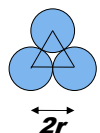
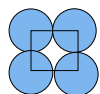


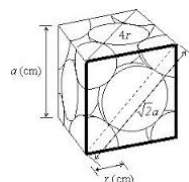
2次元の最密充填構造



円の半径 $r \rightarrow$ 三角形の一辺 $2r$
 $\rightarrow$ 三角形の面積 $(1/2) \times 2r \times \sqrt{3}r = \sqrt{3}r^2/2$
 円の面積 $\pi r^2 \times (1/6) \times 3 = \pi r^2/2$
 充填率 $(\pi r^2/2)/(\sqrt{3}r^2) = \pi/(2\sqrt{3}) = \mathbf{0.906}$



円の半径 $r \rightarrow$ 正方形の一辺 $2r$
 $\rightarrow$ 正方形の面積 $4r^2$
 円の面積 πr^2
 充填率 $(\pi r^2)/(4r^2) = \pi/4 = \mathbf{0.785}$



面心立方格子の充填率

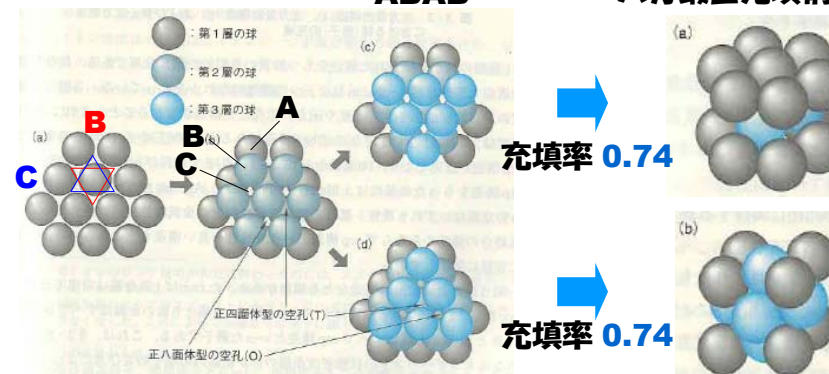
$$4r = \sqrt{2}a \quad \text{球の体積} \quad \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{(\sqrt{8}r)^3} = \frac{2\pi}{3\sqrt{8}} = 0.74$$

$\rightarrow a = \sqrt{8}r$ 立方体の体積

Hexagonal close packing (hcp)

ABAB

六方最密充填構造



充填率 **0.74**

充填率 **0.74**

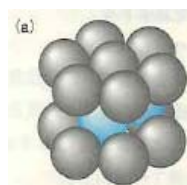
ABCABC

立方最密充填構造
= 面心立方構造

Cubic close packing (ccp)

Hexagonal close packing (hcp)

六方最密充填構造

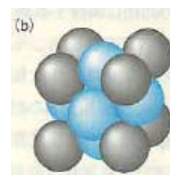


配位数 **12**
充填率 **0.74**

Cubic close packing (ccp)

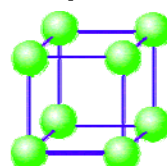
立方最密充填構造
= 面心立方構造

Face-centered cubic (fcc)



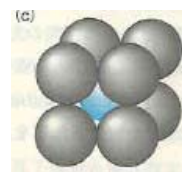
配位数 **12**
充填率 **0.74**

単純立方格子 Simple cubic



配位数 **6**
充填率 **0.52**

体心立方構造 Body-centered cubic (bcc)

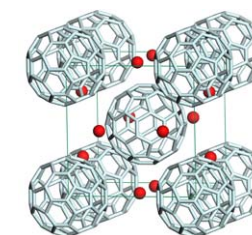


配位数 **8**
充填率 **0.68**

単体金属の構造 (室温)

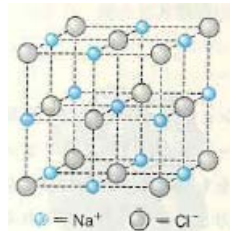
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Ln	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
bcc	hcp		ccp														

C_{60}
面心立方
 $C_{60} + K \rightarrow K_3C_{60}$
超伝導
(18 K)



1:1

NaCl 配位数 6

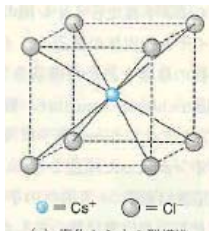


(a) 塩化ナトリウム型構造

各イオンはccp

**LiF, KCl,
AgCl, AgBr
CaO, MgO
MnS, PbS**

CsCl 配位数 8



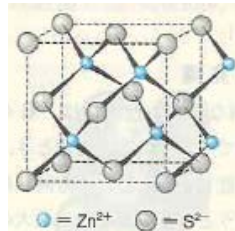
(e) 塩化セシウム型構造

**CsCl, CsBr
CsI, CuZn**

↑

**各イオンは単純立方
Cs=Clでbcc**

**配位数 4
ZnS (Zinc blende)**

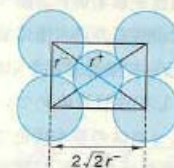
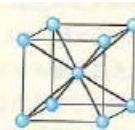


(b) セン亜鉛鉱型構造

Zn=Sでdiamond構造

**CuCl, γ-AgI
BeS, ZnSe
CdTe, BP
GaAs, AlSb**

CsF

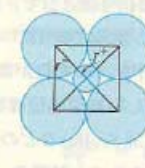
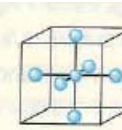


$$r^- + r^+ = \sqrt{3}r^-$$

$$\frac{r^+}{r^-} = \sqrt{3} - 1 = 0.732$$

(a) 立方体型配位

NaCl

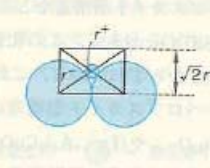
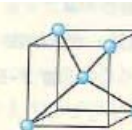


$$r^- + r^+ = \sqrt{2}r^-$$

$$\frac{r^+}{r^-} = \sqrt{2} - 1 = 0.414$$

(b) 正八面体型配位

ZnS



$$r^- + r^+ = \sqrt{\frac{3}{2}}r^-$$

$$\frac{r^+}{r^-} = \sqrt{\frac{3}{2}} - 1 = 0.225$$

(c) 正四面体型配位

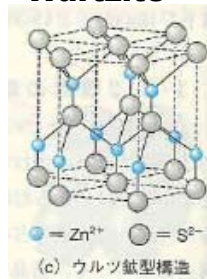
図 3・6 立方体型配位 (a), 正八面体型配位 (b) および正四面体型配位 (c) の場合の陽イオンと陰イオンの理想的な半径比の計算

r どうしが
接する条件

$$\frac{r^+}{r^-} > 0.732 > \frac{r^+}{r^-} > 0.414 > \frac{r^+}{r^-}$$

1:1

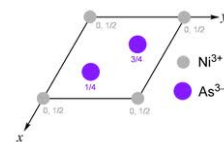
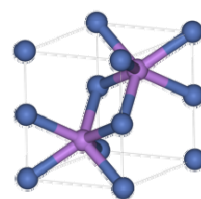
Wurtzite



(c) ウルツ鉱型構造

**CdS, BeO
ZnO, β-AgI**

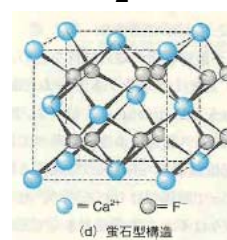
NiAs



● = Ni³⁺
● = As³⁻

1:2

CaF₂

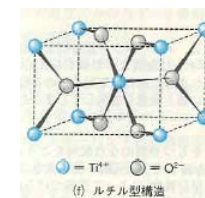


(d) 螢石型構造

配位数 8:4

Na₂O, K₂O

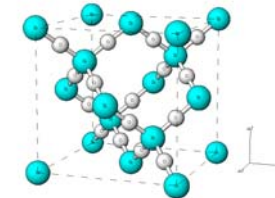
TiO₂ Rutile



(f) ルチル型構造

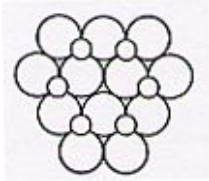
配位数 6:3

SiO₂

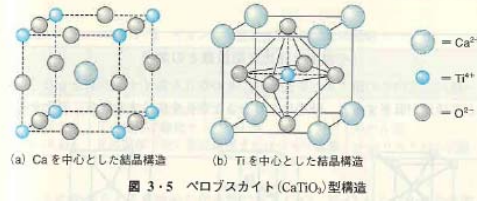


**クリストバル石型
配位数 4:2**

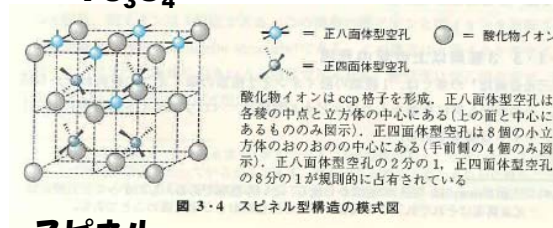
その他の組成



コランダム

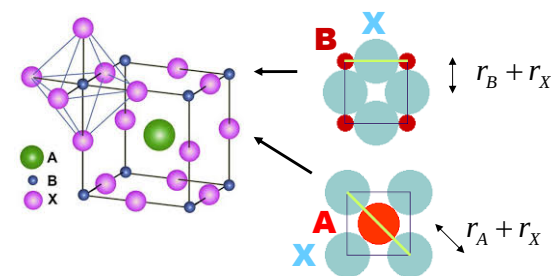


ペロブスカイト



スピネル

ペロブスカイト ABX_3

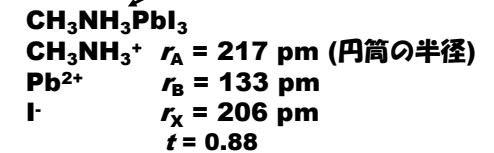
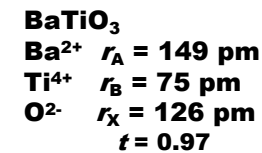


Aが空隙に入るためには

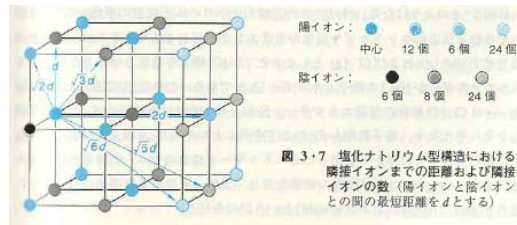
$$t = \frac{r_A + r_X}{\sqrt{2}(r_B + r_X)} < 1$$

tolerance factor
実際に存在するペロブスカイト:
 $0.8 < t < 1.0$

有機太陽電池の色素



Madelung Energy



第1近接 d 6個

第2近接 $\sqrt{2}d$ 12個

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{6e^2}{d} + \frac{12e^2}{\sqrt{2}d} - \frac{8e^2}{\sqrt{3}d} + \frac{6e^2}{2d} - \frac{24e^2}{\sqrt{5}d} + \frac{24e^2}{\sqrt{6}d} \dots \right)$$

$$= \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 d} \left(6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \frac{24}{\sqrt{6}} \dots \right) = 1.74756$$

Madelung定数

NaCl	1.74756	CdI_2	2.36
CsF	1.76267	CaF_2	2.51939
ZnS	1.63806	TiO_2	2.408
Wurtzite	1.64132	Al_2O_3	4.040