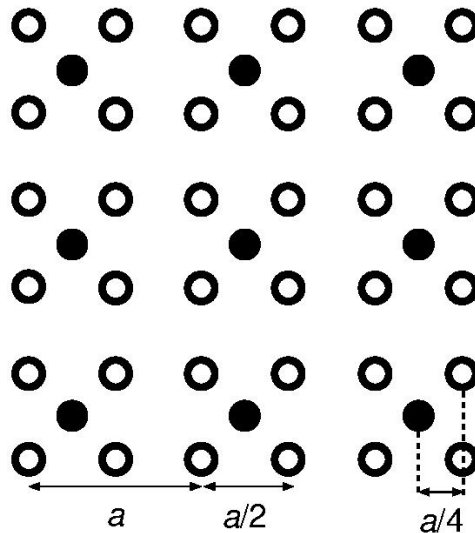


令和5年度 基礎結晶学 2023.8.1 実施

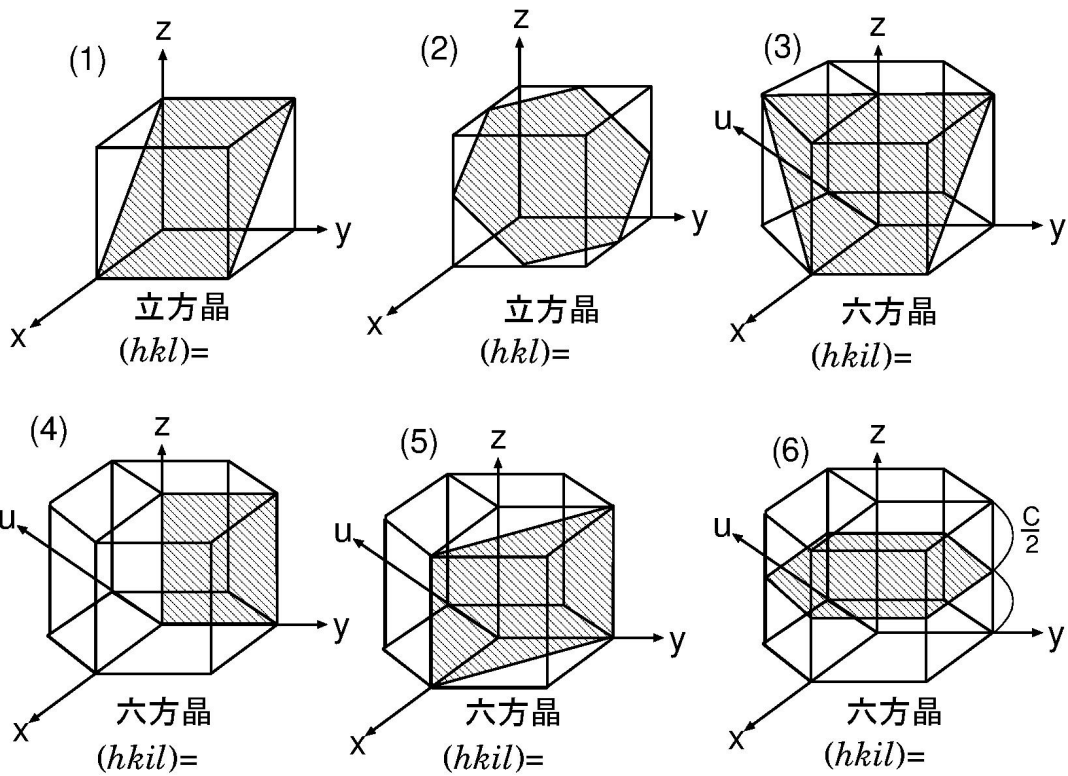
学籍番号 _____ 氏名 _____

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



- (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)。
- (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。

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)。



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

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。

(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。

(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。

(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)。

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)。

3-3) Mg の APF を求めよ。

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。

(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。

(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)。

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。以下の間に答えよ。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。

(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) 熱処理後の結晶のプラベ格子の名称を記せ(答だけでよい)。

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。

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、格子点に乗っていないものはどれか、(1)~(6)の記

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

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

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。

- (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)。