

Q:体心立方格子・面心立方格子・六方最密充填の密度をそれぞれ求めよ。
 (アボガドロ定数を N_A 、原子のモル質量を M とする)

A: (密度) = (単位格子に含まれる原子の質量) ÷ (単位格子の体積) と考える。
 また、原子 1 個の質量は、 M/N_A と表すことができる。

※モル質量とは原子 1mol、つまり N_A 個の質量だから、 M を N_A で割れば 1 個当たりの質量が出せる。

☆体心立方格子の場合

単位格子に含まれる原子の個数は 2 個だから、単位格子に含まれる原子の質量は、 $2 \times M/N_A$ となる。一方、単位格子の体積は a^3 と表される。よって密度は

$$\frac{2M}{N_A} \div a^3 = \frac{2M}{a^3 N_A}$$

※密度の具体的な値を求める際は単位に注意すること！たとえば M が $[g/mol]$ 、 N_A が $[/mol]$ 、 a が $[cm]$ なら、密度の単位は $[g/cm^3]$ となるが、 a の単位が $[m]$ の場合は、密度の単位は $[g/m^3]$ となる。

☆面心立方格子の場合

単位格子に含まれる原子の個数は 4 個で、単位格子の体積は a^3 なので、密度は

$$\frac{4M}{N_A} \div a^3 = \frac{4M}{a^3 N_A}$$

☆六方最密充填の場合

単位格子に含まれる原子の数は 2 個。単位格子の体積は、授業内で考えた正六角柱の $\frac{1}{3}$ (単位格子を 3 つ組み合わせると、正六角柱になる)。正六角柱の体積は $3\sqrt{2}a^3$ なので、求める密度は

$$\frac{2M}{N_A} \div \frac{3\sqrt{2}a^3}{3} = \frac{2M}{\sqrt{2}a^3 N_A}$$

正六角柱を基準に考えても同じこと。正六角柱に含まれる原子 6 個の質量を正六角柱の体積で割れば、同じ答えが出せる。

$$\frac{6M}{N_A} \div 3\sqrt{2}a^3 = \frac{2M}{\sqrt{2}a^3 N_A}$$