

問題3 岩石学・鉱物学 (100点)

以下の問い(問1, 問2)に答えよ。

問1 結晶構造と格子欠陥に関する次の文を読んで、以下の設問(1)～(6)に答えよ。

金属の代表的な結晶構造には、立方最密構造、六方最密構造、体心立方構造があり、そのうち(a)前者2つは最密充填構造である。AX化合物(陽イオンAおよび陰イオンX)の代表的な結晶構造には(b)NaCl型、NiAs型、CsCl型などがある。物質は温度・圧力条件に応じて相転移を起こし、同じ化学組成であっても結晶構造の異なる様々な多形が存在する。

一方で、(c)規則正しい構造をもつ結晶にもその内部には格子欠陥が存在し、物性に影響を与える。例えば結晶の塑性変形は線欠陥である転位のすべり運動によって起こる。金属などの単純な結晶構造では(d)原子の最密面上の最密方向へのすべりが卓越する。NaCl型構造などのイオン結晶では、そのような幾何学的関係よりも(e)すべりに際して同種イオン間隔が近づかないことがより重要な制約となる。一般に金属に比べ、セラミックスや珪酸塩鉱物では、すべり系が少なく、(f)バーガーズベクトルの大きさが大きくなり、すべりに必要な応力も大きくなるので、非常に塑性変形しにくいことが知られている。

- (1) 下線部(a)について、立方最密構造(面心立方格子)の充填率を計算過程も含めて有効数字2桁で解答せよ。
- (2) 下線部(b)について、図1にNaCl型の結晶構造図を示す。この構造では両イオンとも配位数(CN)が6で単位格子に含まれる化学式数(Z)は4である。一方、CsCl型ではCN=8, Z=1である。図1にならってCsCl型の結晶構造図を描け。
- (3) 下線部(c)について、面欠陥のひとつに積層欠陥と呼ばれるものがある。図2に示す立方最密構造の最密面の積み重なりを例に挙げながら、積層欠陥について説明せよ。
- (4) 下線部(d)について、立方最密構造の最密面の面指数と最密方向の方位指数を答えよ。ただし最密方向は最密面上にあるものとする。
- (5) 下線部(e)について、NaCl型構造の(001)面の模式図を示し、この制約のもとに予想されるNaCl型構造のすべり面を答えよ。
- (6) 下線部(f)について、ある結晶中の転位を観察したところ、バーガーズベクトル $\mathbf{b} = [001]$ の転位が結晶の[001]方向に向かって直線状に分布していた。この転位は刃状転位、らせん転位のどちらであるか、理由も含めて答えよ。

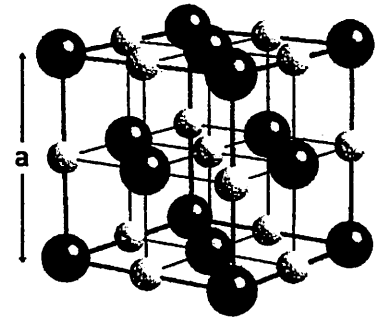


図1 NaCl型構造の単位格子の結晶構造図(格子定数a, 黒丸が陰イオン, 白丸が陽イオン)

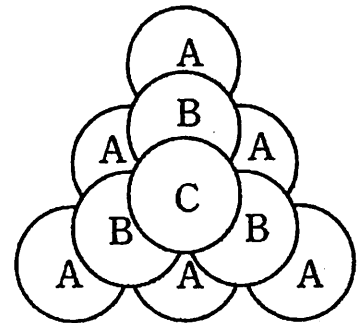


図2 立方最密構造の最密面の原子の積み重なり

(次ページに続く)