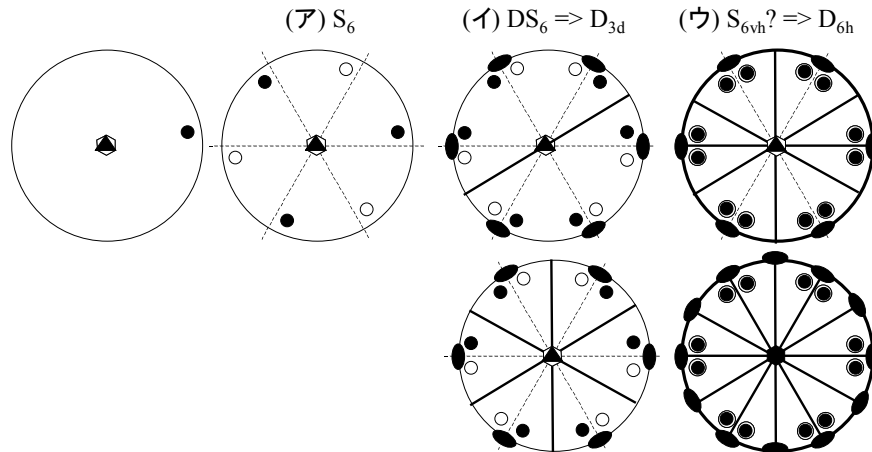


第6回講義レポート課題に関して

(ア) 下左図のステレオ投影を作製せよ

(イ) (ア)のステレオ投影に、 S_6 軸に垂直な C_2 軸を加えたステレオ投影を作製せよ。

(ウ) (イ)のステレオ投影に、 S_6 軸と一本の C_2 軸を含む鏡映面を加えたステレオ投影を作製せよ。



$$\bullet \quad D_{nd} = C_n + nC_2 + n\sigma_v \quad D_{nh} = C_n + nC_2 + n\sigma_v + \sigma_h$$

(エ) 自然に発生した対称要素は、必ず他の対称要素の演算として表すことができる。これらの対称要素の関係を示せ。

$$\bullet \quad \sigma_v = C_2'S_6 \text{ (} C_2' \text{は } S_6 \text{に垂直な2回軸)}, \quad \sigma_h = \sigma_v'C_2', \quad C_6 = \sigma_h S_6 \text{ など}$$

ポーリングの第二法則： 局所的に電荷の和は0になる $n = \sum_i Z_i / \nu_i$

螢石型		<p>MX_2 型化合物 立方晶 ($Fm\bar{3}m, 225$) M^{2+}: 8 配位 X^-: 4 配位 陰イオンが FCC 構造をとり、その4配位位置を陽イオンが占める構造</p>	<p>$CaF_2, CaBr_2, BaF_2, PbF_2, SrF_2, CeO_2$</p>
-----	--	--	---

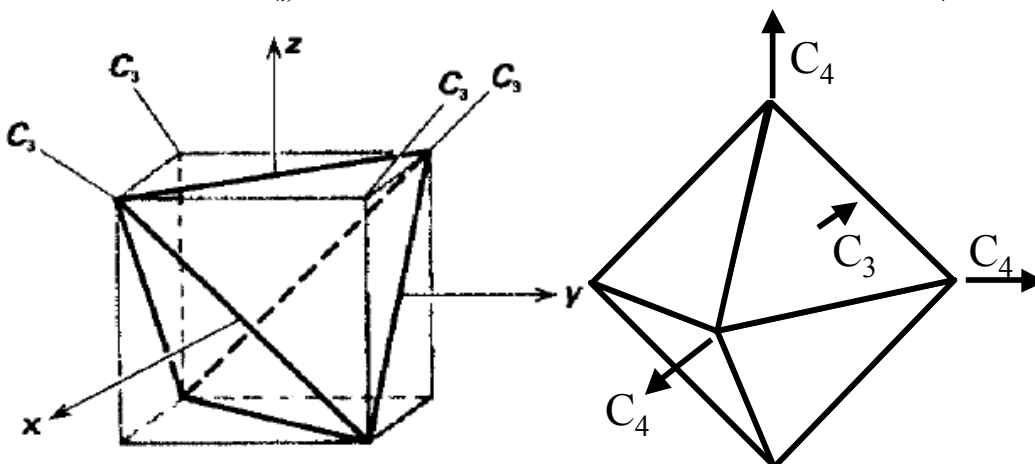
ホタル石型構造をとる CaF_2 について、 Ca^{2+} を中心にして考える。N は Ca^{2+} の電荷だから $N=2$ 。陰イオンの価数 Z_i は -1、配位数 ν_i は 4。陽イオンの配位数は 8 であるから、 $n = \sum Z_i / \nu_i = 8 * (-1/4) = 2$ で、陽イオンの価数に等しくなる。

F を中心にして考える。N は F の電荷の絶対値だから $N=1$ 。陽イオンの価数 Z_i は +2、配位数 ν_i は 8。陰イオンの配位数は 4 であるから、 $n = \sum Z_i / \nu_i = 4 * (+2/8) = 1$ で、陰イオンの価数の絶対値に等しくなる。

「多面体群」

四面体群 (下左図) : T_h, T_d, T 点群 : 一番対称性が高い形は正四面体。4つの C_3 軸が互いに $109^\circ 28'$ で交わる

八面体群 (下右図) : O_h, O 点群 : 一番対称性が高い形は正八面体。3つの C_4 軸が互いに 90° で交わる



試験について

- 紙資料（講義配布資料、本、ノート）は持ち込み自由。電子機器の使用は時計以外は不可（携帯などを時計代わりに使うのも不可）。
- 試験内容は、
 - 必ず覚えていないといけない概念、用語などに関する基礎問題。
 - 資料があっても、考えないとわからない応用問題。
- 試験の出来が悪かったと思う人は、該当問題に関して詳しいレポートを提出することで配点を考慮する。ただし、配点は、試験合格者の最低点を上回らない。

単位の合否判定について

- 最低条件は、出席、レポート、試験のすべてで合格基準を超えること。
 - 出席の最低基準：欠席が3回以下。出席点に関しては欠席回数を考慮する。病欠等事情がある場合は個別に考慮する。
 - レポートの最低基準：すべてのレポートに関して、問題を解くために考えようとする努力が認められること。課題に関しては正答することが望ましいが、誤答であっても、考える過程を考慮して正答と同じ扱いにすることもある。
 - 試験の最低基準：基礎問題を理解できていると判断できること。

第7回講義 レポート課題

1. 次の問いに答えよ

酸化アルミニウム Al_2O_3 には複数の多形が存在し、その一つである $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ の結晶構造は次のようになっている。

空間群： $R\bar{3}c$ (No.167, International Tables Vol.A)

晶系：菱面体晶

格子定数(菱面体格子)： $a = 0.512 \text{ nm}$, $\alpha = 55.28^\circ$

原子の種類、部分座標(x, y, z)

Al 0.355 0.355 0.355

O 0.553 -0.053 0.25

(ア) 菱面体格子の単位胞体積を求めよ。

(イ) $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ の密度を調べよ。

(ウ) 菱面体格子の単位胞には Al_2O_3 の化学式量がいくつ含まれているか。

(エ) 下は International Tables の $R\bar{3}c$ の抜粋である。 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ の AlO イオンはどの Wyckoff 位置に属するか。

また、その位置の多重度が組成と一致することを確認せよ。

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

12	<i>f</i>	1	(1) x, y, z	(2) z, x, y	(3) y, z, x
			(4) $\bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	(5) $\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}$	(6) $\bar{z} + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$
			(7) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(8) $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y}$	(9) $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x}$
			(10) $y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(11) $x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}$	(12) $z + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$

6	<i>e</i>	.2	$x, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, x$
			$\bar{x}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, x + \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{x}$

6	<i>d</i>	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
---	----------	-----------	---------------------	---------------------	---------------------	-------------------------------	-------------------------------	-------------------------------

4	<i>c</i>	3.	x, x, x	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x}$	$x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}$
---	----------	----	-----------	---	-----------------------------	---

2	<i>b</i>	$\bar{3}$.	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	----------	-------------	-----------	---

2	<i>a</i>	32	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$
---	----------	----	---	---

2. 講義に関する質問、疑問、感想、要望など