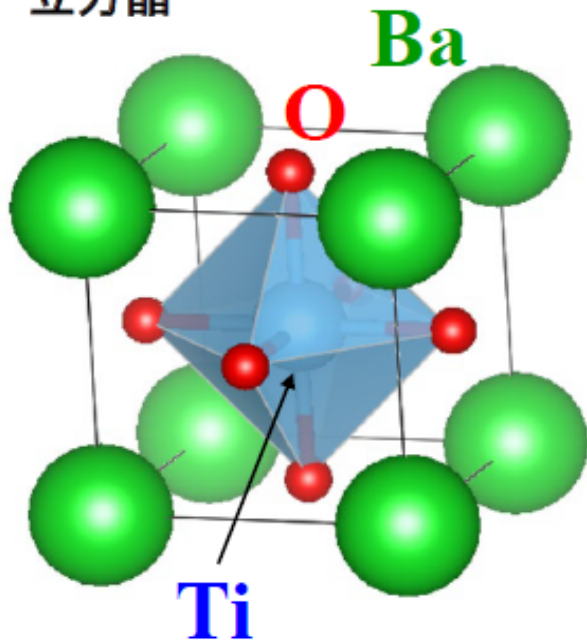


# BaTiO<sub>3</sub>

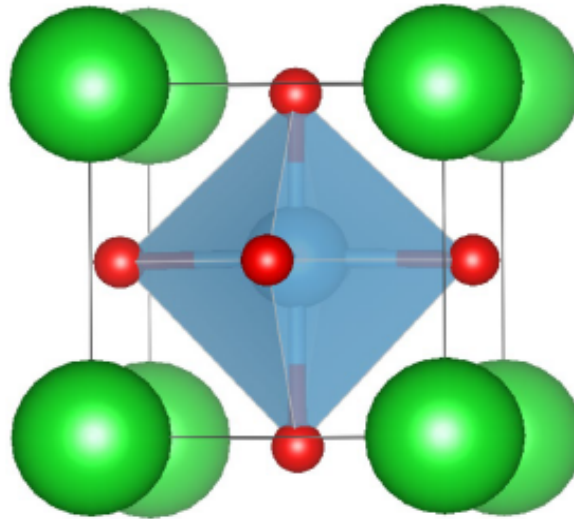
ペロブスカイト ABX<sub>3</sub> の場合、Aサイトの配位多面体は描かないことが多い  
原子の種類は、球の色に合わせて明示する

立方晶



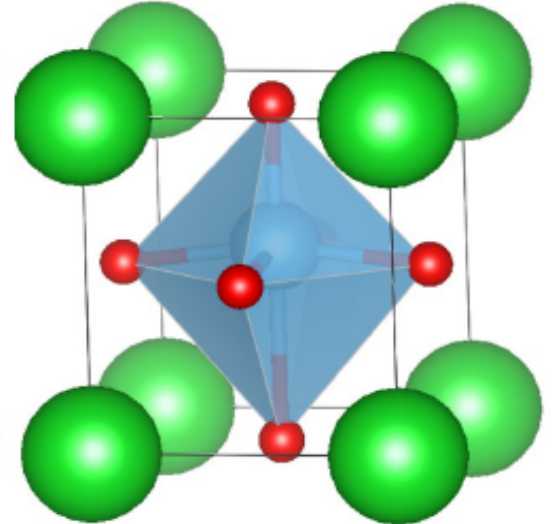
正方晶

角度をうまく選ぶと  
O-Ti-O結合がひずんで  
いることがわかる



正方晶(デフォルメ)

CIFファイル中のc軸長と  
Ti z座標を書き換えて  
デフォルメすると  
わかりやすくなる

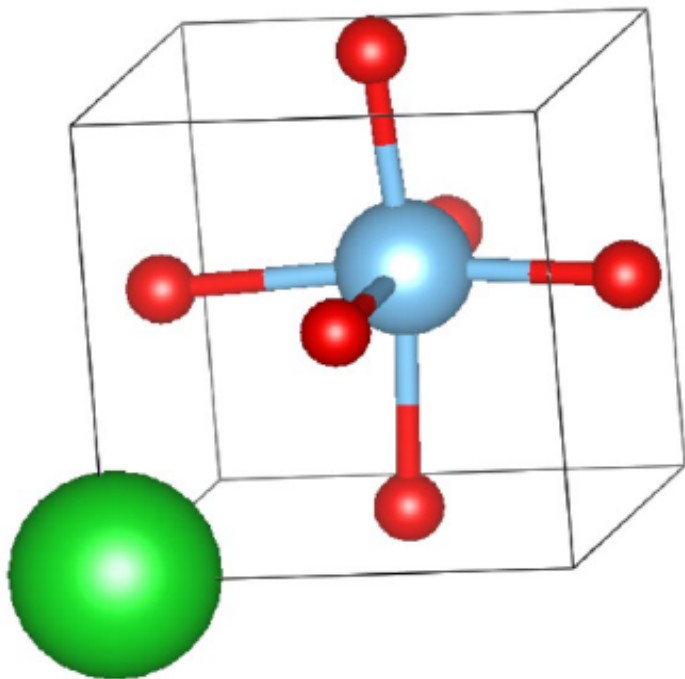


# BaTiO<sub>3</sub>

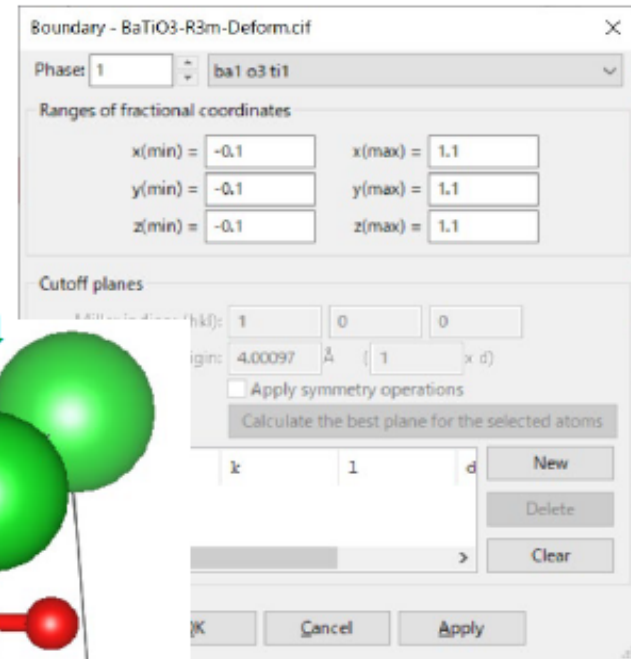
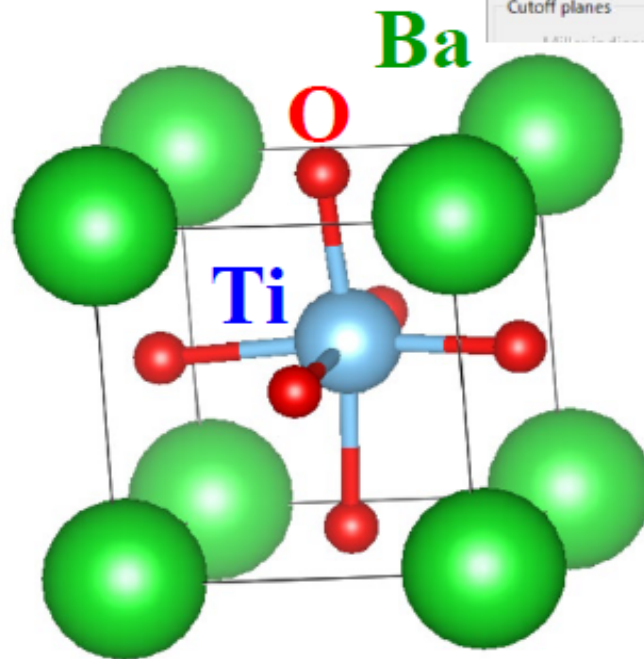
菱面体晶 (デフォルメ)

Ti位置を (0.55 0.55 0.55)に  
して変位をデフォルメ。

Baの座標が (0.013 0.013 0.013)と  
なっており、隣の格子での  
座標が 1.013となるため、  
VESTAのデフォルトの座標範囲  
0~1.0だと、隣の格子のBa原子が  
表示されない



VESTA: Objects => Boundaryで  
表示範囲を -0.1 ~ 1.1 と、  
少し拡大すると、隣の格子の原子も  
表示される

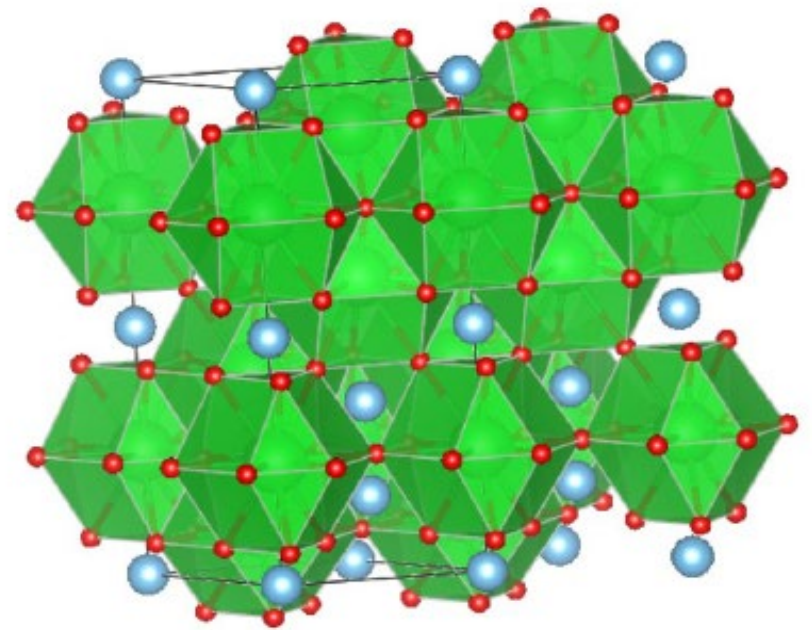
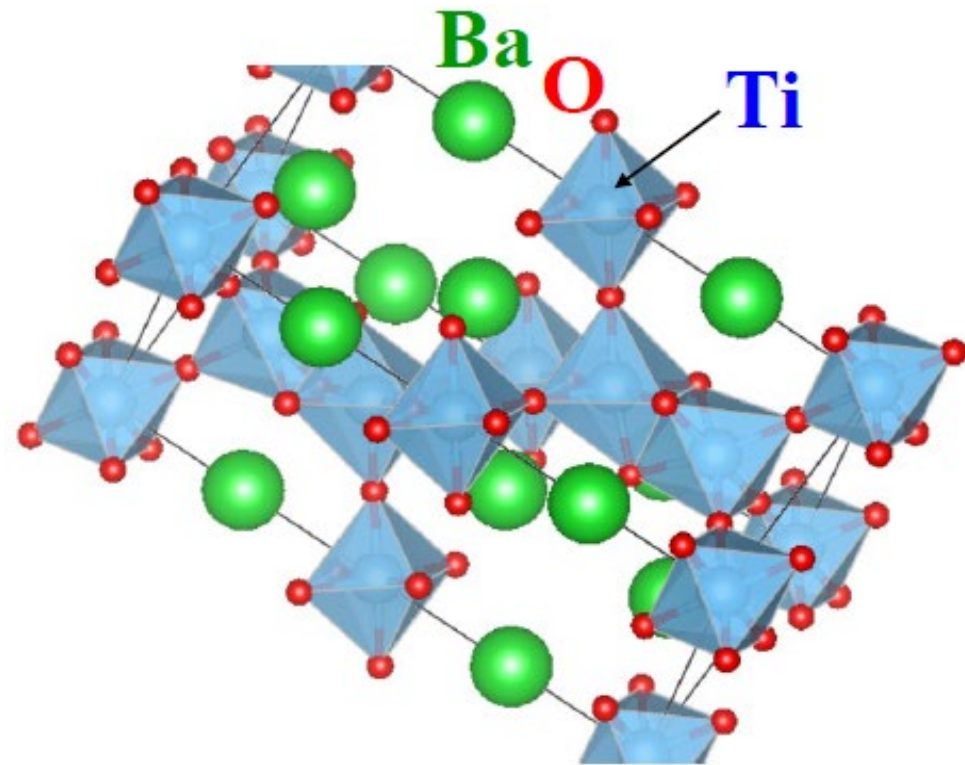


# BaTiO<sub>3</sub>

## 六方晶

角度をうまく合わせると、  
(TiO<sub>6</sub>)八面体が頂点共有して  
面を作っている構造がわかる。  
(TiO<sub>6</sub>)八面体が面共有している  
構造もある

(BaO<sub>n</sub>)多面体だけ表示させ、  
A軸方向の表示範囲を拡大すると、  
(BaO<sub>12</sub>)多面体が面共有でブロックを  
作っていることがわかる



# LaCuOSe

表示範囲をうまく調整すると、  
層状構造がわかりやすくなる

Boundary - LaCuOSe.cif

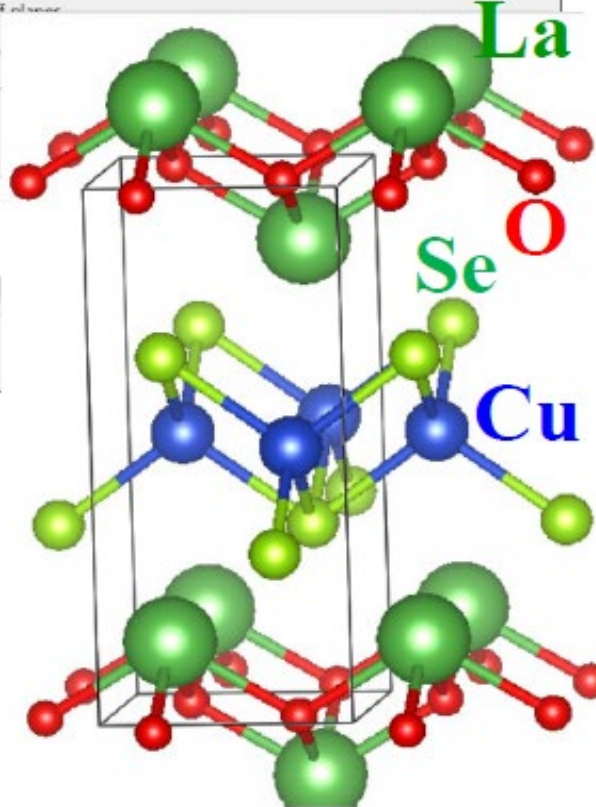
Phase: 1 undefined

Ranges of fractional coordinates

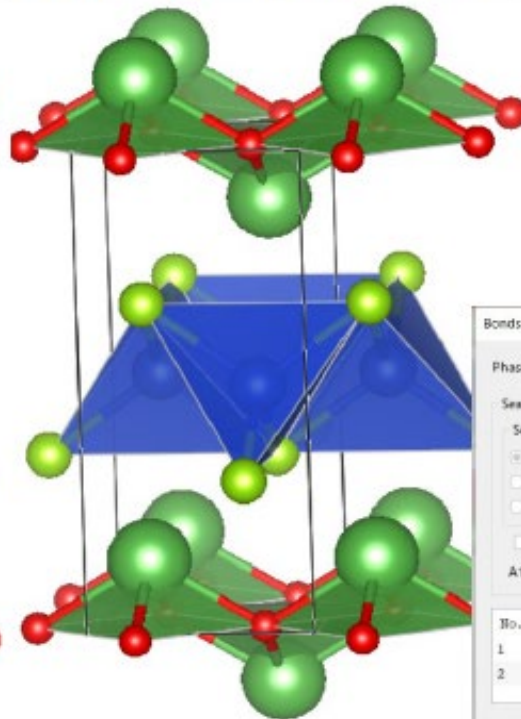
x(min) = 0	x(max) = 1.5
y(min) = 0	y(max) = 1.5
z(min) = -0.2	z(max) = 1.2

Cutoff of size

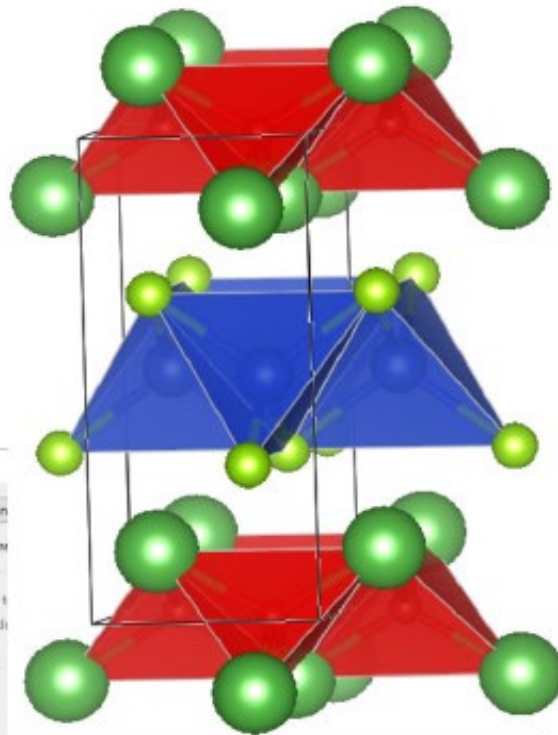
No.



多面体表示では  
(LaO<sub>4</sub>Se<sub>4</sub>)多面体は  
表示しないことが多い。



LaO層は、Oを中心とした  
(OLa<sub>4</sub>)多面体を描くとわかりやすい。  
VESTA: Edit => bondsで、  
Oを左、Laを右の原子にすると、  
多面体の中心がOになる



Bonds - LaCuOSe.cif

Phase: 1 undefined

Search bonds and atoms

Search mode

- Search A2 bonded to A1
- Search atoms bonds
- Search molecules
- Search by label

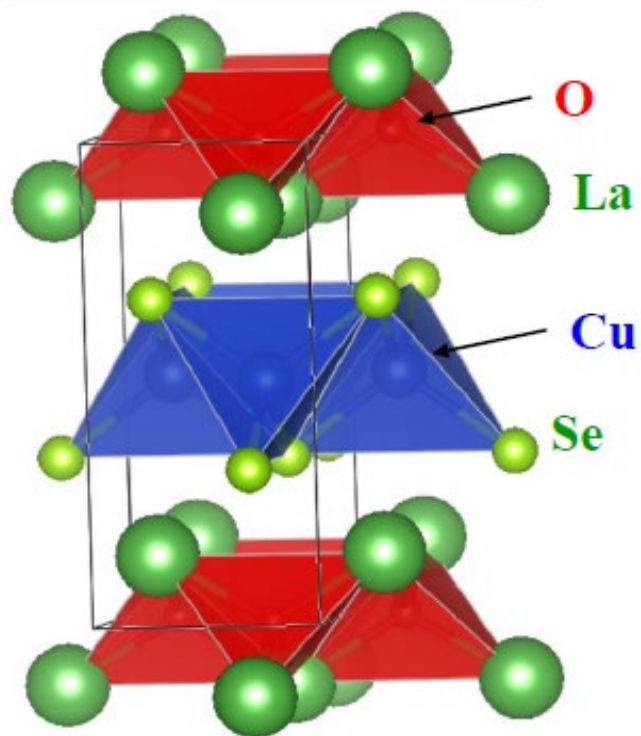
A1: La

No.	Atom 1	Atom 2	Min. (Å)	Max. (Å)	Bond.	Poly.
1	Cu	Se	0	2.76295	2	<input checked="" type="checkbox"/>
2	O	La	0	3	2	<input checked="" type="checkbox"/>

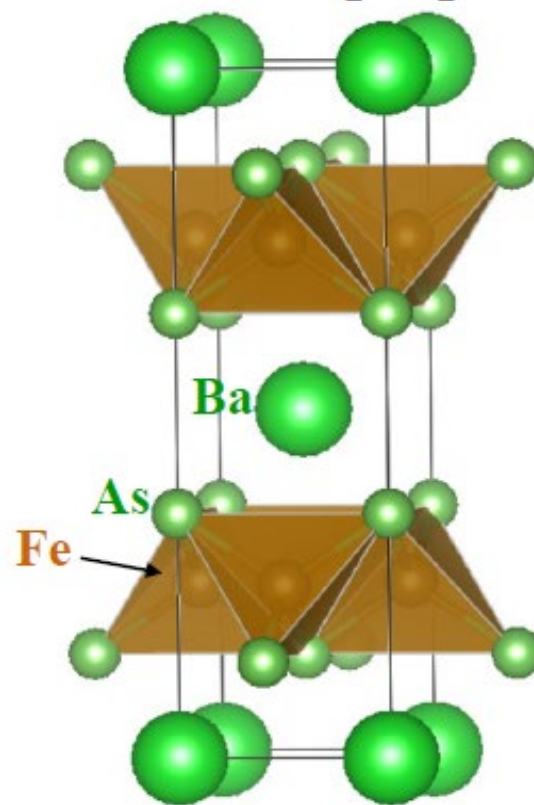
OK Cancel Apply

# LaCuOSe と BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>

LaCuOSe

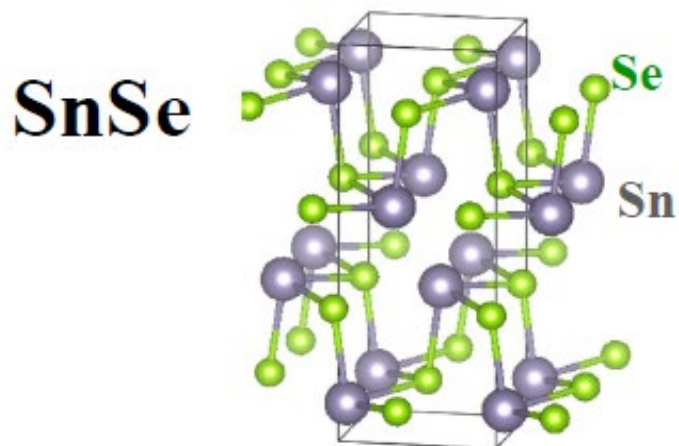
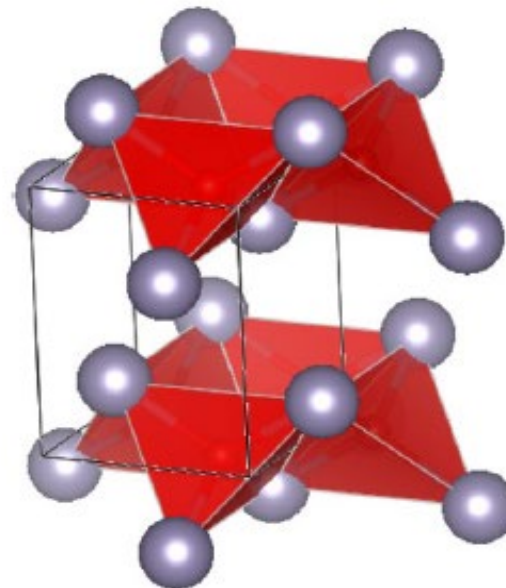
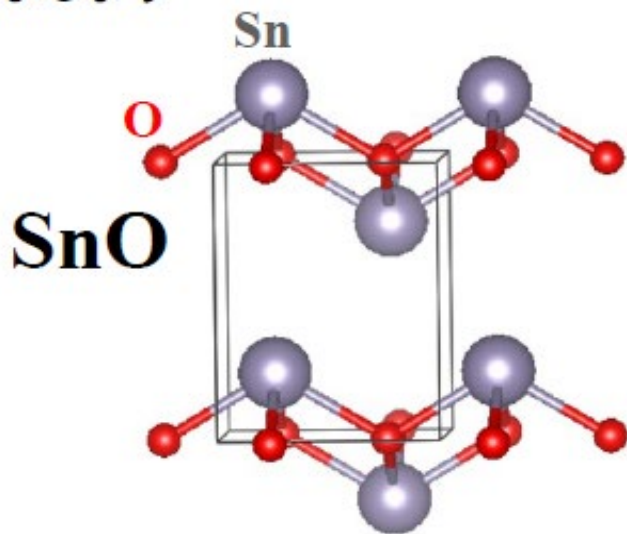


BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>



# SnO と SnSe

どのような表示範囲、  
結合選択をしたか、  
自分で考えてみましょう



# 課題

ZnOの $\sigma_V$ 面,  $\sigma_{V'}$ 面, (0001)面について、以下について述べよ。

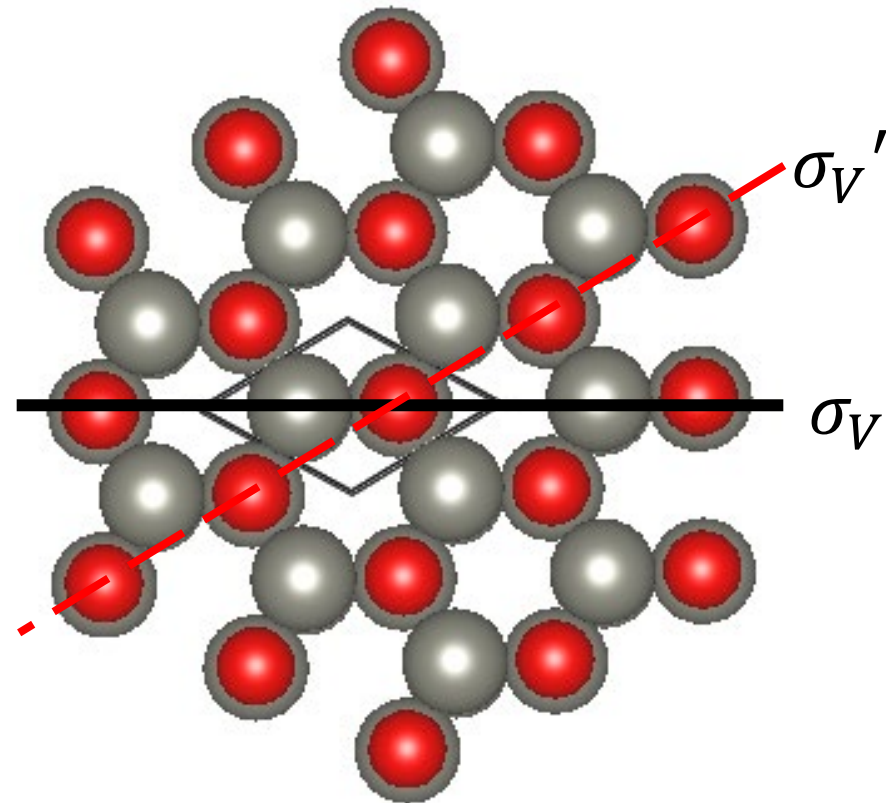
1. 面指数を求めよ
2. そのミラー指数をもつ方位ベクトルを描け
3. 原子配列が3次的にわかる絵をVESTAで描き、特徴を述べよ

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出

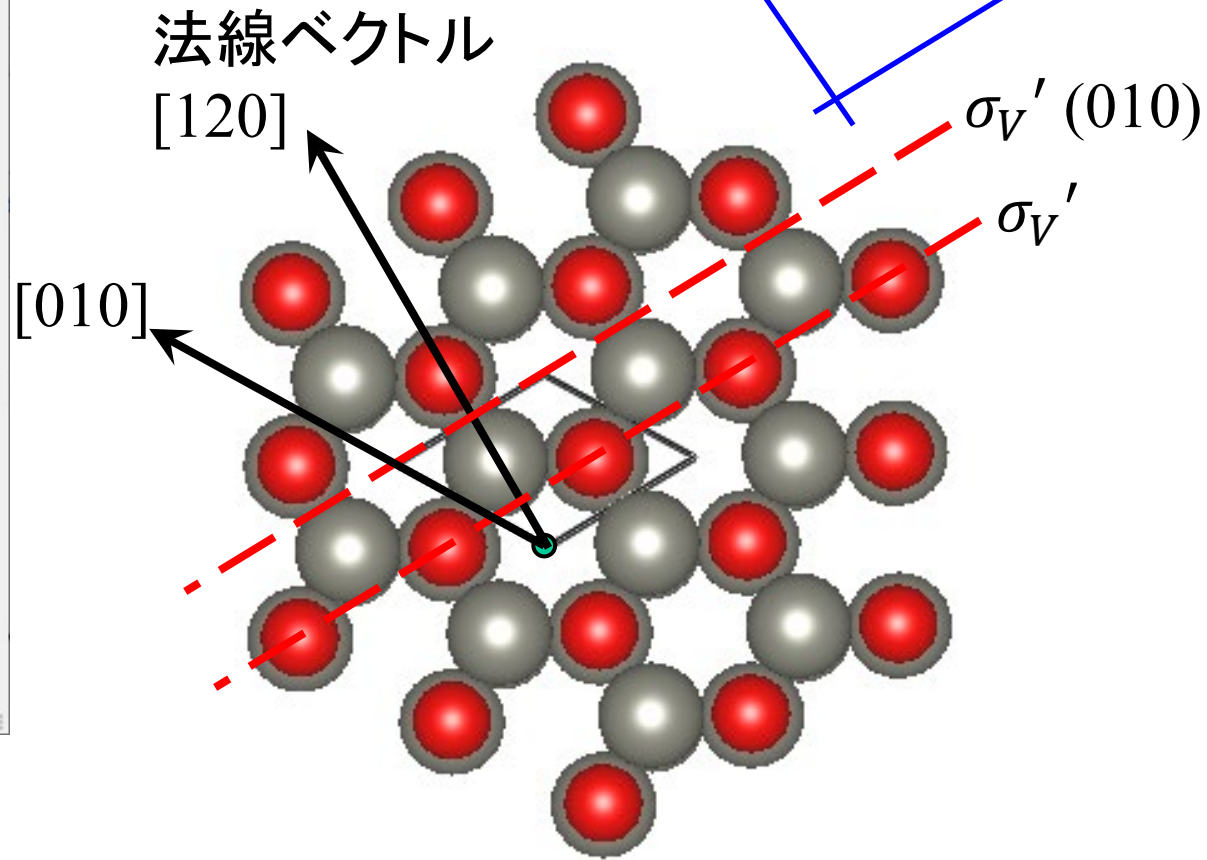
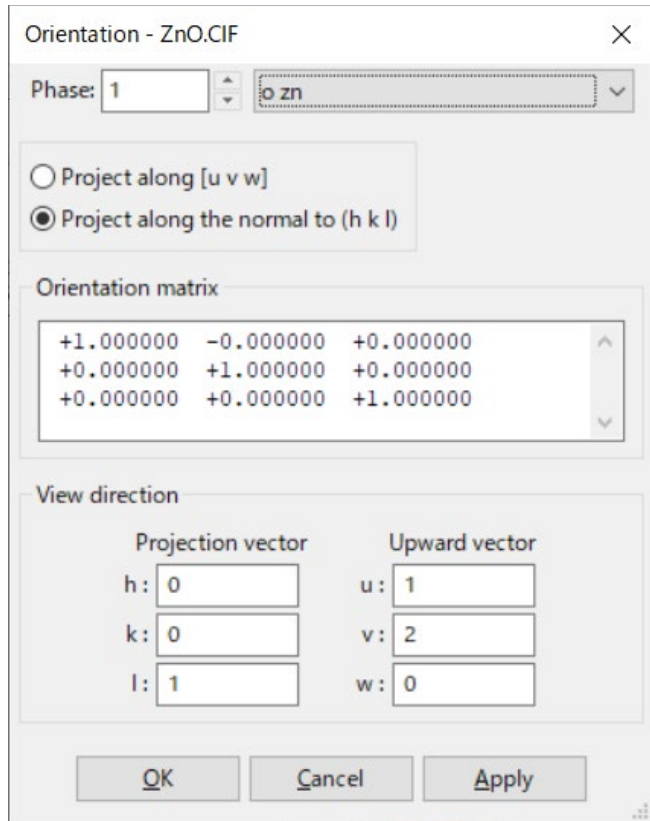
期限: 今日の17:00までに  
できたところまでで可

## ZnOの $a$ - $b$ 面内の原子配列

赤い酸素原子の配列を見ると、 $C_6$ 対称がはっきりわかる



# VESTA: Objects=>Orientationを使う



(理由は不明だが)

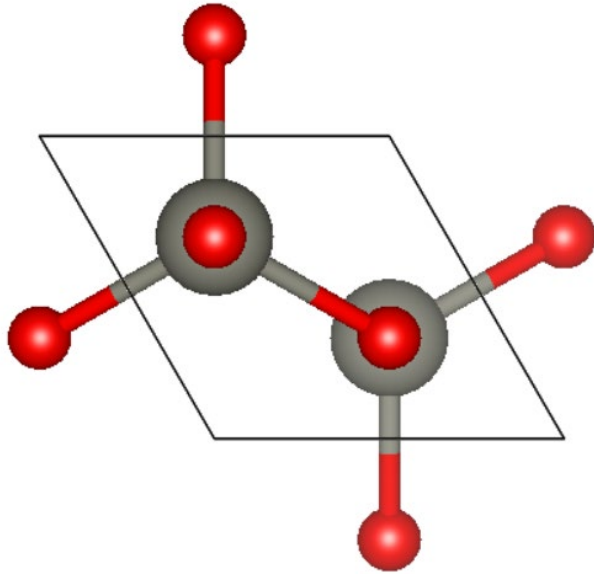
1. Project along the normal to (h k l)  
を選ぶ
2. Projection vectorには視線の方位ベクトル[001]
3. Upward vectorには法線ベクトル[120]



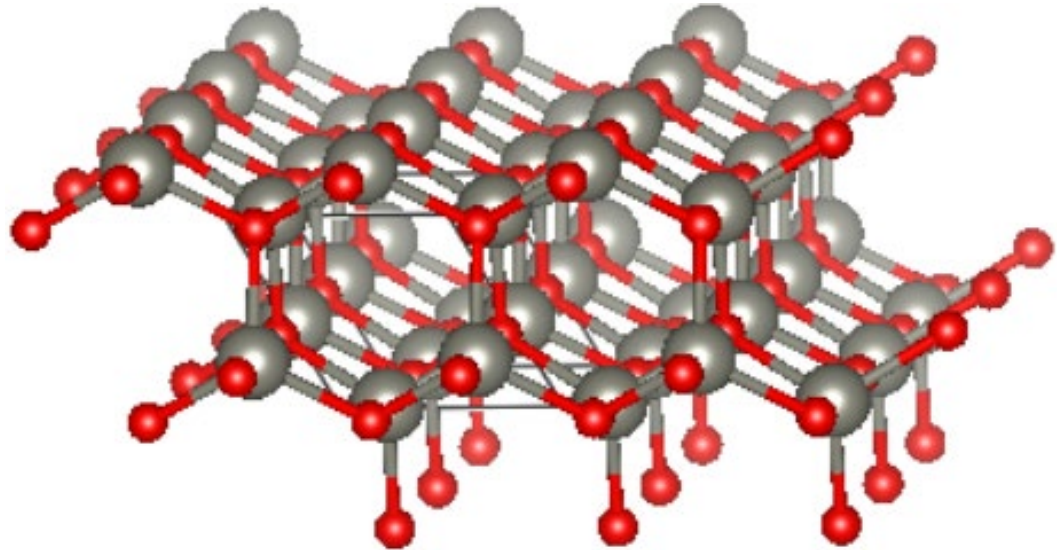
# VESTA: Objects=>Orientationを使う

(理由は不明だが)

1. Project along the normal to (h k l)  
を選ぶ
2. Projection vectorには視線の方位ベクトル[001]
3. Upward vectorには法線ベクトル[120]

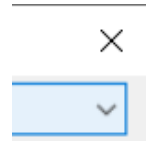
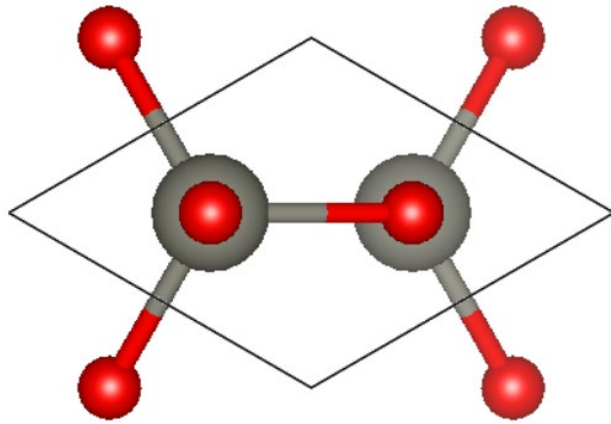


Objects => Boundary で表示範囲を  
 $x = (0, 3), y = (0, 2), z = (0, 3)$   
にして見やすく回転



# $\sigma_v$ 面

Objects => Boundary で表示範囲を  
 $x = (0, 5), y = (0, 5), z = (0, 3)$



Project along [u v w]  
 Project along the normal to (h k l)

Orientation matrix

+0.866025	-0.500000	+0.000000
+0.500000	+0.866025	+0.000000
+0.000000	+0.000000	+1.000000

View direction

Projection vector

h:   
k:   
l:

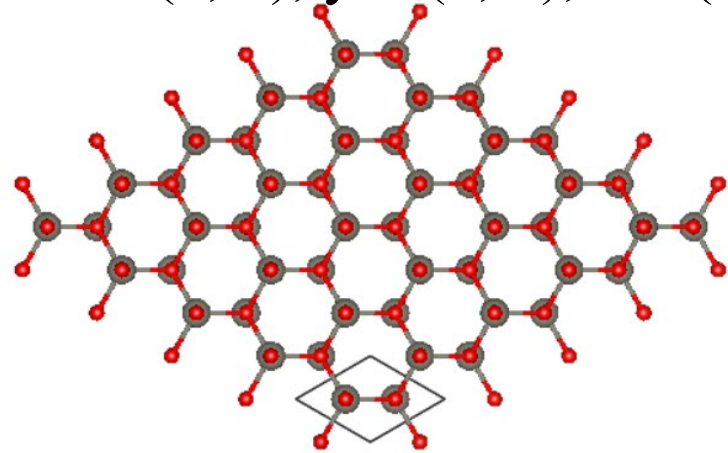
Upward vector

u:   
v:   
w:

OK

Cancel

Apply



余計な原子を削除して見やすく回転

