

結晶物理学 定期試験問題

問題用紙にも氏名を記入して提出すること

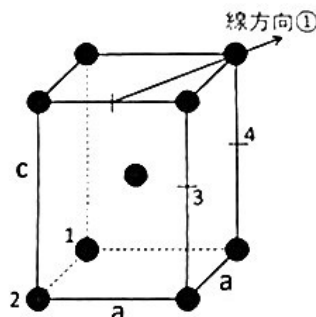
学生番号

氏名

* この問題中に記載されている数値などは、問題用に想定したものであり、現実として正しい数値ではない。

問題1 (基礎) 右図は、体心正方格子を模式的に示している。図中の黒点は格子点を、記入した長さ (a, c) はそれぞれの辺の長さを示している。以下の問に答えよ。

- 1) 単位格子に含まれる格子点の座標を求めよ。
- 2) 図中に示した、面 (1, 2, 3, 4 で示した座標を含む面)、線方向①のミラー指数を、それぞれ答えよ。
- 3) $\{110\}$ の面間隔は複数存在する。それぞれの面間隔に含まれる面のミラー指数をすべて答えよ。



問題2 (基礎) CsCl 構造 (格子定数は a) に関する以下の問いに答えよ。

- 1) ブラベー格子の名称、および、基本構造を答えよ。
- 2) Cs イオンに対して第二近接となるイオンの名称、配位数、および、その距離を答えよ。
- 3) Cs イオンをすべて Na イオンに置き換えると NaCl 構造となる。このとき、結晶構造におけるイオンの配位数は、CsCl 構造と比較して増加するか、減少するか、理由とともに答えよ。

問題3 (基礎) 面心立方構造 (寛容格子定数は a) に関する以下の問いに答えよ。

- 1) 基本単位格子のブラベー格子の名称、および、その格子定数を答えよ。
- 2) この結晶の粉末 X 線回折 (θ - 2θ 法) を行った。最も低角度 (2θ) に現れる回折ピークのミラー指数を理由とともに答えよ。
- 3) 問2) で求めた回折ピークのミラー指数を、問1) で求めた基本単位格子のミラー指数として、理由とともに求めよ。

問題4 (基礎) 次の語句を簡潔に説明せよ。

不定比性化合物、特性 X 線、原子散乱因子

問題5 (応用) 螢石型構造である酸化ジルコニウム (ZrO_2) について、以下の問に答えよ。

ただし、格子定数は 0.5nm 、Zr の原子量は 90、Ca の原子量は 40、O の原子量は 16、および、アボガドロ数は $6 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ として計算せよ。

- 1) CaO を固溶させる。Ca イオンが置換型で固溶する時の点欠陥反応式を、クレーガー・ピンクの表記法に従って答えよ。
- 2) CaO を固溶させる。Ca イオンが侵入型で固溶する時の点欠陥反応式を、クレーガー・ピンクの表記法に従って答えよ。
- 3) CaO を 10mol% 固溶させて格子定数を測定したところ 0.55nm であった。Ca イオンの固溶は置換型で固溶しているものとする。この固溶体の密度を求めよ。ただし、単位には g/cm^3 を用い、小数点以下二桁で解答すること。

以上