

課題 5

学籍番号 8223036 氏名 栗山淳

※ この課題は、この word ファイルに直接記入または貼り付けて作成し、pdf に変換し、提出せよ。

※ PrtScn してファイルの貼り付ける場合は unnecessary 情報はトリミングすること。

面心立方の Ni の結晶構造の情報を集めよう。

先ず、NIMS の MatNavi の URL <https://mits.nims.go.jp/> から利用登録してください。登録に当たっては含まれるすべての Database の利用を登録せよ。

ここで登録した君自身の ID や PW 情報は今後も将来に亘って使用できるので大切に扱う事！

登録が終わったら、下記の課題を遂行せよ。今回の課題では、Database のうち Atom Work を利用する。

1. Atom Work にログインして、Chemical system に Ni を入力せよ。

現れた画面を PrtScn し、下の枠内に貼り付け、Chemical formula から Space group までの部分をトリミングして下の枠内に拡大せよ。

#	Chemical formula	Substance name	Number of elements	Phase identifier		
				Structure type (Prototype)	Pearson symbol	Space group
1	Ni		1	Mg	hP2	P6 ₃ /mmc (194)
2	Ni		1	Cu	cF4	Fm-3m (225)

2. chemical formula の 2 Ni をクリックすると Structure type などの情報の頁が出る。この画面を PrtScn して下の枠内に貼り付け、Search materials -List of found materials から(2 頁目の)表の Year の 1951 年から 1944 年まで (No.36~39) の 4 つをトリミングして枠内に拡大せよ。

36	Structure X-ray diffraction	J. Inst. Met., 1951, 80, 577-587, Taylor A., Floyd R.W.	1951
37	Structure X-ray diffraction	J. Inst. Met., 1951, 80, 641-652, Pearson W.B., Hume Rothery W.	1951
38	Structure X-ray diffraction	J. Inst. Met., 1950, 77, 585-594, Taylor A.	1950
39	Structure X-ray diffraction	Z. Elektrochem. Angew. Phys. Chem., 1944, 50, 268-274, Esch U., Schneider A.	1944

3. 2 の画面の No.39 の Data Type の Structure をクリックして、現れた画面を PrtScn し、下の枠内に貼り付け、Crystal Structure (Standardized) の文字部分 (Crystallographic data から Occupancy / 1.0 までの部分をトリミングし、下の枠内に拡大せよ。

Crystallographic data

Cell parameters $a = 0.35169 \text{ nm}$, $b = 0.35169 \text{ nm}$, $c = 0.35169 \text{ nm}$,
 $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$


Cell volume 0.04350 nm^3

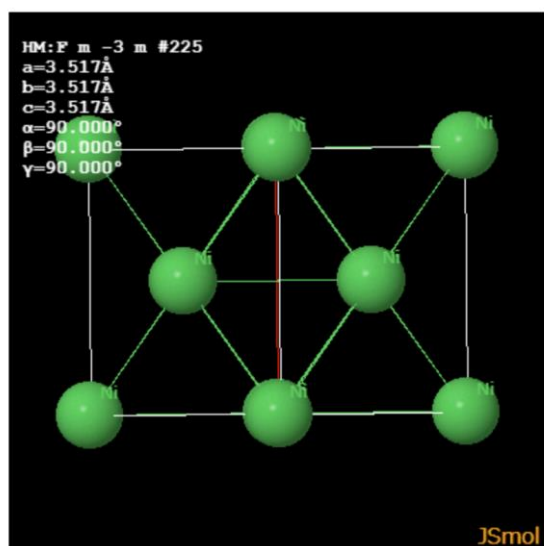
Cell density (calculated) 8.96 Mg m^{-3}

Z 4

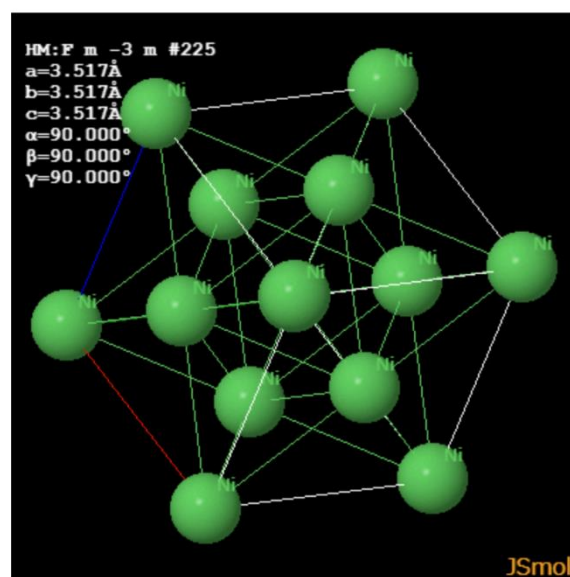
Atom coordinates

No	Site notation	Atom	Multiplicity	Wyckoff	Site symmetry	x	y	z	Occupancy
1	Ni	Ni	4	a	m-3m	0	0	0	1.0

4. 3の画面の下に結晶構造の投影をシミュレーションできる部分がある. この中の  Control with mouse を用いて Ni 単位胞の[110]投影及び[111]投影の図を作成し, PrtScn し, 下の枠内に拡大せよ.

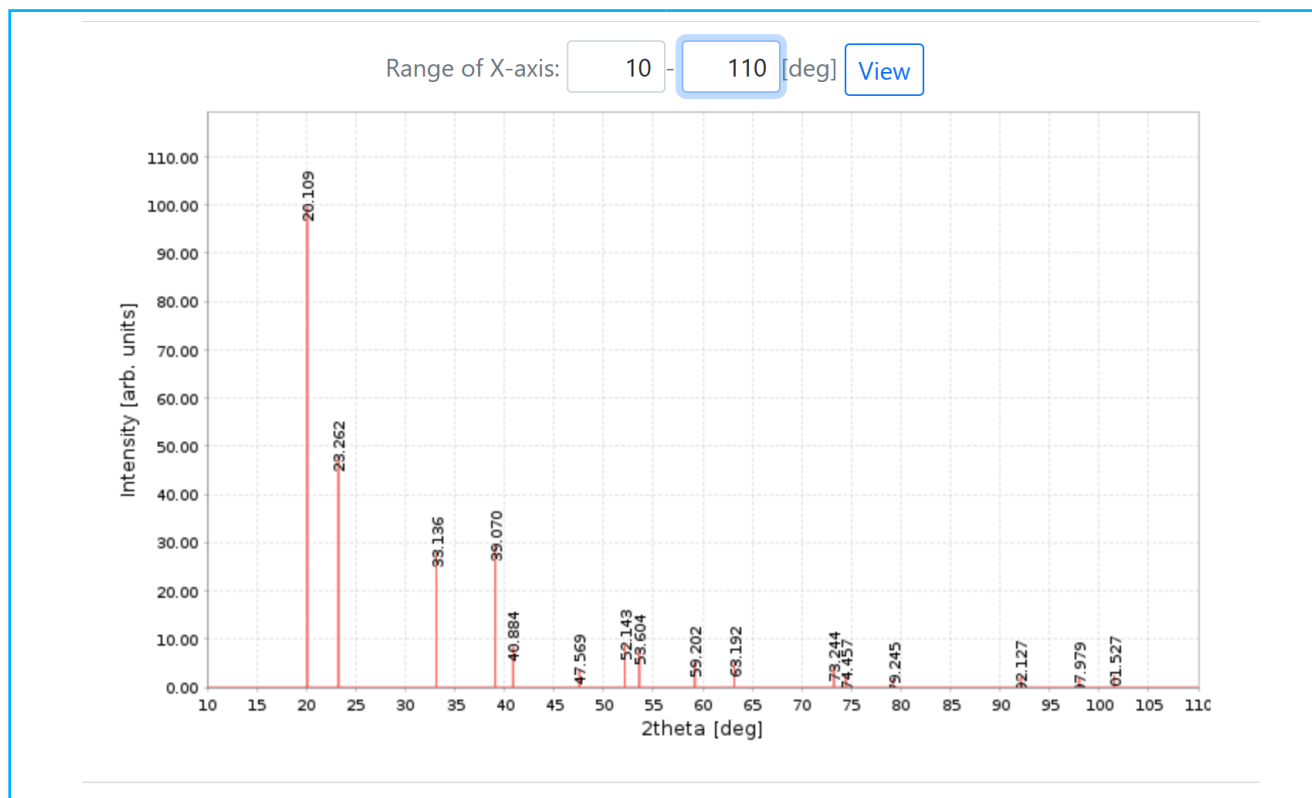


[110]投影



[111]投影

5. 2の画面の No.39 の Data Type の X-ray diffraction をクリックして, 現れた画面の X-ray diffraction (青字) のタグをクリックし, 出てきた画面で Radiation source を $\text{Mo K}\alpha$ と設定 (View) し, 切り替わった画面で更に Range of X-axis を $10\sim 110[\text{deg}]$ として設定 (View) し, 現れた画面を PrtScn し, Powder pattern graph を下の枠内に拡大せよ.



6. 5 に引き続いて, Powder pattern data の表を PrtScn し, 下の枠内に拡大せよ.

2θ (°)	Miller Indices			Intensity	d-spacing (nm)
	h	k	l		
20.109	1	1	1	99	0.2031
23.262	2	0	0	47	0.1759
33.136	2	2	0	27	0.1243
39.070	3	1	1	29	0.1060
40.884	2	2	2	8	0.1015
47.569	4	0	0	3	0.0879
52.143	3	3	1	8	0.0807
53.604	4	2	0	7	0.0786
59.202	4	2	2	5	0.0718
63.192	5	1	1	5	0.0677
63.192	3	3	3	5	0.0677
73.244	5	3	1	4	0.0595
74.457	6	0	0	2	0.0586
74.457	4	4	2	2	0.0586
79.245	6	2	0	1	0.0556
92.127	7	1	1	2	0.0493
92.127	5	5	1	2	0.0493
97.979	6	4	2	1	0.0470
101.527	7	3	1	2	0.0458
101.527	5	5	3	2	0.0458

ここまで作成したこの word ファイルを pdf に変換して, upload せよ. 以上