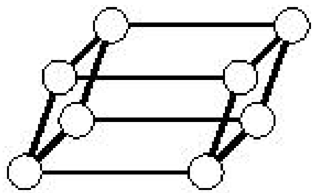
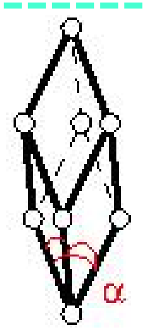
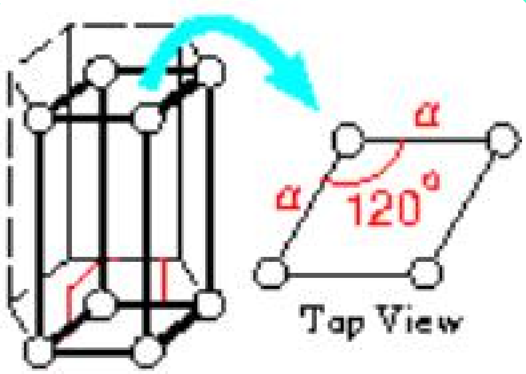
復習　14個のブラベー格子



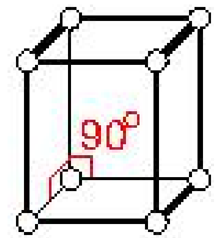
三斜晶



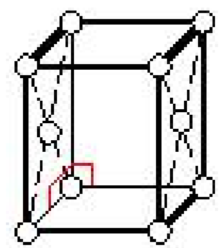
菱面体晶



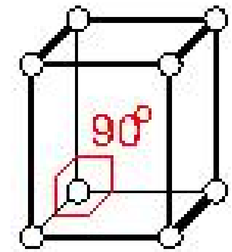
六方晶



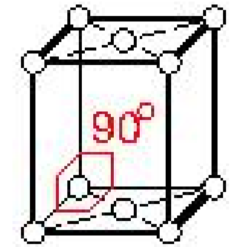
単純単斜晶



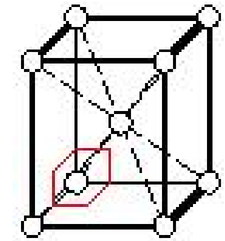
側心単斜晶
(底心単斜晶)



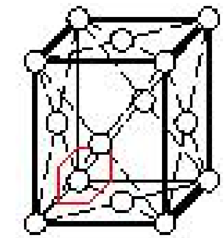
単純直方晶



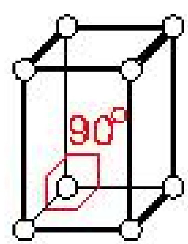
底心直方晶



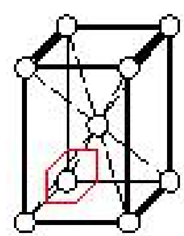
体心直方晶



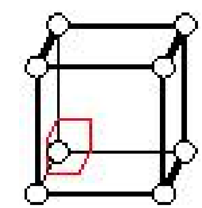
面心直方晶



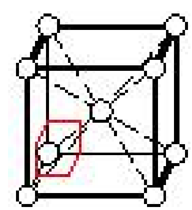
単純正方晶



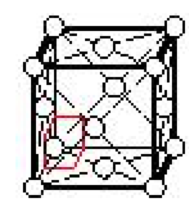
体心正方晶



単純立方晶

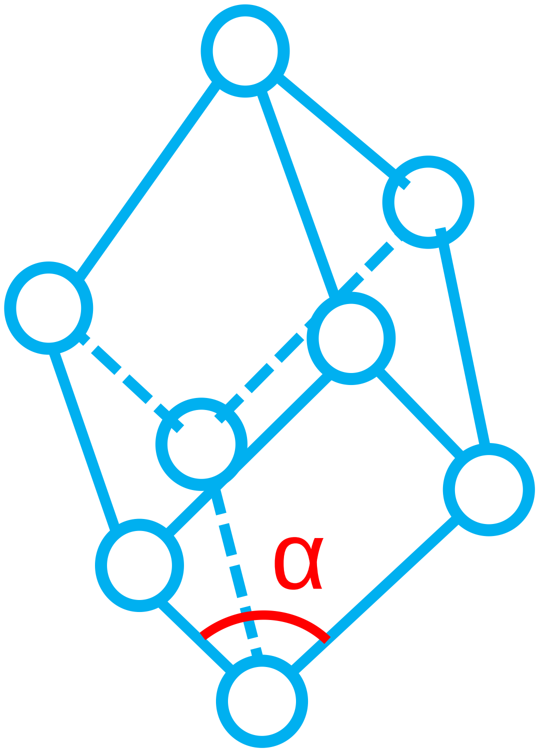


体心立方晶

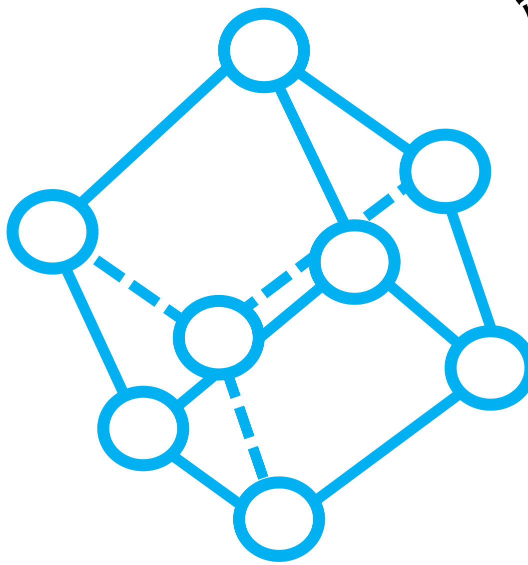


面心立方晶

復習　立方晶は菱面体晶の特殊形



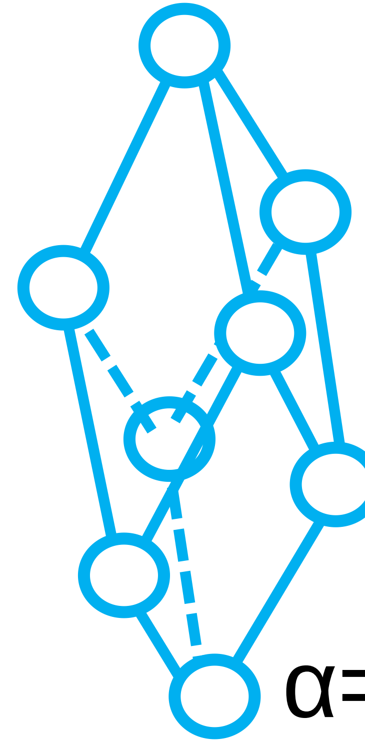
菱面体晶



単純立方晶

α=90°

縦に伸ばす

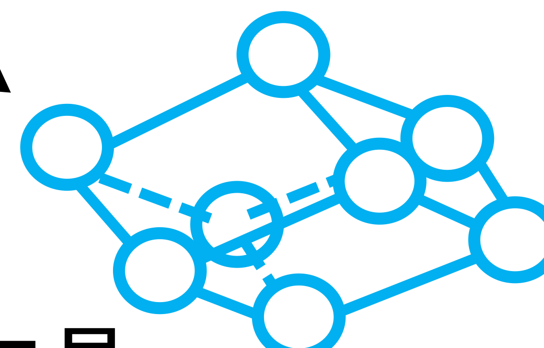


α=60°

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

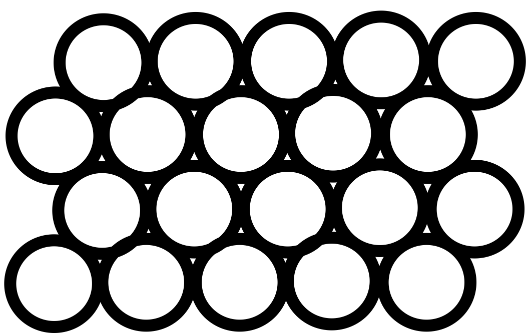
α=109.47°

二つの最密充填構造(面心立方と六方最密)の違い

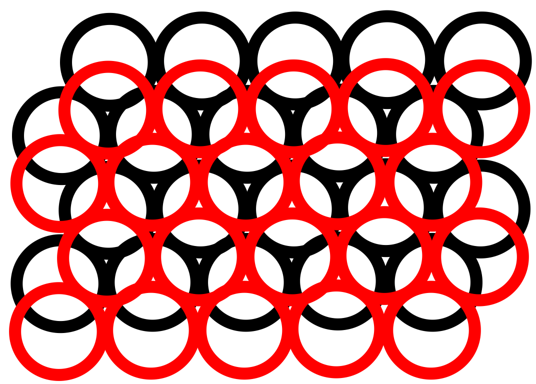
原子を球体と考えると、空間を埋め尽くすことはできず、必ず隙間ができる

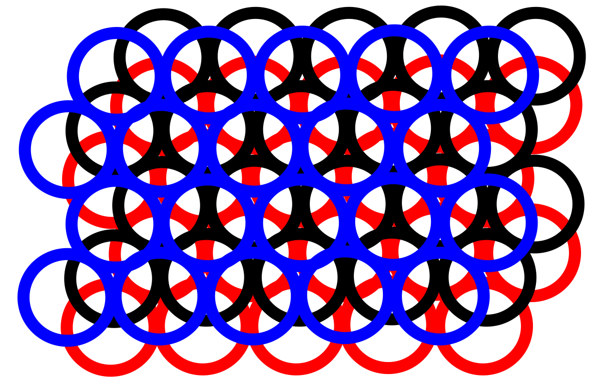
紙面に垂直に積み上げ

平面に球体を敷き詰めると、
六方格子のようになる

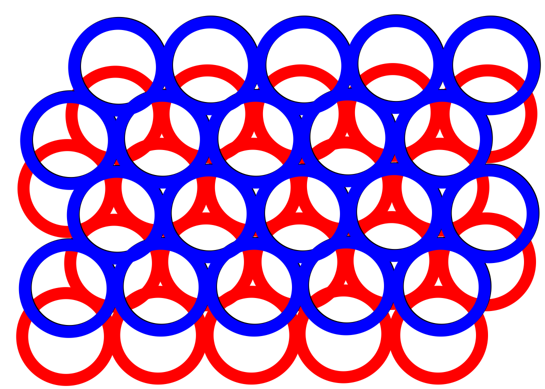


２段目を積み上げる

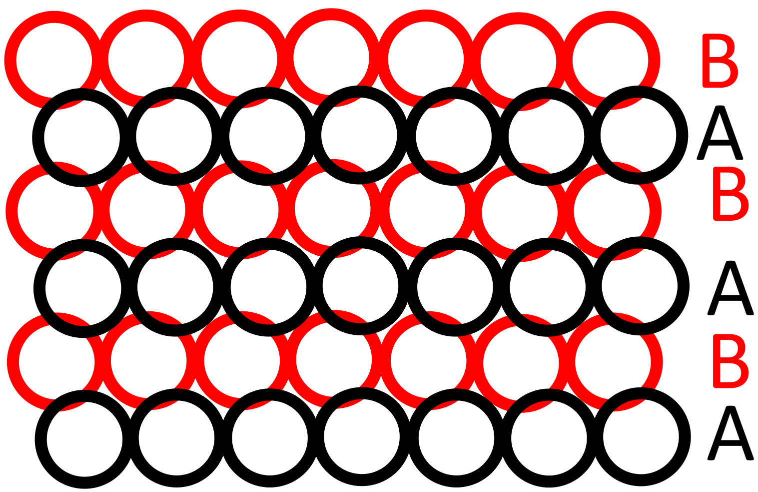




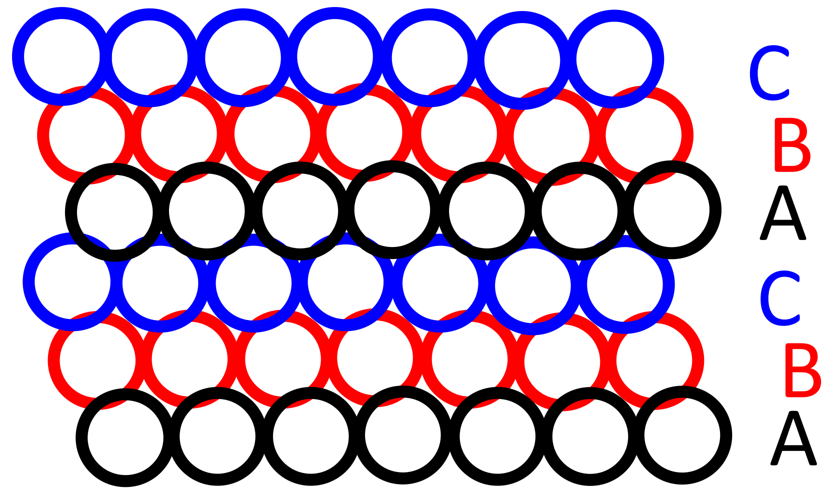
３段目の積み方は
２とおり

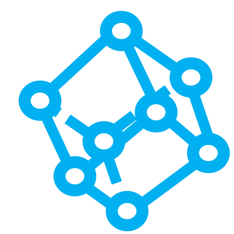


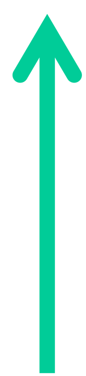
最密構造2つ



六方最密構造



面心立方 

C軸 

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 をまず求め、それに単位格子あたりの個数を乗じて単位格子の体積で割る。

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。

提出場所：C3棟入り口談話室の 専用Box

自宅で正解をノートに書き写した後、5/10(金) 17:00 までに下に示すボックスに(プリントを)提出されたし。

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

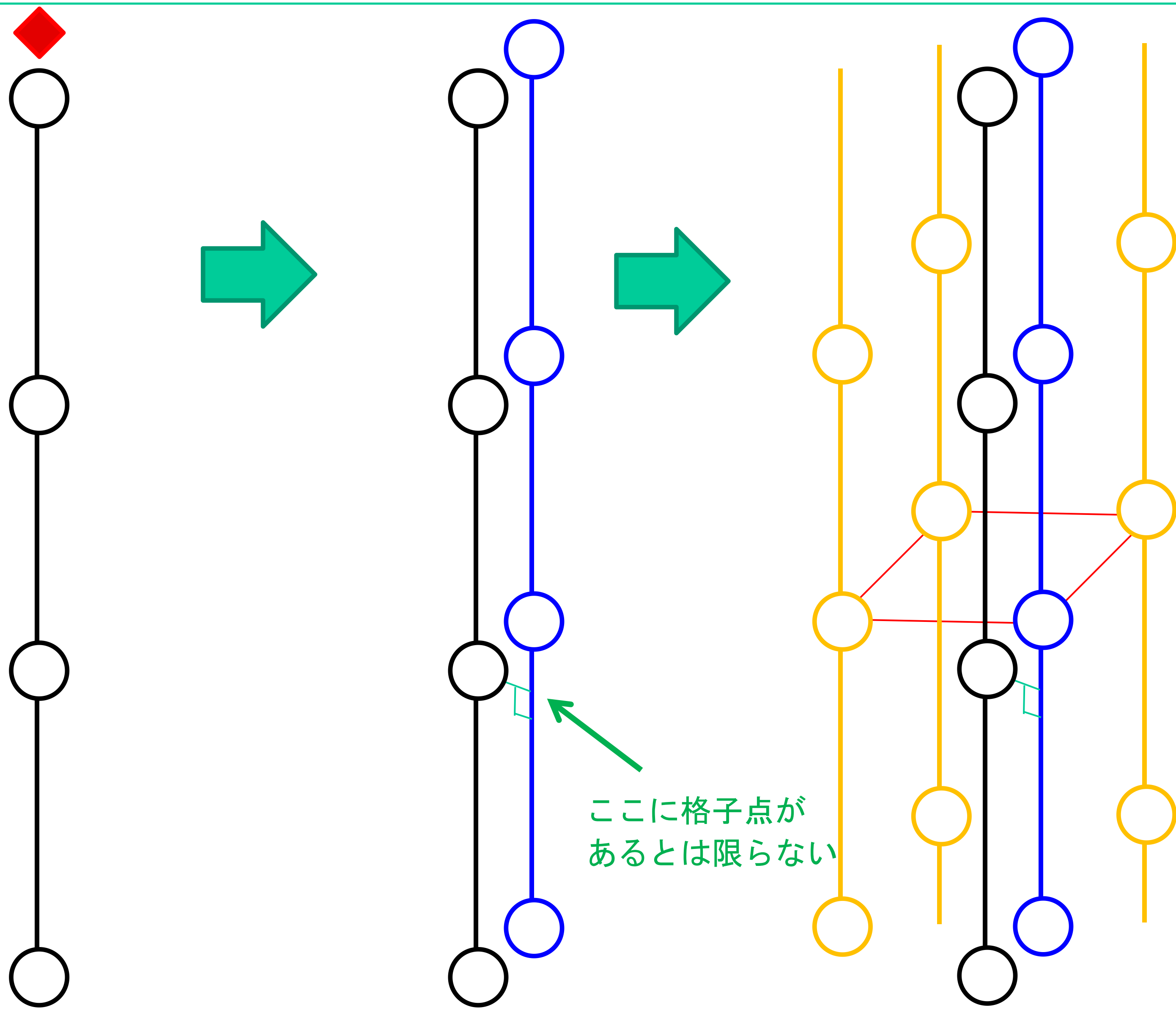
最低限必要な対称要素があることは

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] 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）

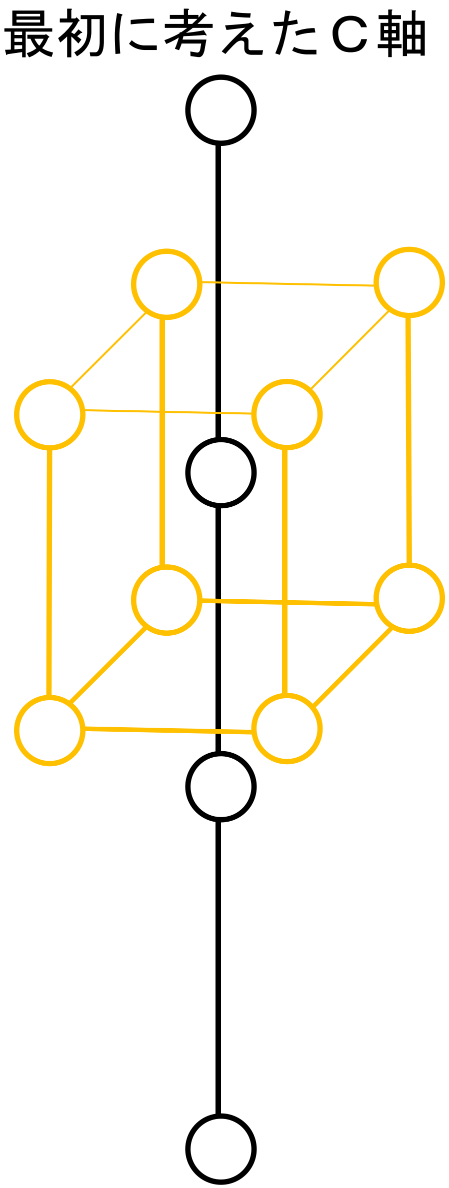
格子点は全て等価。
よって①軸上の
格子点も正方形
ネットを形成する

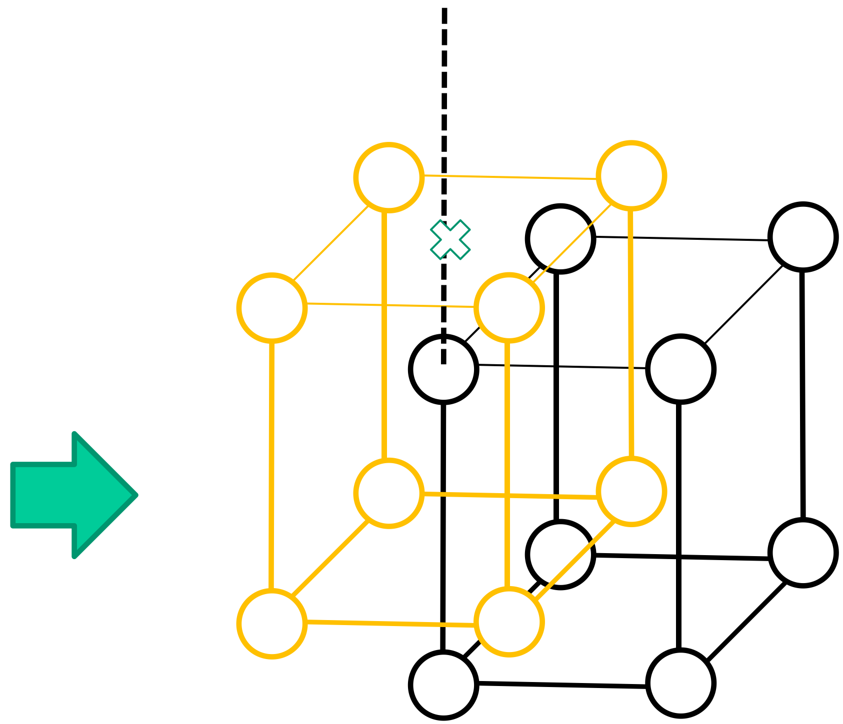
$a=b\neq c$、$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ の
格子ができる

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

7 結晶系：二つの記述法の等価性

[1] 正方晶　（黒板で解答）



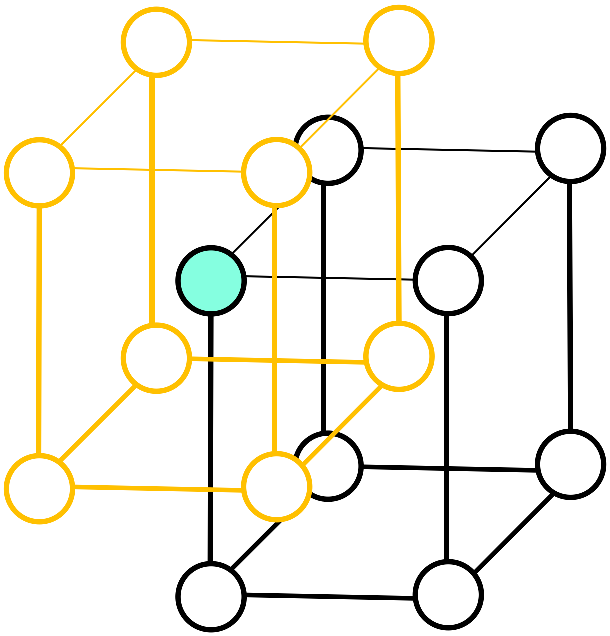


格子点の周囲の形は
みな同じはずなので、
最初の軸の格子点も
正方格子状に並ぶ。

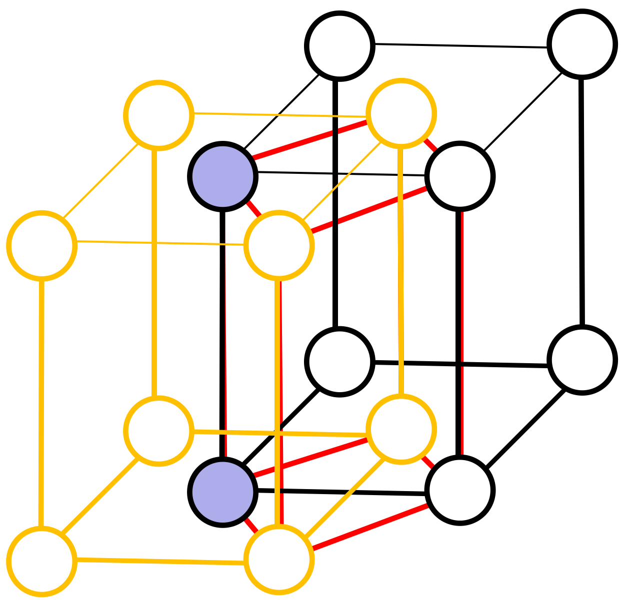
7 結晶系：二つの記述法の等価性

[1] 正方晶　（黒板で解答）

黒色格子の任意の点と黄色格子の任意の点を結んだものも格子点なので、
黒の格子点の位置は、黄色格子の体心の位置か、底心の位置以外は
ありえない。体心の位置になった場合は体心正方であり、
底心の位置になった場合は、軸の取り替えにより、単純正方となる。



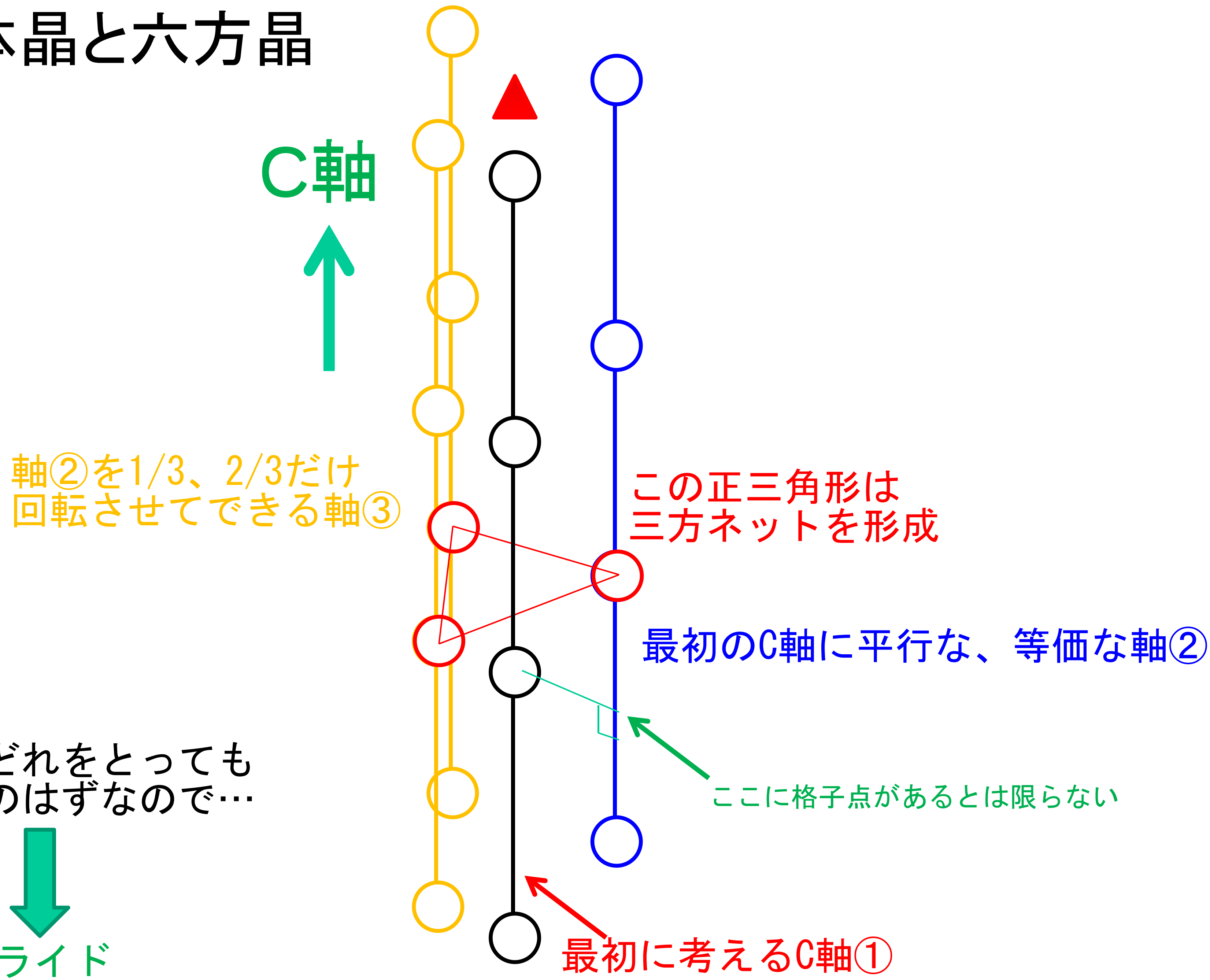
体心正方格子



単純正方格子（赤色で表示）

7 結晶系：二つの記述法の等価性

[2] 菱面体晶と六方晶

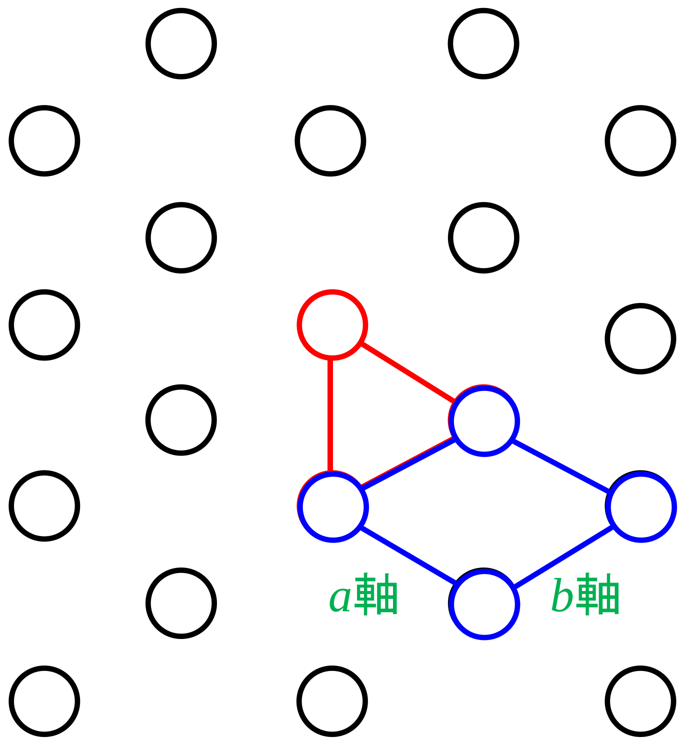


格子点はどれをとっても
同じ環境のはずなので…

次スライド

7 結晶系：二つの記述法の等価性

[2] 菱面体晶と六方晶



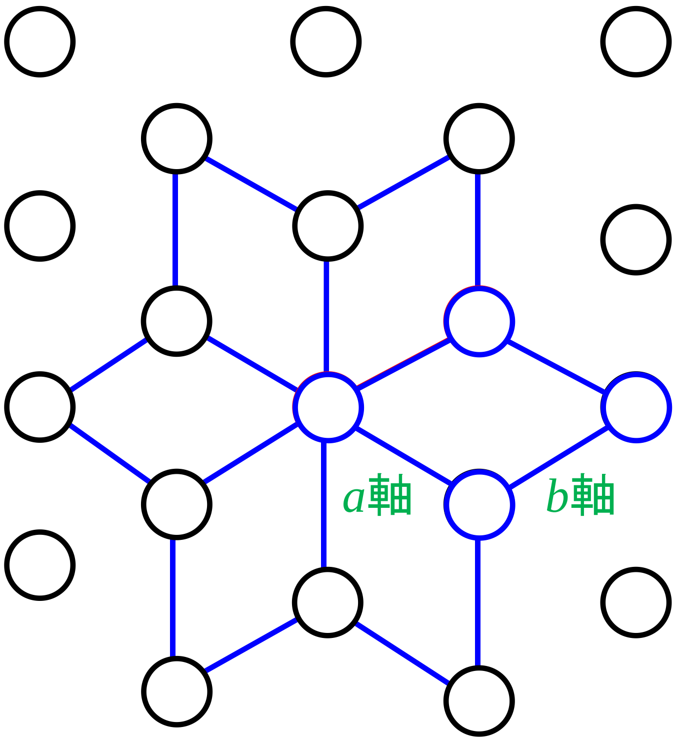
格子点はどれをとっても
同じ環境のはずなので、
格子点は左図のような
ネットを形成する。

Ｃ軸は３回回転軸なので、
三方ネットができる。

講義で解説したように、この解答にはいくつものバリエーションがあり、
全部きっちり説明しようとすると、ネットの積み上げの話に戻るので、
頭の体操＋復習と思っていろいろ思考してみてください

7 結晶系：二つの記述の等価性

[2] 菱面体晶と六方晶



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

七つの結晶系の記述

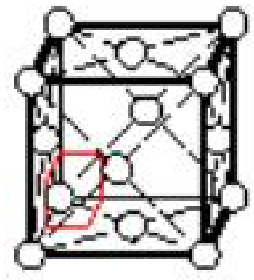
格子定数(6個)の特徴で記述する方法と
必須の対称要素を記述する方法は等価

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

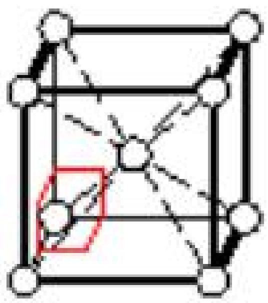
結晶学での考え方

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)

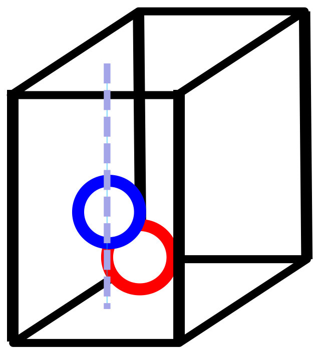


単位格子には2個の格子点があり、
その格子座標は
格子点1→(0,0,0)、
格子点２→(1/2, 1/2, 1/2)

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)



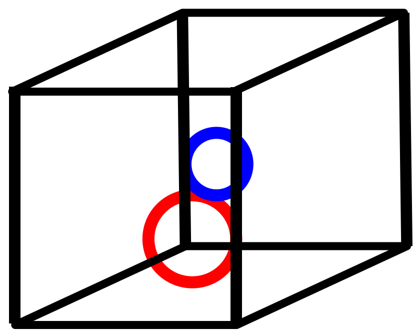
単位格子には格子点が１個だけあり、
その格子座標は(0,0,0) である。

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