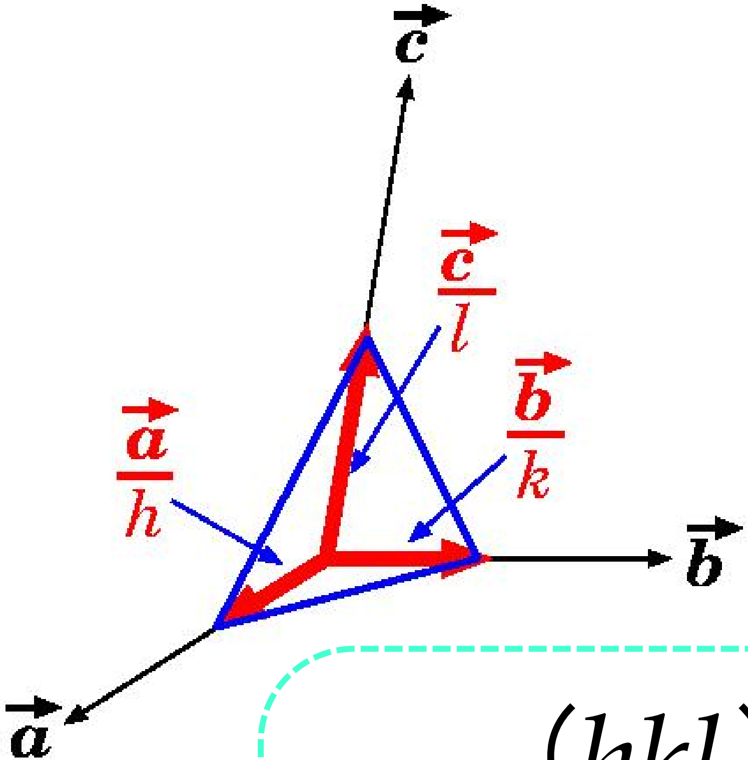
復習

$$hx + ky + lz = N$$

Nを変化させると、等間隔に並んだ一連の平行な面を表すことができる。



N=1 のとき、この面は単位格子を左図のように切っている

N=1 は原点に最も近い面

(hkl)　ミラー(Miller)指数

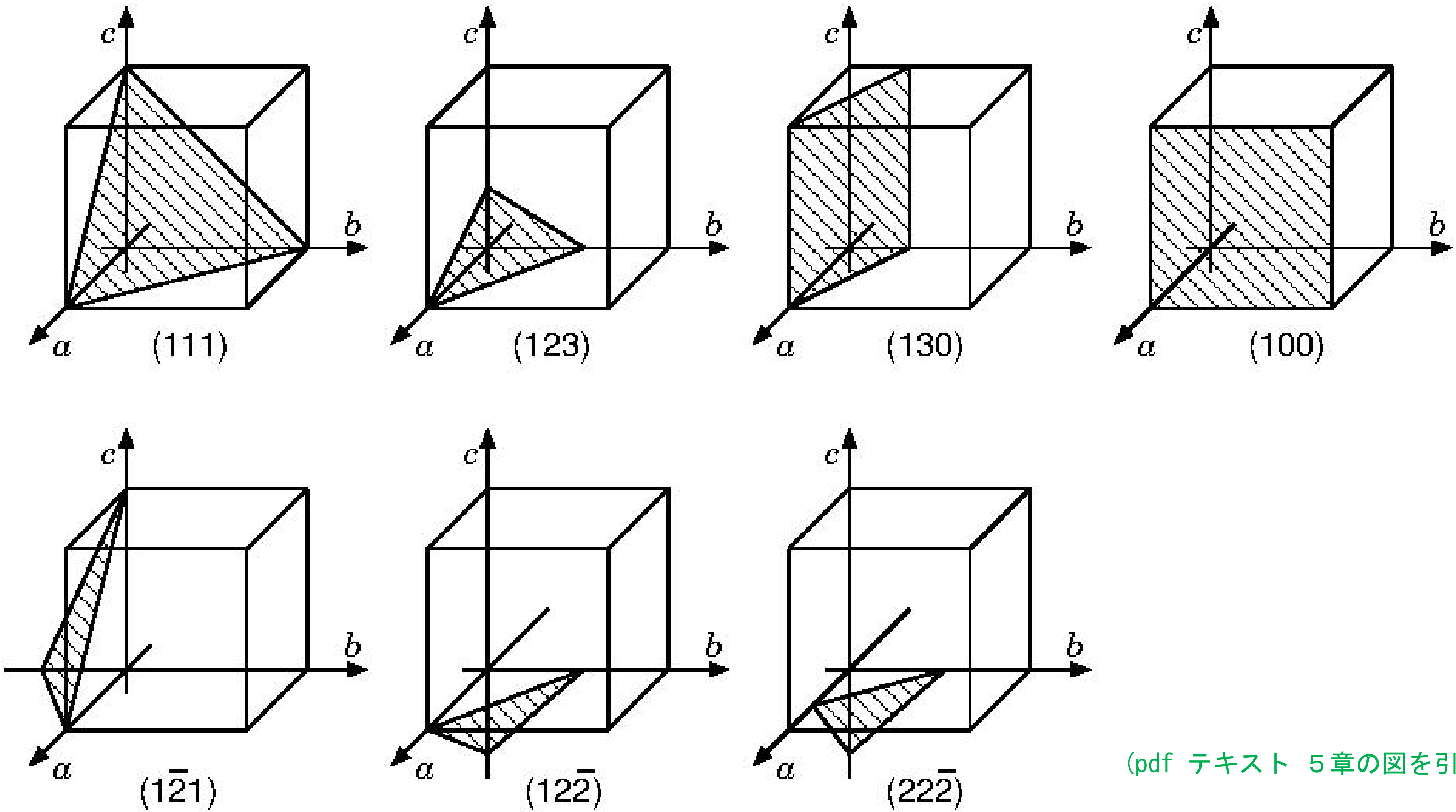
三角形部分だけでなく、無限に広がっている。

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)。

復習　いろいろな（hkl）面：立方晶の例

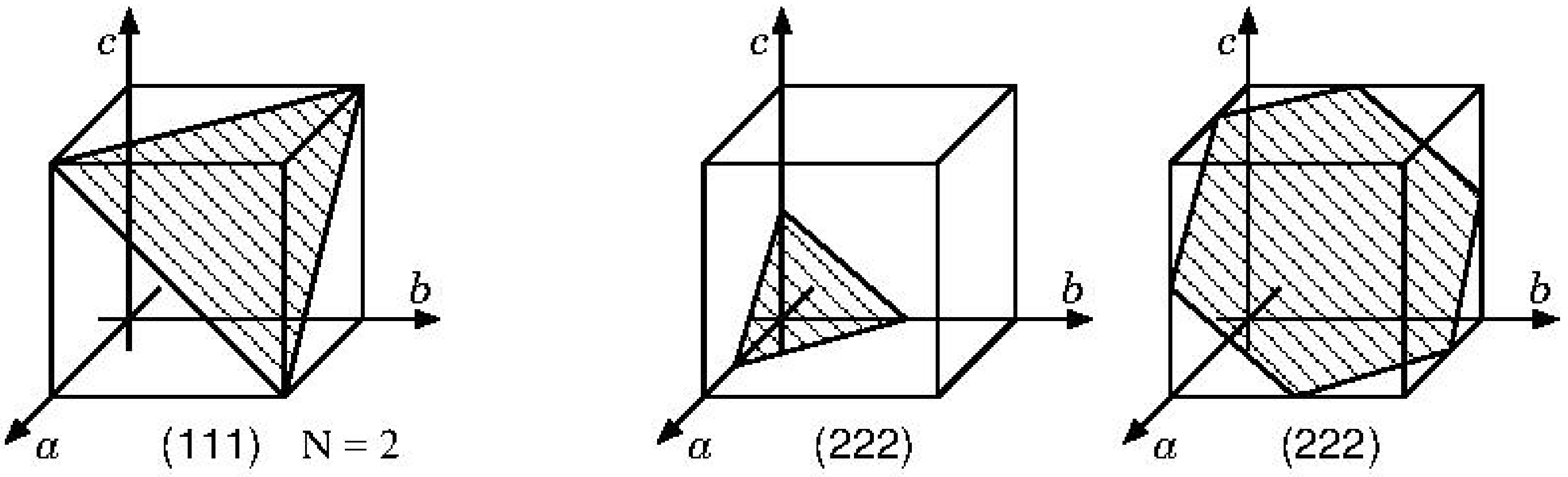
負の部分で軸を切るときは、マイナス符号ではなく、指数の上にバーを付ける



（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

復習　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。

ここから

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、$\langle uvw \rangle$

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？

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）

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

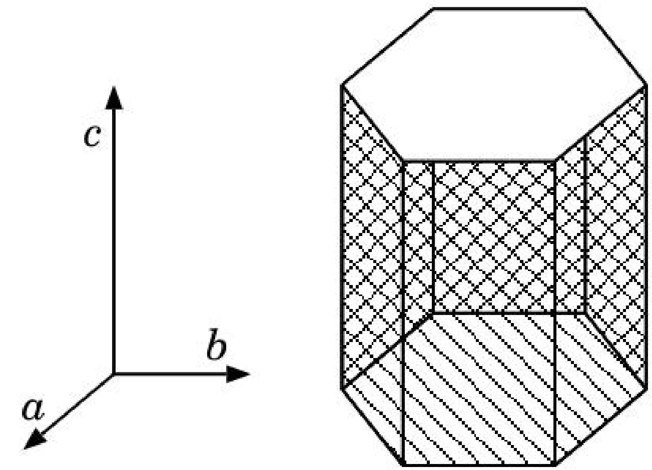
４．　面心立方構造をもつ単体金属（例：金、銀など）において、
原子が最も密に並んだ面をミラー指数で表示せよ。
また、原子を剛体球と見なし、その断面図を図示せよ。

５．　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) $(1\bar{1}0)$ $(\bar{1}00)$ $(0\bar{1}0)$ $(1\bar{1}0)$ 面は
等価であるが、数字の並びだけ見ても
等価であることが判りにくい。



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)($hk\boldsymbol{i}l$)で
表記する(次のスライド参照)。

上記の６個の面はそれぞれ、
$(10\bar{1}0)$ $(01\bar{1}0)$ $(\bar{1}100)$ $(10\bar{1}0)$ $(01\bar{1}0)$ $(1\bar{1}00)$

h, k, i にはつねに

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

の関係が成立するので、しばしば i を・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(p. 37–39)を読んでおいてください。

次週はここから

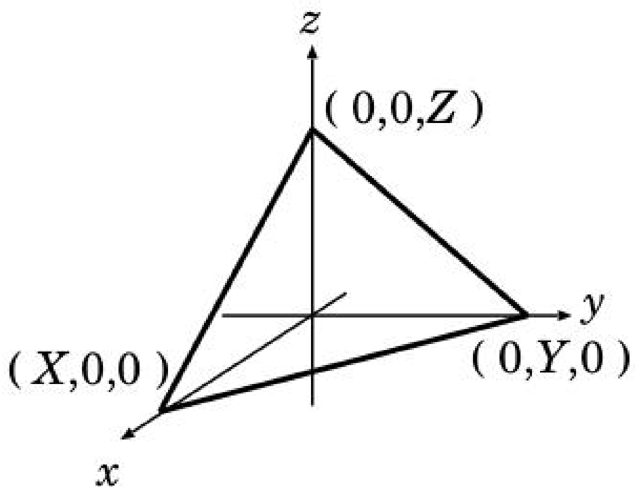
5/28 は次ページから

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

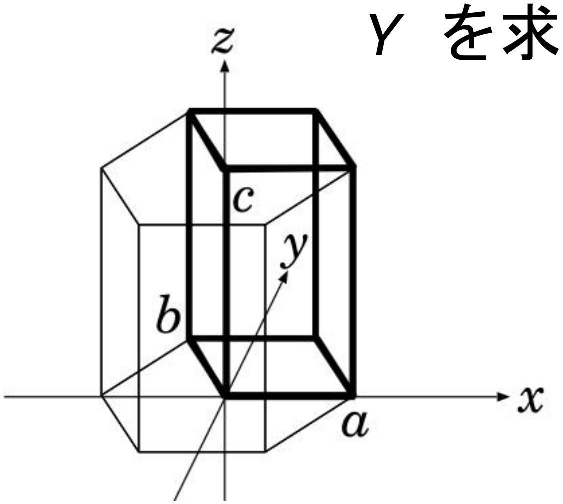
立方晶 $$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

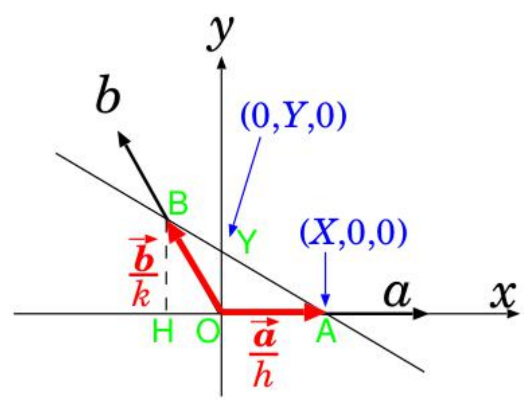
六方晶

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。





△YOA と△BHA は相似であり、△BHOの３辺の比は

１ ： ２ ： √3 であることから、$Y = \sqrt{3}a/(h+2k)$

よって 六方晶 $$\frac{1}{{d_{hkl}}^2} = \frac{4(h^2+hk+k^2)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

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

次回までに考えておく課題 (講義時間に演習として解く予定)

1) 立方格子において、ミラー指数$\{hkl\}$ 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、k、l は互いに異なる、
ゼロではない整数である)

2) 六方晶の面のミラー・ブラベー指数において、$h+k+i=0$であることを示せ。
高校数学のベクトルの問題です

3) 六方晶の(100)面と等価な面を、ミラー・ブラベー指数$(hkil)$で表記せよ。

4) 六方晶の(110)面と等価な面を、ミラー・ブラベー指数$(hkil)$で表記せよ。