

固体物理学 第2章課題解答例

(1) 六方最密充填構造

- ① $c = 2\sqrt{6}a/3$ の関係があることを示しなさい
- ② 充填率が $\sqrt{2}\pi/6$ となることを示しなさい

(解答例)

① 理想的な六方最密充填構造は、最密充填原子面 A、B が ABABAB... と c 方向に隙間なく積層した構造である。図 1-1 に示すように、第 1 層の剛体球 P、Q、S 上の第 2 層の剛体球を O とする。この時、剛体球 P、Q、S、O の中心を結ぶ菱形 PQRS は単位胞の c 面を、PQSO は正四面体を形成する。また、剛体球 O の中心を通る PQRS 面の垂線とその面の交点を O'、剛体球 Q と c 方向に距離 c だけ離れた位置の第 3 層の剛体球を Q' とする (図 1-2)。この時、求めるべき c は、 $\overline{QQ'}$ で与えられる。

PQSO は正四面体を形成するから、 $\overline{QO'}$ は次式で与えられる。

$$\overline{QO'} = \overline{PQ} \times \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{2}{3} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

よって、 $\overline{QQ'}$ は、

$$\overline{QQ'} = 2 \times \overline{QO'} = 2 \times \sqrt{a^2 - (\overline{QO'})^2} = 2a \frac{\sqrt{6}}{3}$$

となる。従って、理想的な六方最密充填構造では、

$$c = 2a \frac{\sqrt{6}}{3}$$

の関係がある。

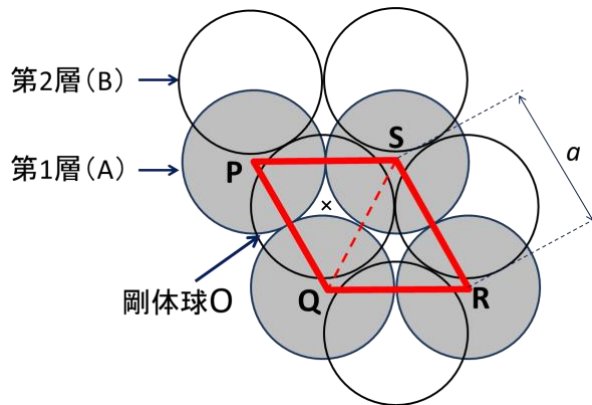


図 1-1: 最密充填原子面 A、B の積層の様子の平面図

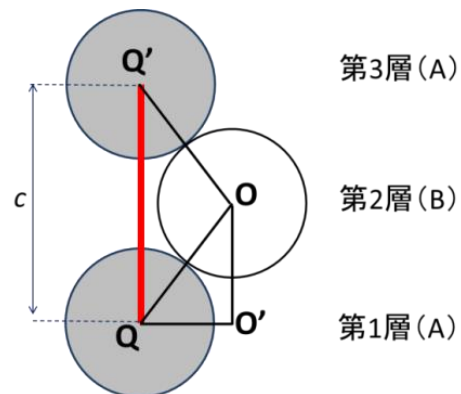


図 1-2: 積層の様子の断面図

② 六方最密充填構造には単位胞あたり、半径 $a/2$ の原子が 2 個含まれる。原子の体積は、 $\frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3$ 、六方最密充填構造の単位胞の体積は菱形 PQRS の面積に、高さ c を乗じたもの $a \times \frac{\sqrt{3}}{2}a \times c$ であるので、充填率は

$$2 \times \frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3 / (a \times \frac{\sqrt{3}}{2}a \times c) = 2 \times \frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3 / (a \times \frac{\sqrt{3}}{2}a \times 2a \frac{\sqrt{6}}{3}) = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi$$

従って、六方最密充填構造の充填率は、 $\frac{\sqrt{2}}{6}\pi$ である。

(2) 省略 (教科書の解答例などを参照して下さい)

(3) 結晶構造がダイヤモンド構造および閃亜鉛鉱構造である物質について、表 2.2 の物質を含めてそれらの格子定数を調べなさい。また、物質を構成する元素の種類と格子定数の間にはどのような関連があるかを調べなさい。

(解答例)

ダイヤモンド構造、閃亜鉛鉱構造を持つ物質例とその格子定数を以下の表に示す。(Kittel 固体物理学、NIMS データベース参照)

ダイヤモンド構造	
物質名	格子定数 (Å)
C	3.567
Si	5.43
Ge	5.658
Sn	6.49

閃亜鉛鉱構造	
物質名	格子定数 (Å)
SiC	4.35
ZnS	5.41
ZnSe	5.65
ZnTe	6.44
GaP	5.45
GaAs	5.65
GaSb	6.10
AlAs	5.66

- ダイヤモンド構造を持つ物質では、原子番号が大きいほど、格子定数も大きくなる特徴がある。
 - 閃亜鉛鉱構造は二つの元素からなるが、一方の元素の原子番号が大きくなると格子定数も大きくなる。(例えば、Zn を含む物質では、S, Se, Te と原子番号が大きくなると格子定数も増加)。
- また、閃亜鉛鉱構造の二つの元素の周期の組み合わせが同一の物質は、比較的似た格子定数を持つ。例えば、第 4 周期元素と第 3 周期元素の組み合わせである、ZnS, GaP, AlAs, 第 4 周期元素と第 4 周期元素の組み合わせである ZnSe, GaAs, 第 4 周期元素と第 5 周期元素の組み合わせである ZnTe, GaSb などである。