

固体電子工学

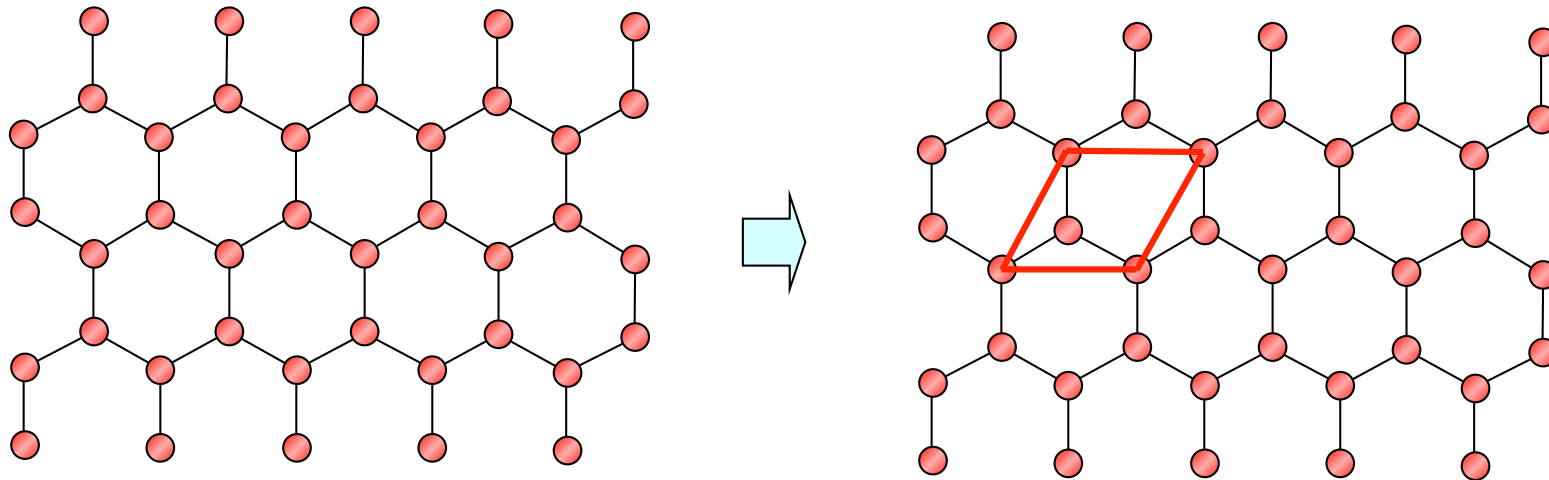
第4回 結晶構造

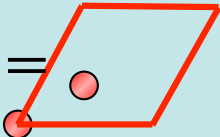
結晶構造

結晶 = 数個の原子からなる構成ブロックの周期的な繰り返し

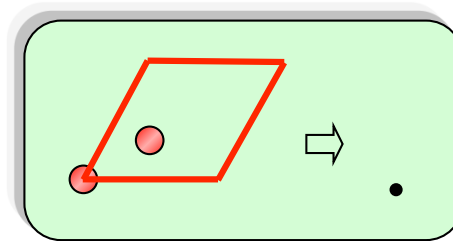
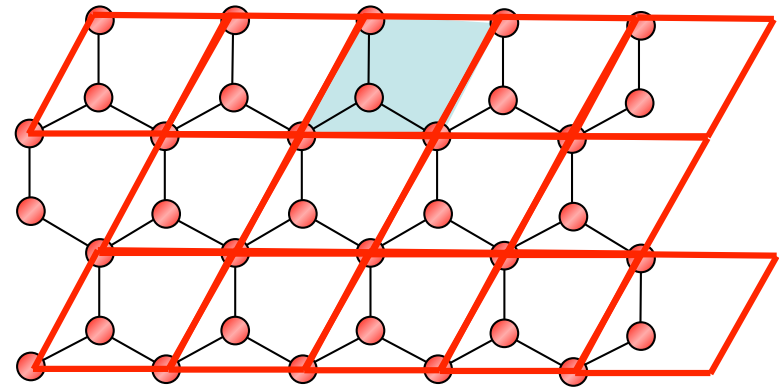
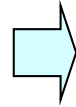
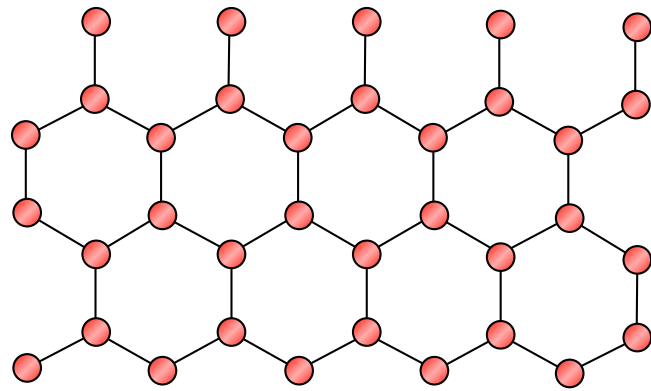
構成ブロック： 平行移動して配置することにより、重なることなく空間を完全におおうことができるブロック

例：グラフィン

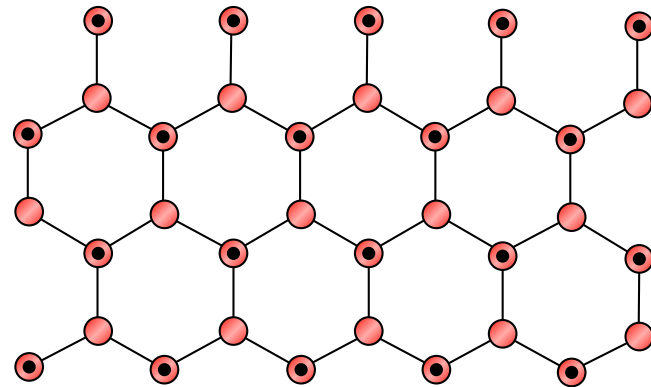
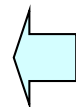
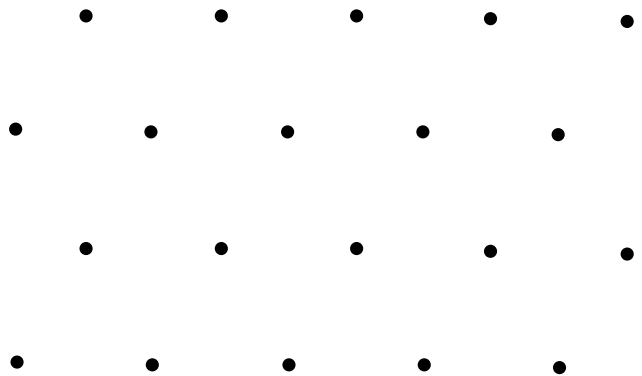
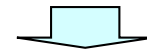


構成ブロック =  2個の原子で構成

結晶格子

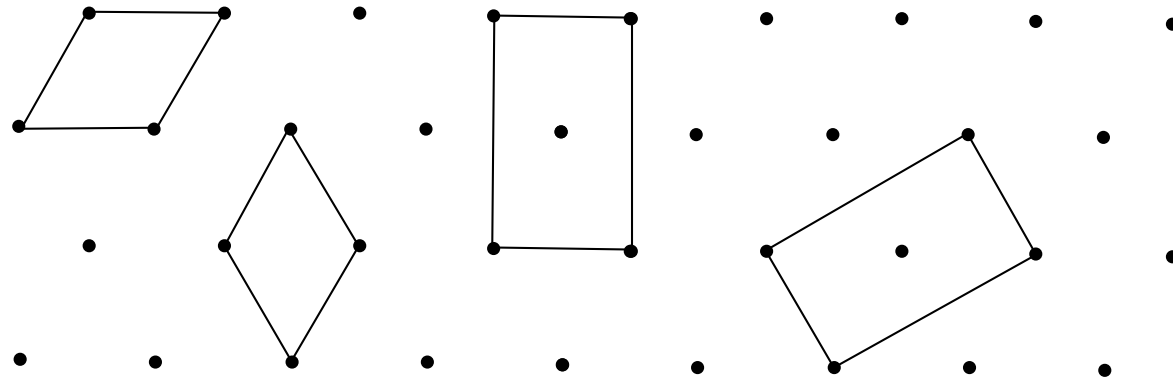


構成ブロックを
点で代表



格子点：周囲の環境が同一である点

単位胞 : 格子点の空間的なユニット



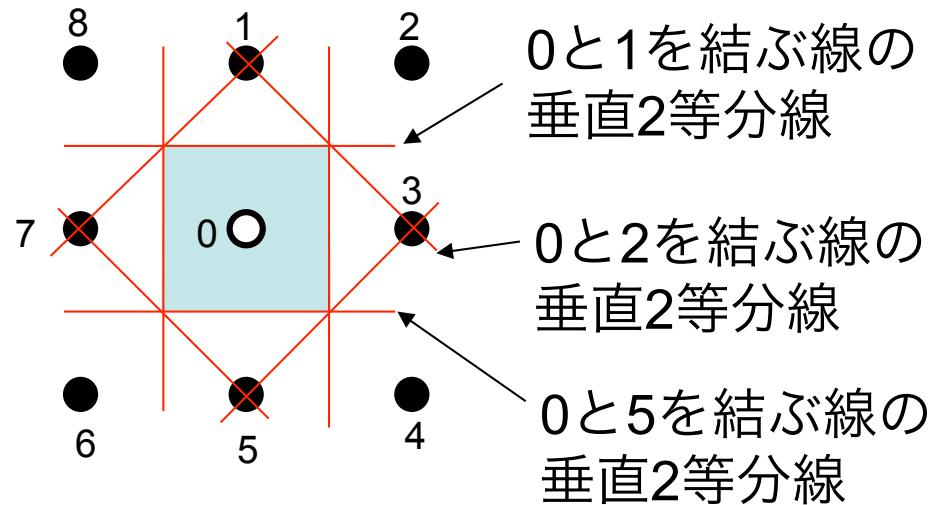
基本単位胞

格子点を平均で一つ含む単位胞

慣用単位胞

非基本単位胞であるが、対称性が良く原子の位置関係がつかみやすいので一般的に用いられる単位胞

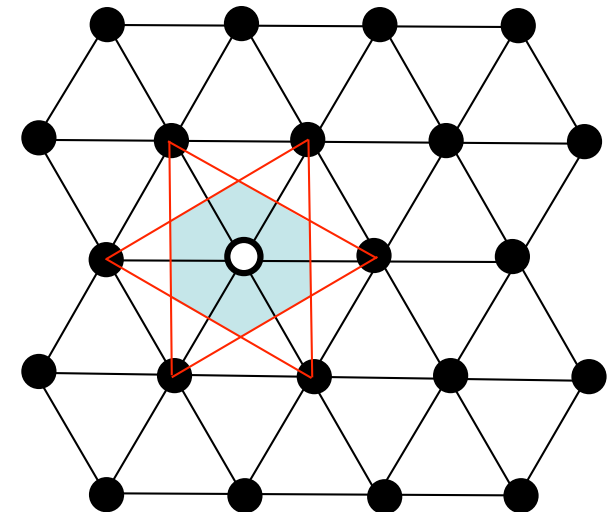
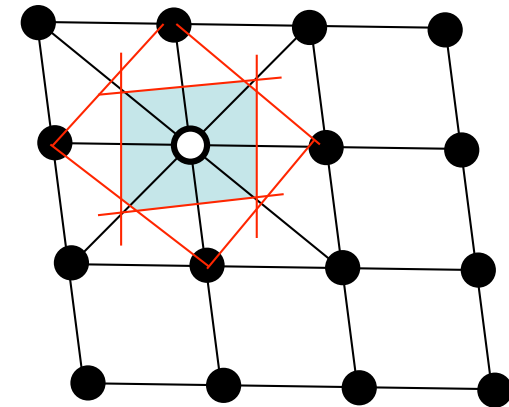
ウィグナー・ザイツ (Wigner-Seitz)胞 (セル)



基準の格子点 (○) と近接した点を結び、その垂直2等分線* (赤線) を引く。これらの線で囲まれた最小の多面体領域をウィグナー・ザイツ (Wigner-Seitz)胞あるいはウィグナー・ザイツ・セルと呼ぶ。

* 3次元格子の場合は垂直2等分面

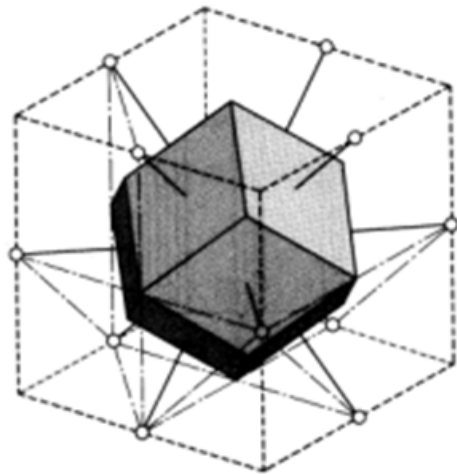
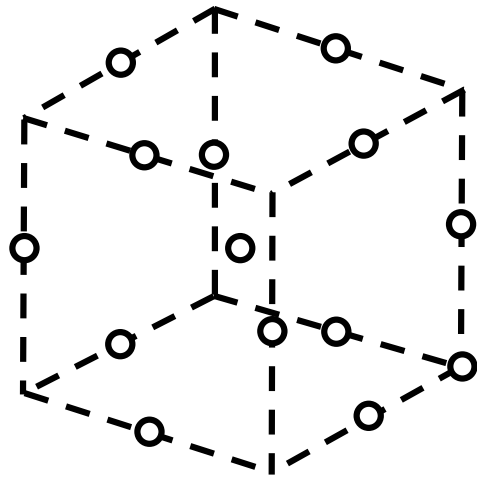
ウィグナー・ザイツ (Wigner-Seitz)胞は基本単位胞である。



ウィグナー・ザイツ (Wigner-Seitz) セル

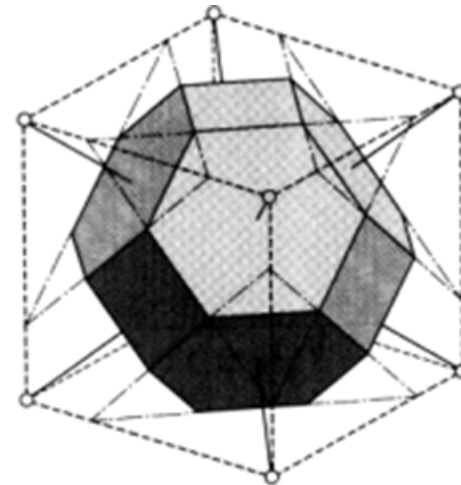
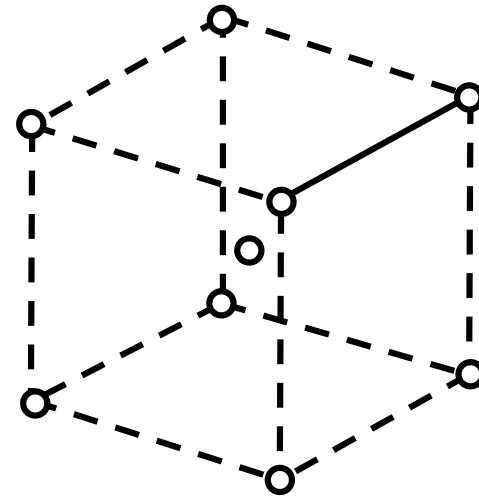
面心立方格子

(fcc : face centered cubic)



体心立方格子

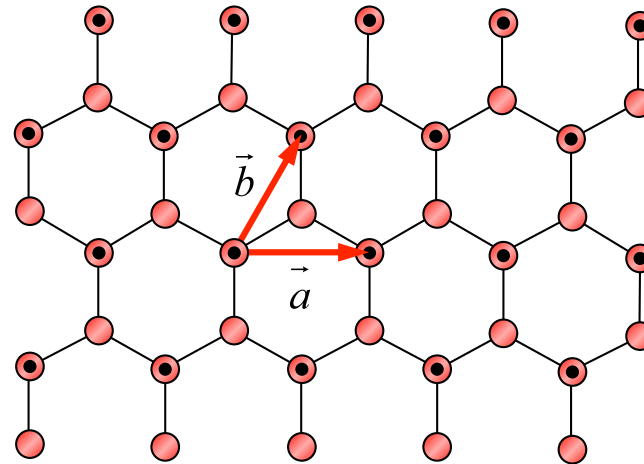
(bcc : body centered cubic)



2次元格子

原点を格子点上にとると、任意の格子点は格子ベクトル \vec{a} , \vec{b} から次で与えられる

$$\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} \quad u, v: \text{整数}$$



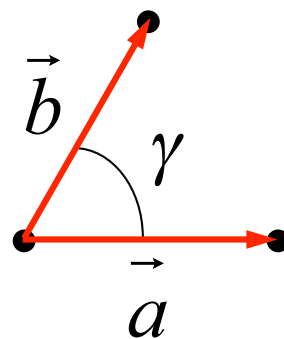
• : 格子点

格子ベクトルの長さを格子定数と言う。

単位胞の平行でない辺を格子ベクトルにとることが多い。

正確には基本単位胞のときにのみ、任意の格子点が
L-ゴでまわされる

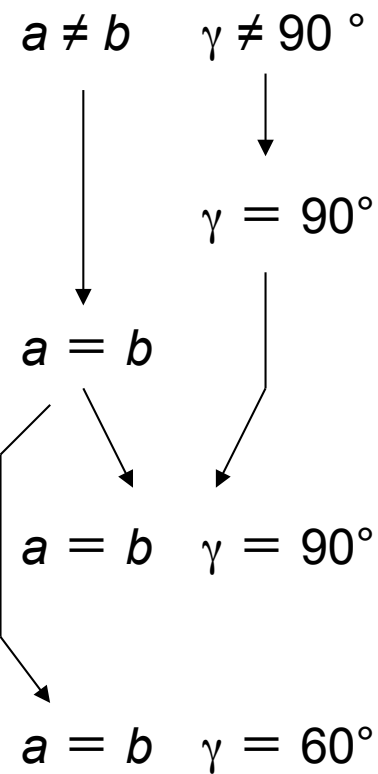
2次元格子



5つの基底ベクトル系

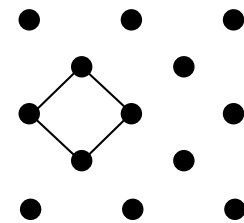
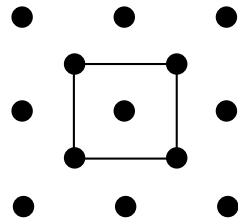
平面斜方格子 (平行四辺形格子)	$a \neq b$ $\gamma \neq 90^\circ$	
長方格子	$a \neq b$ $\gamma = 90^\circ$	
面心長方格子	$a \neq b$ $\gamma = 90^\circ$	
正方格子	$a = b$ $\gamma = 90^\circ$	
六方格子	$a = b$ $\gamma = 60^\circ$	

結晶構造を対称性により分類



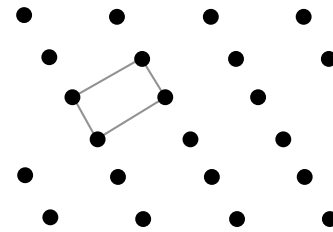
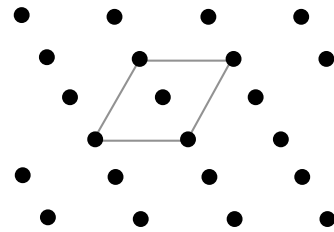
2次元格子

面心正方格子？



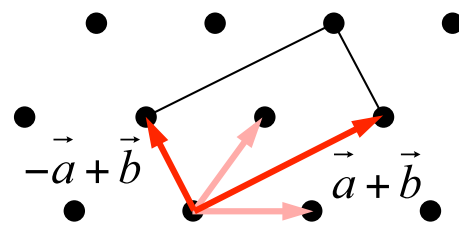
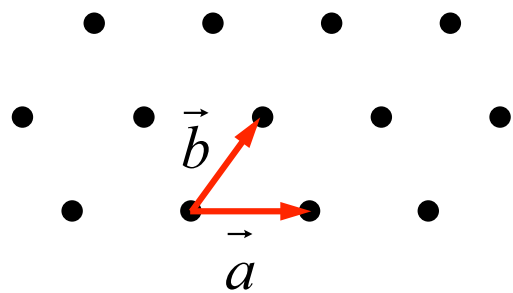
正方格子

面心六方格子？



長方格子

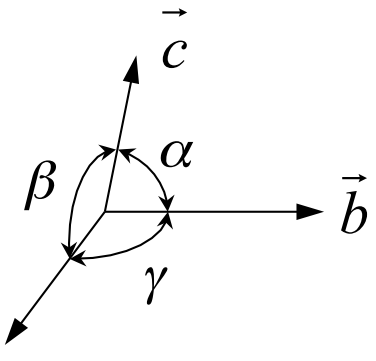
$a = b$ $\gamma \neq 60^\circ, 90^\circ$ は？



面心長方格子

$$(-\vec{a} + \vec{b})(\vec{a} + \vec{b}) = -|\vec{a}|^2 + |\vec{b}|^2 = 0$$

3次元格子

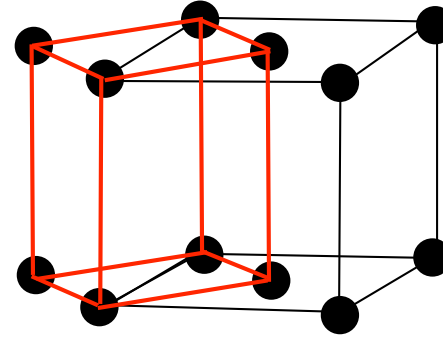
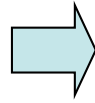
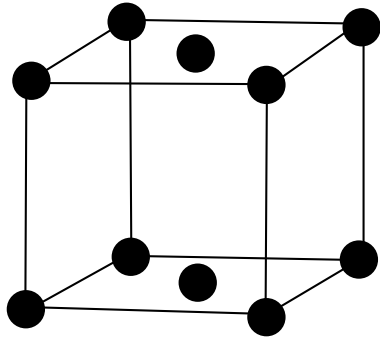


7つの基底ベクトル系と14のブラベー(Bravais)格子

		単純(P)	底心(C)	体心(I)	面心(F)
三斜 triclinic	$a \neq b \neq c \neq a$ $\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$				
単斜 monoclinic	$a \neq b \neq c \neq a$ $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$				
斜方 (直方) orthorhombic	$a \neq b \neq c \neq a$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
正方 tetragonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
六方 hexagonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$				
菱面体 (三方) rhombohedral	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$				
立方 (等軸) cubic	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				

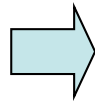
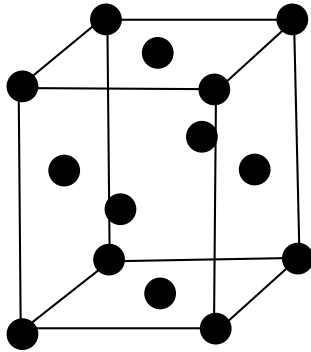
3次元格子

底心立方？

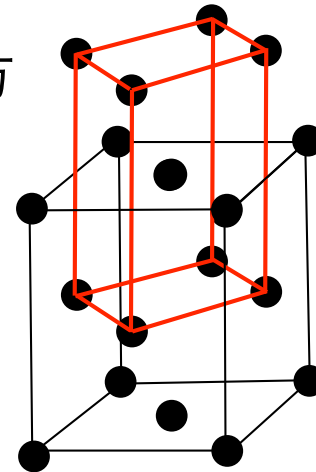


正方格子

面心正方？



体心正方



多くの結晶は対称性の大きな結晶格子をとる
 配位数（最近接の原子あるいはイオンの数）が大きいほど結合エネルギーが高くなり安定

面心立方格子(fcc : face centered cubic)

最密充填構造
 配位数 = 12

六方最密構造 (hcp : hexagonal closed-packed)

最密充填構造
 配位数 = 12

体心立方格子(bcc : body centered cubic)

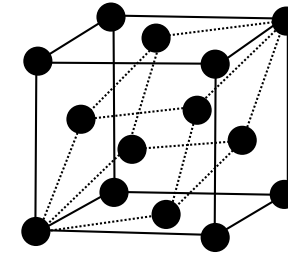
配位数 = 8
 第2最近接原子数 = 6

$$\left. \begin{array}{l} \text{最近接原子距離} = \frac{\sqrt{3}}{2} a = 0.87a \\ \text{第2最近接原子距離} = a \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{値が近い} \\ \text{ため} \\ \text{配位数} \\ \text{8+6に} \\ \text{近い} \end{array}$$

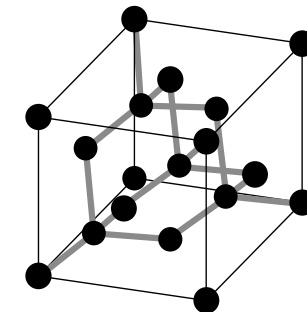
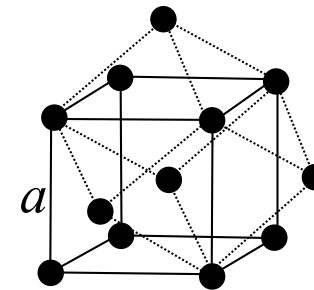
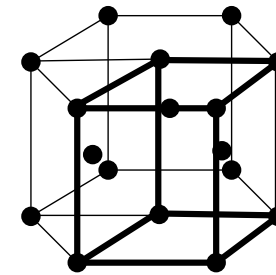
ダイヤモンド構造

配位数 = 4
 sp^3 混成軌道の4ボンドの制約下で最密充填

慣用単位胞



点線は基本単位胞



結晶格子面の表し方

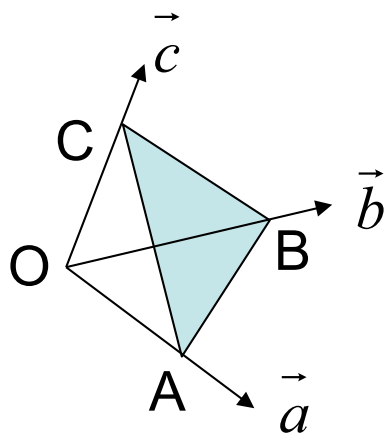
格子点 $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ u, v, w : 整数

格子面 直線上にない少なくとも3つの格子点を含んでいる面

平行で等間隔な格子面の組

格子面が3軸を切る点をA, B, Cとし、原点Oからそれらの点に至る距離を \overline{OA} , \overline{OB} , \overline{OC} とする

$$h' = \frac{a}{\overline{OA}} \quad k' = \frac{b}{\overline{OB}} \quad l' = \frac{c}{\overline{OC}}$$



で与えられる h', k', l' は有理数である。 h', k', l' に適当な整数を掛け、整数で互いに素の組 h, k, l を求める。
格子面の組を $(h k l)$ で表し、**面指数**あるいは**ミラー指数**という

負の値の場合には \bar{h} のように表す。

(2 -3 1) を $(\bar{2} 3 1)$ のように書く

逆に $\overline{OA} = \frac{a}{h}$ $\overline{OB} = \frac{b}{k}$ $\overline{OC} = \frac{c}{l}$ で作られる面は**原点に最も近い**格子面となる

2次元格子の例

この面を考える

$$\vec{a} \text{ 軸との交点 } \overline{OA} = -2\frac{1}{3}a = -\frac{7}{3}a$$

$$\vec{b} \text{ 軸との交点 } \overline{OB} = 3\frac{1}{2}b = \frac{7}{2}b$$

$$h' = -\frac{3}{7}, k' = \frac{2}{7}$$

整数 7 を掛けて

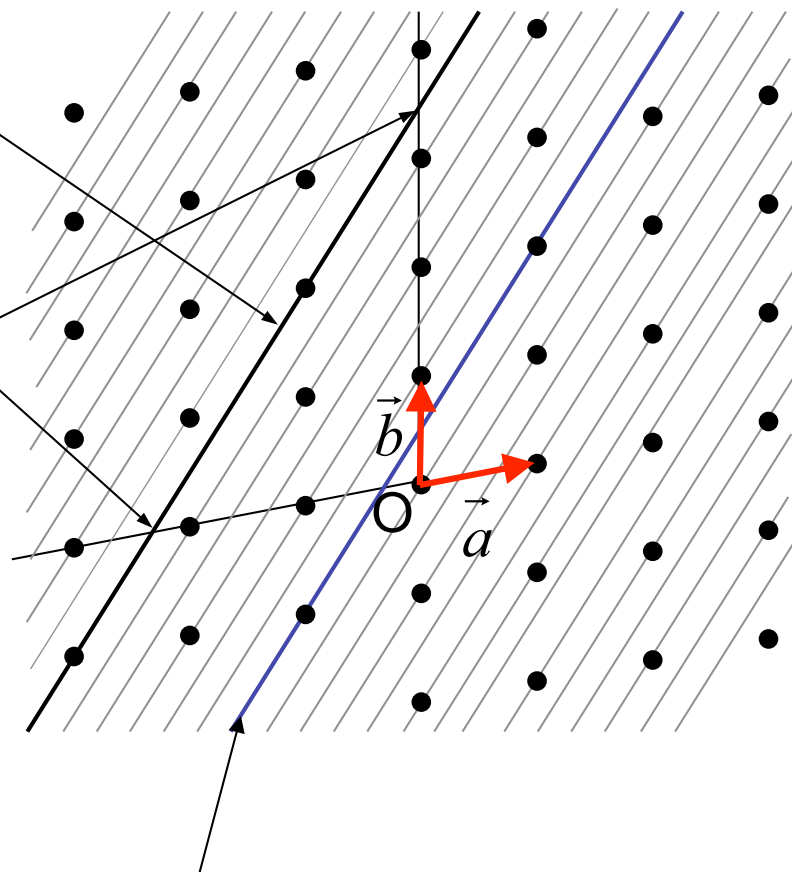
$$h = -3, k = 2$$

⇒ ミラー指数 $\bar{3}2$

原点に最も近い面

原点に近い面と \vec{a} の交点 $\vec{a}/3$

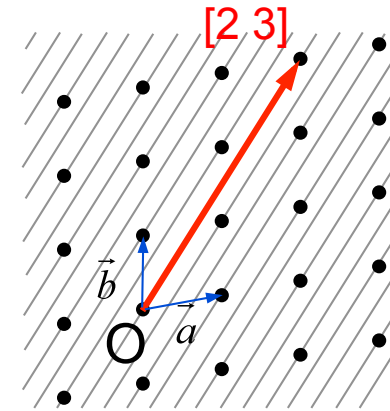
原点に近い面と \vec{b} の交点 $\vec{b}/2$



結晶格子で用いられる他の記号

互いに平行で等間隔な格子列の組

原点を通る格子列の上で原点にもっとも近い格子点の座標を用いて格子列を $[h k l]$ で表す

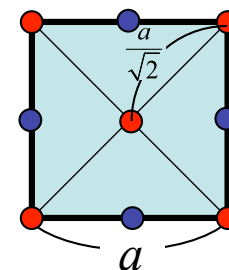
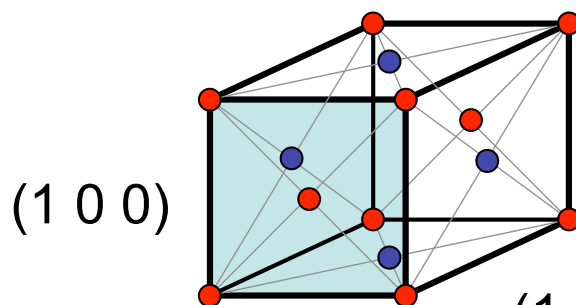
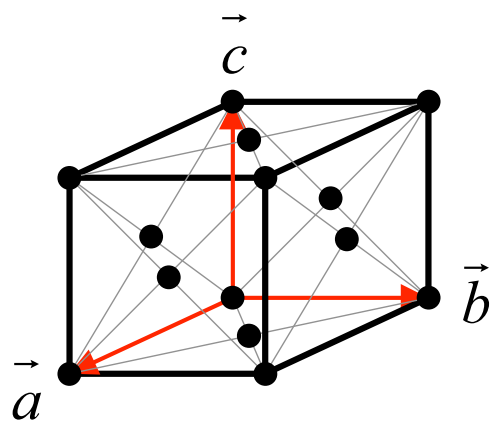


対称性により等価な面の集まりを面の族と呼ぶ。

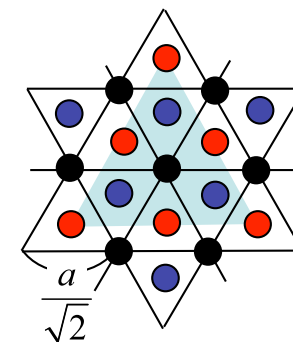
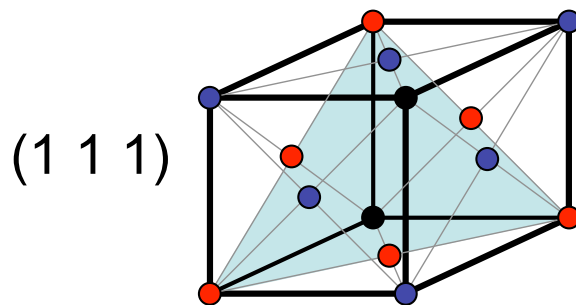
$(h k l)$ に等価な面の族を $\{h k l\}$ で表す

$[h k l]$ に等価な格子列の族を $\langle h k l \rangle$ で表す

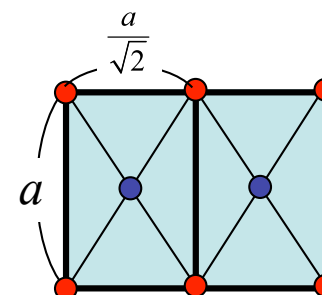
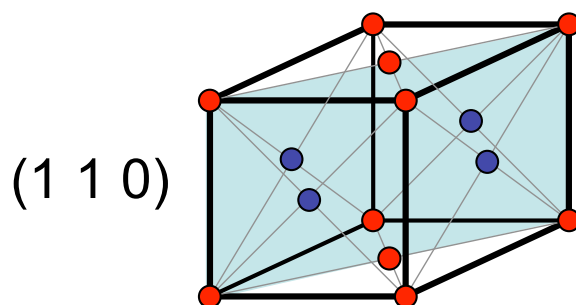
面心立方晶 (fcc)



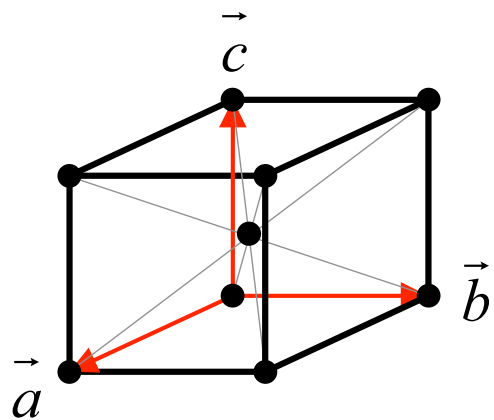
$$\{100\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



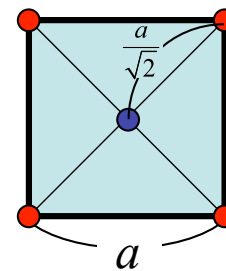
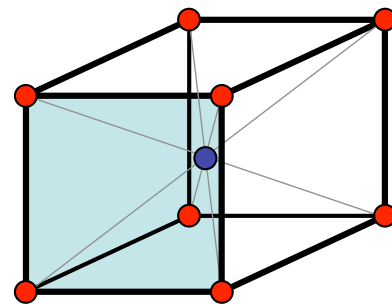
$$\{111\} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} & \bar{1} \\ 1 & \bar{1} & 1 \end{pmatrix}$$



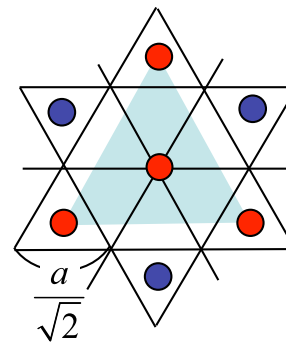
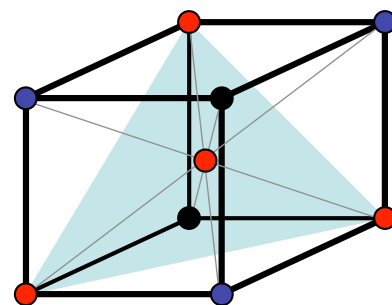
体心立方晶 (bcc)



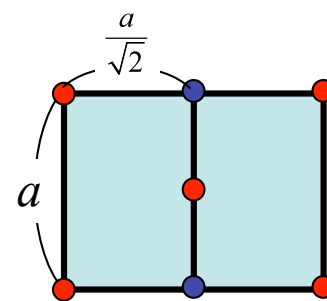
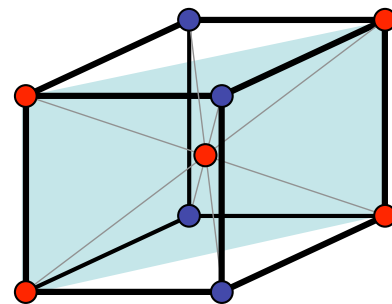
(1 0 0)



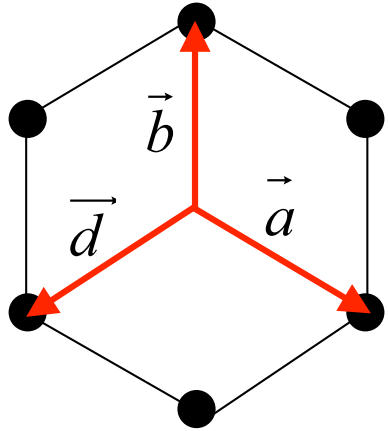
(1 1 1)



(1 1 0)

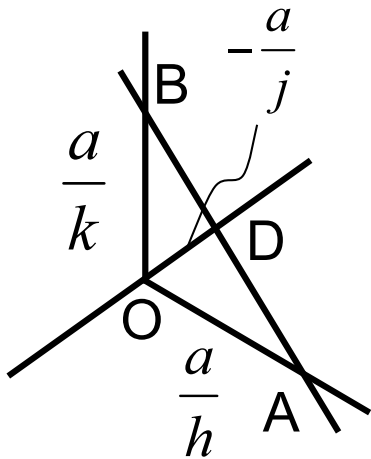


六方晶系の面指数



$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \rightarrow \vec{a}, \vec{b}, \vec{d}, \vec{c}$ を用いる

$$(h k l) \rightarrow (h k j l)$$



$$\triangle OAB = \triangle OAD + \triangle OBD$$

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{a}{h} \cdot \frac{a}{k} \sin 120^\circ = \frac{1}{2} \cdot \frac{a}{h} \cdot \frac{a}{-j} \sin 60^\circ + \frac{1}{2} \cdot \frac{a}{-j} \cdot \frac{a}{k} \sin 60^\circ$$

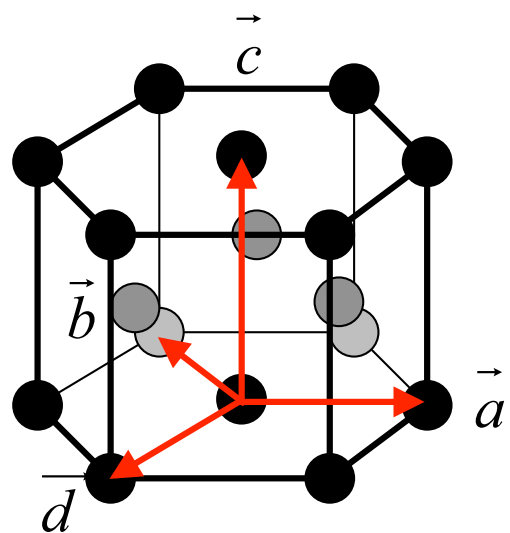
$$\Rightarrow h + k + j = 0$$

利点：面の対称性が明らかになる

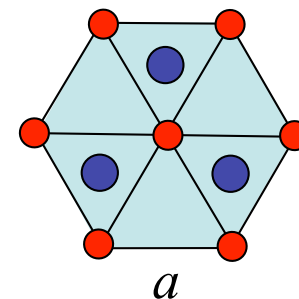
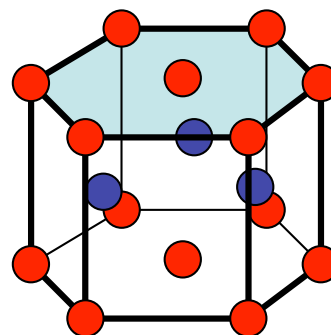
$$\begin{matrix} (1 \bar{2} 1) \\ (111) \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} (1 \bar{2} 1 1) \\ (11 \bar{2} 1) \end{matrix}$$

この2つの面が等価であることがわかる

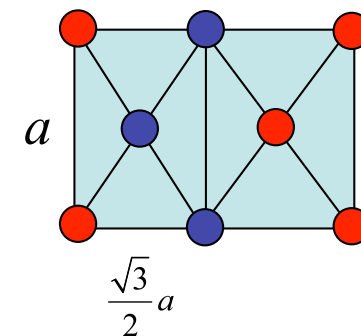
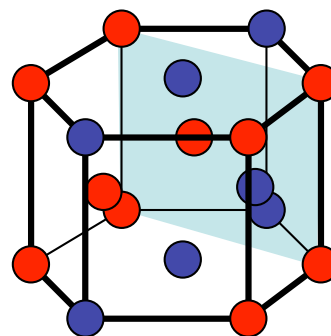
六方最密晶 (hcp)



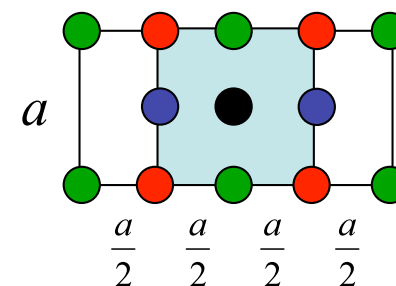
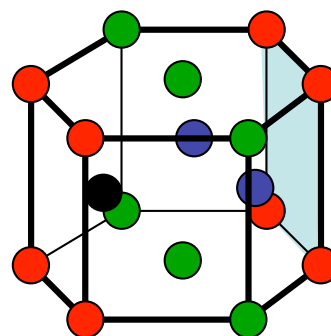
$(0\ 0\ 0\ 1)$



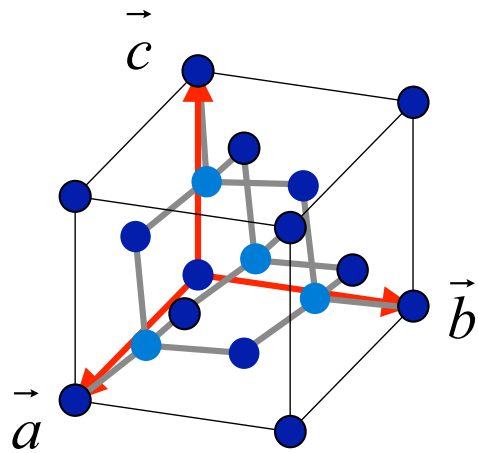
$(1\ 1\ \bar{2}\ 0)$



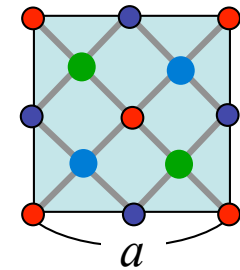
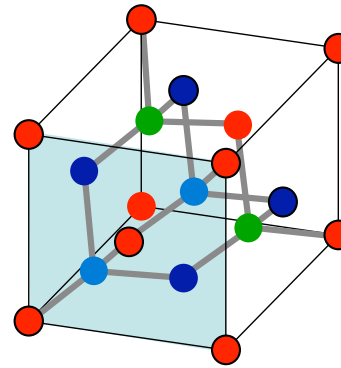
$(1\ 0\ \bar{1}\ 0)$



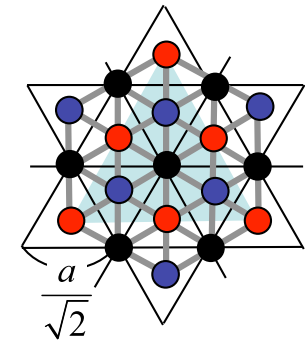
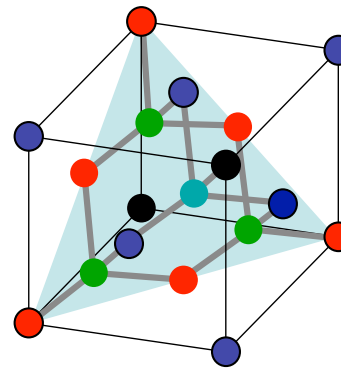
ダイヤモンド構造



(1 0 0)



(1 1 1)



(1 1 0)

