

金属の結晶格子には体心立方格子，面心立方格子，六方最密構造などがある。次の各問いに答えよ。

ただし， $A_{\text{g}}=108$ ，アボガドロ定数は $6.0 \times 10^{23} / \text{mol}$ とする。なお，(3)の(b)～(e)は有効数字2桁で答えよ。

- (1) 体心立方格子の単位格子中に含まれる原子の数は何個か。
- (2) 六方最密構造中に含まれる原子の数は何個か。
- (3) 金属の銀 (**Ag**) の結晶は面心立方格子をつくっており，単位格子の一辺の長さは $3.8 \times 10^{-8} \text{ cm}$ である。ただし，銀の原子は剛体の球とみなし，単位格子中では原子が互いに密着しているとする。
 - (a) 単位格子中には何個の銀原子が含まれているか。
 - (b) 1 cm^3 中には何個の銀原子が含まれているか。
 - (c) 最隣接原子間距離は何 cm か。
 - (d) 単位格子中で銀原子の占める体積は何 % か。
 - (e) 銀の結晶の密度は何 g/cm^3 か。

解答

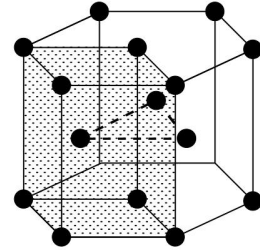
- (1) 2個 (2) 6個(または2個) (3) (a) 4個 (b) 7.3×10^{22} 個
(c) 2.7×10^{-8} cm (d) 74% (e) 13 g/cm^3

解説

(1) $\frac{1}{8}(\text{頂点}) \times 8 + 1(\text{中心}) = 2(\text{個})$

- (2) 六方最密構造の単位格子を右図の正六角柱と考えると、各頂点に位置する原子は正味6分の1、正六角形の各面の中心に位置する原子は正味2分の1、その他の3原子は正味3原子が含まれるから

$$\frac{1}{6} \times 12 + \frac{1}{2} \times 2 + 3 = 6(\text{個})$$



[補足] 最小のくり返し単位は右図の正六角柱の3分の1の菱形柱なので、これを単位格子と考えると $6 \div 3 = 2(\text{個})$ が答えとなる。

教科書などでは正六角柱の図が示されているが、単位格子の本当の意味、すなわち構造のくり返しの最小単位としては菱形柱の方が正しい。

- (3) (a) 単位格子の8つの頂点に位置する原子は正味8分の1、6つの面の中心に位置する原子は正味2分の1が単位格子に含まれるから

$$\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4(\text{個})$$

- (b) $(3.8 \times 10^{-8})^3 \text{ cm}^3$ の単位格子中に正味4個の原子が含まれているから、 1 cm^3 には

$$\frac{4}{(3.8 \times 10^{-8})^3} = 7.28 \times 10^{22}$$

$$\doteq 7.3 \times 10^{22}(\text{個})$$

- (c) 単位格子の面の対角線は、単位格子の一边の長さの $\sqrt{2}$ 倍であり、これが最隣接原子間距離の2倍であるから

$$3.8 \times 10^{-8} \times \sqrt{2} \times \frac{1}{2} = 1.9 \times 10^{-8} \times 1.41$$

$$= 2.67 \times 10^{-8} \doteq 2.7 \times 10^{-8}(\text{cm})$$

- (d) 原子球の半径 r は最近接原子間距離の2分の1であり、単位格子に正味4個の原子球が含まれるから、 $3.8 \times 10^{-8} = a[\text{cm}]$ とおくと、原子球1個の体積は

$$\frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2} a}{4} \right)^3 [\text{cm}^3]$$

であるから、

$$\frac{\text{原子4個の体積}}{\text{単位格子の体積}} \times 100$$

(e) 求める密度を d [g/cm^3] とおくと

$$\left(\begin{array}{l} (3.8 \times 10^{-8})^3 d [\text{g}] \cdots \text{原子 4 個} \\ 108 (\text{g}) \cdots \cdots \text{原子 } 6.0 \times 10^{23} \text{ 個} \end{array} \right)$$

の関係より

$$\frac{(3.8 \times 10^{-8})^3 d}{108} = \frac{4}{6.0 \times 10^{23}}$$

よって $d = 13.1 \doteq 13$ (g/cm^3)

[補足] 実際の銀の単位格子の一辺の長さは 4.09×10^{-8} cm で、密度は $10.5 \text{ g}/\text{cm}^3$ (20°C)。