

# 前回の講義スライド(公開版)で予告した 演習問題

## 問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)

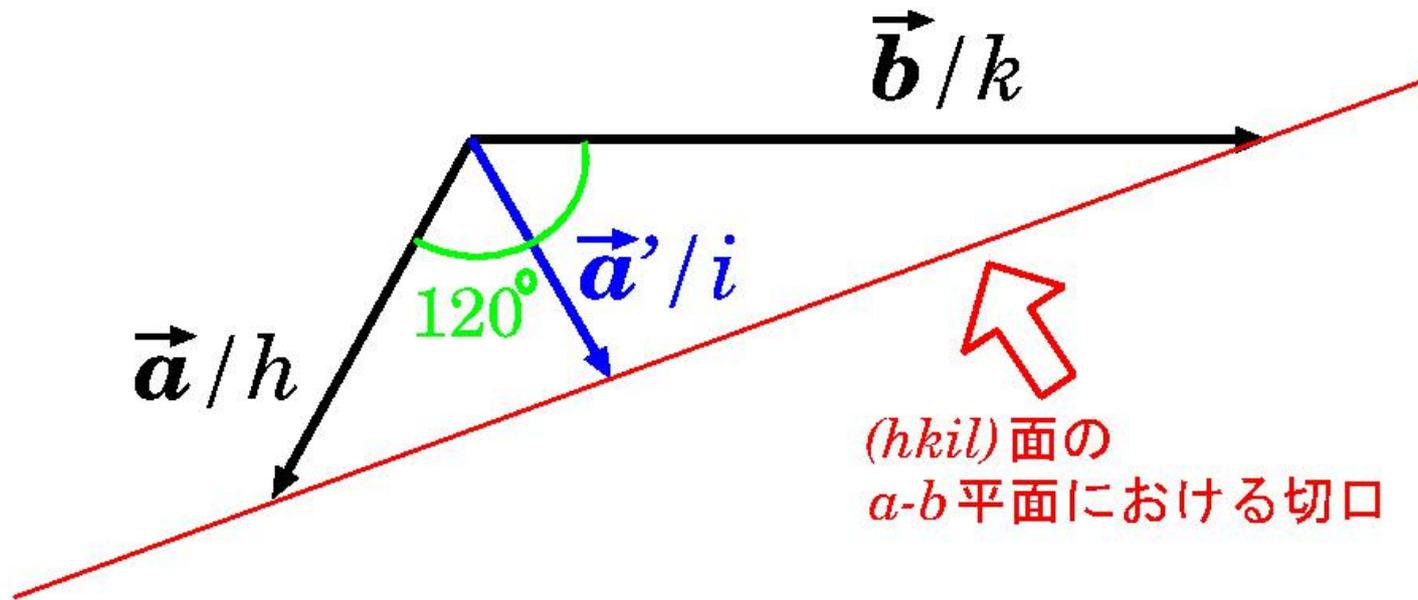
## 問2

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。

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。

( 問1・2の解答は略 )

**問3** 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。



$hkl$ 面と  $xy$ 平面の交線で考えれば良い。第4の基本ベクトルがこの線を切る点に相当するベクトルは  $\vec{a}'/i$  であるが、この点は  $\vec{a}/h$  と  $\vec{b}/k$  の先端を結んだ線上にある (この線を内分する点である)。よって、 $t$  をある実数とすると、

$$\vec{a}'/i = t\vec{a}/h + (1-t)\vec{b}/k$$

と書くことができる。ここに  $\vec{a}' = -(\vec{a} + \vec{b})$  を代入、 $\vec{a}$  と  $\vec{b}$  が線形独立であるから、各係数はゼロ。よって

$$\frac{1-t}{k} + \frac{1}{i} = 0 \quad \frac{t}{h} + \frac{1}{i} = 0.$$

これより  $t$  を消去して  $h+k+i=0$  を得る。

# 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

1～8は終了

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

## 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

# 金属表面を鏡面研磨



表面を酸で腐食(エッチング)して顕微鏡で観察

# 多結晶の組織

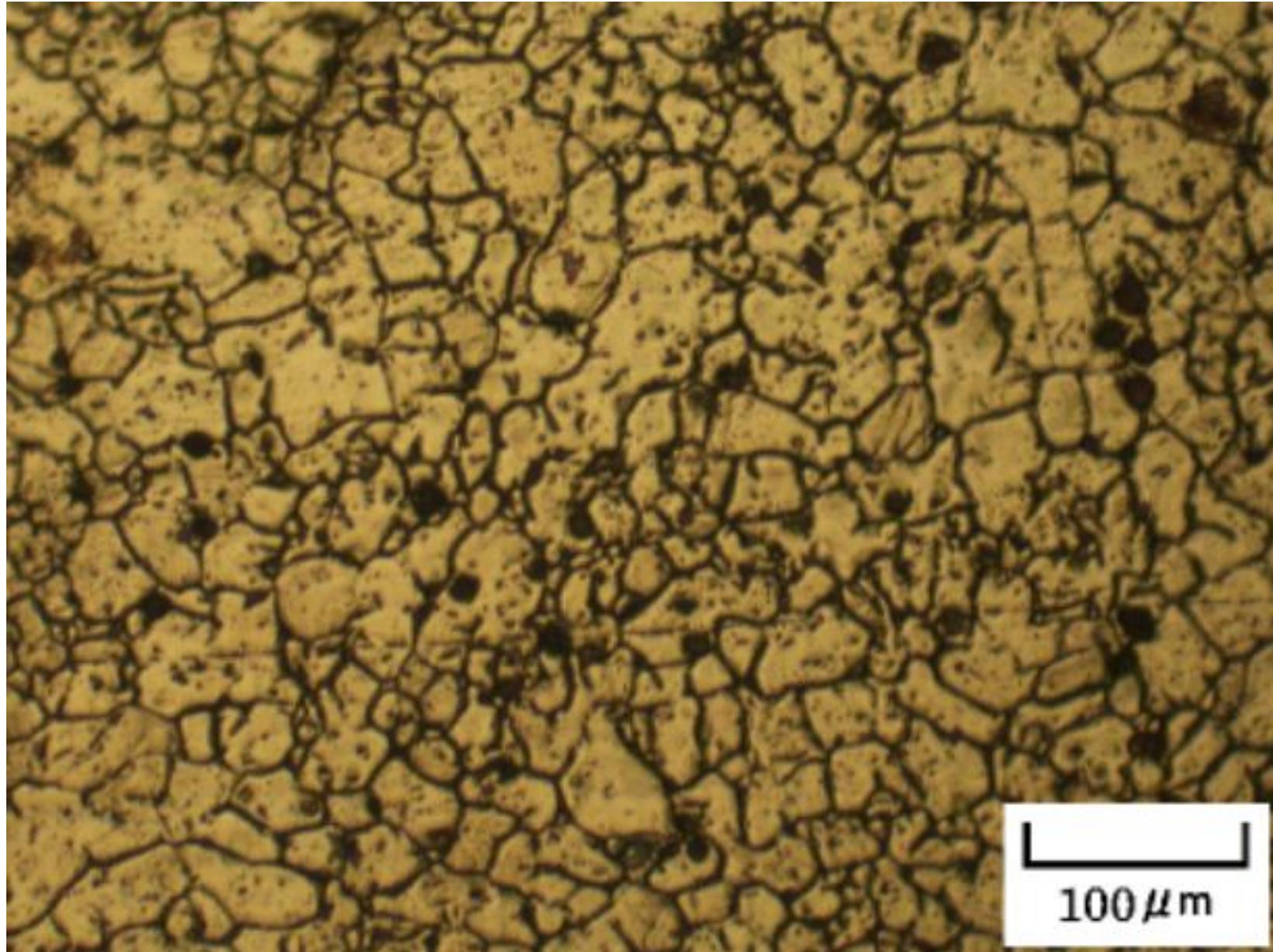


図1 真空中、900°Cで2時間焼きなましを行った鋼の組織

# 結晶格子欠陥のいろいろ

詳細は3年選択科目「金属材料」(前期)、  
「材料組織学」(後期)「材料強度物性」(後期)等で講述されます。

0次元の欠陥=点欠陥      **原子空孔** (Vacancy)  
「不純物原子」はここに分類されることもあります。

1次元の欠陥=線欠陥      **転位** (Dislocation)

2次元の欠陥=面欠陥      **積層欠陥**  
(Stacking **Fault**)

3次元の欠陥      積層欠陥四面体  
(Stacking Fault Tetrahedra)

# 結晶格子欠陥-(2)

絶対0度でない限り、原子空孔は必ず存在する

原子空孔1個の生成エンタルピーが  $E_f$  のとき、

$$C_v = e^{-\frac{E_f}{kT}}$$

転位の無い結晶は頑張れば作れる

Whisker = ひげ結晶 (厳密には1本だけ転位がある)

# 原子空孔の濃度 $C_v$ を導出

原子空孔 1 個を生成するのに必要なエンタルピー  $E_f$

原子空孔  $n$  個を生成するのに必要なエンタルピー  $nE_f$

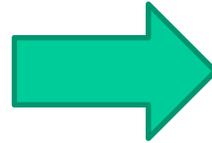
原子  $N$  個に空孔  $n$  個を導入した時のエントロピー変化  $\Delta S$

$$\Delta S = k \ln \frac{(N + n)!}{N! \cdot n!}$$

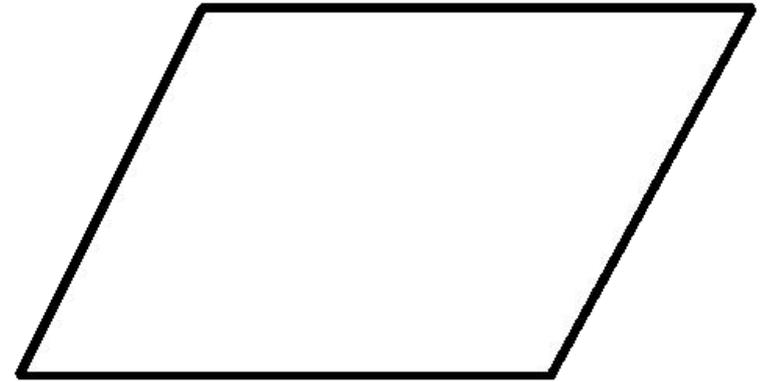
原子  $N$  個に空孔  $n$  個を導入した時の

ギブスエネルギーの変化  $\Delta G$  は？

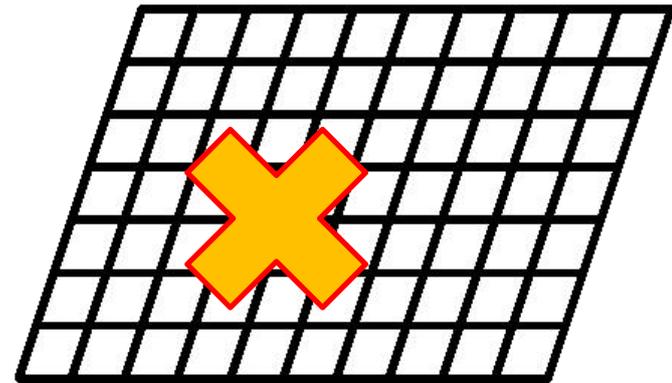
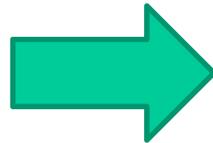
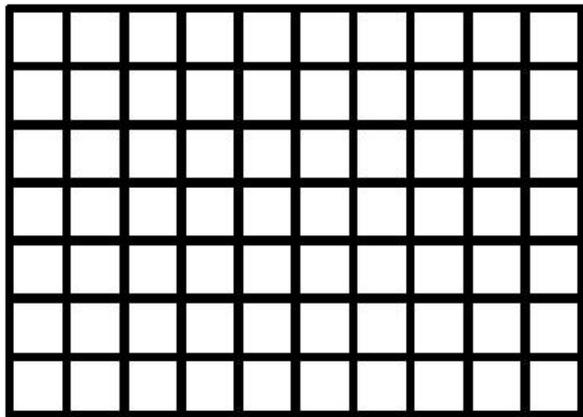
# 金属の変形機構



剪断応力による変形

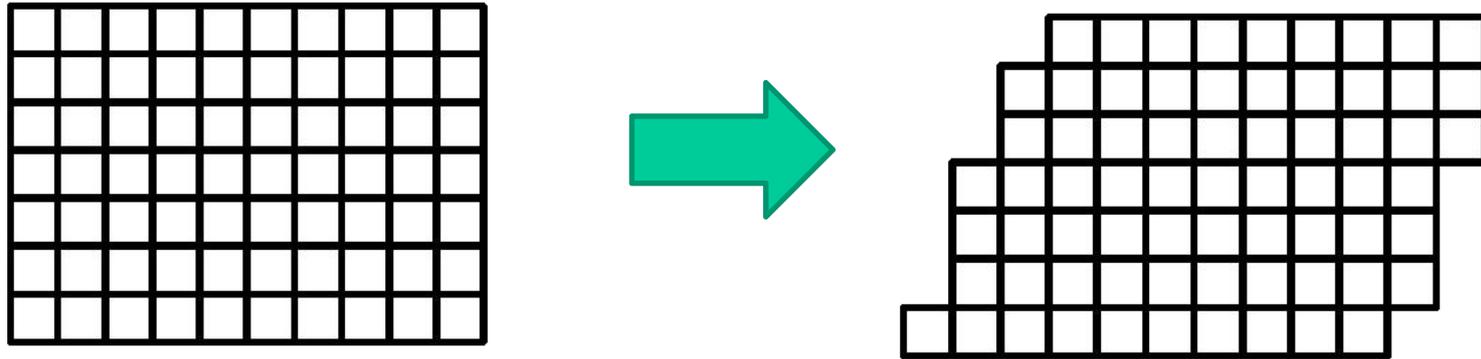


このとき、結晶格子は変形するか？

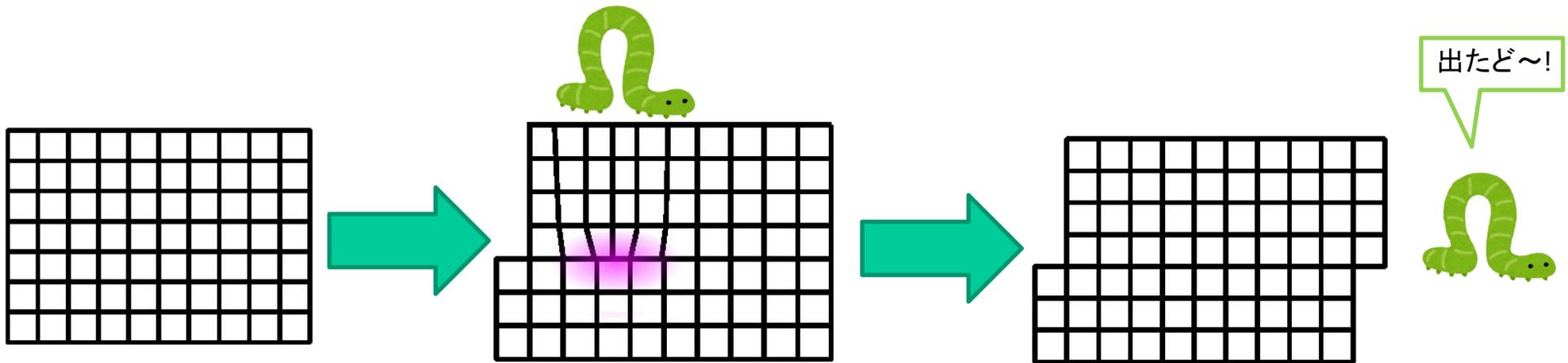


格子は変形しません！

# 金属の変形は**転位**の運動によって起こる



単位格子の形は変わらない。隣に来る原子がずれるだけ。  
この「ずれ」もすべての原子について同時に起こるわけではなく、  
絨毯のシワが移動するように変形が進行する



変形途中では、結晶の一部だけが変形し、格子の周期を乱している。  
これを**転位(てんい: dislocation)**という。転位には大別して2種類あり、  
この図のような物は「刃状転位」という。これとは別に「らせん転位」がある。