

1 次の文中の () 内に適当な語句または数値を入れ、後の問いに答えよ。なお、文脈上、番号が異なるが同じ答えの入る箇所が、1組ないし2組ある。

三次元結晶格子を考える際、単位格子の対称性から (1) 種類の結晶系に分類する。但し、結晶の中には、単純格子で考えれば対称性は低くなるが、高次の対称性を含むものもある。そこで、高次の対称性を表現するため、単純格子以外に (2) 格子、(3) 格子、(4) 格子の3種類の (5) 格子を導入し、結晶系と組み合わせて結晶格子を (6) 種類に分類する。これを (7) 格子という。しかし、(1) 種類の結晶系すべてに (5) 格子があるわけではない。例えば、各軸の単位長さが等しく、軸角がすべて 90° である^(ア) (8) 晶系には (4) はない。また、^(イ) 底辺が正方形の直方体が単位格子の正方結晶系には、(3) も (4) もない。

さて、単体の金属結晶を考える。金属は (9) によって結合しているので、結合に (10) 性も (11) 性もない。そこで、金属原子を剛体球と仮定すると、(12) 構造をとるように配列すると考えられる。基本的な (12) 格子には (13) (12) 格子と (14) (12) 格子がある。このうち、前者は (7) 格子の (15) 格子と同じ構造となる。(15) 格子は見方を変えれば、(16) 正方格子の特殊なものと思ふことができる。いま、このように見て正方形という形を保ちながら、少しずつ原子間距離を広げて正方形を大きくしていくと、やがて (17) 格子が実現する。金属単体の結晶は、(17) 格子、(15) 格子、(14) (12) 格子のどれかに分類される。

(12) 構造とはいえ、球で構成するから空隙が存在する。空隙は2種に分けられ、空隙の狭い方を (18) 型空隙、広い方を (19) 型空隙という。

問 下線部 (ア) 及び (イ) の理由を、それぞれ簡単に記せ。

(B) 剛体球の半径を r とし、各単位格子に関する次の空欄を埋めよ。なお、無理数になる場合はそのまま答えよ。但し、充填率は有効数字3桁で記せ。

	単純(8)格子	(17)格子	(15)格子	(14)(12)格子
一辺の長さ	r	r	r	短 r 長 r
配位数				
含有球数				
充填率(%)				
(18)型空隙数				
空隙に入りうる球の最大半径			r	
(19)型空隙数				
空隙に入りうる球の最大半径			r	

(C) (15) 格子において、(18) 型空隙、(19) 型空隙はどこに存在するか。

(D) 格子定数 $l \text{ \AA}$ 、(17) 格子をとる金属結晶(原子量 M)がある。この金属の密度は $d \text{ g/cm}^3$ である。このことからアボガドロ定数 (mol^{-1}) を求めよ。

【解答】

1

1. 7 2. 体心 3. 面心 4. 底心 5. 複合 6. 14 7. ブラヴェ 8. 等軸 (立方) 9. 自由電子
 10. 方向 11. 飽和 12. 最密充填 13. 立方 14. 六方 15. 面心立方 (fcc) 16. 体心
 17. 体心立方 (bcc) 18. 四面体 19. 八面体

A ア. 底心格子は三軸相等でないから。

イ. (3) のない理由 単位体積半分の体心立方格子に読み替えられるから。

(4) のない理由 単位体積半分の単純正方格子に読み替えられるから。

B

	単純 (8) 格子	(17) 格子	(15) 格子	(14) (12) 格子
一辺の長さ	$2r$	$\frac{4\sqrt{3}}{3}r$	$2\sqrt{2}r$	短 $2r$ ----- 長 $4\sqrt{6}/3r$
配位数	6	8	12	12
含有球数	1	2	4	2
充填率 (%)	52.4 (52.3)	68.0	74.0	74.0
(18)型空隙数	/	/	8	4
空隙に入りうる球の最大半径	/	/	$(\sqrt{6}-2)/2r$	/
(19)型空隙数	/	/	4	2
空隙に入りうる球の最大半径	/	/	$(\sqrt{2}-1)r$	/

C. (18) 合同な 8 個の小立方体に分けたときの, 各小立方体の中心に 8 箇所

(19) 体心に 1 箇所と, 各辺の中心に 1/4 ずつ 12 箇所

D. $\frac{2M}{l \cdot d} \times 10^{24} \text{ mol}^{-1}$