

結晶模型を作ろう

BB-dan Model

安 達 洋

室蘭工業大学電気電子工学科 ☎ 050-8585 北海道室蘭市水元町 27-1

(1998 年 5 月 29 日受理)

Let's Make Crystal Models !!

——BB-dan Model——

Hiroshi ADACHI

Department of Electrical and Electronic Engineering, Muroran Institute of Technology
27-1 Mizumoto-cho, Muroran, Hokkaido 050-8585

(Received May 29, 1998)

BB-dan is Japanese brand name of ball bullets for toy guns. The bullets are plastic spheres with a diameter of 6 mm, and are very cheap, for example 4,000 bullets costs you about 1,000 yen (equivalent to approximately 8 US dollars). Ball crystal models called some times "marble ball models" are constructed by using these tiny ball bullets. Here I give the name BB-dan model, because the bullet is called BB-dan. The constructing methods are detailed. The pictures of models for a hexagonal compact structure, a body centered cubic structure, a zinc-blende type structure and a Si(111) 7×7 reconstructed structure are given.

1. は じ め に

電界イオン顕微鏡や電界放射顕微鏡を用いて研究している研究者の間では、針状試料の先端の原子配列を理解するのに球を並べて模型を作ることが古くから行われていた。これを marble ball model と呼んでいる。日本語に直訳すると大理石の球を並べた模型ということになるが、マーブルはどうもお菓子の名前に由来しているらしい。このモデルを作るには、同じ半径の球が多数必要になる。一辺に 10 個並べて立方体を作るとしたとき、単純に考えて 1000 個も必要になるので、簡単には作ることができなかった。日曜大工用品を扱っている店をのぞいてみると、プラスチックの球が売られているが 1 つが数十円もするので、1000 個も買うと数万円にもなる。数をそろえて注文すれば、もっと安く手に入るかもしれないが、それを扱ってくれる店を探すことも容易ではな

い。特に筆者のように地方に住んでいるとなおさらである。

おもちゃ好きの学生が、おもちゃの銃に使用する弾丸を買ってきた。値段が非常に安い。約 4,000 個入った袋が 1,000 円程度で売られている。ディスカウントショップでは 700 円程度のところもあるとのことである。銃で遊ぶ趣味を持っているのかと思い聞いてみたら、そのような趣味はなく、これで結晶模型を作ろうと考えたとのことであったので、安心する一方で常に自分の課題を考えながら余暇を楽しんでいることを知って、たのしくも思った。私事で恐縮だが、私の長男はこの弾を使う銃で遊んでいて、目を傷つけ半年ほど病院通いをさせられた。危険なおもちゃなので、売らないようにしてほしいと思う一方で、これほど安価に多数の球が売られていることはありがたいことにも思える。この弾の商品名がビービー弾とのことなので、この結晶模型にビービーダンモデル (BB-dan model) と名付けてみた。

この弾は球状をしていて直径はおおよそ 6 mm で扱いや

すい大きさであるうえに、種々の色のものが売られているので、結晶モデルを作るにはうってつけのものである。ただし、直径が1つに限られるので、作ることができるものが制限されるのは致し方ないことである。この球10個を一列に並べてノギスで長さを計てみると59.1 mmで、何度か計りなおしてもばらつきはほとんどない。おもちゃであるにもかかわらず、品質管理がしっかりしているのに感心した。ロットによるばらつきがあるかも知れないが、かなり正確に製造されていることをうかがい知ることができた。

2. 製 作

プラスチックモデル用の接着剤を添付のブラシで少しずつ塗布しながら球を並べていく。接着に要する時間は非常に短く数十秒間押さえておくと、手を離しても移動しない程度にまで接着する。完全に固着されるまでには数時間放置する必要がある。簡単なジグ（作業工具）を作っておくと、固着中にあえて手で押さえておく必要はない。ただし、この接着剤は成分の大部分が溶剤で、プラスチックを溶かして、その溶けた部分同士を押しつけることによって接着するようになっている。したがって、押しつける力が強いと溶ける部分が増えるので、球の中心間の距離が小さくなってしまうことがある。押しつける力をほとんど加えないように注意しながら固着するのを待たないと、結晶が歪んでしまう結果になる。また、固着直前には強い張力が働くので、近くに接着剤を塗布した直後でまだ固着していない部分があると、その部分を引き込んでしまうので、やはり結晶が歪む結果になる。固着寸前には少しの補正なら可能なので、接着して十数分後に歪みを確かめて、補正するのが良い。この補正作業には竹製の耳かきが非常に便利な道具となる。補正の時期を失すると歪みが残ってしまうので、後の結晶成長が思うようにならなくなるので注意する必要がある。プラスチックを溶かさないう型の接着剤があると便利だと思うが、市販されているものでは、固着までの時間や付着力などでそれぞれに一長一短があり、プラスチックモデル用の接着剤に勝るものはいまのところ見つけてはいない。また、接着剤は球間の接触する部位のみにつけるような注意をしないと結晶が歪む結果になる。

3. 最ちょう密構造

球の間を接着して作るのので、原子を球にみたてたとき原子間が接触している必要がある。最ちょう密構造の面心立方格子と六方晶は原子球が接触しているので、単に球を積み上げるだけで簡単に作ることができる。面心立方格子の場合、 $\{001\}$ 面を基本におくより $\{111\}$ 面を

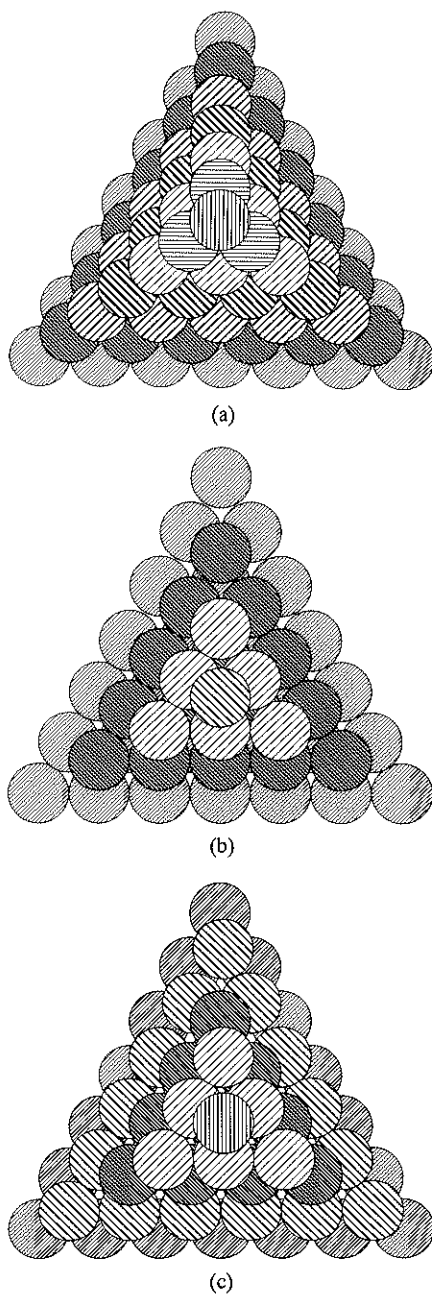


Fig. 1 Construction of the most compact packed structure. a) a tetrahedron of the face centered cubic structure (FCC). b) a corner-cube of FCC. c) a triangular cone of the hexagonal compact packed structure (HCP).

基本において構築するほうが作りやすい。六方晶の場合には、 $\{0001\}$ 面を基本におく。

平面上に球を互いに接触するように並べてゆくと、球は正三角形を基本格子にするように整然と並ぶ。第1層

を並べて接着剤が乾くのを待って、第2層を接着しながら並べる。Fig. 1 に示したように第1層を正三角形に並べ、第2層をそれより一回り小さな正三角形で終了し、第3層はさらに一回り小さな正三角形で終了するようにして積み上げてゆくと角錐状のものができ上がる。

Fig. 1 (a) に示すように単純に球を積み上げてゆくと正四面体ができる。これは面心立方格子になっている。正四面体のどの面を見ても正方形に球が並んでいるところがないので、なかなか面心立方格子に結びつけにくい。Fig. 1 (b) のように球を並べるとやはり三角錐状になるが、今度は面上に正方状に球が並んでいるところがあるので、立方格子になっていることが直感的に見て取れる。角錐の面間の角度が直角になり面心立方格子になることが実感できる。実際に作って観察してみるとある種の感激がある。とにかく作ってみることをお勧めする。

Fig. 1 の (a) と (b) の両方のものを作り、両方の三角形の面を接触させて合わせてみると、球の並びが連続的になっているのが見て取れる。Fig. 1 (a) の正四面体が面心立方格子になっていることが納得でき、その稜が面心立方格子の $\langle 110 \rangle$ 軸になっているとも一目瞭然となる。

第3層を並べるときには、第1層との関係で2つの可能性が出てくる。Fig. 1 (c) に示すように、並べた面の上方からみて第1層と第3層の球が同じ位置になるように並べると六方最ちょう密構造となる。第1層と第3層の球が重ならない位置に並んでいる Fig. 1 の (a) や (b) では面心立方格子になる。第3層の原子の並べ方で、このように2つの結晶形が区別されることが体験できるうちに、最近接原子間の並びが四角だったり、三角だったりして、教科書の図を見たり、コンピュータの画面を見たりしているときには見落としている特徴が、球を積み

上げるという動作ではっきりと確認できるのもこの模型を作ることの良い点と考える。

六方最ちょう密構造の場合、底面が正六角形になるようにして、同じように積み上げてみると、Fig. 2 に示した写真のように水晶の結晶の頂部と似た形ができる。実際の水晶と比較してみると頂角が鋭くなっているのに気づく。水晶は、 SiO_2 分子が規則的に並んでできる形であり、その分子はとても球とは考えられない形をしているうえに、結合手が立体的に出ているため、このような差が現れてくる。

4. 単純立方格子

単純立方格子を作るには、直角を出すための簡単なジグ(作業工具)が必要になる。箱の隅を利用するのも一方法ではあるが、私の場合は研究室の隅から約10 cm 角で1 mm 厚のアルミ板1枚と、長さ約12 cm で10 mm 角1 mm 厚のアルミアングルを2本を見つけて来て、Fig. 3 の写真に示すようにそれらをダブルクリップで固定して使用している。アルミ材を利用したのは、誤って接着剤を落としてしまったとき、結晶とジグが接着されるのを防ぐためである。アルミアングルは押し出し整形法で作られるので、非常に正確な直角に折り曲がっている。一方の面をクリップで止めると、必然的に他方の面は垂直に立つことになる。この垂直面が、球を垂直に積み上げるときに役に立つ。

2本のアルミアングルをクリップでアルミ板に固定するとき、その間の角度を分度器や三角定規を用いて正確に90度を設定すれば、それに沿って球が並ぶので90度を出すことができる。隣同士の球の色を変えると食塩のようなイオン結晶も実現できる。 $\{111\}$ 面では正イオン層と負イオン層が交互に重なっている様子も容易に理解することができる。

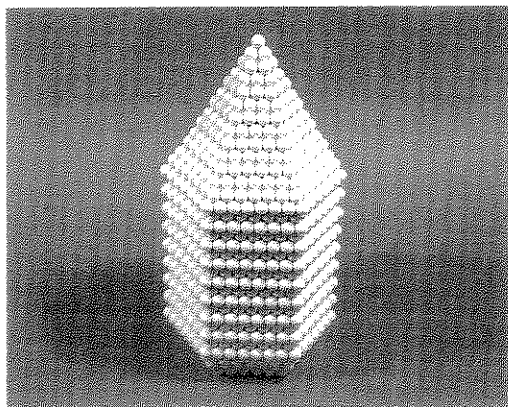


Fig. 2 An example of the hexagonal compact packed structure (HCP).

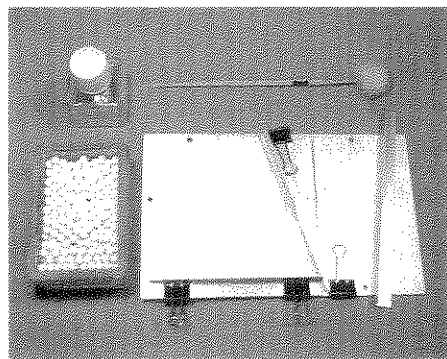


Fig. 3 Tools for making the crystal model.

5. 体心立方格子

体心立方格子では、原子を球で置き換えたとき隣同士間が接触する面は $\{110\}$ なので、この面に基本をおいて球を並べると容易に構成できる。基本格子の $\{110\}$

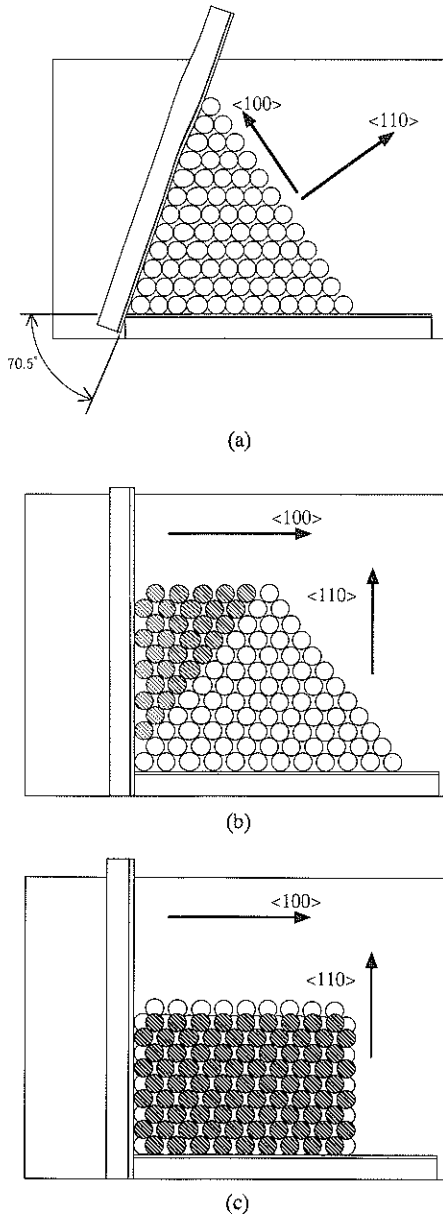


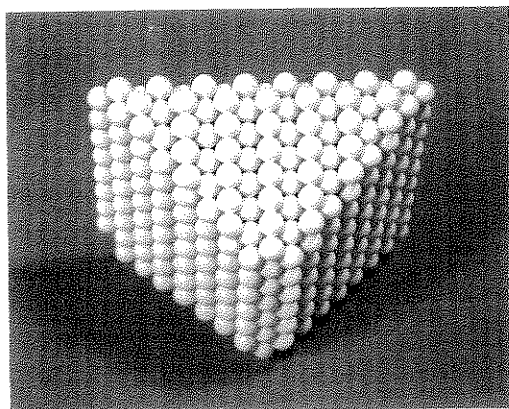
Fig. 4 Construction of (110) plane of the body centered cubic structure (BCC). a) The fundamental triangular structure. b) Extending to a rectangular structure. c) Stacking configuration over than two layers.

面は、辺の長さの比が $1:\sqrt{2}$ の長方形なので、これに沿って球を並べるには、Fig. 4 (a) に示すようにジグの2つのアングルの間の角度を、この長方形の辺と対角線のなす角の2倍、つまり 70.5° に設定してクリップで止める。2つのアングルに挟まれたところに、頂点から順に球を並べていくと、三角形状に $\{110\}$ 面の配置を満足するように球が並び、基本形ができる。長方形の $\{110\}$ 面が欲しいときには、Fig. 4 (b) に示すようにジグの2本の間の角度を直角に調整し、この三角形の球の並びの $\langle 100 \rangle$ 軸を一方のアングルに接触するようにおいてさらに球を並べると作ることができる。この操作をするときに、接着剤が完全に固まってからジグをはずすようにしないと変形してしまうので注意が肝要となる。

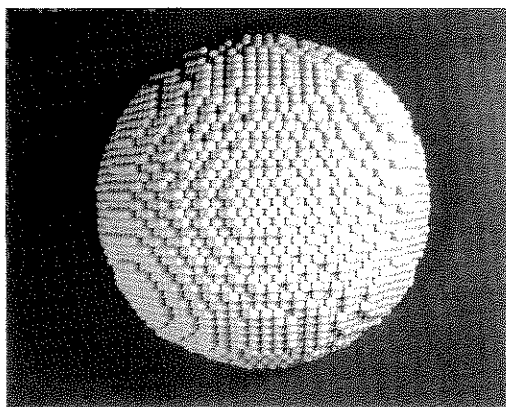
第2層を並べるには、 (110) 面が $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面に直角に交差することを考慮して、Fig. 4 (c) に示すように $\langle 001 \rangle$ 軸の並びをジグのアルミアングルの一方に接触させておいて、新しい球をアルミアングルの垂直面に接触し、かつ $\langle 001 \rangle$ 軸の原子の間になるように並べて接着していくと、アルミアングルに接触している面が $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面となる。第3層は、今できた $(\bar{1}\bar{1}0)$ を机などの平面上において第2層の球の間に位置するように並べると構成できる。各層ごとに $\langle 110 \rangle$ 方向を一つずつ小さくしてゆくと、 (110) 面と $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面に挟まれたところに (100) 面が形成される。このようにして (100) 面ができるので、以後この面を基準に考えて球を積んでゆくと体心立方格子が形成できる。Fig. 5 (a) は三角柱状に組んだ体心立方格子であり、下面と側面が $\{100\}$ で、背面が (110) 面、上面が (112) 面である。

体心立方格子を形成する金属では、外力を加えると $\{110\}$ 面が滑り面となって塑性変形することが知られている。金属線を作るときの線引き工程は塑性変形で、そのときの滑り面は $\{110\}$ 面であるから、金属線の長さ方向には $\langle 110 \rangle$ 軸が並ぶことになる。球を並べて $\{110\}$ 面を作ってみるとこの面の凹凸が他の面に比べて著しく小さく滑りやすいことが直感的に理解できる。

金属を電気化学的にエッチングして鋭い針状にして、先端を観察するのに電界放射顕微鏡が良く用いられ、その標準的試料としてタングステン線がよく使われる。そのとき、放射パターンの中心に必ず $\{110\}$ 面がくるのは線引き工程での塑性変形に原因があり、タングステンが体心立方格子を形成していることから必然的にそうなる。Fig. 5 (b) は頂点が (110) 面にくるように半球状に組んだもので、タングステンの電界放射パターンの解釈に使っているもので、針先の様子が手に取るように解る。



(a)

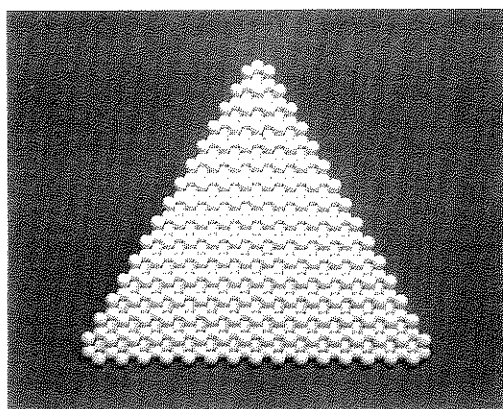


(b)

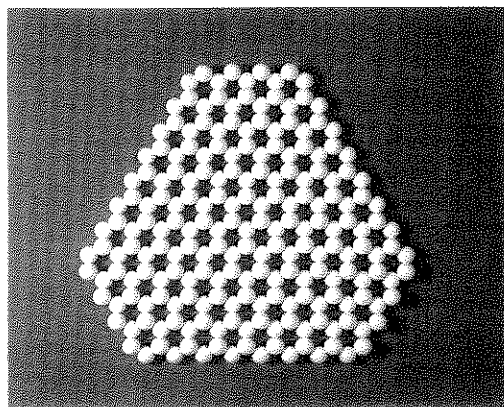
Fig. 5 Examples of the body centered cubic structure (BCC). a) A triangular bar. The top surface is $\{112\}$, the sides and bottom surfaces are $\{100\}$, and the back surface is $\{110\}$. b) A hemisphere of (BCC) directed to $\langle 110 \rangle$ axis.

6. ダイヤモンド構造

ダイヤモンド構造を作るには、一工夫が必要になる。その理由は、どの方向の結晶面をみても原子に相当する球を平面上で接触させて形成できる平面がないからである。今までの経験では、 $\{111\}$ 面に基本をおいて構成するのが最も簡単と思われる。体心立方格子の $\{111\}$ 面の原子の並びがダイヤモンド構造の $\{111\}$ 面の並びと同じになるので、この面のレプリカを作ってそれを基準にして作る。Fig. 6 (a) の写真に示したものが、この目的のために作った体心立方格子の $\{111\}$ 面である。この面に接着しない球を一面に並べる。この層は不用意に接着剤を落としたときのためのバッファー層である。この上で球を接着剤で固定しながら一層つくり、接着剤が固化してから取り上げると、Fig. 6 (b) に示したように



(a)



(b)

Fig. 6 Construction of the diamond structure. a) The die has a $\{111\}$ surface of BCC. b) A layer structure of the diamond $\{111\}$ surface made by a help of the die.

ダイヤモンド構造の $\langle 111 \rangle$ 面の一層ができ上がっている。同じものを必要の枚数作り、重ねて接着するとダイヤモンド構造ができ上がる。しかし、層間の接着の際に、層間の原子の並びがダイヤモンド構造と一致するかの確認が必要となる。単純にそのまま重ねると、体心立方格子になるのは理の当然である。また、層状のグラファイト構造になることもある。まず、小さなものをいくつか作ってみて、その並びを一度確認してみることをお勧めする。その後、目的の大きさのものを作ってみると良い。これら3つの結晶構造が、これほどにまで似た原子配列であることは、この模型を作ってみるまで、実感できなかった。

Fig. 7 は、このようにして作った閃亜鉛鉱型構造で、GaAs などの化合物半導体に見られる構造である。 $\{111\}$ 面が安定になるためには、その構成する一方の原子のみ

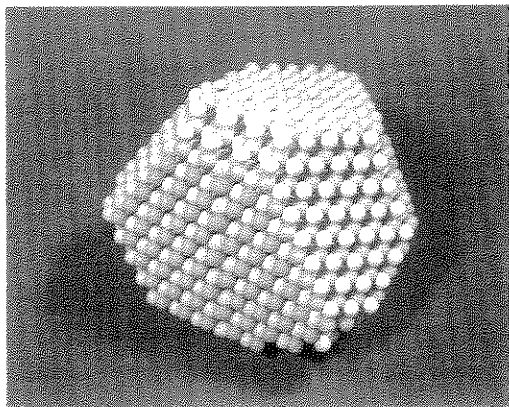


Fig. 7 An example of the zinc-blende structure.

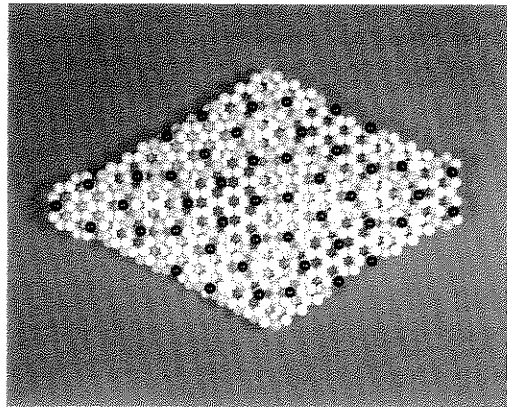


Fig. 8 An example of the Si (7×7) reconstructed structure.

が面に現れ、しばしば a 面や b 面、あるいは Ga 面や As 面といった区別される理由がはっきりと確認できる。

Fig. 8 は、Si (111) に現れる (7×7) 再構成面である。STM で観察されるのは、黒い球で表した吸着原子である。STM の画像では Si の (7×7) 構造の原子配列が観察されるとされているが、画像の各々の輝点はこれほど多くの原子の代表として現れてくる。このことが体感できたのは、このモデルを作ってみて、良いことだったと考えている。また、ひし形に見える基本格子の半分ずつの三角形で、原子の並びが基本の Si 結晶の並びと微妙に違うこともはっきりと観察できる。

球を並べるという単純作業ではあるが、実際にやってみると研究室の日常とは異なった時間帯が体験でき、落ちついた時間を過ごすことができるうえに、球を並べると種々のことが頭の中を横切り、日常を反省したりする時間帯が得られた。その意味では趣味の時間と同じで、非日常の時間が得られたと思っている。週末など時

間の余裕があるときに作ると、単純作業であるがゆえに時間を忘れて没頭することがあった。

プラスチックモデル用の接着剤の溶剤は、無害とされているが、蒸気を換気するように気を配って頂きたい。日曜大工用品を販売している店で、活性炭入りのマスクを売っているので、それを利用することをお勧めする。非常に効果があり、接着剤のにおいを感じないで作業ができた。とにかく、作ってみることをお勧めする。ここには書けなかったいろいろとおもしろいことが見えてくること請け合いです。

本稿は、北海道大学、山梨大学、室蘭工業大学の三大学が共同で開催しているジョイントセミナーでの原稿をもとにして書いた。投稿を勧めて下さいました山梨大学の川村隆明先生に感謝します。また、図面や写真の製作には室蘭工業大学の山根康一氏に負うところが大きい。そのおかげで原稿を所定の締め切りに間に合わせることができた。ここに感謝します。