

結晶構造

波多腰玄一

1 はじめに

半導体レーザーや発光ダイオード（LED）には化合物半導体結晶が用いられる。今回は結晶の結合の元となる混成軌道と半導体結晶の結晶構造について述べる。Excelによる結晶構造の表示についても紹介する。

2 混成軌道

前章で、共有結合には最外殻電子が寄与していることを述べた。Si（シリコン）の例では、3s電子2個、3p電子2個が最外殻電子である。同じIV族におけるC（炭素）の最外殻電子は2s電子が2個、2p電子が2個である。これらの軌道の線形結合により新たな軌道関数、すなわち混成軌道^{1,2)}が形成され、これが原子間の電子対による化学結合に寄与する。

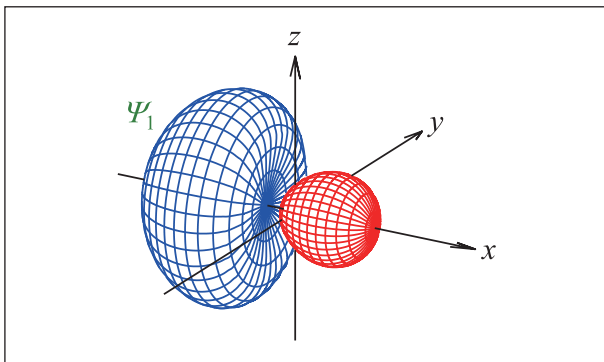


図1 sp²混成軌道の波動関数

s軌道とp軌道の混成軌道には、sp混成軌道、sp²混成軌道、sp³混成軌道がある。この中で例えばsp²混成軌道は以下の線形結合で表される。

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_s + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_{px} \quad (1)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_s - \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{px} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{py} \quad (2)$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_s - \frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{px} - \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{py} \quad (3)$$

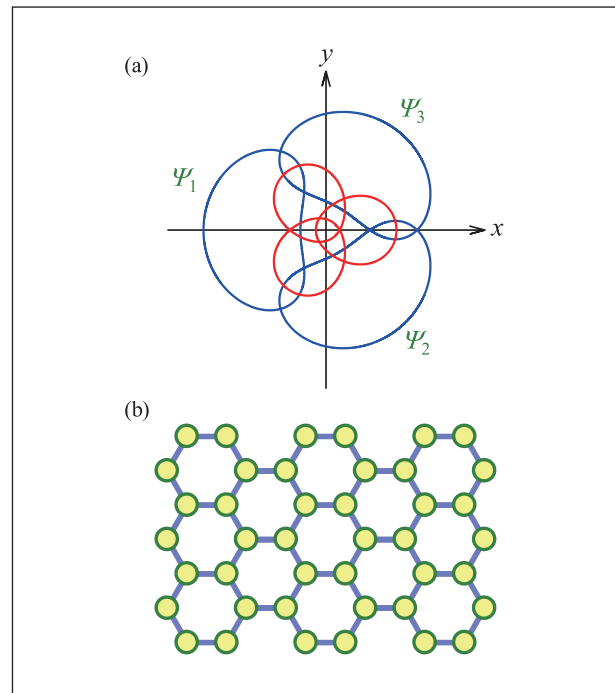


図2 (a) sp²混成軌道のxy-断面 (b) sp²混成軌道による原子の結合