平成１９年前期中間試験解答

１．

(1) [10 点] 1 個のシリコン原子の重さは 28/N_A [g] である。1cm^3 のシリコン結晶の重さは 2.3g であることから、1cm^3 のシリコン結晶に含まれる原子数は 2.3 x N_A/28 = 4.9x10^{22}個。

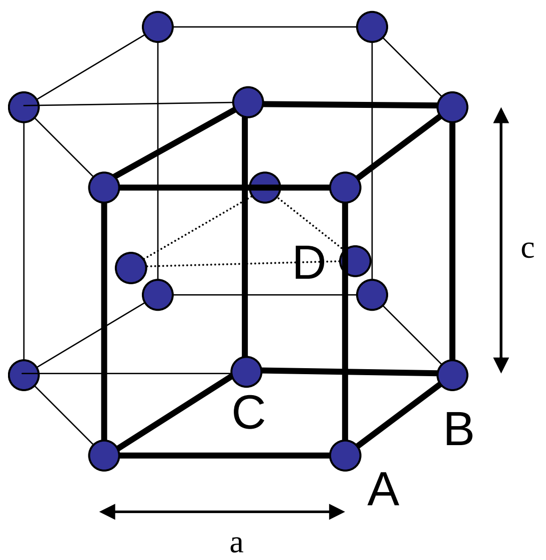
(2) [10 点] a^3 の体積に 8 個の原子があることから 1cm^3 のシリコン結晶に含まれる原子数は 8/a[cm]^3 = 4.9x10^{22}。これより、a=$\sqrt[3]{8/4.9\cdot 10^{22}}$ = 5.4x10^{-8} cm = 5.4x10^{-10} m = 0.54 nm。

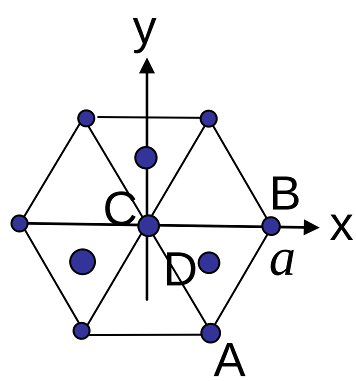
2.

(1) [10 点] 下の図のように A,B,C,D の点を考える。C=(0,0,0), B=(a,0,0)である、A の座標を(x,y,0)とおき、AC と AB の長さが a であることから $x^2+y^2=(x-a)^2+y^2=a^2$ を解き、符号に注意すると、C の座標が$\left(a/2,-\sqrt{3}a/2,0\right)$と求まる。次に D の座標を(x,y,c/2)と置くと、CD,AD,BD の長さが a であることから、

$$x^2+y^2+c^2/4=(x-a)^2+y^2+c^2/4=(x-a/2)^2+(y+\sqrt{3}a/2)^2+c^2/4=a^2$$

これから、x=a/2, y=$-\sqrt{3}a/6$ および、c/a = $\sqrt{8/3}=2\sqrt{6}/3=1.63$ を得る。





(2) [10 点] 単位胞の体積は $a\times\frac{\sqrt{3}a}{2}\times\frac{2\sqrt{6}}{3}a=\sqrt{2}a^3$。この単位胞に２個の原子が含まれるので、剛体球の占有体積は$2\times\frac{4\pi}{3}\left(\frac{a}{2}\right)^3=\frac{\pi}{3}a^3$。従って占有率は$\sqrt{2}\,\pi/6$ =0.74。

３．[20 点]

結合エネルギーはイオン間隔を a として、$\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 a}\left(1-\frac{1}{n}\right)A$。（第２回演習問題２を参照）

A は Mardelung 係数で 1.76267、a は 1.67+1.81=3.48Å=3.48x10^{-10}m。これから、結合エネルギーは 6.48eV。

４．

(1) [10 点]　A,B,C はそれぞれ、$2\vec{a}+2\vec{b},2\vec{b}+2\vec{c},\vec{a}+2\vec{c}$。A,B,C が乗っている面に垂直な方向は$\overrightarrow{AB}\times\overrightarrow{AC}=\left(-2\vec{a}+2\vec{c}\right)\times\left(-\vec{a}-2\vec{b}+2\vec{c}\right)=4\vec{a}+2\vec{b}+4\vec{c}$である。従って、ミラー指数は(212)。

あるいは、面上の点は

$$2\vec{a}+2\vec{b}+t\left(-2\vec{a}+2\vec{c}\right)+u\left(-\vec{a}-2\vec{b}+2\vec{c}\right)=\left(2-2t-u\right)\vec{a}+\left(2-2u\right)\vec{b}+\left(2t+2u\right)\vec{c}$$

軸$\vec{a}$との交点は 2-2u=0, 2t+2u=0 から t=-1, u=1 で 3$\vec{a}$、同様に軸$\vec{b}$との交点は 6$\vec{b}$、軸$\vec{c}$との交点は 3$\vec{c}$となり、ミラー指数は逆数(1/3 1/6 1/3)に 6 をかけて(212)。

(2) [10 点] $\left|\overrightarrow{G_{hkl}}\right|=\frac{2\pi}{d_{hkl}}$ および$\left|\overrightarrow{G_{hkl}}\right|=\frac{2\pi}{a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$ から、d=a/3。

(3) [10 点]　（１）から面は原点から６番目にあり、原点の間に５枚の平行な面が存在する。

(4) [10 点]　原点に最も近い格子面上に、$\vec{a}$/2、$\vec{b}$、$\vec{c}$/2 が乗っていることから、面上の点は

$$\vec{a}/2+t\left(\vec{b}-\vec{a}/2\right)+u\left(\vec{c}/2-\vec{a}/2\right)=\left(1-t-u\right)\vec{a}/2+t\vec{b}+u\vec{c}/2$$

格子点は$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{c}$の前の係数が整数であることに注意すると t は奇数、u は偶数でなければならない。例えば

t=1,u=2 とおいて、$-\vec{a}+\vec{b}+\vec{c}$

t=-1, u=0 とおいて、$\vec{a}-\vec{b}$

t=1, u=-2 とおいて、$\vec{a}+\vec{b}-\vec{c}$