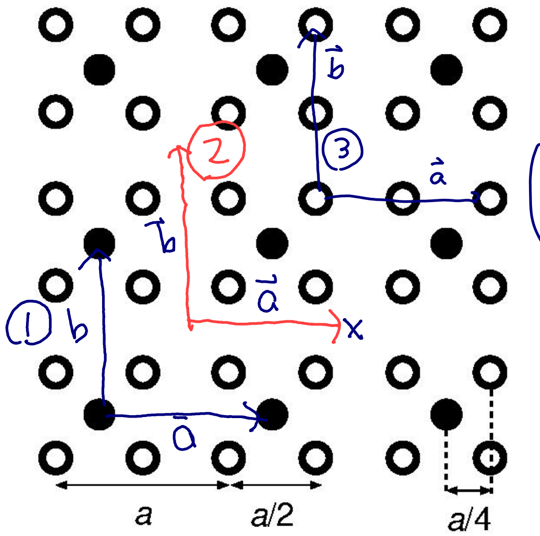
令和５年度 基礎結晶学　2023.8.1 実施

学籍番号 XX　氏名 タヌキ .

１．次の２次元結晶は、正方形ネットの対称性を持ってるものとする。白丸は原子Ａ、黒丸は原子Ｂを表す。



対称性が高いもので選ぶと①or②の2とおり。
(③でも悪くないが、普通は① or②でしょう。)

(1) 図中に最小の 単位格子を描き、基本ベクトル $\vec{a}, \vec{b}$ を記入せよ。また、原子Ｂの位置と同じ対称性を持つ点があれば、その位置に「×」印をつけよ(複数あれば複数つけよ。等価な点については一つだけで良い)

(2) 図の２次元結晶の組成式をＡ、Ｂを用いて記せ(答だけでよい)。

黒1+白4。∴ A_4B_1

(3) 図の２次元結晶の基本構造を「原子名(格子座標)」の形で記述せよ。

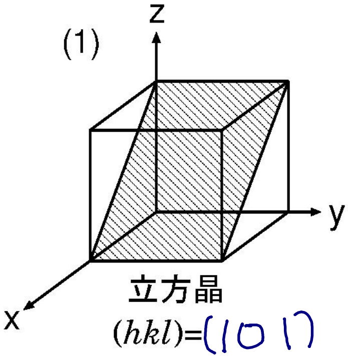
①なら、$\left\{ \begin{array}{l} A(\frac{1}{4},\frac{3}{4})\ A(\frac{1}{4},\frac{1}{4})\ A(\frac{3}{4},\frac{1}{4})\ A(\frac{3}{4},\frac{3}{4}) \\ B(0,0) \end{array} \right.$

②なら $\left\{ \begin{array}{l} A(①と同じ) \\ B(\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \end{array} \right.$

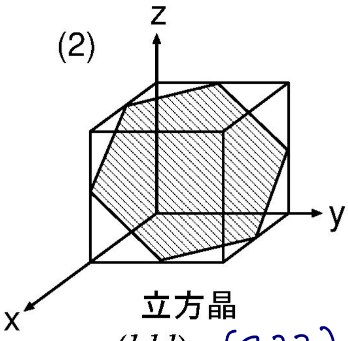
---

③なら $A(0,0)\ A(\frac{1}{2},0)\ A(0,\frac{1}{2})\ A(\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
$B(\frac{3}{4},\frac{3}{4})$

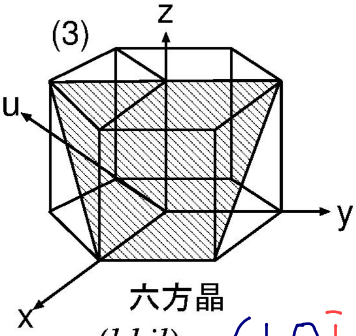
2．次の結晶の各面指数を記せ。ただし立方晶（単純立方とする）についてはミラー指数（*hkl*）、六方晶については、ミラー・ブラベ指数（*hkil*）で記すこと（図(2)と(6)の断面は正六角形である）。



立方晶
(*hkl*)=(101)

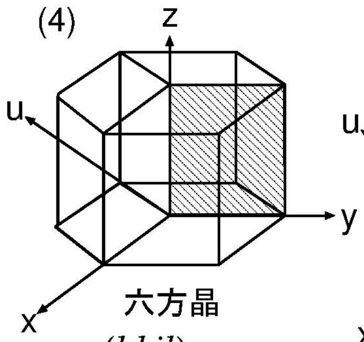


立方晶
(*hkl*)= (222)

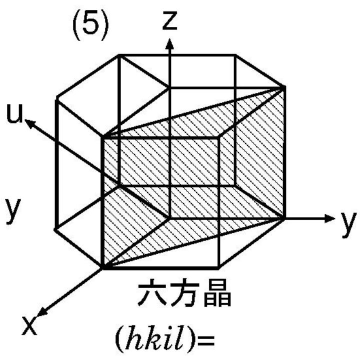


六方晶
(*hkil*)= $(10\bar{1}1)$

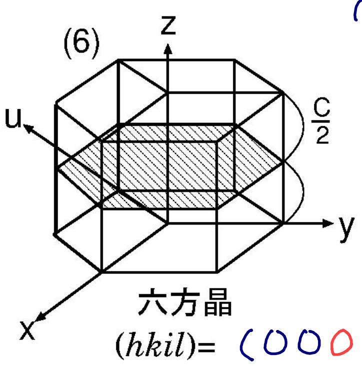
修正済



六方晶
(*hkil*)=
$(10\bar{1}0)$



六方晶
(*hkil*)=
$(11\bar{2}0)$



六方晶
(*hkil*)= (0002)

☆（2-2）　上記６個の面のうち、格子点が乗っていないものはどれか、(1)～(6)の記号で答えよ。

公約数が１でないもの，（ミラー指数で考える）
3つの

(2), (6)

学籍番号＿＿＿＿＿＿＿＿　氏名＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿.

３. 結晶中において原子が占有する体積の割合は、原子の空間充填率 “Atomic Packing Factor (APF)” と呼ばれ、単位格子中に存在する原子の体積(球と考える)の和を単位格子の体積で割ったものである。

(1) 単純立方格子の格子点に原子が 1 個ある単体の APF を求めよ。

$$\left.\begin{array}{l} V(\text{格子}) = a^3 \\ V(\text{原子}) = \frac{4}{3}\pi r^3 \end{array}\right\} \quad 2r = a \text{ であるから}$$

$$APF = \frac{V(\text{原子})}{V(\text{格子})} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{8r^3} = \frac{\pi}{6}$$

(2) 体心立方格子の格子点に原子が 1 個ある単体の APF を求めよ。

同様に、$4r = \sqrt{3}a$

$$APF = \frac{1}{a^3} \cdot 2 \times \frac{4}{3}\pi r^3 = \left(\frac{\sqrt{3}}{4}\right)^3 \cdot \frac{8}{3}\pi = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi$$

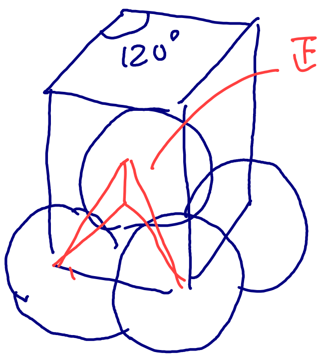
(3) Mg の単体の結晶構造は六方最密構造である。

3-1) この単位格子に含まれる格子点の数を記せ(数値だけでよい)。 1

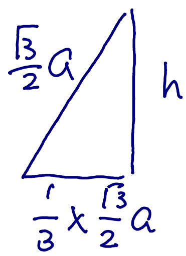
3-2) この単位格子に含まれる原子の数(=基本構造をなす原子の数)を記せ(数値だけでよい)。 2

3-3) Mg の APF を求めよ。

理想的なHCPとする。まず $a:c$ の比を求める。



正四面体，一辺 $a(=2r)$，高さを h とすると $c=2h$



$$h^2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)^2 - \left(\frac{\sqrt{3}}{6}a\right)^2 = \frac{2}{3}a^2$$

$$\therefore c = 2h = \sqrt{\frac{8}{3}}a$$

$$\text{単位格子体積 } V = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2 \times c = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{3}}a^3 = \sqrt{2}a^3$$

ここに原子が 2つ　$\therefore APF = \frac{1}{\sqrt{2}a^3} \times \frac{4}{3}\pi r^3 \times 2 = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$

4．結晶格子は七つの結晶系に分類される。これらのうちいくつかには複合格子が存在し、これも含めると、合計 14 個の「ブラベ格子」に分類される。

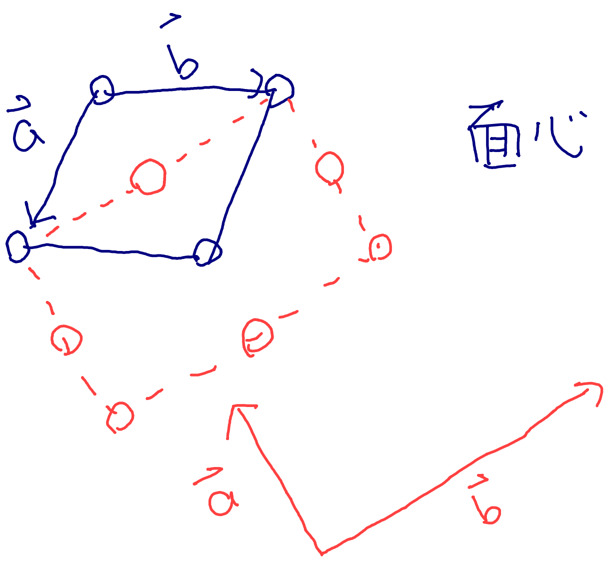
(1) ブラベ格子には「体心正方格子」は存在するが、「面心正方格子」は無い。この理由を説明せよ。

仮に、面心正方があったとして、その基本ベクトルを $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ($|\vec{a}|=|\vec{b}|$) とすると、基本ベクトルをとりかえて、$\vec{a}'=\frac{\vec{a}+\vec{b}}{2}$, $\vec{b}'=\frac{\vec{a}-\vec{b}}{2}$, $\vec{c}'=\vec{c}$ とすると $\vec{a}'\vec{b}'\vec{c}'$ を基本ベクトルとする格子は体心正方晶である.

(2) ブラベ格子には「体心立方格子」、「面心立方格子」存在するが、「底心立方格子」は無い。この理由を説明せよ。

立方格子の底心に格子点をおくと、立方晶の必須対称性である「互いに交じわる4本の3回回転軸」が消えて、立方晶ではなくなるから。

(3) 六方晶には単純格子しか存在しない。すなわち、この格子に新たな格子点を追加すると、別のブラベ格子になるということである。六方晶の単位格子は「ひし餅」のような形であるが、このひし餅の重心(つまり体心位置)に格子点を追加したものはどのブラベ格子になるか、その名称を記し、そう考えた理由を説明せよ(図解すると説明しやすい)。



面心直方晶

学籍番号　　　　　　　　氏名　　　　　　　　　　.

5．単純立方構造を持つある金属の粉末についてX線回折測定を行った。以下の問に答えよ。ただし Bragg の式は、間隔を d、X線の波長を λ、回折の入射角=反射角= θ として $2d\sin\theta = \lambda$ で与えられる。

(1) 角度 2θ の 小さい方から数えて８番目 のピークの反射の指数 *hkl* (ミラー指数に相当すると考えてよい)を記せ。答だけでなく説明も記すこと。

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \frac{\lambda}{2\sin\theta}$$

$$\therefore \sin^2\theta = \frac{1}{4}\cdot\left(\frac{\lambda}{a}\right)^2\cdot(h^2+k^2+l^2)$$

$h^2+k^2+l^2=S$ とおくと、Sは小さい順に 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, …

よって
$hkl = 221, 300$

(2) この金属にある種の熱処理を施すと、結晶構造が少し変化し、c 軸がわずかに伸びた。このことによって、熱処理した後の金属粉末に対して再びX線回折測定を行ったところ、いくつかの回折ピークが分裂した。

2-1) 熱処理後の結晶のブラベ格子の名称を記せ(答だけでよい)。

単純、かつ $a=b\neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90°$ なので、単純正方

2-2) 100 反射はいくつのピークに分裂するか、数値を記せ。またその理由も簡単に説明せよ。

立方晶では、等価面が6つあったが
正方になると (001), (00$\bar{1}$) は非等価になる。

$\{100\} = (100)(010)(\bar{1}00)(0\bar{1}0)$ と $\{001\} = (001)(00\bar{1})$ の

2個に分裂する

2-3) c 軸が伸びることによって分裂しないピークもあった。その反射の指数 *hkl* を記せ。またその理由も簡単に説明せよ。☆ (2-2)　上記６個の面のうち、格子点が乗っていないものはどれか、(1)～(6)の記

ミス
プリ

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

であるから、{110} は値が変わらず、

分裂しない

６．Ｎ個の同じ原子を含む単位格子を考える。j 番目の原子の位置の格子座標を (u_j, v_j, w_j) で表すとき、結晶構造因子 F はこの原子散乱因子を f として

$$F = \sum_{j=1}^{N} f\, e^{-2\pi i (h u_j + k v_j + l w_j)}$$

で与えられる。

(1) 常温の鉄の結晶は体心立方格子である。Ｘ線回折の反射がゼロになる(消滅する)とき、h、k、l の間に成り立つ関係式(「消滅則」)を求めよ。

$$F = \sum_{j=1}^{2} f_{Fe} e^{-2\pi i (h u_j + k v_j + l w_j)}$$

$$= f_{Fe}\left(1 + e^{-\pi i (h+k+l)}\right) \Rightarrow h+k+l \text{が奇数}$$

これが−1になれば $F=0$

(2) 六方晶は単純格子であるが、そのうち六方最密構造と呼ばれるものは、二つの原子の位置がいずれも対称性の良い位置であるため、h, k, l がある条件を満たせばＸ線の回折強度が０となる(消滅する)。その条件を求めよ（この問題においては、ミラー・ブラベ指数ではなくミラー指数 (hkl) だけで考えること)。

$$F = f\left(1 + e^{-2\pi i \cdot \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \frac{1}{2}l\right)}\right)$$

$$= f\left(1 + e^{-\pi i \left(\frac{4}{3}h + \frac{2}{3}k + l\right)}\right)$$

「$\frac{4}{3}h + \frac{2}{3}k + l$ が奇数なら $F=0$」

ここまでで点あります

$\frac{2(2h+k)}{3} + l$

○ $2h+k$ が３の倍数でなければ全体が整数にならないので $F \neq 0$.

○ $2h+k$ が３の倍数なら、$\frac{2(2h+k)}{3}$ は偶数なので、l が奇数のとき $F=0$