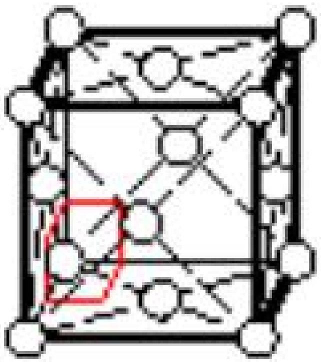
復習　原子の位置を記述する

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

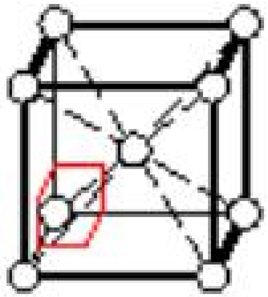
結晶学での考え方

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(続き)

α鉄(体心立方)

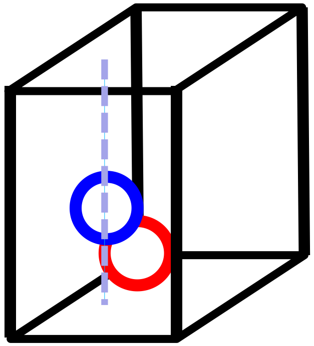


単位格子には2個の格子点があり、
その格子座標は
　格子点1→(0,0,0)、
　格子点２→(1/2, 1/2, 1/2)

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)



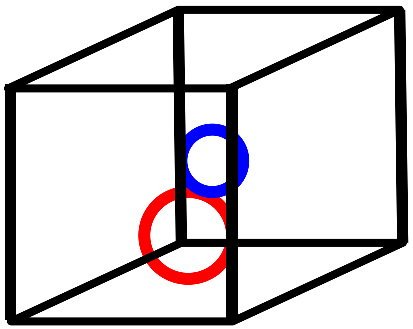
単位格子には格子点が１個だけあり、
その格子座標は(0,0,0) である。

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(続き)

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

pdfのテキスト 第２章の最後部分を
読んでおくこと

講義時間中の演習課題（予定）

１．　酸化鉄 FeO は、塩化ナトリウムと同じ結晶構造を持つ。
この結晶の基本構造を記述せよ

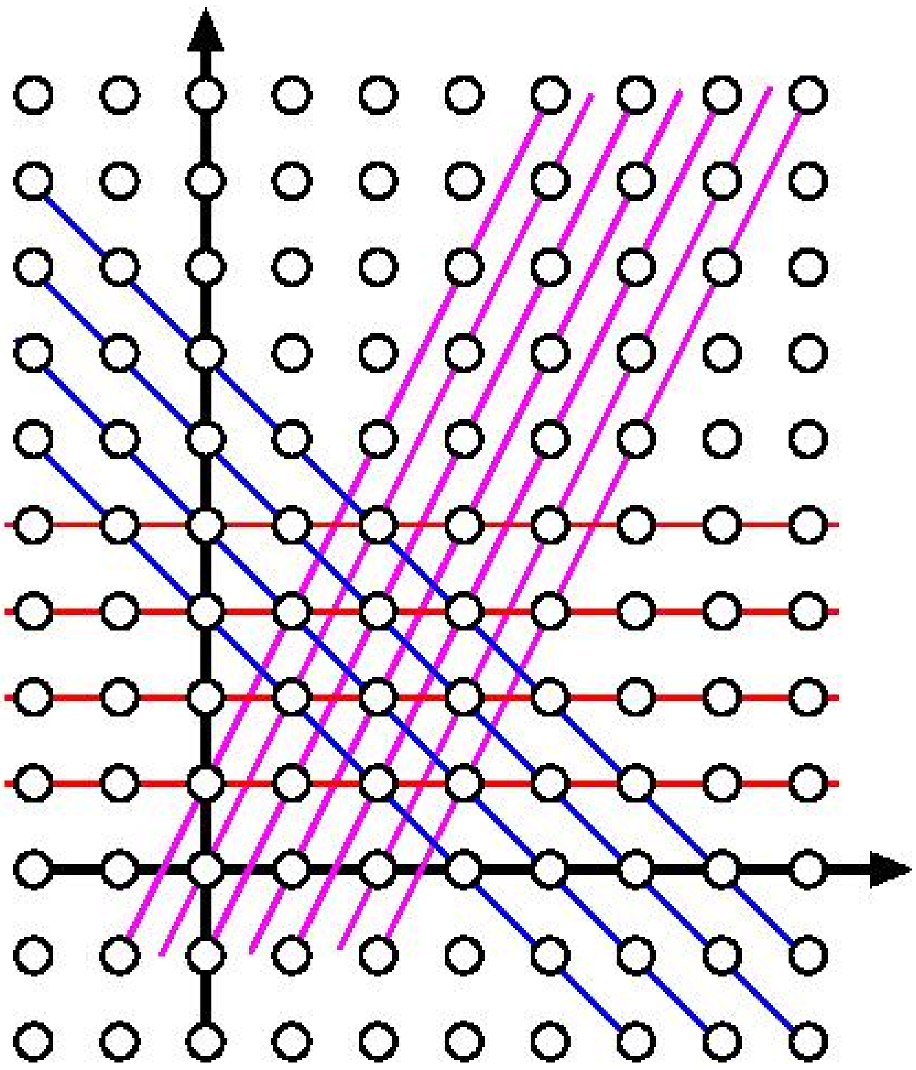
２．　マグネシウムは六方最密構造を有する。この結晶の基本構造は２個のMg原子から構成されるが、一方を単位格子の原点に置くとき、もう一方の位置を格子座標で表せ。

３．　マグネシウム結晶において、最も対称性の高い位置は上記問題２において基本構造を構成する２個の原子の中点である。この点をあらためて原点とした場合の基本構造を記述せよ。

ミラー指数

原子/格子点の並んだ面を記述する
結晶内の方向を記述する

まず２次元で考え、３次元に拡張する



直線の方程式：N を整数として

$$2x - y = N$$

$$x + y = N$$

$$y = N$$

一般形：$hx + ky = N$

斜交座標系でも成立する！

原点をどこにとるかは人の勝手であるから、重要なのは整数の組 (h, k) である。

格子点の並んだ面を記述する

２次元

$$hx + ky = N$$

Nを変えて多数の等価な線を表す

線を表す整数の組$(h\,k)$

h, kは、互いに素

N=0 は原点を通る線

N=1 は原点に最も近い線

３次元

$$hx + ky + lz = N$$

Nを変えて多数の等価な面を表す

面を表す整数の組$(h\,k\,l)$

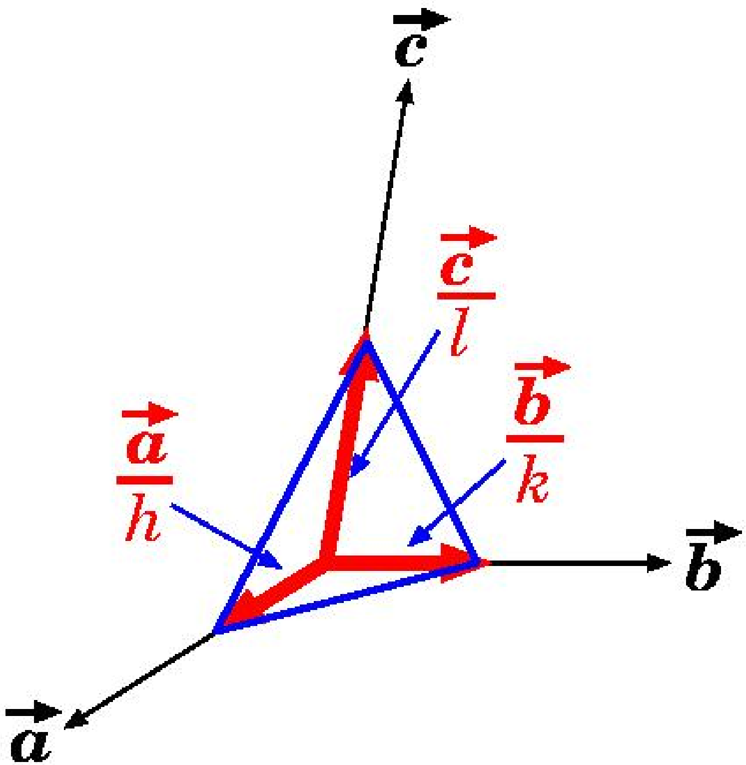
h,k,l の最大公約数は１

N=0 は原点を通る面

N=1 は原点に最も近い面

N=1 のとき、この面が単位格子を
どのように切っているかが判る

(hkl)面



N=0 のとき、面は原点を通る。
原点には格子点がある。

N=1 の面には原点は含まれない。
この面は N=0 の面に平行で、
N≠0 の面では最も原点に近い。

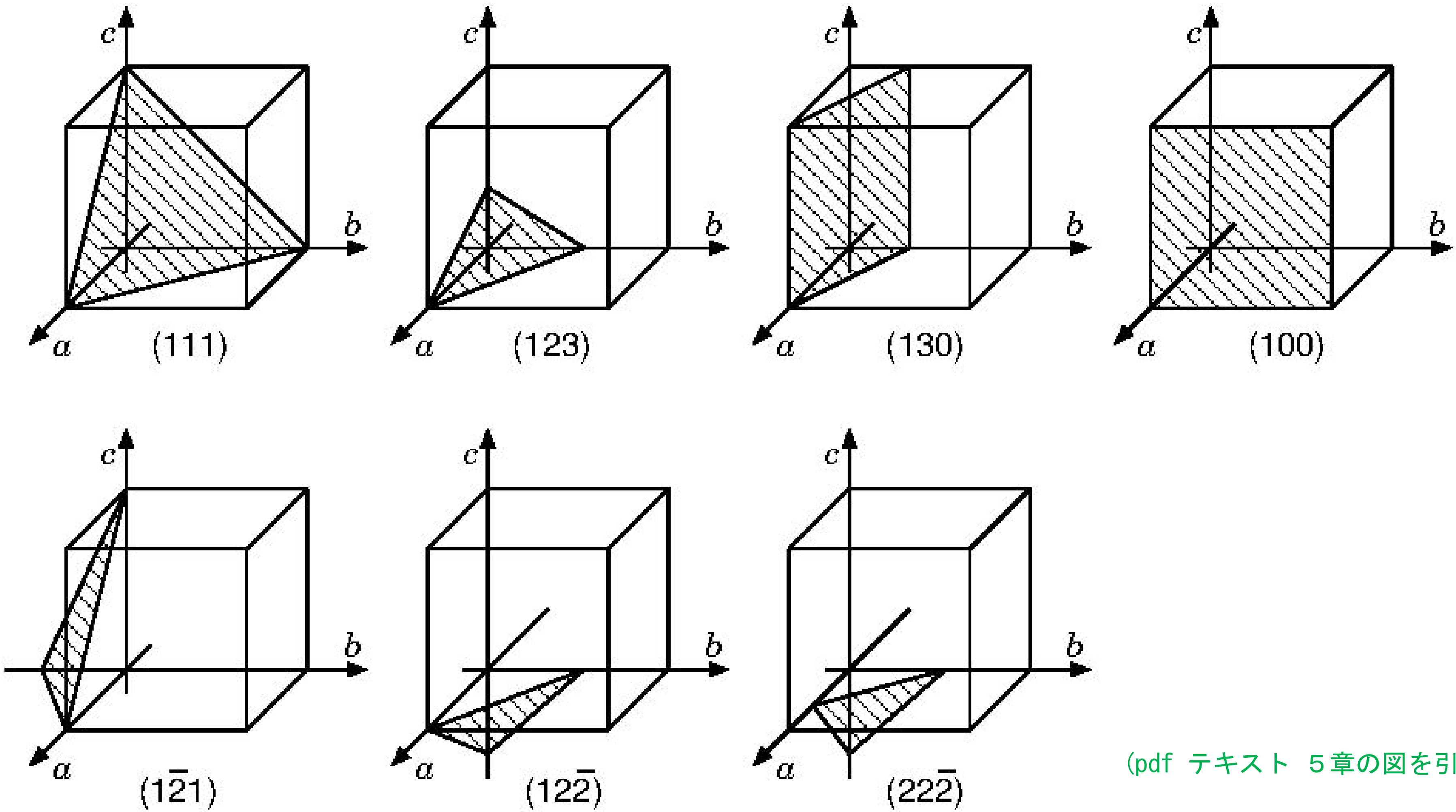
(hkl)面

(hkl)→「ミラー指数」(Miller Index/Indices)

☆ 三角形部分だけでなく、無限に広がっている
☆ １枚だけでなく、平行な一群の面全部を指す
☆ コンマはつけない(座標ではないため)

いろいろな（hkl）面：立方晶の例

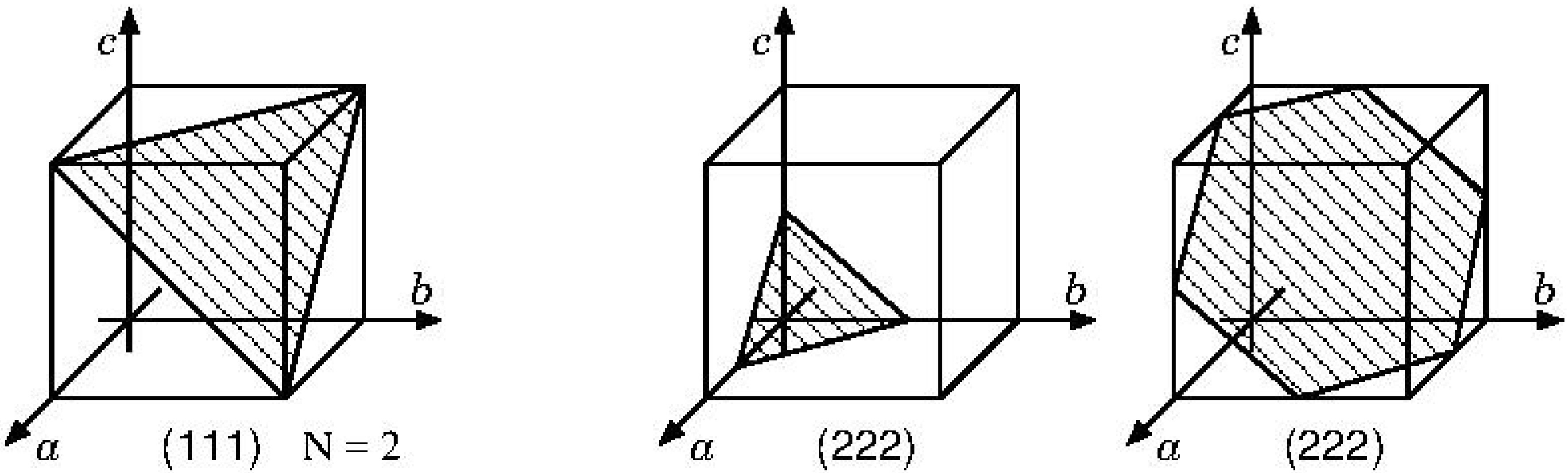
負の部分で軸を切るときは、マイナス符号ではなく、指数の上にバーを付ける



（pdf テキスト ５章の図を引用）

前ページのスライドと併せて見ておくこと

いろいろな（*hkl*）面：立方晶の例－２



<u>単純格子</u>については、*h,k,l* の最大公約数が１でない場合、
その面には格子点は存在しない。

等価な面の数（「多重度」）

４回回転軸をもつ立方晶では、(100) (010) (001) $(\bar{1}00)$ $(0\bar{1}0)$ $(00\bar{1})$ を区別する理由が無い

まとめて $\{100\}$ で表す

４回回転軸をもつ立方晶において、$\{h00\}$ は ６個の等価な面を持つ →「多重度は６である」

以上、面のミラー指数

方向のミラー指数

$[uvw]$ シンプルに方向を表す。ただし、整数 u,v,w は、最大公約数が１であるようにとる

等価な方向をまとめて表す場合、$\langle uvw \rangle$