

固体化学 演習問題 No.1

- 次の構造の格子の型 (P , F , I , C etc) 原子座標を記せ。
(a) ダイヤモンド、(b) 黒鉛、(c) 閃亜鉛鉱 (ZnS)、(d) 蛍石 (CaF_2)
- 次の切片を持つ面のミラー指数はいくらか。それぞれの単位胞の長さで表してある。
(a) $1, 1/2, 1/2$ (b) $1/4, 1/2, 1/2$ (c) $1, \infty, 1/2$ (d) $\infty, 1, 2/5$ (e) $-1/2, -1/2, 1$
- 結晶格子の基本並進ベクトルを a , b , c とするとき、逆格子の基本並進ベクトル、 a^* , b^* , c^* はどのように表されるか。
- 逆格子ベクトル $H_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$ の方向は (hkl) 面に垂直であることを証明せよ。
- 逆格子ベクトル $H_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$ の大きさ $|H_{hkl}|$ は $2\pi/d_{hkl}$ に等しいことを証明せよ。
- 六方晶系における格子定数と面間距離との関係を表す式を導け。
- 剛球体をそれぞれ単純立方、体心立方、面心立方格子に並べるときの充填率 (球の体積 / 単胞の体積) はいくらか。
- 理想的な六方最密充填構造の軸比 (c/a) が $(8/3)^{1/2} = 1.633$ であることを示せ。
- $CsCl$ 結晶について、 (100) , (110) , (111) , (200) の指数を持つ反射の回折強度を求めよ。ただし、 $(f_{Cl} + f_{Cs+})^2 = A$, $(f_{Cl} - f_{Cs+})^2 = B$ とせよ。
- ダイヤモンド構造について次の問に答えよ。
(a) Z はいくらか。
(b) この構造の構造因子を求めよ。
(c) 結晶密度を 3.51 g cm^{-3} であるとし、波長 0.712 \AA の X 線を用いたとき、最初の 6 個の反射が観測される角度を計算せよ。
- $KMgF_3$ 結晶の立方単位胞中の原子座標がそれぞれ $K; (0, 0, 0)$, $Mg; (1/2, 1/2, 1/2)$, $F; (0, 1/2, 1/2); (1/2, 0, 1/2); (1/2, 1/2, 0)$ である。
(a) 単位胞の全ての原子位置を示す単位胞を描け。
(b) この立方単位胞はどの型の格子に属するか。
(c) Mg^{2+} , K^+ , F^- イオンの配位数を記せ。
- 立方晶系をなす Ag の粉末図形に $2\theta = 38.2, 44.4, 64.6, 77.6, 81.8, 98.4$ の位置に反射が観察された。これらの反射に対する指数 (hkl) はいくらか。ただし、用いた X 線の波長は $\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$ 、 Ag の格子定数は $a = 4.086 \text{ \AA}$ である。
ヒント; 立方晶系では $h^2 + k^2 + l^2 = a^2/d_{hkl}^2$ の関係式より、左辺の値は整数になる。
- 金属ポロニウムは単純立方格子をもち、その格子定数 3.345 \AA である。 (110) , (111) , (210) , (211) 面の面間隔を計算せよ。
- MgO 結晶は $NaCl$ 構造を持ち、その格子定数は 4.20 \AA である。 MgO 結晶の密度を計算せよ。
- $CsCl$ の格子定数は 4.121 \AA である。次の問に答えよ。
(a) 密度を計算せよ。
(b) 単位胞の対角線に沿ってイオンが互いに接触しているものとして Cs^+ のイオン半径はいくらか。ただし、 Cl^- のイオン半径は 1.81 \AA である。
- Mo は体心立方格子を持ち、その密度は 10.3 g cm^{-3} である。 $Mo-Mo$ 原子間距離を計算せよ。