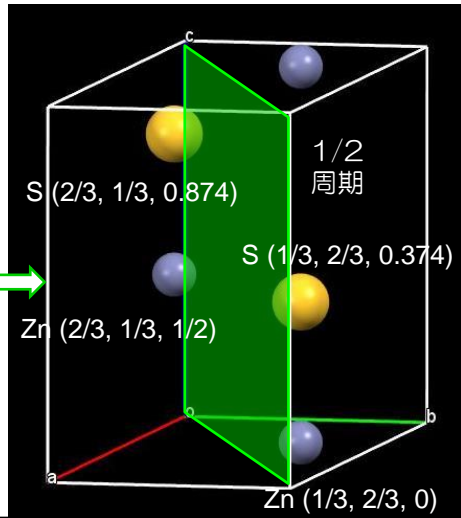


対称操作と原子位置

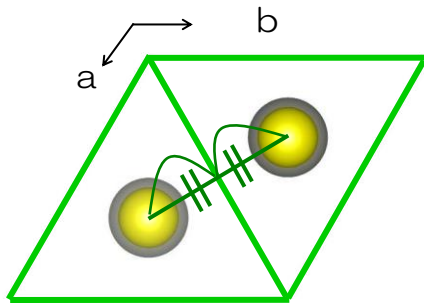


Q. 映進面で各原子は
どう動くでしょうか？

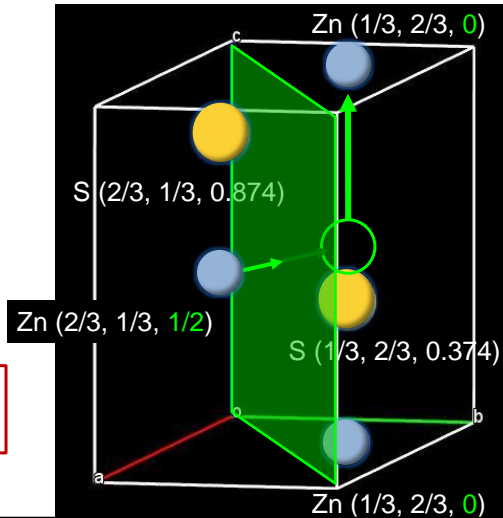
17



対称操作と原子位置



Zn, Sともに複数の
対称操作が重なる点にある



3

空間群 (多重度と座標)

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

$P6_3mc$

12	d	1	(1) x, y, z	(2) $\bar{y}, x - y, z$	(3) $\bar{x} + y, \bar{x}, z$	} 一般位置			
			(4) $\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	(5) $y, \bar{x} + y, z + \frac{1}{2}$	(6) $x - y, x, z + \frac{1}{2}$				
			(7) \bar{y}, \bar{x}, z	(8) $\bar{x} + y, y, z$	(9) $x, x - y, z$				
			(10) $y, x, z + \frac{1}{2}$	(11) $x - y, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$	(12) $\bar{x}, \bar{x} + y, z + \frac{1}{2}$				
6	c	$.m.$	x, \bar{x}, z	$x, 2x, z$	$2\bar{x}, \bar{x}, z$	$\bar{x}, x, z + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, 2\bar{x}, z + \frac{1}{2}$	$2x, x, z + \frac{1}{2}$	} 特殊位置
2	b	$3m.$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z$	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z + \frac{1}{2}$					
2	a	$3m.$	$0, 0, z$	$0, 0, z + \frac{1}{2}$					

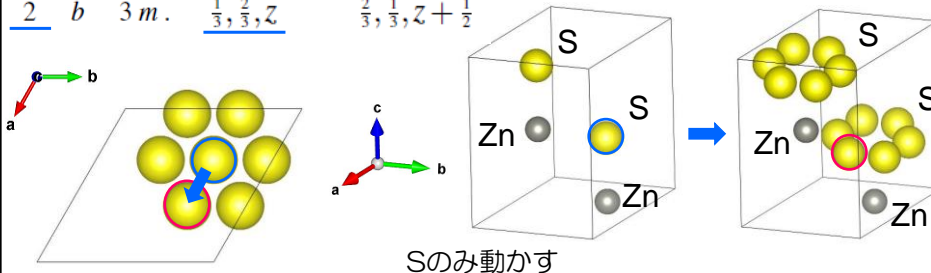
多重度: 結晶学的に
等価な位置の数

原子座標: ある位置に1つ原子を置いたとき
対称性で自動的に発生する位置

ZnS, wurtzite 空間群 (特殊位置と一般位置)

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

2 b $3m.$ $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z$ $\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z + \frac{1}{2}$



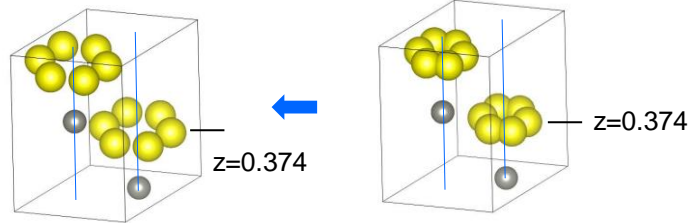
独立原子	x	y	z
Zn	0.3333	0.6667	0.0000
S	0.3333	0.6667	0.3740

Zn, Sは単位胞中に2個
= 特殊位置 (対称性高い)

	x	y	z
Zn	0.3333	0.6667	0.0000
S	0.6333	0.6667	0.3740

Sは単位胞中に12個になる
= 一般位置 (対称性一番低い)

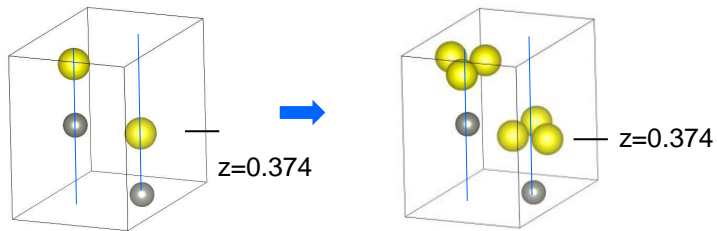
空間群 (特殊位置と一般位置)



S 12d (0.6333, 0.6667, 0.3740)

S 12d (0.5333, 0.6667, 0.3740)

多重度:
特殊位置での
重なり具合
を表す

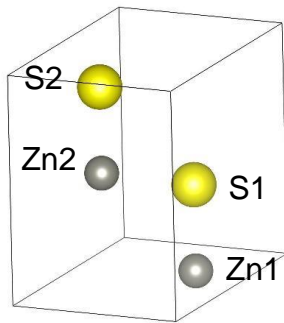


S 2b (0.3333, 0.6667, 0.3740)

S 6c (0.4333, 0.5667, 0.3740)

空間群 (対称性と原子位置発生)

ここが一番大事



論文等の構造パラメータは
独立原子のみ示される
Zn1 (0.3333, 0.6667, 0.0000)
S1 (0.3333, 0.6667, 0.3740)

$2 \quad b \quad 3 m . \quad \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z \quad \frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z + \frac{1}{2}$

独立原子が対称性でどこに
発生させられるかは
International Tablesを見ればわかる

独立原子	対称性で発生した原子
S1 (1/3, 2/3, 0.374)	S2 (2/3, 1/3, 0.874)
Zn1 (1/3, 2/3, 0)	Zn1 (2/3, 1/3, 1/2)

空間群 (サイトの対称性)

$P6_3mc$

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	Coordinates
12	d	1	(1) x, y, z (2) $\bar{y}, x - y, z$ (3) $\bar{x} + y, \bar{x}, z$ (4) $\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$ (5) $y, \bar{x} + y, z + \frac{1}{2}$ (6) $x - y, x, z + \frac{1}{2}$ (7) \bar{y}, \bar{x}, z (8) $\bar{x} + y, y, z$ (9) $x, x - y, z$ (10) $y, x, z + \frac{1}{2}$ (11) $x - y, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$ (12) $\bar{x}, \bar{x} + y, z + \frac{1}{2}$
6	c	$.m.$	x, \bar{x}, z $x, 2x, z$ $2\bar{x}, \bar{x}, z$ $\bar{x}, x, z + \frac{1}{2}$ $\bar{x}, 2\bar{x}, z + \frac{1}{2}$ $2x, x, z + \frac{1}{2}$
2	b	$3m.$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z$ $\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z + \frac{1}{2}$
2	a	$3m.$	$0, 0, z$ $0, 0, z + \frac{1}{2}$

サイトの対称性: 一般位置、特殊位置上にある対称操作

ワイコフレーター: a, b, c ...と対称性の高い順にふってある

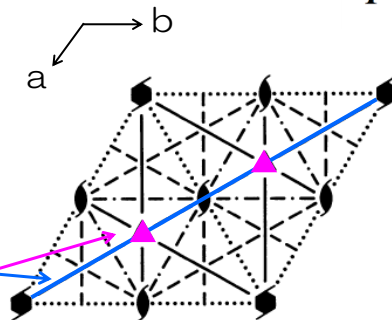
空間群 (サイトの対称性)

$P6_3mc$

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	Coordinates
12	d	1	(1) x, y, z (4) $\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$ (7) \bar{y}, \bar{x}, z (10) $y, x, z + \frac{1}{2}$
6	c	$.m.$	x, \bar{x}, z
2	b	$3m.$	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z$
2	a	$3m.$	$0, 0, z$

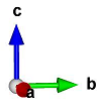
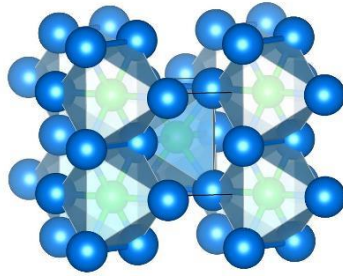


2b サイト: 3回軸と鏡映面上にある
6c サイト: 鏡映面上にある
12d サイト: 恒等操作のみ

サイトの対称性: 一般位置、特殊位置上にある対称操作

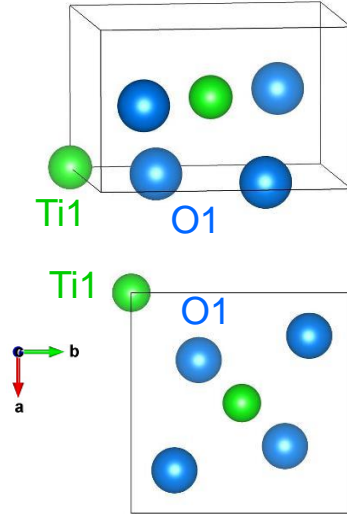
TiO₂ ルチル型構造

P4₂/mnm
No. 136



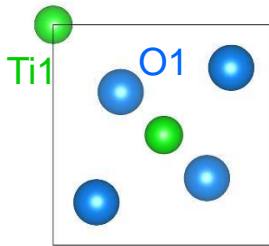
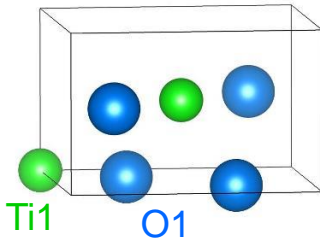
独立原子

	x	y	z
Ti1	0.0000	0.0000	0.0000
O1	0.3049	0.3049	0.0000



TiO₂ の原子座標と対称性

P4₂/mnm
No. 136



4	<i>g</i>	<i>m</i> · 2 <i>m</i>	<i>x</i> , <i>x</i> , 0	<i>x̄</i> , <i>x</i> , 0	<i>x</i> + $\frac{1}{2}$, <i>x</i> + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	<i>x̄</i> + $\frac{1}{2}$, <i>x̄</i> + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$
4	<i>f</i>	<i>m</i> · 2 <i>m</i>	<i>x</i> , <i>x</i> , 0	<i>x̄</i> , <i>x̄</i> , 0	<i>x̄</i> + $\frac{1}{2}$, <i>x̄</i> + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	<i>x</i> + $\frac{1}{2}$, <i>x</i> + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$
4	<i>e</i>	2 · <i>mm</i>	0, 0, <i>z</i>	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, <i>z</i> + $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, <i>z</i> + $\frac{1}{2}$	0, 0, <i>z̄</i>
4	<i>d</i>	$\bar{4}$ · ·	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{3}{2}$
4	<i>c</i>	2/ <i>m</i> · ·	0, $\frac{1}{2}$, 0	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, 0, 0
2	<i>b</i>	<i>m</i> · <i>mm</i>	0, 0, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 0		
2	<i>a</i>	<i>m</i> · <i>mm</i>	0, 0, 0	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$		

Q. 独立原子のみが与えられた
残りの原子座標を計算しましょう

Ti1	0.0000	0.0000	0.0000
O1	0.3049	0.3049	0.0000

TiO₂ の原子座標と対称性 $P4_2/mnm$ No. 136

Ti1 O1

Ti1 O1

4	g	m . 2m	x, \bar{x} , 0	\bar{x} , x, 0	x + $\frac{1}{2}$, x + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	x + $\frac{1}{2}$, x + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	○
4	f	m . 2m	x, x, 0	\bar{x} , \bar{x} , 0	\bar{x} + $\frac{1}{2}$, x + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	x + $\frac{1}{2}$, \bar{x} + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	
4	e	2 . mm	0, 0, z	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, z + $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, z + $\frac{1}{2}$	0, 0, z	
4	d	$\bar{4}$. .	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{3}{4}$	
4	c	2/m . .	0, $\frac{1}{2}$, 0	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, 0, 0	
2	b	m . mm	0, 0, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 0			
2	a	m . mm	0, 0, 0	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$			

Q. 他に表からわかることは？

Ti1	0.0000	0.0000	0.0000
O1	0.3049	0.3049	0.0000

TiO₂ の原子座標と対称性 $P4_2/mnm$ No. 136

Ti1 O1

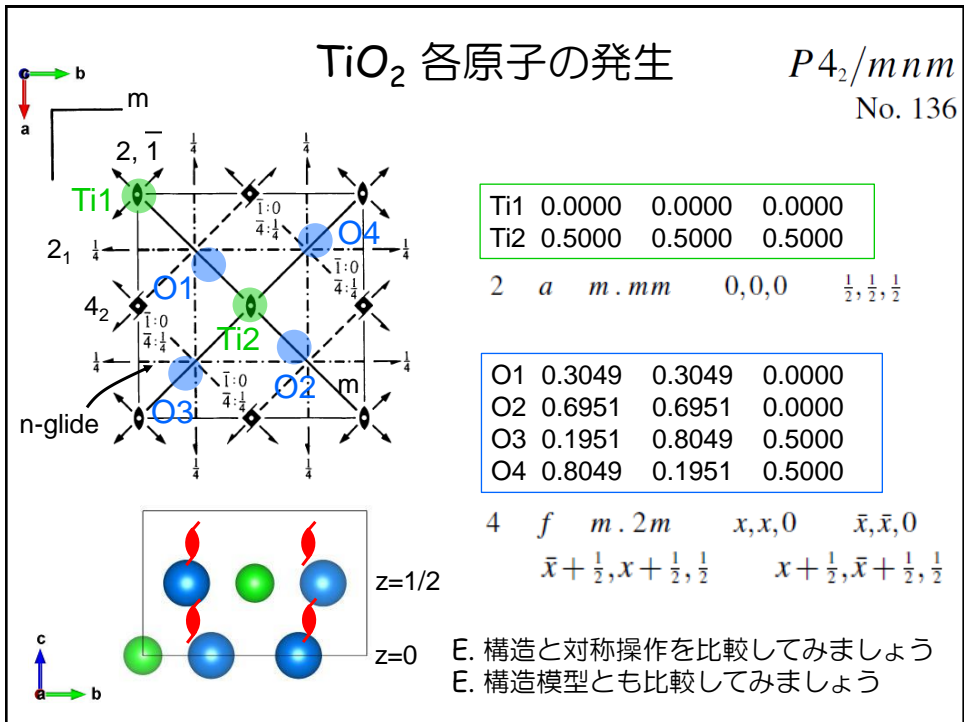
Ti1 O1

4	g	m . 2m	x, \bar{x} , 0	\bar{x} , x, 0	x + $\frac{1}{2}$, x + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	x + $\frac{1}{2}$, x + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	○
4	f	m . 2m	x, x, 0	\bar{x} , \bar{x} , 0	\bar{x} + $\frac{1}{2}$, x + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	x + $\frac{1}{2}$, \bar{x} + $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	
4	e	2 . mm	0, 0, z	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, z + $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, z + $\frac{1}{2}$	0, 0, z	
4	d	$\bar{4}$. .	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{3}{4}$	
4	c	2/m . .	0, $\frac{1}{2}$, 0	0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, 0, 0	
2	b	m . mm	0, 0, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 0			
2	a	m . mm	0, 0, 0	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$			

Q. 独立原子のみが与えられました
残りの原子座標を計算しましょう

Ti1	0.0000	0.0000	0.0000
O1	0.3049	0.3049	0.0000

TiとOが1:2
Tiが2個, Oが4個
Ti上にm, . , 2m
O上にm, . , mm
Tiは動かせない
Oはx=yでzはfix



無機化学I 第8回小テスト

学籍番号	
氏名	

鉄系超伝導体*の構造図、構造パラメータを示す
Q1-Q6の問いに答えよ

I4/mmm (#139)
a = 3.975, *c* = 12.601 Å
Ba (0, 0, 0)
Fe (0, 1/2, 1/4)
As (0, 0, 0.345)

- Q1. 第8回のキーワード
- Q2. この物質中にあるそれぞれの原子数(多重度)
- Q3. Baの全原子位置(Ba1 (*,*,*), Ba2(*,*,*)...)
- Q4. Feの全原子位置
- Q5. Asの全原子位置
- Q6. Ba1とBa2を関係付ける対称操作を2つ以上示せ

- Q1. 第4回のキーワード
- Q2. この物質中にあるそれぞれの原子数(多重度)
- Q3. Baの全原子位置(Ba1 (*,*,*), Ba2(*,*,*)...)
- Q4. Feの全原子位置
- Q5. Asの全原子位置
- Q6. Ba1とBa2を関係付ける対称操作を2つ以上示せ

$I4/mmm$

D_{4h}^{17}

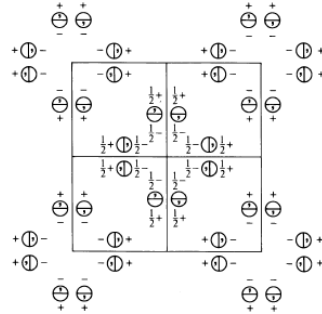
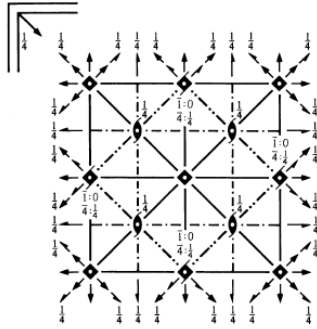
$4/mmm$

Tetragonal

No. 139

$I 4/m 2/m 2/m$

Patterson symmetry $I4/mmm$



Origin at centre ($4/mmm$)

Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}; 0 \leq y \leq \frac{1}{2}; 0 \leq z \leq \frac{1}{2}; x \leq y$

Symmetry operations

For $(0,0,0)+$ set

- | | | | |
|-----------------------|------------------|---------------------------|---------------------------|
| (1) 1 | (2) 2 $0,0,z$ | (3) 4^+ $0,0,z$ | (4) 4^- $0,0,z$ |
| (5) 2 $0,y,0$ | (6) 2 $x,0,0$ | (7) 2 $x,x,0$ | (8) 2 $x,\bar{x},0$ |
| (9) $\bar{1}$ $0,0,0$ | (10) m $x,y,0$ | (11) 4^+ $0,0,z; 0,0,0$ | (12) 4^- $0,0,z; 0,0,0$ |
| (13) m $x,0,z$ | (14) m $0,y,z$ | (15) m x,\bar{x},z | (16) m x,x,z |

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

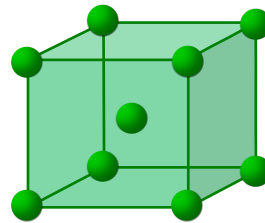
Coordinates

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

32	o	1	(1) x,y,z	(2) \bar{x},\bar{y},z	(3) \bar{y},x,z	(4) y,\bar{x},z
			(5) \bar{x},y,\bar{z}	(6) x,\bar{y},\bar{z}	(7) y,x,\bar{z}	(8) \bar{y},\bar{x},\bar{z}
			(9) \bar{x},y,z	(10) x,y,\bar{z}	(11) y,\bar{x},z	(12) \bar{y},x,\bar{z}
			(13) x,\bar{y},z	(14) \bar{x},y,z	(15) \bar{y},\bar{x},z	(16) y,x,z
16	n	$.m.$	$0,y,z$	$0,\bar{y},z$	$\bar{y},0,z$	$y,0,z$
			$0,y,\bar{z}$	$0,\bar{y},\bar{z}$	$y,0,\bar{z}$	$\bar{y},0,\bar{z}$
16	m	$.m$	x,x,z	\bar{x},\bar{x},z	\bar{x},x,z	x,\bar{x},z
			\bar{x},x,\bar{z}	x,\bar{x},\bar{z}	x,x,\bar{z}	\bar{x},\bar{x},\bar{z}
16	l	$m..$	$x,y,0$	$\bar{x},\bar{y},0$	$\bar{y},x,0$	$y,\bar{x},0$
			$\bar{x},y,0$	$x,\bar{y},0$	$y,x,0$	$\bar{y},\bar{x},0$
16	k	$..2$	$x,x+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\bar{x},\bar{x}+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\bar{x}+\frac{1}{2},x,\frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{2},\bar{x},\frac{1}{2}$
			$\bar{x},\bar{x}+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$x,x+\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{2},\bar{x},\frac{1}{2}$	$\bar{x}+\frac{1}{2},x,\frac{1}{2}$
8	j	$m2m.$	$x,\frac{1}{2},0$	$\bar{x},\frac{1}{2},0$	$\frac{1}{2},x,0$	$\frac{1}{2},\bar{x},0$
8	i	$m2m.$	$x,0,0$	$\bar{x},0,0$	$0,x,0$	$0,\bar{x},0$
8	h	$m.2m$	$x,x,0$	$\bar{x},\bar{x},0$	$\bar{x},x,0$	$x,\bar{x},0$
8	g	$2mm.$	$0,\frac{1}{2},z$	$\frac{1}{2},0,z$	$0,\frac{1}{2},\bar{z}$	$\frac{1}{2},0,\bar{z}$
8	f	$..2/m$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$
4	e	$4mm$	$0,0,z$	$0,0,\bar{z}$		
4	d	$\bar{4}m2$	$0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$		
4	c	$mmm.$	$0,\frac{1}{2},0$	$\frac{1}{2},0,0$		
2	b	$4/mmm$	$0,0,\frac{1}{2}$			
2	a	$4/mmm$	$0,0,0$			

I-centerに伴う並進分:
記述してある座標から
 $+(1/2,1/2,1/2)$ して
残りを発生させる

また、 $y=1$ は $y=0$ と同義
つまり、 $y=1.32 \rightarrow 0.32$
 $y=-1.22 \rightarrow 0.22$



体心格子
Body centered
I