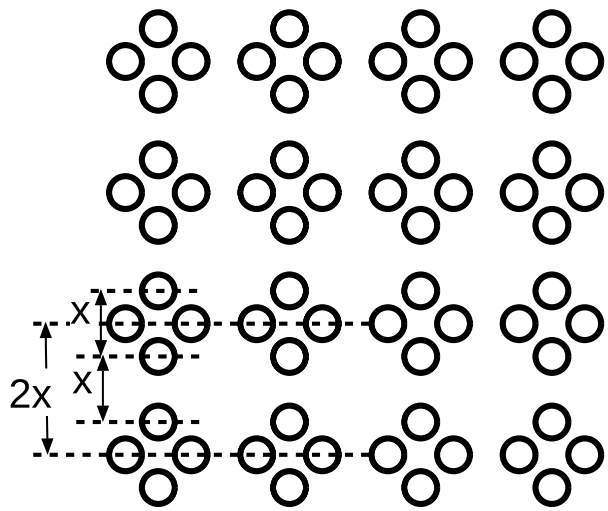
平成 30 年度 基礎結晶学

2018 年 7 月 31 日 実施

学籍番号：　　　　　　氏名：

この試験は 80 点満点で、演習等で 20 点、合計 100 点である。解答は簡潔に書くこと (必要以上に省略しないように)。

1. 次に示す 2 次元結晶 (白丸は原子を表す) について、

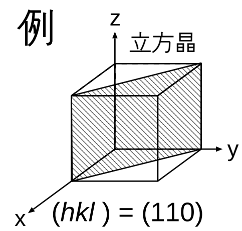


1-1) 最小の単位格子を図中に記入せよ。

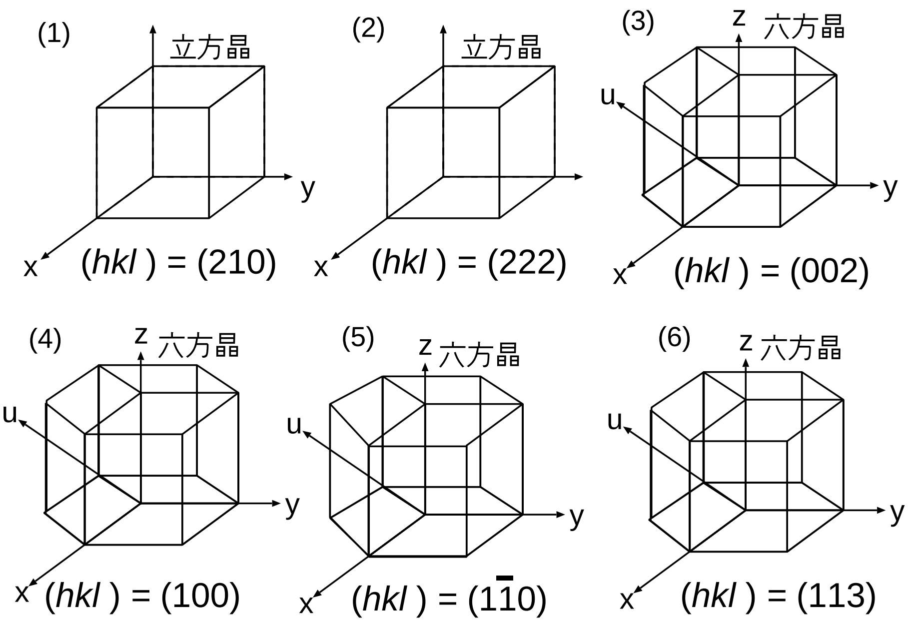
1-2) 1-1) で記入した単位格子について、２個の基本ベクトルの大きさを x で表せ (同一の値の場合、”$a = b = \times\times..$” と記してよい)。

1-3) 単位格子に含まれる基本構造の原子位置を格子座標で記せ。

2. 右の例に示す面は、立方晶における (110) 面である。



2-1) この例にならって、下記の図 (1)　図 (6) に記された (*hkl*) 面を図中に記入せよ。ただしここでは、六方晶についてはミラー・ブラベー指数 (4 個の指数) ではなく、ミラー指数 (3 個の指数) で記している。



2-2) 上記の単位格子はすべて単純格子であるとする。これら (1)∼(6) のうち、格子点を通らない面をすべて挙げ、以下に番号 (1∼6) で記せ。

2-3) (3)∼(6) の六方晶の面は通常のミラー指数（ 3 個の指数）表されている。これをミラー・ブラベー指数 (4 個の指数) で記せ。

(3) →　　(4) →　　(5) →　　(6) →

2-4) 六方晶の面をミラー・ブラベー指数で表す利点について、上記の (4) と (5) を例にとって簡単に説明せよ。

3. 結晶構造に関する以下の問に答えよ。

3-1) 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。γ 鉄 (面心立方結晶) の APF を求めよ。

3-2) ダイヤモンドは、複合格子である面心立方格子がさらに 2 個重なったものであるが、ブラベー格子としては「面心立方」である。基本構造として、格子点 1 個に対して 2 個の炭素原子がある。それぞれの位置を格子座標で記せ。

第 1 の炭素の位置 →　　　　第 2 の炭素の位置 →

3-3) 炭素原子の半径を r、ダイヤモンドの面心立方格子の 1 辺の長さを a とする。a を r で表せ。

3-4) ダイヤモンドの APF を求めよ。

4. ブラベー格子には、単純 (P)・側心または底心 (C)・体心 (I)・面心 (F) があり、全部で 14 個あることが判っている。

4-1) 正方晶には「単純正方晶」・「体心正方晶」があるが、「面心正方晶」「底心正方晶」は存在しない。この２個のうち、「底心正方晶」が存在しない理由を説明せよ。また、この「底心正方晶」は他のどのブラベー格子と同一であるかを記せ。

4-2) ブラベー格子に「底心立方晶」が存在しない理由を説明せよ。

5. ミラー指数を中カッコ { } で記すとき、いくつかの等価な面をまとめて表している。たとえば立方晶の {100} は、実際には 6 個の等価な面 (100)、(010)、(001)、$(\bar{1}00)$、$(0\bar{1}0)$、$(00\bar{1})$ を表す。

5-1) 立方晶について、$\{hh0\}$ (ただし h と l は値が異り、かつゼロでない整数) の等価な面は全部でいくつ考えられるか。個数を記せ。導出過程も記述すること。

5-2) 正方晶 ($a = b \neq c$) において、{210} で表される等価な (hkl) 面はどのようなものがあるか。考えられる (hkl) を全て記せ。

6. 結晶における回折について、以下の問に答えよ。

6-1) 単位格子に N 個の原子を持つ結晶について、j 番目の原子の原子散乱因子を f_j、格子座標を (u_j, v_j, w_j) とする。反射の指数 hkl[注] のときの構造因子 F は、

$$F = \sum_{j=1}^{N} f_j e^{2\pi i(hu_j + kv_j + lw_j)}$$

で表される。体心立方晶の単体 (格子点の位置に 1 個の原子 M を有する結晶) を考える。原子 M の原子散乱因子を f_{M} と書くとき (注；これは散乱ベクトルの関数であるが、ここでは単なる数値のように計算してよい)、上記の F を f_{M} および h, k, l で表し、消滅則 (F がゼロとなるときの h, k, l の条件) を求めよ。

6-2) CsI(ヨウ化セシウム) と CsCl(塩化セシウム) のブラベー格子は、いずれも単純立方晶である。しかしこの２種の化合物のうち、CsI だけが、体心立方晶と同じような消滅則を示す。この理由を簡単に述べよ。ただし、Cs、I の原子番号はそれぞれ 55、53 である。

[1]反射の指数 hkl は、面のミラー指数 (hkl) と同じであると考えて良い