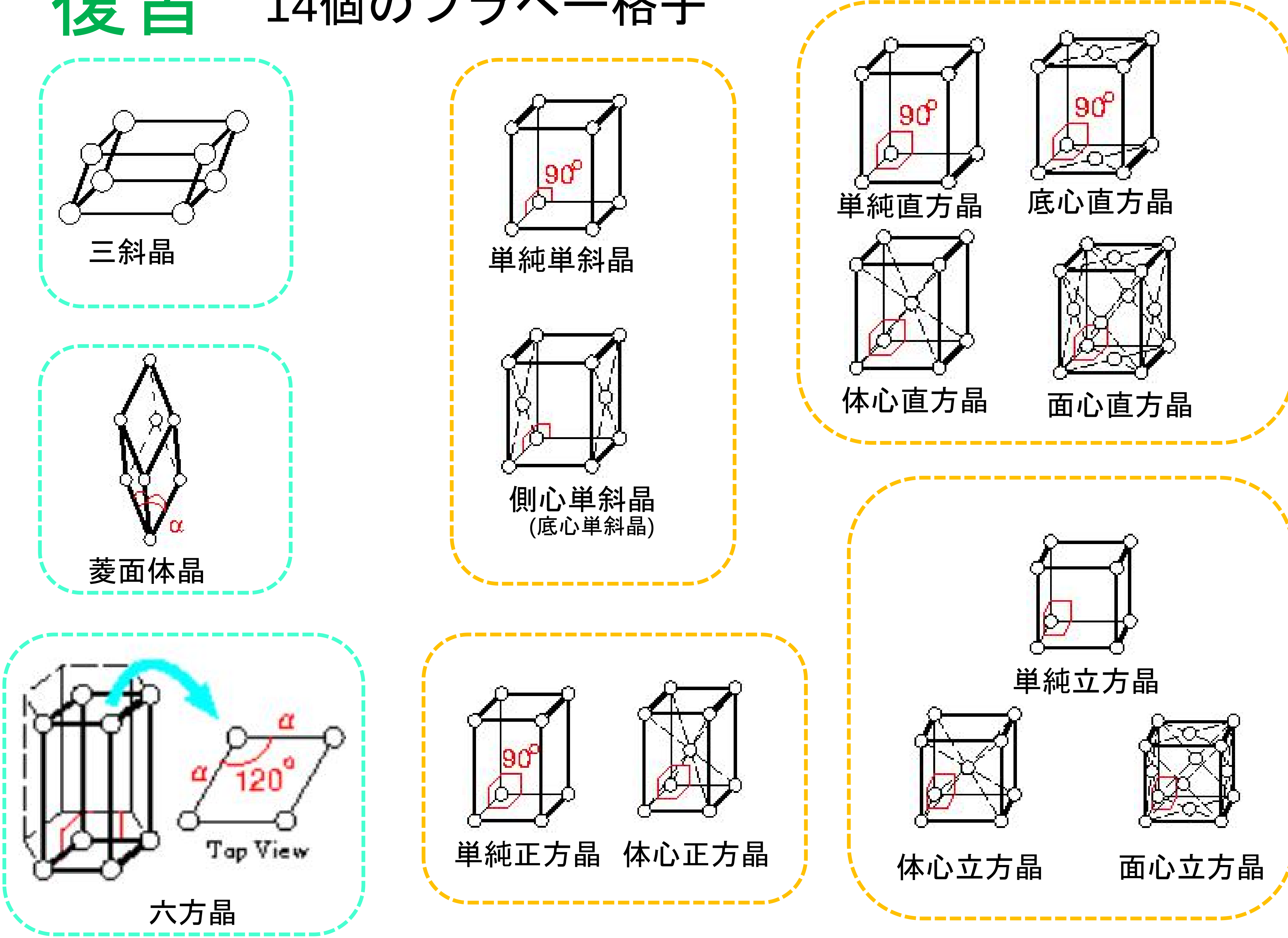
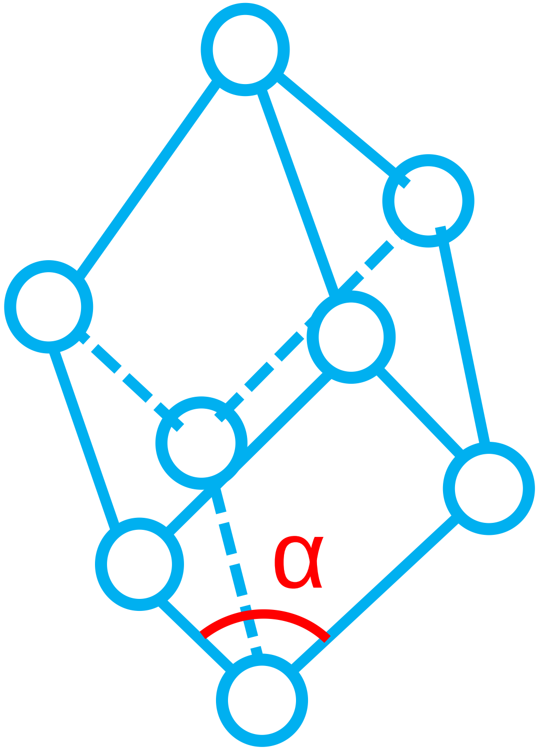
復習　14個のブラベー格子

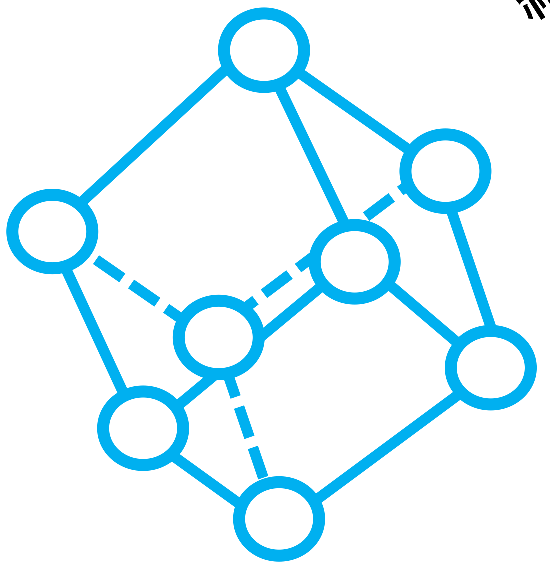


復習　立方晶は菱面体晶の特殊形



α

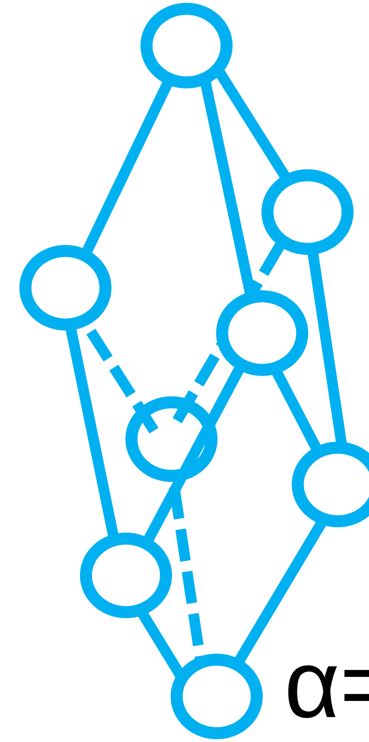
菱面体晶



単純立方晶

α=90°

縦に伸ばす

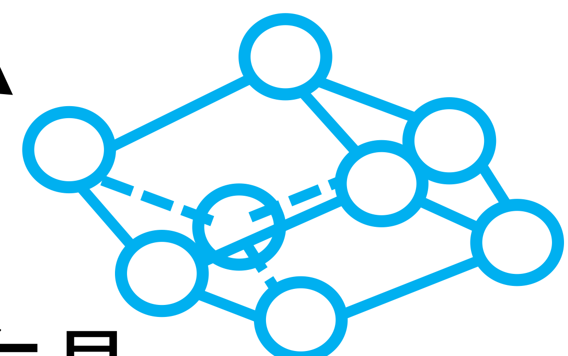


α=60°

面心立方晶

テキスト p.4 を見ること

縦につぶす



体心立方晶

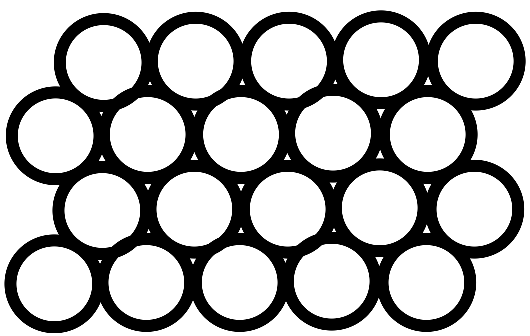
α=109.47°

二つの最密充填構造(面心立方と六方最密)の違い

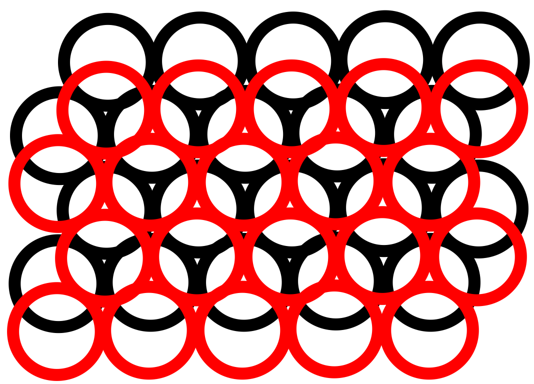
原子を球体と考えると、空間を埋め尽くすことはできず、必ず隙間ができる

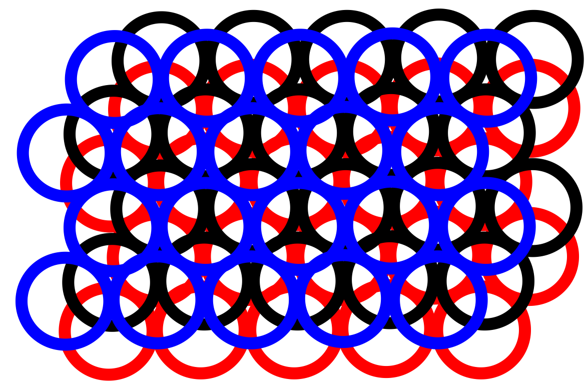
C軸は紙面に垂直

平面に球体を敷き詰めると、
六方格子のようになる

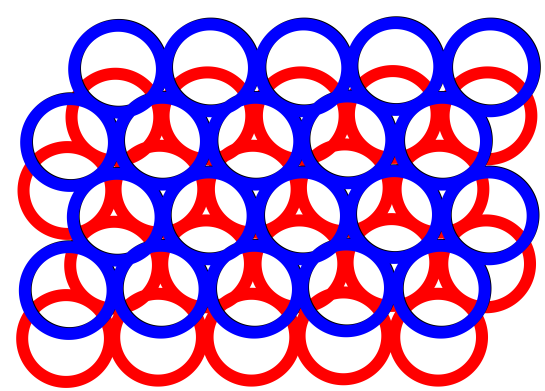


２段目を積み上げる

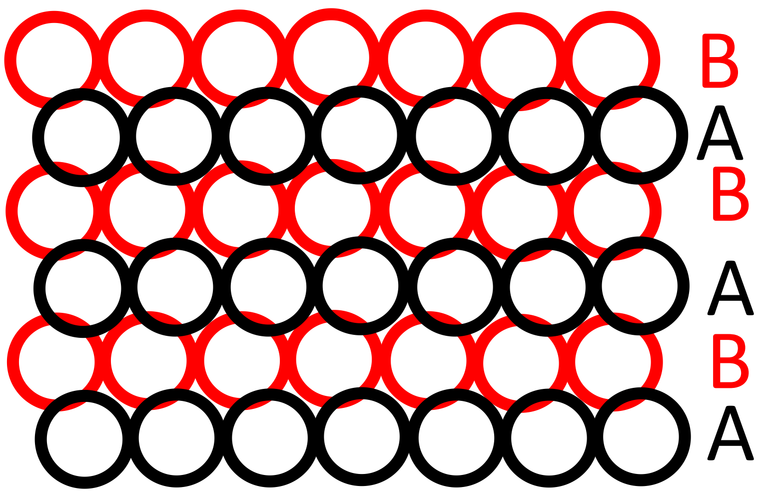




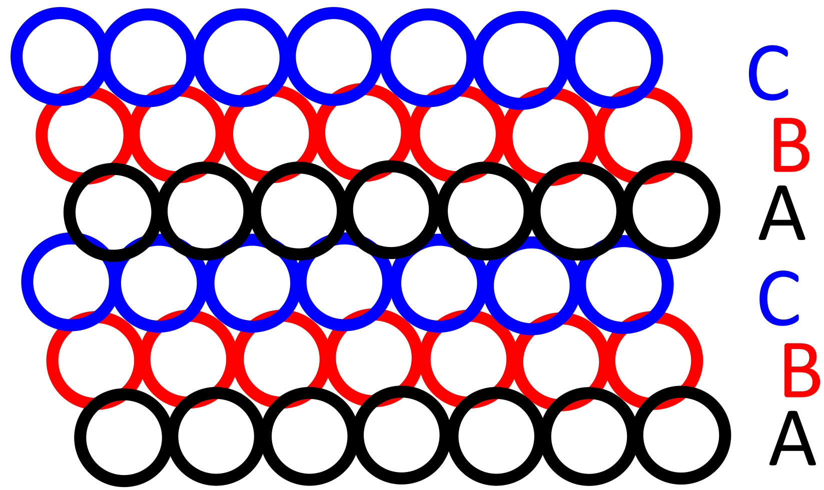
３段目の積み方は
２とおり



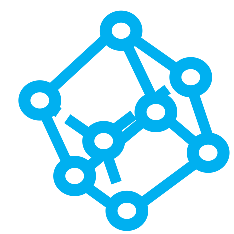
最密構造2つ

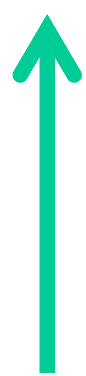


六方最密構造



面心立方





講義中に実施する予定の課題

１ 原子を剛体球と考えた場合、面心立方格子の格子点に１個の原子を持つ単体金属の空間充填率を求めよ。ただし平方根が出たらそのまま記述し、小数にする必要は無い。

半径rの原子１個あたりが占有する空間の体積 V_{atm} をまず求める。
その逆数が空間充填率 となる。

２ 上記１と同様に、体心立方格子の格子点に１個の原子を持つ単体金属の空間充填率を求めよ。

同上

３ 理想的な六方最密構造を持つ単体金属について、a軸とc軸の比を求めよ。
また、この空間充填率は問題１の面心立方と同じ値になることを示せ。

難しくはないが「面倒な」練習問題

「頭の体操」です。できなくても問題なし。
(定期試験に出す予定もありません)

七つの晶系について、
格子定数(６個)の特徴で表す場合と
最低限必要な対称要素で表す場合、
これらが等価であるかどうかを考察せよ。

考え方

「二つの条件Ａ、Ｂが等価である」とは、
「AならばB」「BならばA」が
同時に成り立つことである。

解答は次スライド以降...

復習 (しぶとく…)　七つの結晶系の記述

	最低限必要な対称要素で記述	格子定数の特徴で記述
三斜晶	特に無し	$a \neq b$、$b \neq c$、$c \neq a$ $\alpha \neq \beta$、$\beta \neq \gamma$、$\gamma \neq \alpha$
単斜晶	２回回転軸	$a \neq b$、$b \neq c$、$c \neq a$ $\alpha = \beta = 90^\circ$、$\gamma \neq 90^\circ$
直方晶 (斜方晶)	相互に直交する３本の２回回転軸	$a \neq b$、$b \neq c$、$c \neq a$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
菱面体晶	１本の３回回転軸	$a = b = c$　$\alpha = \beta = \gamma$ ただし角度は 90、120、109.47° ではない
正方晶	１本の４回回転軸	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
六方晶	１本の６回回転軸	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$
立方晶	相互に交わる４本の３回回転軸	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

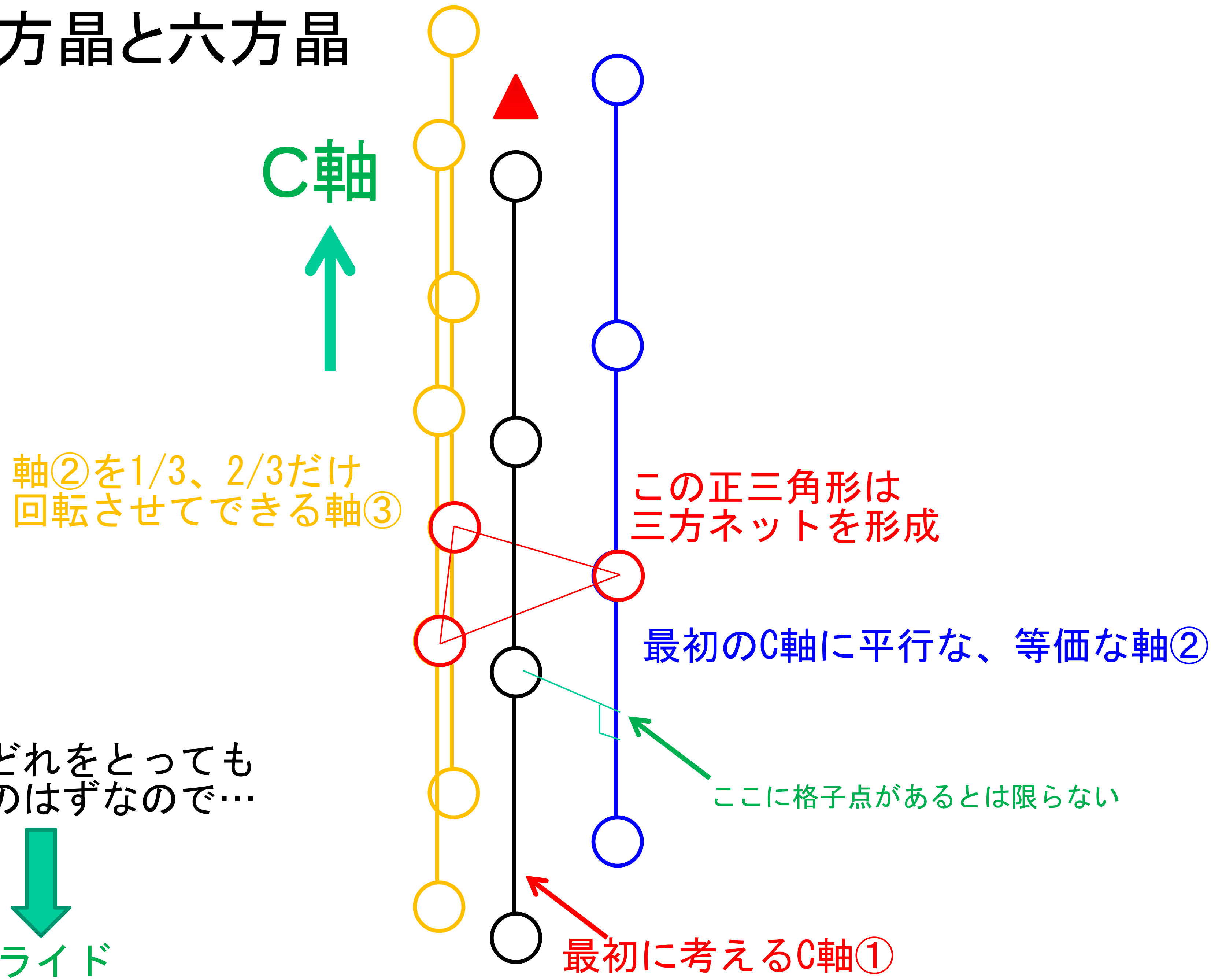
結晶系の特徴を記述する二つの方法
(格子定数による記述と対称性による記述)は等価？

格子定数の特徴で記述する場合、それぞれに
最低限必要な対称要素があることは
すぐに確認できる(確認してみること)。

その逆は？

7 結晶系：二つの記述法の等価性

[1] 三方晶と六方晶

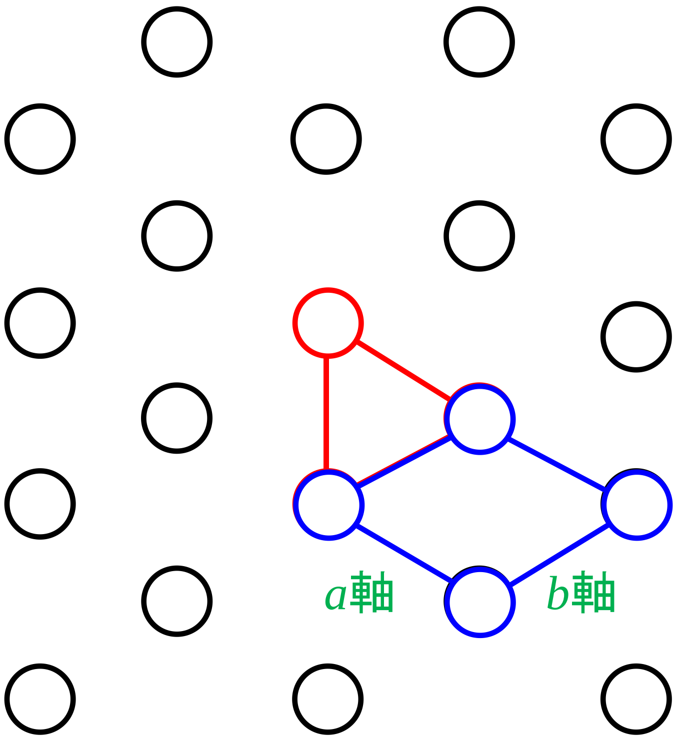


格子点はどれをとっても
同じ環境のはずなので…

次スライド

７結晶系：二つの記述法の等価性

[1] 三方晶と六方晶



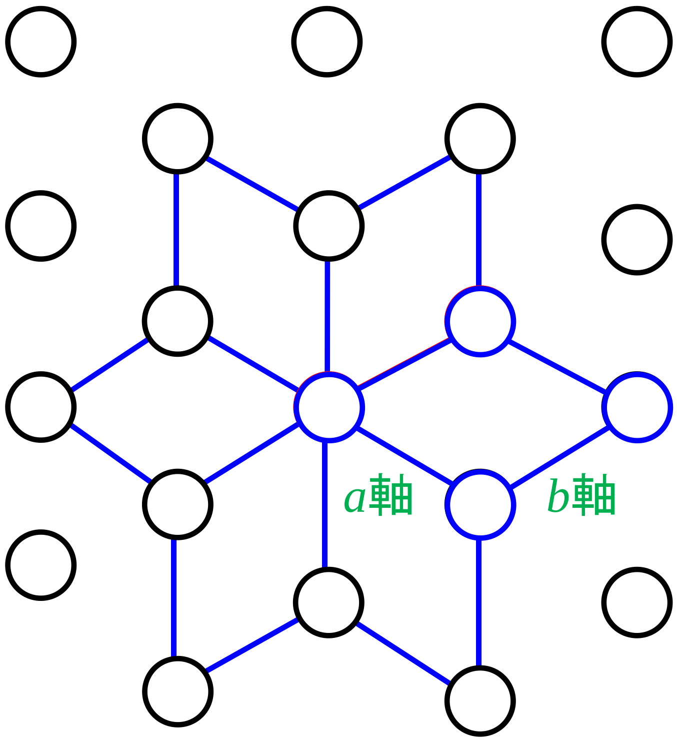
格子点はどれをとっても
同じ環境のはずなので、
格子点は左図のような
ネットを形成する。

前のスライドでは、「格子点が
あるとか限らない」とした場所に、
結果的にはあったということ。

Ｃ軸は３回回転軸なので、
三方ネットができる。

7 結晶系：二つの記述法の等価性

[1] 三方晶と六方晶



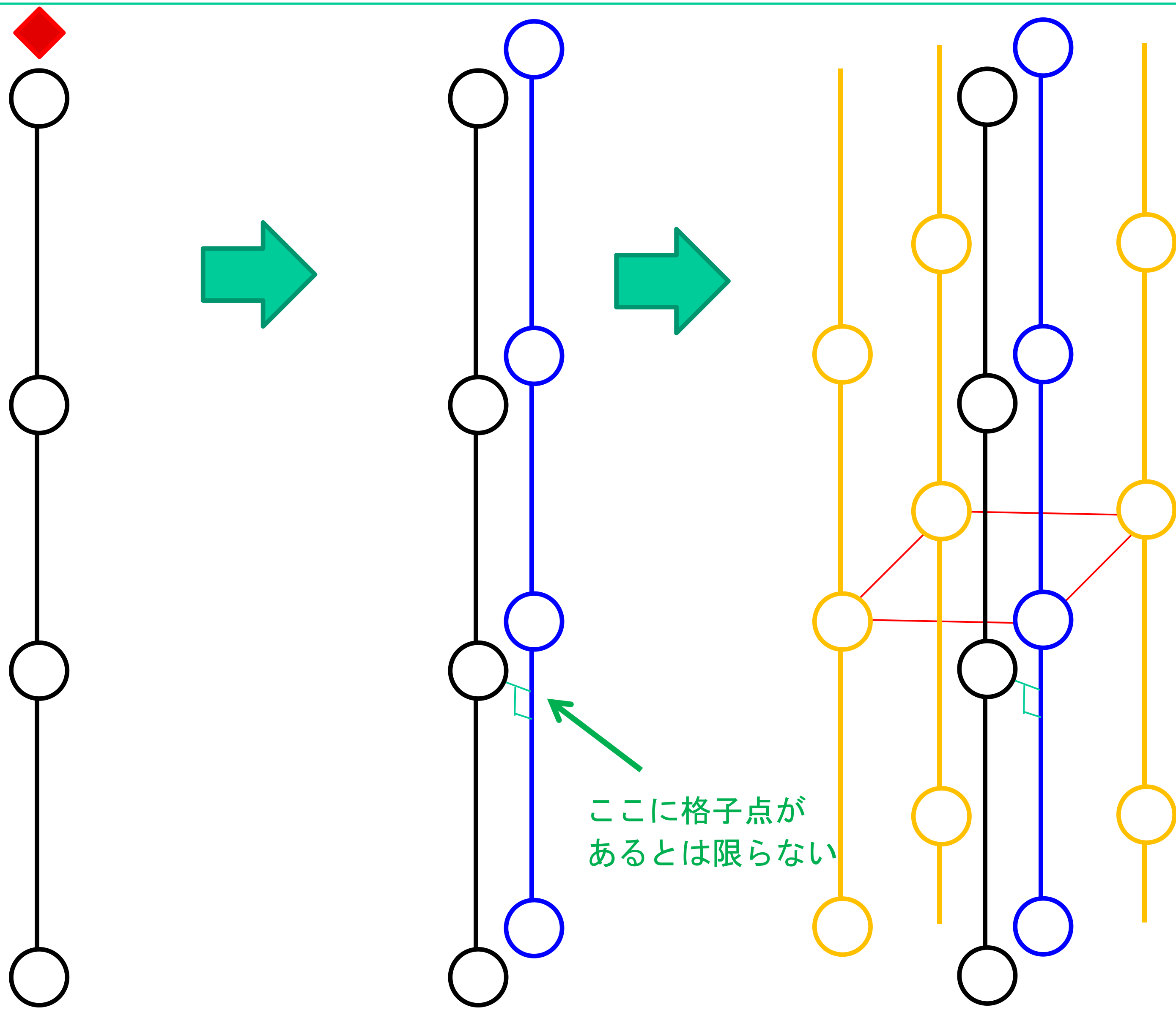
同じ理由によって …

Ｃ軸が６回回転軸であれば六方ネットができる。

左図のように a軸 ,b 軸を取れば、
最初にとったc軸と合わせて
六方晶の単位格子ができる

7 結晶系：二つの記述法の等価性

[2] 正方晶　（黒板で解答）



最初に考えるC軸①

最初のC軸に平行で
等価な軸②

①の回りに②を回転
（正方形ネット）

格子点は全て等価。
よって①軸上の
格子点も正方形
ネットを形成する

$a=b\neq c$、$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ の
格子ができる

Ｃ軸方向の周期性も
考えると、
体心正方晶または
単純正方晶となる

七つの結晶系の記述

格子定数(6個)の特徴で記述する方法と
必須の対称要素を記述する方法は等価

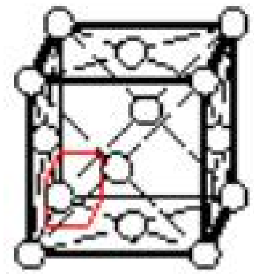
両方理解しておく必要があります。
片方だけでは文字通り「片手落ち」

原子の位置を記述する

単位格子にN個の原子があるとする。

j番目の原子の格子座標を $r_j=(u_j,v_j,w_j)$

金(面心立方)の構造



高校化学までの考え方

単位格子には４個の原子があり、その格子座標は
原子1→(0,0,0)、原子２→(1/2, 1/2, 0)、原子３→(1/2, 0, 1/2)、原子４→(0, 1/2, 1/2)

単位格子に４個の原子

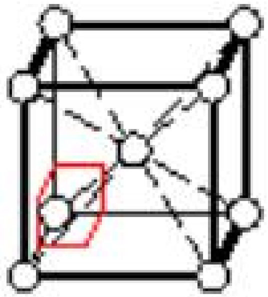
結晶学での考え方

単位格子には４個の格子点があり、その格子座標は
格子点1→(0,0,0)、格子点２→(1/2, 1/2, 0)、格子点３→(1/2, 0, 1/2)、格子点４→(0, 1/2, 1/2)

単位格子に４個の格子点、各格子点に１個の原子

原子の位置を記述する

α鉄(体心立方)

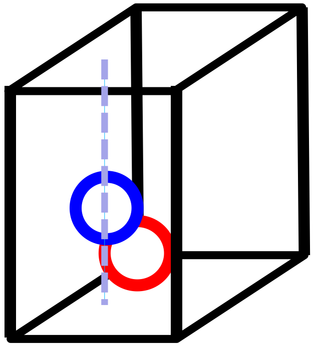


単位格子には2個の格子点があり、
その格子座標は
格子点1→(0,0,0)、
格子点２→(1/2, 1/2, 1/2)

その格子点に対する相対位置 (0,0,0)に
鉄の原子が１個ある。

１個の格子点に対して
１個の鉄原子がある。

Mg(六方最密)



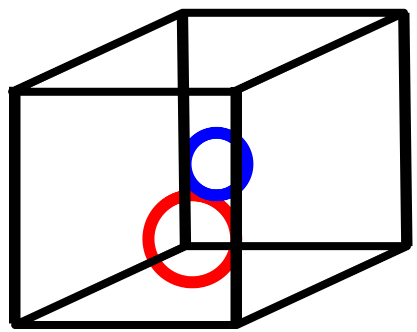
単位格子には格子点が１個だけあり、
その格子座標は(0,0,0) である。

その格子点に対する相対位置 (0,0,0)に
Mgの原子が１個あり、さらに
相対位置(2/3, 1/3, 1/2)に
Mgの原子が１個ある。

１個の格子点に対して
２個のMg原子がある

原子の位置を記述する

CsCl(単純立方)



単位格子には格子点が１個だけあり、
その格子座標は(0,0,0) である。

その格子点に対する相対位置 (0,0,0)に
Cl^- イオンが１個あり、さらに
相対位置(1/2, 1/2, 1/2)に
Cs^+ イオンが１個ある。

１個の格子点に対して
２個のイオンがある

結晶 = 格子点 ＋ 格子点に与えられる原子団

この原子団を「基本構造」(basis)という

１．ブラベー格子が決まって
２．格子定数が与えられて
３．基本構造が決まれば

すべての原子の位置を記述することができる

Text 第２章の最後に、結晶の例と基本構造の例を記載してあるので、見ておくこと