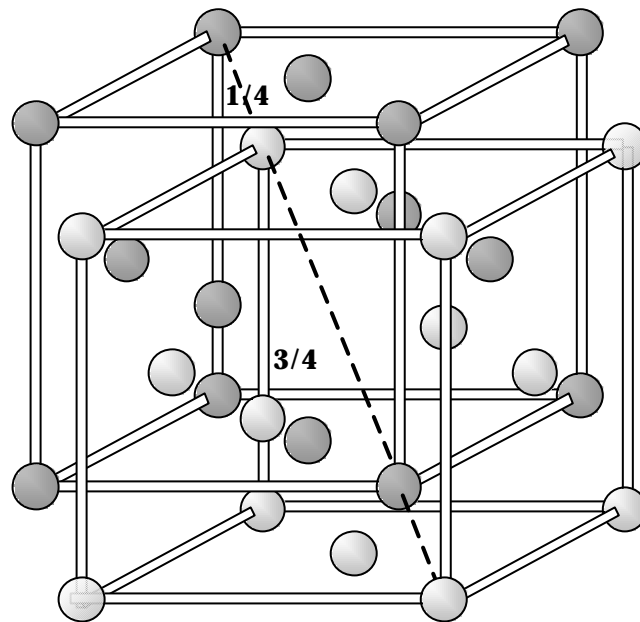


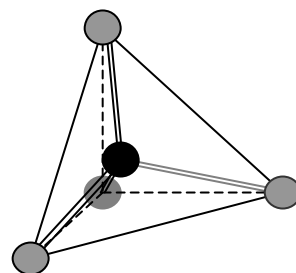
# ダイヤモンド構造 (diamond structure)

西川 和弘

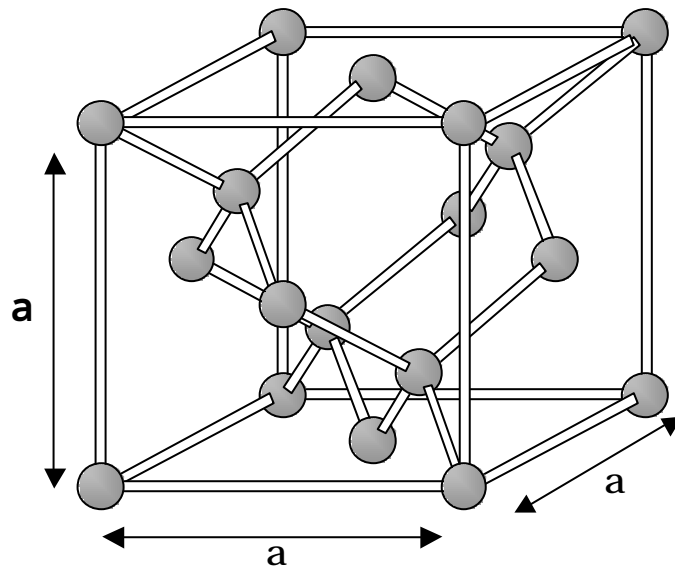
共有結合 ( 共有結合 ) するような原子は 族元素のダイヤモンド (C)、シリコン (Si)、ゲルマニウム (Ge) などがある。これらは、最外殻電子 (価電子) 4 個を持ち、最近接原子数 (配位数) 4、第 2 隣接原子数 (次に隣接する原子の総数) 12 で正四面体結合するダイヤモンド構造をとることが多い。ダイヤモンド構造は、( 図 1 ) のような、2 組の同じ原子からできた面心立方格子 (fcc) を対角線長の  $1/4$  だけずらした構造となっている。また、ダイヤモンド構造は他の構造に比べて隙間が多い。結晶格子点に球状の原子が互いに接して結晶を構成するとき、単位格子内で原子の占める割合 (充填率) は 34% であり、面心立方格子 (fcc) や六方最密構造 (hcp) のような最密構造の充填率が 74% に比べて、半分以下 (46%) である。



( 図 1 ) ダイヤモンド構造 ( 面心立方格子 (fcc) を対角線長の  $1/4$  だけずらした図 )



( 図 2 ) 正 4 面体結合



(図3) ダイヤモンド構造 (単位格子 格子定数  $a$  [ ])

(表1) ダイヤモンド構造のバンドギャップと格子定数 (at 300 K)

	バンドギャップ $E_g$ [eV]	格子定数 $a$ [ ]
C (ダイヤモンド)	5.47	3.56
Si	1.12	5.43
Ge	0.67	5.65
-Sn (灰色)	-	6.46