

電卓シリーズ (5)

鉱物の結晶図の作図

金沢康夫 (鉱床部)

1. まえがき

鉱物結晶の形態を研究する時 まず最初に結晶の測角を行なう。論文では 測角した結果に基づきその結晶の外形を正確に記載しなければならない。もともと3次元に広がる結晶の形態をわかりやすく2次元の用紙の上に表わすことは容易なことではない。そのためにいろいろな投影法と作図法が工夫されてきた。しかし実際に作図するとすると 面角度の計算 投影ネットへの結晶面のプロット 見やすい位置への結晶の回転 そして製図といったずいぶん労力の要る過程をたどる。

そこで今回 結晶図の作図を卓上型電子計算機 YHP-20とプロッタを用いて行なうプログラムを作成したのでそれを紹介する。

2. 結晶図の作図の規約

結晶の測角 投影および作図については 実験鉱物学(1965)に詳しく述べてあるのでここでは最もよく用いられている投影法と作図法およびその規約について簡単に触れておこう。

接触測角器または反射測角器を用いて得られた測角値は球面座標の緯度 ρ と経度 φ によって表わされる。これを投影するには 普通ウルフ(Wulff)のネット(第2

図)を使用するステレオ投影法が用いられる。球面座標値 ρ と φ は地球儀と異なって第2図のように北極を $\rho = 0^\circ$ 赤道線を $\rho = 90^\circ$ 南極を $\rho = 180^\circ$ 緯度 φ については $\varphi = 0^\circ$ から左回りに -180° まで 右回りに $+180^\circ$ まで取る。

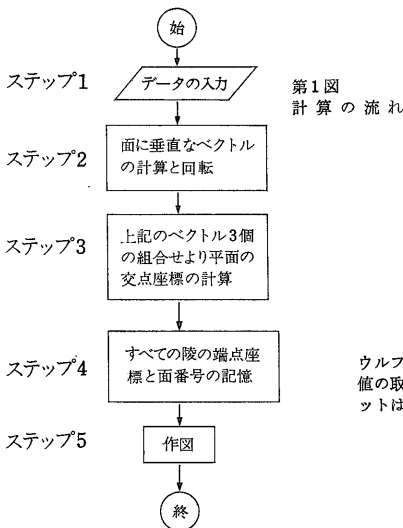
ウルフのネットを用いると 結晶の晶帯軸と結晶面の角度を見つけ出すことや結晶の回転が容易にできる。

結晶図作図については 古くからの国際的約束があり結晶の c 軸を紙面上の上下に立て a 面が紙面の手前にくるように置き かつ視点を右へ $18^\circ 26'$ ($\tan^{-1} 1/3$) 上方へ $6^\circ 23'$ ($\sin^{-1} 1/9$) または $9^\circ 28'$ ($\tan^{-1} 1/6$) に置くことになっている。

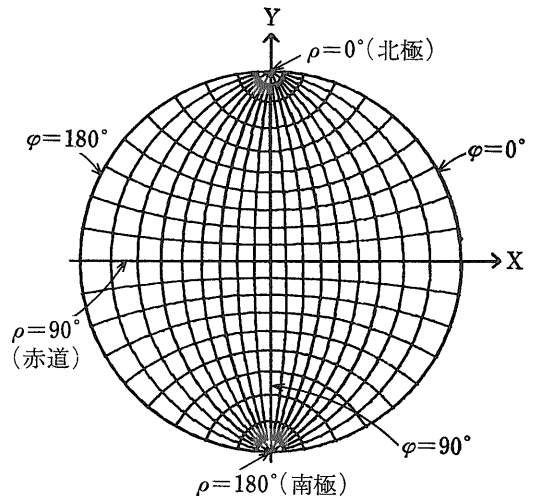
国際的約束に基づく作図法には Parkerの作図法と高野の作図法がある(実験鉱物学参照)。Parkerの作図法では 結晶の面指数を必要とし 稜の方向を計算しなければならないのに対し 高野の作図法では特殊なステレオネット(高野ネット)を用いて計算なしで正確な作図をすることができる。

3. 作図の方法

結晶図を作成するにあたっての問題点は 与えられた結晶面を示すデータからどのようにして結晶の隅を見つ



第2図 ウルフネットと球面座標値の取り方。ウルフネットは鉱床部小出仁技官の作図による。



け出し その隅からどのようにして1つの稜の端点となるべき2つの隅を捜し出すかというところにある。また結晶を透視した図を描く時には結晶の裏側の見えない稜を表側の見える稜と識別する必要がある。

以上の点に留意しながら 第1図に示した計算の流れの順序に従い 作図の方法について説明する。ここでは第3図に示すように六角柱状の結晶を例にとった作図の過程を参照していただきたい。

3.1 データの入力(ステップ1)

このプログラムでは入力データとして次の2種類が可能である。

1. 測角した時の結晶面を示す球面座標値(緯度 ρ 経度 φ)
2. ミラーの面指数と格子定数または軸比

上のデータを入力する時 同時に結晶内部に任意に仮定した原点から結晶面までの距離も入力する。この距離の違いは結晶面の大きさの違いとなって表われる。もし同価な面が同じ大きさに発達していれば(この結晶の形態を理想形とよぶ) 同価な面に同じ距離を入力すればよい。しかし一般に鉱物の結晶面の発達の仕方は生成条件によりずいぶんちがってくるため 作図ではまず一度理想形を描いてみて それから試行錯誤で実際の結晶によく合うように結晶面までの距離を与えるとよい。

3.2 結晶面のベクトル表示(ステップ2)

結晶面をベクトルにより表わしておくことは以下の結晶の回転や結晶の隅を求めるのに非常に便利である。

入力されたデータを直角座標系により次のように結晶面に垂直な位置ベクトルに変換する(第3-2図)。

データが球面座標値(ρ φ)の場合には 第2図に示したように 球の中心から $\rho=90^\circ$ $\varphi=0^\circ$ の方向をx軸 $\rho=0^\circ$ の方向をy軸に取る。この時の(ρ φ) \rightarrow (x y z)の変換式は

$$x = \sin \rho \cos \varphi$$

$$y = \cos \rho$$

$$z = \sin \rho \sin \varphi$$

となる。

データがミラーの面指数(hkl)の場合にはそれに垂直な方向を見出さなければならない。これには逆格子ベクトルを用いればよい。すなわち 指数(hkl)の面に垂直な逆格子ベクトル r^* は 次の式で示すことができる。

$$r^* = ha^* + kb^* + lc^*$$

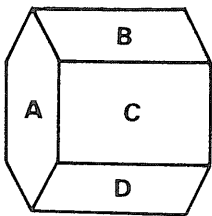
$$a^* = (b \times c) / V$$

$$b^* = (c \times a) / V$$

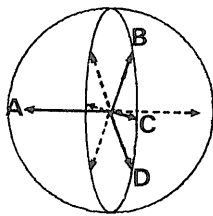
$$c^* = (a \times b) / V$$

ここで a b c は実格子軸 a^* b^* c^* は逆格子軸 V は単位格子の体積である。

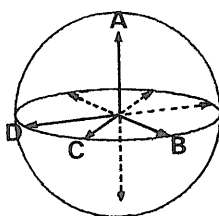
このようにして計算した逆格子ベクトル hkl は結晶の c 軸が作図紙面上の縦軸に平行 a 面が紙面に平行かつ長さが1となるように変換する。紙面上の横軸をX



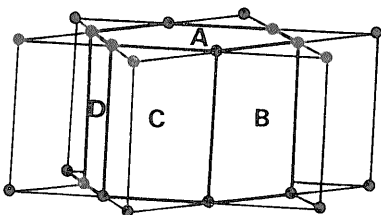
①六角柱状の結晶



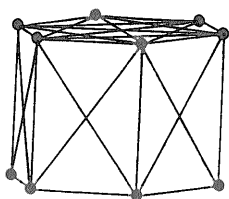
②結晶面のベクトル表示



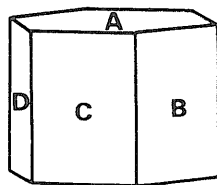
③回転操作を行なった後のベクトル



④すべての3個の結晶面の組み合わせから得られた交点



⑤結晶の隅点間のすべての線分



⑥最終図

第3図 結晶図の作図過程

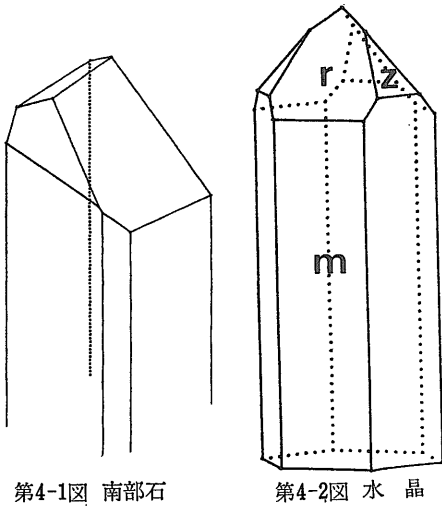


表1 南部石結晶の測角値

| 面番号 | ρ' | φ' | 面までの距離 |
|-----|---------|------------|--------|
| 1 | 4.93° | -152.70° | 1.00 |
| 2 | 175.00 | 27.28 | 1.00 |
| 3 | 53.42 | -152.72 | 1.25 |
| 4 | 97.85 | -152.72 | 1.00 |
| 5 | 87.92 | 27.28 | 1.00 |
| 6 | 44.63 | -68.32 | 1.10 |
| 7 | 88.08 | -125.08 | 1.40 |
| 8 | 108.85 | -68.32 | 2.20 |

(鉱床部 達藤祐二技官による)

軸 縦軸をY軸 それらに垂直な方向をZ軸とすれば
結晶軸との位置関係は

$$c // Y$$

$$b \times c // Z$$

$$c \times (b \times c) // X$$

となる。

得られた位置ベクトルは前述した正規の位置に来るように Y軸 X軸の順序で軸のまわりに回転する(第3-3図)。

以上のステップで結晶面はすべてベクトルにより表示され 回転操作も行なわれたわけである。 次のステップでは このベクトル集合から結晶の隅を見つけ出す。

3.3 結晶の隅の見つけ方(ステップ3)

今 1つの結晶面を表わす位置ベクトルの終点の座標が $(h_i \ k_i \ l_i)$ 原点から結晶面までの距離を r_i とす

ると この結晶面は

$$h_i x + k_i y + l_i z = r_i$$

となる平面方程式で表わされる。 n個の結晶面が存在する場合にはそれらに対応するn個の平面方程式が作られる。

さて結晶の隅は3個以上の結晶面の交点であるから隅の座標はn個の平面方程式のうち適当な3個の平面方程式を連立させた時の解である。 しかしその解には隅を示すものの他に結晶外部の交点も含まれている(第3-4図)。 そこでこのような結晶外部の交点は排除しなければならない。 そのためには連立方程式の解の中から結晶内部(境界を含む)の領域を示す次のn個の不等式を満足するものだけを選びだせばよい。

$$h_1 x + k_1 y + l_1 z \leq r_1$$

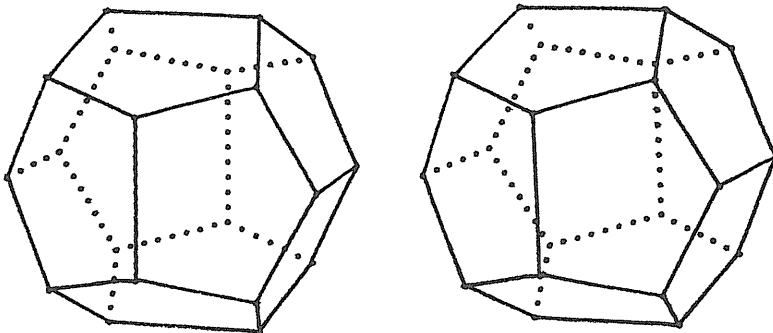
$$h_2 x + k_2 y + l_2 z \leq r_2$$

.....

$$h_n x + k_n y + l_n z \leq r_n$$

3.4 面番号の記憶(ステップ4)

このステップでは次に行なう稜の線引きのために上で求めた隅の座標とそれを求めるのに使用した結晶面をい



第4-3図
黄鉄鉱

っしょに記憶する。結晶面はデータ入力の際の順番を面番号として識別する。1つの隅が4つ以上の結晶面の交点である場合もこの面番号はすべて記憶しておく。この時結晶の裏側の見えない稜を点線で引く準備のため結晶面を表わす位置ベクトルの z 座標が負値のものは面番号に負号を付けておく。

3.5 稜の線引き(ステップ5)

稜は2つの隅の間を直線で結んだものであるがステップ4で記憶した隅を示す交点間をすべて直線で結ぶわけにはいかない(第3—5図)。結晶の稜は2つの結晶面の交線であるから2つの面が共有している隅の間の線分だけが稜となる。したがって前のステップで記憶した任意の2つの面番号を共に含む隅を選びだし線引きを行なう。もし共有する2つの面番号がともに負値である場合その稜は結晶の裏側であることを示すから点線を引く。

4. 結晶の立体透視図

立体透視法によると結晶の外形を3次元的に見ることが可能である。立体透視図は航空写真などでなじみが深い。近年結晶構造図にもごく普通に用いられている。立体透視図に関する説明は省略するがここでは結晶を Y 軸(紙面の縦軸)に関し互いに 6° 回転した左目用と右目用の2つの透視図を描くようにした。任意の方向から見た作図が可能であるのは前に述べた平行直斜投影の場合と同様である。

平行直斜投影図を描く場合にも一度その前に立体透視図を描いてみたほうがよい。これにより結晶の面構成がよく理解できどの方向から見た場合が一番よく結晶の特徴を表わすことができるかを判断できる。

またもし結晶構造がわかっているのならこの同じ図法による結晶の外形図と構造図は両者を比較検討するのに便利であろう。

5. 作図の例

実際に計算機で作図した結晶図の2—3の例を紹介する。

第4図の1—2—3は平行直斜投影 国際的規約に基づく平行直斜投影 それに立体透視による例でそれぞれ南部石 水晶 黄鉄鉱でよく見られる結晶形態を示している。

南部石は吉井ら(1972—1973)が新鉱物として記載を行なったものである。第1表は遠藤ら(1972)が測角した南部石結晶の測角データであるが第4—1図はこの測角データをもとに Y 軸のまわりに -140° X 軸の

まわりに 30° の回転を行なった平行直斜投影図である。第1表の結晶面までの距離は実際の南部石結晶と外形が合うように任意に与えてある。

第4—2図と第4—3図はDANA(1951)の記載をもとにした作図でどちらも面指数を入力としている。

第4—2図は最もよく見られる水晶の形態を表わしている。これは c 軸方向に伸び $m\{1000\}$ $r\{10\bar{1}1\}$ $z\{01\bar{1}1\}$ 面が特に発達している。

第4—3図は黄鉄鉱の $e\{210\}$ 面によるpyritohedronで鉱物ではめずらしい五角形の結晶面が現われている。

この図では立体化してあるため裏側の面構成もよく理解できる。

今回の作図は結晶が凸面体であるもののみに対して有効である。しかし天然の結晶には双晶 すなわちその多くは凹面体の外形をもつものも多く産する。この双晶を一般的に図化することは今後の課題であるが個々の場合場合にに応じて双晶操作で結びつく結晶片を重ね合わせる方法で図化することは可能である。また外形のみならず結晶の表面の模様(条線やエッチピットなど)や内部欠陥も描きたいという要求が将来でてくるかも知れない。

なおこのプログラムで作図時間はほぼ面の数の階乗に比例する。YHP-20を使った場合の作図時間は面の数が10個の結晶に対して12~13分である。時間のかかるのは難点であるが結晶面が非常に多い場合には結晶を分割して作図するようにすれば時間がかなり節約できる。また理想形に対しては非対称部のみを計算し他の等価な面は対称操作によりくり返す方法も検討中である。

参 考 文 献

- 遠藤祐二・吉井守正(1972):新鉱物南部石の結晶形態。三
 鉱学会講演要旨 13p.
 日本鉱物学会編(1965):実験鉱物学。共立出版 p. 178—
 205.
 C. PALACHE, H. BERMAN and C. FRONDEL (1951): *Dana's
 System of Mineralogy* (7th ed). vol. I, p. 282—283
 and vol. III, p. 13—15.
 M. YOSHII, Y. AOKI and K. MAEDA (1972): Nambulite,
 a new lithium-and sodium-bearing manganese silicate
 from the Funakozawa mine, northeastern Japan. *Min.
 Jour.*, vol. 7, p. 29—44.
 吉井守正・青木義和・前田憲二郎(1973):岩手県舟子沢鉱山
 産の新鉱物南部石。地質調査所月報 vol. 24 p. 223—
 231.