

工業材料学



京都工芸繊維大学 機械工学系

森田 辰郎



第1章 金属の結晶構造

目的 原子結合の種類, 金属の基本的な結晶構造および表記法を理解する.

- | | |
|------------|--|
| 1. 原子結合の種類 | 1.1 単位 1.2 原子の安定化
1.3 イオン結合 1.4 共有結合 1.5 金属結合 |
| 2. 金属の結晶構造 | 2.1 結晶と空間格子
2.2 体心立方格子
2.3 面心立方格子
2.4 六方最密格子
2.5 面心立方格子と六方最密格子の類似性
2.6 変態 |
| 3. ミラー指数 | 3.1 立方格子のミラー指数
3.2 六方格子のミラー指数 |
| 4. 結晶の不完全性 | 4.1 格子欠陥
4.2 単結晶と多結晶 |

演習問題



1. 原子結合の種類

1.1 単位

SI 単位: 接頭語 + 単位

表1 SI単位

量の種類	記号
長さ	m
力	N (kg · m/s ²)
質量	kg
応力	Pa (N/m ²)
時間	s
エネルギー	J (Nm)
振動数	Hz (1/s)
仕事率	W (J/s)
原子の量	mol
温度	K (°C+273)

(例) 1,245,000 Pa → 1.245 MPa

表2 接頭語

数	名称	記号
10 ⁻¹⁸	atto	a
10 ⁻¹⁵	femto	f
10 ⁻¹²	pico	p
10 ⁻⁹	nano	n
10 ⁻⁶	micro	μ
10 ⁻³	milli	m
10 ⁻²	centi	c
10 ⁻¹	deci	d
10 ¹	deca	da
10 ²	hecto	h
10 ³	kilo	k
10 ⁶	mega	M
10 ⁹	giga	G
10 ¹²	tera	T
10 ¹⁵	peta	P
10 ¹⁸	exa	E



1. 原子結合の種類

1.2 原子の安定化

原子(atom)

原子核(nucleus) + 電子(electron)

電子軌道

電子の存在確率が高い経路
各軌道の最大電子数は一定

原子の安定化

原子は閉殻により安定化

閉殻(closed shell)

充足された(外殻)電子軌道

閉殻方法の相違

原子結合の種類 → 性質の相違

表3 元素の電子軌道と電子数

殻	K				L				M				N							
	軌道	1s	2s 2p	3s 3p 3d	軌道	1s	2s 2p	3s 3p 3d	軌道	1s	2s 2p	3s 3p 3d	4s 4p 4d 4f	軌道	1s	2s 2p	3s 3p 3d	4s 4p 4d 4f		
最大電子数	2	2	6	10	最大電子数	2	2	6	10	最大電子数	2	2	6	10	最大電子数	2	2	6	10	14
1 H	1				19 K	2	2	6	2	6	2	6	1							
2 He	2				20 Ca	2	2	6	2	6	2	6	2							
3 Li	2	1			21 Sc	2	2	6	2	6	1	2	2							
4 Be	2	2			22 Ti	2	2	6	2	6	2	2	2							
5 B	2	2	1		23 V	2	2	6	2	6	3	2	2							
6 C	2	2	2		24 Cr	2	2	6	2	6	5	1	2							
7 N	2	2	3		25 Mn	2	2	6	2	6	5	2	2							
8 O	2	2	4		26 Fe	2	2	6	2	6	6	2	2							
9 F	2	2	5		27 Co	2	2	6	2	6	7	2	2							
10 Ne	2	2	6		28 Ni	2	2	6	2	6	8	2	2							
11 Na	2	2	6	1	29 Cu	2	2	6	2	6	10	1	2							
12 Mg	2	2	6	2	30 Zn	2	2	6	2	6	10	2	2							
13 Al	2	2	6	2	31 Ga	2	2	6	2	6	10	2	1							
14 Si	2	2	6	2	32 Ge	2	2	6	2	6	10	2	2							
15 P	2	2	6	3	33 As	2	2	6	2	6	10	2	3							
16 S	2	2	6	4	34 Se	2	2	6	2	6	10	2	4							
17 Cl	2	2	6	5	35 Br	2	2	6	2	6	10	2	5							
18 Ar	2	2	6	6	36 Kr	2	2	6	2	6	10	2	6							

1. 原子結合の種類

表4 周期表

1																	18
1 H	2											13 B	14 C	15 N	16 O	17 F	18 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	*1	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	*2	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo

*1 ランタノイド: La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu
 *2 アクチノイド: Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr

- 1 常温で固体
- 1 常温で液体
- 1 常温で気体
- 金属元素
- 半金属元素
- 非金属元素
- 人工元素
- アルカリ金属
- アルカリ土類金属
- ハロゲン
- 希ガス
- 遷移元素

1. 原子結合の種類

1.3 イオン結合 (ionic bond)

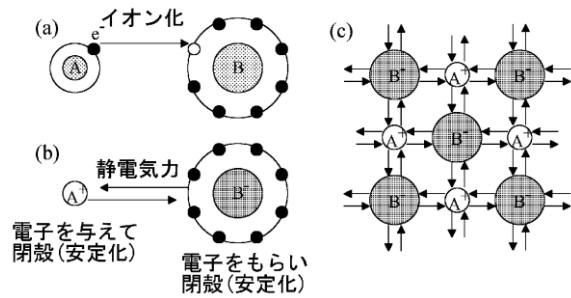


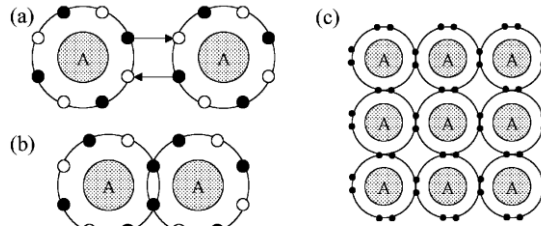
図1 イオン結合のモデル

物質: 例えばNaCl(食塩), Al₂O₃(アルミナ)
 特徴: 結合エネルギー大, 結合に強い方向性
 ↓
 ひずみにくい, ぜい性破壊(原子移動が困難)
 高融点, 低伝導性(電子が自由に動けない)



1. 原子結合の種類

1.4 共有結合 (covalent bond)



電子を相互に共有して閉殻 (安定化)

図2 共有結合のモデル

物質: 例えばC(ダイヤモンド), Si, プラスチックス
特徴: 結合エネルギー大, 結合に強い方向性
↓
ひずみにくい, ぜい性破壊(原子移動が困難)
高融点, 低伝導性(電子が自由に動けない)



1. 原子結合の種類

1.5 金属結合 (metallic bond)

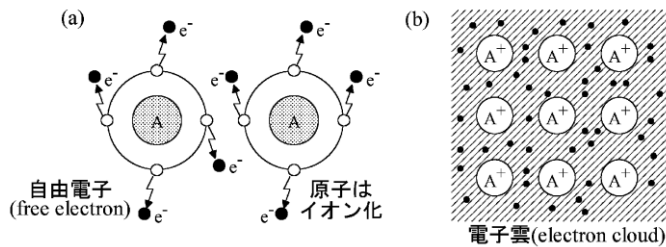


図3 金属結合のモデル

物質: Fe, Al, Ti, 他金属
特徴: 結合エネルギー小, 結合の方向性弱
↓
延性的に変形(原子移動が容易), 充填構造
電気・熱の良伝導性, 金属光沢(自由電子)



2. 金属の結晶構造

2.1 結晶と空間格子

結晶 (crystal): 規則正しく配列した原子の集合体
原子は電子のやり取りにより閉殻して安定化するので、周囲に多数の原子が必要(配列に規則性).

空間格子 (space lattice): 原子位置を点で表して幾何学的構造を表記する方法

単位格子 (unit lattice): 基本となる格子

配位数: 1原子の周囲の最近接原子数

充填率: 単位体積あたりの原子の体積占有率

格子定数 (lattice constant): 格子の単位となる長さおよび角度(図5の a, b, c)

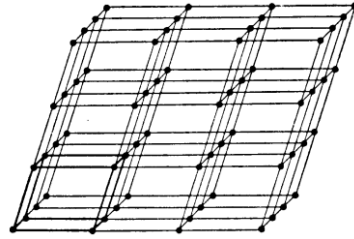


図4 空間格子

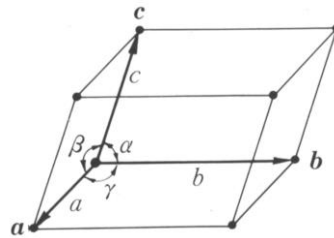


図5 単位格子



2. 金属の結晶構造

2.2 体心立方格子 (body centered cubic lattice, BCC)

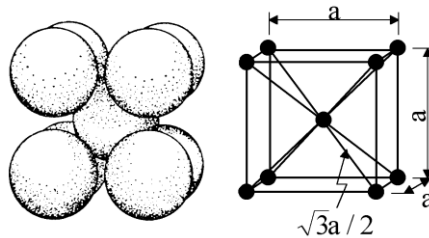


図6 体心立方格子

体心立方格子の金属	Cr, α -Fe, Mo, β -Ti, Vなど
配位数	8
単位格子中の原子数	2個(=1/8 × 8 + 1)
原子間距離	$\sqrt{3}a/2$
充填率	約68% $\left(= \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\sqrt{3}a}{4} \right)^3 \times 2 \times \frac{1}{a^3} \right)$



2. 金属の結晶構造

2.3 面心立方格子 (face centered cubic lattice, FCC)

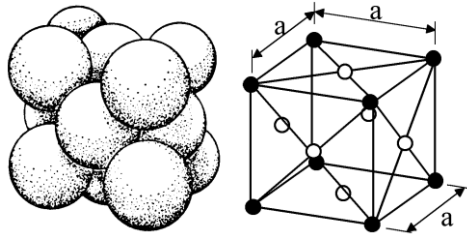


図7 面心立方格子

面心立方格子の金属	Al, Cu, γ -Fe, Niなど
配位数	12
単位格子中の原子数	4個(=1/8×8+1/2×6)
原子間距離	$\sqrt{2}a/2$
充填率	約74% $\left(= \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\sqrt{2}a}{4} \right)^3 \times 4 \times \frac{1}{a^3} \right)$



2. 金属の結晶構造

2.4 六方最密格子 (hexagonal close-packed lattice, HCP)

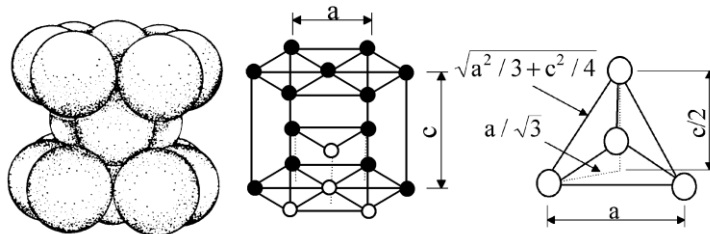


図8 六方最密格子

六方最密格子の金属	α -Ti, Znなど
配位数	12
単位格子中の原子数	6個(=1/2×2+1/6×12+3)
最近接原子間距離	a ($c/a=1.633$ の場合)
充填率($c/a=1.633$)	約74% $\left(= \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2a}{4} \right)^3 \times 6 \times \frac{1}{(3\sqrt{3}a^2/2) \times 1.633a} \right)$



2. 金属の結晶構造

2.5 面心立方格子と六方最密格子の類似性

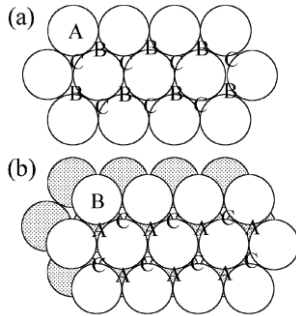


図9 最密充填面の積層

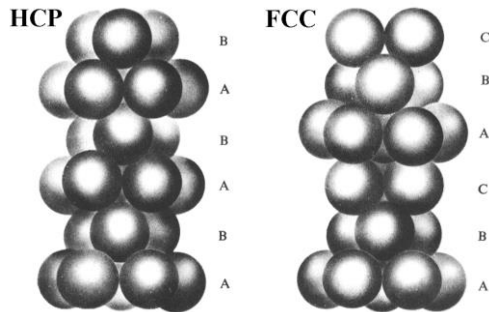


図10 2種類の最密充填面の積層方法

最密充填面の積層方法の相違

(a)...ABCABC...→FCC, (b)...ABABAB...→HCP



2. 金属の結晶構造

2.6 変態

変態 (transformation)

外因的条件(温度等)によって結晶構造が変化すること。
(熱処理で極めて重要な現象)

変態点

変態が生ずる温度

鉄およびチタンの変態

Fe: α (BCC) \leftarrow 912°C \rightarrow γ (FCC) \leftarrow 1394°C \rightarrow δ (BCC)

Ti: α (HCP) \leftarrow 882°C \rightarrow β (BCC)

(温度が低い側から α , β , γ , δ ... の順に相の名前をつける)

炭素鋼の焼入れ

α 相(低温相)と γ 相(高温相)における炭素濃度の固溶度の相違を使って炭素を過飽和に固溶させ、高硬さとする。



3. ミラー指数 (Miller index)

3.1 立方格子のミラー指数

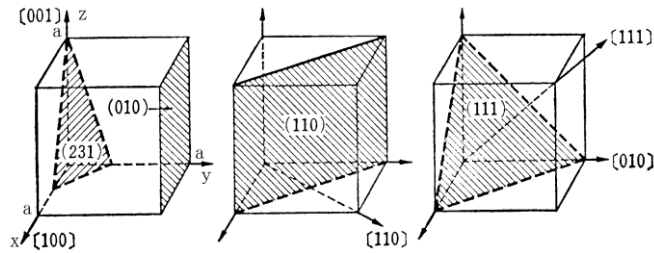


図11 立方格子のミラー指数

x, y, z 軸を α, β, γ で横切る面 $1/\alpha : 1/\beta : 1/\gamma$ の最小の整数比 $h:k:l \rightarrow (hkl)$
(例) x, y, z 軸を $a/2, a/3, a$ で横切る面 $\rightarrow (231)$

原点から座標 (α, β, γ) へ向かう方向 $\alpha : \beta : \gamma$ の最小の整数比 $h:k:l \rightarrow [hkl]$
(例) 原点から座標 (a, a, a) へ向かう方向 $\rightarrow [111]$



3. ミラー指数 (Miller index)

座標軸の負側で交わる面 \rightarrow オーバーライン (例) $(\bar{1}10)$
座標軸に平行な面 \rightarrow 指数は0 ($=1/\infty$) (例) (010)

結晶学的に等価な面や方向

(例) $(100), (010), (001)$ など \rightarrow まとめて $\{100\}$

(例) $[100], [010], [001]$ など \rightarrow まとめて $\langle 100 \rangle$



3. ミラー指数 (Miller index)

3.2 六方格子のミラー指数

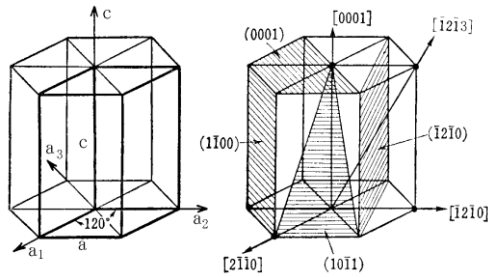


図12 六方格子のミラー指数

a_1, a_2, c 軸を α, β, γ で横切る面

$1/\alpha : 1/\beta : 1/\gamma$ の最小の整数比 $h:k:m$ を求めた後、最後の指標を $l=-(h+k)$ から決める。(例) 3 軸を $a/1, a/\infty, c/1$ で横切る面 $h:k:m=1:0:1$, また $l=-(h+k)=-1$, よって面の指標は $(10\bar{1}1)$ 。

原点から a_1, a_2, c 軸の座標で (α, β, γ) へ向かう方向

$\alpha : \beta : \gamma$ の最小の整数比 $h:k:m$ を求めた後、最後の指標を $l=-(h+k)$ から決める。



4. 結晶の不完全性

4.1 格子欠陥 (lattice defect)

格子欠陥

実際の金属における規則性の乱れた部分



材料の強度を考える上で極めて重要

格子欠陥の種類

格子間原子, 原子空孔, 不純物原子 (侵入型, 置換型)

※右図参照

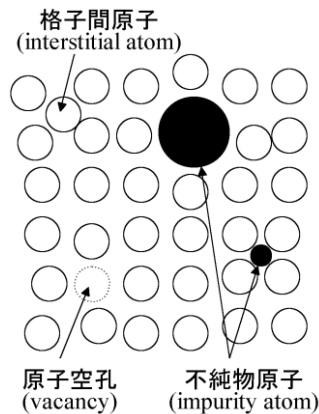


図13 格子欠陥



4. 結晶の不完全性

4.2 単結晶と多結晶

単結晶 (single crystal)

全部分で結晶方位(crystal orientation)が同じである固体.

多結晶体 (polycrystalline material)

多数の結晶粒(crystal grain)から構成される固体. 各結晶粒の方位は異なる.

結晶粒界 (grain boundary)

結晶粒間の境界にある不整合な領域. 力学的性質や変態・析出・拡散といった熱処理に関連する.

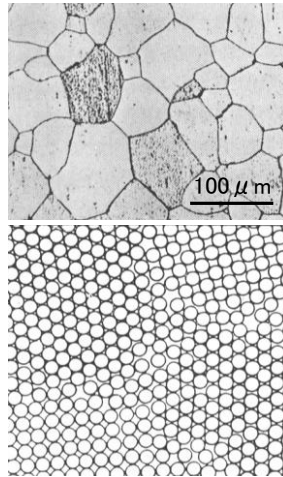


図14 多結晶体の例と原子モデル



演習問題

問題 1 以下の問いに答えなさい.

- (1) 基本的な原子結合の種類を3つ挙げなさい.
- (2) 基本的な金属の単位格子を3つ挙げなさい.
- (3) 最密充填面を...ABCA...の順に積層させた時の格子名を答えなさい.

問題 2 格子定数 a の体心立方格子を考える.

- (1) 単位格子を図示しなさい.
- (2) この格子のすべり系は $\{110\}$ 面, $\langle 111 \rangle$ 方向である. その内の (110) 面および $[\bar{1}11]$ 方向を図示しなさい.
- (3) 原子間距離と充填率を求めなさい.

問題 3 六方最密格子について考える.

- (1) 単位格子を図示しなさい.
- (2) この格子のすべり系の一つは $\{0001\}$ 面, $\langle 1210 \rangle$ 方向である. その内の (0001) 面および $[\bar{1}210]$ 方向を図示しなさい.
- (3) この格子($c/a=1.633$)の原子間距離と充填率を求めなさい.



演習問題解答

問題 1

- (1) イオン結合, 共有結合, 金属結合
- (2) 体心立方格子, 面心立方格子, 六方最密格子
- (3) 面心立方格子

問題 2

- (1), (2) 右上図の通り.
- (3) 原子間距離は, $\frac{\sqrt{a^2 + a^2 + a^2}}{2} = \frac{\sqrt{3}a}{2}$

一辺が a の立方体中に直径が原子間距離の球が

2個あるから充填率は, $V_f = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3 \times 2 \times \frac{1}{a^3} = 68\%$

問題 3

- (1), (2) 右下図の通り.
- (3) 原子間距離は a . 六角柱内に直径が原子間距離の球が6個あるから充填率は,

$$V_f = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{a}{2}\right)^3 \times 6 \times \frac{1}{(3\sqrt{3}a^2/2) \times 1.633a} = 74\%$$

