

材料強度設計No.3

知能機械システム工学科

坂本東男

Sakamoto.haruo@kochi-tech.ac.jp

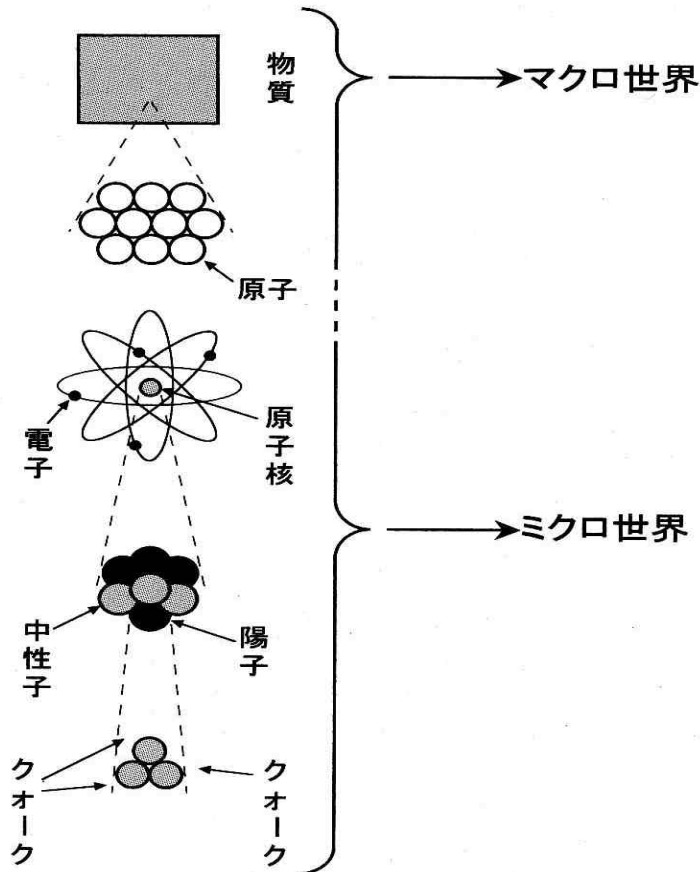
教員室A429、TEL:0887-57-2317

研究室A213、TEL:57-2243

原子構造、結合、結晶構造 (テキスト p15-p37)

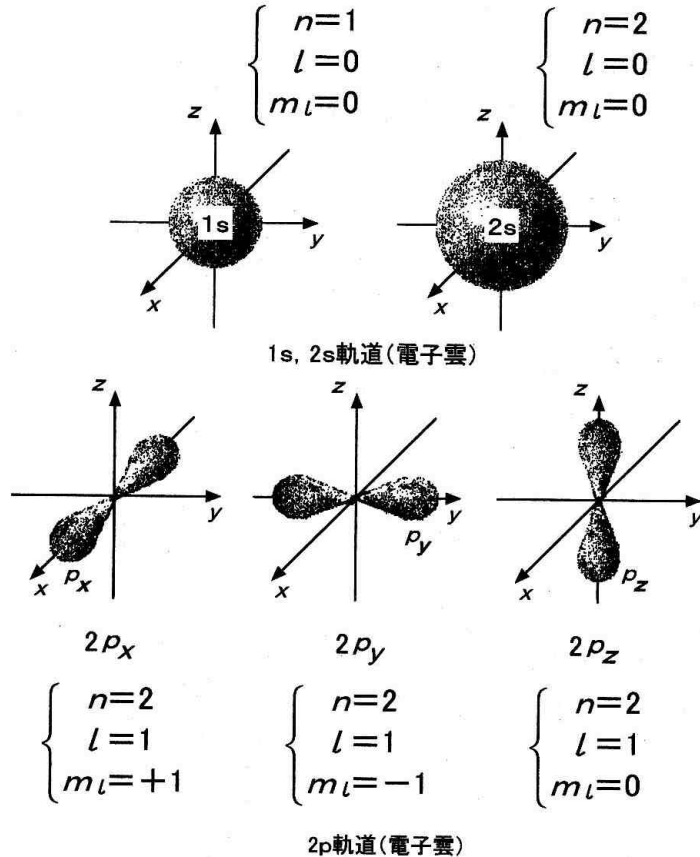
- 2.1 原子構造
- 2.2 原子間の結合力
 - a. 金属結合 b. イオン結合 c. 共有結合 d. 分子結合
- 2.3 周期律表
- 3.1 空間格子と単位格子
- 3.2 金属の結晶構造
 - a. 結晶方向 b. 結晶面
- 3.4 結晶面と結晶方向 (ちょう密六方格子)
- 3.5 面心立方格子とちょう密六方格子の関係
- 3.6 原子半径、格子定数、面密度、線密度
- 3.8 結晶構造の測定 (X線分析)

原子構造



- 原子は原子核と電子より構成される。大きさは 10^{-10}m (10^{-1} ナノメートル、ナノは 10^{-9} 、 10^{-6} がミクロン、 10^{-3} がミリ)
- 陽子の質量は $1.672 \times 10^{-24}\text{g}$ で電子の1,840倍。

電子雲



- 電子の雲は n, l, m_l, m_s の量子数で表される。例えば水素は $n=1, l=0, m_l=0, m_s=1/2$

表 2.1 量子数

名称	記号	規定要素	可能な数値
主量子数	n	原子核からの距離	1, 2, 3, ...
方位量子数	l	電子雲の形	0, 1, 2, 3, ..., $n-1$
磁気量子数	m_l	空間での配向	0, $\pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$
スピン量子数	m_s	電子のスピン向き	$+1/2, -1/2$

図 2.6 量子論原子モデルにおける電子軌道の模式図

電子の配置

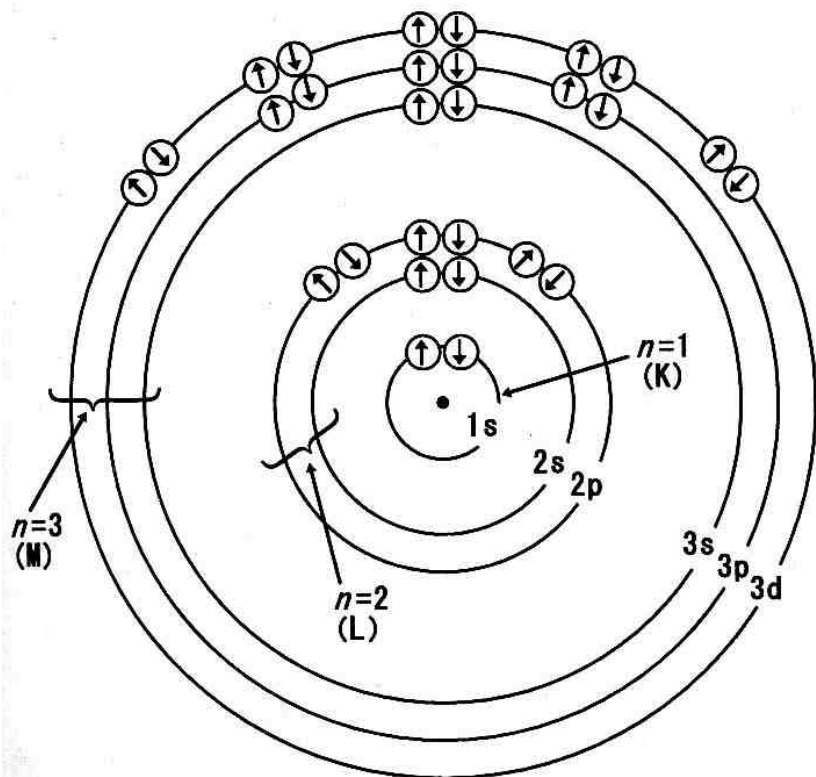
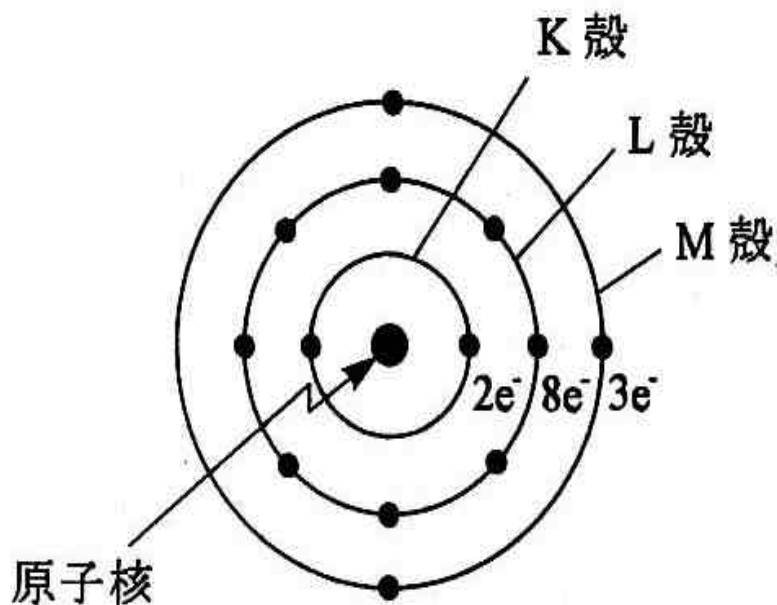


表 2.2 各軌道に存在し得る電子の最大数

n	殻	l	記号	電子の最大数
1	K	0	1s	2 $2 = 2 \times 1^2$
2	L	0	2s	2 } $8 = 2 \times 2^2$ 6
		1	2p	
3	M	0	3s	2 } $18 = 2 \times 3^2$ 6 10
		1	3p	
		2	3d	
4	N	0	4s	2 } $32 = 2 \times 4^2$ 6 10 14
		1	4p	
		2	4d	
		3	4f	

図 2.7 各電子軌道における電子の配置模式図

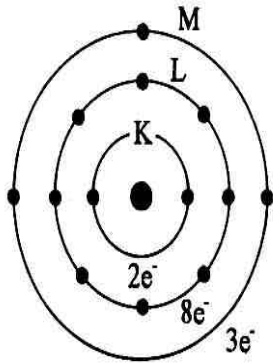
アルミニウムの原子構造



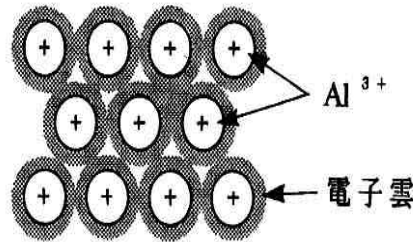
アルミニウムの場合
は $n=1$ (K殻) にs電子
が2つで $2e^-$ 、 $n=2$ (L殻)
にs電子2つとp電子
が6つの $8e^-$ 、 $n=3$ (M
殻) にs電子が2つ、p
電子が1つで $3e^-$ 。

図 2.1 原子構造の例 (アルミニウム)

原子間の結合力 (金属結合)



(a) アルミニウムの原子と電子殻

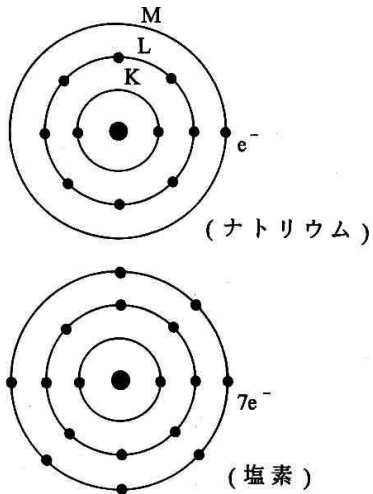


(b) アルミニウムの固体
(面心立方晶であり最稠密な(111)面)

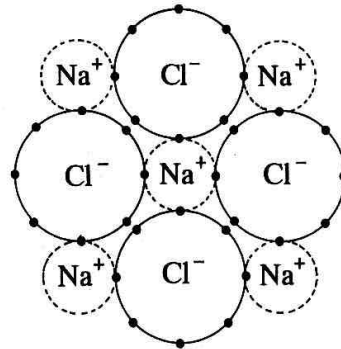
図 2.2 アルミニウム原子

アルミニウムの場合には左のように、各原子から3つの電子が金属全体にいきわたり、電子雲と原子の+イオンと引き合った結合

同 (イオン結合)



(a) ナトリウム原子と塩素原子

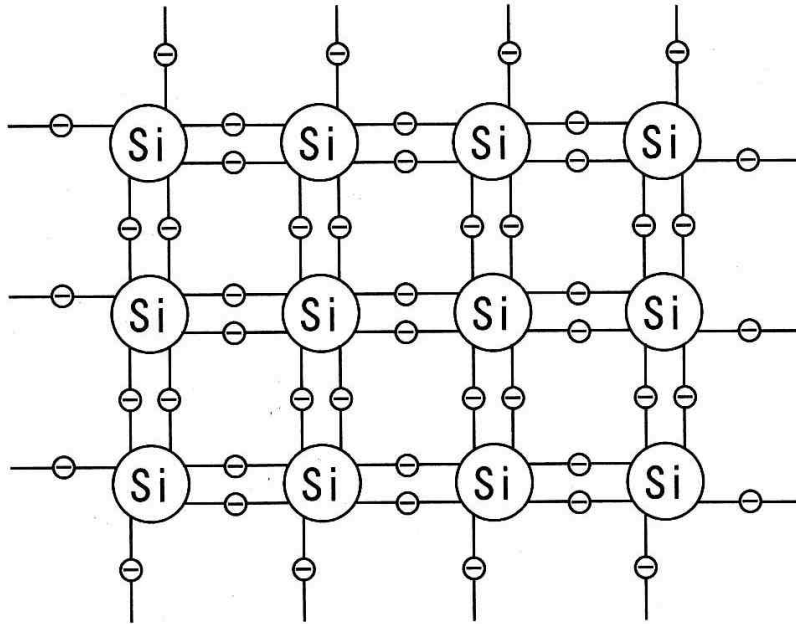


(b) イオン化したナトリウムと塩素

図 2.3 塩化ナトリウムイオンの結合

原子同士が電子をやりとりして正と負のイオンになったときに両イオン間に作用する静電的な力による結合をイオン結合。

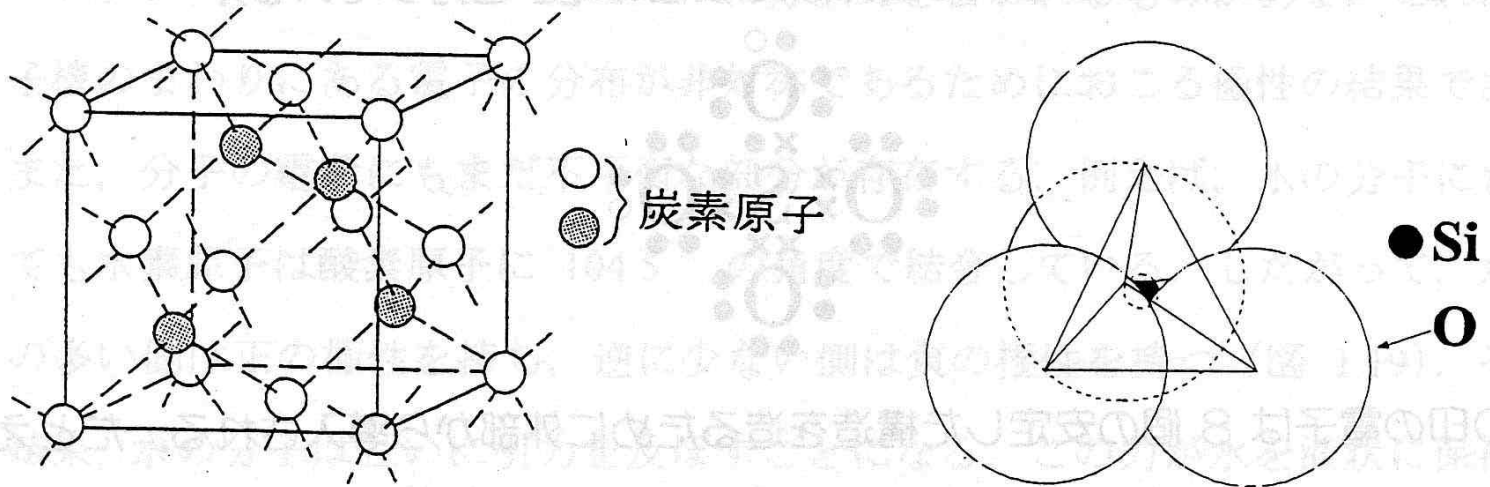
同 (共有結合)



- Siは最外殻に4つの電子を持っている。隣合うSiと1つずつ電子を共有して結合する。共有結合。

図 2.16 シリコン原子の共有結合 (平面概念図)

他の共有結合の例

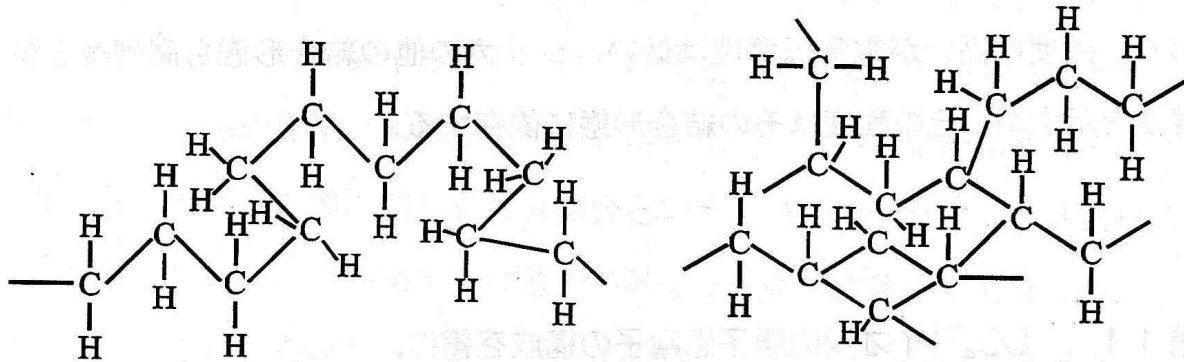


(a) ダイヤモンド単位格子中の C 原子の共有結合（四面体中心の原子を●で示す．全ての原子が共有結合で結ばれ巨大分子を構成しているが，この構造の強さも共有結合に基づくものである．）

(b) SiO_4^{4-} イオンの四面体構造

図 1.17 共有結合

同 (分子結合-ファンデルワールスカ)



(a) 熱可塑性プラスチックの骨格 (b) 熱硬化性プラスチックの網目構造

図 1.18 プラスチック

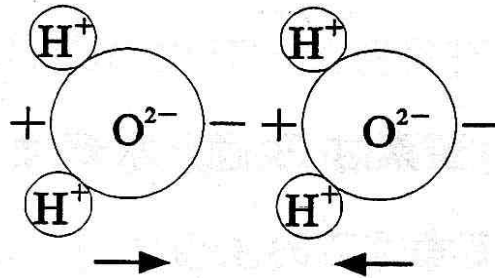


図 1.19 水の分子に働くファン・デル・ワールスカ

分子相
互の静電相
相互作用に基
づく高分子
材料はこの
分子結
合。
分子の電荷
に不平衡が
ある場合に
も電氣的に
引き合う
(水の例)

周期律表

表 2.4 周期律表

周期/族	I a	II a											III b	IV b	V b	VI b	VII b	0	
1	¹ H* 1.00797																		² He 4.0026
2	³ Li 6.939	⁴ Be 9.01212											⁵ B* 10.811	⁶ C* 12.01115	⁷ N 14.0067	⁸ O* 15.9994	⁹ F 18.9984	¹⁰ Ne 20.183	
3	¹¹ Na 22.9898	¹² Mg 24.312	III a	IV a	V a	VI a	VII a	VIII			Ib	II b	¹³ Al 26.9815	¹⁴ Si* 28.086	¹⁵ P 30.9738	¹⁶ Sa 32.064	¹⁷ Cl** 35.453	¹⁸ Ar 39.948	
4	¹⁹ K 39.102	²⁰ Ca 40.08	²¹ Sc 44.956	²² Ti 47.90	²³ V 50.942	²⁴ Cr** 51.996	²⁵ Mn 54.9380	²⁶ Fe** 55.847	²⁷ Co 58.9332	²⁸ Ni 58.71	²⁹ Cu** 63.546	³⁰ Zn 65.37	³¹ Ga 69.72	³² Ge 72.59	³³ As 74.9216	³⁴ Se 78.96	³⁵ Br** 79.904	³⁶ Kr 83.80	
5	³⁷ Rb 85.47	³⁸ Sr 87.62	³⁹ Y 88.905	⁴⁰ Zr 91.22	⁴¹ Nb 92.906	⁴² Mo 95.94	43Tc	⁴⁴ Ru 102.905	⁴⁵ Rh 102.905	⁴⁶ Pd 106.4	⁴⁷ Ag** 107.868	⁴⁸ Cd 112.40	⁴⁹ In 114.82	⁵⁰ Sn 72.59	⁵¹ Sb 121.75	⁵² Te 127.60	⁵³ I 126.9044	⁵⁴ Xe 131.30	
6	⁵⁵ Cs 132.905	⁵⁶ Ba 137.34	ランタノイド 57-71	⁷² Hf 178.49	⁷³ Ta 180.948	⁷⁴ W 183.85	⁷⁵ Re 186.2	⁷⁶ Os 190.2	⁷⁷ Ir 192.2	⁷⁸ Pt 195.09	⁷⁹ Au 196.967	⁸⁰ Hg 200.59	⁸¹ Tl 204.37	⁸² Pb 207.19	⁸³ Bi 208.980	⁸⁴ Po	⁸⁵ At	⁸⁶ Rn	
7	⁸⁷ Fr	⁸⁸ Ra	アクチノイド 89-103	(Th)	(Pa)	(U)													

ランタノイド	⁵⁷ La 138.91	⁵⁸ Ce 140.12	⁵⁹ Pr 140.90 7	⁶⁰ Nd 144.24	⁶¹ Pm	⁶² Sm 150.35	⁶³ Eu 151.96	⁶⁴ Gd 157.25	⁶⁵ Tb 158.924	⁶⁶ Dy 162.50	⁶⁷ Ho 164.930	⁶⁸ Er 167.26	⁶⁹ Tm 168.934	⁷⁰ Yb 173.04	⁷¹ Lu 174.97
アクチノイド	⁸⁹ Ac	⁹⁰ Th 232.038	⁹¹ Pa	⁹² U 238.03	⁹³ Np	⁹⁴ Pu	⁹⁵ Am	⁹⁶ Cm	⁹⁷ Bk	⁹⁸ Cf	⁹⁹ Es	¹⁰⁰ Fm	¹⁰¹ Md	¹⁰² No	¹⁰³ Lr

注) *自然界における同位体組成変動のため、これらの元素の原子量は次の範囲で変わることが観測された。

H ±0.00001 B ±0.003 C ±0.00005 O ±0.0001 Si ±0.001 S ±0.003

**これらの元素の原子量は実験上の理由により次の範囲で不確定である。

Cl ±0.001 Cr ±0.001 Fe ±0.003 Cu ±0.001 Br ±0.001 Ag ±0.001

その他の元素では最後の桁で±0.5まで信頼できる。

空間格子と単位格子

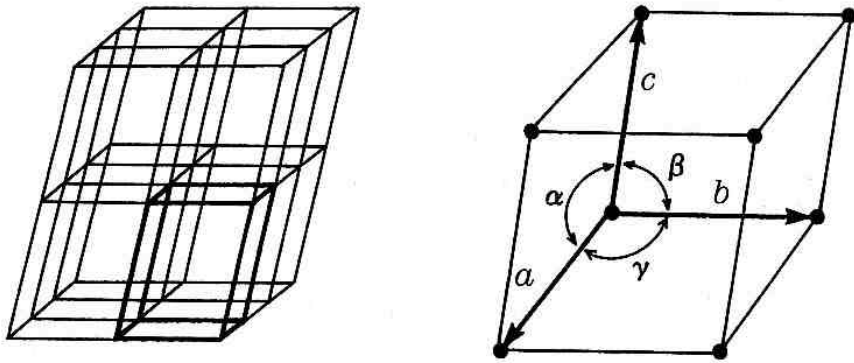
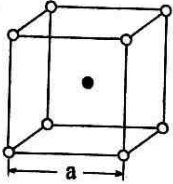


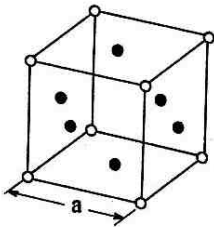
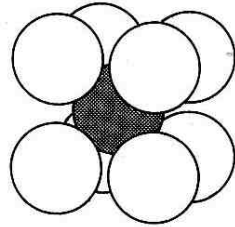
図 3.1 空間格子と単位格子 (単位胞)

- 金属原子は一定の間隔で規則的に配列している。これを結晶格子あるいは空間格子 (space lattice) と言う
- A, b, c を稜とするような平衡六面体を単位格子 (unit lattice) あるいは単位胞 (unit cell)

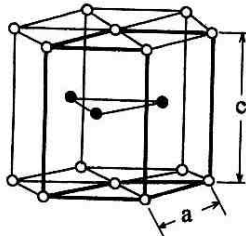
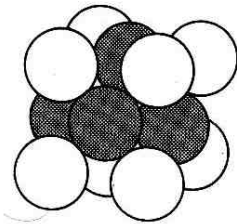
金属の結晶構造



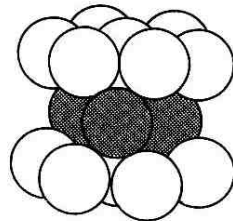
(a) 体心立方格子 (BCC)



(b) 面心立方格子 (FCC)



(c) 稠密六方格子 (HCP)



- 金属の70%は3種類の単純な構造を持つ。
- 体心立方格子 (body centered cubic-BCC)
- 面心立方格子 (face centered cubic-FCC)
- ちょう密六方格子 (hexagonal close packed-HCP)

図 3.2 BCC, FCC, HCP の格子構造

結晶方向

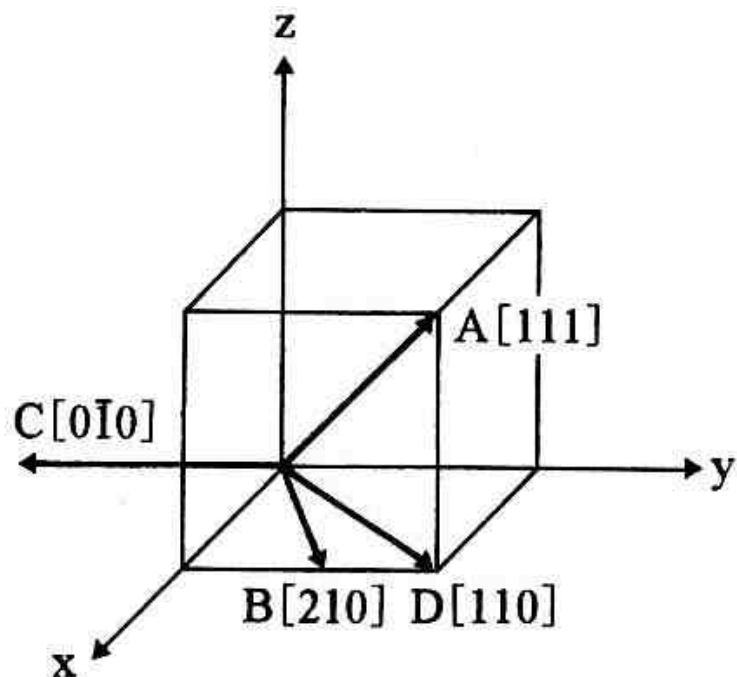


図 3.3 結晶方向の表示

- 格子の方向は原点よりその方向に示すベクトルを描き、その各軸方向の最も簡単な正数比で表す。
- 例えばB点の座標は1,1/2,0なので正数比にすれば[210]となる。

結晶面

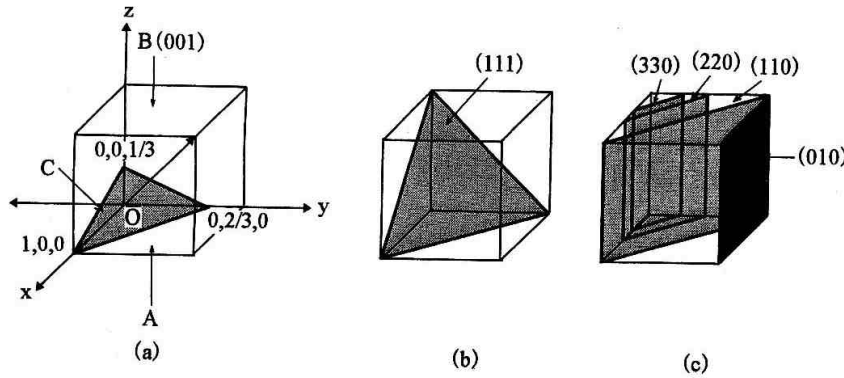
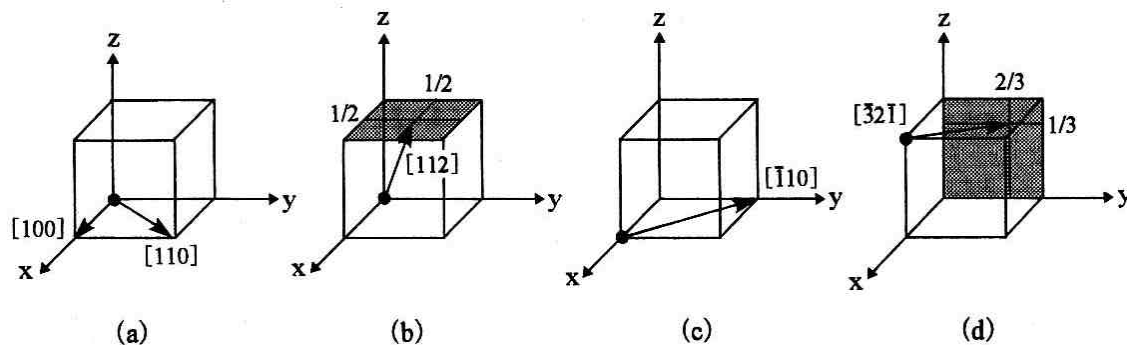


図 3.4 結晶面の表示

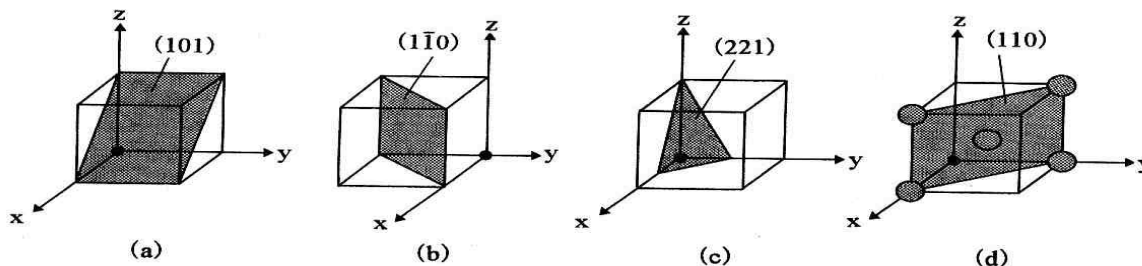
- 例えば、面cのx,y,z軸との交点を $a_1(1/a)$, $b_1(1/b)$, $c_1(1/c)$ として l, m, n を求めると $(1, 2/3, 1/3)$ である。これの逆数比 $(1/1, 3/2, 3/1)$ 簡単な正数比に直すと (236) となる。これが結晶面の表示。

結晶方向、結晶面の例



●印は原点を示す。

図 3.6



●印は原点を示す。

交点 $(1,0,1)$, $(1,0,0)$
 $(0,1,1)$, $(0,1,0)$, $(1/2, 1/2, 1/2)$

図 3.5

ちょう密六方格子の結晶面と結晶方向

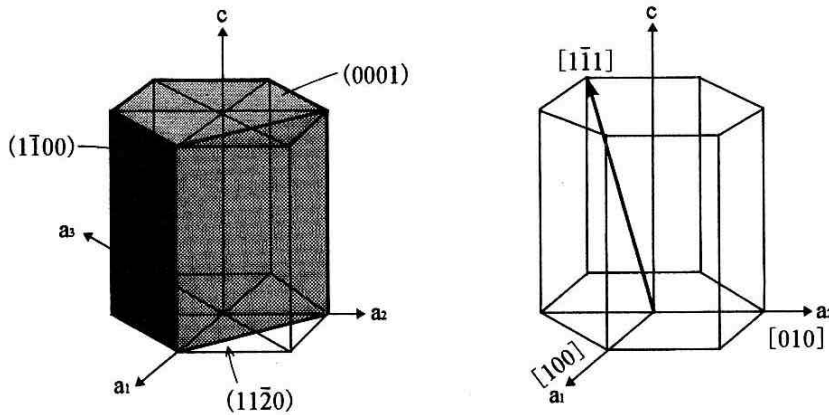
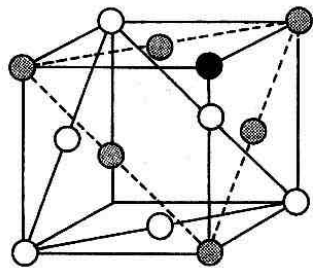


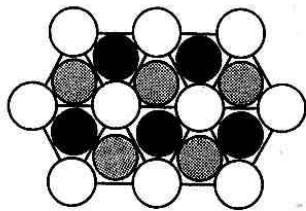
図 3.7 稠密六方格子の結晶面と結晶方向の表示

- 左図の如く平面内での3軸(a_1, a_2, a_3)と z 方向に c 軸をとる。
- 上面は a_1, a_2, a_3 とも無限大で $c=1$ なので(0001)
- 結晶の方向は120度をなす a_1, a_2 と c の座標で表せる。

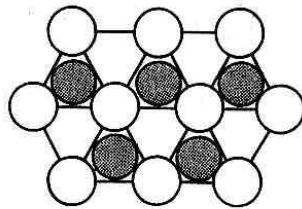
面心立方格子とちょう密六方格子



- 1段目
- 2段目
- 3段目



(a) 面心立方格子

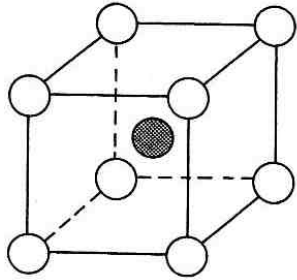


(b) 稠密六方格子

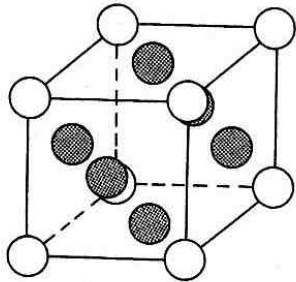
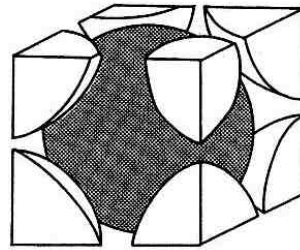
図 3.8 面心六方格子と稠密六方格子の相互関係

- FCCとHCPは球を最も密に重ねられた構造である。
- FCCは左上の図に示すように斜めから見ると1,2,3段目が順次重なっている。
ABCABC...
- HCPは上から見た構造でABABAB...

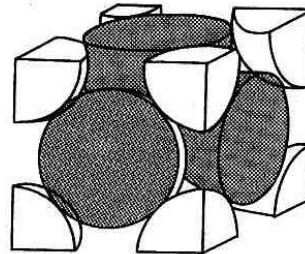
単位格子内の原子の数



(a) BCC



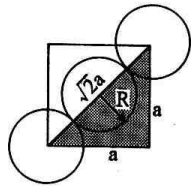
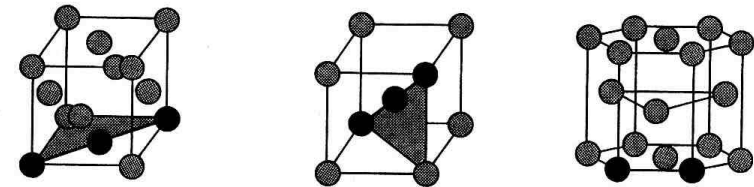
(b) FCC



- BCCは格子内に1個、角の原子数は $8 \times 1/8 = 1$ で、合計2個
- 同様にFCCは4個
- HCPは6個である。

図 3.9 BCC, FCC の単位格子に含まれる原子の数

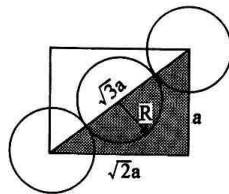
原子半径R、格子定数a、単位格子の体積 a^3



$$4R = a\sqrt{2} = \text{対角線の長さ}$$

$$R = a\sqrt{2}/4$$

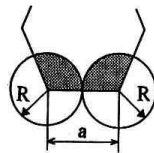
(a) FCC 単位格子



$$4R = a\sqrt{3}$$

$$R = a\sqrt{3}/4$$

(b) BCC 単位格子



$$2R = a$$

$$R = a/2$$

(c) HCP 単位格子

- 左に示すように原子半径が機知であれば、格子定数a、単位格子の体積 a^3 が計算出来る。

図 3.10 原子半径の計算

面密度

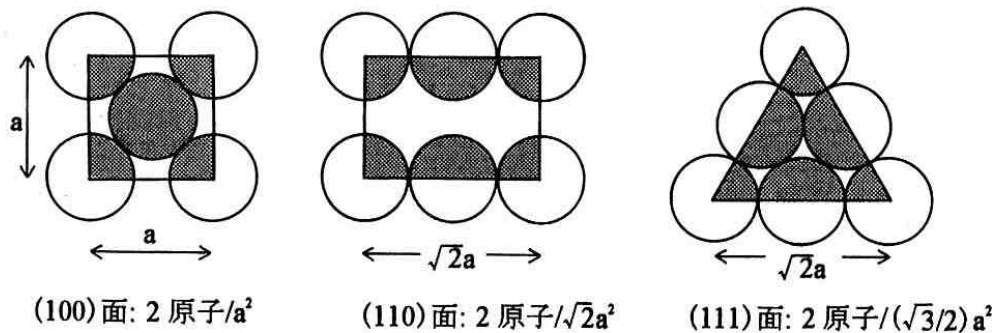
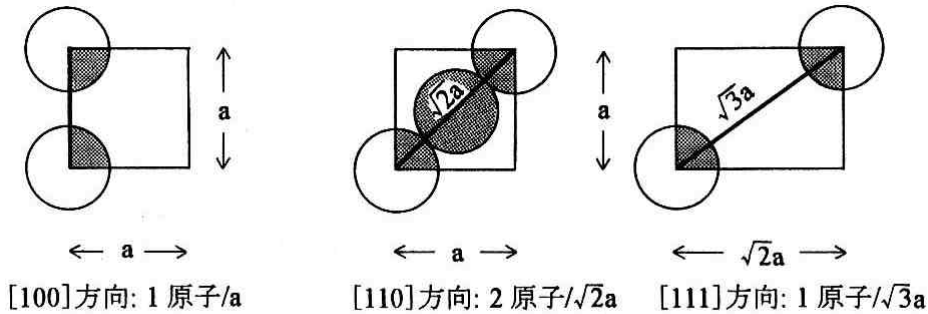


図 3.11 FCC 単位格子の面密度

- 面密度の計算も 結晶構造毎にまた面毎に計算出来る。
- 左はFCCの例である。

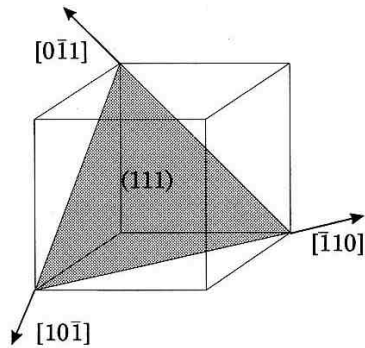
線密度



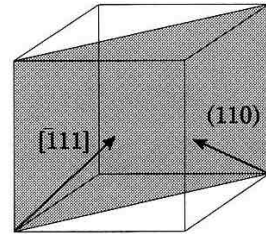
原子の線密度も左
FCCの例のように
算出来る。

図 3.12 FCC 単位格子の線密度

すべり面とすべり方向



(a) FCCのすべり系(111) $\langle 110 \rangle$



(b) BCCのすべり系(110) $\langle 111 \rangle$

[111]

- ・ FCCとBCCのすべり面、すべり方向である。
- ・ 原子が最も重点された面が多い。

図 3.13 FCC 結晶, BCC 結晶のすべり面とすべり方向

結晶構造の測定(X線分析)

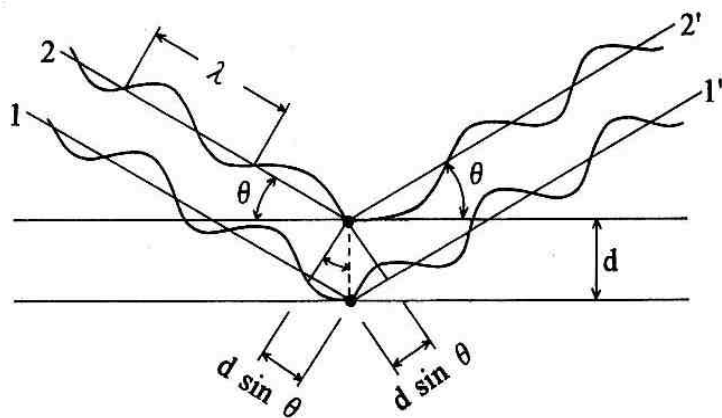


図 3.16 X線の回折条件 ($d_{100}=a$, $d_{110}=a/\sqrt{2}$,
 $d_{111}=a/\sqrt{3}$)

回折現象で $n\lambda=2d\sin\theta$
(ブラッグの式)を満たす関係より λ と θ より d を求める。