

#### 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、**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)** シリカ（**SiO<sub>2</sub>**）単位胞（単位構造，単位格子）の体積はいくらか。その中にはいくつの結合手があるか。

シリカガラス中にしばしばみられる結晶欠陥とは酸素空孔のことである。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。非晶質（アモルファス）シリカには**SiO<sub>1.9</sub>**で表わされるものもある。

**c)** 非晶質シリカ（**SiO<sub>1.9</sub>**）において，ケイ素同士の結合（**Si-Si**結合）は全結合手のうちどのくらいの割合で存在するか。

**d)** あるシリカサンプルを**SiO<sub>x</sub>**としたとき，その**Si-Si**結合の数と**Si-O**結合の数の割合（ $n_{\text{Si-Si}}/n_{\text{Si-O}}$ ）を**X**の関数として表せ。また，すべてのケイ素原子が1つの**Si-Si**結合をもつ場合の**X**の値はいくつか。