

3章 固体化学

結晶のおさらい 竹内第8章

(a) 単位格子 (単位胞) : 結晶中の繰り返し構造の単位 図 8.1

一般には六面体 → 空間を満たす

格子定数 : 大きさ (a, b, c)、形 (α , β , γ) を規定

14種類 : Bravais 格子 7種類の結晶系 図 8.2

格子に含まれる粒子数 (内部 : 1 面 : 1/2 辺 : 1/4 頂点 : 1/8)

(b) 結晶構造の決定 : X線結晶解析 図 8.7

回折時の光路差 : $2d \sin \theta$

回折像の現れる条件 $= n\lambda$ Bragg 条件

$$d = \lambda / (2 \sin \theta) \quad (n = 1)$$

金属 : 金属結晶

高分子 : 共有 (結合) 結晶

イオン性物質 : イオン結晶

分子性物質 : 分子結晶

3.1 金属結晶 : 金属結合

最密充填 : 六方最密

面心立方最密

体心立方

3.2 イオン結晶 : イオン結合

イオン半径 : 竹内 p. 90 (表 5.3)

半径比と構造 : 充填構造の隙間に入るときが最小

隙間	配位数	最小半径比	实例
三角形	3	$0.155 (\sqrt{4/3}-1)$	
四面体	4	$0.225 (\sqrt{3/2}-1)$	ZnS (セン亜鉛鉱型、ウルツ鉱型) CaF ₂ (ホタル石型)
八面体	6	$0.414 (\sqrt{2}-1)$	NaCl 型
立方体	8	$0.732 (\sqrt{3}-1)$	CsCl 型

3.3 共有（結合）結晶（巨大分子：共有結合）

結合方向（混成）が形を決める

（例）ダイヤモンド： sp^3

グラファイト、： sp^2

フラーレン、カーボンナノチューブも

3.4 分子結晶（van der Waals 力）

単原子分子：最密充填構造

多原子分子：一般に複雑

3.5 固体の電子軌道

3.5.1 バンド理論：量子力学の物質・材料科学への応用（図 3.15）

軌道の数：関与する原子軌道の分だけある。

金属では多数：エネルギー準位 \rightleftharpoons 連続

→バンド（帯）で近似

許容帯（バンドあり）

禁制帯（バンドなし）

価電子帯：価電子が入っている

伝導帯：価電子帯の上の空のバンド：電子入ると導電性

バンドギャップ

ない：導電体：金属 図 3.16

小さい：半導体：Si, Ge

大きい：絶縁体：ダイヤモンド（図で説明）

半導体の導電性：熱や光で励起

電子と正孔（キャリア）ができる（図 3.18a）