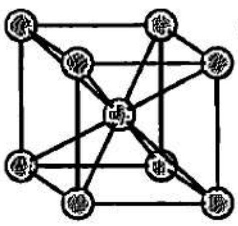
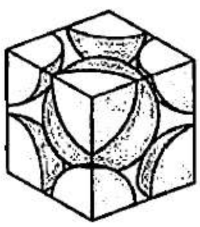
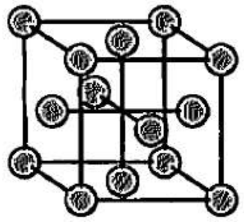
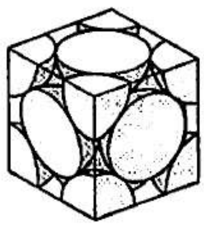
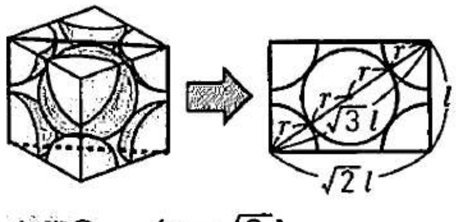
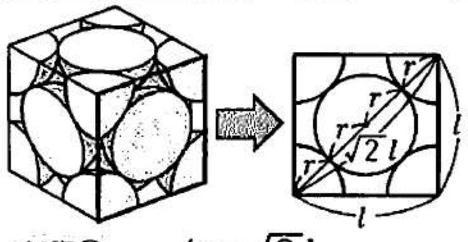
THEME 1

金属結晶

「金属結晶」で用いる知識

	体心立方格子	面心立方格子(立方最密構造)
単位格子中の原子の配置(左上)と剛体球モデル(右下)	 ◉は原子の中心を表す。 	 ◉は原子の中心を表す。 
単位格子中の原子の個数	知識① $\frac{1}{8}\times 8+1=2$(個)	知識⑤ $\frac{1}{8}\times 8+\frac{1}{2}\times 6=4$(個)
最近接の原子の数(配位数)	知識② 8個	知識⑥ 12個
原子半径 r と単位格子の一辺の長さ l との関係	 知識③ $4r=\sqrt{3}l$	 知識⑦ $4r=\sqrt{2}l$
充塡率(じゅうてん)	知識④ 68%	知識⑧ 74%

知識⑧の補足　六方最密構造の充塡率は，類似の最密構造である面心立方格子(立方最密構造)の充塡率と等しく，74%である。

単位格子の一辺の長さを l(cm)，原子量を M(⟹モル質量を M(g/mol))，単位格子中に含まれる原子の個数を n，アボガドロ定数を N(/mol)としたときの金属の結晶の密度 d(g/cm³)
知識⑨ $d=\dfrac{\frac{M}{N}\times n}{l^3}$ (g/cm³)

例題 1 体心立方格子(原子間距離と単位格子の大きさ)

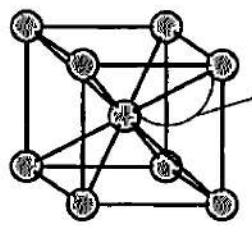
アルカリ金属 A は体心立方格子をとる。アルカリ金属 A の体心立方格子の中心から一つの頂点までの距離は 4.50×10^{-8} cm であった。この体心立方格子の一辺の長さはいくらになるか。ただし，$\sqrt{3} = 1.73$ とし，有効数字 2 桁で答えよ。

関西学院大

ADVICE まずは，体心立方格子に関する基本的な問題からです。

知識の選択 「知識③ を用いる」

『体心立方格子の中心から一つの頂点までの距離は 4.50×10^{-8} cm』とは，体心立方格子を構成する原子の中心間距離 R が 4.50×10^{-8} cm であることを意味している。



また，剛体球モデル(原子を，変形しない球体であると仮定したモデル)を考えると，剛体球モデルでは最近接の原子は互いに接しているので，

$$原子の中心間距離\ R = 原子半径\ r \times 2 = 2r$$

である。よって，単位格子の一辺の長さ l は，

知識③

体心立方格子の場合：$\mathbf{4r = \sqrt{3}\, l}$

より，$l = \dfrac{4}{\sqrt{3}} r = \dfrac{4}{3}\sqrt{3}\, r = \dfrac{2}{3}\sqrt{3}\, R$

$$= \frac{2}{3}\sqrt{3} \times 4.50 \times 10^{-8} = \frac{2}{3} \times 1.73 \times 4.50 \times 10^{-8}$$

$$= 5.19 \times 10^{-8} (\mathrm{cm})$$

となる。

解答 5.2×10^{-8} cm

例題 2 **体心立方格子（密度）**

金属ナトリウムは，体心立方型の結晶格子をもつ。したがって一つの体心立方格子中に含まれるナトリウム原子の数 A は明らかである。体心立方格子の一辺の長さを B〔cm〕とすると，アボガドロ定数 N〔/mol〕の値はこれらの結晶格子に関する測定値をもとにして求めることができる。そのためには，A，B と原子量 M の３つの物理量以外に，もう一つ別の物理量 x を知る必要がある。これにより N を A，B，M および x の関数として表すことができる。

問１　物理量 x の名称と単位（問２で用いる場合の）を書け。

問２　N を B，M および x の関数として示せ。　　**都立大**

ADVICE　金属の結晶の密度を測定することによって，アボガドロ定数を算出することができます。そのことは，しっかりと理解できていますか？

生徒　「固体の密度って，一般的には　$\text{密度}=\dfrac{\text{質量〔g〕}}{\text{体積〔cm}^3\text{〕}}$ でいいのですよね」

先生　「金属の結晶の密度の場合には，金属の結晶の単位格子に注目して，

$\text{密度}=\dfrac{\text{単位格子中の原子の質量〔g〕}}{\text{単位格子の体積〔cm}^3\text{〕}}$ とした方がいいね」

生徒　「“単位格子中の原子の質量〔g〕”は，“原子１個の質量〔g〕×単位格子中に含まれる原子の個数 n”だから，原子量を M（モル質量を M〔g/mol〕），アボガドロ定数を N〔/mol〕とすると，$\dfrac{M}{N}\times n$ ですね」

先生　「そう，つまり金属の結晶の密度 d〔g/cm^3〕は，単位格子の一辺の長さを l〔cm〕とすると，$d=\dfrac{\frac{M}{N}\times n}{l^3}$ ……**知識⑨**　となるんだ」

生徒　「なるほど。l，M，n の値さえわかっていれば，d を測定することによって，N の値が計算できるわけですね」

知識の選択　『**知識⑨** と **知識①** を用いる』

知識⑨

$$d=\frac{\frac{M}{N}\times n}{l^3}$$

題意より，$l(=B)$，$M(=M)$，$n(=A)$は明らかになっているので，『もう一つ別の物理量 x』とは，『金属の結晶の密度 d』である。また，

知識①

体心立方格子の場合：**単位格子中の原子の個数＝2**

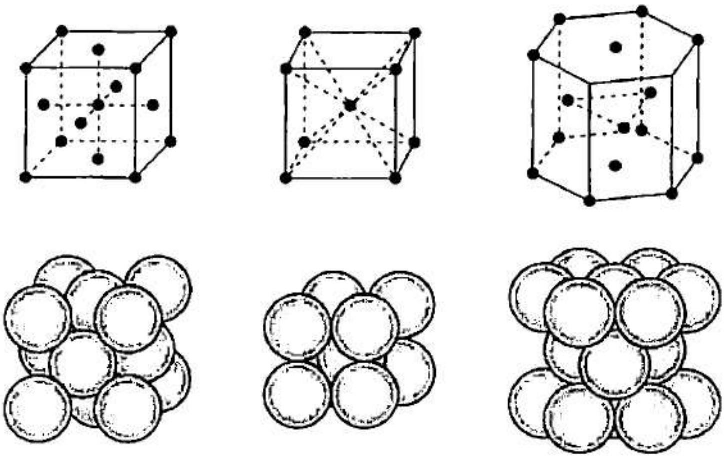
より，$n(=A)=2$　も明らかである。したがって，

$$d=\frac{\frac{M}{N}\times n}{l^3}\quad より，\quad x=\frac{\frac{M}{N}\times 2}{B^3}\qquad よって，\quad N=\frac{2M}{xB^3}$$

解答 **問1**　密度，g/cm^3　　**問2**　$N=\dfrac{2M}{xB^3}$

例題3 面心立方格子(密度)，金属結晶の充填率

銅，鉄，亜鉛の3種の金属の単体の構造について以下の問いに答えよ。図は，それぞれ，(a)銅，(b)鉄，(c)亜鉛の常温・常圧での結晶構造(結晶格子)を示したものである。



(a)　(b)　(c)

問1　銅の密度を求めよ。ただし，単位格子の一辺の長さは 3.62×10^{-8} cm，銅の原子量は63.5，アボガドロ定数は 6.02×10^{23} mol^{-1} とする。答の数値は有効数字2桁とせよ。

問2　鉄と亜鉛について，原子が空間に対して占める割合(充填率)を求めよ。充填率の答は百分率(%)で，小数点以下を四捨五入せよ。必要に応じて，$\sqrt{2}=1.41$，$\sqrt{3}=1.73$，$\pi=3.14$ の数値も用いよ。

奈良女大／改

ADVICE 問2は知識だけで答えてしまうことができますが，それはそれとして，ここではきちんと計算してみましょう。ちなみに，(a)は面心立方格子，(b)は体心立方格子，(c)は六方最密構造であることは大丈夫ですね？

問1について

知識の選択 『知識⑨ と 知識⑤ を用いる』

題意より，

> 知識⑨
>
> $$d=\frac{\frac{M}{N}\times n}{l^3}$$

における $l(=3.62\times10^{-8})$，$M(=63.5)$，$N(=6.02\times10^{23})$ は明らかになっている。また，

> 知識⑤
>
> 面心立方格子の場合：**単位格子中の原子の個数＝4**

より，$n=4$ も明らかである。よって，

$$d=\frac{\frac{M}{N}\times n}{l^3}=\frac{\frac{63.5}{6.02\times10^{23}}\times4}{(3.62\times10^{-8})^3}=8.89\,(\mathrm{g/cm^3})$$

解答 8.9 $\mathrm{g/cm^3}$

問2について

知識の選択 『知識④ と 知識⑧の補足 を用いる』

図より明らかに，鉄(b)は体心立方格子であり，亜鉛(c)は六方最密構造である。よって，

> 知識④
>
> 体心立方格子の充填率は 68%である。

> 知識⑧の補足
>
> 六方最密構造の充填率は，類似の最密構造である面心立方格子(立方最密構造)の充填率と等しく，74%である。

より，解答は自明である。では，体心立方格子の場合(鉄の場合)について確認してみよう。知識① より，単位格子中の原子の個数は2個である。また，単位格子の一辺の長さを l(cm)，原子半径を r(cm)とすると，知識③ より

$4r=\sqrt{3}\,l$　だから，$l=\frac{4}{3}\sqrt{3}\,r$　である。よって，

$$\text{体心立方格子の充塡率}=\frac{\text{単位格子中の原子 1 個の体積}\times\text{個数}}{\text{単位格子の体積}}\times 100$$

$$=\frac{\frac{4}{3}\pi r^3\times 2}{l^3}\times 100=\frac{\frac{4}{3}\pi r^3\times 2}{\left(\frac{4}{3}\sqrt{3}\,r\right)^3}\times 100=\frac{25}{2}\sqrt{3}\,\pi$$

$=12.5\times 1.73\times 3.14=67.9(\%)$　と求められる。

面心立方格子の場合についても確認してみて下さい。六方最密構造の場合（亜鉛の場合）は面心立方格子の場合と結論は同じです。

解答 鉄：68%，亜鉛：74%