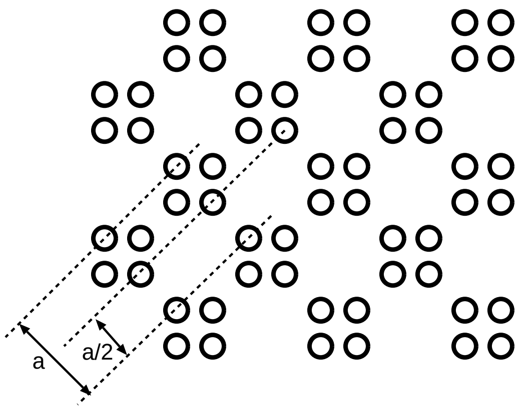
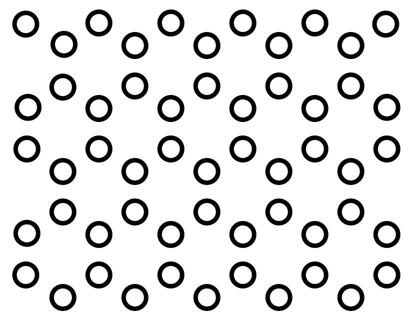
令和 04 年度 基礎結晶学　2022 年 8 月 02 日 実施

学籍番号：　　　　　　　　氏名：

1. 次の二つの２次元結晶において、図中の白丸は原子を表す。それぞれの図中に**最小の**単位格子を描き、基本ベクトル $\vec{a}$、$\vec{b}$ も記入せよ。また下の空欄に、格子座標を用いて基本構造を「原子１:(0,0,0)」のように記述せよ。ただし図 (1) の格子には正方形ネット、図 (2) の格子には六方ネットの対称性がある。



(1) 正方形ネットの対称性あり



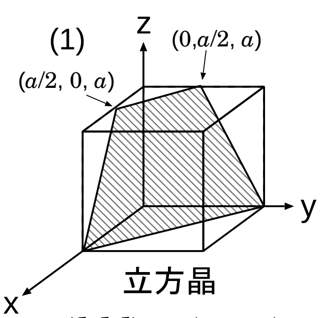
(2) 蜂の巣型：6回回転軸あり

基本構造

基本構造

2. 次の結晶の各面指数を記せ。ただし立方晶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。

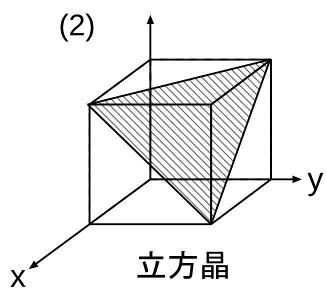
(1)



立方晶

(hkl) = (　　　)

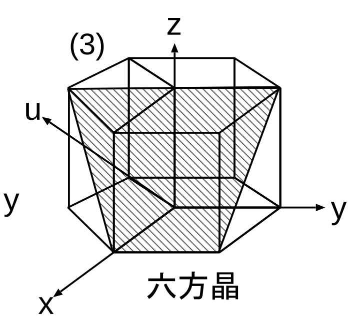
(2)



立方晶

(hkl) = (　　　)

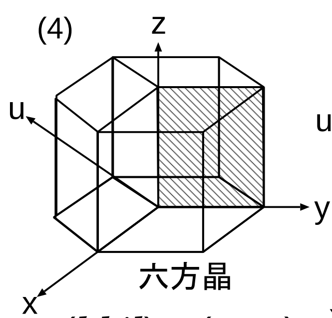
(3)



六方晶

$(hkil)$ = (　　　)

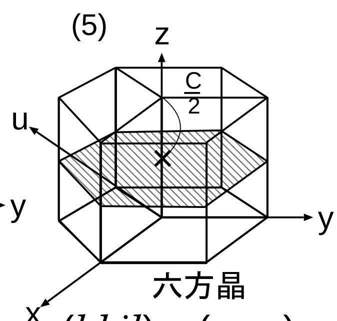
(4)



六方晶

$(hkil)$ = (　　　)

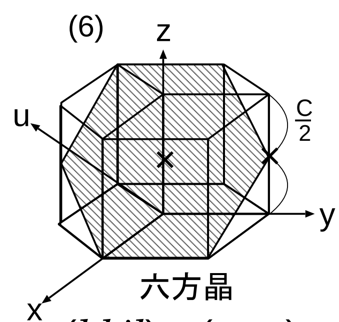
(5)



六方晶

$(hkil)$ = (　　　)

(6)



六方晶

$(hkil)$ = (　　　)

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。例えば室温における鉄であれば、BCC の単位格子に 2 個の原子が存在する。原子半径を r とおけば、単位格子の一辺の長さを a とすると、$\sqrt{3}a = 4r$ であるから、

$$APF_{\mathrm{Fe}} = \frac{2 \times (4\pi r^3/3)}{(a)^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8}$$

で与えられる。

(1) 単体の金 (FCC) について、APF_{Au} の値を求めよ。解答に π や根号 ($\sqrt{\ }$) が出た場合は、小数に直さずそのまま表記すること (以下の小問も同様)。

(2) 炭素原子の半径を r とするとき、ダイヤモンドの単位格子の 1 辺の長さ a を r で表せ。

(3) ダイヤモンドの空間充填率 APF_{D} を求めよ。

学籍番号：　　　　　　氏名：

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。以下、単純格子を ”P” 、底心または側心格子を”C”、体心格子を ”I”、面心格子を”F” で表す。

[1] 下表の空欄に、ブラベ格子として存在するものは○、しないものに×印を記せ。

晶系	P	C	I	F
六方晶	○			
立方晶	○	×	○	○
菱面体晶	○	×	×	×
正方晶	○	×		

晶系	P	C	I	F
直方晶	○			
単斜晶	○			
三斜晶	○	×	×	×

[2] 上の表において、「底心 (または側心) 立方晶」が存在しない理由を述べよ。

5. 単純立方構造を持つ金属の単体粉末についてX線回折測定を行ったところ、9 個の回折ピークが観察された。角度 2θ の **小さい方から数えて７番目** のピークの反射の指数 hkl[1]を記せ。答だけでなく説明も記すこと。また Bragg の式は、面間隔を 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]注１：ミラー指数 (hkl) とほぼ同様に考えて良い

6. ヨウ化セシウム CsI は塩化セシウム CsCl と同様に単純立方構造を有しており、ヨウ素イオンを単位格子の原点の置くとき、反射の指数 hkl[注2]の結晶構造因子 F は、

$$F = \sum_{j=1}^{2} f_j e^{-2\pi i(hu_j+kv_j+lw_j)} = f_{\mathrm{I}} + f_{\mathrm{Cs}} \cdot e^{-\pi i(h+k+l)}$$

で与えられる。ここで、f_{I}、 f_{Cs} はそれぞれヨウ素イオンとセシウムイオンの原子散乱因子を表す。

(1) f_{I} と f_{Cs} および h, k, l を用いて回折強度 $F^2(= F^*F)$ を表せ。ただし、f_{I}、f_{Cs} はともに実数であり、それぞれの共役複素数はそれ自身と同じ (つまり $f_{\mathrm{I}}^* = f_{\mathrm{I}}$、$f_{\mathrm{Cs}}^* = f_{\mathrm{Cs}}$) である。

(2) ヨウ素イオンとセシウムイオンの電子配置はどちらも同じ (Ar 型) であるため、$f_{\mathrm{I}} = f_{\mathrm{Cs}} = f$ とおくことができる。このことと上記 (1) の結果を用いて、ヨウ化セシウムが単純立方格子であるにもかかわらず体心立方格子のような消滅則 ($h + k + l$ が奇数なら $F = 0$) を示す理由を説明せよ [注3]。

[2] 注２：前問 5. と同じく、面のミラー指数 (hkl) と同様に考えて良い
[3] 注３：参考になるかどうかですが…　オイラーの式 : $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$