

## ダイヤモンド型結晶構造

### ダイヤモンド型結晶構造の単位格子中の原子配置

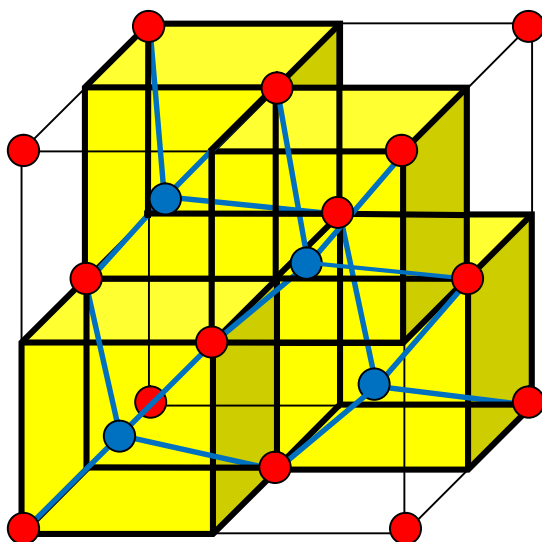
ダイヤモンド型結晶構造の単位格子の原子は、下図に示すように、

面心立方格子の原子配置をとる原子（赤色）と

単位格子の中にまるまる含まれる4個の原子（青色）から構成されている。

したがって、単位格子中の原子数は、面心立方格子の原子数に4を加えた数となる。

よって、ダイヤモンド型結晶構造の単位格子の原子数は、 $4 + 4 = 8$



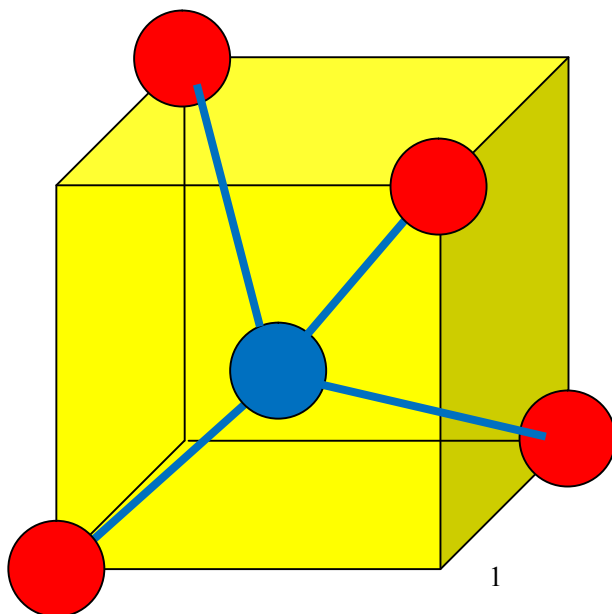
単位格子の中にまるまる含まれる4個の原子（青）は、

単位格子を8等分した小立方体のうち太線枠で囲った黄色の小立方体に含まれている。

### 黄色の立方体の拡大図

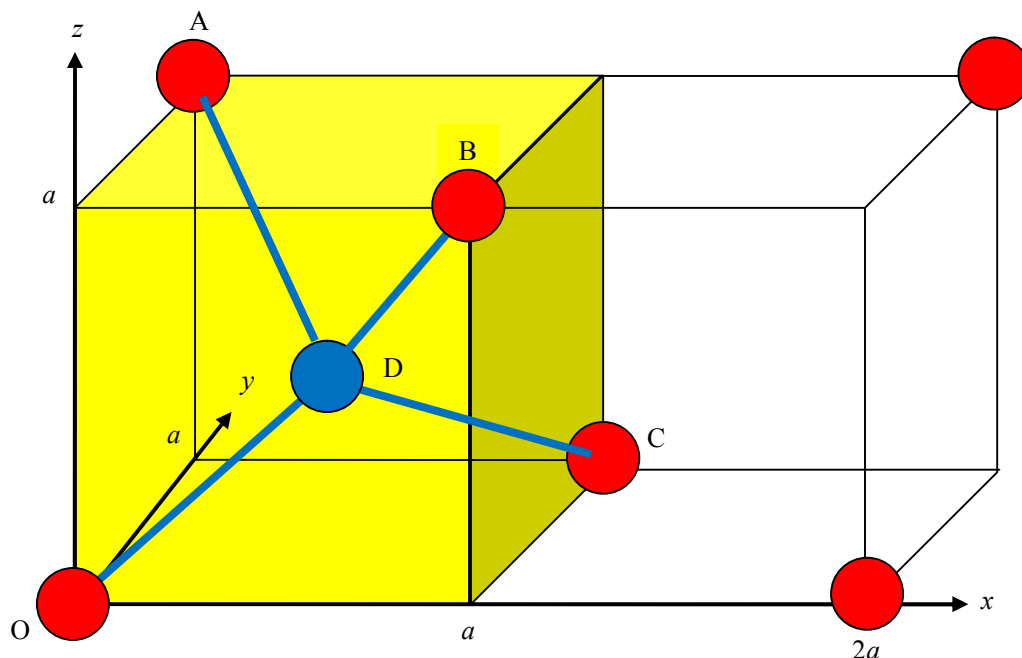
赤色の原子は正四面体の頂点に図のように位置し、

青色の原子は4個の赤色原子の重心と一致する。



## ダイヤモンド型結晶の原子間の距離

小立方体の1辺の長さを  $a$  とし、下図の  $xyz$  直交座標系で考えることにする。



質点の重心の座標は、 $\left( \frac{\sum m_i x_i}{\sum m_i}, \frac{\sum m_i y_i}{\sum m_i}, \frac{\sum m_i z_i}{\sum m_i} \right)$  ( $i=1,2,\dots$ ,  $m_i$  は質点  $i$  の質量)

で与えられる。

そこで、

O, A, B, C の質量を  $m$  ,

それぞれの座標を O(0,0,0), A(0,a,a), B(a,0,a), C(a,a,0) とすると、

$$D \left( \frac{m \cdot 0 + m \cdot 0 + m \cdot a + m \cdot a}{4m}, \frac{m \cdot 0 + m \cdot a + m \cdot 0 + m \cdot a}{4m}, \frac{m \cdot 0 + m \cdot a + m \cdot a + m \cdot 0}{4} \right)$$

よって、

$$D \left( \frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right)$$

ゆえに、原子間の距離  $OD = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{a\sqrt{3}}{2}$