

- (1) 回転軸、鏡映、反転対称、回反の 4 種類の点群に属する対称操作を持つ分子の中で、講義では紹介していない例を、各々 1 つ挙げなさい。また、身の回りのもので（例えば動物全般に鏡面对称性が成り立つなど、近似的に）それらの対称性が成り立つ物（生物を除く）の例を各々 1 つ挙げなさい。

ポイント：

- ・省略

- (2) メタン( $\text{CH}_4$ )分子が持つ対称要素を、「 $m$  回転が  $n$  個、鏡映が  $l$  個……」といった形式で全て書きなさい。

ポイント：

- ・ 3 回転が 4 個
- ・ 鏡映が 6 個
- ・ 反転対称は無し
- ・ 4 回回反軸が 4 個

- (3) 分子に対する点群と結晶に対する点群の数は異なる。各々いくつあるか答え、なぜそのような違いが生じるのか説明しなさい。

ポイント：

- ・ 分子の点群：例えば回転軸を取っても、1 回回転軸、2 回回転軸、…… $n$  回回転軸など、無限にある
- ・ 結晶点群：32 種類。結晶の周期構造を敷き詰めるためには、各々の対称操作が並進操作とも両立しなければならない。例えば 5 回対称操作といった並進対称性と並立しない点群を除かなければならず、並進と並立しうる 1, 2, 3, 4, 6 回回転軸などの操作を残した結果として 32 点群が得られるため。

- (4) 立方晶の場合、ブラッグの回折条件を満たす面間隔  $d$  は、格子定数  $a$ 、ミラー指数  $h, k, l$  を用いて

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (\text{式 1})$$

と表される。これは、立方晶の場合には空間の面と原点との距離から簡単に計算可能である。空間中で面が一般式  $\alpha x + \beta y + \gamma z + \delta = 0$ 、その法線ベクトルが  $(\alpha, \beta, \gamma)$ 、直線の式が  $x = pt, y = qt, z = rt$  ( $t$  は媒介変数) と表せることを利用して、面間隔が式 1 になることを示しなさい。(ヒント：原点を含まない原点に最近接の面が  $x, y, z$  軸と交わる点はどこか?)

ポイント：

- ・ 原点に最も近い平面は、各辺の切片である 3 つの点  $(a/h, 0, 0)$ ,  $(0, a/k, 0)$ ,  $(0, 0, a/l)$  を通る。このとき、平面の式は  $hx + ky + lz = a$  となる
- ・ この面の法線ベクトルは  $(h, k, l)$  なので、原点を通る直線の式は、 $x = ht, y = kt, z = lt$  ( $t$  は媒介変数) となる
- ・ この平面と直線の交点を求めればよい (あとは単なる計算なので省略。どうしてもわからなければ質問は受け付けます)。

(5) 3 種類の物質 A, B, C について X 線回折測定を行ったところ、各々以下のような反射が得られた。

A: (110), (200)

B: (111), (200)

C: (110), (111), (200)

表 2.3 並進対称要素による消滅則

| 対称要素     | 影響される面    | 反射の起こる条件            |
|----------|-----------|---------------------|
| 単純格子 (P) | ( $hkl$ ) | なし                  |
| 体心格子 (I) | ( $hkl$ ) | $h+k+l$ =偶数         |
| 面心格子 (F) |           | $h,k,l$ がすべて奇数または偶数 |

A, B, C は各々単純格子、体心格子、面心格子、それ以外のいずれであるか答えなさい。ただし単純格子、体心格子、面心格子の場合は立方晶に属するものとし、その場合の消滅則は上の表のようになる。また立方晶の単純格子、体心格子、面心格子のうち、A, B, C のいずれにも該当しない格子に予想される、最初 ( $h^2+k^2+l^2$  が最小) から 5 つのピークの指数を書きなさい。

ポイント：

- ・立方晶単純格子があれば(100) (立方晶なので(010), (001)も完全に等価)は必ずあるので、A, B, C は単純格子ではない
- ・体心格子は  $h+k+l$  = 偶数の時だけピークが出るので、(111)があるものはダメ→A
- ・面心格子は成分が全部偶数か全部奇数なので、(110)があるものはダメ→B
- ・その他が C
- ・単純格子の最初から 5 つのピークは、(100), (110), (111), (200), (210)