

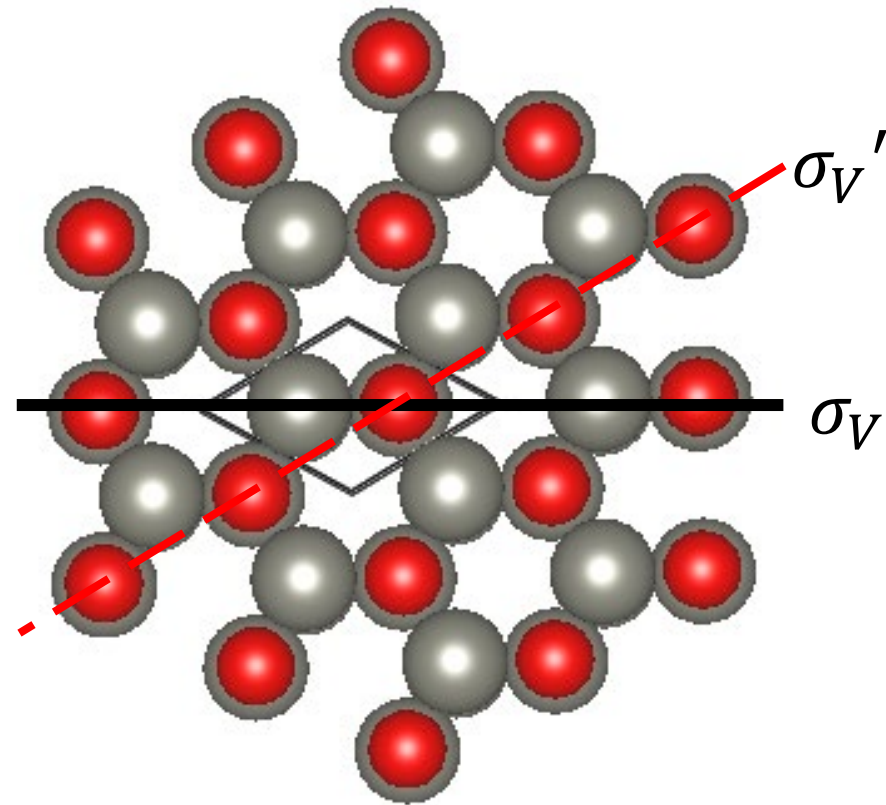
問題

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

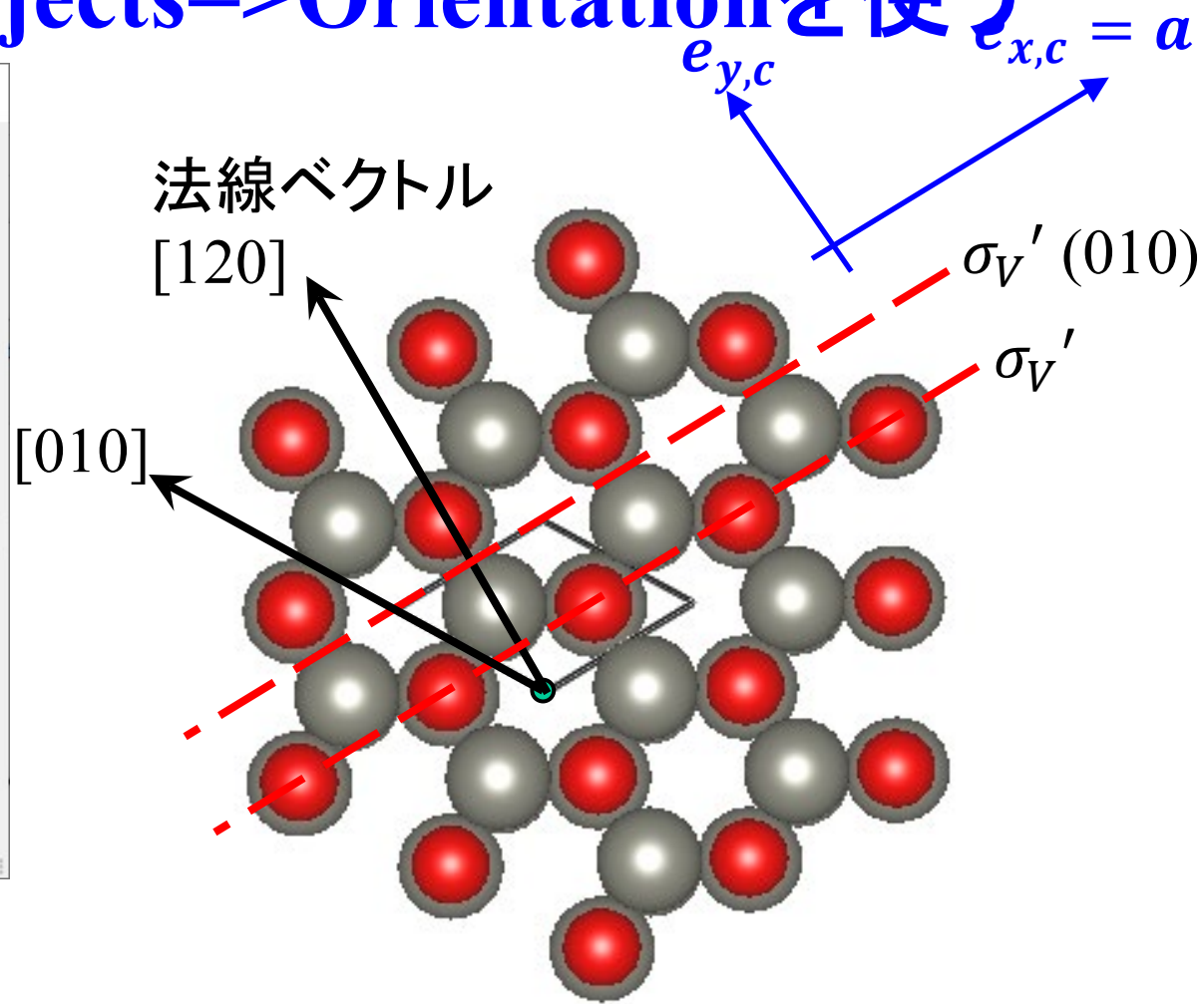
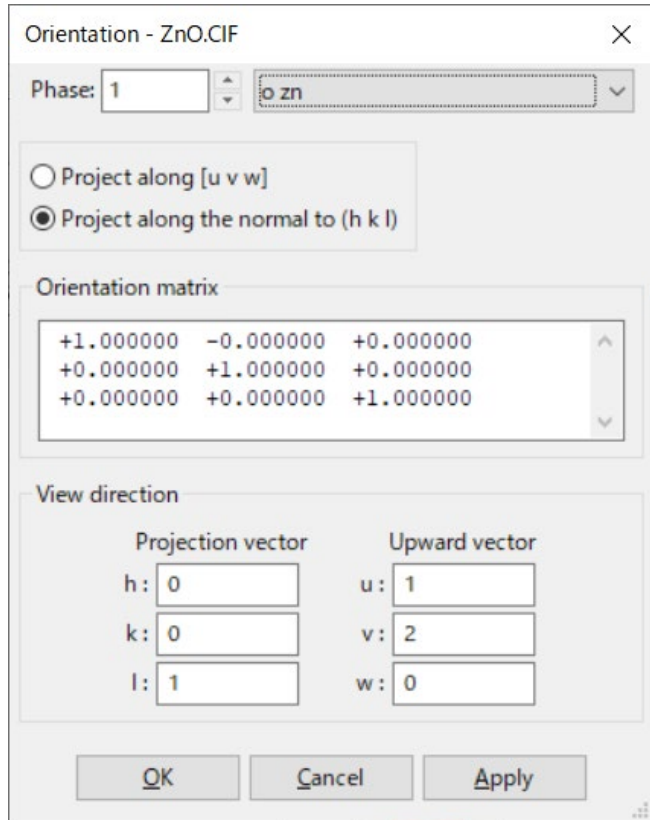
1. 面指数を求めよ
2. そのミラー指数をもつ方位ベクトルを
描け
3. 原子配列が3次的にわかる絵を
VESTAで描き、特徴を述べよ

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



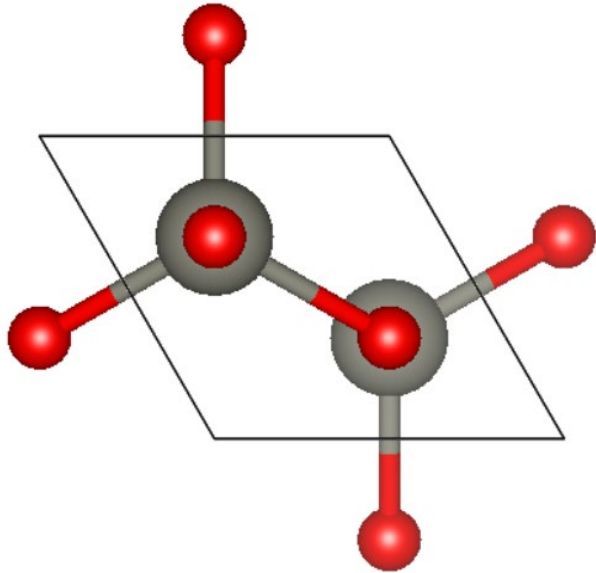
(理由は不明だが)

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

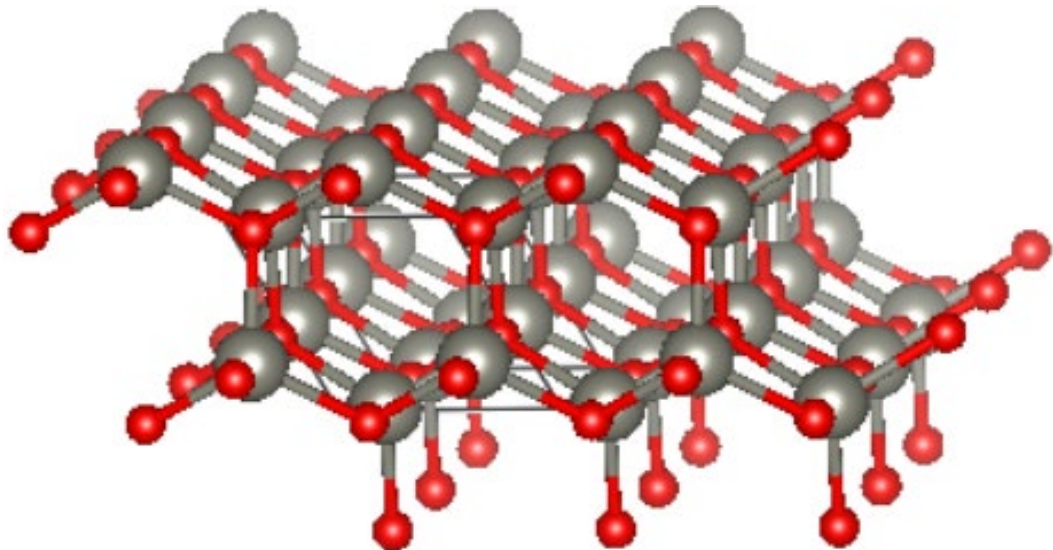
VESTA: Objects=>Orientationを使う

(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]

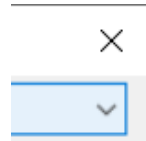
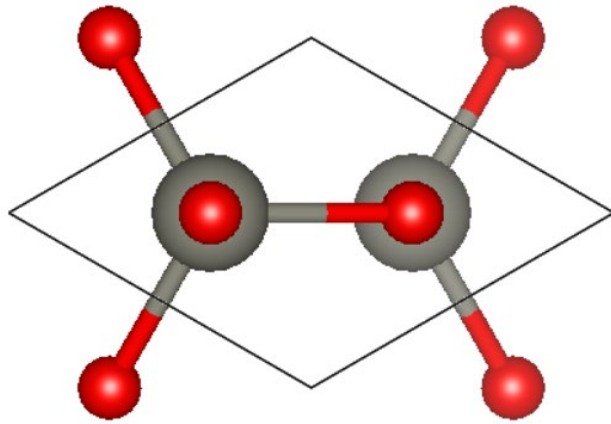


Objects => Boundary で表示範囲を
 $x = (0, 3), y = (0, 2), z = (0, 3)$
にして見やすく回転



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

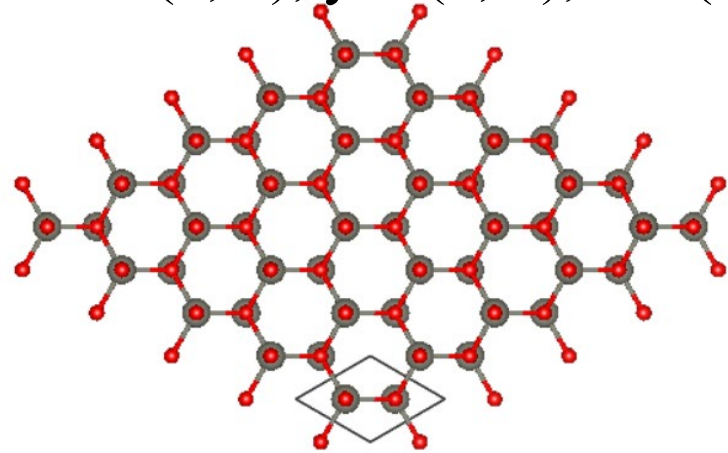
View direction

Projection vector	Upward vector
h: <input type="text" value="0"/>	u: <input type="text" value="1"/>
k: <input type="text" value="0"/>	v: <input type="text" value="1"/>
l: <input type="text" value="1"/>	w: <input type="text" value="1"/>

OK

Cancel

Apply



余計な原子を削除して見やすく回転

