

#### 問題 4 シリカとその結晶欠陥について

シリカやシリカガラスは、 $\text{Si-O}$  で表される共有結合（単結合）から構成されている。

- a) これらの構造中のケイ素（Si）と酸素（O）の配位数はいくつか。

シリカガラスの密度は  $2.203\text{g/cm}^3$  とする。

- b)  $\text{SiO}_2$  ユニットあたりの平均体積はいくらか。その中には平均でいくつの結合があるか。

シリカガラス中に多くみられる結晶欠陥は酸素空孔である。本来酸素原子があるべき場所になく、隣の酸素を失ったケイ素原子はそのケイ素同士で結合を形成して結晶を安定化させている。ある非晶質（アモルファス）シリカの試料は組成式  $\text{SiO}_{1.9}$  で表わされる。

- c) 上述の非晶質シリカ試料（ $\text{SiO}_{1.9}$ ）において、ケイ素同士の結合（Si-Si 結合）は全結合のうちどのくらいの割合で存在するか。
- d) あるシリカ試料の組成式を  $\text{SiO}_x$  としたとき、その Si-Si 結合の数  $n_{\text{Si-Si}}$  と Si-O 結合の数  $n_{\text{Si-O}}$  の比（ $n_{\text{Si-Si}}/n_{\text{Si-O}}$ ）を  $x$  の関数として表せ。また、すべてのケイ素原子が平均で1つの Si-Si 結合をもつ場合の  $x$  の値はいくつか。