

令和 03 年度 基礎結晶学
2021- 8- 3 実施

学籍番号：

氏名：

1. 次の図1は、正方形ネットを単位格子として持つ A-B 二元系 2 次元結晶であり、○は原子A、●は原子Bを表す。

(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、もっとも対称性の高い位置にある原子を一つ選び、○印をつけよ。

(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) 図に番号 1 および番号 2 で示された原子が居る位置について、そこにある対象要素をグラフィックシンボルで記せ。ただし、 n 回回転軸の n の値が同じでも区別する場合や、種類の異なる鏡面がある等の場合は、これらを区別するために添字をつけて記せ。(例：3 回回転軸が 3 種類、鏡面が 2 種類ある場合は $\blacktriangle_1 \blacktriangle_2 \blacktriangle_3$ 、 $m_1 m_2$ 等のように記す。)

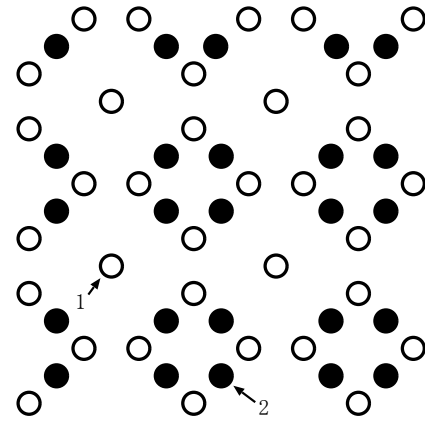


図 1: A-B 2 次元合金

番号 1 の原子 →

番号 2 の原子 →

2. 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。原子を剛体球と考えるとき、面心立方格子と六方最密構造では APF の値が同じになることを示せ (原子 1 個あたりが占有する空間の体積が同じになることを示すとよい)。

学籍番号：

氏名：

- 3.** ブラベー格子の分類として、三斜晶には複合格子(体心、面心、底心等)が存在しない。
この理由を簡単に説明せよ。

4. 単位格子の一片の長さが a の単純立方構造を有する金属単体の粉末に対し、波長 0.15nm の X 線を当てて、回折角 2θ を $0^\circ \sim 90^\circ$ の範囲で測定したところ、強い回折ピークが三つだけ観測された。角度 2θ と反射の指数の対応はそれぞれ、 $41.41^\circ \rightarrow 110$ 、 $60.0^\circ \rightarrow 200$ 、 $75.5^\circ \rightarrow 211$ であった。

(1) 格子定数 a の値を記せ (計算過程も記すこと)。

これは出題ミスでした。(2)の解答は「体心立方格子」ですが、問題の冒頭部に「単純立方」と書いてしまいました。
(作問過程で「単純」を消し忘れたのが間違い。全員加点しました)

(2) この金属単体のブラベー格子の名称を記せ。(問題 6-(3) の式がヒント)。

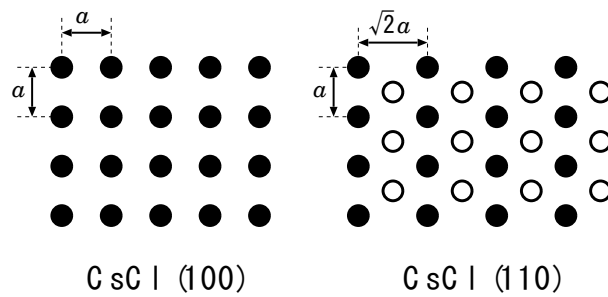
学籍番号：

氏名：

5. ハロゲン化アルカリの結晶及びその X 線回折に関する以下の間に答えよ。

(1) 塩化カリウム、塩化セシウムのそれぞれのブラベー格子の名称を記せ。

(2) 下の図は、塩化セシウムの結晶 (格子の 1 辺の長さを a とする) について、塩素イオンを格子点に置いた場合の (100)、(110) 断面における原子の並び方を描いたものである。



この描き方にならって、塩化カリウム結晶 (格子の 1 辺の長さを A とする) について、塩素イオンを格子点に置いた場合の (100)、(111)、(222) 断面の原子の並び方を図示せよ。ただし、原子については中心位置がわかれば良く、接触の仕方等は考えなくてよい (ただし塩素イオンは●、カリウムイオンは○で描くこと)。

- (3) 単位格子に N 個の原子を持つ結晶について、単位格子内にある 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 ^{註1}の構造因子 F は次式で与えられる。

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

カリウムイオンの原子散乱因子を f_K 、塩素イオンの原子散乱因子を f_{Cl} とする。格子点に塩素イオンを置いたとき、 f_K 、 f_{Cl} および hkl を用いて F を表せ。

- (4) 塩化カリウムを粉末 X 線回折で測定したとき観測される 強い反射 のうち、回折角 2θ の小さいものからの三つについて、その反射の指数 $\{hkl\}$ を記せ。

¹面のミラー指数と同様に考えてよい