

問題 1：単純立方格子において、次のミラー指数で与えられる面を図示せよ。

$$(1\ 1\ 0) \quad (2\ 1\ 1) \quad (4\ 2\ 2) \quad (2\ 1\ 0) \quad (1\ 1\ 1)$$

問題 2：半径 a の原子が Fig. 2-1 のように層状に重なっている。面心立方格子 (fcc) は A-B-C-A-B-C... のように重なり、六方最密構造の格子は A-B-A-B-A-B... のように重なる。

第 1 層 (A)、第 2 層 (B)、第 3 層 (C) 中の原子の中心を通る平面をそれぞれ A 平面、B 平面、C 平面と定義する。

- 1) 面心立方格子、六方最密構造の慣用の単位胞を並べ、その中に A 平面、B 平面、C 平面を対応させ、分かるように図示せよ。また A 平面、B 平面の面間隔を a で表せ。
- 2) 面心立方格子、六方最密構造の充填率をそれぞれ求めよ。

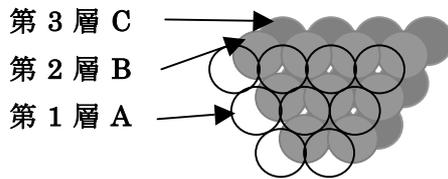


Fig.2-1

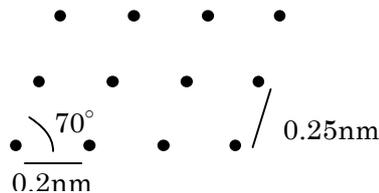
問題 3：剛球が面心立方から体心立方構造に変化するとき、基本単位格子の体積は何倍になるかを求めなさい。最近接の剛球は接しているものとする。

問題 4：ファンデルワース力によって結合した 2 つの原子を考える。ポテンシャルエネルギー $u(r)$ が 2 つの原子間距離 r の関数として $u(r) = \frac{A}{r^m} - \frac{B}{r^n}$ と与えられる場合について以下の問いにこたえよ。ただし $m > n$ とする。

- (a) 縦軸を $u(r)$ 、横軸を r としたグラフを定性的にスケッチせよ。
- (b) $u(r)$ が最小になる距離 r_0 を A, B, m, n を用いて表せ。
- (c) 二つの原子を引き離れたところ、ある距離 r_1 以上では引き離すために必要な力が減少し、結果として化学結合が完全に切れた。この r_1 を A, B, m, n を用いて見積もれ。

問題 5

下図に示す 2 次元ブラベ格子に対応した逆格子を図示せよ。逆格子ベクトルとその長さ、および逆格子ベクトル同士のなす角度を図中に示すこと。また、逆格子のウィグナーサイトセル (第 1 ブリリュアンゾーン) も示せ。



問題 6：体心立方格子の実空間(実格子)における基本単位ベクトルを

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{a}{2}\right)(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}), \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{a}{2}\right)(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}), \quad \vec{a}_3 = \left(\frac{a}{2}\right)(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

とした場合を考える。但し、 a は格子定数、 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ は x, y, z 方向の長さが 1 の単位ベクトルである。

(a) 実格子を図示し、 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ を示しなさい。

(b) 逆格子空間における単位基本ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ を $a, \pi, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ で表しなさい。また、逆格子を図示し $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ を示しなさい。

問題 7：面心立方格子の実空間(実格子)における基本単位ベクトルを

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{a}{2}\right)(\hat{y} + \hat{z}), \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{a}{2}\right)(\hat{x} + \hat{z}), \quad \vec{a}_3 = \left(\frac{a}{2}\right)(\hat{x} + \hat{y})$$

とした場合を考える。但し、 a は格子定数、 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ は x, y, z 方向の長さが1の単位ベクトルである。

(a) 実格子を図示し、 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ を示しなさい。

(b) 逆格子空間における単位基本ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ を $a, \pi, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ で表しなさい。また、逆格子を図示し $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ を示しなさい。

問題 8：六方ブラベー格子の基本単位ベクトルを

$$\vec{a}_1 = a\hat{x}, \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}, \quad \vec{a}_3 = c\hat{z}$$

とする。逆格子空間における単位基本ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ を $a, \pi, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ で表しなさい。さらに、この逆格子は実格子を z 軸の周りに 30° 回転させた六方格子であることを示しなさい。

問題 9：結晶中の hkl 面を考える。

(a) 逆格子ベクトル $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ は hkl 面に対して垂直であることを証明せよ。

(b) 実格子空間で格子点を含む二つの面の感覚 $d(hkl)$ は $d(hkl) = 2\pi/|\vec{G}|$ で与えられることを証明せよ。

(c) 正方晶系、立方晶系、斜方晶系では、 (hkl) 面の相隣り合う2面間の距離 d が $d^2 = 1/(h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2)$ で与えられることを示しなさい。但し、 a, b, c は結晶の軸方向の長さである。

(d) $\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ が実格子における基本単位胞の体積 V であり、 $\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$ が逆格子における基本単位胞の体積 V' であることを示し、 $V' = (2\pi)^3/V$ の関係があることを示せ。

問題 10：慣用の格子定数 a の体心立方格子を、単位構造(基底)のある格子定数 a の単純立方格子とみなした場合の構造因子を求めなさい。格子定数が a の単純立方格子の逆格子は、一辺 $2\pi/a$ の単純立方格子である。ここで構造因子が0となる逆格子点を白丸、0とならない逆格子点を黒丸として、この逆格子を図示せよ。このとき黒丸が一辺 $4\pi/a$ の体心立方格子となっていることを確認せよ。

問題 11：慣用の格子定数 a の面心立方格子を、単位構造(基底)のある格子定数 a の単純立方格子とみなした場合の構造因子を求めなさい。

問題 12：ダイヤモンド構造の構造因子を、次の2つの方法でそれぞれ求めよ。

(i) 単位構造のある面心立方構造とした場合

(ii) 単位構造のある単純立方構造とした場合

問題 13：面心立方構造を有するアルミニウム粉末の x 線回折実験を Fig. 13-1 に示す構成で x 線の波長 0.154nm を用

いて行ったところ、回折角度が $\theta=19.48^\circ$, 22.64° , 33.00° , 39.68° , 41.83° , 50.35° , 57.05° , 59.42° で強い信号を検出器で得た。アルミニウムの慣用の格子定数（単純立方とした一辺の長さ）を求めよ。また、上記のそれぞれの角度への回折に寄与したミラー面のミラー指数を求めよ。ここでは{100}のようにそれぞれの角度に対する面をファミリーで記すこと。(100), (010), (001)といった区別は本問題の範囲ではできない。それぞれの角度に対するミラー面を決定した根拠を簡単に記すこと。

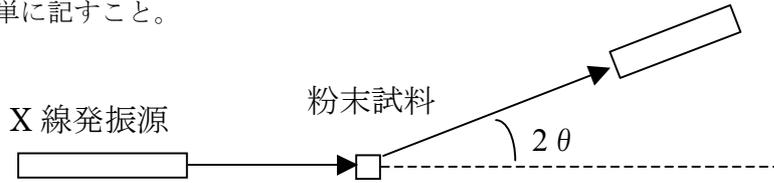


Fig. 13-1

問題 14：2種類(A, B)の単一の元素から構成される立方型の結晶を粉末法のX線解析により解析した。実験は Fig. 14-1 の構成で行い、用いたX線の波長は 0.1542 nm であった。Fig. 14-2 がフィルムに得られた回折像である。A と B それぞれの結晶構造を決定し、格子定数を求め、その情報から A と B を構成する元素の種類を推測せよ。角度 2θ の定義は講義ノートや図のとおり。[回答例：結晶 D はダイヤモンド構造で格子定数（立方体の一辺）は 0.532 nm 。元素の種類は炭素(C)。ただし、その結論に至った根拠をしっかりと示すこと。]

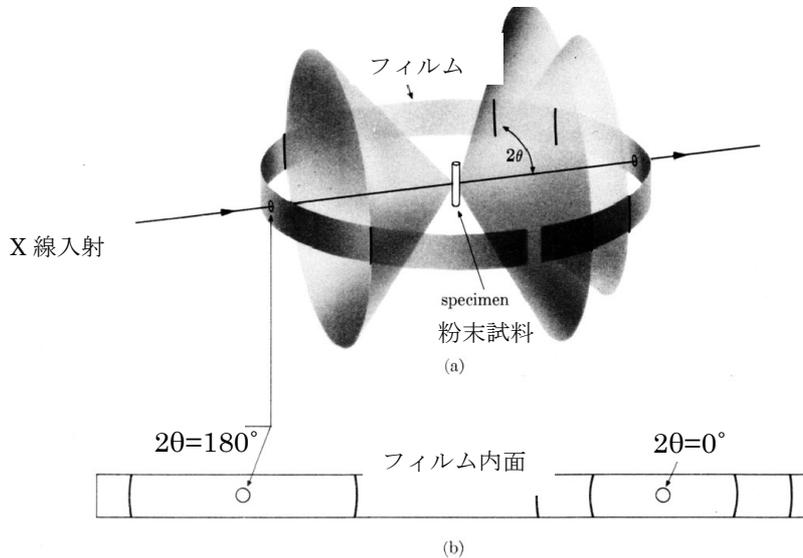


Fig. 14-1 粉末法による結晶構造解析の構成

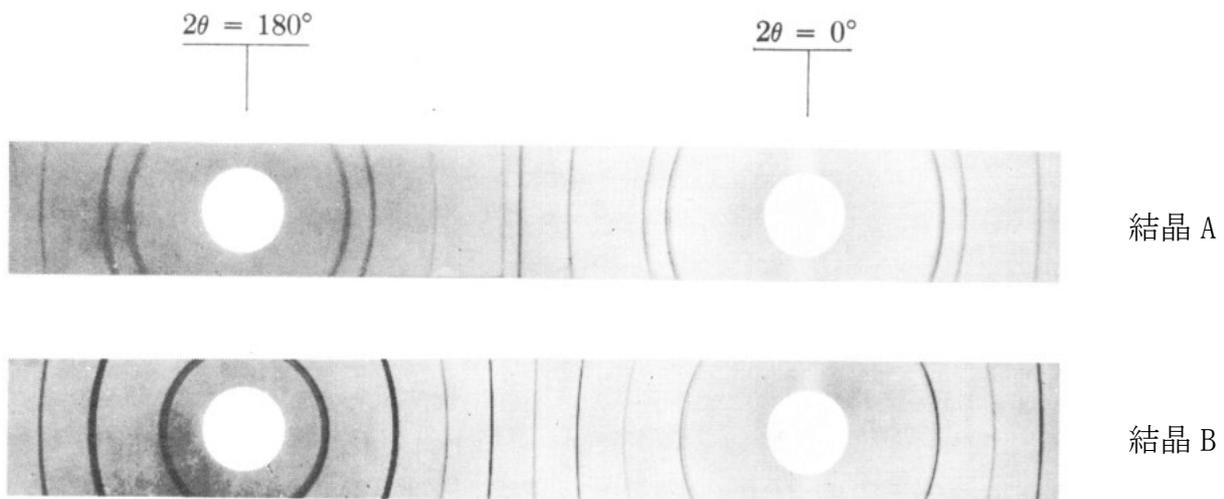


Fig. 14-2 結晶 A と B から得られた、フィルム内面に写った回折像

問題 15：3つの粉末試料 A,B,C の結晶構造をデバイ・シェラー・カメラで調べた (Fig. 15-1)。この3つの試料は全て単原子立方構造であり、1つは体心立方構造、1つは面心立方構造、もう1つはダイヤモンド構造をとることが分かっている。各試料において最初の4つの回折環の近似的な位置は Table 15-1 のようになった。

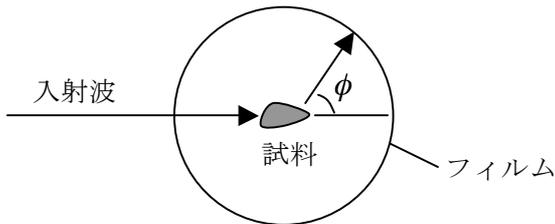


Fig. 15-1

Table 15-1 最初の4つの φ の値

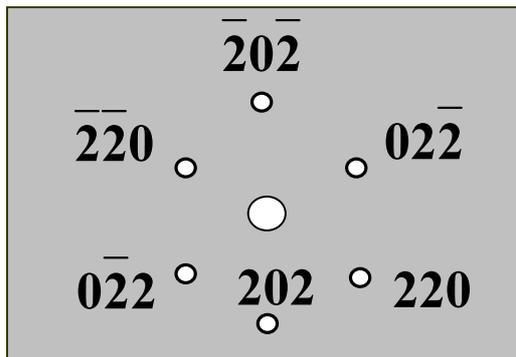
A	B	C
42.2°	28.8°	42.8°
49.2	41.0	73.2
72.0	50.8	89.0
87.3	59.6	115.0

- (a) A,B,C の結晶構造を決定せよ。
- (b) 入射 X 線の波長は 1.5 \AA である。A,B,C の慣用立方単位格子の一辺の長さを求めよ。
- (c) もしダイヤモンド構造の試料が、一辺の長さの等しい立方単位格子のセン亜鉛構造の場合、最初の4つの回折環は何度の角度で生じるか。

問題 16：シリコンウエハーの(100)面上に金を蒸着し、 500°C に熱してからゆっくりと冷やした試料を電子線顕微鏡で観察した。面に垂直に電子線を照射して得られた電子顕微鏡写真を Fig. 16-1 に示す。黒いところが金で、白っぽいところがシリコンウエハーのようである。その確認を行うために、Fig. 16-1 の A の部分、B の部分、C の部分のそれぞれに面に垂直方向から電子線を照射し、試料の後方に位置する面に平行なスクリーン上に回折像をうつした。その結果を Fig. 16-2 に示す。この回折像から、A の黒い部分は金の単結晶、B の白っぽい部分はシリコンの単結晶であることがわかる。また、C に電子線を照射すると、金とシリコンの両方の結晶からの回折像が同時に得られ、シリコン基板の結晶方位に対して金単結晶がどのような結晶方位で形成されたかがわかる。本実験結果の解析として以下の問いに答えよ。

- (a) 金の結晶構造はなにか？ (回答例：体心立方，面心立方，ダイヤモンド構造など)
- (b) 面垂直方向の金の結晶方位は何か？ (回答例：100 方向など) その根拠も記せ。
- (c) Fig.16-2 の A から得られた回折像と B から得られた回折像に対して、回折点の指数(どの面の集合からの回折か)を図示せよ。電子線の入射方向は A と B それぞれに対して自分で指定すること。それを基準にして各回折点の指数を明記せよ。

回答例：



A 地点の金の単結晶に、金の $\bar{111}$ 方向に電子線を入射した場合に得られる回折点の指数

(d) シリコン結晶と金結晶の面内における方位の関係はどうなっているか？（回答例：面内ではシリコンの 111 方向が金の 311 方向に平行など）. その根拠も記せ. なぜこのような結晶方位の関係がシリコンと金の間にあるのか数行で推測せよ.

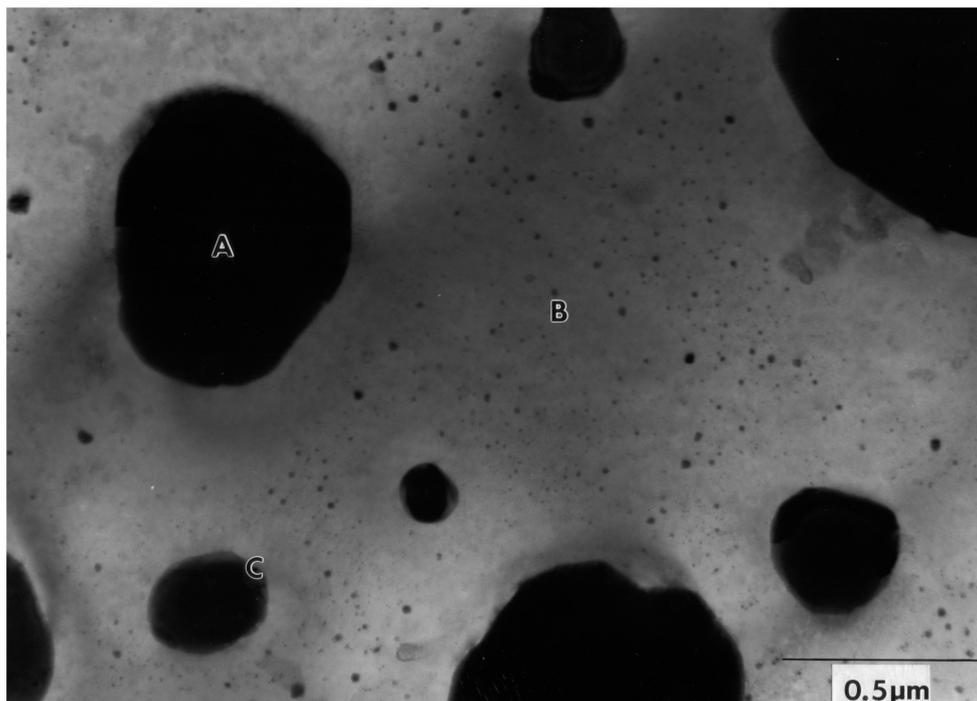
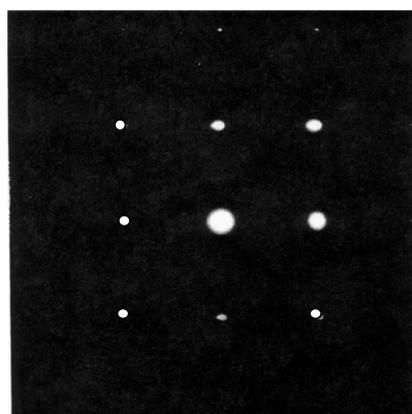


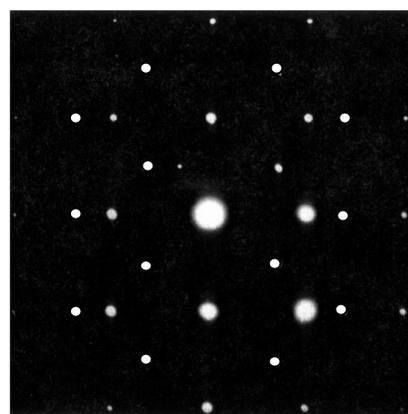
Fig. 16-1 シリコン表面上の金の電子顕微鏡像



A 部分から得られた回折像



B 部分から得られた回折像



C 部分から得られた回折像

Fig. 16-2 電子顕微鏡写真（図 4-1）から得られた回折像

問題 17 :

問題 18 : Fig. 18-1 のように実験装置を組み、慣用の格子定数（体心立方の立方体部分の一辺の長さ）が 0.4nm の体心立方単結晶の電子線回折像を写真に撮る。ここで、結晶の $[001]$ 方向は試料からみた電子線発振源方向（電子線に平行）、 $[\bar{0}\bar{1}0]$ 方向は電子線方向と直交する試料の上向き方向とする。試料とフィルム間の距離は $L=30\text{cm}$ で、電子線の波長 $\lambda=0.0037\text{nm}$ とする。本実験の結果、Fig. 18-2 の感光面に得られたパターンを図 3 に示す。ただし、○が回折されないで透過してきた電子線、●が結晶面で回折された電子線による輝点である。体心立方は $h+k+l$ が偶数の面のみから回折（フィルム上に輝点）が生じる。

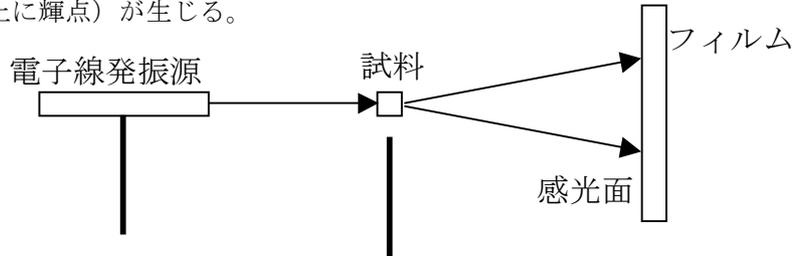


Fig. 18-1

- (a) ○から最近接の●までの距離 R を求めなさい。
- (b) すべての●がどの hkl 面からの回折かを図中へ書き込みなさい。各●の横に $\bar{2}00$ といった具合に記入すればよい。ヒントとして $\bar{3}10$ の輝点だけは既へ書き込んである。図の右横の空欄には、どの hkl 面からの回折かを決定する過程を簡単に書きなさい。

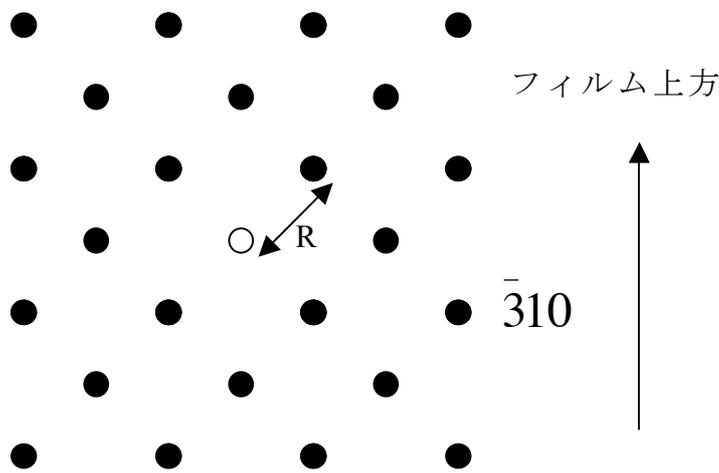


Fig. 18-2 感光面に映った電子線による輝点

問題 19 : X線回折

Fig. 19 のとおりに実験装置を組み、格子定数が 4\AA の単純立方格子試料の X 線回折像を写真に撮る。ここで、結晶の $[\bar{0}\bar{1}0]$ 方向は試料からみた X 線発振源方向（X 線に平行）、 $[\bar{1}00]$ 方向は X 線方向と直交する試料の上方向、 $[001]$ 方向は X 線方向と直交し試料とフィルム面に平行とする。試料とフィルム間の距離は 5cm とする。 $2d\sin\theta = n\lambda$ における $n=1$ の場合に対して以下の質問にこたえよ。

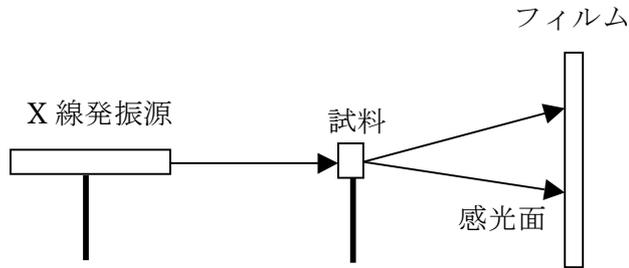


Fig. 19 X線回折実験 (ラウエ方式)

- a) $(\bar{3}10)$ 面、 $(\bar{4}10)$ 面、 $(\bar{5}10)$ 面のそれぞれにより回折される光 (X線) の波長を求めよ。
- b) 前問 a) で求めた波長のすべてを含む白色 X 線を Fig. 19 の X 線発振源から試料に向けて発射した。この場合、フィルムの感光面に現れる以下の面による回折点を図示せよ。

$$(\bar{3}10), (\bar{4}10), (\bar{5}10), (3\bar{1}0), (4\bar{1}0), (5\bar{1}0), (0\bar{1}\bar{3}), (0\bar{1}\bar{4}), (0\bar{1}\bar{5}), (0\bar{1}3), (0\bar{1}4), (0\bar{1}5)$$

フィルム上の各回折点の位置は実際の寸法で忠実に描くこと。感光面を $10\text{cm} \times 10\text{cm}$ 程度の面積と仮定するとよい。各回折点の大きさを定量的に見積るのは困難なので適当でよい。

問題 20 : 電子線回折

Fig. 20-1 のように実験装置を組み、面心立方晶の電子線回折像をフィルム上に写す。最初に結晶をある方向に置いたところ Fig. 20-2(a) の回折像をフィルム感光面に得た。次に Fig. 20-1 を上から見たときの半時計周りに試料を回転させたところ、ある角度 θ_1 において Fig. 20-2 (b) の回折像を感光面に得た。さらに回転させて (a) から丁度 90° 回したときに Fig. 20-2 (c) の回折像を得た。ただし、○が回折されずに透過してきた電子線、●が回折された電子線による輝点である。

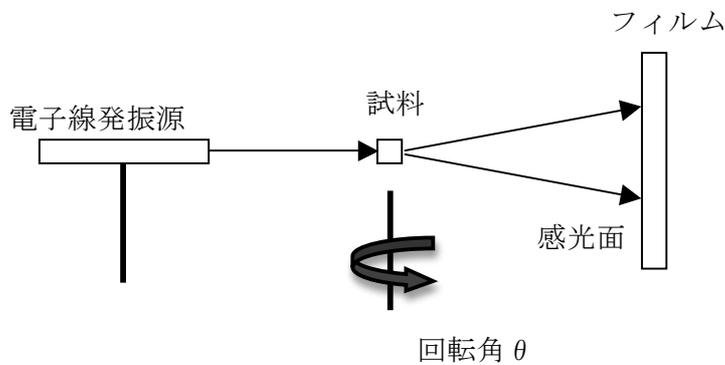


Fig. 20-1

- (a) Fig. 20-2 の (a), (b), (c) のそれぞれは電子線をどの結晶方位 (例えば $[\bar{1}10]$ など) に入射したときの回折像か? 理由も述べなさい。また Fig. 20-2 (b) の回折像を得たときの回転角 θ_1 を求めなさい。

- (b) Fig. 20-2 (b) の ● がどの hkl 面からの回折かを図中に書き込みなさい。各 ● の近くに $\bar{2}00$ といった具合に記入すればよい。

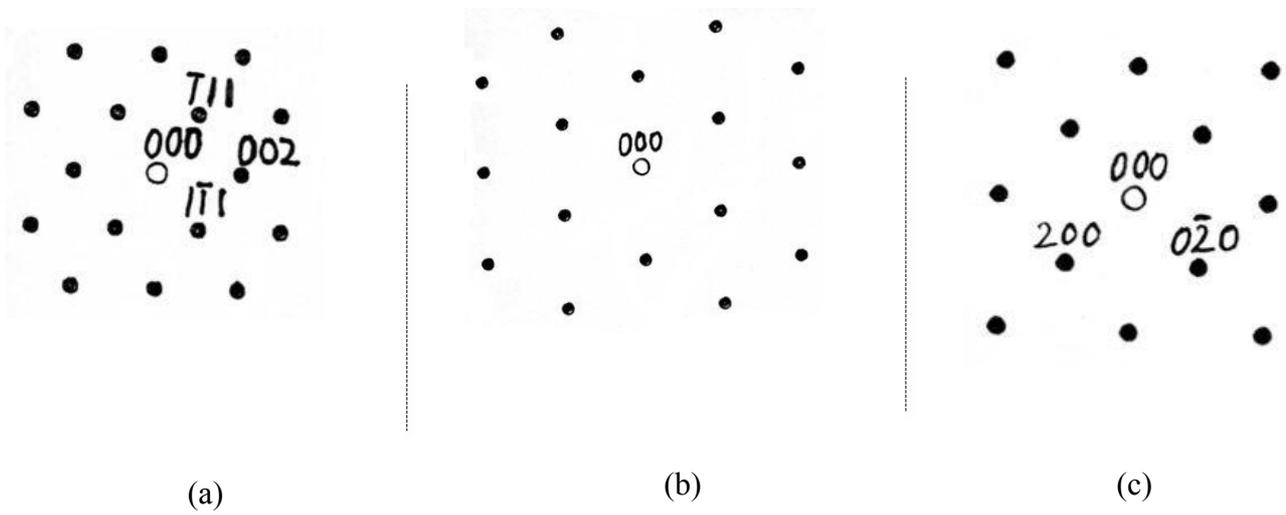
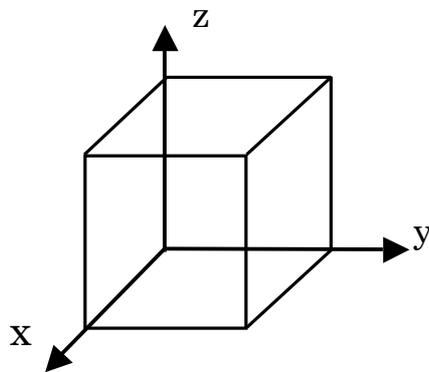


Fig. 20-2

(c)以下の立方晶中にFig. 20-1の回転軸を直線として書き込み、Fig. 20-1における上方向を矢印で示しなさい。



問題 21：金の粉末試料の x 線回折を測定した結果、Fig. 21 の結果を得た。ここでは θ - 2θ 法を用いた。x 線の波長は 0.154nm である。

- (a) 実験結果から金の結晶構造（面心立方、体心立方、ダイヤモンド等）を決定しなさい。計算過程を示すこと。
- (b) Fig. 21 のピーク A~F は、それぞれがどの hkl 面からの回折か？
- (c) 実験結果から金の慣用の格子状数（立方体の一辺の長さ a）を求めなさい。

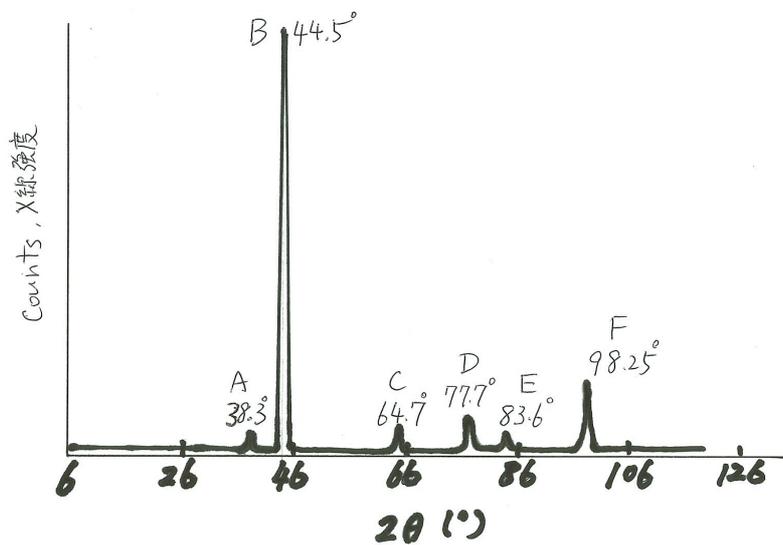


Fig. 21

問題 22 : 電子線回折

Fig. 22-1 のように実験装置を組み、体心立方晶の電子線回折像をフィルム上に写す。最初に結晶をある方向に置いたところ Fig. 22-2(a)の回折像をフィルム感光面に得た。次に Fig. 22-1 の z 軸を上から見たときの時計周りに試料を回転させたところ、ある角度 θ_1 において Fig. 22-2(b)の回折像を感光面に得た。さらに回転させて(a)から丁度 90° 回したときに Fig. 22-2(c)の回折像を得た。ただし、○が回折されずに透過してきた電子線、●が結晶面で回折された電子線による輝点である。体心立方では $h+k+l$ が偶数の面のみから回折（フィルム上に輝点）が生じる。

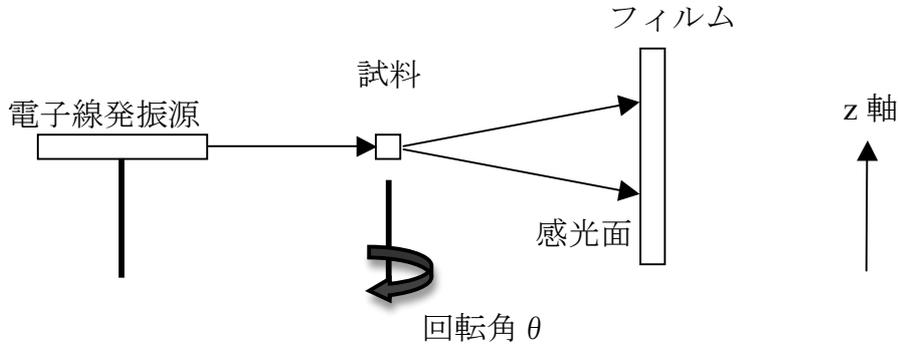


Fig. 22-1

(a) Fig. 22-2 の(a), (b), (c)のそれぞれは電子線をどの結晶方位（例えば $[\bar{1}10]$ など）に入射したときの回折像か？理由も述べなさい。また Fig. 22-2(b)の回折像を得たときの回転角 θ_1 を求めなさい。

(b) Fig. 22-2(b) の●がどの hkl 面からの回折かを図中に書き込みなさい。各●の横に $\bar{2}00$ といった具合に記入すればよい。

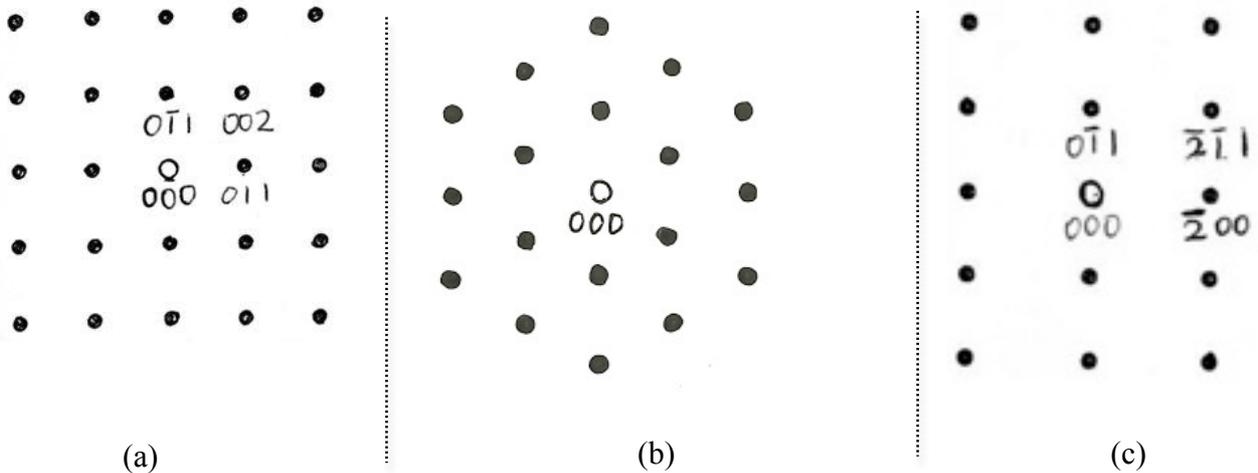
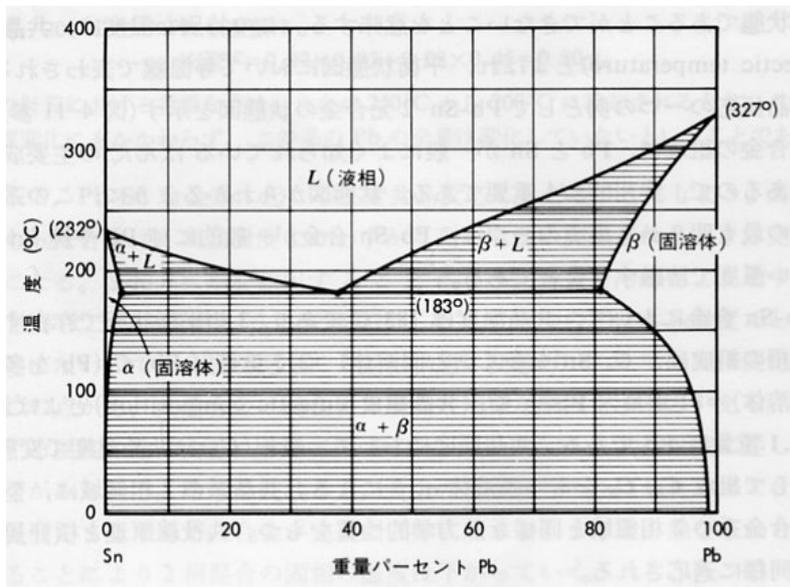


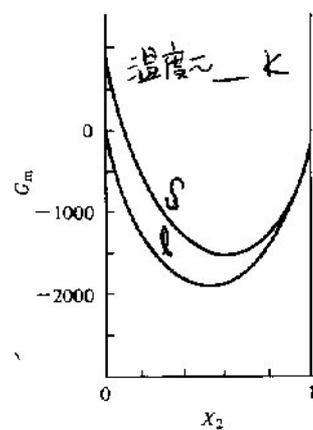
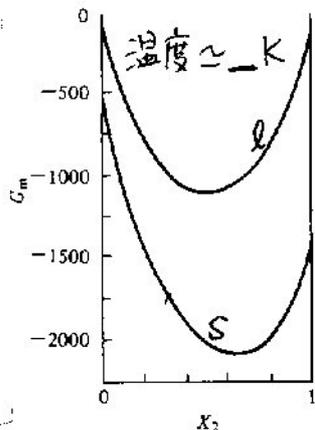
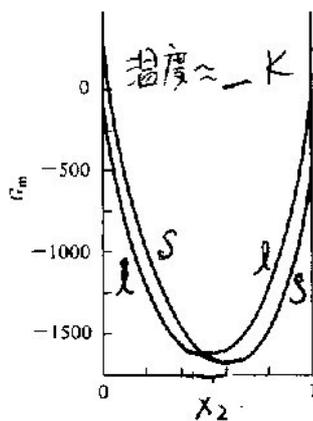
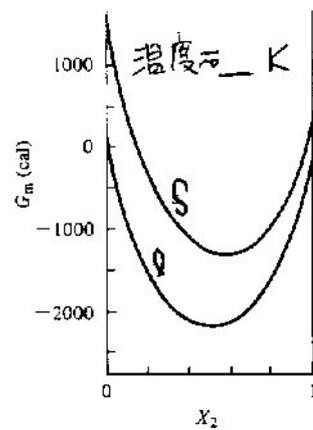
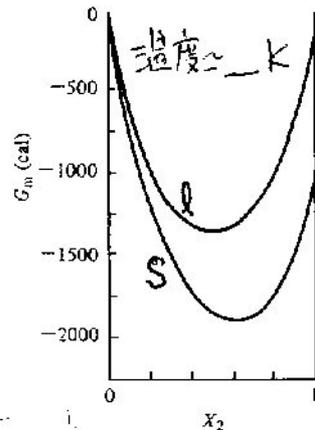
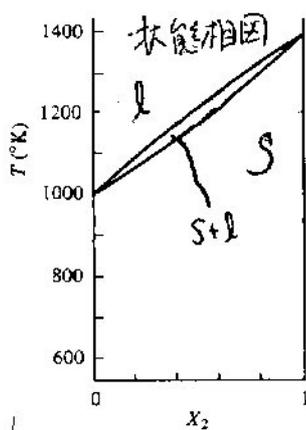
Fig. 22-2

問題 23

- 1) Pb と Sn は固体では相分離してしまう。その理由を推察せよ。
- 2) Pb-Sn の状態相図を見ながら Sn60%-Pb40%の液体がゆっくりと冷やされて固化される過程における金属組織の変化を詳しく述べよ。
- 3) 90 重量%Pb と 10 重量%Sn の合金の 50°C における相の組成とそれらの相の割合を見積もれ。（解答例 Pb が約 a%、Sn が約 b%の x 相と、Pb が約 c%、Sn が約 d%の y 相が共存していて、総重量に占める x 相の割合が xx%、y 相が yy%である。）



問題 24 : 下に示す状態相図の異なる温度に対応するギブスの自由エネルギーが 5 つ示してある. この 5 つのギブスの自由エネルギーがそれぞれに温度何度(K)に対応するかを推察せよ.



問題 25 : 下に示す図(a)~(e)の温度によって変化する固体相(s)と液体相(l)のギブスの自由エネルギーを参考にして、(f)中に状態相図をスケッチせよ。ただし $X_2=0$ のときの融点は 600°K , $X_2=1$ における融点は 500°K である。

