

構造化学

結晶構造

第2回 4月16日

河野淳也

前回の復習

X線の本性について述べました

X線は、波長 Å の だ。

原子の大きさも だ。

本日の目標

基本的な結晶の構造について理解しよう

内容

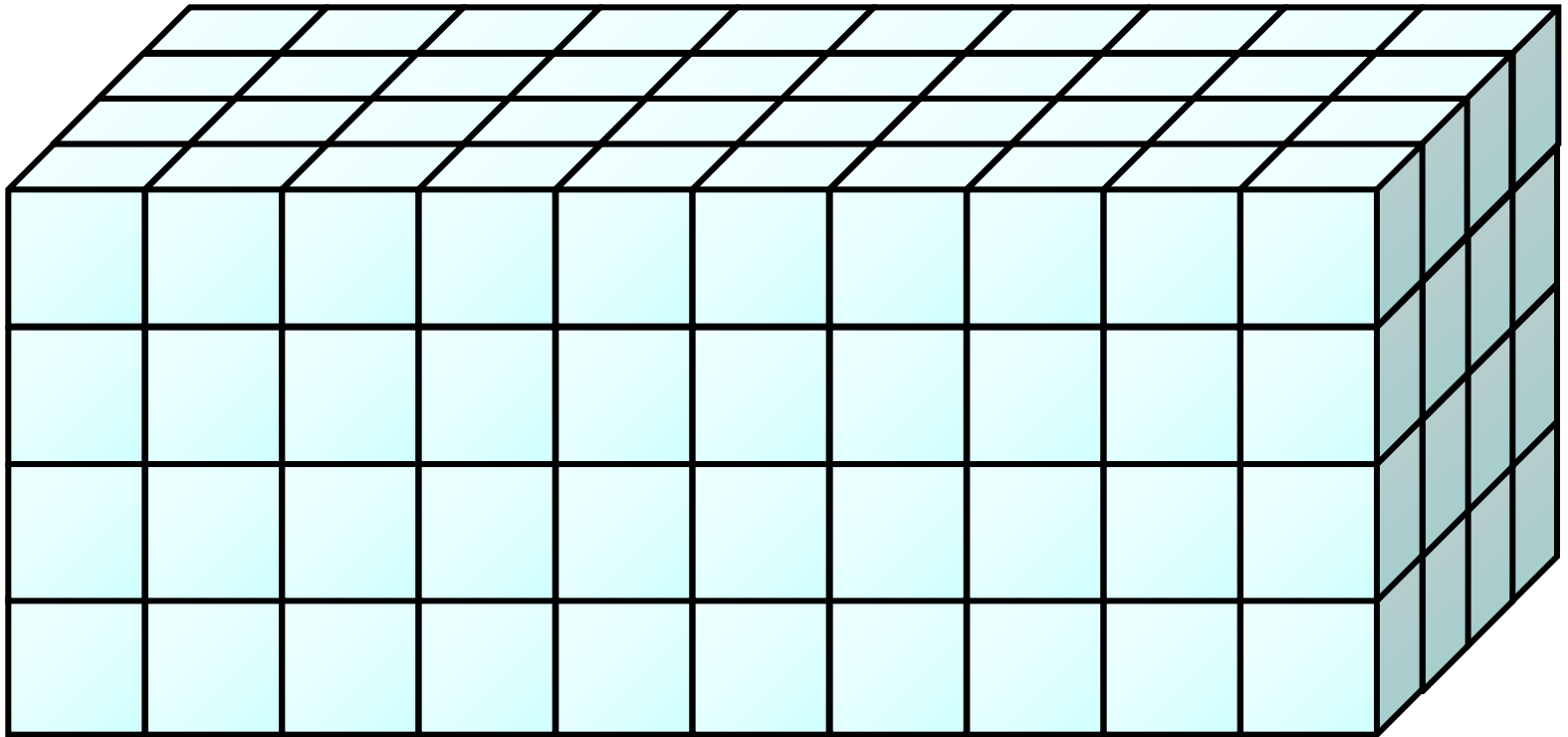
- 結晶とは
- X線構造解析と結晶
- 単位胞
- いろいろな結晶の構造
- 次回のための確認(複素数、積分)

結晶とは

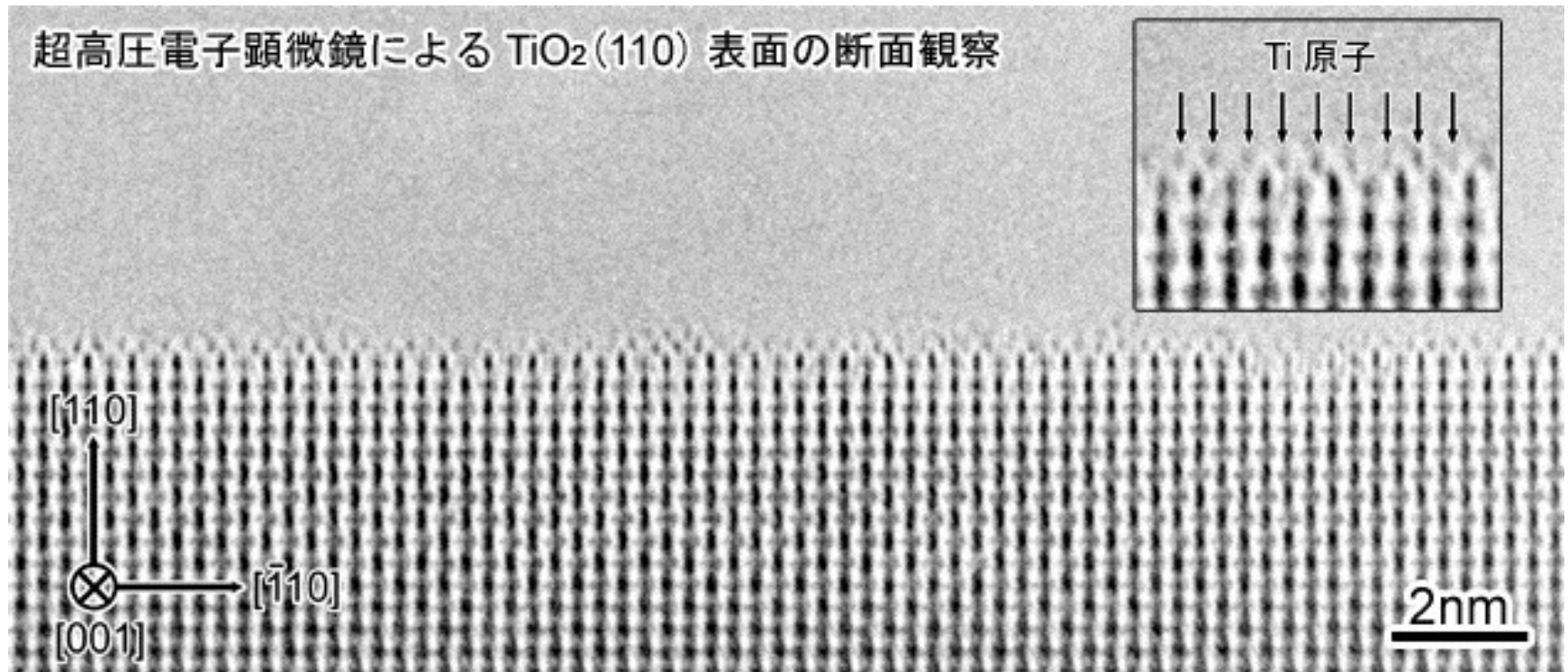
『広辞苑』

原子が規則正しく 配列してつくられた固体。

苦心・努力・愛情などの結果、立派な形になって現れたもの。



電子顕微鏡による結晶の観察



東京大学 幾原雄一先生

<http://crystalinterface.jp/>

固体の分類

固体 (solid)

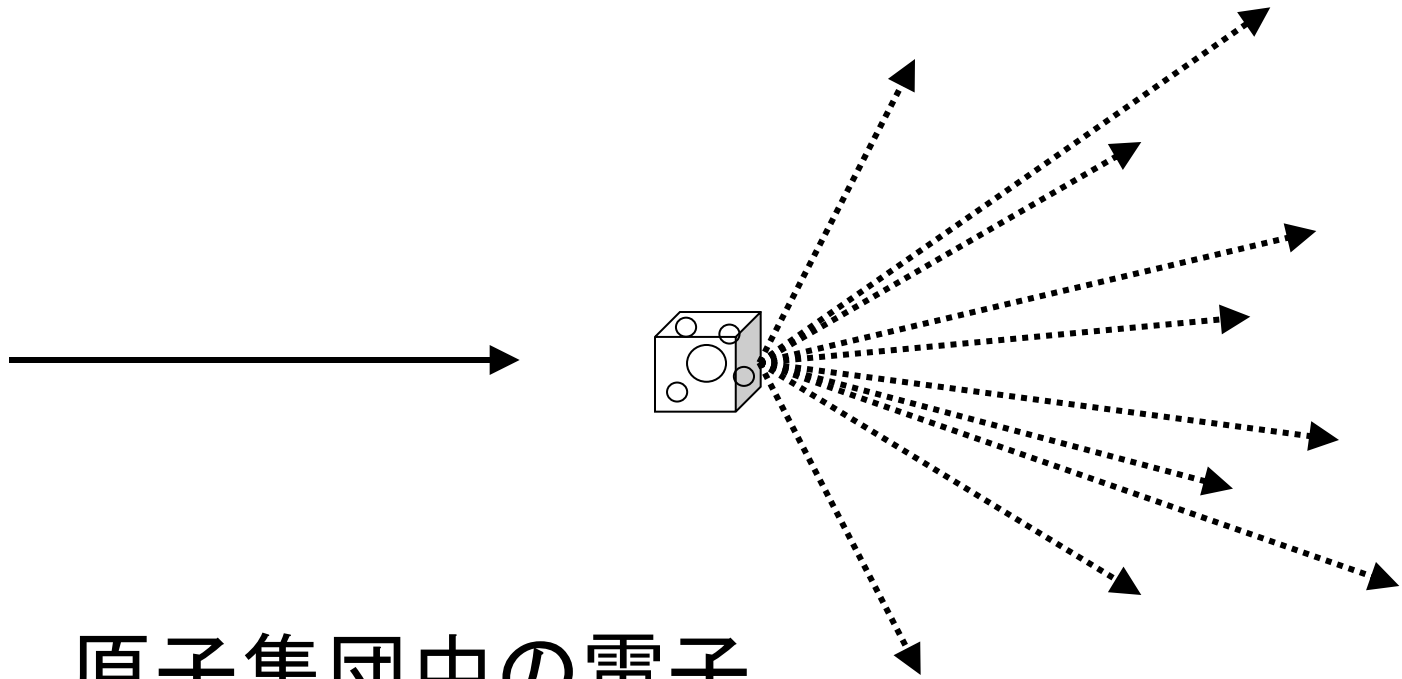
結晶

(single crystal)

(poly crystal)

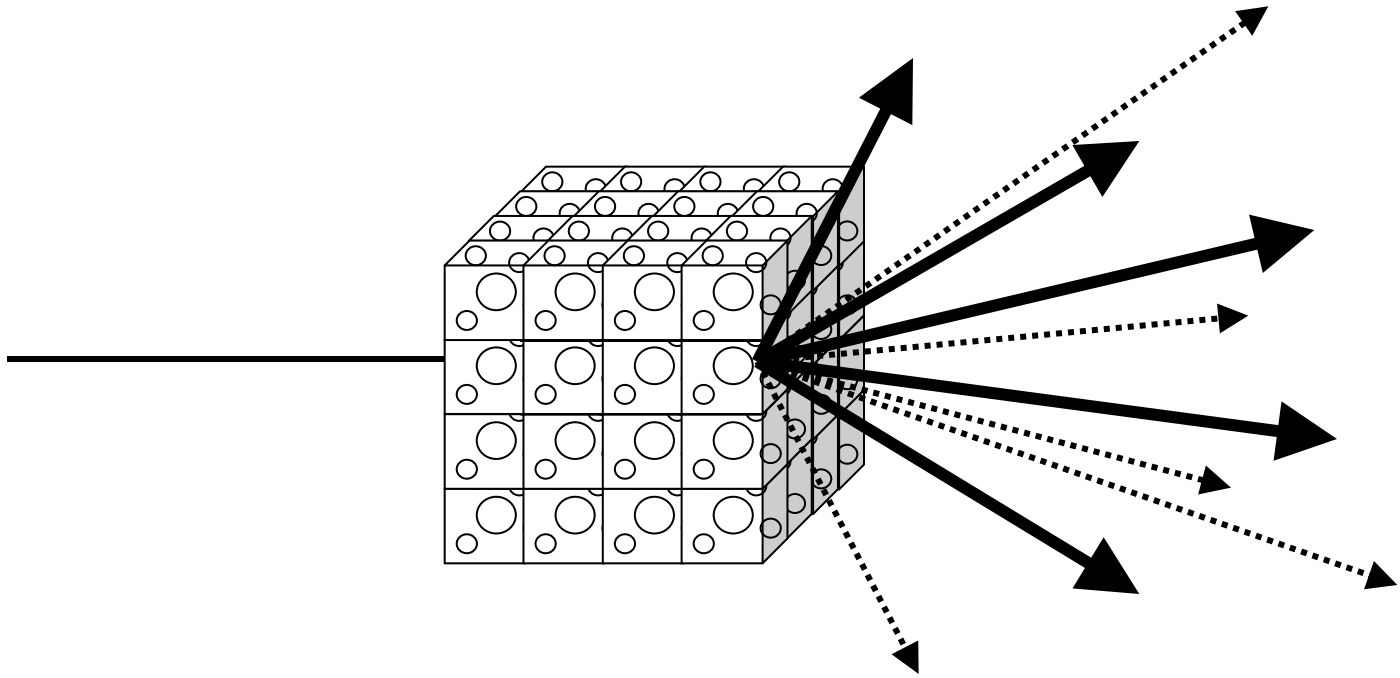
(amorphous, glass)

X線結晶構造解析



原子集団中の電子

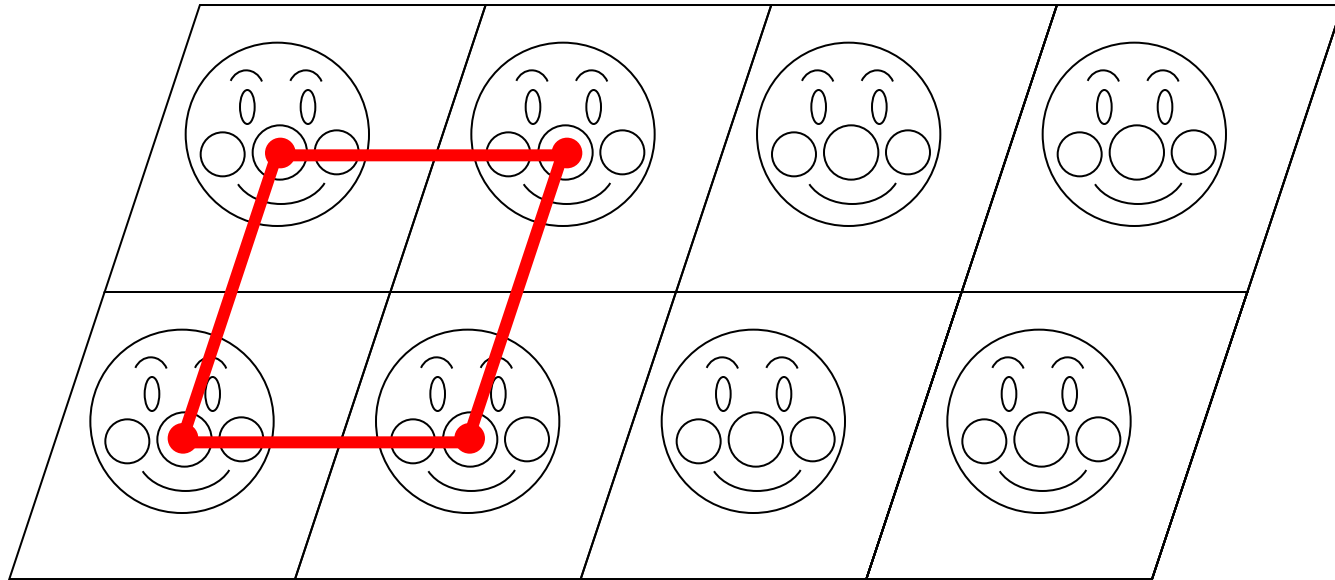
X線結晶構造解析



結晶：の構造

→ 散乱光が強めあう

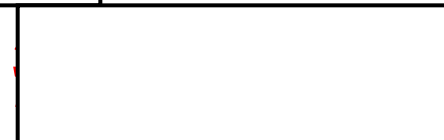
格子点、結晶格子、単位格子



同じ環境の点 =



格子点の作る格子 =



結晶格子の周期単位 =

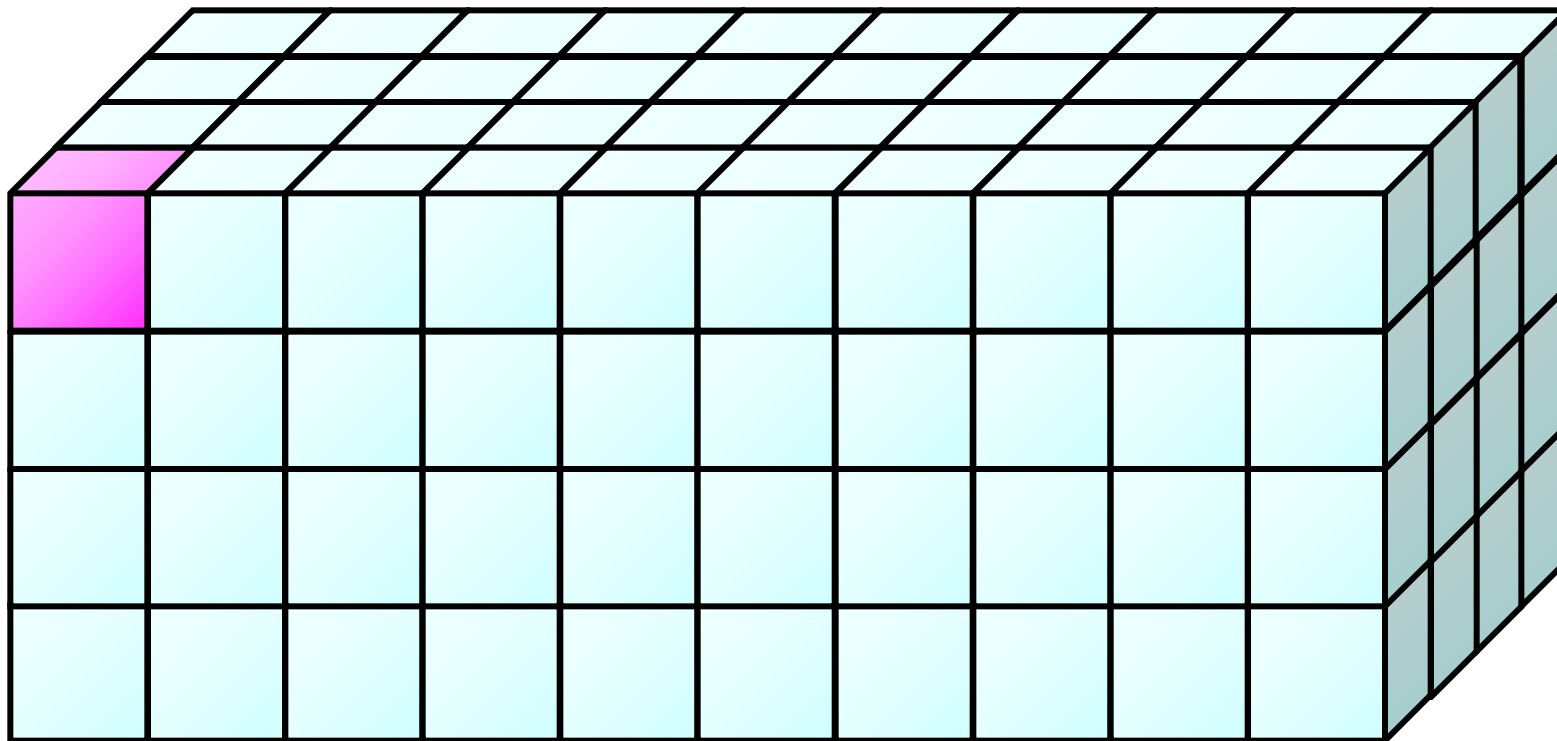


(物質の詰まったもの = 単位胞)



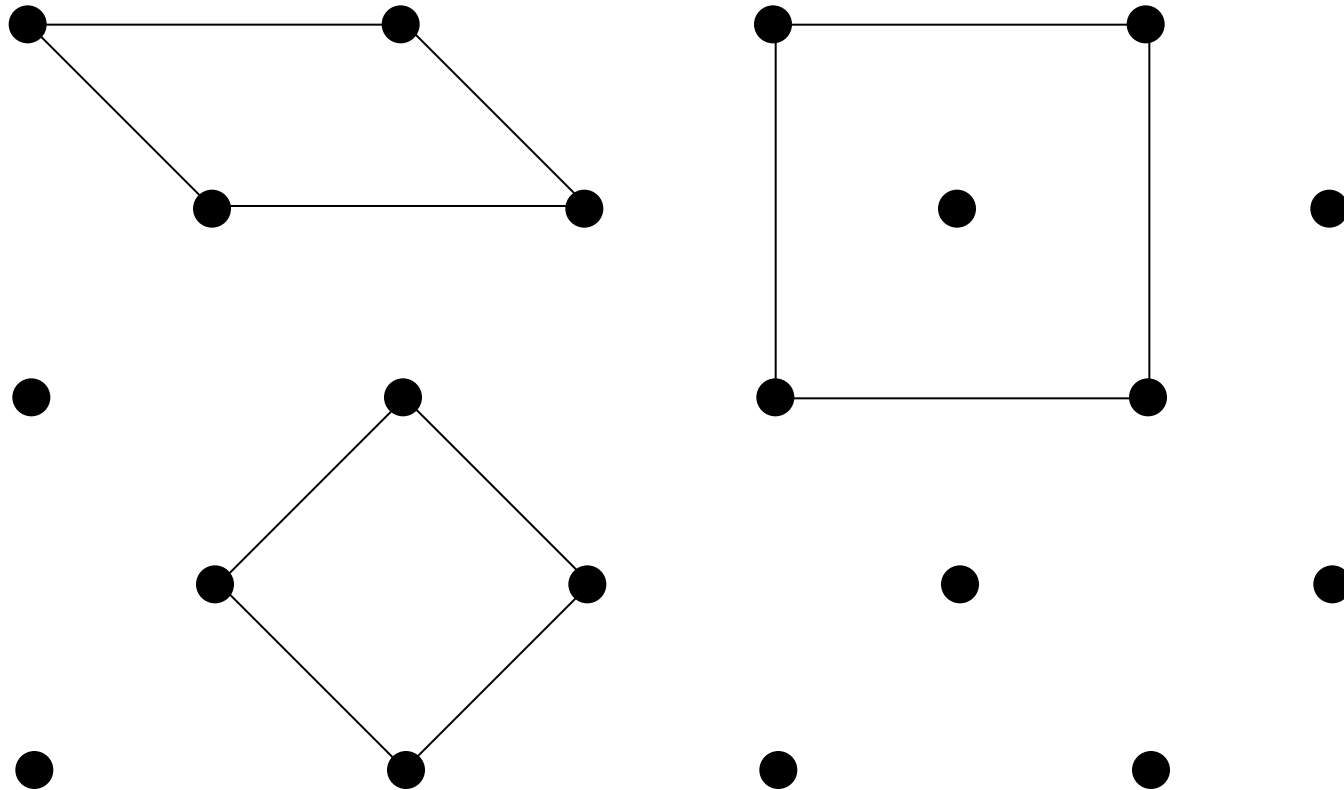
(Unit Cell)

結晶の持つ3次元周期構造の周期単位
(平行六面体)



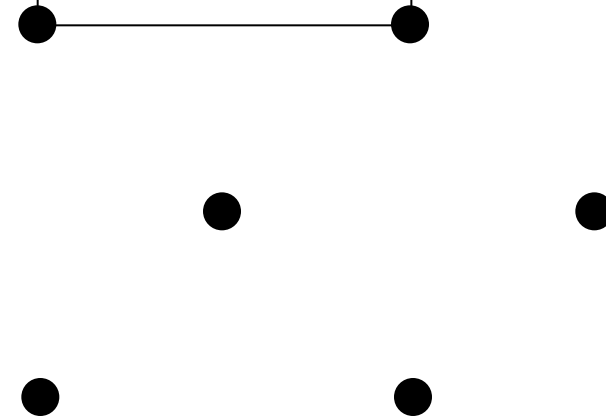
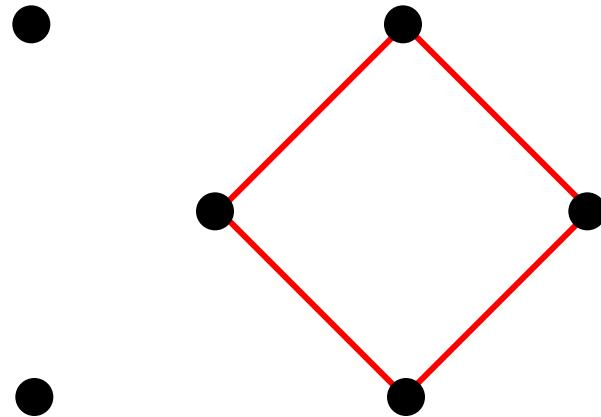
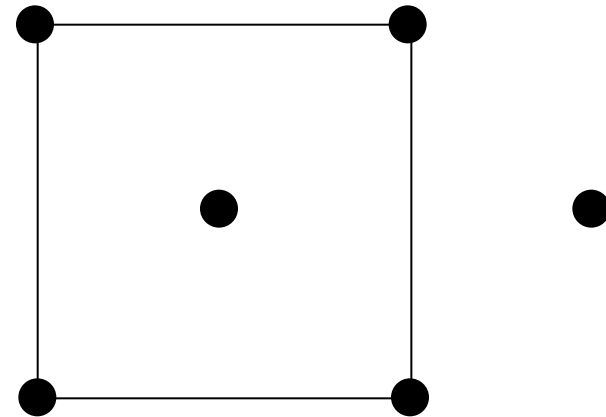
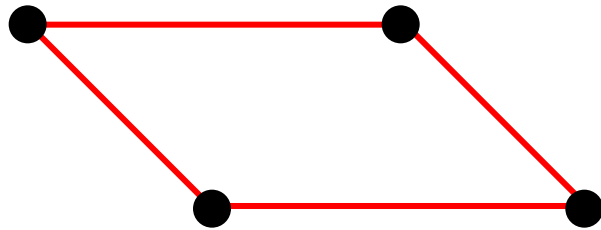
単位胞 (Unit Cell)

単位胞のとり方は一意ではない



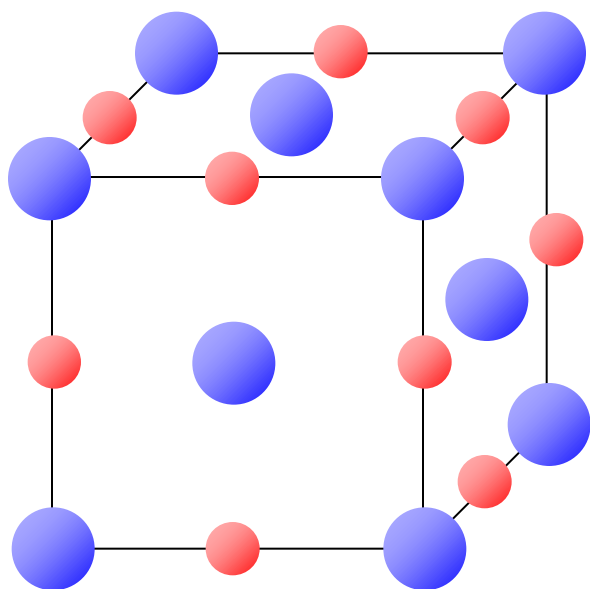
単純単位胞 (Primitive Unit Cell)

格子点を1つだけ含む単位胞



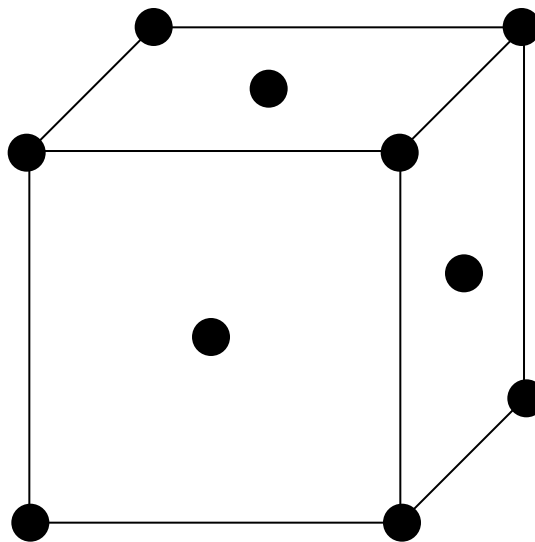
結晶とは

$$\text{結晶} = \boxed{\phantom{\text{格子}}} (\text{lattice}) + \boxed{\phantom{\text{基底}}} (\text{basis})$$



結晶

=









格子

14種(後半)

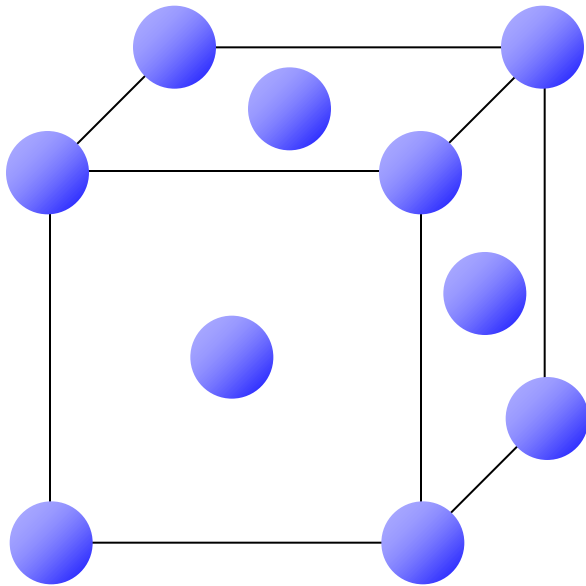
+



基本的な結晶構造

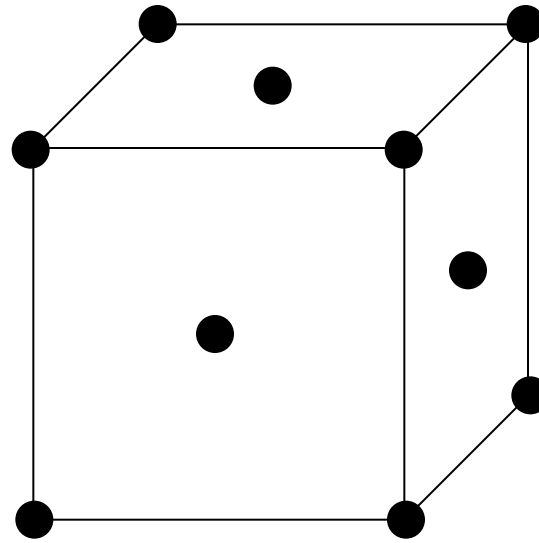
	構造	Face-centered cubic (fcc)
	構造	Body-centered cubic (bcc)
	構造	Hexagonal closed-packed
	構造	Diamond
	構造	Graphite
NaCl型構造		
CsCl型構造		
	型構造	Zinc blende

構造 Face-centered cubic (fcc)



結晶

=



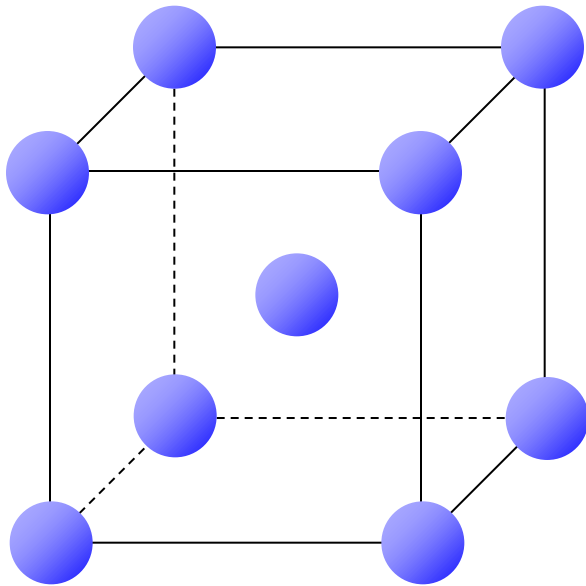
面心立方格子

+



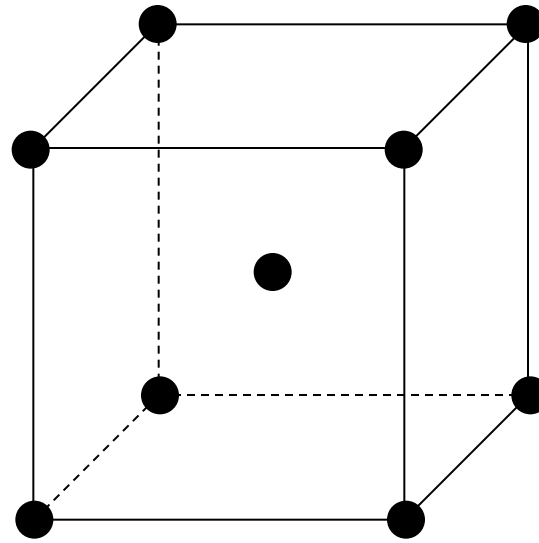
原子

構造 Body-centered cubic (bcc)



結晶

=



体心立方格子

+

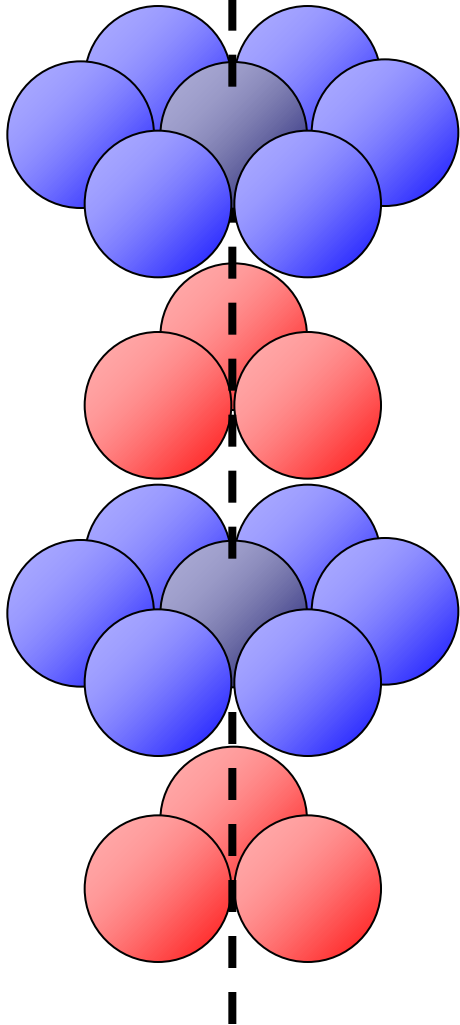


原子



構造

Hexagonal closed-packed (hcp)

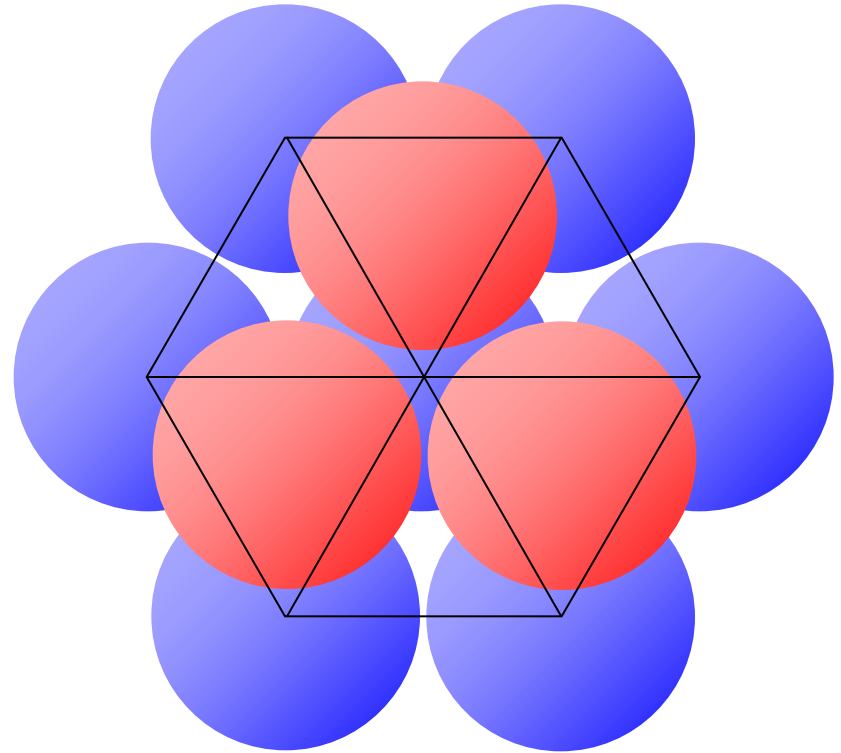


A

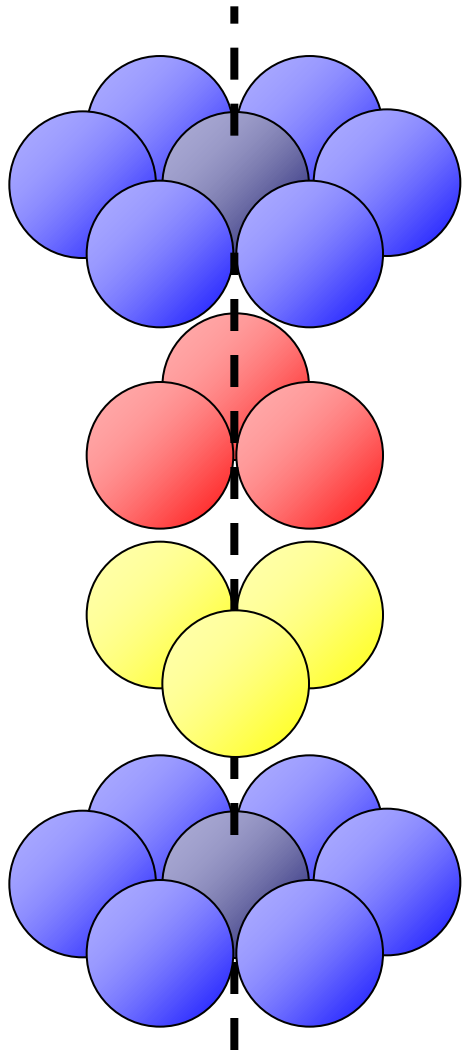
B

A

B



ABCABC = 面心立方構造

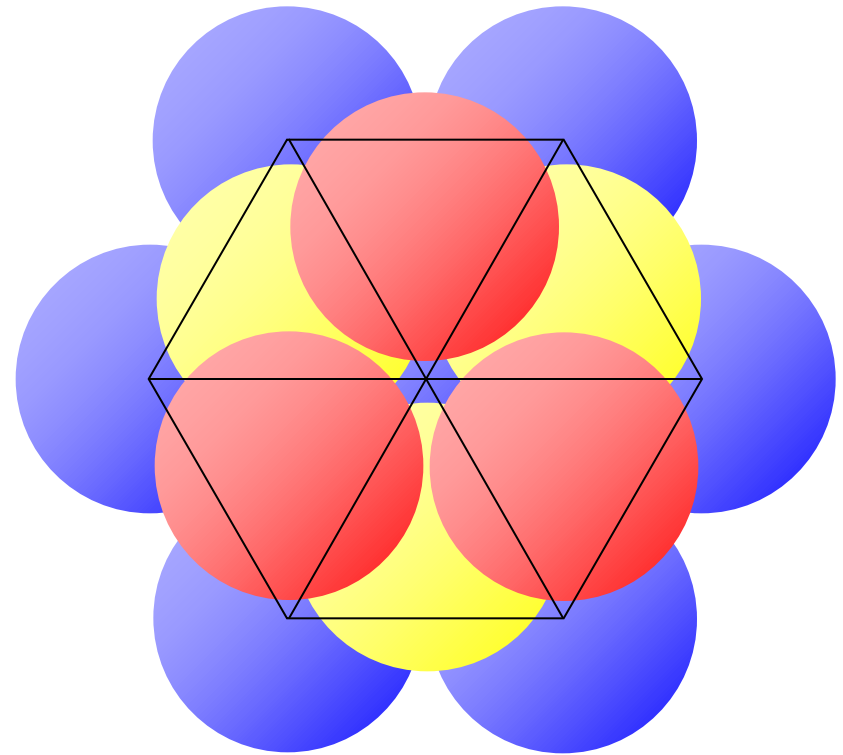


A

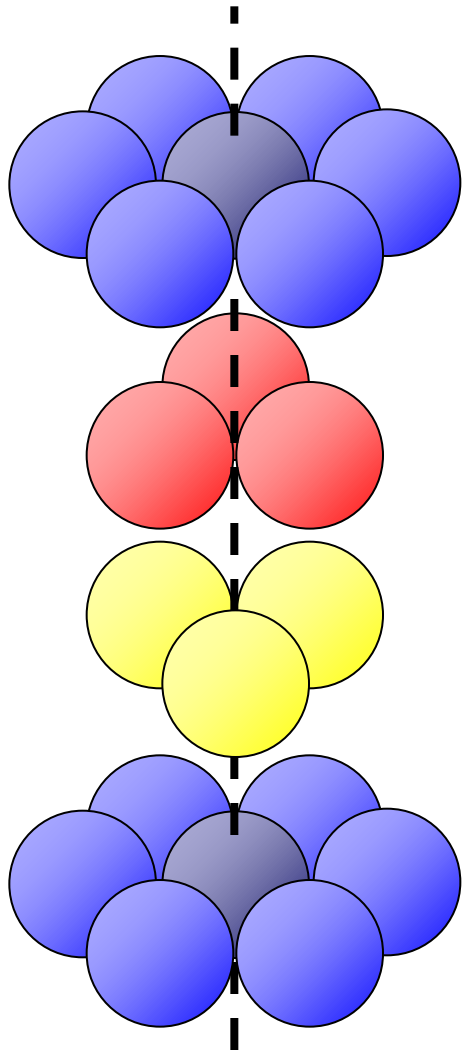
B

C

A



ABCABC = 面心立方構造

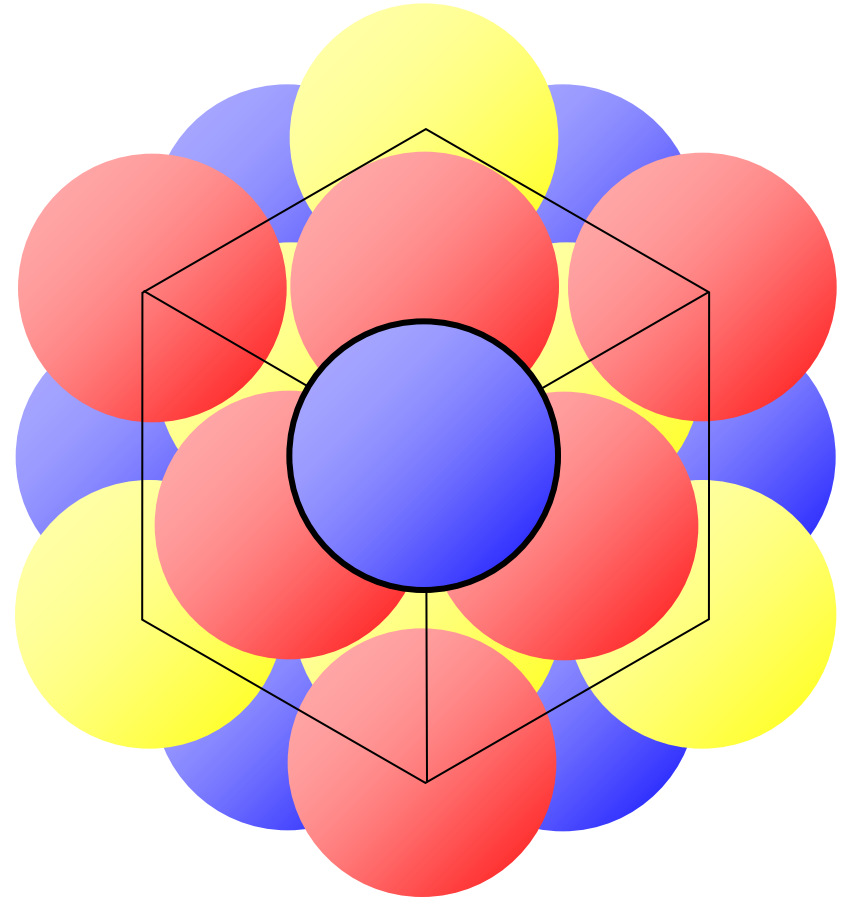


A

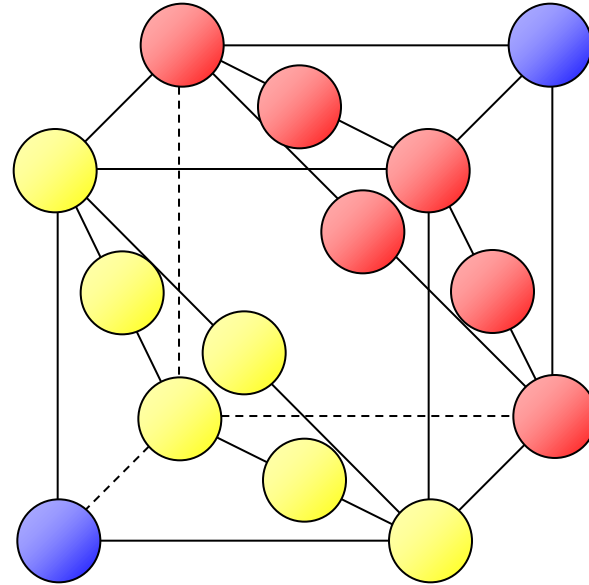
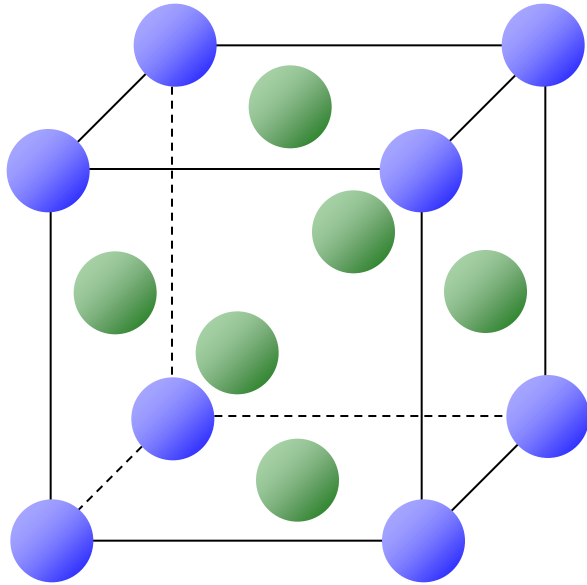
B

C

A

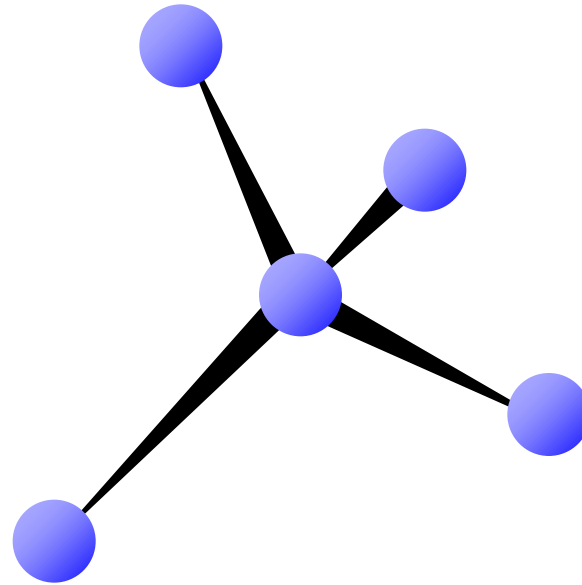
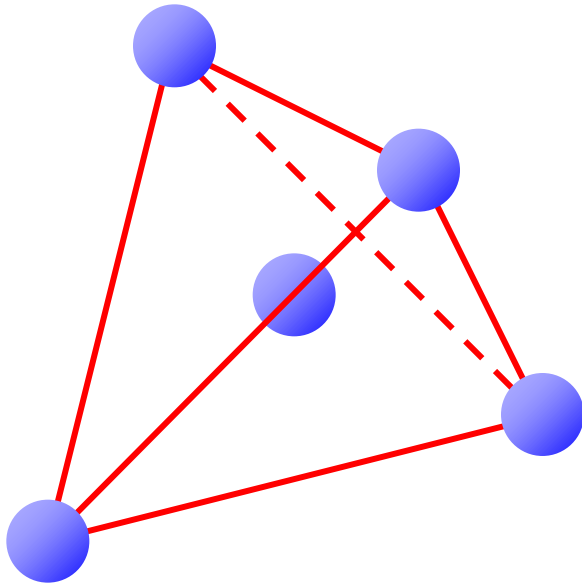


ABCABC = 面心立方構造





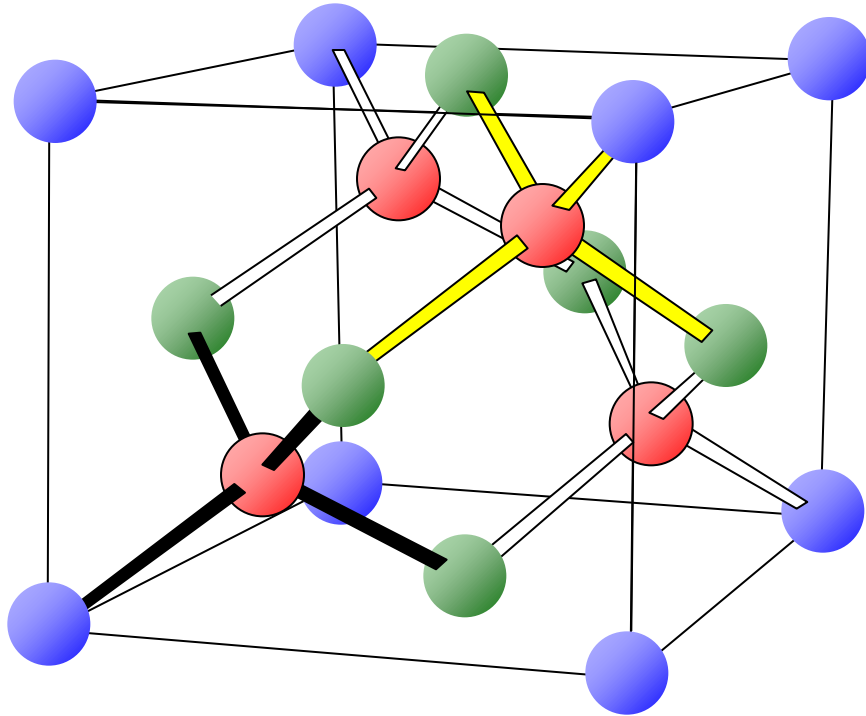
構造



正四面体構造 (Tetrahedral structure)

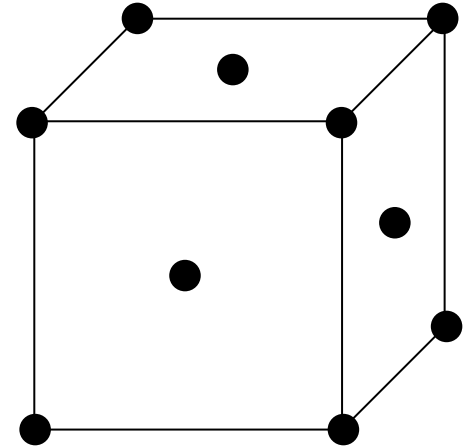


構造

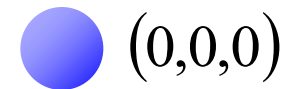
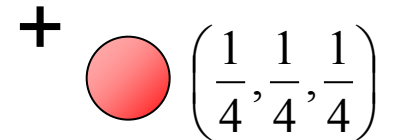


結晶

=

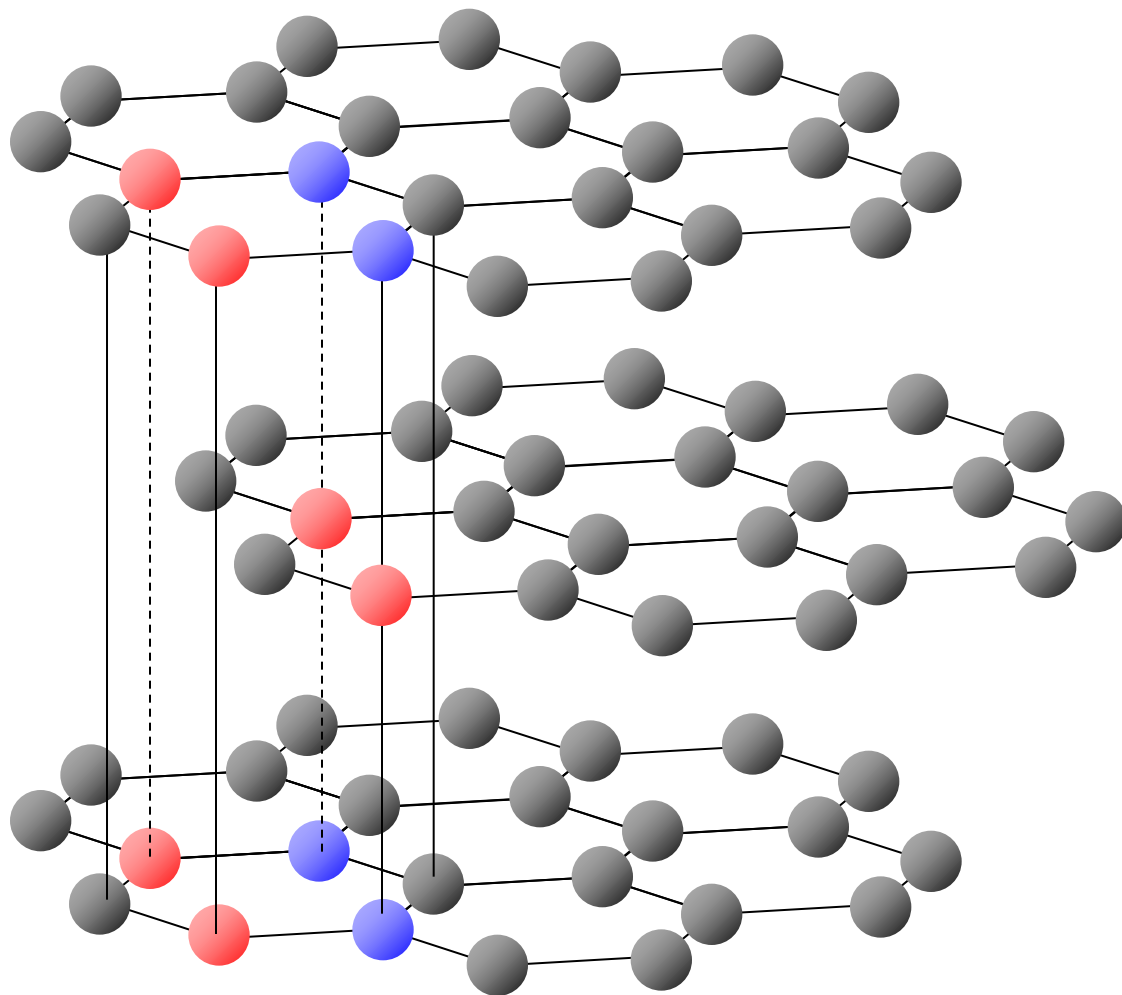


面心立方格子



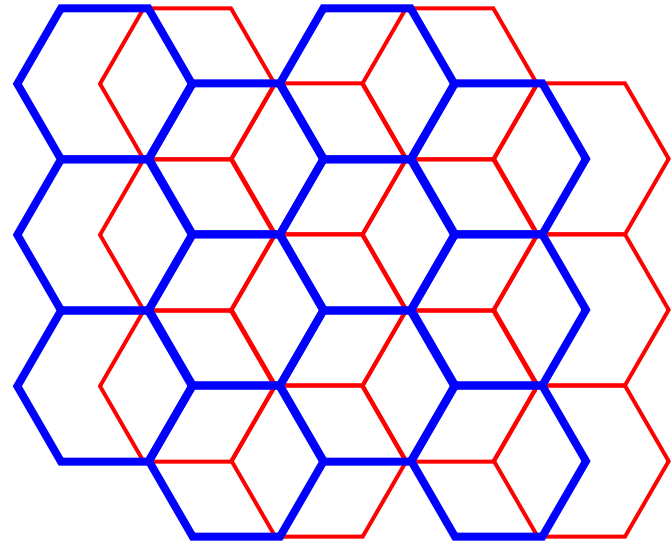
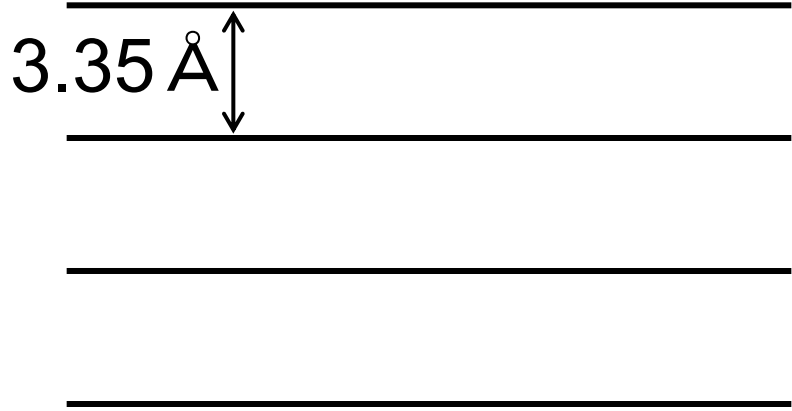
2原子

構造





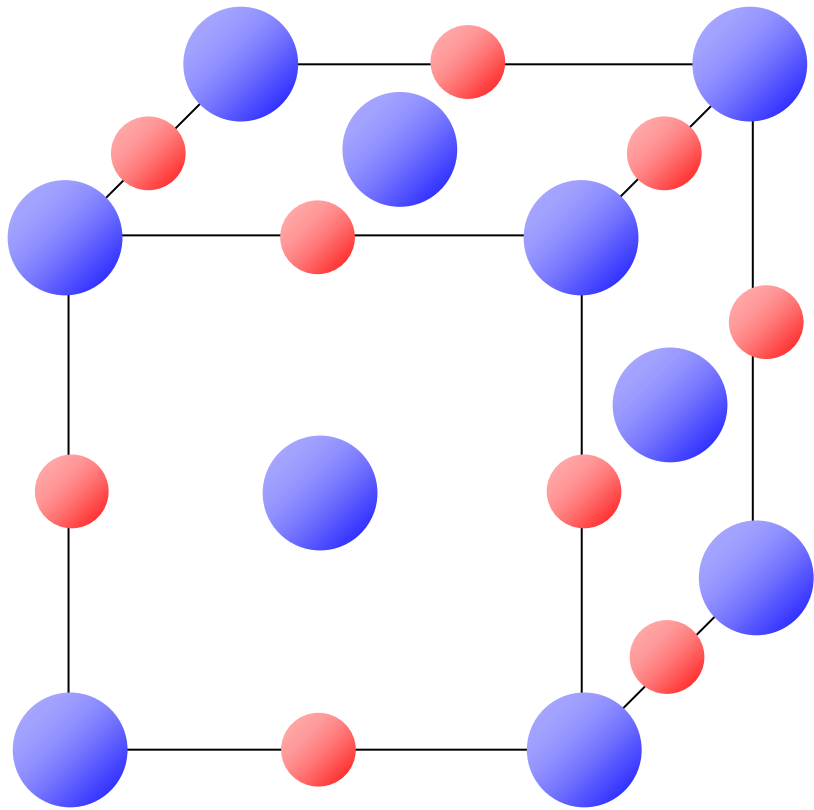
構造



↔
1.42 Å

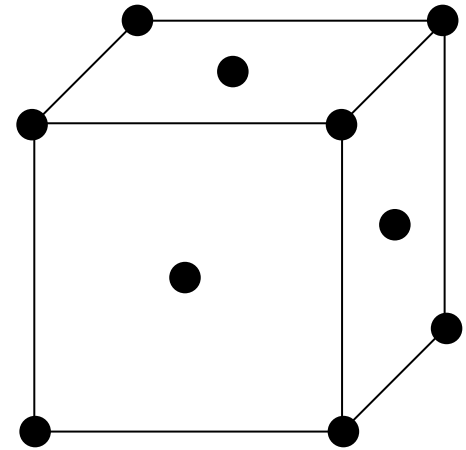


型構造



結晶

=



面心立方格子

+



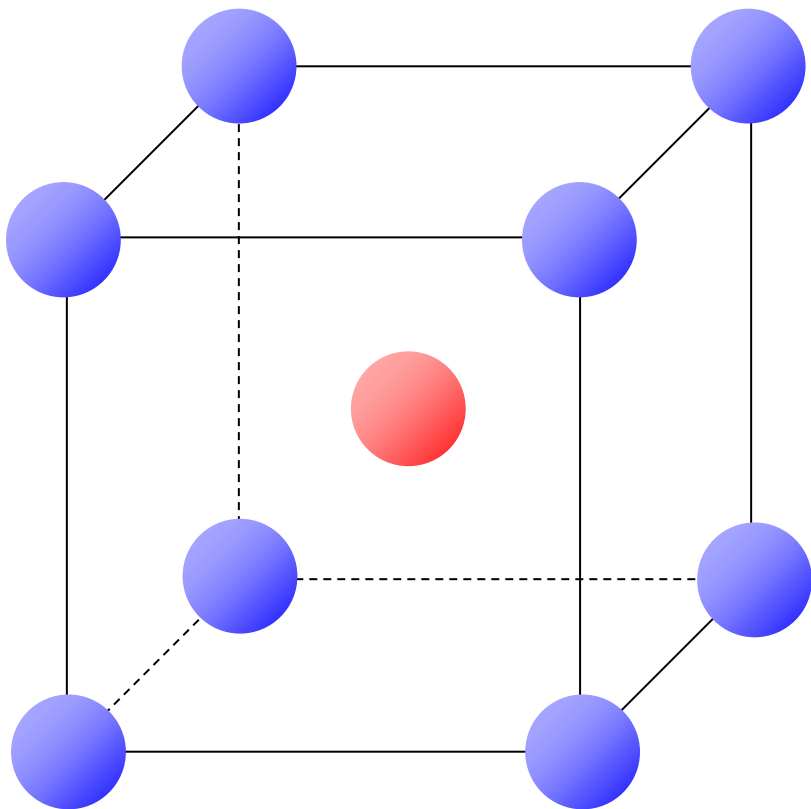
$(0,0,0)$



$(\frac{1}{2},0,0)$

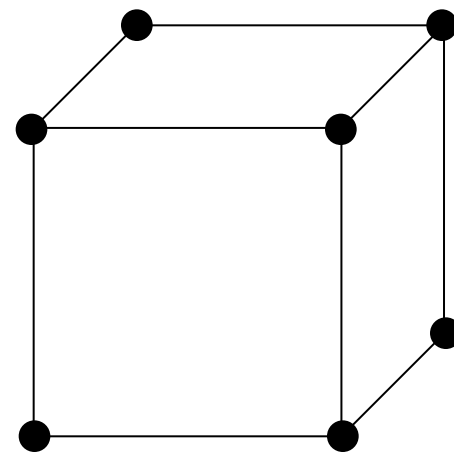
2原子

型構造





結晶

=



單純立方格子

+  $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

 $(0,0,0)$

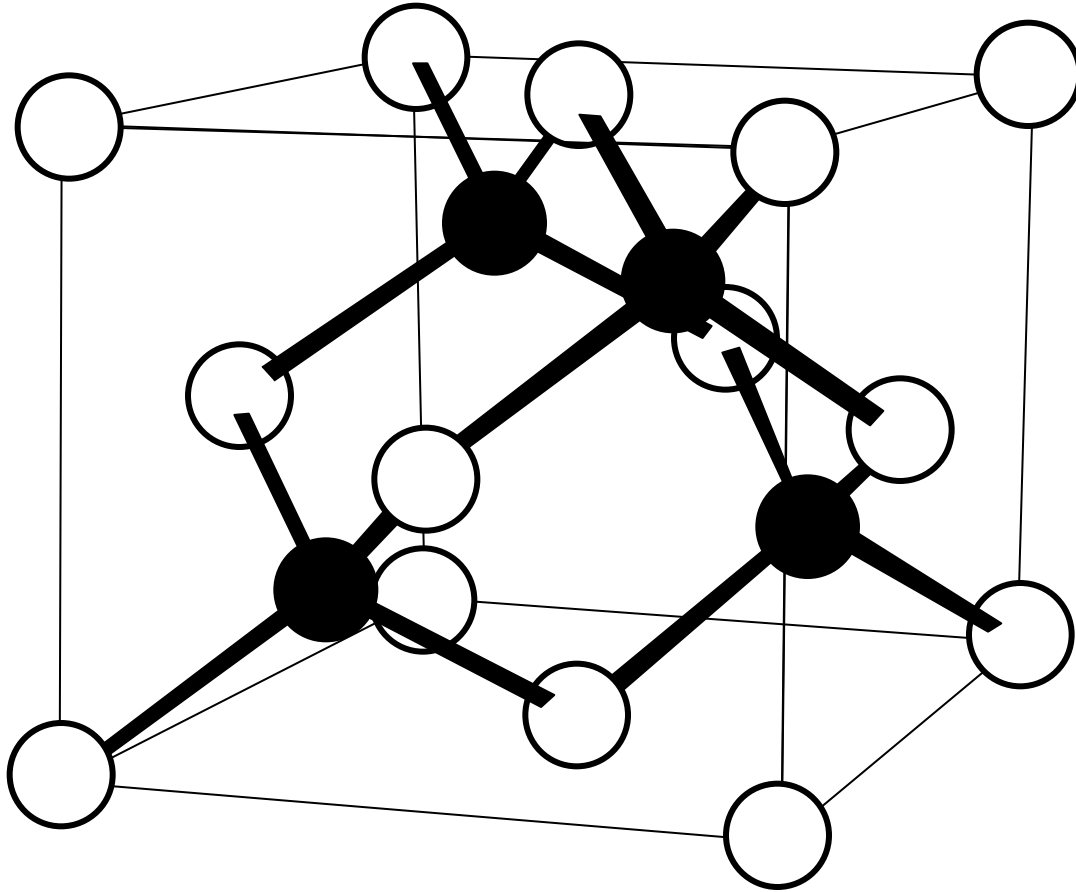
2原子



型構造 zinc blende

ダイヤモンド型構造において、交互に
2種類の原子を配置してできる構造

型構造 zinc blende



まとめ

- **結晶** : 3次元周期構造を持った固体
- **単位胞** : 結晶の周期単位。並進だけで結晶を形成できる。
- いろいろな結晶構造

次回は

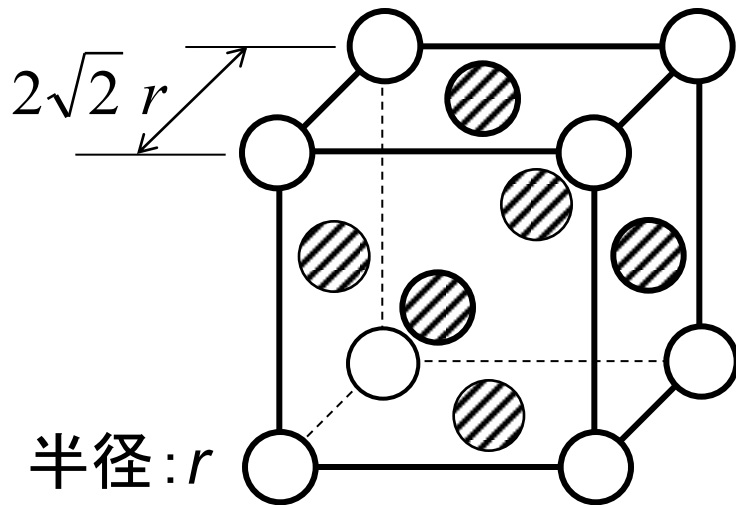
構造解析のための物理と数学
について述べます。

理解を深めるために

空間が原子の球によって占められる割合を充填率といいます。

- (1) 面心立方構造(最密充填)
 - (2) 体心立方構造
 - (3) ダイヤモンド構造
- の充填率を計算してください。

- (1) 面心立方構造(最密充填)



○ $\frac{1}{8}$ 個/単位胞 $\times 8$ 個 = 1 個/単位胞

● $\frac{1}{2}$ 個/単位胞 $\times 6$ 個 = 3 個/単位胞

$$\frac{(1 + 3) \times \frac{4}{3} \pi r^3}{(2\sqrt{2} r)^3} =$$

(2) 体心立方構造

(3) ダイヤモンド構造