

Q2. 鉄系超伝導体BaFe₂As₂におけるFe原子の多重度と
Wyckoff letter及び単位胞内の全ての原子位置を記せ
*ICSDでI4/mmmの空間群のBaFe₂As₂を選択
*Int-AでI4/mmm(#139)を参照にする

<i>I4/mmm</i>		No. 139			
			$(0,0,0)+ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+$		
4	<i>e</i>	<i>4mm</i>	$0,0,z$	$0,0,\bar{z}$	As
4	<i>d</i>	$\bar{4}m2$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	Fe
4	<i>c</i>	<i>mmm.</i>	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	
2	<i>b</i>	<i>4mmm</i>	$0,0,\frac{1}{2}$		
2	<i>a</i>	<i>4mmm</i>	$0,0,0$		Ba

Int. A 参考

解答

Ba 2 a (0, 0, 0) (1/2, 1/2, 1/2)
Fe 4 d (0, 1/2, 1/4), (1/2, 0, 1/4), (1/2, 0, 3/4), (0, 1/2, 3/4)
As 4 e (0, 0, 0.345), (0, 0, 0.655), (1/2, 1/2, 0.845), (1/2, 1/2, 0.155)