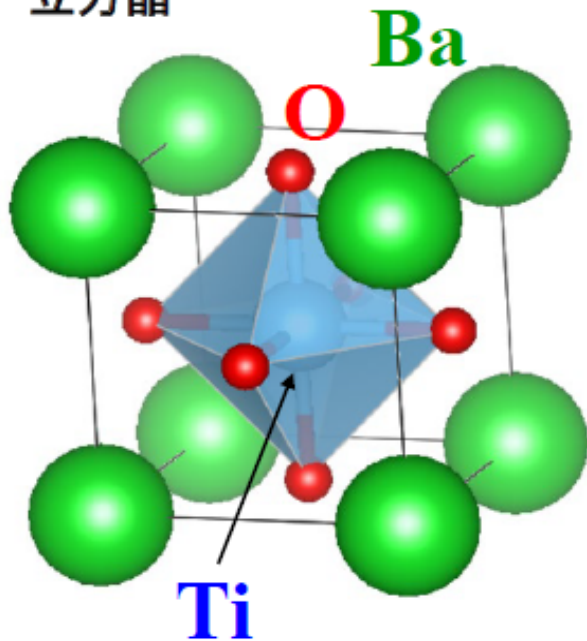


BaTiO₃

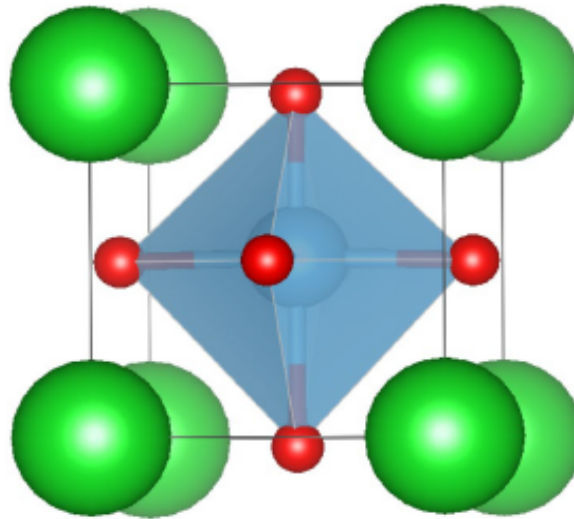
ペロブスカイト ABX₃ の場合、Aサイトの配位多面体は描かないことが多い
原子の種類は、球の色に合わせて明示する

立方晶



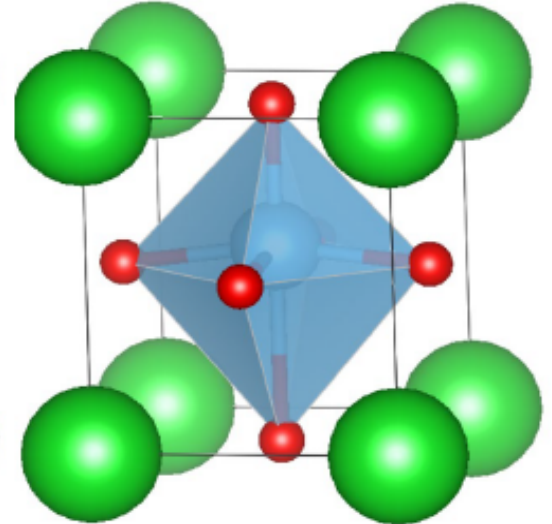
正方晶

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

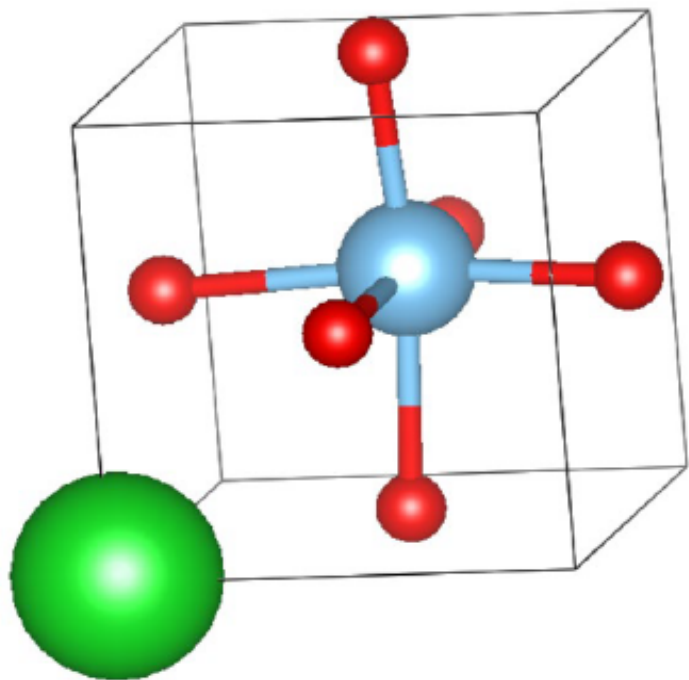


BaTiO₃

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。

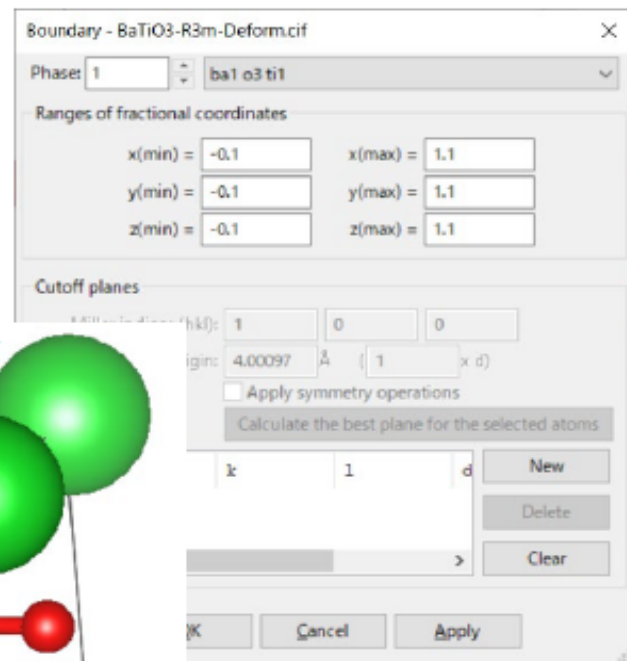
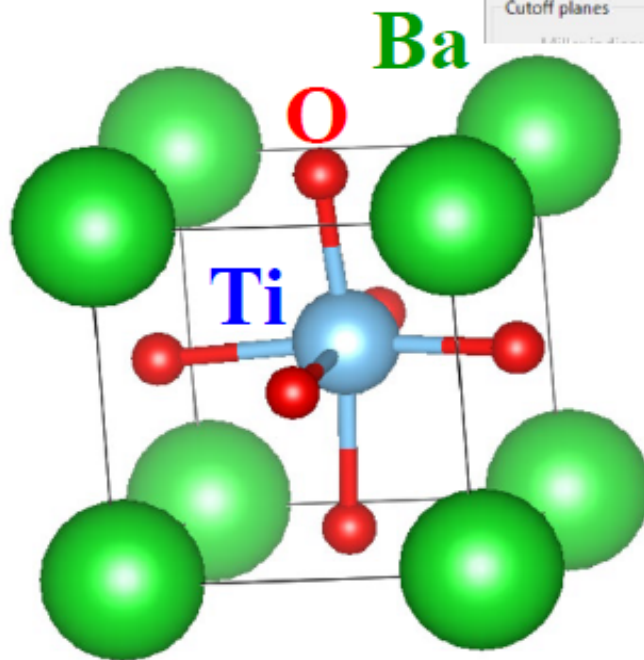
Baの座標が (0.013 0.013 0.013)と
なっており、隣の格子での
座標が 1.013となるため、
VESTAのデフォルトの座標範囲
0~1.0だと、隣の格子のBa原子が
表示されない



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

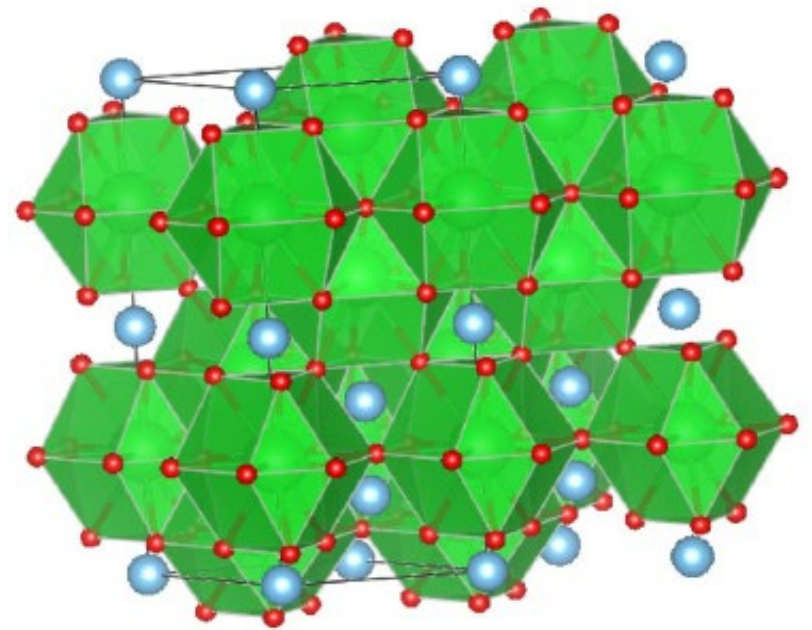
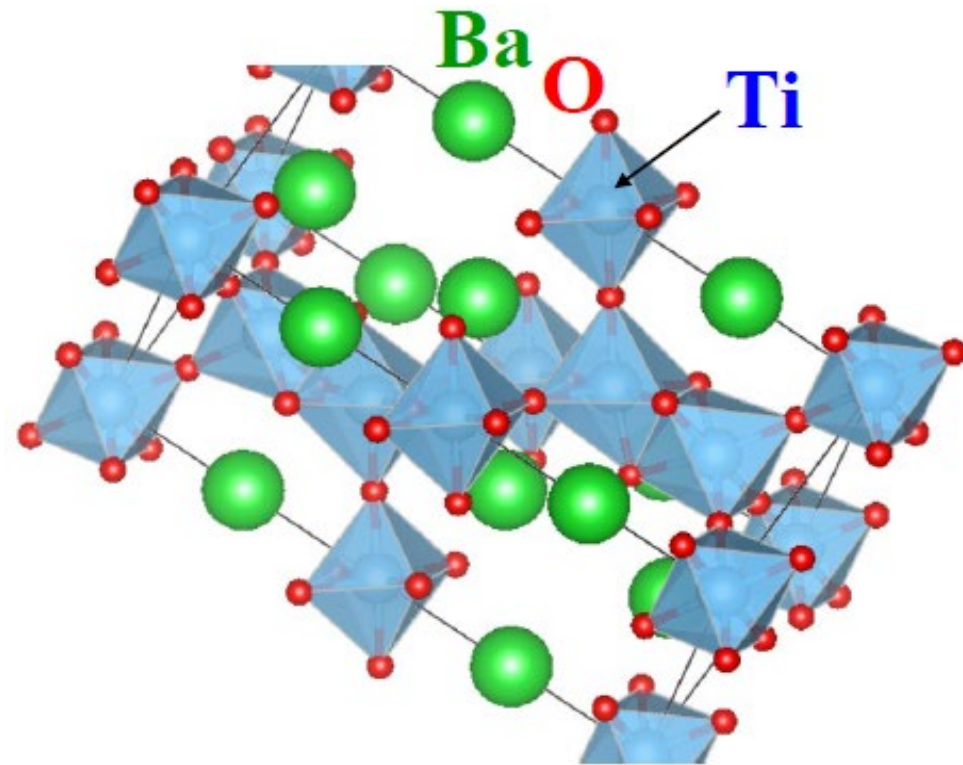


BaTiO₃

六方晶

角度をうまく合わせると、
(TiO₆)八面体が頂点共有して
面を作っている構造がわかる。
(TiO₆)八面体が面共有している
構造もある

(BaO_n)多面体だけ表示させ、
A軸方向の表示範囲を拡大すると、
(BaO₁₂)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

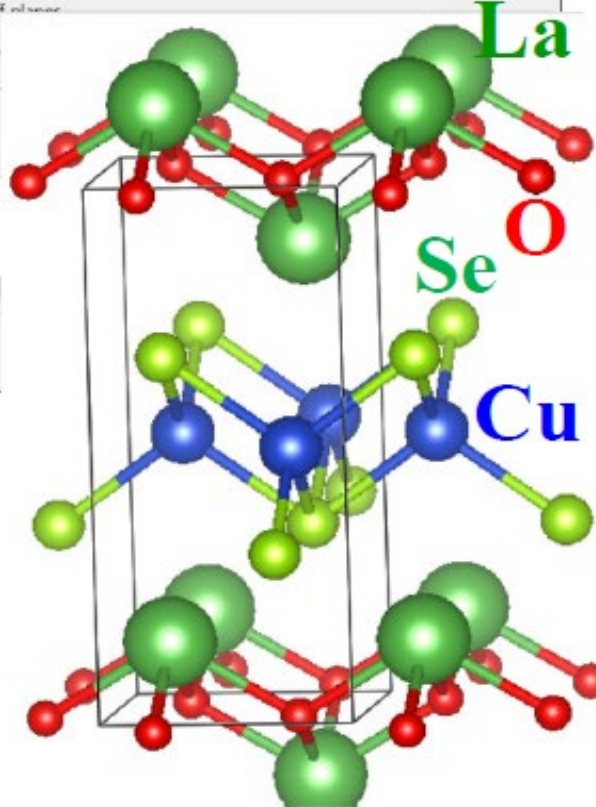
Phase: 1 undefined

Ranges of fractional coordinates

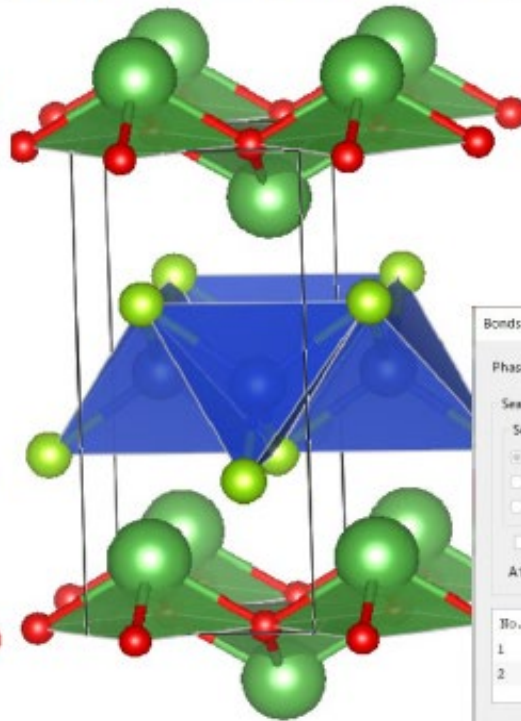
x(min) = 0	x(max) = 1.5
y(min) = 0	y(max) = 1.5
z(min) = -0.2	z(max) = 1.2

Cutoff of size

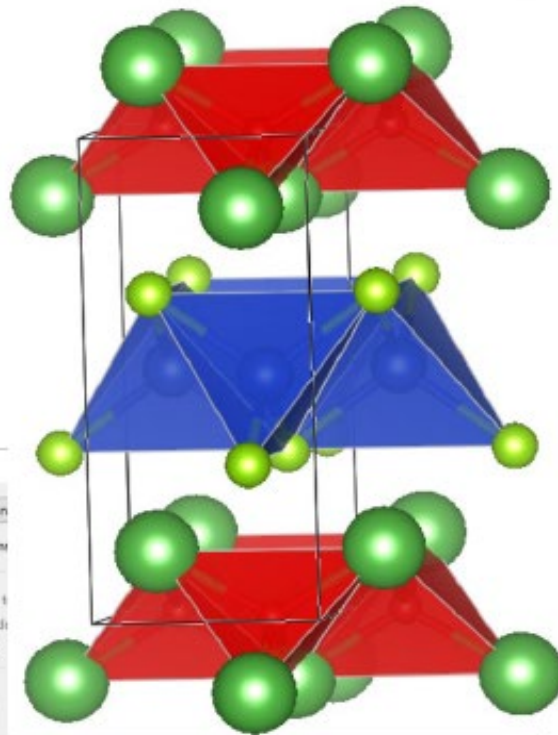
No.



多面体表示では
(LaO₄Se₄)多面体は
表示しないことが多い。



LaO層は、Oを中心とした
(OLa₄)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

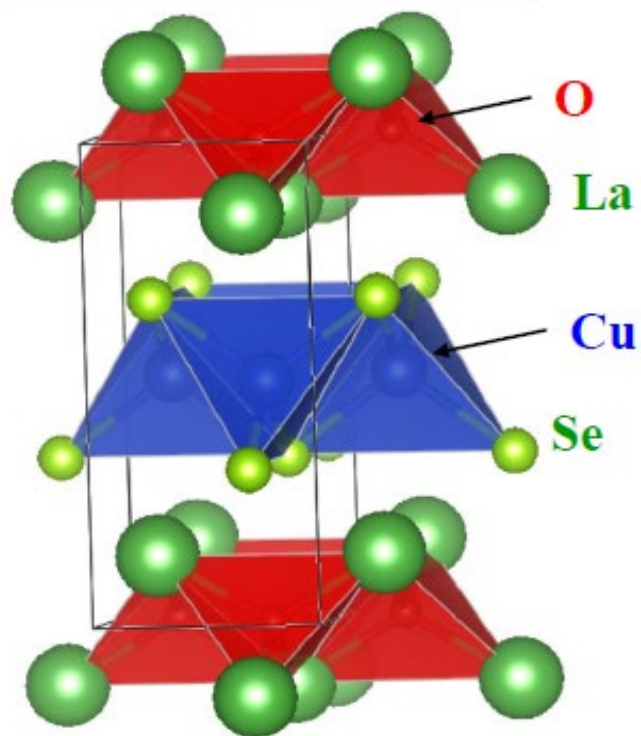
No.	Atom 1	Atom 2	Min. (Å)	Max. (Å)	Bound.	Poly.
1	Cu	Se	0	2.76295	2	<input checked="" type="checkbox"/>
2	O	La	0	3	2	<input checked="" type="checkbox"/>

New Delete Clear

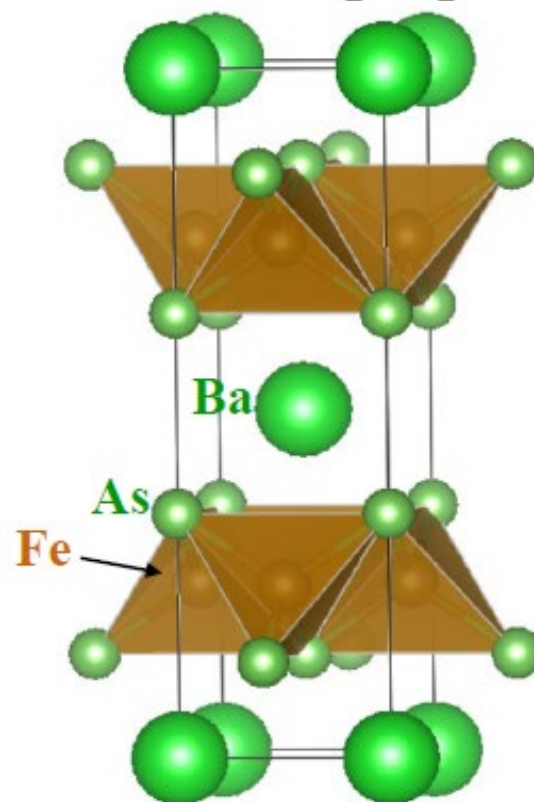
OK Cancel Apply

LaCuOSe と BaFe₂As₂

LaCuOSe

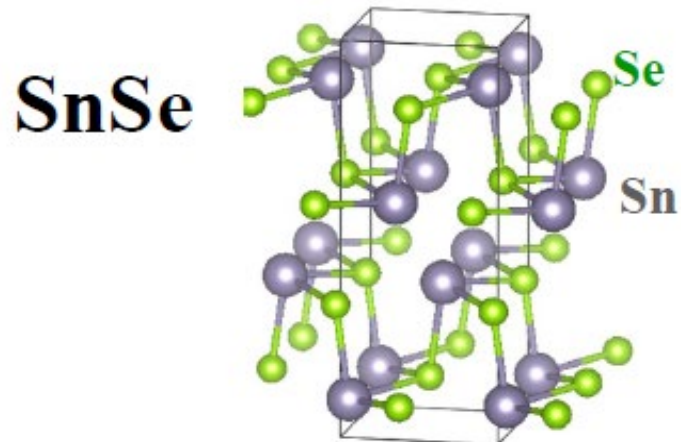
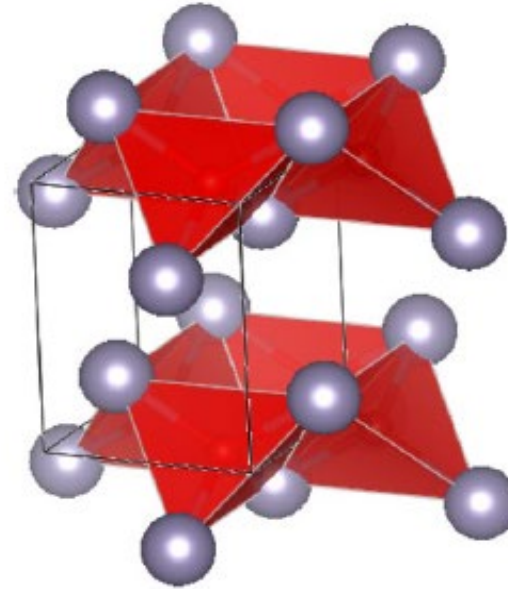
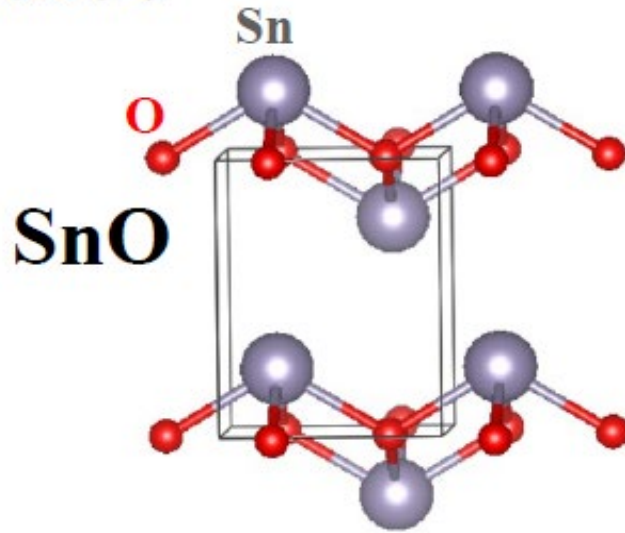


BaFe₂As₂



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

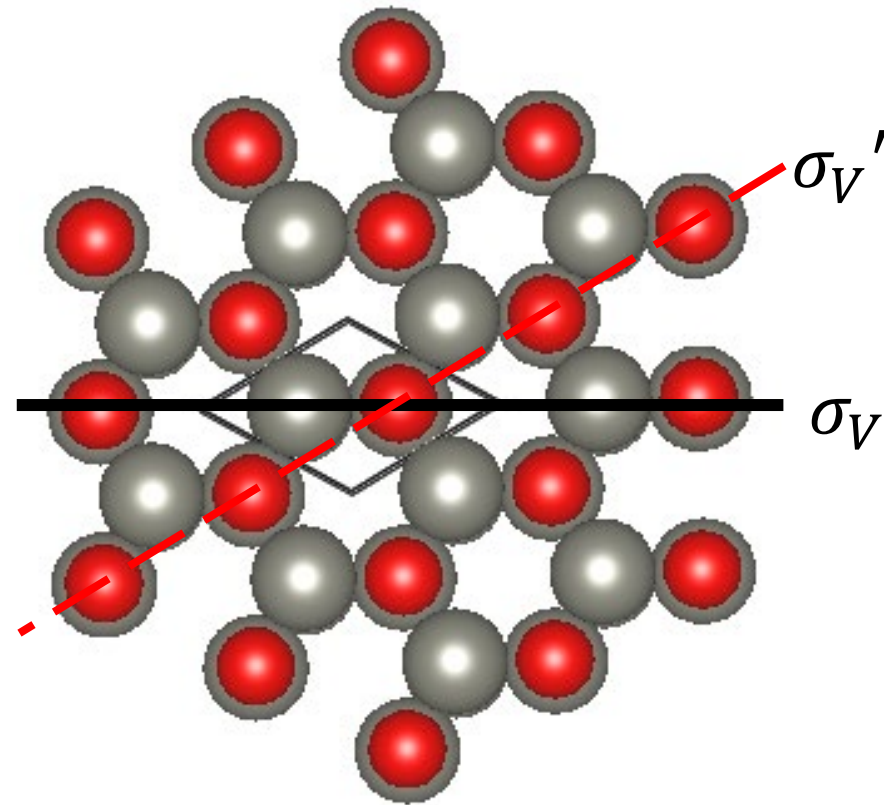
1. 面指数を求めよ
2. そのミラー指数をもつ方位ベクトルを描け
3. 原子配列が3次的にわかる絵をVESTAで描き、特徴を述べよ

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出

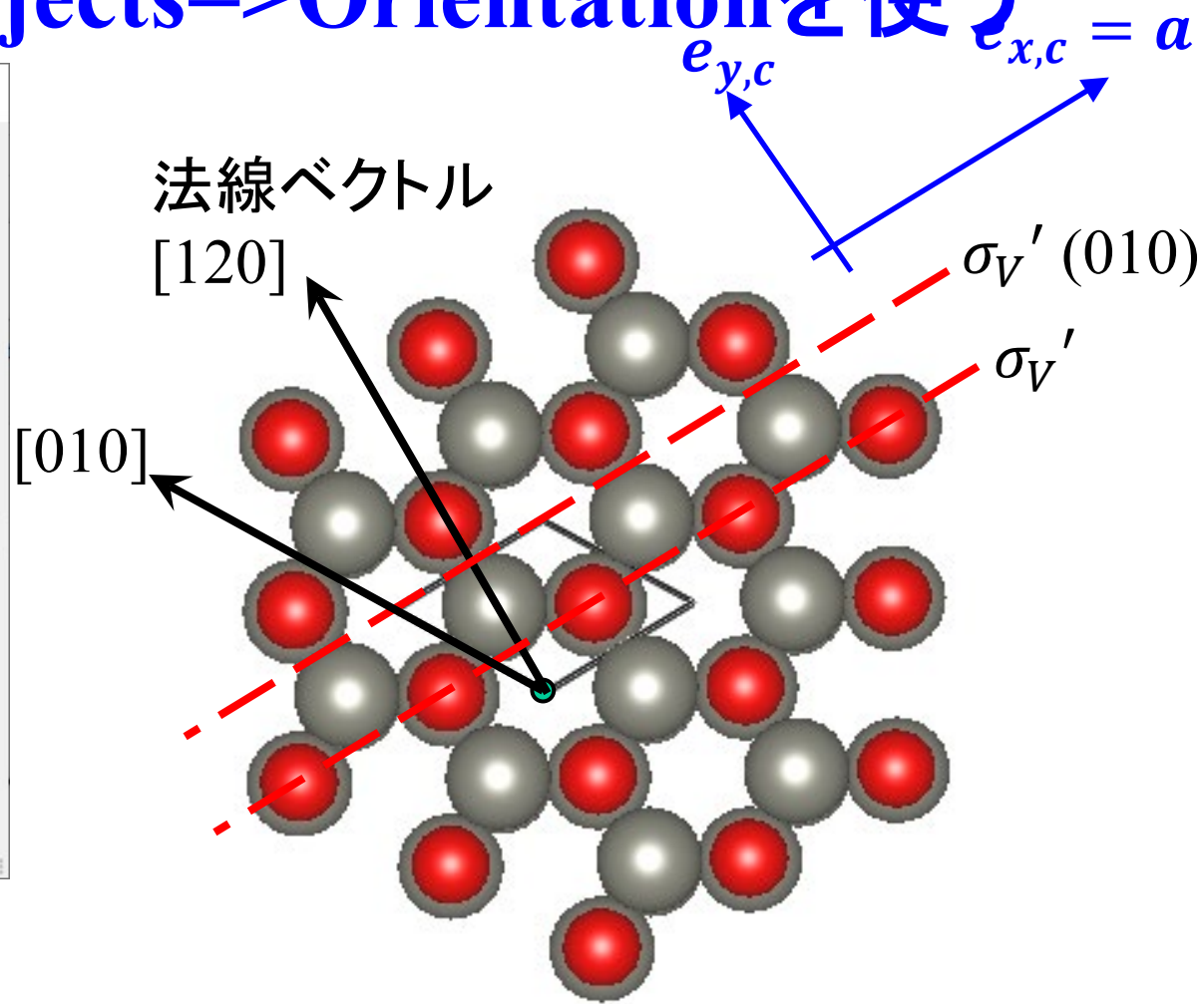
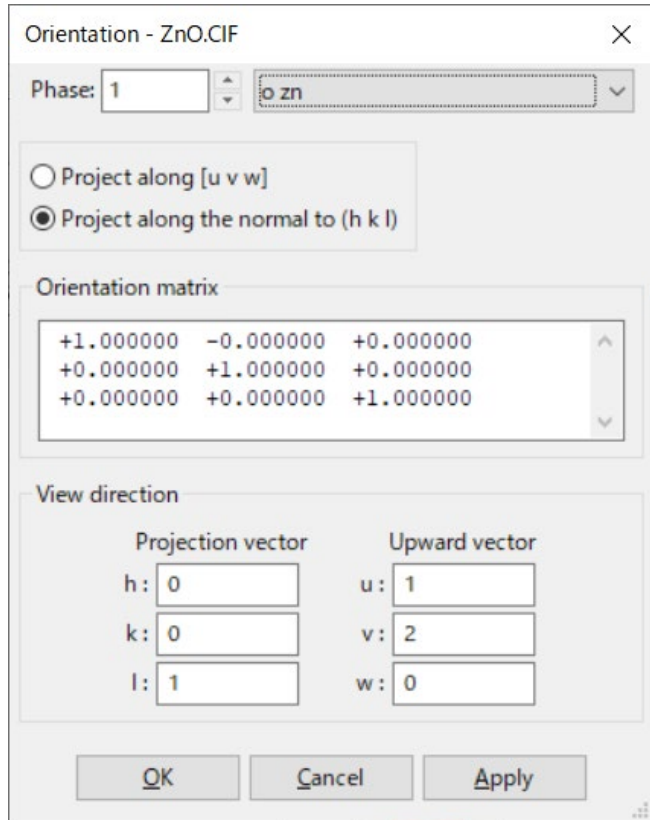
期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

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



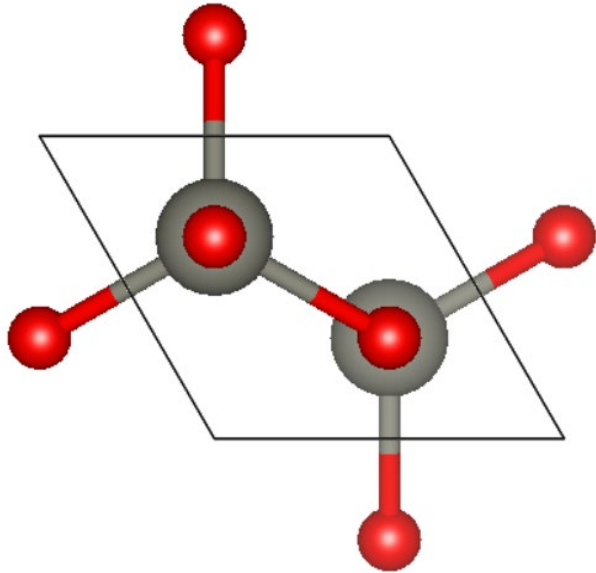
(理由は不明だが)

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]

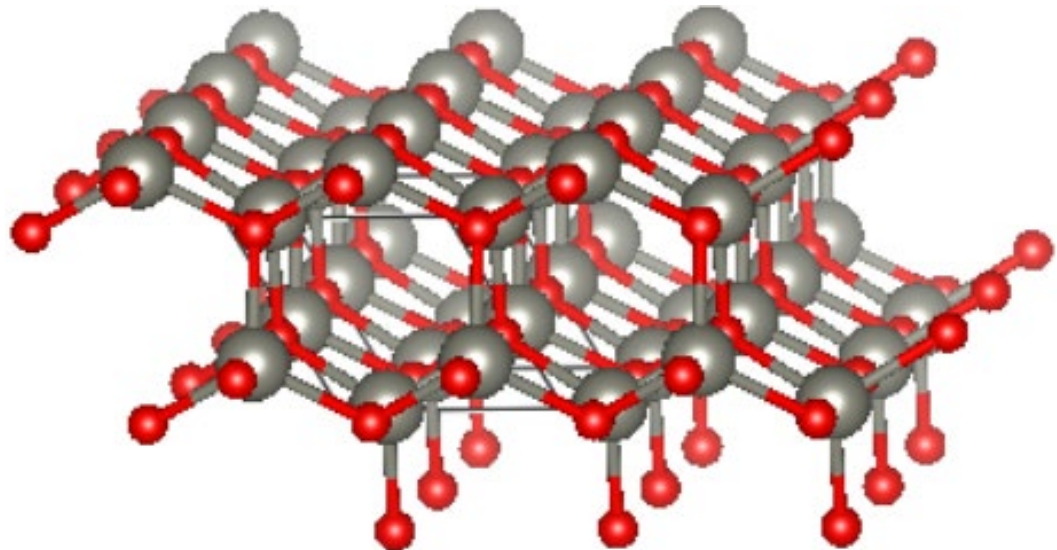
VESTA: Objects=>Orientationを使う

(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]

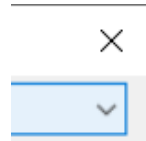
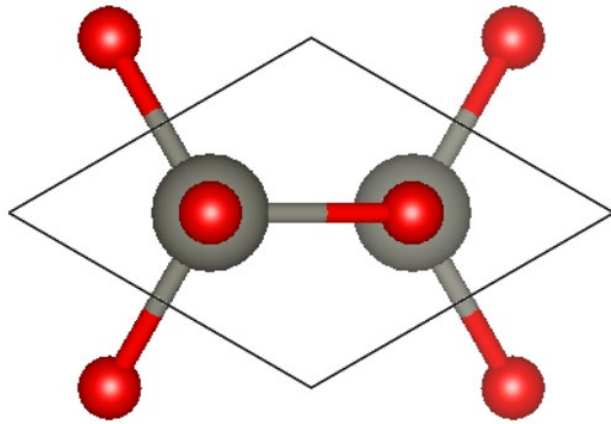


Objects => Boundary で表示範囲を
 $x = (0, 3), y = (0, 2), z = (0, 3)$
にして見やすく回転



σ_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:

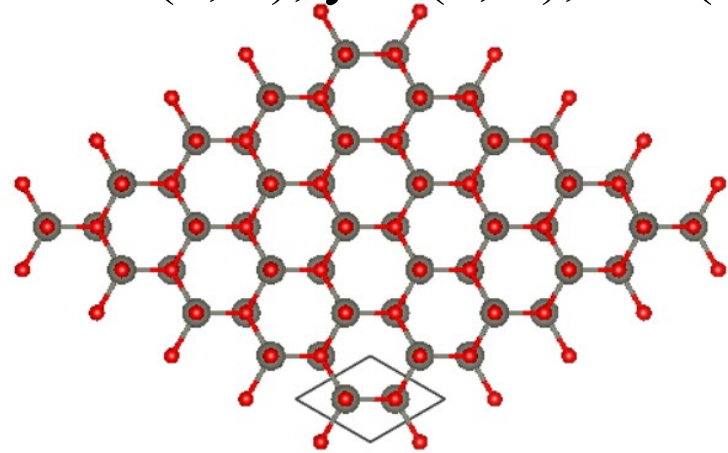
Upward vector

u:
v:
w:

OK

Cancel

Apply



余計な原子を削除して見やすく回転

