高校化学 L01 第 63 講 結晶格子と単位格子

この講でできるようになること

- 結晶格子と単位格子の関係を説明できる。
- 格子点が規則的に繰り返される意味を説明できる。
- 単位格子の頂点・面中心・内部にある粒子の分担を判断できる。
- 与えられた立方体内の配置から、単位格子 1 個あたりの粒子数を求められる。

結晶の規則性を立体的に表す

結晶格子は規則的な位置の繰り返し

結晶では、構成粒子の配置に長距離にわたる規則性がある。
この規則的な配列を、空間内に繰り返す点の集まりとして表したものを**結晶格子**という。
その規則的な位置を表す点を**格子点**という。
格子点は結晶中の規則性を表すための位置であり、どの結晶でも必ず「格子点 1 個＝原子 1 個」を意味するわけではない。

繰り返しの基本単位を取り出す

結晶格子全体を理解するとき、同じ形の小さな立体が空間内で繰り返されていると考えると整理しやすい。
その繰り返しの基本となる立体を**単位格子**という。
単位格子は必ずしも最小体積とは限らず、結晶の対称性がわかりやすい形を選ぶこともある。
単位格子を縦・横・奥行きの方向へ繰り返すことで、結晶格子を表すことができる。

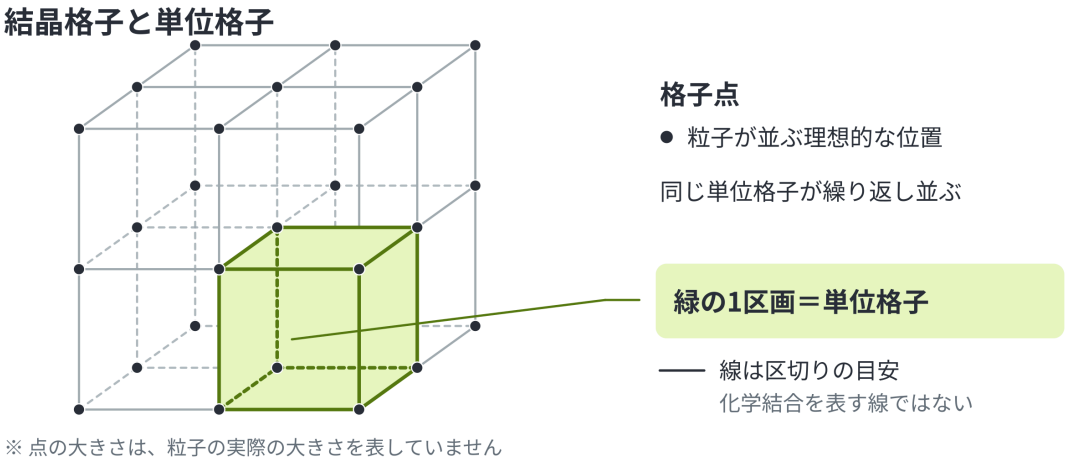


図 1　結晶格子の繰り返しと単位格子の模式図。

単位格子の枠は実在する壁ではない

単位格子の枠線は、結晶中に実際の仕切りが存在することを表しているのではない。
連続して広がる結晶格子から、繰り返しの一単位を考えるために区切っている。
そのため、単位格子の境界上にある粒子は、隣接する単位格子と共有される。

©ミライコーチング

単位格子中の粒子数は共有を考える

見えている球の数をそのまま足さない

立方体の単位格子を考える。
頂点にある粒子は、同じ頂点を囲む 8 個の単位格子で共有されるため、1 個の単位格子への寄与は$\frac{1}{8}$個分である。
面の中心にある粒子は、その面をはさんだ 2 個の単位格子で共有されるため、寄与は$\frac{1}{2}$個分である。
単位格子の内部に完全に含まれる粒子は、他の単位格子と共有されないので 1 個分として数える。

粒子の位置	共有する単位格子の数	単位格子 1 個への寄与
頂点	8 個	$\frac{1}{8}$
面中心	2 個	$\frac{1}{2}$
内部	1 個	1

粒子を実際に切り分けているわけではない

$\frac{1}{8}$個や$\frac{1}{2}$個という表現は、粒子そのものを物理的に切断するという意味ではない。
1 個の粒子を複数の単位格子が共有しているため、**単位格子 1 個あたりにどれだけ対応するか**を分担して数えている。
立方体の奥側を含め、頂点は全部で 8 個あることにも注意する。

頂点だけに粒子がある場合

8 個の頂点を 8 分の 1 ずつ数える

立方体の 8 個の頂点それぞれに粒子が 1 個ずつあり、それ以外には粒子がない配置を考える。
各頂点粒子の寄与は$\frac{1}{8}$個分なので、単位格子 1 個あたりの粒子数は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個である。
図で球が 8 個見えていても、単位格子 1 個に属する粒子数を 8 個とは数えない。

頂点と内部に粒子がある場合

内部の粒子はそのまま 1 個分

8 個の頂点に粒子が 1 個ずつあり、さらに立方体の内部に粒子が 1 個ある配置を考える。
頂点からの寄与は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個分である。
内部の粒子は共有されないので 1 個分である。
したがって、単位格子 1 個あたりでは$1 + 1 = 2$個の粒子を含むことになる。

面中心の粒子を含む場合

立方体には 6 つの面がある

立方体には 6 つの面がある。
8 個の頂点に粒子が 1 個ずつあり、6 つの各面の中心にも粒子が 1 個ずつある配置なら、頂点からの寄与は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個分である。
面中心からの寄与は$6 \times \frac{1}{2} = 3$個分なので、合計は$1 + 3 = 4$個となる。

©ミライコーチング

例題

例題 1

立方体の単位格子を考える。指定された各位置には粒子が 1 個ずつあるものとする。

- 配置 A：8 個の頂点にだけ粒子がある。
- 配置 B：8 個の頂点と、立方体内部に 1 個の粒子がある。

1. 配置 A について、単位格子 1 個あたりの粒子数を求めよ。
2. 配置 B について、単位格子 1 個あたりの粒子数を求めよ。

解答・解説

粒子を数えるときは、単位格子の境界上にある粒子が何個の単位格子で共有されるかを見る。

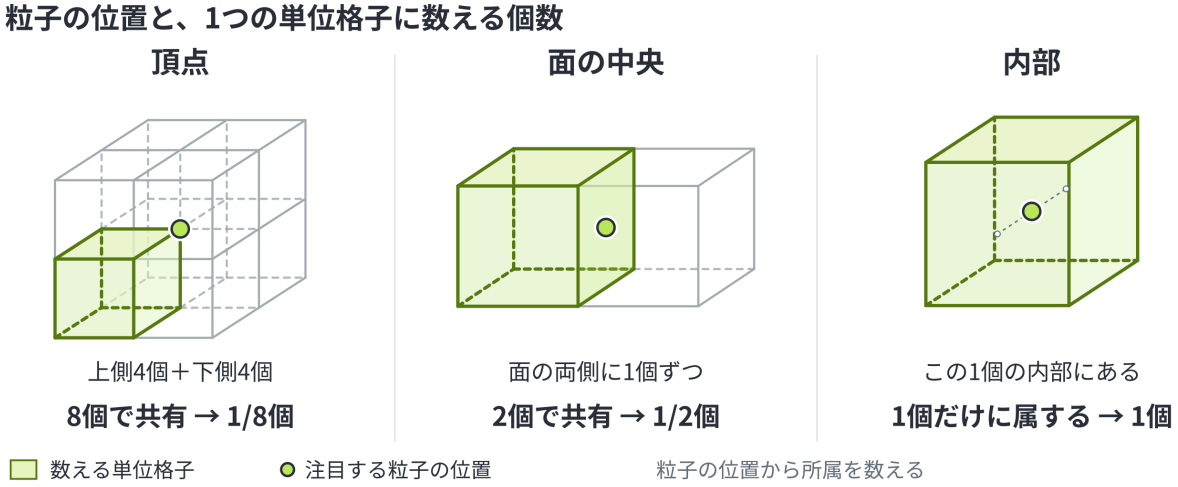


図 2　頂点・面中心・内部の粒子を単位格子へ分担する。

1.
立方体には頂点が 8 個あり、それぞれの頂点粒子は 8 個の単位格子で共有される。
したがって、頂点 1 個からの寄与は$\frac{1}{8}$個分であり、配置 A の粒子数は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個である。
答えは **1 個**である。

2.
配置 B では、頂点からの寄与は配置 A と同じく$8 \times \frac{1}{8} = 1$個分である。
内部の粒子は他の単位格子と共有されないので 1 個分として数える。
したがって、合計は$1 + 1 = 2$個である。
答えは **2 個**である。

例題 2

立方体の単位格子について、8 個の頂点と 6 つの面の中心に、それぞれ粒子が 1 個ずつ配置されている。

1. 頂点にある粒子と面中心にある粒子は、それぞれ単位格子 1 個へ何個分ずつ寄与するか答えよ。
2. この単位格子 1 個あたりに含まれる粒子数を求めよ。

©ミライコーチング

解答・解説

1.
頂点にある粒子は 8 個の単位格子で共有されるため、1 個あたりの寄与は$\frac{1}{8}$**個分**である。
面中心の粒子は、その面を共有する 2 個の単位格子で分担されるため、1 個あたりの寄与は$\frac{1}{2}$**個分**である。

2.
頂点からの寄与は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個分である。
面中心からの寄与は$6 \times \frac{1}{2} = 3$個分である。
したがって、単位格子 1 個あたりの粒子数は$1 + 3 = 4$個である。
答えは **4 個**である。

例題 3

ある立方体の単位格子には、8 個の頂点、6 つの面中心、立方体内部にそれぞれ粒子が配置されている。各位置には粒子が 1 個ずつあるものとする。

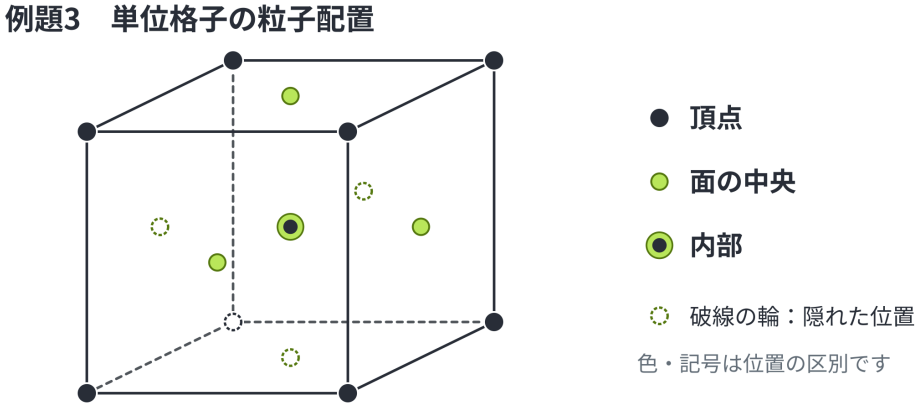


図 3　例題 3 の粒子配置。

ある生徒は「図に見える粒子は$8 + 6 + 1 = 15$個なので、単位格子中には 15 個の粒子がある」と考えた。

1. この数え方が正しくない理由を、共有に注目して説明せよ。
2. 単位格子 1 個あたりに対応する粒子数を正しく求めよ。

解答・解説

1.
正しくない。
頂点と面中心の粒子は、その単位格子だけに属しているわけではない。
頂点粒子は 8 個の単位格子で共有されるため 1 個につき$\frac{1}{8}$個分、面中心粒子は 2 個の単位格子で共有されるため 1 個につき$\frac{1}{2}$個分として数える必要がある。
内部の粒子だけがその単位格子に完全に含まれ、1 個分となる。

2.
頂点の寄与は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個分である。
面中心の寄与は$6 \times \frac{1}{2} = 3$個分である。
内部の粒子は 1 個分なので、合計は$1 + 3 + 1 = 5$個である。
したがって、単位格子 1 個あたりに対応する粒子数は **5 個**である。

演習問題

演習 1

結晶格子と単位格子について考える。
1. 結晶格子と単位格子の関係を、「規則的な繰り返し」という語を用いて説明せよ。
2. 単位格子の枠線を、結晶内部に実際に存在する仕切りと考えてよいか。理由を説明せよ。

演習 2

立方体の単位格子の 8 個の頂点に、それぞれ粒子が 1 個ずつ配置されている。それ以外の位置には粒子がない。
1. 頂点の粒子 1 個が単位格子 1 個へ寄与する粒子数を答えよ。
2. 単位格子 1 個あたりの粒子数を求めよ。

演習 3

立方体の単位格子の 8 個の頂点と、立方体内部に 2 個の粒子が配置されている。各位置には指定された粒子が 1 個ずつあるものとする。
1. 8 個の頂点から単位格子 1 個へ寄与する粒子数の合計を求めよ。
2. 内部の 2 個も含め、単位格子 1 個あたりの粒子数を求めよ。

演習 4

立方体の単位格子の 8 個の頂点と 6 つの面中心に、それぞれ粒子が 1 個ずつ配置されている。
1. 6 つの面中心にある粒子から、単位格子 1 個へ寄与する粒子数の合計を求めよ。
2. 頂点の寄与も含め、単位格子 1 個あたりの粒子数を求めよ。

演習 5

ある立方体の単位格子では、8 個の頂点と 6 つの面中心に粒子がある。
ある生徒は「頂点は 8 個あるので 8 個分、面中心は 6 個あるので 6 個分、合計 14 個である」と答えた。
1. この誤りを、頂点と面中心がそれぞれ何個の単位格子で共有されるかを用いて説明せよ。
2. 正しい単位格子 1 個あたりの粒子数を求めよ。

©ミライコーチング

演習問題の解答・解説

解答 1

1.

結晶格子は、格子点が空間内で規則的に繰り返された配列を表す。
単位格子は、その規則的な繰り返しを表すために結晶格子から取り出した基本となる立体である。
したがって、単位格子を各方向へ繰り返すことで結晶格子を表すことができる。

2.

実在する仕切りと考えてはいけない。
結晶は連続して広がっており、単位格子の枠線は繰り返しの単位を考えるために設定した境界である。
そのため、境界上の格子点に対応する粒子は隣接する単位格子と共有される。

解答 2

1.

頂点にある粒子は 8 個の単位格子で共有される。
したがって、頂点粒子 1 個が単位格子 1 個へ寄与する量は$\frac{1}{8}$**個分**である。

2.

頂点は全部で 8 個あるので、単位格子 1 個あたりの粒子数は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個である。
したがって、答えは**1 個**である。

解答 3

1.

各頂点粒子の寄与は$\frac{1}{8}$個分なので、8 個の頂点からの合計は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個分である。
したがって、頂点からの寄与は**1 個分**である。

2.

内部の粒子は他の単位格子と共有されないので、2 個はそのまま 2 個分として数える。
したがって、合計は$1 + 2 = 3$個である。
答えは**3 個**である。

解答 4

1.

面中心の粒子は 2 個の単位格子で共有されるため、1 個につき$\frac{1}{2}$個分として数える。
6 つの面中心からの寄与は$6 \times \frac{1}{2} = 3$個分である。
したがって、面中心からの寄与は**3 個分**である。

2.

8 個の頂点からの寄与は$8 \times \frac{1}{8} = 1$個分である。
面中心からの 3 個分を加えると、$1 + 3 = 4$個となる。
したがって、単位格子 1 個あたりの粒子数は**4 個**である。

©ミライコーチング

解答 5

1.

頂点粒子は、その単位格子だけに属するのではなく 8 個の単位格子で共有されるため、1 個につき$\frac{1}{8}$個分として数える。
面中心粒子も 2 個の単位格子で共有されるため、1 個につき$\frac{1}{2}$個分として数える。
したがって、見えている粒子の個数をそのまま$8+6$と足すことはできない。

2.

頂点からの寄与は$8\times\frac{1}{8}=1$個分、面中心からの寄与は$6\times\frac{1}{2}=3$個分である。
合計は$1+3=4$個である。
したがって、単位格子 1 個あたりの粒子数は **4 個**である。