

こってりセンター化学関東風 ～理論編～

化学結合と結晶① 宿題の答え

Q.塩化セシウム型結晶の配位数と密度は？

塩化セシウムのセシウムイオンに着目すると、周囲に 8 個の塩化物イオン（結晶格子模型で言えば頂点の位置）がある。よって、配位数は 8となる。塩化物イオンに着目しても、1 つの塩化物イオンの周囲には 8 個のセシウムイオンがあるため、やはり配位数は 8 となる。結晶模型を 8 個用意して、縦・横・奥に 2 個ずつ組み合わせて並べると分かりやすいが、残念ながら模型が無いので、授業に出ていた模型を元に絵を描いてみてほしい。

単位格子の密度を求めるためには、単位格子の質量を単位格子の体積で割ればよい。単位格子の 1 辺の長さを a とすると、体積は a^3 なのはすぐ分かると思うので、質量について考えよう。そのためには、塩化セシウム型結晶の単位格子に含まれるイオンの数を求めればよい。セシウムイオンは中央に 1 個。塩化物イオンは頂点に 8 カケラあるけれど、1 カケラの大きさは球 8 分の 1 個分なので、全部で 8 分の $1 \times 8 = 1$ 個となる。塩化セシウム 1 mol の質量を M とすると、塩化セシウム 1 組の質量は M/N_A (N_A はアボガドロ数)。これがそのまま単位格子の質量となる。よって、塩化セシウム型結晶の密度は、

$$\frac{\frac{M}{N_A}}{a^3} = \frac{M}{a^3 N_A}$$

となる。具体的な値を求めるときは、 a の単位が cm なのか m なのかを確認すること。

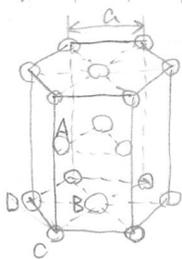
こってりセンター化学関東風 ～理論編～

化学結合と結晶② 補足

「六方最密充填を考える時の正六角柱の体積がなぜ $3\sqrt{2} \times a^3$ なのか？」

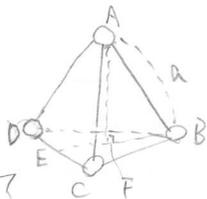
→次のページのノートを参照のこと

※かっぱ巻き RC の手書きノートなので、字が下手なのはご容赦ください。



大方最密充填で考える正六角柱(左図)の点A, B, C, Dは頂上。

A, B, C, Dを頂点とする四面体は、辺がaの正四面体である。



Bが辺CDに垂線を下すとき、この垂線と辺CDの交点をEとする。

∴ Aを通る直線BEの垂線は、この垂線とBEの交点をFとする。

EはCDの中点。



三平方の定理から、 $BE = \sqrt{a^2 - (\frac{a}{2})^2} = \frac{\sqrt{3}}{2}a$

点Fは三角形BCDの重心である。

中線BEを2:1に分ける。

よって、 $BF = BE \times \frac{2}{3} = \frac{\sqrt{3}}{2}a \times \frac{2}{3} = \frac{\sqrt{3}}{3}a$

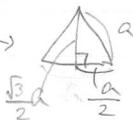


三平方の定理から、

$AF = \sqrt{AB^2 - BF^2} = \sqrt{a^2 - (\frac{\sqrt{3}}{3}a)^2} = \frac{\sqrt{6}}{3}a$

大方最密充填では、Aの位置は上側の正六角形と下側の正六角形の頂点の中間にある。すなわち、六角柱の高さをhとすると、 $h = 2AF$ となる。

∴ 六角柱の底面、すなわち辺がaの正六角形の面積は、



$$\left(a \times \frac{\sqrt{3}}{2}a \times \frac{1}{2}\right) \times 6 = \frac{3}{2}\sqrt{3}a^2$$

これは六角柱の体積は

$$(\text{底面}) \times (\text{高さ}) = \frac{3}{2}\sqrt{3}a^2 \times h = \frac{3}{2}\sqrt{3}a^2 \times 2 \times AF$$

$$= \frac{3}{2}\sqrt{3}a^2 \times 2 \times \frac{\sqrt{6}}{3}a$$

$$= 3\sqrt{2}a^3$$

##