強者の戦略

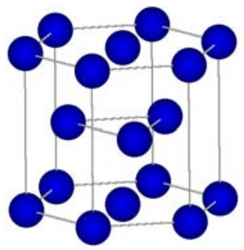
森　上総です。先週の問題いかがだったでしょうか。色々な解法があると思います。首尾よく,短時間で処理することはできたでしょうか。

それでは,まずは前回の問題の解答･解説です。

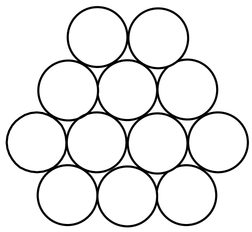
＜解説＞

―隣接原子に接する原子数を求める―

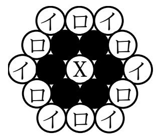
六方最密構造の単位格子(繰り返し構造の一つ分)は次のような構造です。実際の原子どうしは接していますが,見やすくするため小さく描かれています。



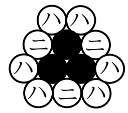
すなわち,次のような 2 次元の最密構造が積層したような構造と考えれます。



これを元に考えると,原子 X に隣接する原子(●で示す)に接する原子(イ～へ)は,各層において次のように配列している。

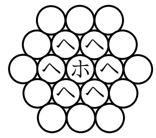


1 層目



2 層目

(3 個の●の隙間が X の真上)



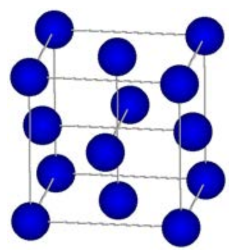
3 層目

(ホが X の真上)

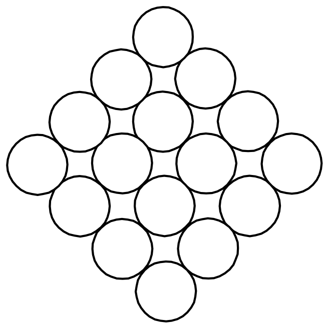
1 層目の上に 2 層目が乗っているわけですが,1 層目の下にも同様の層があります。また,2 層目の上に 3 層目が乗っていますが,これも下側が同じようになっています。よって,X に隣接している原子に接している原子の個数は,

$$12 + 9\times2 + 7\times2 = 44(個)$$

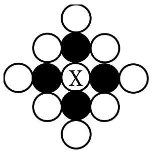
一方,面心立方格子の単位格子は次の構造です。



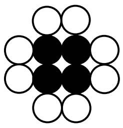
すなわち,次のような 2 次元の構造が積層したような構造と考えれます。



これを元に考えると，原子 X に隣接する原子(●で示す)に接する原子(○で示す)は，各層において次のように配列している。

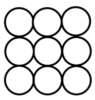


1 層目



2 層目

(4 個の●の隙間が X の真上)



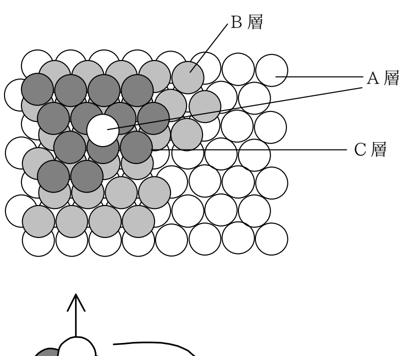
3 層目

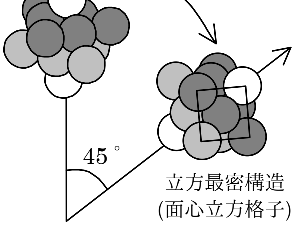
(中心の原子が X の真上)

よって，X に隣接している原子に接している原子の個数は，

8 ＋ 8×2 ＋ 9×2 ＝ 42(個)

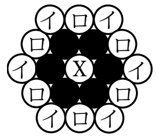
ところで，面心立方格子は「立方最密構造」と呼ばれることがあります。これは，見方によっては六方最密構造と同様に二次元の最密構造が積層しているととらえることができるからです。次のように見れば，よく分かります。



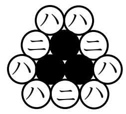


立方最密構造
(面心立方格子)

ですので，以下のように面心立方格子も六方最密構造と共通の図を用いて考えることができます。数えるべきはイ～ニとト･チです。

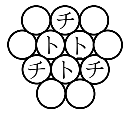


1 層目



2 層目

(3 個の●の隙間が X の真上)



3 層目

(3 個のトの隙間が X の真上)

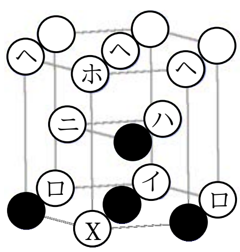
このようにして，

12 ＋ 9×2 ＋ 6×2 ＝ 42(個)

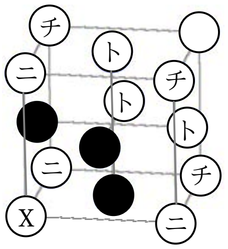
と，求めることもできます。

―隣接原子に接する原子の距離を求める―

六方最密構造の単位格子の原子に先ほどのルールにしたがって名前をつけると次のようになります。

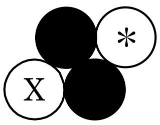


同様に面心立方格子の単位格子の原子に先ほどのルールにしたがって名前をつけると次のようになります。



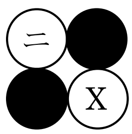
原子半径を r とすると,X とイまたはチとの間の距離は $4r$ です。

X とロ,ハ,トとの位置関係は次のようになっています。(*がロまたはハまたはト)



したがって X とロ,ハ,トとの距離は $2\sqrt{3}\,r$ です。

X とニとの位置関係は次のようになっています。



したがって X とニとの距離は $2\sqrt{2}\,r$ です。

X とホとの間の距離は二次元の最密構造の層間距離の 2 層分です。これは,面心立方格子の単位格子の立方体の対角線の長さが層間距離の 3 層分に相当することから,その長さの 3 分の 2 として求められます。単位格子の立方体の面の対角線の長さが $4r$ ですので,$\frac{4\sqrt{6}}{3}r$ となります。

X とニとの間の距離は直角を挟む一辺が $2r$,もう一辺が $\frac{4\sqrt{6}}{3}r$ の直角三角形の斜辺となります。したがって,$\frac{2\sqrt{33}}{3}r$ です。

以上より,面心立方格子も六方最密構造も最も遠い原子間距離は,最も近い原子間距離は $2\sqrt{2}\,r$ となります。

＜解答＞

問1　面心立方格子:42 個
　　六方最密構造:44 個

問2　面心立方格子:3 種類
　　六方最密構造:5 種類

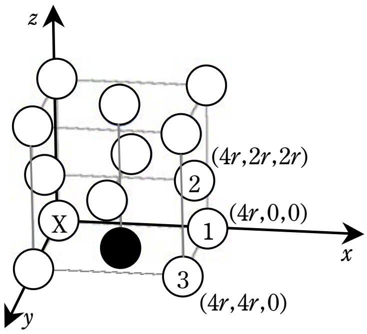
問3　面心立方格子: $\sqrt{2}$ 倍
　　六方最密構造: $\sqrt{2}$ 倍

いかがだったでしょうか。慣れていないと,もう問 1 からつまずいてしまうと思います。ある程度,結晶に関する問題の練習ができていれば,問 1 ぐらいは時間をかければ出来そうですが,問 2 以降はこれまた立体的な構造がイメージできなければ厳しく,極めて難易度が高いと思います。

しかし,面心立方格子と六方最密構造はいずれも二次元の最密構造が積層したもの,ということを知っていれば,問 3 なんかは即答ですね。X とニのような位置関係の原子どうしが現れてくることが分かりますし,もちろん最も遠い原子は原子間距離 $4r$ のものですし。

面心立方格子と六方最密構造の類似性については割と有名です。知らなかった人は覚えておくと便利です。それ以外にも,結晶構造は「教科書通りの理解」を少し超えたあたりに面白い法則や規則性があふれています。受験生ならさしあたり「必要なこと」を学ぶのが先ですが,時間的に余裕がおありの方は,ぜひ調べてみてもらいたいと思います。

さて,実は結晶に関する面倒くさそうな計算問題を正確かつスピーディに解く方法があります。それは,座標を用いる方法です。例えば,今回の問題,面心立方格子なら次のように考えてはどうでしょうか。



上図のように原点にXを置きます。単位格子の辺に沿って座標を設定します。X に近接する原子を一つ見つけ(図の●),さらにそれに接する原子を探します(図の1～3)。原子半径を r とすると,1～3 の座標は図中に示した通りになります。座標が分かりますので,当然Xからの距離は分かりますね。

さて,分かるのは距離だけではありません。同じ距離にある原子が何個あるかも求めることができます。1 の原子は$(4r,0,0)$に位置しますが,例えば$(0,4r,0)$に位置する原子も同じ距離です。この,「$4r$ を何座標に持ってくるか」が ${}_3C_1$ 通り。さらに,$(-4r,0,0)$に位置する原子も同じ距離です。この,正負の選び方が 2^1 通り。ですので,1 と同じ距離の原子数は,

$${}_3C_1\times2^1=6$$

となります。同様に,2 と同じ距離にある原子の個数は,

$${}_3C_2\times2^2=12$$

となります。同様に,2 と同じ距離にある原子の個数は,

$${}_3C_1\times2^3=24$$

となります。したがって,今回の問題の問 1 で求めるべき原子の個数は,

$$6+12+24=42$$

となります。

いかがでしょうか。この程度の計算でしたら暗算でも可能なぐらいですから,面心立方格子に関しては 1 分もかからずに答えが出せるのではないでしょうか。もしかしたら,六方最密構造についても鮮やかな解法があるかもしれません。時間に余裕があるなら,色々と試してみてもらいたいと思います。

座標を用いて単位格子の計算をするのは,本問に限らず「使える」問題は少なくないです。そのような問題に出くわしたら,一旦「もしかして座標が使えるんじゃないかな」って考えてみてください。瞬時に片づけられるかもしれませんよ!