

第7回講義レポート課題に関して

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

変更した問題

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

(イ) 菱面体格子の単位胞には Al_2O_3 の化学式量が2つ含まれている。菱面体格子の単位胞体積を求めよ。

(ウ) 下は International Tables の $R\bar{3}c$ の抜粋である。 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ の Al, O 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。

オリジナルの問題

(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。

下記の公式より： $V = a^3 \sqrt{1 - 3\cos^2 \alpha + 2\cos^3 \alpha} = 0.0845 \text{ nm}^3$

質量数： $M_{\text{Al}}=27.0$, $M_{\text{O}}=16.0$

単位格子中の全原子の質量： $M_{\text{unit cell}} = (4 \times 27.0 + 6 \times 16.0) / N_A = 204 / 6.02 \times 10^{23} \text{ g} = 3.389 \times 10^{-22} \text{ g}$

密度 = 4.01 g/cm^3

(エ) 下は International Tables の $R\bar{3}c$ の抜粋である。 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ の Al, O 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。

Al (0.355, 0.355, 0.355) は $x=y=z$ だから、4c 位置。

O (0.553, -0.053, 0.25) は $(x, -x+1/2, 1/4)$ に一致するから、6e 位置。

Al と O の位置の多重度は4と6であり、 Al_2O_3 の組成比 2:3 に一致する。

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

12	f	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	e	.2	$x, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}, x, \bar{x} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, x$
			$\bar{x}, x + \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}, \bar{x}, x + \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \bar{x}$

6	d	$\bar{1}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
---	---	-----------	---------------------	---------------------	---------------------	-------------------------------	-------------------------------	-------------------------------

4	c	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	b	$\bar{3}$.	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
---	---	-------------	-----------	---

2	a	32	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$
---	---	----	---	---

単位胞体積の公式

$$V = abc \frac{\sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma}}{+ 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

$$a = \frac{b^* c^* \sin \alpha^*}{V^*}, \quad b = \frac{c^* a^* \sin \beta^*}{V^*},$$

$$c = \frac{a^* b^* \sin \gamma^*}{V^*}$$

$$\cos \alpha = \frac{\cos \beta^* \cos \gamma^* - \cos \alpha^*}{\sin \beta^* \sin \gamma^*}$$

$$\cos \beta = \frac{\cos \gamma^* \cos \alpha^* - \cos \beta^*}{\sin \gamma^* \sin \alpha^*}$$

$$\cos \gamma = \frac{\cos \alpha^* \cos \beta^* - \cos \gamma^*}{\sin \alpha^* \sin \beta^*}$$

$$V^* = a^* b^* c^* \frac{\sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma}}{+ 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

$$a^* = \frac{bc \sin \alpha}{V}, \quad b^* = \frac{ca \sin \beta}{V},$$

$$c^* = \frac{ab \sin \gamma}{V}$$

$$\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}$$

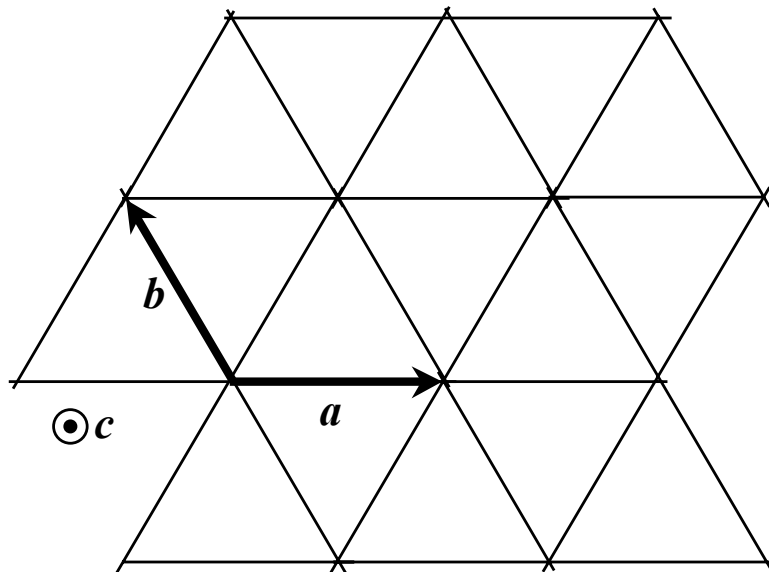
$$\cos \beta^* = \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{\sin \gamma \sin \alpha}$$

$$\cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}$$

第8回講義 レポート課題

1. 次の問いに答えよ

ZnO は六方晶系に属する結晶である。下に、c 軸方向から見た六方晶の格子を a-b 面に投影した図を示す。次の質問に答えよ。



- (ア) $a^* - b^*$ 面内の ZnO の逆格子ベクトルと逆格子を描け。
- (イ) [100]ベクトル、(100)面と逆格子の 100 点を描け。
- (ウ) [110]ベクトル、(110)面と逆格子の 110 点を描け。
- (エ) [230]ベクトル、(230)面と逆格子の 230 点を描け。

2. 講義に関する質問、疑問、感想、要望など