

問題 14 : 固体の構造

図は酸化セリウム  $\text{CeO}_2$  ( $\text{CaF}_2$  型結晶構造) の単位格子を示している。 $\text{CeO}_2$  に少量の  $\text{Y}_2\text{O}_3$  を加え加熱すると、 $\text{Ce}_{1-x}\text{Y}_x\text{O}_{2-y}$  固溶体が生成する。この固溶体では、 $\text{Ce}^{4+}$  と  $\text{Y}^{3+}$  はカチオンサイトに均一に分布しており、アニオンサイトには酸素欠損が生じる。また、セリウムイオンの価数はずねに +4 とする。

a)  $\text{CaF}_2$  型結晶構造の単位格子にはいくつのカチオンとアニオンがあるか示せ。

b) モル比  $\text{CeO}_2 : \text{Y}_2\text{O}_3 = 0.8 : 0.1$  で調製した固溶体中のアニオンサイトに対する酸素欠損の割合を計算せよ。

c) 上記の固溶体  $1.00 \text{ cm}^3$  中に存在する酸素欠損の数を計算せよ。ただし、単位格子の体積  $a^3$  は  $1.36 \times 10^{-22} \text{ cm}^3$  である。

