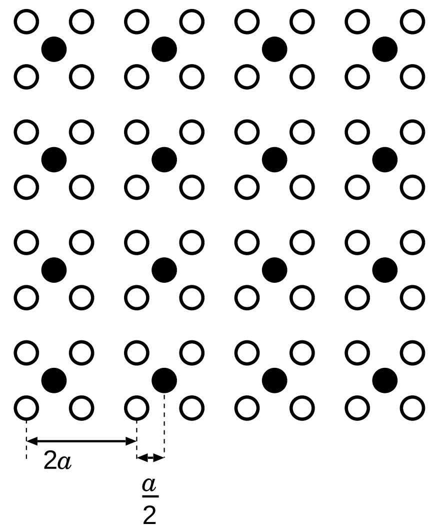
令和 01 年度 基礎結晶学

2019- 8- 6 実施

学籍番号：　　　　　　氏名：

1. 次の図 (２次元結晶) において、○は原子Ａ、●は原子Ｂを表すものとする。また、原子Ｂの位置には４回回転軸がある。



(1) この２次元合金の組成式を記せ (答だけでよい)。

(2) 図に示された領域において、原子Ｂのある位置と同じ対称性を持つ点をすべて記せ。答えは図中に「×」印で記すこと。

(3) この２次元合金の単位格子を図中に記せ。ただし、できるだけ対称性が良くかつ小さいものを選ぶこと。

(4) (3) で描いた単位格子における基本構造について、原子の種類と格子座標で記せ
(例 ： 原子Ａ、位置=(0, 0, 0))。

(5) 図の２次元格子と同じ格子を持ってきて、原子Ｂの位置にある４回回転軸が一致するように等間隔 a で紙面に垂直に多数重ねて３次元の格子を作った。このブラベー格子の名称を記せ。

(6) 原子Ｂの位置にある鏡面および回転軸を全て挙げ、シンボル (▲、◆など) で記せ。鏡面については記号「m」を用いること。ただし、n 回回転軸の n が同じであっても種類が異なる場合は区別すること。例えば、３回回転軸が２種類ある場合は、「▲×２」あるいは「▲ $_1$、▲ $_2$」のように記すこと。また、恒等変換は記さなくてよい。

2. 直交座標系において、3点 $(X,0,0)$、$(0,Y,0)$ $(0,0,Z)$ を通る平面と原点の距離を d とすると、

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{X^2} + \frac{1}{Y^2} + \frac{1}{Z^2}$$

で与えられる。

(1) 六方晶の格子定数を $a(=b)$、c、$\alpha = \beta = 90°$、$\gamma = 120°$ とする。a 軸を直交座標系の x 軸に乗せ、c 軸が z 軸に一致するように単位格子を置いたとき、ミラー指数 (hkl) の面について、上記の X、Y、Z の値を格子定数およびミラー指数の成分等を用いて表せ (ここでは4数表示の「ミラー・ブラベー指数」は考えなくてよい)

(2) 六方晶における面の指数について、3成分の「ミラー指数」ではなく4成分の「ミラー・ブラベー指数」を用いた場合の利点を、面指数の具体例を挙げて説明せよ。

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。ダイヤモンドの APF を求めよ。

4. 単位格子の一片の長さが a の単純立方構造を有する化合物の粉末に対し、波長 λ の X 線を当てて回折を測定した。

(1) 波長がある程度短くないと、回折は観測されない。X 線回折プロファイルに少なくとも 1 本以上の回折ピークが観測されるための a と λ が満たすべき条件を求めよ (Hint: ブラッグの回折条件に、$0 < \sin\theta < 1$ を適用する)。

(2) 充分短い波長の X 線を用いると、多くの回折線が観測される。θ(あるいは 2θ) の小さい順に並べたとき、7 番目に観測される回折ピークの指数 hkl[注1]を求めよ。導出過程も記せ (単純格子なので消滅則は考慮しなくて良い)。

[1] 面のミラー指数と同様に考えてよい

5. 14 種類のブラベー格子のうち、単純格子は 7 種であり、残りの 7 種が複合格子である。

(1) C 軸を 2 回回転軸とする単斜晶を考える。a 軸、b 軸が張る平行四辺形が底面であるが、この面の中心位置 (位置ベクトルで $(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})/2$ の位置) に格子点を置くと、一見「底心単斜晶」ができそうだが、ブラベー格子には「底心単斜晶」なるものは存在しない。その理由を説明せよ。

(2) 複合格子には、底心 (または側心) 格子・体心格子・面心格子があるが、「2 面心格子」は存在しない。この理由を説明せよ。

(3) 「底心立方晶」が存在しない理由を説明せよ。

6. 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2]の構造因子 F は、

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

で与えられる。面心立方晶の単体 (格子点の位置に 1 個の原子 M を有する結晶) について、原子 M の原子散乱因子を f_M と書くとき、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。

[2]面のミラー指数と同様に考えてよい