

三斜晶系の軸과 原子座標를 直交規格座標系로의 變換

金勁翰 · 吳美蘭 · 徐日煥

忠南大學校 物理學科

大田市 儒城區 弓洞 220, 305-764

The Transformation from Triclinic Axes and Atomic Coordinates to Orthonormal Ones

Kyung-Han Kim · Mi-Ran Oh · Il-Hwan Suh

Department of Physics, Chungnam National University, Taejon, 305-764 Korea

요 약

많은 幾何學的 計算은 任意的 結晶學的 軸에서 보다 orthonormal 軸에서 훨씬 쉽게 이루어질 수 있다. 本 論文에서는 triclinic cell data와 原子座標들을 orthonormal 座標系의 것으로 變換하는 式을 誘導하고 computer program化 하였다.

Abstract

Geometrical calculations are often more easily made in an orthonormal than in a crystallographic frame. In this paper a rationale for the transformation from a triclinic cell data and atomic coordinates to orthonormal ones has been shown and a computer program has been made for the transformation.

1. 序 論

單位胞 常數인 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ 가 任意的 값을 갖는 경우 그 單位胞內에 있는 原子의 位置를 作圖하기란 不便할 뿐만 아니라 어려움이 있다. 本 論文에서는 三斜晶系の 單位 vector軸들과 orthonormal軸들간의 變換關係를 誘導하고 이를 利用하여 任意的 結晶系の cell data와 原子座標들을 orthonormal 座標系로 變換하는 computer program을 製作하였다.

2. 理 論

2-1. Triclinic axes의 orthonormal axes로의 變換
結晶學的 triclinic cell data를 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ 라 하고, orthonormal軸 vector를 $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ 라고 하자.¹⁾

Fig. 1에서와 같이 orthonormal 座標에서 單位 vector인 \vec{e}_1 은 \vec{a} 軸에 나란하게, 그리고 \vec{e}_2 는 (a, b) 平面에 있으면서 \vec{a} 에 垂直하도록, 그리고 \vec{e}_3 는 \vec{e}_1 과 \vec{e}_2 에 垂直하도록 取한다.

Orthonormal 座標의 單位軸 $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ 에
 對한 triclinic의 單位軸 $\frac{\vec{a}}{a}, \frac{\vec{b}}{b}, \frac{\vec{c}}{c}$ 의 direction
 cosine을 各各 $(l_1, l_2, l_3), (m_1, m_2, m_3), (n_1, n_2,$
 $n_3)$ 라 하면

$$\begin{aligned} \frac{\vec{a}}{a} &= \vec{e}_1, \quad \frac{\vec{a}}{a} \perp \vec{e}_2, \quad \frac{\vec{a}}{a} \perp \vec{e}_3 \\ \frac{\vec{b}}{b} &= \vec{e}_1 \cos \gamma + \vec{e}_2 \sin \gamma + \vec{e}_3 \cos 90^\circ \\ \frac{\vec{c}}{c} &= \vec{e}_1 \cos \beta + \vec{e}_2 n_2 + \vec{e}_3 n_3 \end{aligned}$$

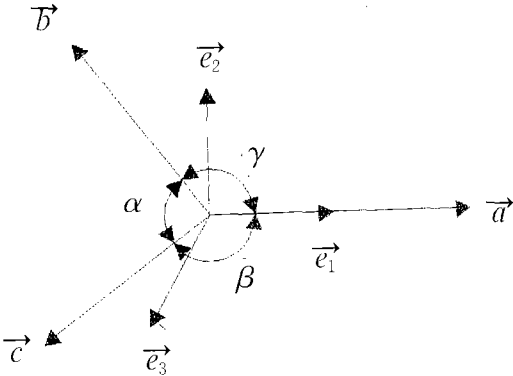


Fig. 1 Orthonormalization of crystallographic bases.

따라서 $l_1=1, l_2=0, l_3=0$ 이고, $m_1=\cos \gamma,$
 $m_2=\sin \gamma, m_3=0$ 그리고 $n_1=\cos \beta$ 이고 n_2 와 n_3
 는 다음같이 求해진다.

b-軸과 c-軸사이의 scalar product인 다음 式
 에

$$\begin{aligned} (\vec{b}/b) \cdot (\vec{c}/c) &= \cos \alpha = (m_1 \vec{e}_1 + m_2 \vec{e}_2 \\ &+ m_3 \vec{e}_3) \cdot (n_1 \vec{e}_1 + n_2 \vec{e}_2 + n_3 \vec{e}_3) = m_1 n_1 + m_2 n_2 \\ &+ m_3 n_3 \end{aligned}$$

위의 값을 代入하면 다음같이 n_2 를 計算 할
 수 있다.

unit vector $\frac{\vec{a}}{a}, \frac{\vec{b}}{b}, \frac{\vec{c}}{c}$ 는 $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ 로
 다음같이 表示된다.

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \cos \gamma \cos \beta + \sin \gamma n_2 \\ n_2 &= (\cos \alpha - \cos \beta \cos \gamma) / \sin \gamma \end{aligned}$$

a-軸에 對하여 $\frac{\vec{a}}{a} \cdot \frac{\vec{a}}{a} = 1 = l_1^2 + l_2^2 + l_3^2$ 이 成立
 하는 것과 같이 나머지 軸에 對하여도 scalar
 product를 適用하면 다음 關係가 나온다.

$$\sum_i l_i^2 = \sum_i m_i^2 = \sum_i n_i^2 = 1$$

式 $\sum_i n_i^2 = 1$ 에서 n_3 를 다음같이 計算할 수
 있다.

$$\cos^2 \beta + \left(\frac{\cos \alpha - \cos \beta \cos \gamma}{\sin \gamma} \right)^2 + n_3^2 = 1$$

$$\begin{aligned} \vec{a}/a &= l_1 \vec{e}_1 + l_2 \vec{e}_2 + l_3 \vec{e}_3 \\ \vec{b}/b &= m_1 \vec{e}_1 + m_2 \vec{e}_2 + m_3 \vec{e}_3 \\ \vec{c}/c &= n_1 \vec{e}_1 + n_2 \vec{e}_2 + n_3 \vec{e}_3 \end{aligned}$$

이를 matrix로 나타내면 다음과 같다.

$$\begin{bmatrix} \vec{a}/a \\ \vec{b}/b \\ \vec{c}/c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \\ \vec{e}_3 \end{bmatrix} \quad (1)$$

Fig. 1에서 다음이 됨을 알 수 있다.

$$n_3^2 = \sin^2 \beta - \frac{(\cos \alpha - \cos \beta \cos \gamma)^2}{\sin^2 \gamma} = \sin^2 \beta - n_2^2$$

위의 값들을 식 (1)에 代入하면 다음과 같이 되며

$$\begin{bmatrix} \frac{\vec{a}}{a} \\ \frac{\vec{b}}{b} \\ \frac{\vec{c}}{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ \cos \beta & n_2 & n_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \\ \vec{e}_3 \end{bmatrix}$$

이 變換 matrix를 다음같이 P^{-1} 이라 놓으면

$$\begin{bmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ b \cos \gamma & b \sin \gamma & 0 \\ c \cos \beta & c n_2 & c n_3 \end{bmatrix} = P^{-1} \begin{bmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \\ \vec{e}_3 \end{bmatrix}$$

任意的 triclinic axes를 orthonormal axes로의 變換 matrix는 P 가 되며 다음으로 表示된다.

$$P = \begin{bmatrix} \frac{1}{a} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{a} \cot \gamma & \frac{1}{b \sin \gamma} & 0 \\ \frac{1}{a} \left(\frac{n_2}{n_3} \cot \gamma - \frac{\cos \beta}{n_3} \right) & \frac{-n_2}{b n_3 \sin \gamma} & \frac{1}{c n_3} \end{bmatrix} \quad (2)$$

卽 triclinic cell data로부터 orthonormal cell data를 얻기 爲하여는 다음같이 triclinic 軸 vector를 식(2)에 操作하여야 한다.

$$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 \\ \vec{e}_2 \\ \vec{e}_3 \end{bmatrix} = [P] \begin{bmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{bmatrix}$$

2-2. Triclinic의 原子座標를 orthonormal의 原子座標로 變換

結晶學的 軸變換行列의 transpose의 inverse matrix가 原子座標의 變換行列이다.²⁾ 故로 原子座標 變換 行列은 $[P^{-1}]^T$ 으로 다음의 (3)式같이 表示된다.

式(3)에 fractional atomic coordinates를 代入하면 orthonormal 座標系의 軸의 길이는 Å 單位의 單位 vector 이므로 原子座標는 Å 單位로 나타난다.

$$[P^{-1}]^T = \begin{bmatrix} a & b \cos \gamma & c \cos \beta \\ 0 & b \sin \gamma & c n_2 \\ 0 & 0 & c n_3 \end{bmatrix} \quad (3)$$

2-3. 應用例

(2)式과 (3)式을 使用하여 만든 computer program(ORTHON)을 利用하여 sodium trans-bis(methyliminodiacetato)chromate(III), $C_{10}H_{14}O_8CrNa$,의³⁾ triclinic data를 orthonormal data로 變換하였다.

Table 1에는 $C_{10}H_{14}O_8CrNa$ 分子의 triclinic ($a=8.9856 \text{ \AA}$, $b=13.3075 \text{ \AA}$, $c=6.2606 \text{ \AA}$, $\alpha=76.381^\circ$, $\beta=110.361^\circ$, $\gamma=107.394^\circ$) 및 orthonormal($a=b=c=1 \text{ \AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$) cell data와 各 cell에서의 原子座標들이 보여져 있다.

Fig. 2에는 ORTEP⁴⁾으로 作圖한 triclinic unit cell內에 들어 있는 $C_{10}H_{14}O_8CrNa$ 의 한 分子의 構造이며, Fig. 3는 orthonormal cell을 基準한 同一한 分子構造이다.

3. 結論

任意的 結晶學的 系의 $a(\text{\AA})$, $b(\text{\AA})$, $c(\text{\AA})$, α° , β° , γ° 와 座標를 變換하고자 하는 原子數, 그리고 그 原子數와 같은 數의 原子들의 分率 座標(fractional coordinate)를 computer program ORTHON*에 入力시키면 orthonormal

Table 1. Triclinic and orthonormal cells of $C_{10}H_{14}O_8N_2CrNa$ and atomic coordinates in respective cells.

TRICLINIC				ORTHONORMAL		
a(Å)	8.9856			1.0		
b(Å)	13.3075			1.0		
c(Å)	6.2606			1.0		
$\alpha(^{\circ})$	76.3810			90.0		
$\beta(^{\circ})$	110.3610			90.0		
$\gamma(^{\circ})$	107.3940			90.0		
Atom	x	y	z	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Na	.25100	.75000	.51240	-1.84438	9.96613	2.97486
Cr1	.00000	.50000	.0000	-1.98908	6.34948	.00000
O1	-.15660	.41640	.16700	-3.42742	5.43187	.96956
O2	.05830	.61700	.17370	-2.30903	7.98506	1.00845
O3	-.42090	.35330	.12180	-5.45284	4.59159	.70714
O4	.00470	.76920	.16750	-3.38263	9.91250	.97246
N2	-.19340	.56500	-.20740	-3.53370	6.99605	-1.20411
C1	-.30730	.41280	.05560	-4.52457	5.29008	.32280
C2	-.02590	.68750	.08800	-3.15940	8.80643	.51090
C3	-.34200	.48420	-.17420	-4.61984	5.99861	-1.01136
C4	-.17150	.66530	-.12190	-3.92217	8.34350	-.70772
C5	-.20200	.58750	-.45490	-3.16136	7.06833	-2.64103
O1'	.15660	.58360	-.16700	-.55073	7.26710	-.96956
O2'	-.05830	.38300	-.17370	-1.66913	4.71390	-1.00845
O3'	.42090	.64670	-.12180	1.47468	8.10738	-.70714
O4'	-.00470	.23080	-.16750	-.59553	2.78647	-.97246
N1'	.19340	.43500	.20740	-.44446	5.70292	1.20411
C1'	.30730	.58720	-.05560	.54641	7.40889	-.32280
C2'	.02590	.31250	-.08800	-.81876	3.89254	-.51090
C3'	.34200	.51580	.17420	.64169	6.70036	1.01136
C4'	.17150	.33460	.12190	-.05599	4.35547	.70772
C5'	.20200	.41250	.45490	-.81680	5.63063	2.64103

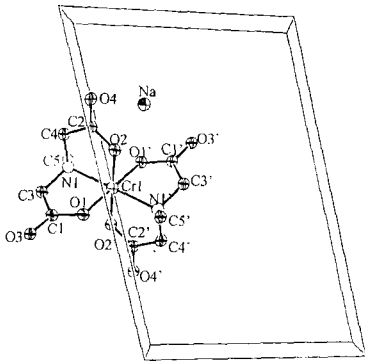


Fig. 2 ORTEPII^[4] drawing of the molecular structure of $C_{10}H_{14}O_8NaCr$ complex in a triclinic unit cell. The Origin is at the lower left, the a-axis is horizontal, the b-axis is vertical, H-atoms have been omitted for clarity.

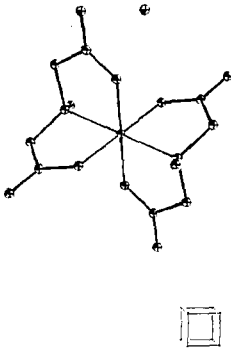


Fig.3 ORTEPII^[4] drawing of the molecular structure of $C_{10}H_{14}O_8CrNa$ complex on the basis of an orthonormal cell. The unit orthonormal cell is shown in the bottom. The Origin is at the lower left, the a-axis is horizontal, the b-axis is vertical. H-atoms have been omitted for clarity.

cell data와 原子들의 座標(Å單位)가 出力된다.

勿論 直交化하기 前後의 原子들간의 距離 및 角度는 變함이 없으며 直交化된 原子座標를 그

대로 ORTEPII^[4]에 利用할 수 있다. 그러나 非直交座標系를 直交座標系로 變換하였으므로 非直交座標系에서 成立하던 對稱性이 變換된 直交座標系에서 그대로 성립하지는 않는다.

* The computer program ORTHON may be obtained through Suh.

參考文獻

- 1) C. Giacovazzo, Fundamentals of Crystallography, International Union of Crystallography, Oxford University Press, p. 68, 1992.
- 2) I. H. Suh, O. K. Oh, Y. K. Yoon & M. J. Kim, J. of the Kor. Phys. Soc., Vol. 19, No. 4, pp. 280-285, 1986.
- 3) J. S. Suh, S. J. Park, K. W Lee, I. H. Suh, J. H. Lee, J. H. Song & M. R. Oh, Acta Cryst. C53, 1997.
- 4) C. K. Johnson, ORTEPII, Report ORNL-5138, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA, 1976.