

金属材料

Metallic Materials

工業材料の用途による分類

1. 構造材料 (structural materials)

構造物を構成し，内外から受ける**力学的負荷**に耐える材料．一般に，機械的性質（降伏応力，破壊強度，き裂伝ぱ，座屈に対する抵抗等）で評価される．

2. 機能材料 (functional materials)

非構造材料 (non-structural materials) とも呼ばれ，**電氣的，磁氣的，熱的，化学的，光学的特性**等の強度以外の因子で評価される．

機能例：光から電気へのエネルギー変換，記憶・記録，物質分離，物質認識，触媒，感光

工業材料の物質および物質構成による分類

金属材料 (metallic materials)

非金属材料 (non-metallic materials)

無機材料 (inorganic materials)

セラミックス (ceramics) , ガラス (glass)

有機材料 (organic materials)

プラスチック (plastics) , ゴム (rubber)

複合材料 (composite materials)

繊維強化プラスチック

(Fiber Reinforced Plastics; FRP) ,

繊維強化金属 (Fiber Reinforced Metals; FRM)

元素の周期表 (periodic table)

周期	アルカリ金属		族														ハロゲン	希ガス
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	¹ H 水素																	² He ヘリウム
2	³ Li リチウム	⁴ Be ベリリウム				金属	半導体	非金属					⁵ B ホウ素	⁶ C 炭素	⁷ N 窒素	⁸ O 酸素	⁹ F フッ素	¹⁰ Ne ネオン
3	¹¹ Na ナトリウム	¹² Mg マグネシウム											¹³ Al アルミニウム	¹⁴ Si ケイ素	¹⁵ P リン	¹⁶ S 硫黄	¹⁷ Cl 塩素	¹⁸ Ar アルゴン
4	¹⁹ K カリウム	²⁰ Ca カルシウム	²¹ Sc スカンジウム	²² Ti チタン	²³ V バナジウム	²⁴ Cr クロム	²⁵ Mn マンガン	²⁶ Fe 鉄	²⁷ Co コバルト	²⁸ Ni ニッケル	²⁹ Cu 銅	³⁰ Zn 亜鉛	³¹ Ga ガリウム	³² Ge ゲルマニウム	³³ As ヒ素	³⁴ Se セレン	³⁵ Br 臭素	³⁶ Kr クリプトン
5	³⁷ Rb ルビジウム	³⁸ Sr ストロンチウム	³⁹ Y イットリウム	⁴⁰ Zr ジルコニウム	⁴¹ Nb ニオブ	⁴² Mo モリブデン	⁴³ Tc テクネチウム	⁴⁴ Ru ルテニウム	⁴⁵ Rh ロジウム	⁴⁶ Pd パラジウム	⁴⁷ Ag 銀	⁴⁸ Cd カドミウム	⁴⁹ In インジウム	⁵⁰ Sn スズ	⁵¹ Sb アンチモン	⁵² Te テルル	⁵³ I ヨウ素	⁵⁴ Xe キセノン
6	⁵⁵ Cs セシウム	⁵⁶ Ba バリウム	⁵⁷⁻⁷¹ L ランタノイド	⁷² Hf ハフニウム	⁷³ Ta タンタル	⁷⁴ W タングステン	⁷⁵ Re レニウム	⁷⁶ Os オスミウム	⁷⁷ Ir イリジウム	⁷⁸ Pt 白金	⁷⁹ Au 金	⁸⁰ Hg 水銀	⁸¹ Tl タリウム	⁸² Pb 鉛	⁸³ Bi ビスマス	⁸⁴ Po ポロニウム	⁸⁵ At アスタチン	⁸⁶ Rn ラドン
7	⁸⁷ Fr フランシウム	⁸⁸ Ra ラジウム	⁸⁹⁻¹⁰³ A アクチノイド	¹⁰⁴ Rf ラザホーニウム	¹⁰⁵ Db ドブニウム	¹⁰⁶ Sg シーボーギウム	¹⁰⁷ Bh ボーリウム	¹⁰⁸ Hs ハッシウム	¹⁰⁹ Mt マイタネリウム									

ランタノイド

⁵⁷ L ランタノイド	⁵⁷ La ランタン	⁵⁸ Ce セリウム	⁵⁹ Pr プラセオジウム	⁶⁰ Nd ネオジウム	⁶¹ Pm プロメチウム	⁶² Sm サマリウム	⁶³ Eu ユロピウム	⁶⁴ Gd ガドリウム	⁶⁵ Tb テルビウム	⁶⁶ Dy ジスプロシウム	⁶⁷ Ho ホルミウム	⁶⁸ Er エルビウム	⁶⁹ Tm ツリウム	⁷⁰ Yb イットルビウム	⁷¹ Lu ルテチウム
---------------------------	--------------------------	--------------------------	-----------------------------	---------------------------	----------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	-----------------------------	---------------------------	---------------------------	--------------------------	-----------------------------	---------------------------

アクチノイド

⁸⁹ A アクチノイド	⁸⁹ Ac アクチニウム	⁹⁰ Th トリウム	⁹¹ Pa プロトアクチニウム	⁹² U ウラン	⁹³ Np ネプツニウム	⁹⁴ Pu プルトニウム	⁹⁵ Am アメリシウム	⁹⁶ Cm キュリウム	⁹⁷ Bk バークリウム	⁹⁸ Cf カリホルニウム	⁹⁹ Es アインスタニウム	¹⁰⁰ Fm フェルミニウム	¹⁰¹ Md メンデレビウム	¹⁰² No ノーベリウム	¹⁰³ Lr ローレンシウム
---------------------------	----------------------------	--------------------------	-------------------------------	------------------------	----------------------------	----------------------------	----------------------------	---------------------------	----------------------------	-----------------------------	------------------------------	------------------------------	------------------------------	-----------------------------	------------------------------

元素の地殻存在度

高存在度

酸素O	46.60
ケイ素Si	27.72
アルミニウムAl	8.13
鉄Fe	5.00
カルシウムCa	3.63
ナトリウムNa	2.83
カリウムK	2.59
マグネシウムMg	2.09
チタンTi	0.44
クロムCr	0.01

酸化物で存在

炭酸塩もしくは塩化物

ニッケルNi
亜鉛Zn
銅Cu
コバルトCo
モリブデンMo
タングステンW
銀Ag
白金Pt
金Au

硫化物で存在

単体で存在

質量比 (mass%)

低存在度

参考：日本金属学会編，改訂3版 金属データブック，丸善（2000）

金属材料の一般的特徴

金属結合 (metallic bond)

1. 金属光沢を有する.

自由電子 (free electron) が光を反射する.

2. 電気および熱の伝導性が高い.

自由電子の移動により伝導する.

3. 伸展性や延性が高く, 塑性加工が可能である.

金属に力が加わっても, 原子の動きとともに自由電子も動くことで, 原子と原子の間の結合が切れることなく (壊れることなく) ずれる (変形する) .

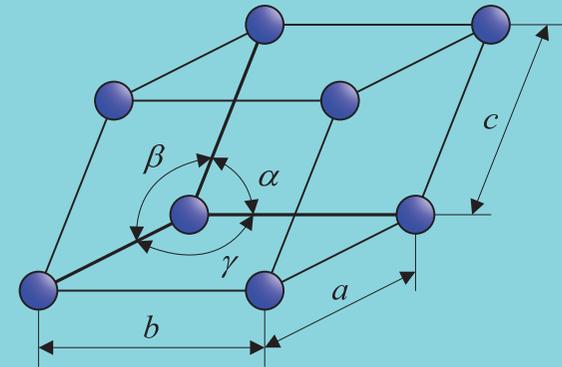
* 自由電子が接着剤の役割を果たして集団的な共有結合の形を取っている.

金属の結晶構造

Crystal Structure of Metals

結晶構造 (crystal structure)

空間格子 (space lattice)



結晶中の原子配列を3次元的に周期配列した格子で表したとき、その結晶空間を分割している格子。格子は一義的に決まらない。

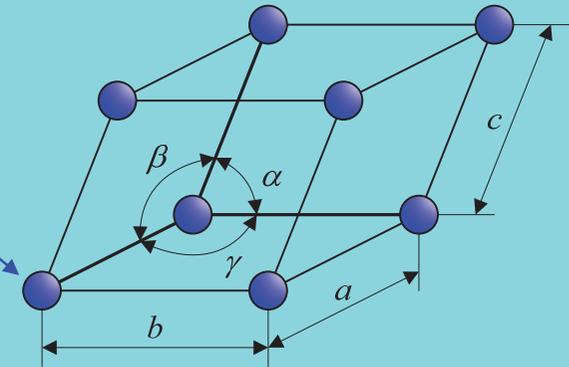
単位格子 (unit lattice) または単位胞 (unit cell)

空間格子を構成している最小単位の**平行六面体**。軸長 (a, b, c) と軸角 (α, β, γ) で表され、これらを**格子定数 (lattice constant)** という。

格子点 (lattice point) の性質

格子点 (lattice point)

格子点



単位格子の隅の点. どの格子点に関してもそれを取り巻く空間的な状況は同一.

||

同等な周囲 (identical surroundings)

格子点周囲の原子配列は, どの格子点に関しても同じ.

必ずしも格子点と原子 1 個を対応させる必要はない. 格子点 \leftrightarrow 1 対の原子や格子点 \leftrightarrow 分子の対応も可能.

基本となる格子

基本単位格子 (primitive unit lattice)

格子の体積が最小で、それに属する格子点の数や各辺の長さが最小になるように選んだ単位格子。基本単位格子の中に含まれる格子点は1つである。



慣用的単位格子 (conventional unit lattice)

ブラベー格子のように慣用的に用いられる単位格子。単位格子の中に含まれる格子点は1つと限らない。

結晶系 (crystal system) その1

結晶系は、以下に示す **7種類** が基本となる。

三斜晶系 (triclinic system)

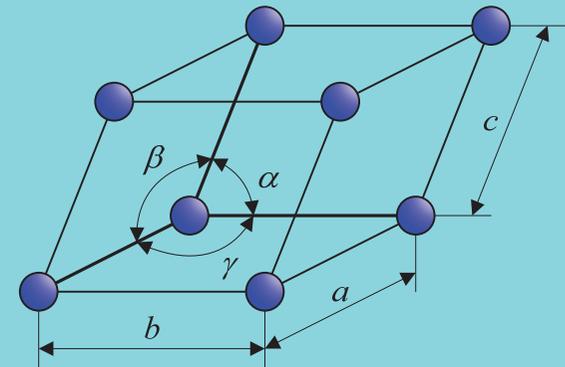
$$(a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma)$$

単斜晶系 (monoclinic system)

$$(a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \pi/2 \neq \gamma)$$

斜方晶系 (orthorhombic system)

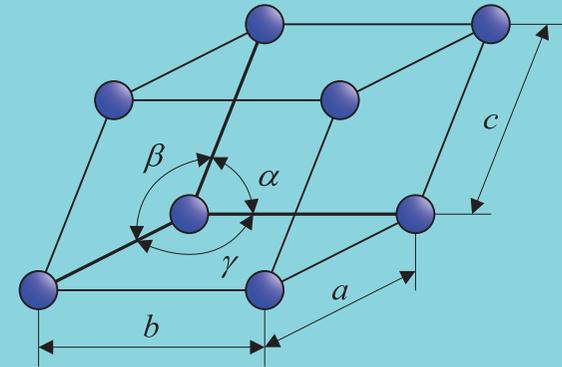
$$(a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = \pi/2)$$



結晶系 (crystal system) その2

正方晶系 (tetragonal system)

$$(a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = \pi/2)$$



立方晶系 (cubic system)

$$(a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = \pi/2)$$

六方晶系 (hexagonal system)

$$(a = b \neq c, \alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 2\pi/3)$$

三方晶系 (trigonal system)

$$(a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq \pi/2)$$

ブラベー格子

体心立方格子

面心立方格子

最密六方格子

基本単位格子

ブラベー格子 (Bravais lattice)

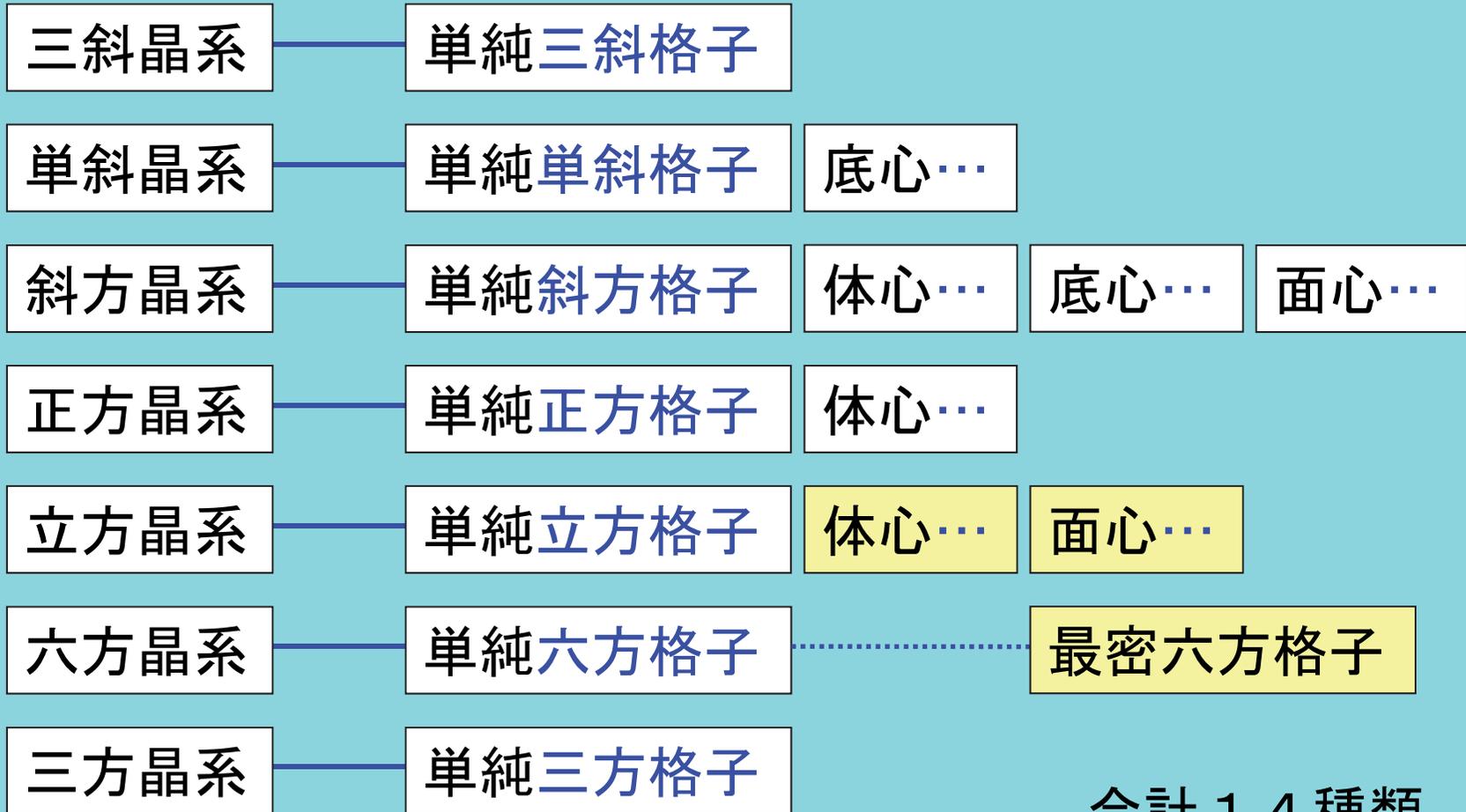
基本単位格子 (primitive unit lattice) の中心 (体心) や上下面の中心 (底心), 各面の中心 (面心) のように, 元の単位格子の対称性を崩さないように格子点を加えた格子. 全部で **14種類** 存在する.

体心格子 (body-centered lattice)

底心格子 (base-centered lattice)

面心格子 (face-centered lattice)

ブラベー格子 (Bravais lattice) の種類



合計 14 種類

単位格子 (unit lattice) の特性値 (その1)

格子定数 (lattice constant)

単位格子の外形や大きさを記述する定数の組. 単位格子が立方体である立方晶系では, 1 辺の長さ a のみで表す.

最近接原子 (nearest neighbor)

互いに接触している原子.

近接原子間距離 (inter atomic distance)

最近接原子間の距離.

単位格子 (unit lattice) の特性値 (その2)

配位数 (coordination number)

1 個の原子に注目して考えたとき, その原子の周囲にある最近接原子の数.

充填率 (Atomic Packing Factor; APF)

単位格子内で原子の占める体積割合.

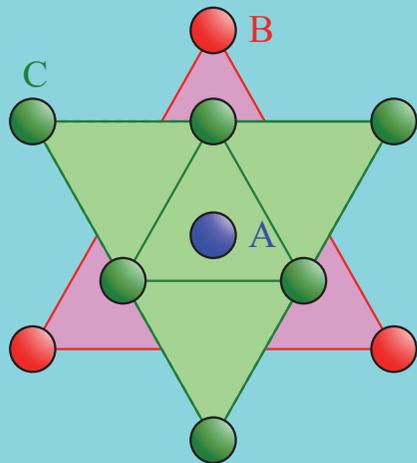
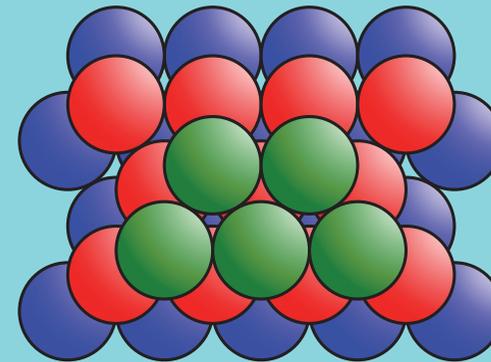
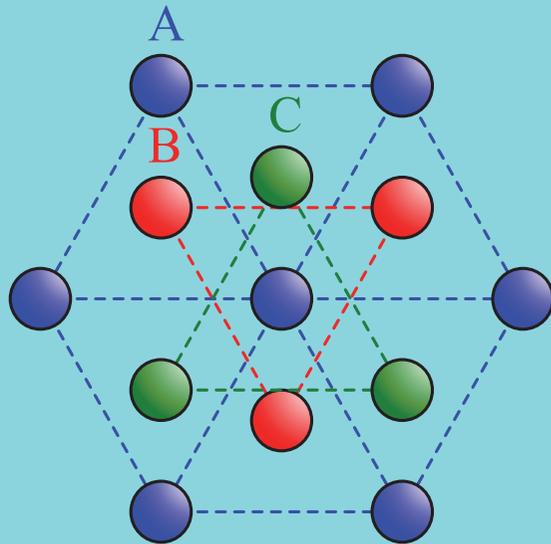
代表的な単位格子

面心立方格子 (face-centered cubic lattice; fcc)

最密六方格子 (hexagonal close-packed lattice; hcp)

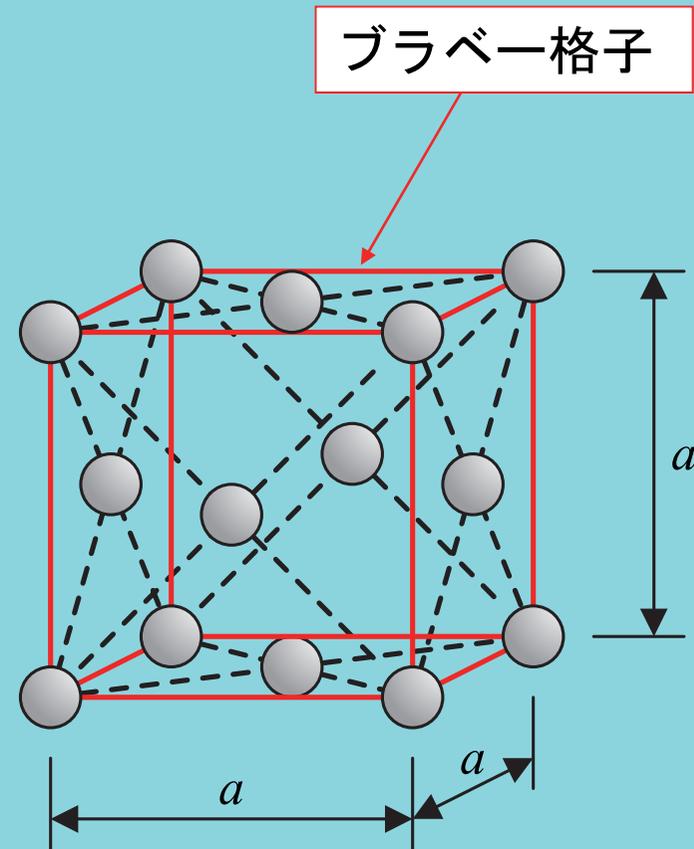
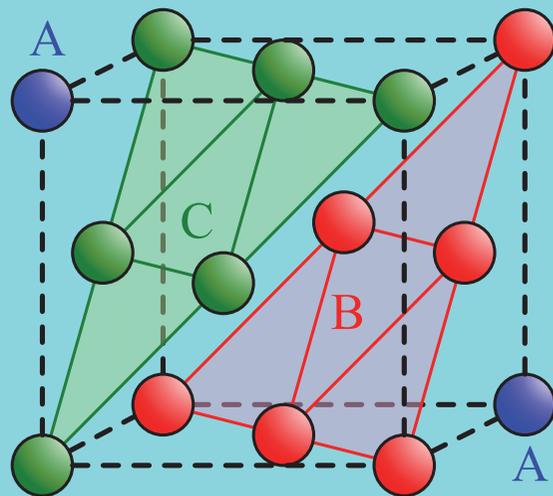
体心立方格子 (body-centered cubic lattice; bcc)

面心立方格子 (face-centered cubic lattice) の積層

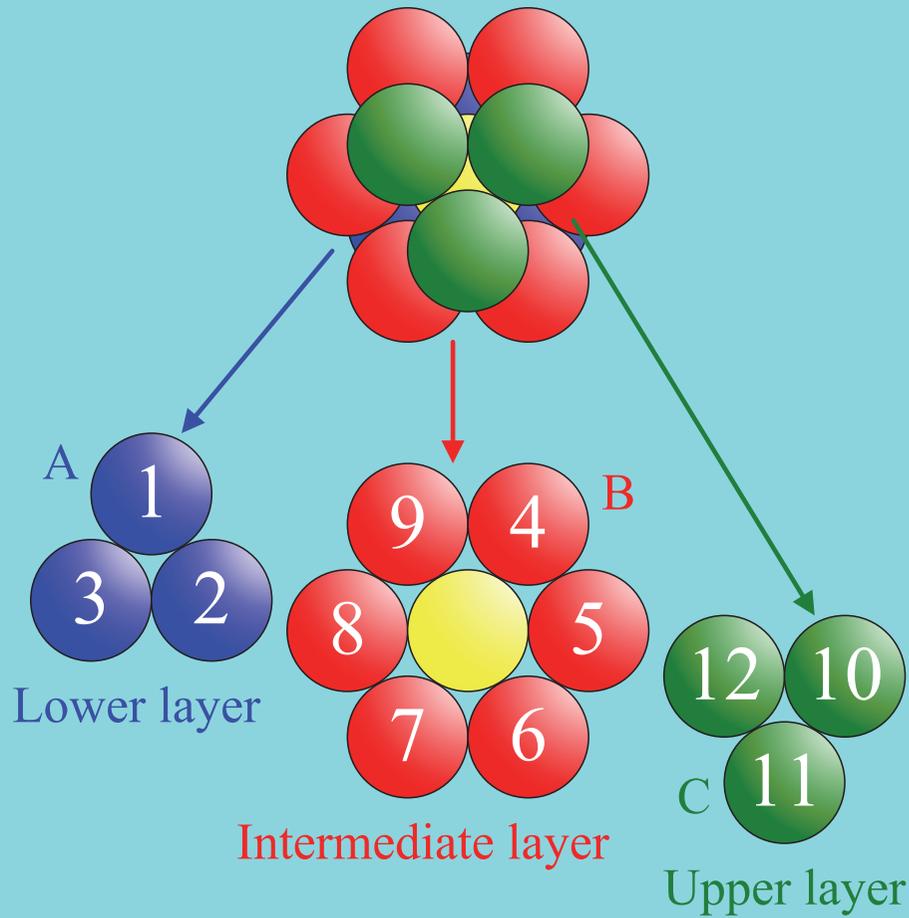


正三角形の配列で、積層
順序がABCABCABC.

面心立方格子 (face-centered cubic lattice) の原子配置

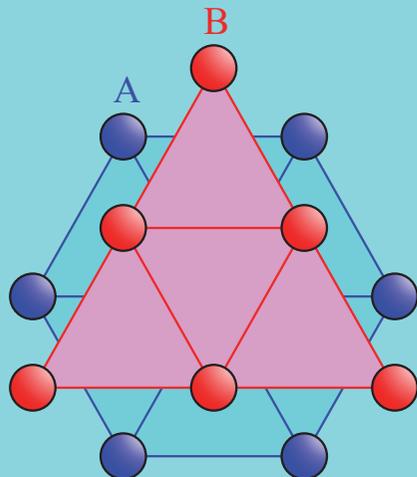
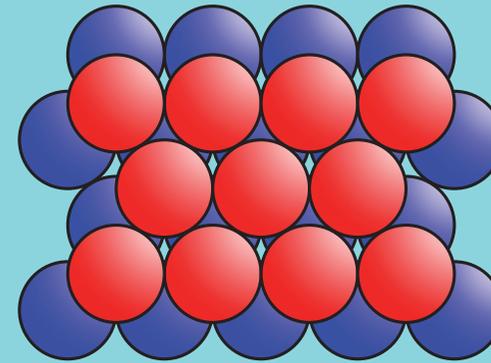
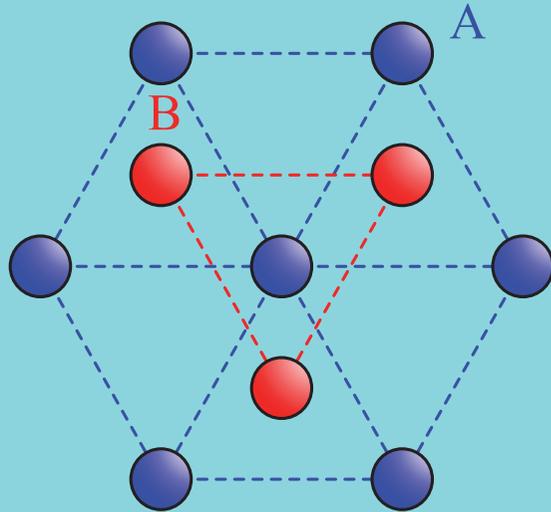


面心立方格子 (face-centered cubic lattice) の最近接原子



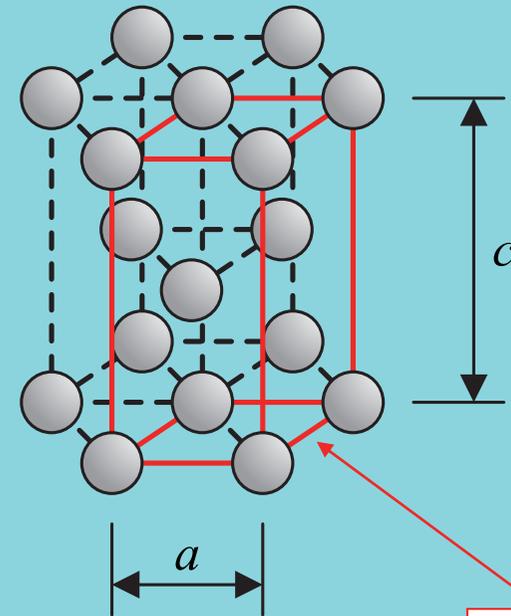
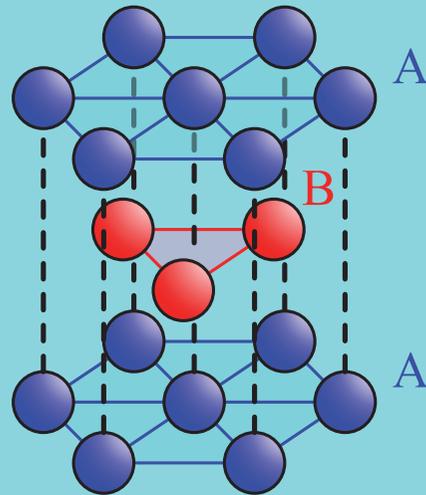
面心立方格子の
配位数は 12.

最密六方格子 (hexagonal close-packed lattice) の積層



正三角形の配列で，積層順序がABABAB. ABCの配列にすると，面心立方格子になる.

最密六方格子 (hexagonal close-packed lattice) の原子配置



単位格子

軸比 (axial ratio)

c/a の値. 理想的な場合 (各原子が球形と見なせる場合) には, 軸比が $1.633 = \sqrt{8/3}$ となる.

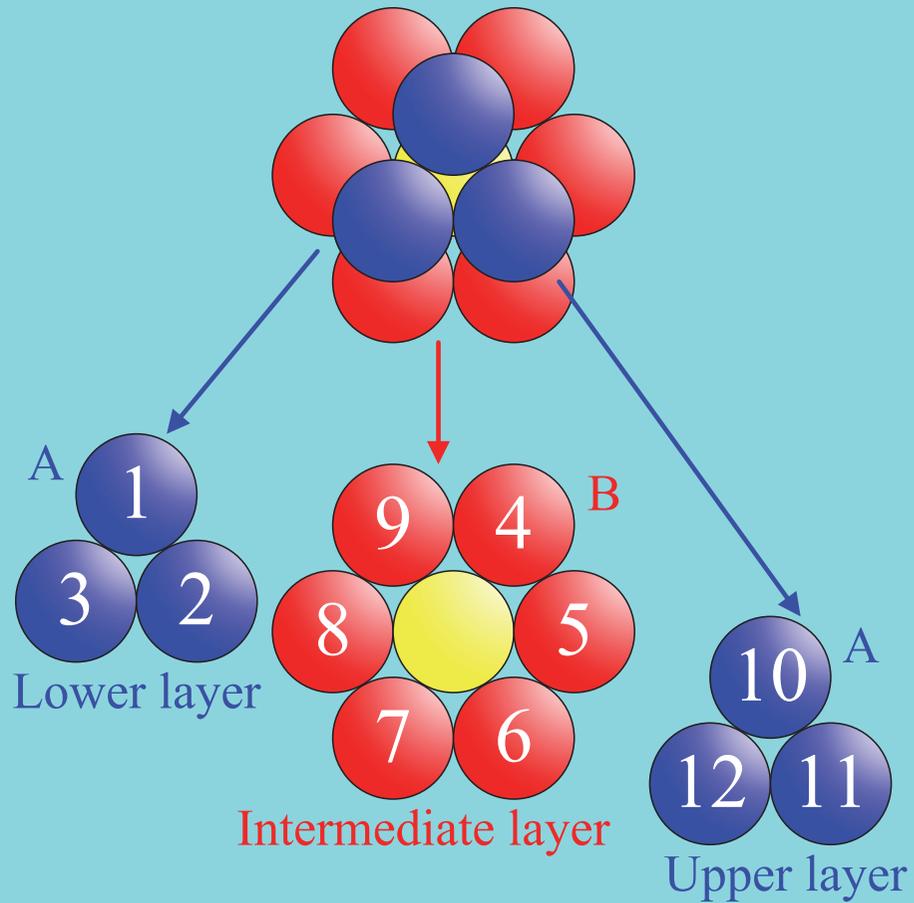
最密六方格子の軸比 c/a

金 属	軸 比
Be	1.568
Hf	1.5811
Zr	1.593
Ti	1.598
Co	1.623
Mg	1.623
理 想	1.633
Zn	1.856
Cd	1.8856

ほとんどの物質において結合に偏りがある。

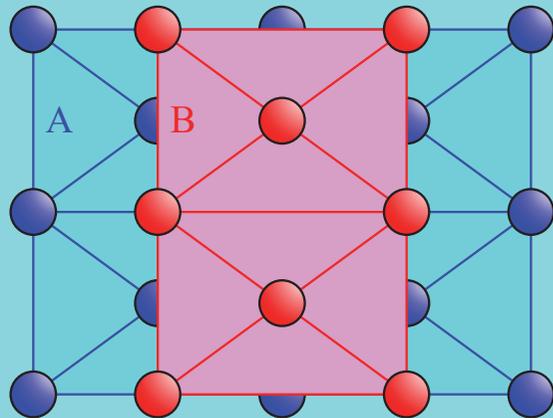
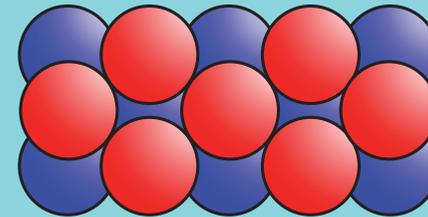
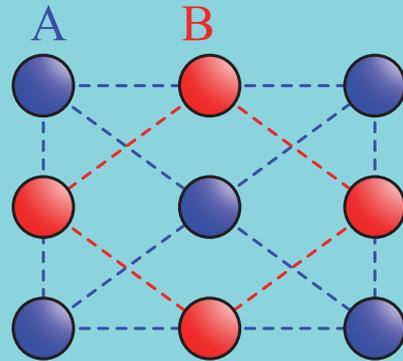
各原子を球と見なして単純に積み上げて計算される値

最密六方格子 (hexagonal close-packed lattice) の最近接原子



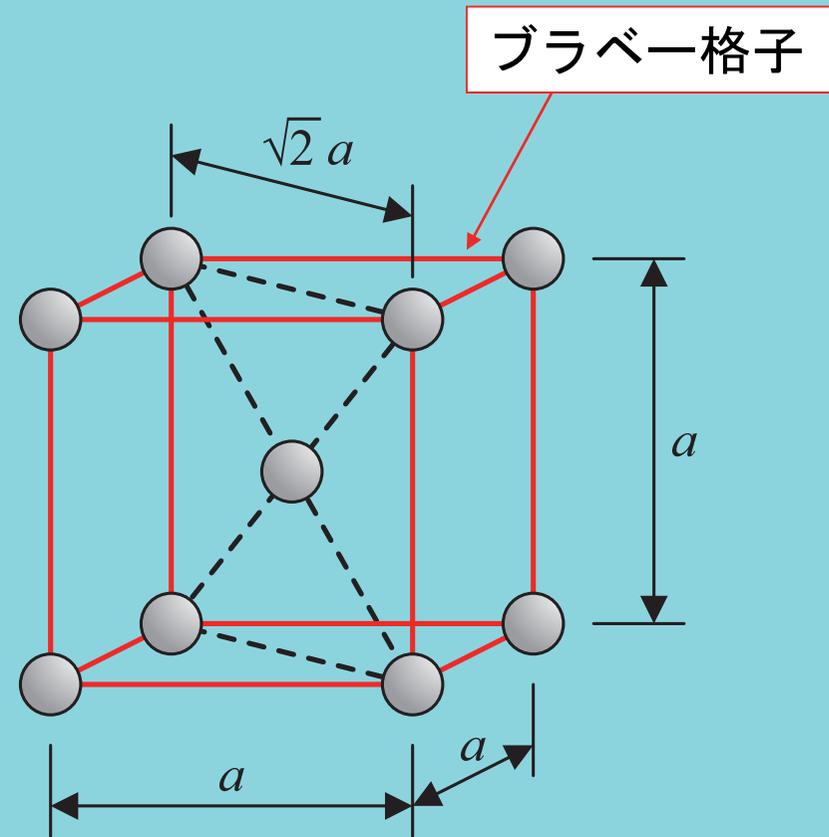
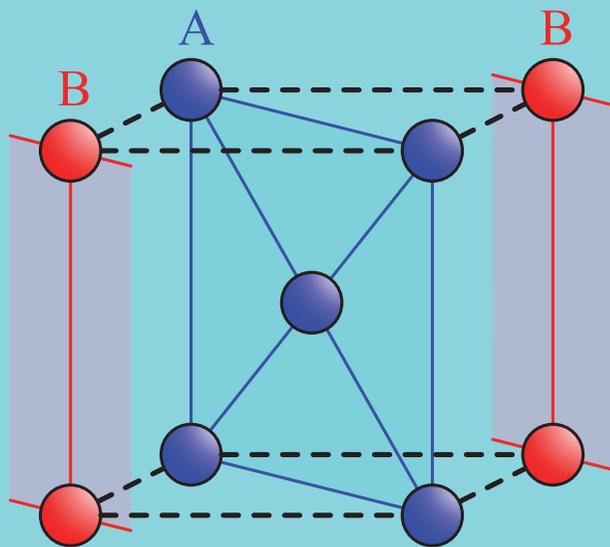
最密六方格子の
配位数は 12.

体心立方格子 (body-centered cubic lattice) の積層

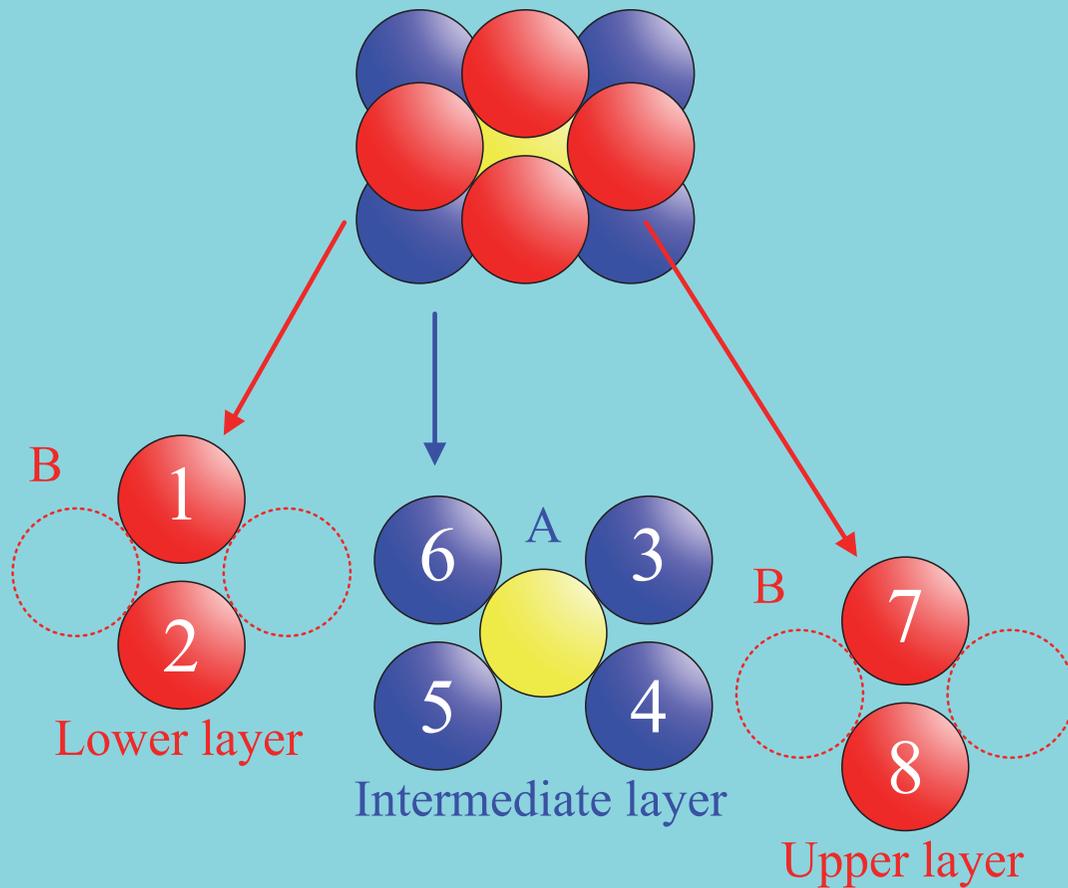


菱形の配列で、積層順序がABABAB.

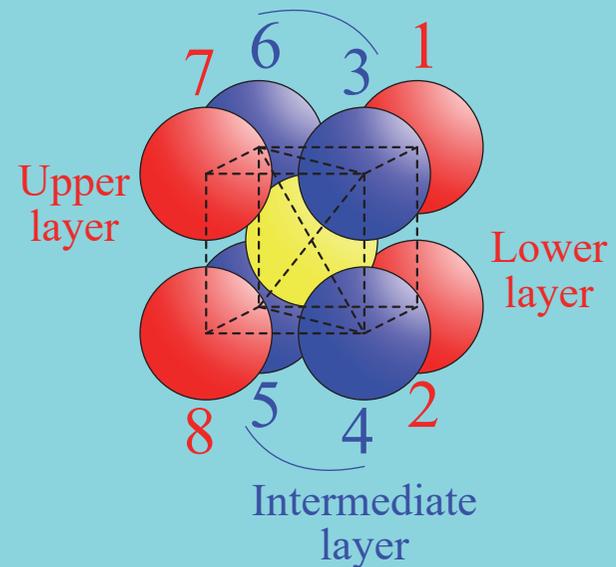
体心立方格子 (body-centered cubic lattice) の原子配置



体心立方格子 (body-centered cubic lattice) の最近接原子

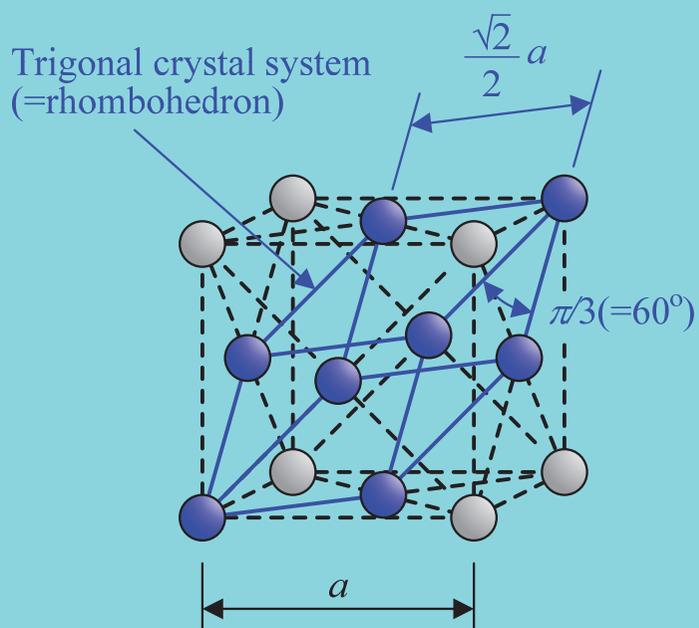


体心立方格子の
配位数は **8** .

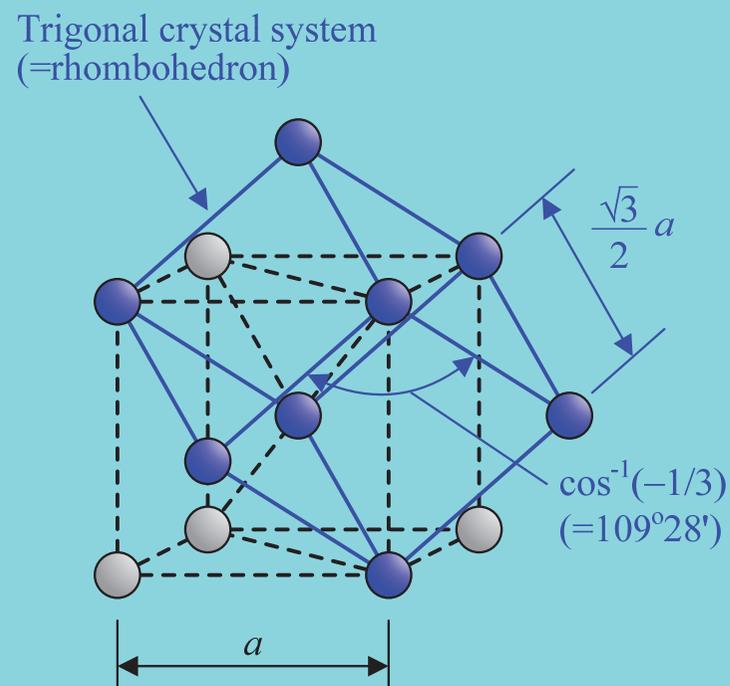


面心立方格子と体心立方格子における基本単位格子

面心立方格子

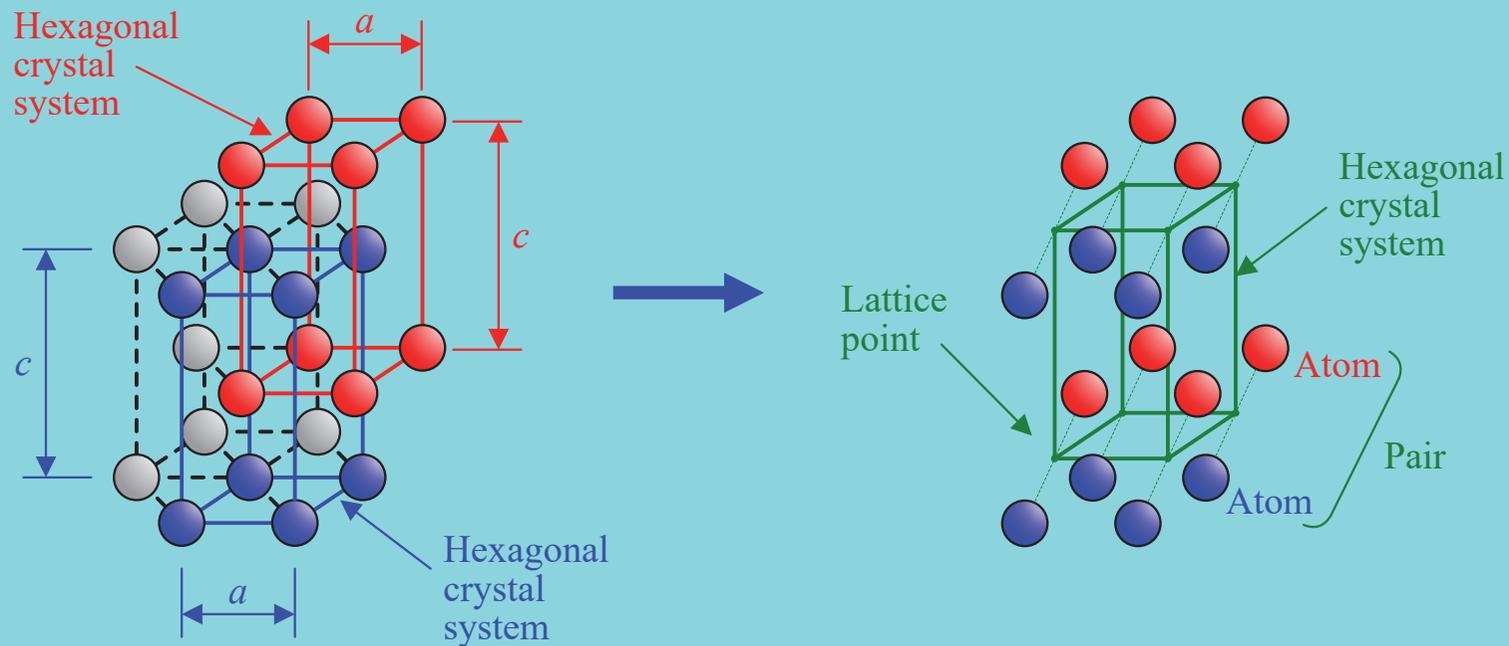


体心立方格子



厳密には，両格子の基本単位格子は，単純三方格子（菱面体または斜方六面体）になる。

最密六方格子における基本単位格子の考え方



最密六方格子の基本単位格子は，2原子（原子対）で1つの格子点を構成する六方格子であると考えることができる。

各結晶構造における原子の充填

結晶構造	単位格子に属する原子数	配位数	充填率 [%]	近接原子間距離
面心立方格子 (fcc)	4	12	74	$\frac{1}{\sqrt{2}}a$
最密六方格子 (hcp)	2	12	74	a もしくは $\sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}$ <small>注)</small>
体心立方格子 (bcc)	2	8	68	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$

注) 軸比 c/a が1.633以上の場合 a

主な純金属の結晶構造（室温付近）

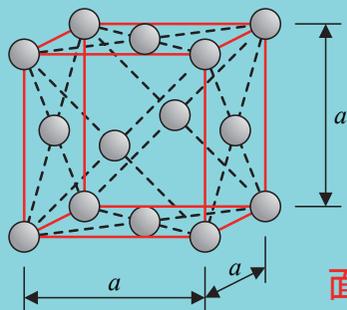
結晶構造	金 属
面心立方格子 (fcc)	Ag, Al, Au, Ca, Cu, Ir, Ni, Pb, Pd, Pt, Rh, Sr
最密六方格子 (hcp)	Be, Cd, Co, Hf, Mg, Os, Re, Ti, Tl, Zn, Zr, Y
体心立方格子 (bcc)	Ba, Cr, Cs, Fe, K, Li, Mo, Na, Rb, Ta, V, W

α -Ti

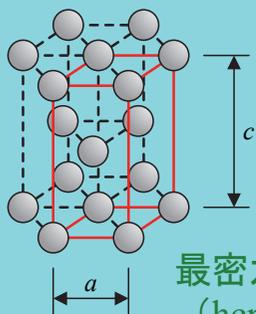
α -Fe

* 室温付近の結晶構造

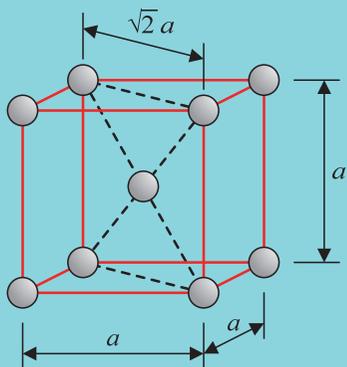
主な純金属の格子定数（室温付近）



面心立方格子
(fcc)



最密六方格子
(hcp)



体心立方格子
(bcc)

金 属	格子定数 [10 ⁻¹⁰ m]	
	<i>a</i>	<i>c</i>
Ag	4.0862	—
Al	4.0496	—
Au	4.0785	—
Cu	3.6147	—
Ni	3.5238	—
Mg	3.2094	5.2105
α-Ti	2.951	4.6843
Zn	2.665	4.9468
α-Fe	2.8664	—

* 室温付近の値

10⁻¹⁰ m = 1 Å (オングストローム)

同素体 (allotrope)

同一の元素においても原子の配列や結合の仕方が異なる単体.

純鉄 (pure iron)

δ 鉄 (bcc)

A_4 変態点 \updownarrow 1673K(1400°C)

γ 鉄 (fcc)

A_3 変態点 \updownarrow 1183K(910°C)

α 鉄 (bcc)

純チタン (pure titanium)

β チタン (bcc)

β 変態点 \updownarrow 1155K(882°C)

α チタン (hcp)

低い温度から順に α , β , γ ,...と付ける. 以前は, 磁気変態を区別していたため β 鉄も存在していたが, α 鉄と構造が同じことがわかったため, α 鉄に含むこととなった.

合金

Alloys

合金 (alloys)

純金属が持っている特性を向上させたり、あるいは持っていない特性を与えるために、1種類あるいは数種類の金属や非金属元素を添加して作ったもの。添加元素が**固溶体 (solid solution)**を形成する場合や**化合物 (compound)**を形成する場合等がある。

合金元素 (alloying elements)

合金化 (alloying) するときに用いる元素。

固溶体 (solid solution) と化合物 (compound)

固溶体 (solid solution)

異なる物質が互いに均一に溶け合った固相.

化合物 (compound)

2種以上の元素の原子の化学結合によって生じた物質. 各元素の組成比は一定.

金属間化合物 (intermetallic compound)

TiAl, NiAl, Ni₃Al等がある. これとは別に, 無機化合物 (inorganic compound) の例としては, NaCl, Al₂O₃等がある.

固溶体 (solid solution) の種類

置換型固溶体 (substitutional solid solution)

溶媒原子の結晶の格子点にある原子が、溶質原子によって置き換えられたもの。

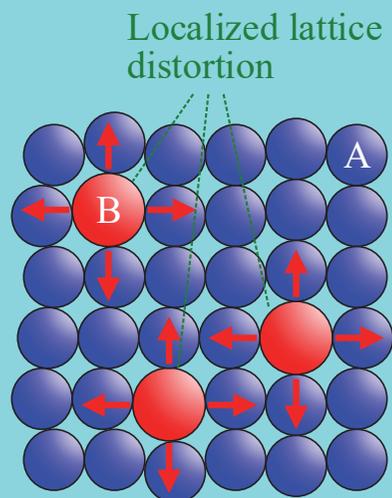
侵入型固溶体 (interstitial solid solution)

溶質原子が溶媒原子の作る結晶格子の間の空間に入り込んだもの（原子半径の小さなH, B, C, N, Oに限られる）。

これらも点欠陥 (point defect) の一種。

各固溶体の原子配列

置換型固溶体



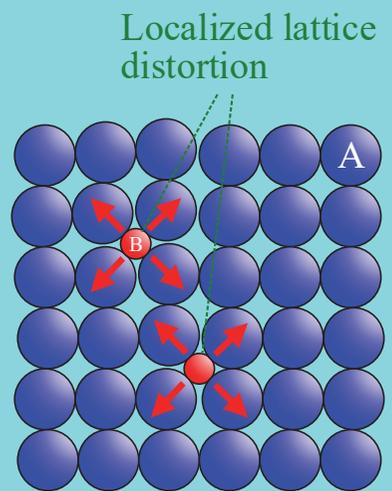
溶媒原子
(solvent atom)

量の最も多い成分の原子.

溶質原子
(solute atom)

量の少ない成分の原子.

侵入型固溶体



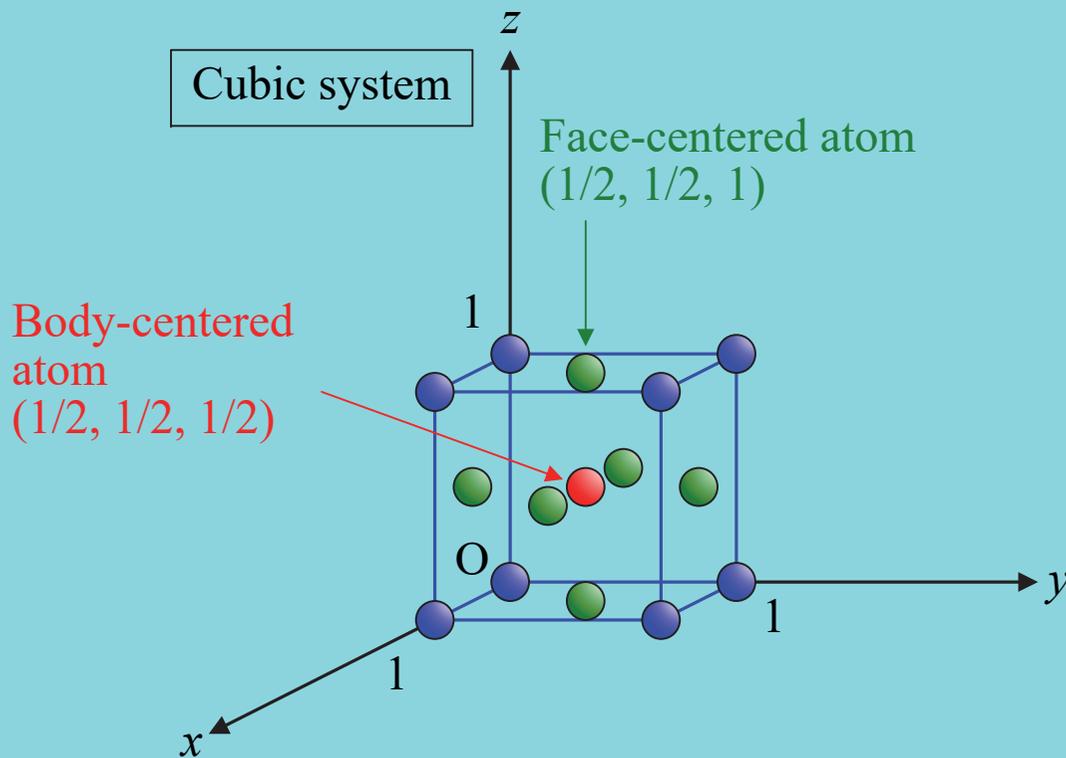
結晶格子の局所的な
ゆがみ (distortion)
が発生.

金属結晶における面と方向

Planes and Directions of Metallic Crystals

立方晶系の格子座標 (lattice coordinates)

格子定数 a を単位として表した座標系.



体心の原子 : $(1/2, 1/2, 1/2)$

面心の原子 : $(1/2, 1/2, 0)$,
 $(1/2, 0, 1/2)$,
 $(0, 1/2, 1/2)$,
 $(1/2, 1/2, 1)$,
 $(1/2, 1, 1/2)$,
 $(1, 1/2, 1/2)$

立方晶系のミラー指数 (Miller index) その1

面 (plane)

結晶の面を各座標軸の切片の長さの逆数の最小整数比で示す。整数比が $h:k:l$ のとき、

$$(hkl)$$

と表す。また、指数が負の値を取るときは、

$$(\bar{h}kl) \quad (\text{マイナス}h, k, l \text{と読む})$$

のように上に負号を付けて表す。

一つの座標軸に平行な面は、その切片の長さを ∞ (逆数は0) と考える。

立方晶系のミラー指数 (Miller index) その2

面の指数の求め方

面の法線ベクトルを最小整数比で表したものを.

各軸の切片の長さ

↓ x軸は3, y軸は2, z軸は1

切片長さの逆数

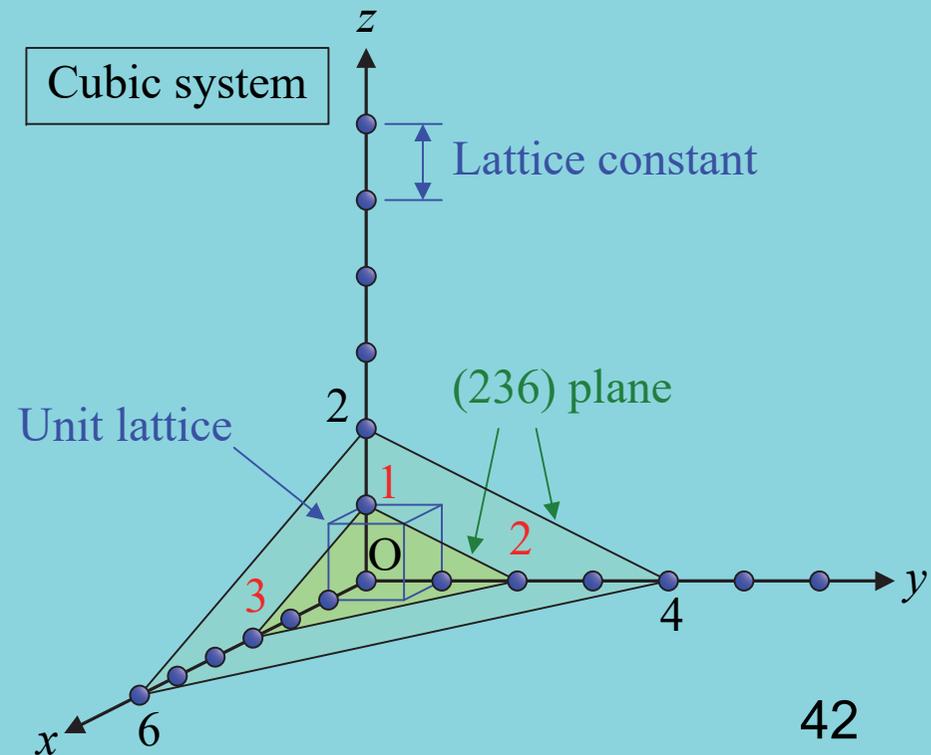
↓ $1/3, 1/2, 1/1$

最小整数比

↓ 2 : 3 : 6

指数表示

(2 3 6)



立方晶系のミラー指数 (Miller index) その3

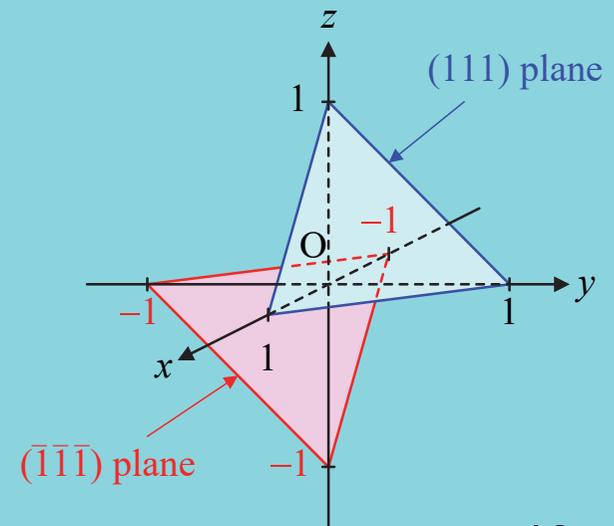
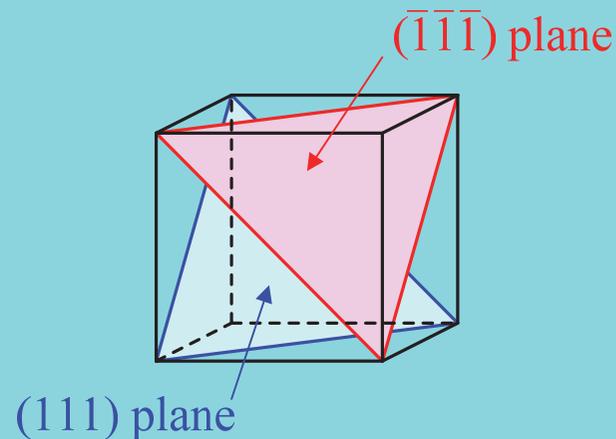
面の指数の特徴

面の方向（法線
の方向）のみを
示し，位置は指
定していない。

互いに平行な面は，同じ指数で表される。

指数が同じでそれらの符号がすべて逆の面も
互いに平行となる。

例えば， (111) と $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$



立方晶系のミラー指数 (Miller index) その4

方向 (direction)

結晶内の方向は、それと平行で原点を通る直線を考え、その直線上の任意の1点の座標の最小整数比で示す。整数比が $u : v : w$ のとき、

$$[u \ v \ w]$$

と表す。また、指数が負の値を取るときは、面の表示と同様に

$$[u \ \bar{v} \ w] \quad (u, \text{ マイナス}v, w \text{ と読む})$$

のように上に負号を付けて表す。

面の指数では、切片の長さの逆数を取るが、方向の指数では、座標の値をそのまま用いる。

立方晶系のミラー指数 (Miller index) その5

方向の指数の求め方

方向ベクトルを最小整数比で表したものの。

原点を通る平行な直線

↓ 直線OA

直線上の点の座標

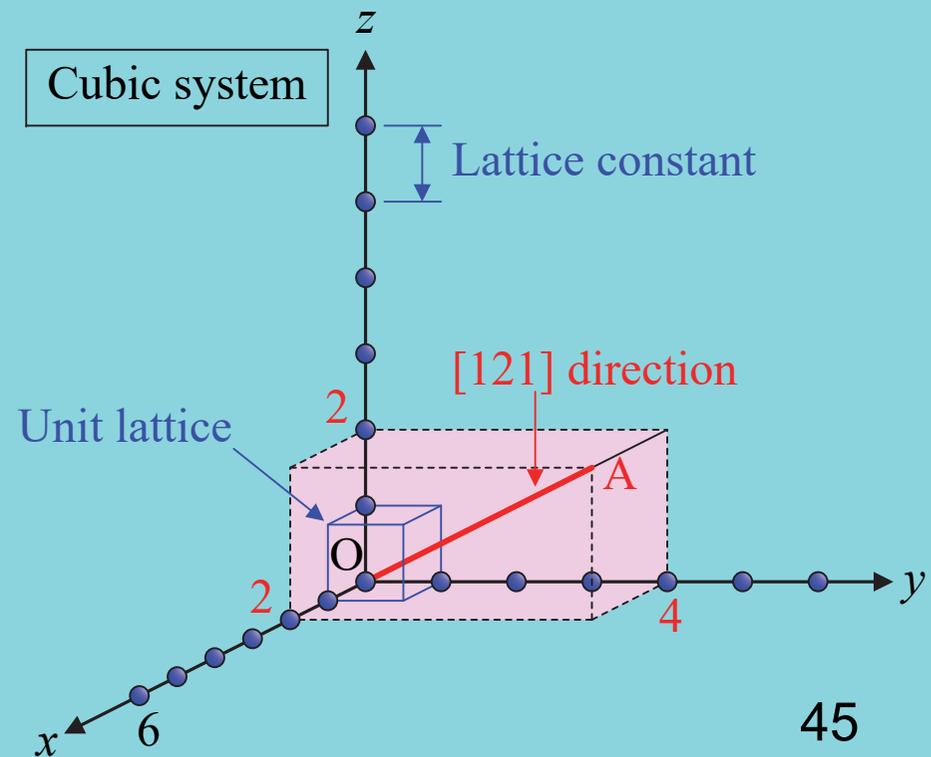
↓ (2, 4, 2)

最小整数比

↓ 1 : 2 : 1

指数表示

[1 2 1]



立方晶系のミラー指数 (Miller index) その6

等価な面 (equivalent plane)

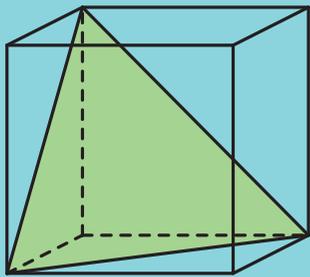
座標軸に対する相対的な関係が同じ面. 以下のように{}を用いて表す.

$$\{hkl\}$$

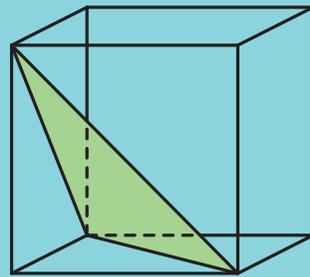
立方晶系のミラー指数 (Miller index) その7

等価な面の例

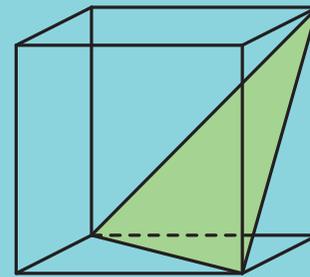
$$\{111\} = \{(111), (\bar{1}11), (1\bar{1}1), (11\bar{1}), \dots\}$$



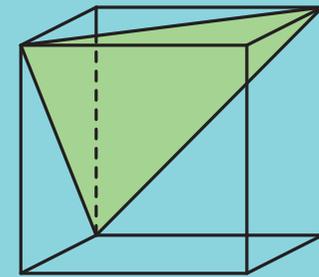
(111) plane



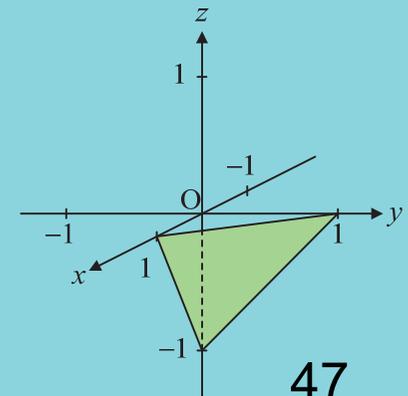
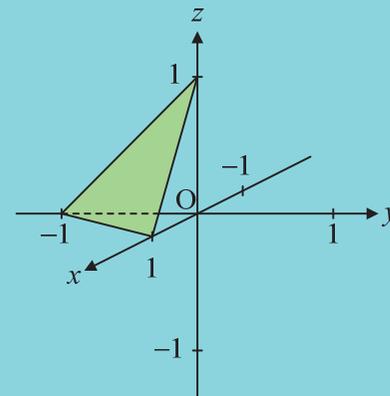
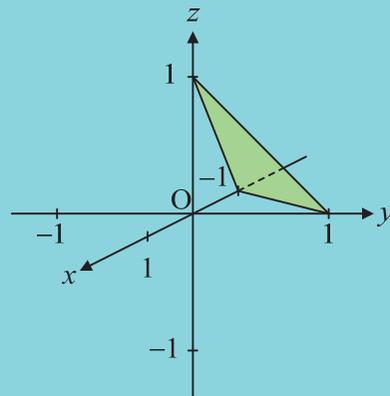
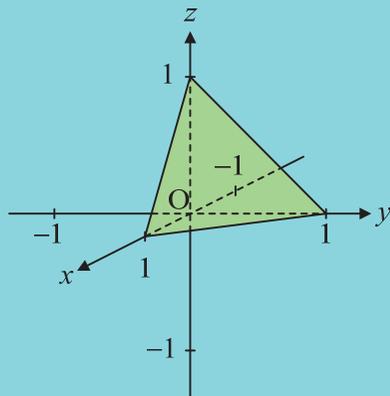
(\bar{1}11) plane



(1\bar{1}1) plane



(11\bar{1}) plane



立方晶系のミラー指数 (Miller index) その8

等価な方向 (equivalent direction)

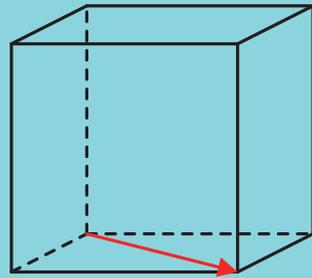
座標軸に対する相対的な関係が同じ方向. 以下のように $\langle \rangle$ を用いて表す.

$$\langle u v w \rangle$$

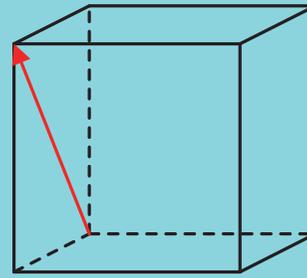
立方晶系のミラー指数 (Miller index) その9

等価な方向の例

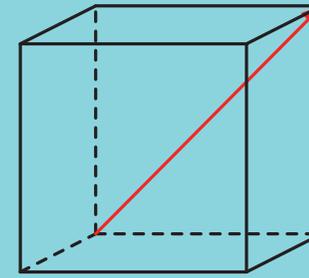
$$\langle 101 \rangle = \langle [110], [101], [011], [1\bar{1}0], [10\bar{1}], [01\bar{1}], \dots \rangle$$



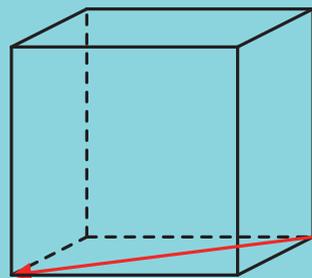
[110] direction



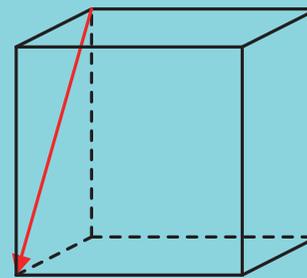
[101] direction



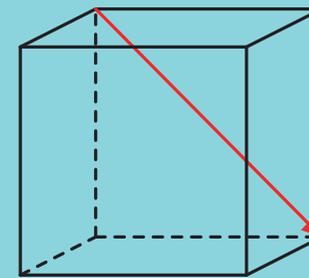
[011] direction



[1 $\bar{1}$ 0] direction



[10 $\bar{1}$] direction

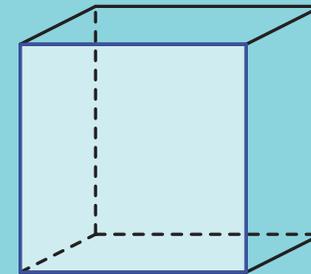


[01 $\bar{1}$] direction

立方晶系における主要な面

立方体面 (cube plane)

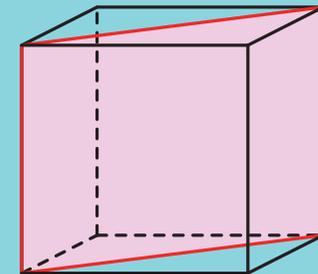
$\{100\}$



$\{100\}$ cube plane

12面体面 (dodecahedral plane)

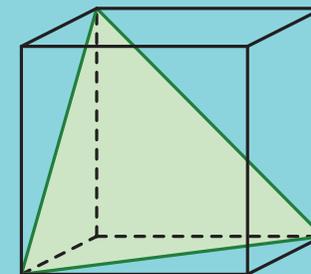
$\{110\}$



$\{110\}$ dodecahedral plane

8面体面 (octahedral plane)

$\{111\}$



$\{111\}$ octahedral plane 50

立方晶系における主要な公式 (その1)

面と面のなす角度

面と面のなす角 = 各面の法線がなす角
[$h_1 k_1 l_1$]方向と[$h_2 k_2 l_2$]方向がなす角

($h_1 k_1 l_1$)面と($h_2 k_2 l_2$)面のなす角 ϕ

$$\cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

[$h_1 k_1 l_1$]方向と
[$h_2 k_2 l_2$]方向の
なす角度も同じ式

面と方向のなす角度

($h k l$)面の法線と[$u v w$]方向がなす角
= $\pi/2 - \psi$

($h k l$)面と[$u v w$]方向のなす角 ψ

$$\sin \psi = \cos \left(\frac{\pi}{2} - \psi \right) = \frac{hu + kv + lw}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)(u^2 + v^2 + w^2)}}$$

立方晶系における主要な公式 (その2)

面と方向の平行条件 (面内条件)

$(h k l)$ 面と $[u v w]$ 方向が平行であるための条件

$$hu + kv + lw = 0$$

$(h k l)$ 面の法線方向 $= [h k l]$ 方向

→ $(h k l)$ 面が $[u v w]$ 方向と平行 $= [h k l]$ 方向と $[u v w]$ 方向が直交

→ベクトル (h, k, l) とベクトル (u, v, w) の内積が0



立方晶系では、 $(h k l)$ 面と $[h k l]$ 方向のように指数が同じ面と方向は直交する。

立方晶系における主要な公式 (その3)

面間距離 (interplanar spacing)

($h k l$)面の面間距離 d_{hkl} (格子定数 a)

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

実際の距離への変換 ($\times a$)

格子座標における
($h k l$)面の式

$$hx + ky + lz - 1 = 0$$

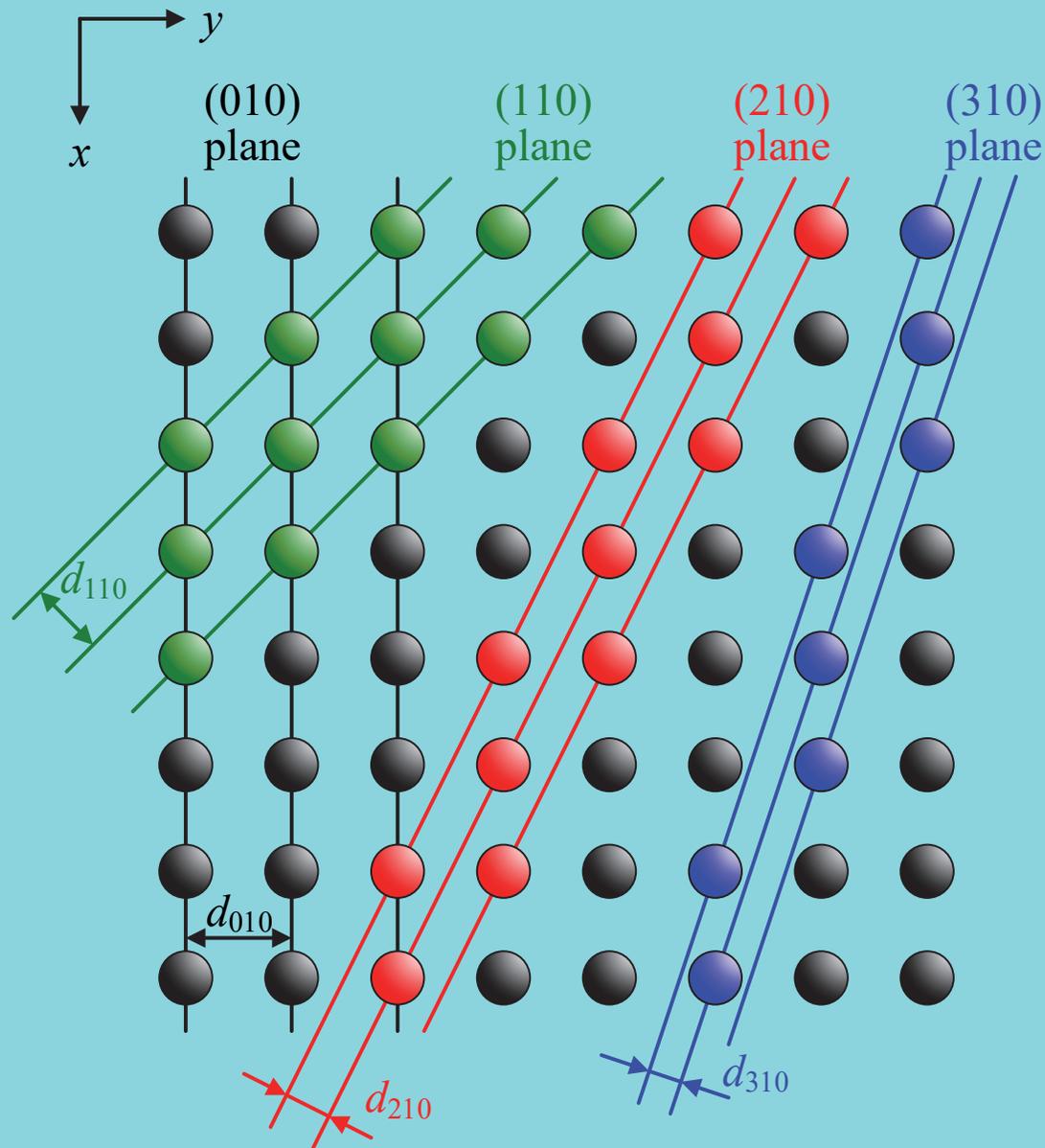
(h, k, l)面と原点との距離

$$d = \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

d : 格子座標における距離

高指数の面ほど、面間距離 d_{hkl} が小さくなる。

ミラー指数と面間距離の関係



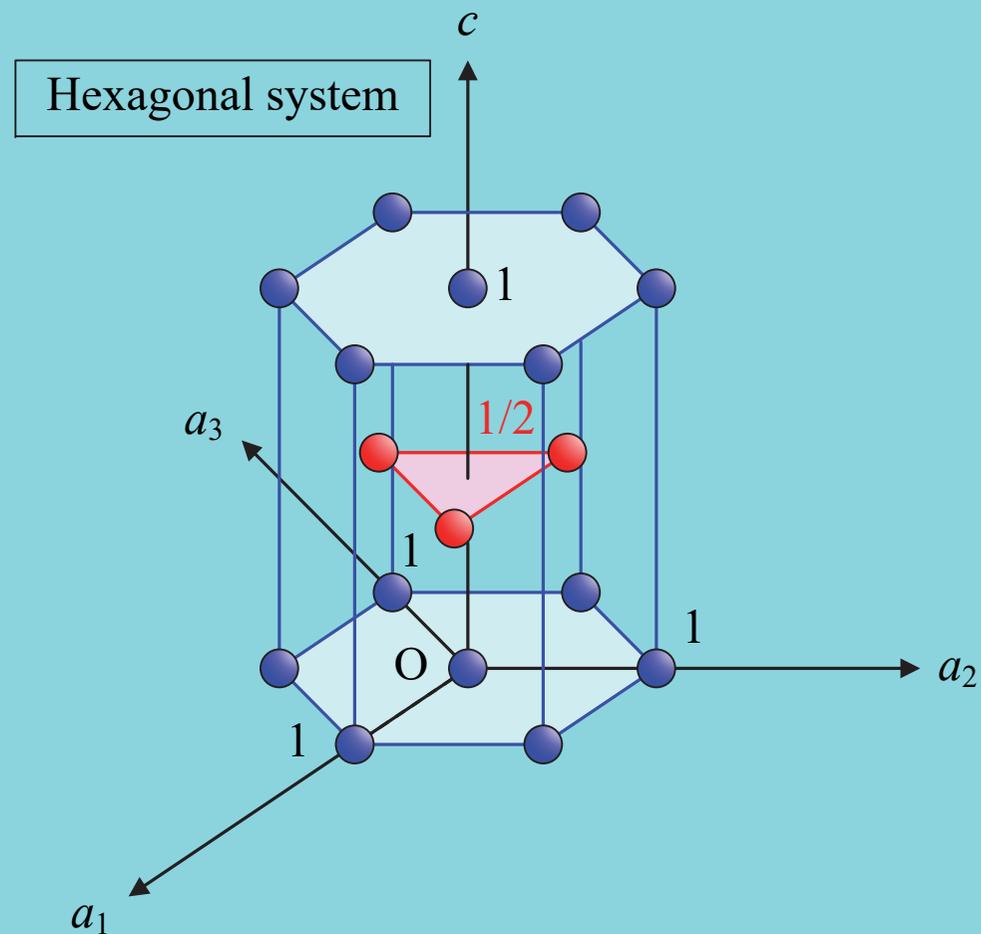
($h k l$)面面間距離 d_{hkl}
(格子定数 a)

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

高指数の面ほど、その面内における原子間距離が大きくなり、その面における単位面積当たりの原子密度が低くなる。

六方晶系の格子座標 (lattice coordinates)

格子定数 a と c を単位として表した座標系.



六方晶系のミラー・ブラヴェ指数 (Miller-Bravais index) その1

面 (plane)

基本的には、立方晶系と同じルールで表すが、座標軸が a_1, a_2, a_3, c と4本あるので、以下のように表す。

$$(h k i l)$$

ただし、 a_1, a_2, a_3 の座標軸が互いに 120° で交わるので、必然的に以下の関係を有する。

$$h + k = -i$$



3 指数表示 $(h k \cdot l)$

3つの指数 h, k, i のうちの2つ（例えば h と k ）と指数 l を先に求めておき、残りの指数（この場合は i ）は、この式を使って後から求める。

六方晶系のミラー・ブラヴェ指数 (Miller-Bravais index) その2

面の指数の求め方

面の法線ベクトルを最小整数比で表したものの。

各軸の切片の長さ

↓ a_1 軸は1, a_2 軸は1, a_3 軸は不明, c 軸は0.5

切片長さの逆数

↓ $1/1, 1/1, i, 1/0.5$

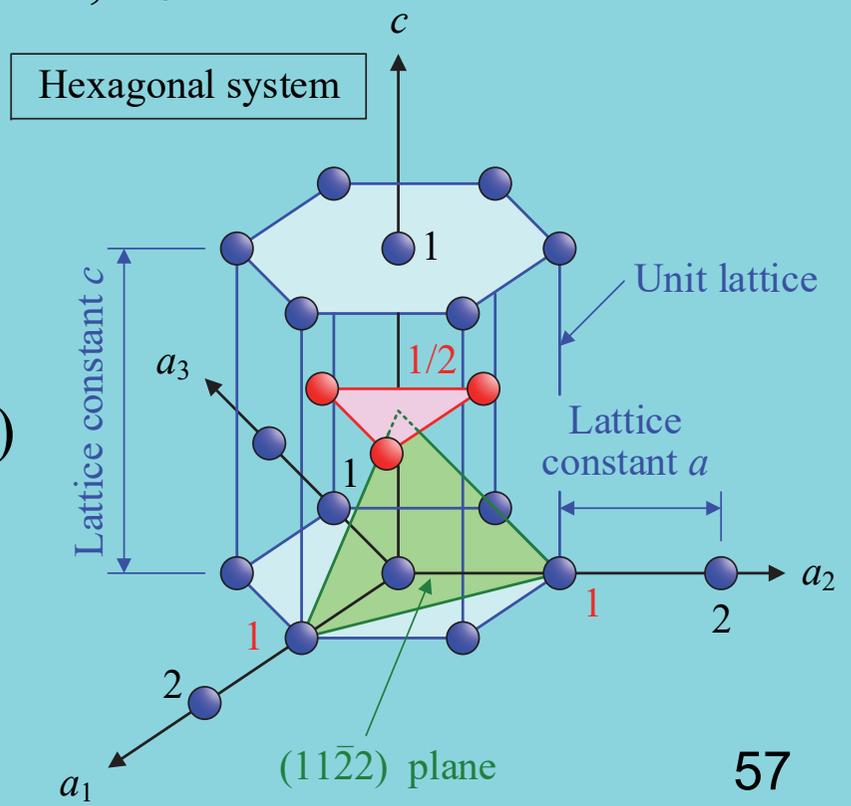
残りの逆数 (a_3 軸)

↓ $1, 1, -2, 2$ ($i = -1 -1 = -2$)

最小整数比

指数表示

$1 : 1 : -2 : 2$ $(11\bar{2}2)$



六方晶系のミラー・ブラヴェ指数 (Miller-Bravais index) その3

方向 (direction)

基本的には、立方晶系と同じルールで表すが、座標軸が a_1, a_2, a_3, c と4本あるので、以下のように表す。

$$[u\ v\ s\ w]$$

ただし、 a_1, a_2, a_3 の座標軸が互いに 120° で交わるので、必然的に以下の関係を有する。

$$u + v = -s$$

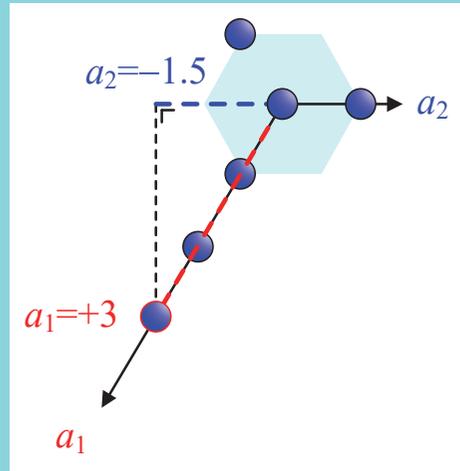
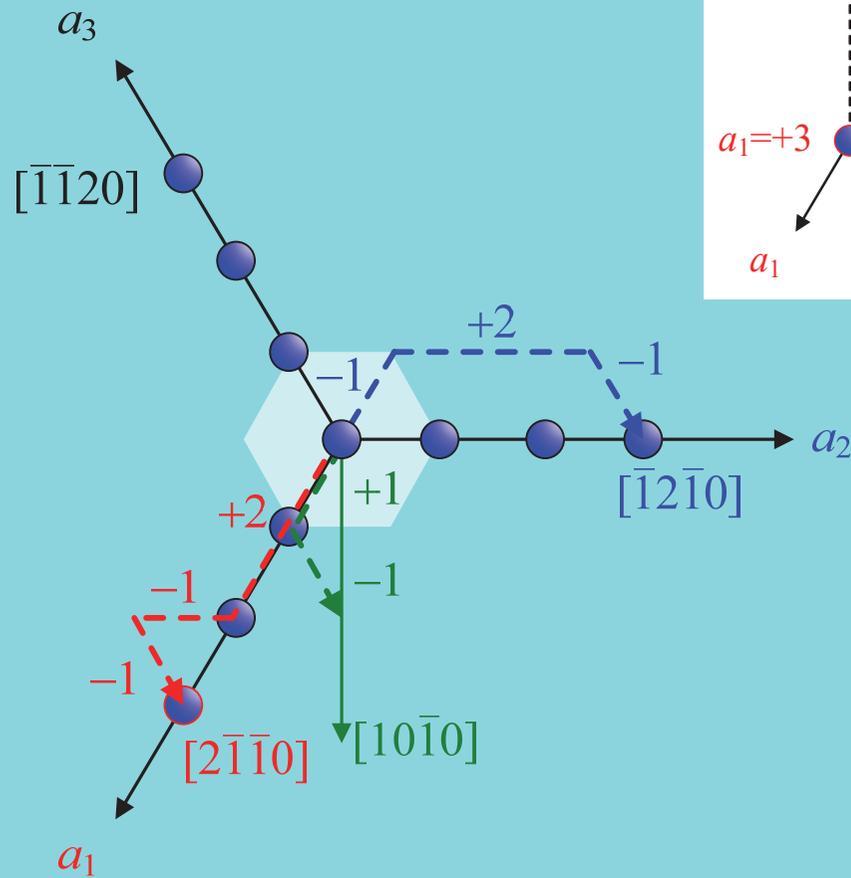


3 指数表示 $[u\ v\ \cdot\ w]$

3つの指数 u, v, s のうちの2つ（例えば u と v ）と指数 w を先に求めておき、残りの指数（この場合は s ）は、この式を使って後から求める。

六方晶系のミラー・ブラヴェ指数 (Miller-Bravais index) その4

方向の指数の求め方



直線上の点の座標

↓ $(3, -1.5, s, 0)$

残りの座標 (a_3 軸)

↓ $(3, -1.5, -1.5, 0)$

最小整数比

↓ $2 : -1 : -1 : 0$

指数表示

$[2\bar{1}\bar{1}0]$

六方晶系における主要な面 (その1)

底面 (basal plane)

$$\{0001\}$$

柱面 (prismatic plane)

一次柱面

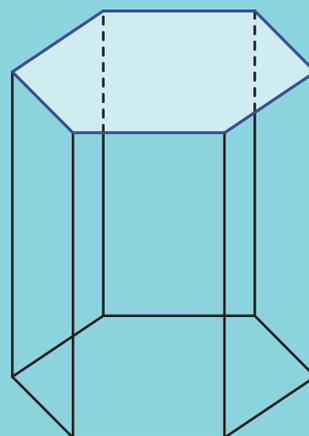
(1st order prismatic plane)

$$\{10\bar{1}0\}$$

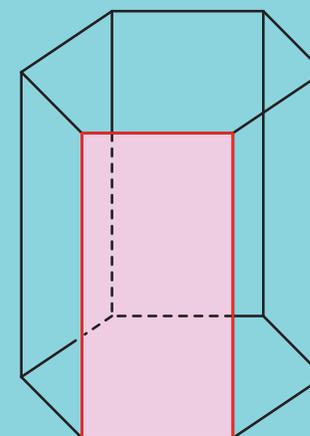
二次柱面

(2nd order prismatic plane)

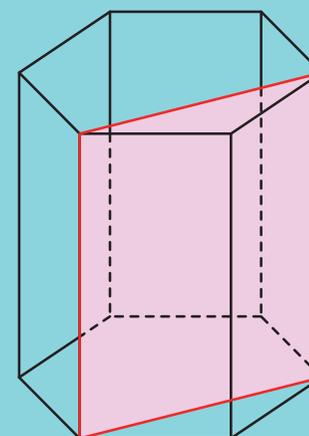
$$\{11\bar{2}0\}$$



$\{0001\}$ basal plane



$\{10\bar{1}0\}$ 1st order prismatic plane



$\{11\bar{2}0\}$ 2nd order prismatic plane

六方晶系における主要な面 (その2)

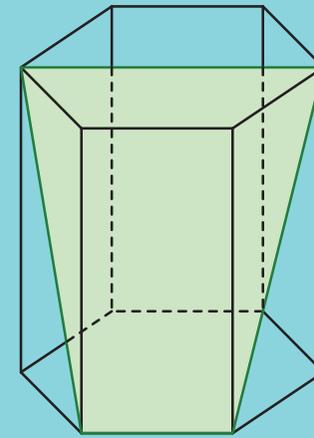
錐面 (pyramidal plane)

一次錐面
(1st order pyramidal plane)

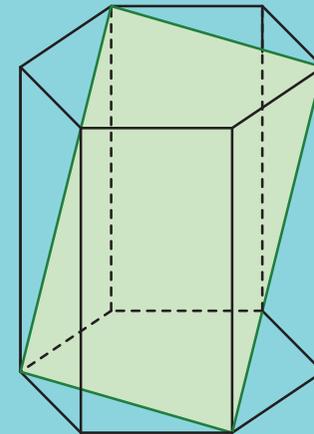
$$\{10\bar{1}1\}$$

二次錐面
(2nd order pyramidal plane)

$$\{2\bar{1}\bar{1}2\}$$



$\{10\bar{1}1\}$ 1st order pyramidal plane



$\{2\bar{1}\bar{1}2\}$ 2nd order pyramidal plane

六方晶系における主要な公式 (その1)

面と面のなす角度

$(h_1 k_1 \cdot l_1)$ 面と $(h_2 k_2 \cdot l_2)$ 面のなす角 ϕ

$$\cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \frac{1}{2}(h_1 k_2 + h_2 k_1) + \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 l_1 l_2}{\sqrt{\left(h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 l_1^2\right) \left(h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 l_2^2\right)}}$$

六方晶系では、同じ指数を持つ面と方向の直交性は、 c 軸に平行な面以外では成り立たない。

六方晶系における主要な公式 (その2)

面間距離 (interplanar spacing)

$(h k \cdot l)$ 面の面間距離 d (a, c : 格子定数)

$$d = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2) + \left(\frac{a}{c}\right)^2 l^2}}$$