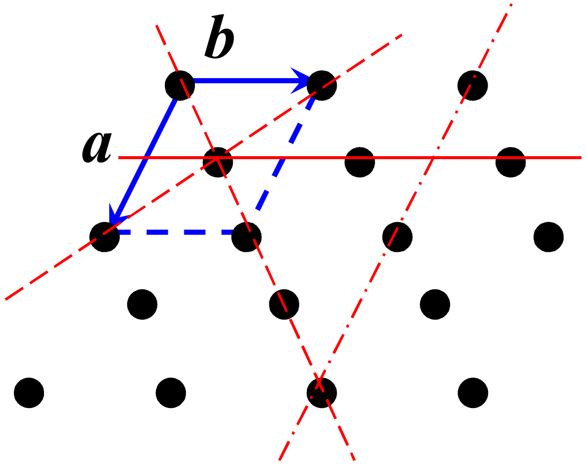
格子点が作る面

面心格子の場合



種々の格子面を見つけることができる

これらをどのようにして区別するのか？

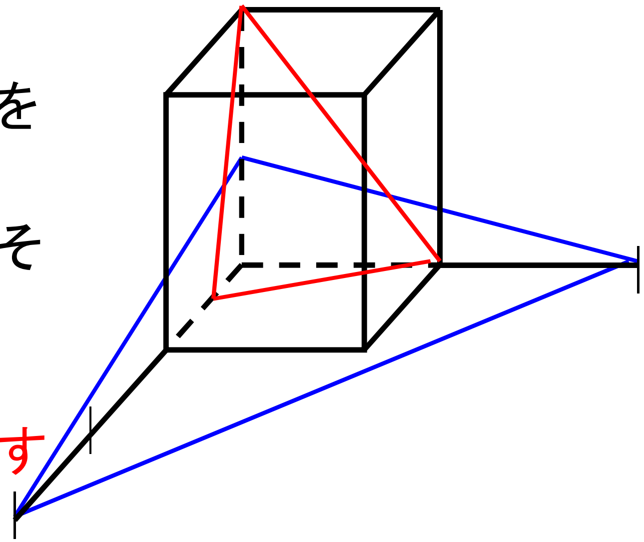
ミラー指数（Miller Index）

(*hkl***)**：3つの整数で表現

ミラー指数の求め方

1. 面が結晶軸a、b、cと交わる点を格子定数を単位として求める
2. 3の数の逆数をそれぞれとり、それと同じ比をもつ3つの整数の組に変換する

注意：切片が∞のときは1/∞=0とする

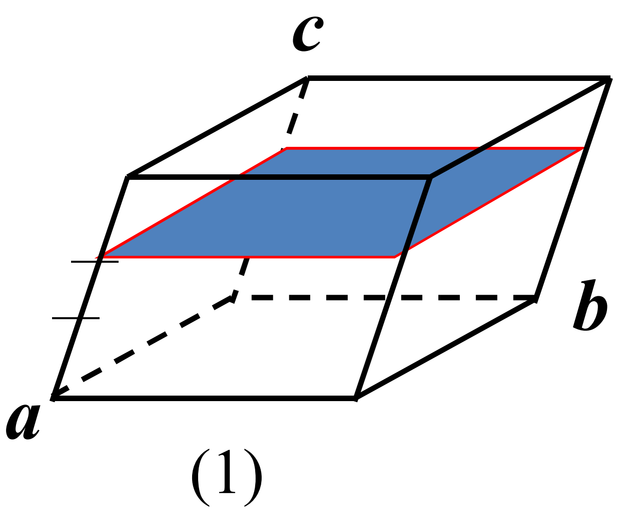


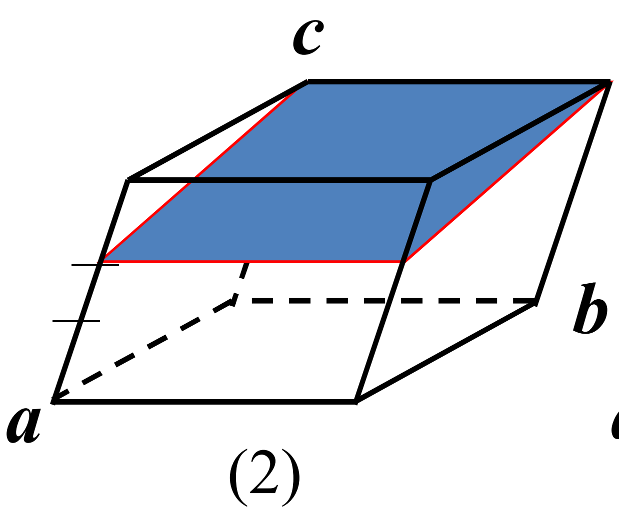
a	b	c
1/2	1	1
↓(逆数)		
2	1	1
↓(1倍)		
(2	1	1)

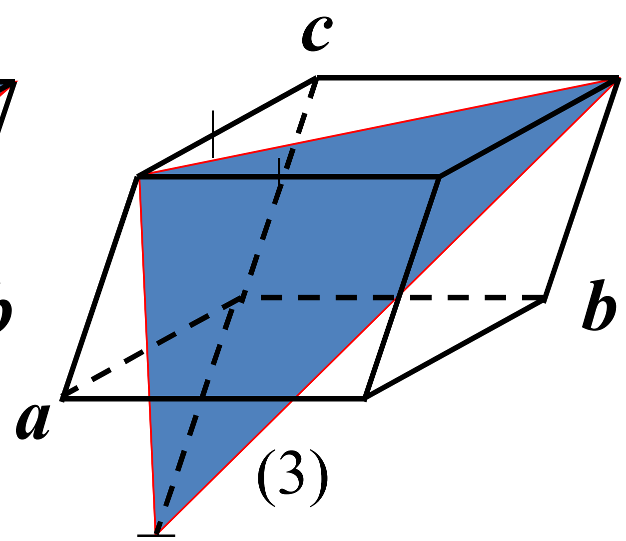
a	b	c
3	2	1/2
↓(逆数)		
1/3	1/2	2
↓(6倍)		
(2	3	12)

演習

問　次の面のミラー指数を求めよ。







解答例

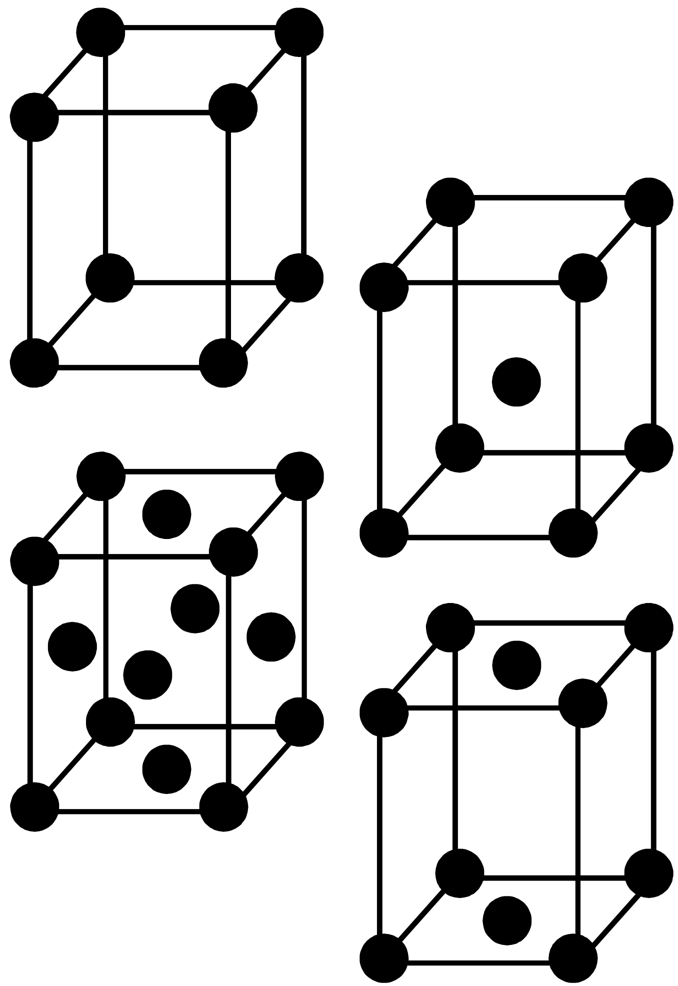
(1)　(003)　　　(2)　(103)　　　(3)　$(22\bar{1})$

注意
負の切片はバーをつける

ブラベ(Bravais)格子

空間的に許される格子の型　－　ベラベ格子

ベラベ格子の基本形は4種類あるが、
晶系を考慮すると全部で14種類ある



P格子:
単純格子(primitive)

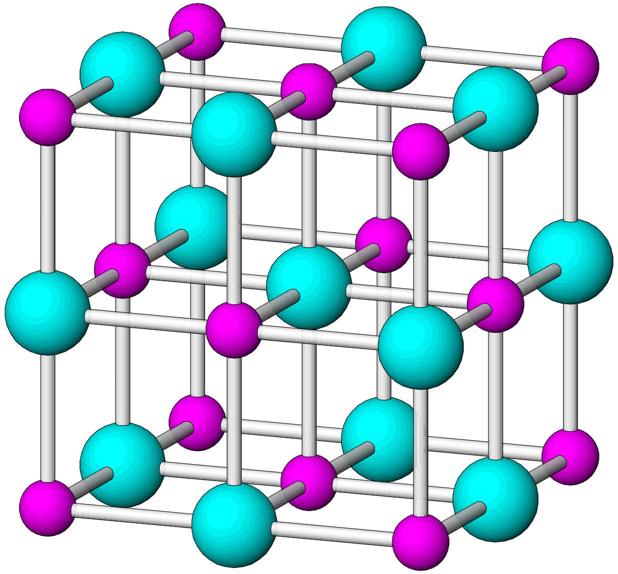
I格子:
体心格子(body-centered)

F格子:
面心格子(face-centered)

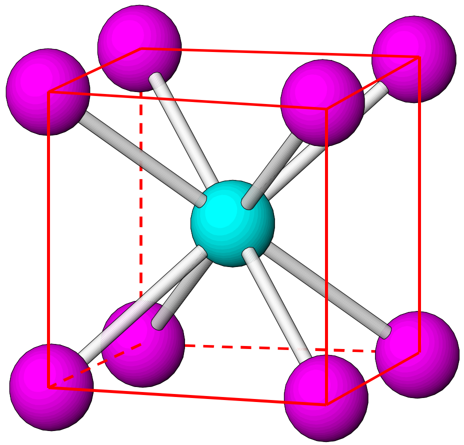
C格子:
底面心格子(base-centered)

演習

問　次の結晶のブラベ格子は何か



(1)　NaCl



(2)　CsCl

解答例

(1)　F格子

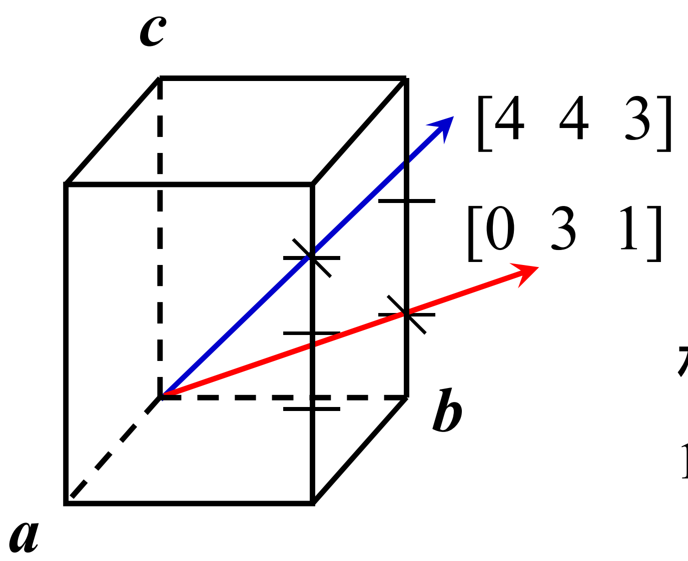
(2)　P

格子点が作る面と方向

格子点の方向:

原点から目的の格子点までのベクトルの成分を[ ]に入れて示す。ただし、ベクトルの成分は、

結晶軸方向の成分同じ比をもつ最小の整数の組



格子点の方向の特徴:

1. 全ての晶系で、
   [100]⇔a軸、[010]⇔b軸、[001]⇔c軸
2. 立方、正方、斜方晶系で、
   [hk0]//(00l)面、[h0l]//(0k0)面、[0kl]//(h00)面
3. 立方晶系では、必ず
   [hkl]⊥(hkl)面

原子座標

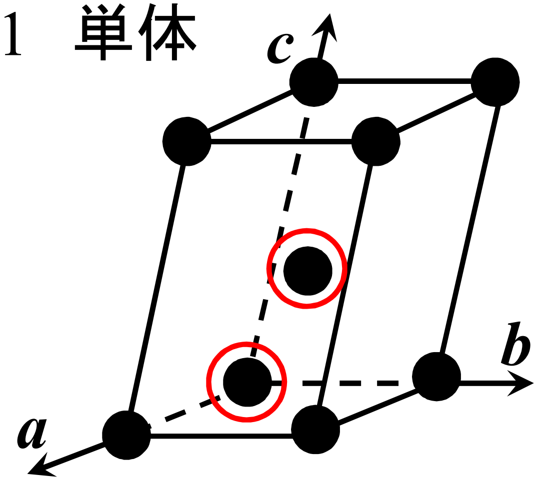
原子座標（atomic coordinate）:

a、b、cを単位として

$0 \leqq (x, y, z) < 1$;　基本的に0以上で1未満

Z値　ー　単位胞中の化学式の数

例1　単体



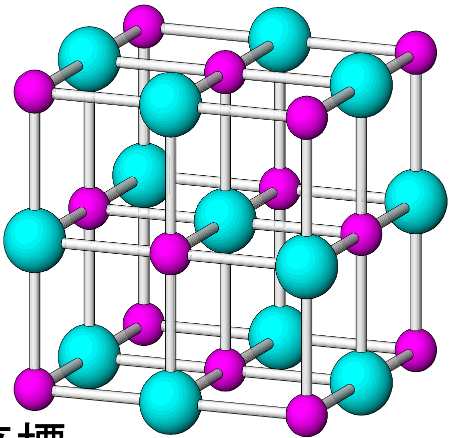
原子座標:

(0,0,0)

(1/2,1/2,1/2)

Z=2

例2　NaCl



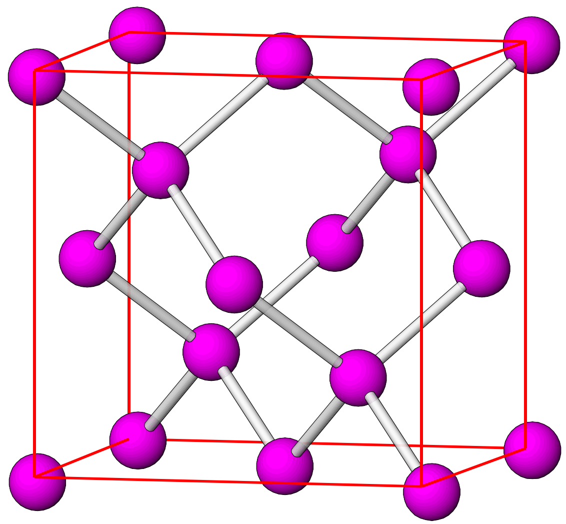
原子座標:

Na:	Cl:
(0,0,0)	(1/2,0,0)
(1/2,1/2,0)	(0,1/2,0)
(1/2,0,1/2)	(0,0,1/2)
(0,1/2,1/2)	(1/2,1/2,1/2)

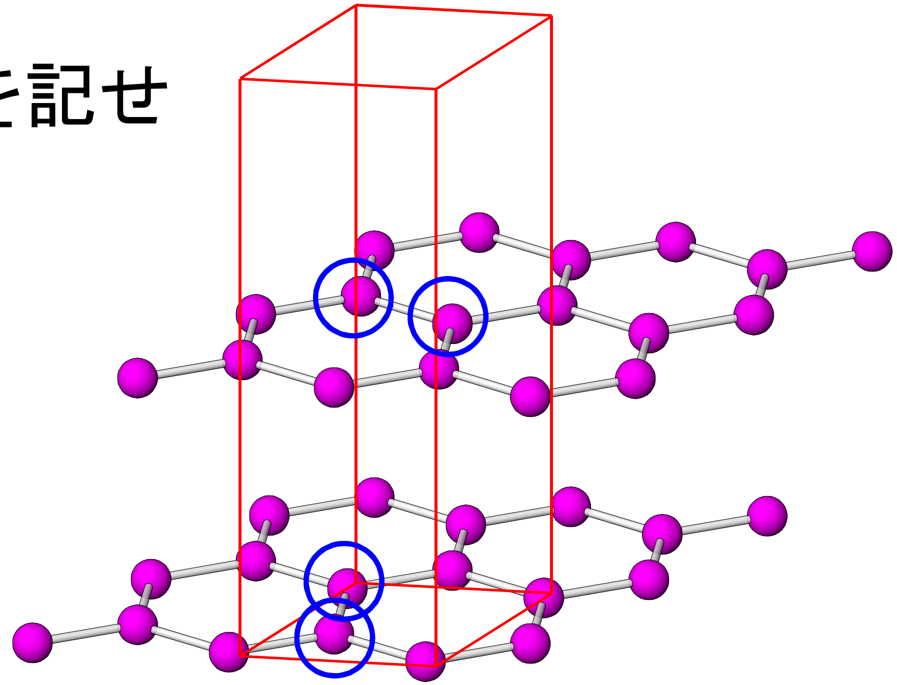
Z=4

演習

問　次の結晶原子座標を記せ



(1)　ダイヤモンド



(2)　グラファイト

解答例

(1) (0,0,0),(1/2,1/2,0),
(1/2,0,1/2),(0,1/2,1/2),
(1/4,1/4,1/4),(3/4,3/4,1/4),
(1/4,3/4,3/4),(3/4,1/4,3/4)
Z=8

(2) (0,0,0),(2/3,1/3,0),
(0,0,1/2),(1/3,2/3,1/2)
Z=4

演習

問　NaCl結晶の格子定数をa(Å)、Naの原子量をM_{Na}、Clの原子量をM_{Cl}、アボガドロ数をN_Aとすると、NaCl結晶の密度ρ(gcm^{-3})はどんな式で表すことができるか。

解答例

ヒント

密度ρ

=(質量(g))/(体積(cm^3))

結晶によるX線の回折

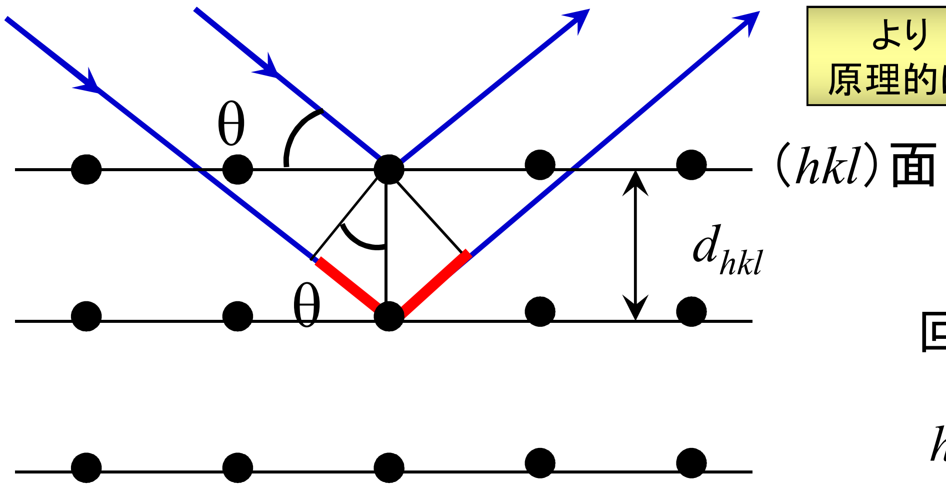
回折（diffraction）:

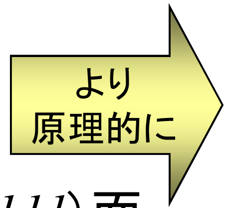
X線（X-ray、電磁波）が多くの散乱中心（原子、より厳密には電子）により散乱されて、その散乱されたX線が干渉して新たなX線を放出すること

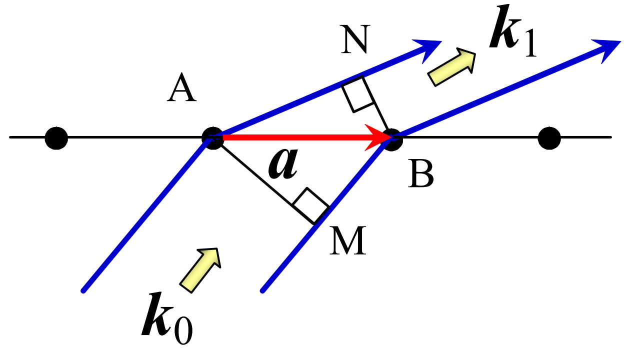
$\boldsymbol{a}$: 基本並進ベクトル

$\boldsymbol{k}$: 波数ベクトル（大きさ、2π/λ）

ブラッグ（Bragg）の法則







$$\boxed{2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda}$$

nは整数、通常は1
λはX線の波長

回折波が強め合う条件:

$$h\lambda = |\overrightarrow{AN}| - |\overrightarrow{BM}| = \boldsymbol{a}\cdot\frac{\boldsymbol{k}_1\lambda}{2\pi} - \boldsymbol{a}\cdot\frac{\boldsymbol{k}_0\lambda}{2\pi}$$

$$= \frac{\lambda}{2\pi}(\boldsymbol{a}\cdot\Delta\boldsymbol{k}) \quad (\because \Delta\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_0)$$

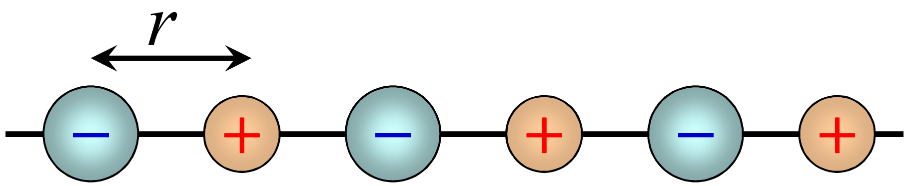
$$\therefore \boldsymbol{a}\cdot\Delta\boldsymbol{k} = 2\pi h$$

$\Delta\boldsymbol{k}$: 散乱波数ベクトル

3次元に拡張

演習

問　下のように1価陽イオンと1価陰イオンが交互に距離rの間隔で並んだ1次元無限鎖結晶がある。波長λのX線がこの鎖に垂直に入射するとき、鎖に対してθの角度でX線が回折する条件を求めよ。



解答例

ラウエの条件

ブラッグの条件の三次元への一般化

$\Delta k \cdot a = 2\pi h$
$\Delta k \cdot b = 2\pi k$
$\Delta k \cdot c = 2\pi l$

ラウエの条件

$$\Delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{x} = \frac{2\pi}{a} h$$

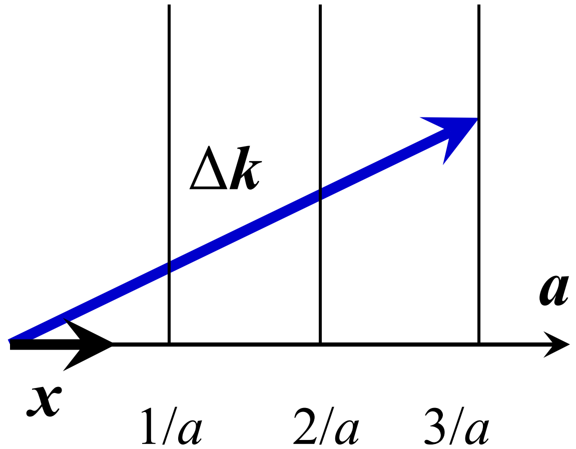
$$\Delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{y} = \frac{2\pi}{b} k$$

$$\Delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{z} = \frac{2\pi}{c} l$$

ただし、

$$\boldsymbol{a} = a\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{b} = b\boldsymbol{y},\ \boldsymbol{c} = c\boldsymbol{z}$$

$$(\because\ \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} : unit\ vector)$$



意味：
$\Delta \boldsymbol{k}$の先端が$\boldsymbol{a}$軸に垂直で間隔が$1/a$である平面群の内のどれかに乗っている

3次元へ拡張、

3つの平面が交わる点の集合ができる

逆格子

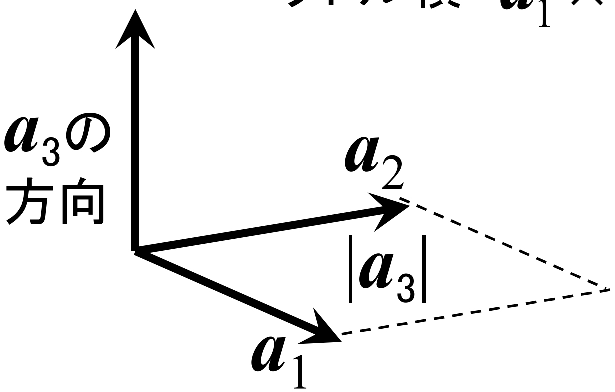
逆格子（reciprocal lattice）

逆格子の基本並進ベクトルの定義

$$\boldsymbol{a}^* = 2\pi \frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{(\boldsymbol{abc})},\ \boldsymbol{b}^* = 2\pi \frac{\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}}{(\boldsymbol{abc})},\ \boldsymbol{c}^* = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}}{(\boldsymbol{abc})}$$

ただし、$(\boldsymbol{abc})$はベクトル3重積で、単位胞の体積に等しい

ベクトル積 $\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{a}_3$



$\boldsymbol{a}_3$の方向は$\boldsymbol{a}_1$と$\boldsymbol{a}_2$にともに垂直（右ネジの方向）

$\boldsymbol{a}_3$の大きさは$\boldsymbol{a}_1$と$\boldsymbol{a}_2$がつくる平行四辺形の面積

定義より、

$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}^*=2\pi$	$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}^*=0$	$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}^*=0$
$\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}^*=0$	$\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b}^*=2\pi$	$\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c}^*=0$
$\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{a}^*=0$	$\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{b}^*=0$	$\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c}^*=2\pi$

逆格子ベクトルH_{hkl}（r^*）

a^*、b^*、c^*で作られる空間において

$H_{hkl}=ha^*+kb^*+lc^*$

で示されるベクトル