

ミラー指数復習

(かなり急いで話したので、本日は少し演習します)

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。多重度は **6**

等価な面の数 = 「**多重度**」)

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、 $\langle uvw \rangle$

講義時間内演習

1. 立方格子において、ミラー指数 $\{hh0\}$ (ただし $h \neq 0$) で表される面については いくつの等価な面が存在するか？

この問題の意味は、「面を表すミラー指数の三つの数字に、ゼロが一つ含まれ、ゼロではない二つが同じ値である場合、等価な面はいくつある？」という意味である。

講義時間内演習

2. 立方格子において、ミラー指数 $\{hk0\}$ で表される面については いくつの等価な面が存在するか？
(ただし $h \neq k$ 、いずれもゼロではない)

$\{hh0\}$ の時は全て数えあげたが、 $\{hk0\}$ では数が多くなるので面倒。
もう少し別のアプローチを考えたほうが良い。

講義時間内演習

3. 正方格子 ($a = b \neq c$) において、 $\{100\}$ $\{001\}$ はそれぞれいくつの等価な面を持つか？

講義時間内演習

4. **面心立方**構造をもつ単体金属(例：**金**、**銀**など)において、原子が最も密に並んだ面をミラー指数で表示せよ。
また、原子を剛体球と見なし、その断面図を図示せよ。

講義時間内演習

4. **体心立方**構造をもつ単体金属(例：**鉄**、**Na**など)において、原子が最も密に並んだ面をミラー指数で表示せよ。
また、原子を剛体球と見なし、その断面図を図示せよ。

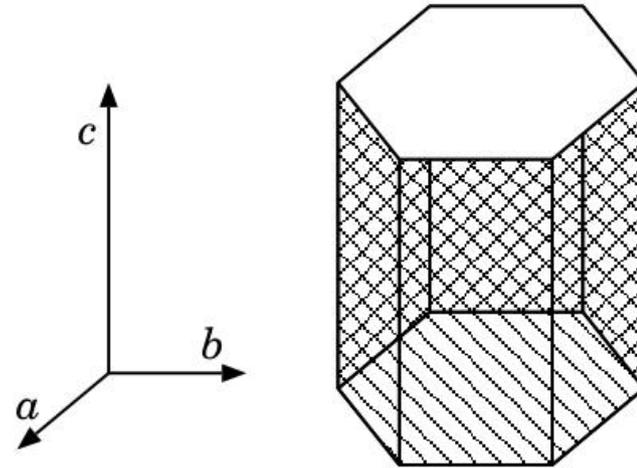
六方晶のミラー指数 (ミラー・ブラベー指数)

1) 面のミラー・ブラベー指数

六方晶では、

(100) (010) ($\bar{1}10$) ($\bar{1}00$) ($0\bar{1}0$) ($1\bar{1}0$)

面は等価であるが、数字の並びを見ただけでは判りにくい。



そこで、第4の基本ベクトル \vec{a}' を導入する。

$$\vec{a}' = -(\vec{a} + \vec{b})$$

第4の基本ベクトルに関する指数を i と記し、 hkl と合わせて4つの指数 (ミラー・ブラベー指数) ($hkil$) で表記する。

h, k, i にはつねに

$$h+k+i=0 \quad \dots (*)$$

の関係が成立するので、しばしば i を \cdot で表記し、 $(hk \cdot L)$ と記述される。

ミラー指数 (hkl) とミラー・ブラベー指数 $(hkil)$ は、式 $(*)$ によっていつでも機械的に変換できる。

2) 方向のミラー・ブラベー指数

第4の軸を導入すると、方向についても指数 $[UVW] \rightarrow [uvtw]$ の変換が存在するが、

面の場合ほど単純ではなく、結構ややこしい

テキスト読んでおいてください。

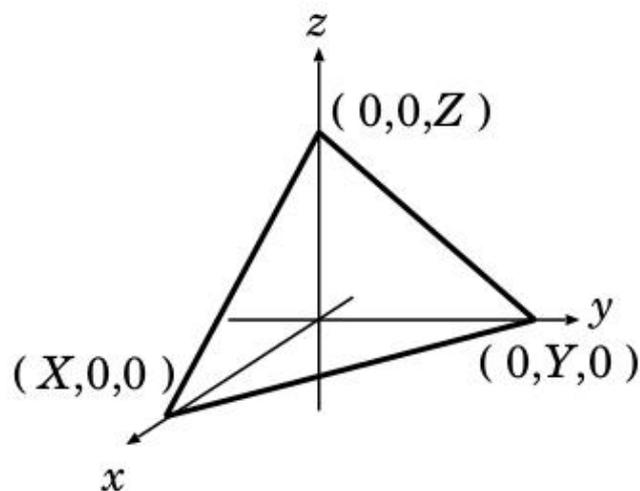
(hkl)面の間隔

立方晶・正方晶・直方晶・六方晶

では、比較的簡単に計算できる。

正規直交基底をもつ座標系

この面と原点の距離を d とすると、



$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{X^2} + \frac{1}{Y^2} + \frac{1}{Z^2}$$

この式は高校数学で学習した「点と直線の距離」の公式を、「点と平面の距離」に素直に拡張することによって導出できます。自力でも簡単にできると思いますので、各自やってみてください。

直方晶の (hkl) 面の場合、 $(X, 0, 0)$ 、 $(0, Y, 0)$ 、 $(0, 0, Z)$ は、
 $(a/h, 0, 0)$ 、 $(0, b/k, 0)$ 、 $(0, 0, c/l)$ となるから、

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

以下の2式は容易に導出できる

正方晶
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

立方晶
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

六方晶

a 軸をx軸に一致させ、 c 軸をz軸に一致させると、 $X = a/h$ 、 $Z = c/l$ であることが判る。あとは Y を求めればよい。

(「講義時間内演習」になる鴨…です。)

その他の結晶系

菱面体晶は、基本ベクトルを適切に変換することにより、六方晶として扱うことができる。テキスト参照。
(記憶する必要はありません)

三斜・単斜については、テキスト参照。
(ややこしいです。記憶する必要はありません)

基礎結晶学

1 結晶とは何か (単位胞／単位格子と基本構造)

2 対称性とブラベー格子

3 七つの結晶系、格子定数

4 二次元ブラベー格子

5 格子のスタッキング、典型的な結晶の形

6 ミラー指数その1：結晶における方向の記述

7 ミラー指数その2：六方晶におけるミラー指数

8 面間隔の求め方

9 格子欠陥（原子空孔と転位）・多結晶体

10 X線の発生法・特性X線について

11 ブラッグの条件と面の間隔

12 粉末X線回折による格子定数の求め方

13 (単結晶による解析)

14 ステレオ投影と極点図

15 まとめ

ここまで終了

到達目標

- ☆ 結晶を七つの結晶系に分類できる (14のブラベー格子についても理解する)
- ☆ 格子定数の記述ができ、与えられたミラー指数の面について、間隔を計算できる
- ☆ 種々の結晶について、粉末X線回折図に出現するピークの位置が計算できる