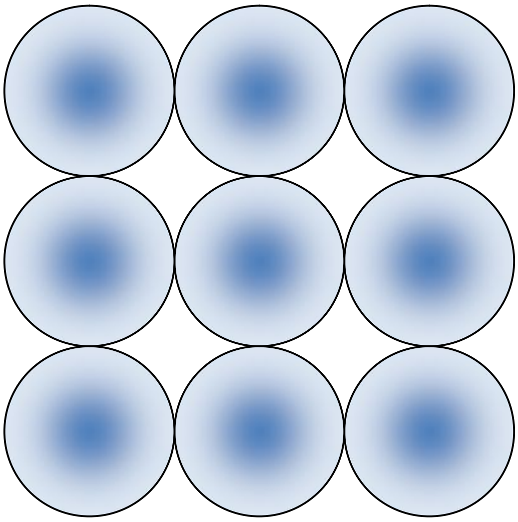
体心立方構造・面心立方構造・六方最密構造

剛球の並べ方と最密構造

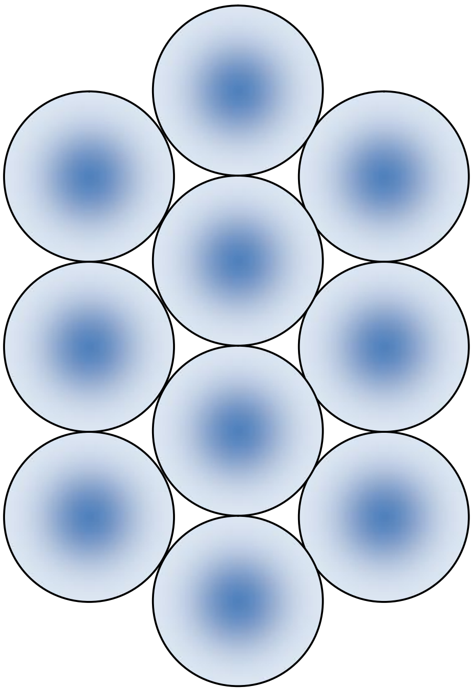
剛球を平面上に↓の向きに整列させるのに次の 2 つの方法がある。

図より，B の方が A より密であることがわかる。

A



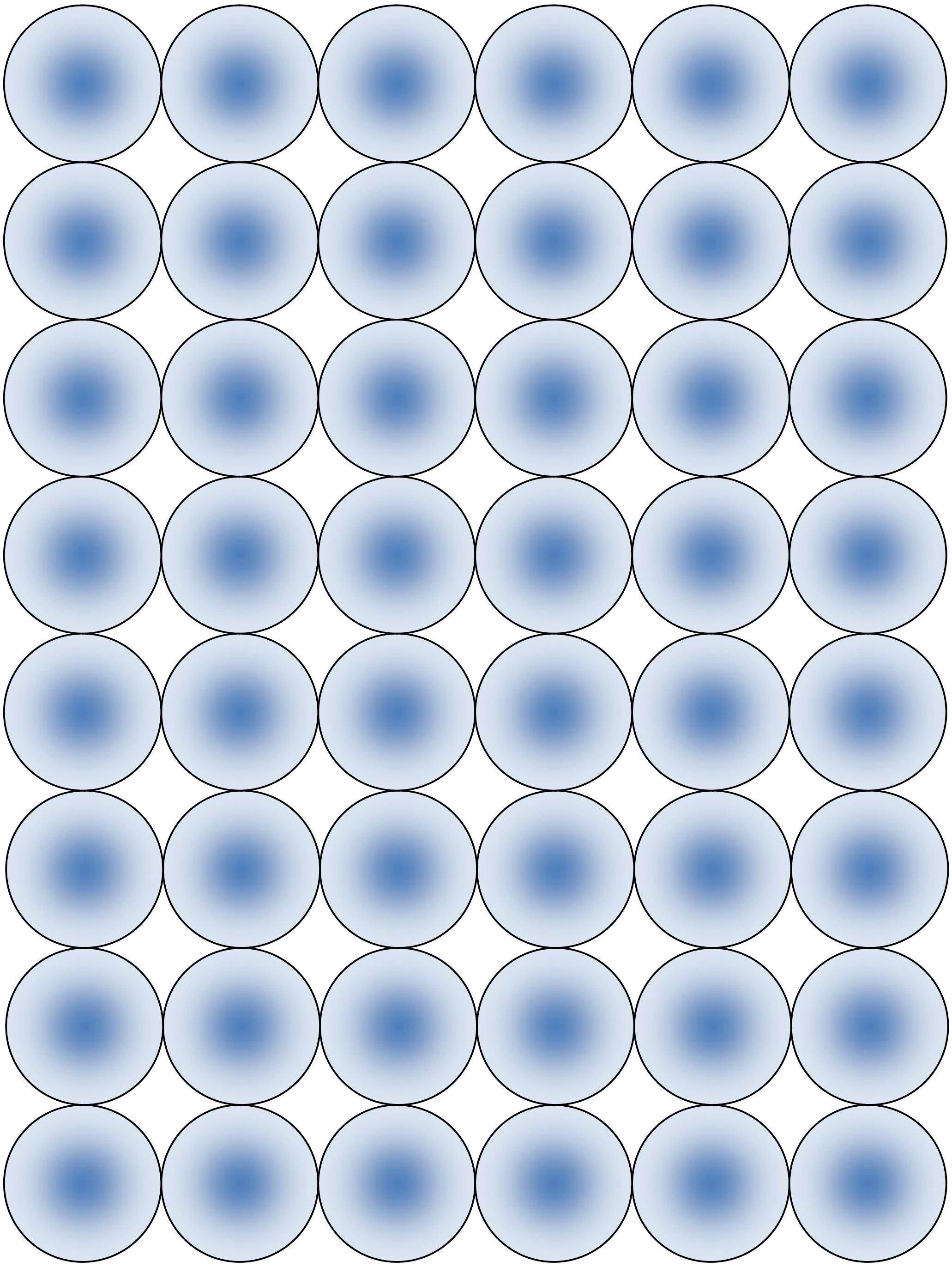
B



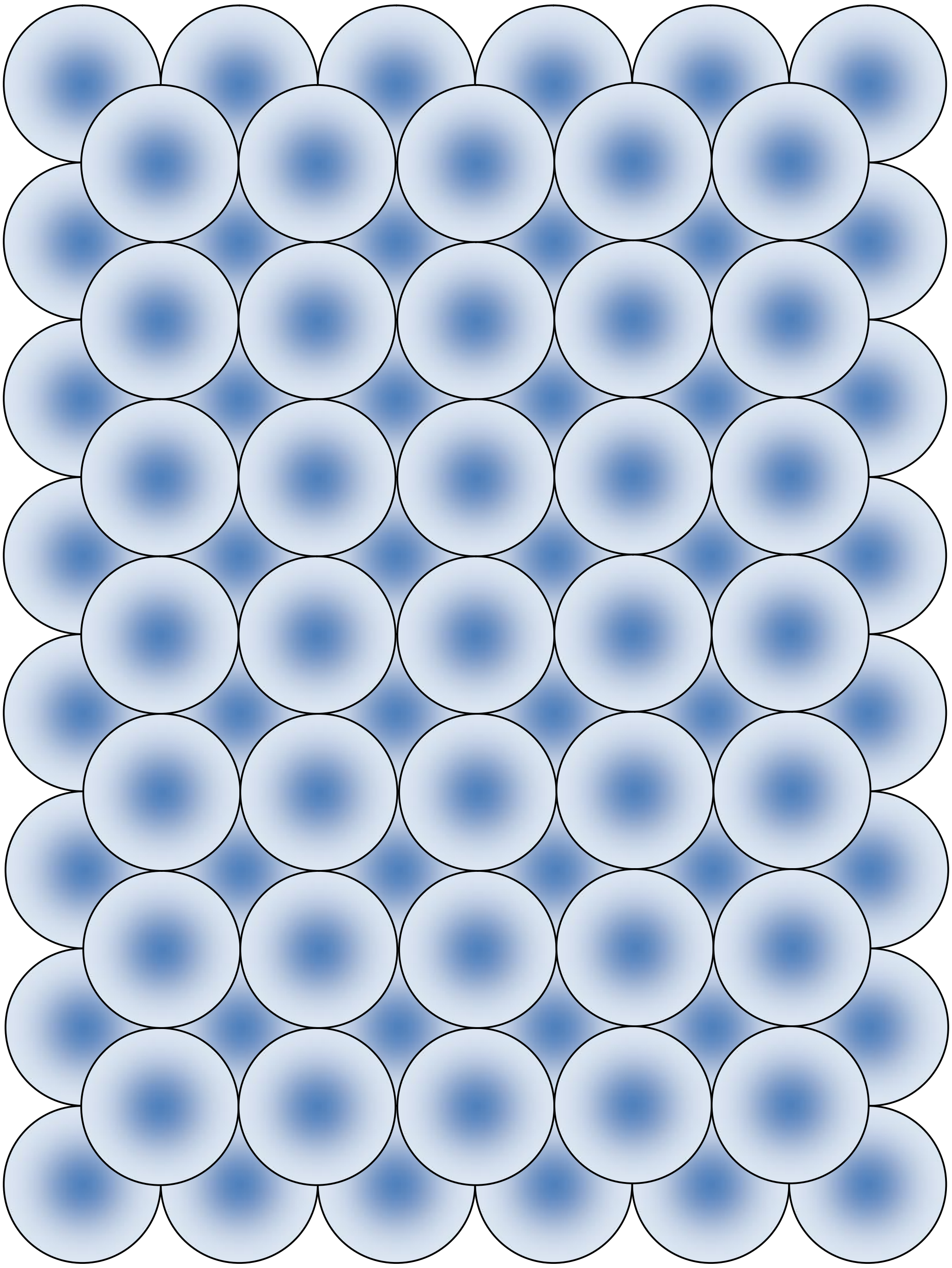
体心立方構造

A を土台に剛球を積み重ねる。

1 段目

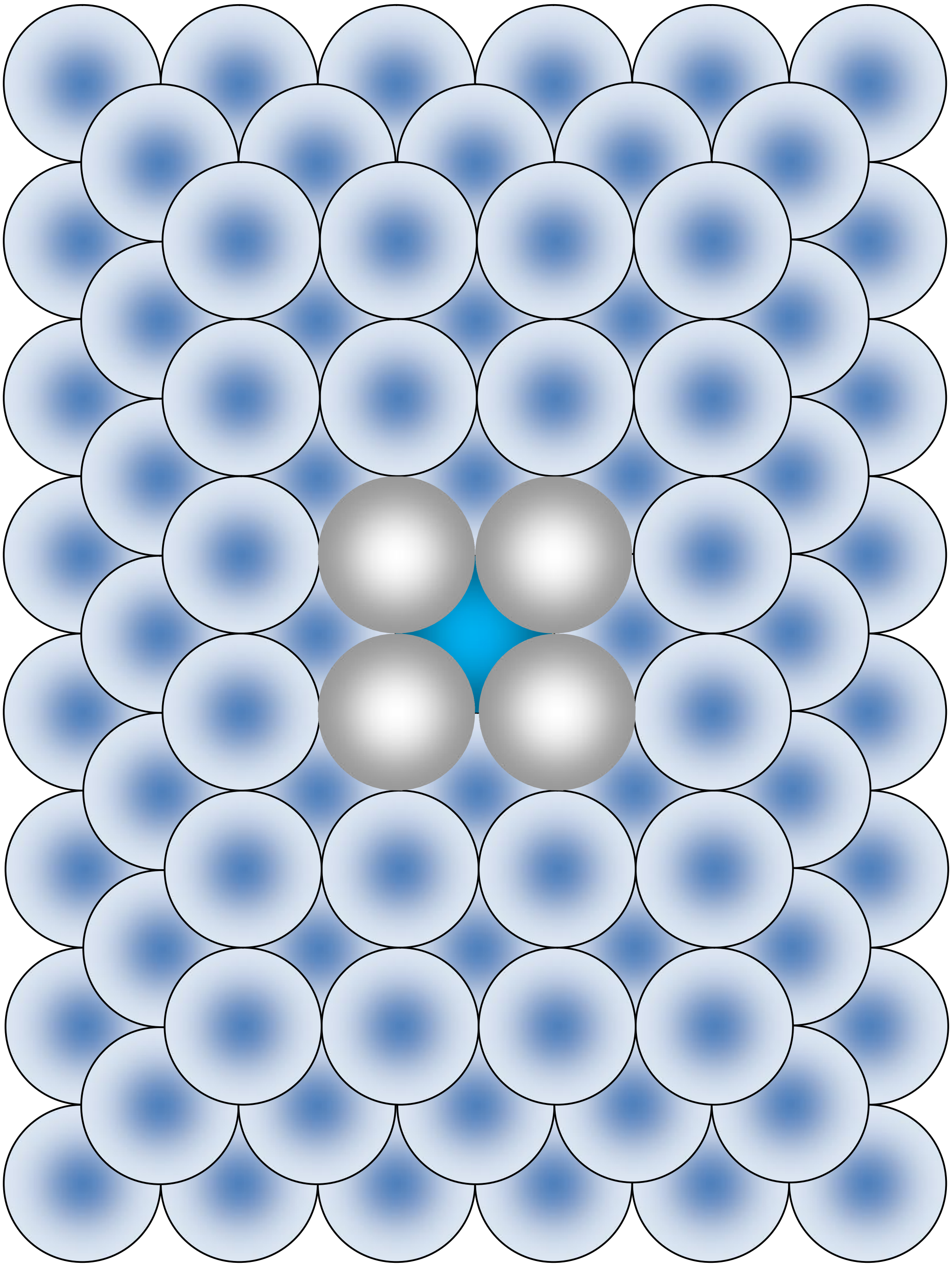


2 段目

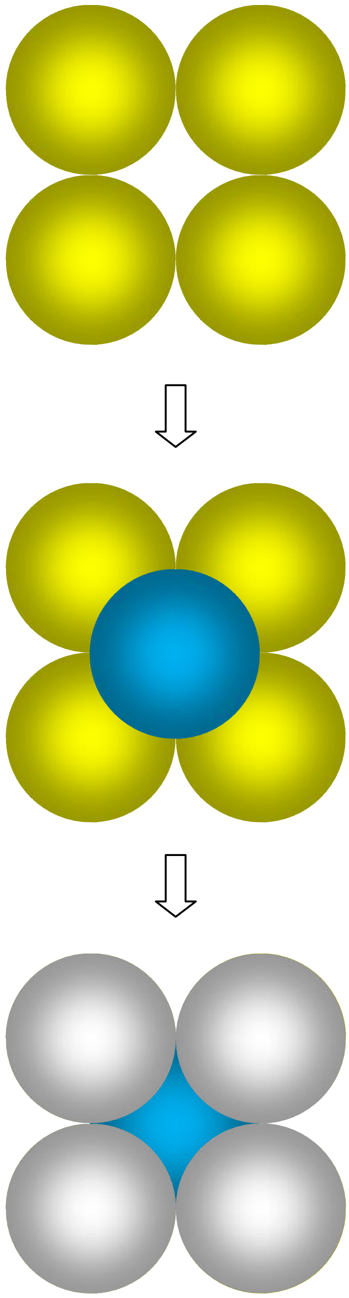


3 段目

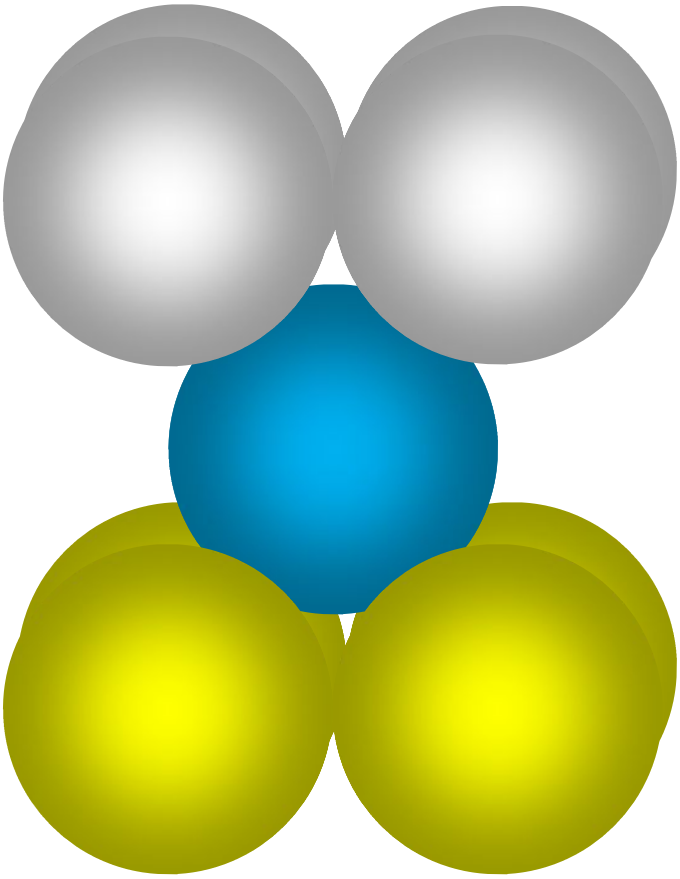
他と色で区別した部分は上から見た最小繰り返し単位構造（体心立方構造）



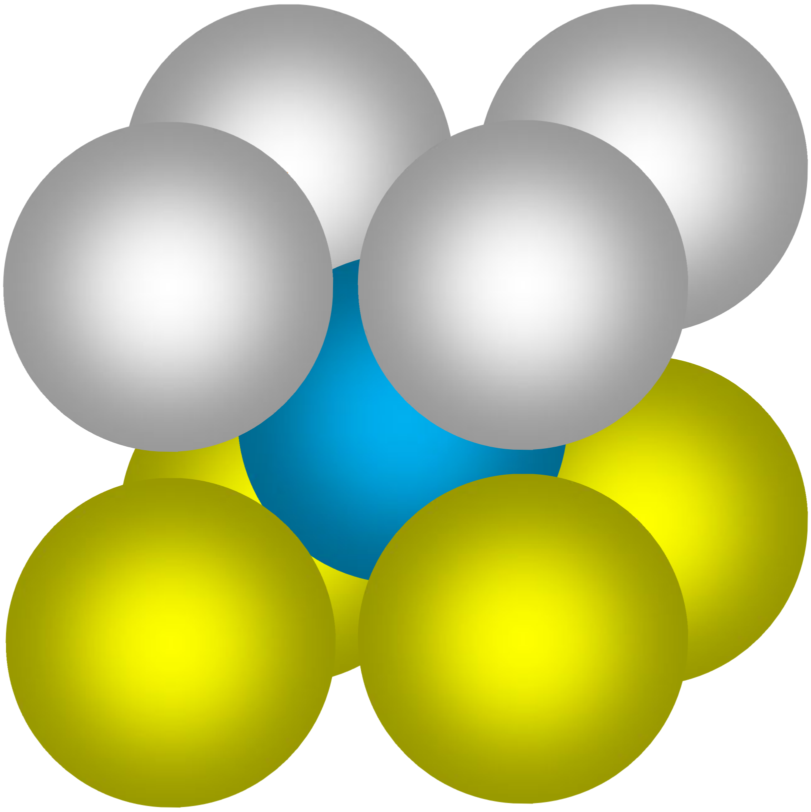
つまり，1 段目，2 段目，3 段目と順に重ねることにより，



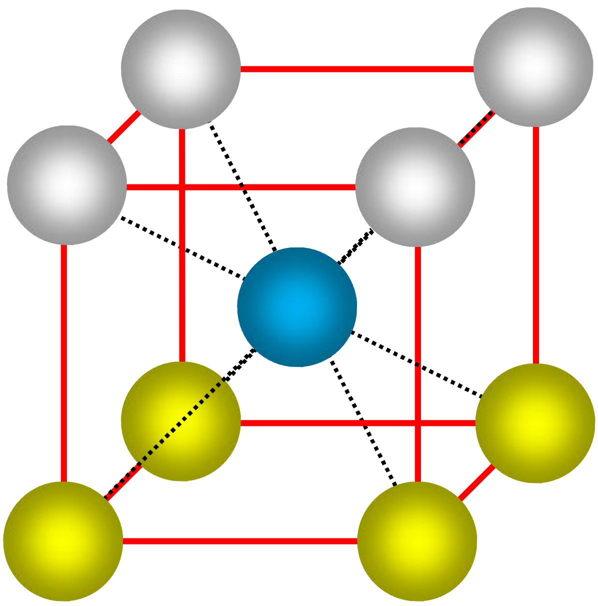
下図のような直方体の繰り返し単位構造ができる。



次に，直方体構造を対角線上の剛球だけが互いに接した立方体構造にする。
この立方体構造が体心立方構造である。



剛球を小さくし見やすくしたのが下図

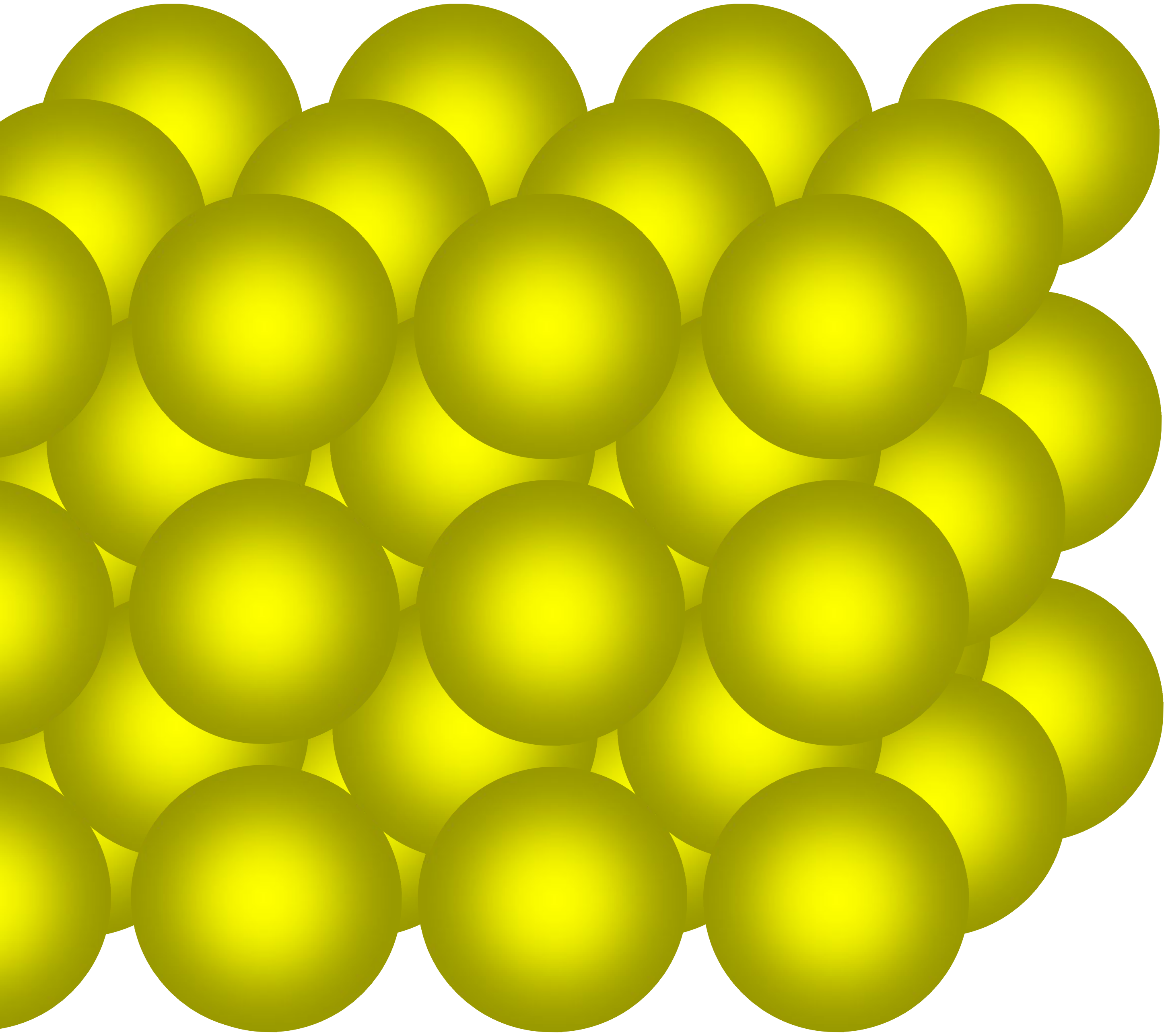


赤色実線は単位格子（体心立方格子）

体心立方構造の任意の剛球と最近接する剛球の数について

剛球が規則正しく配列しているから，どの剛球に注目してもその剛球と最近接する剛球の数は変わらない。そこで，前ページの体心立方構造の中心の青色剛球に注目すると，その剛球に 8 個の剛球が最近接しているのがわかる。

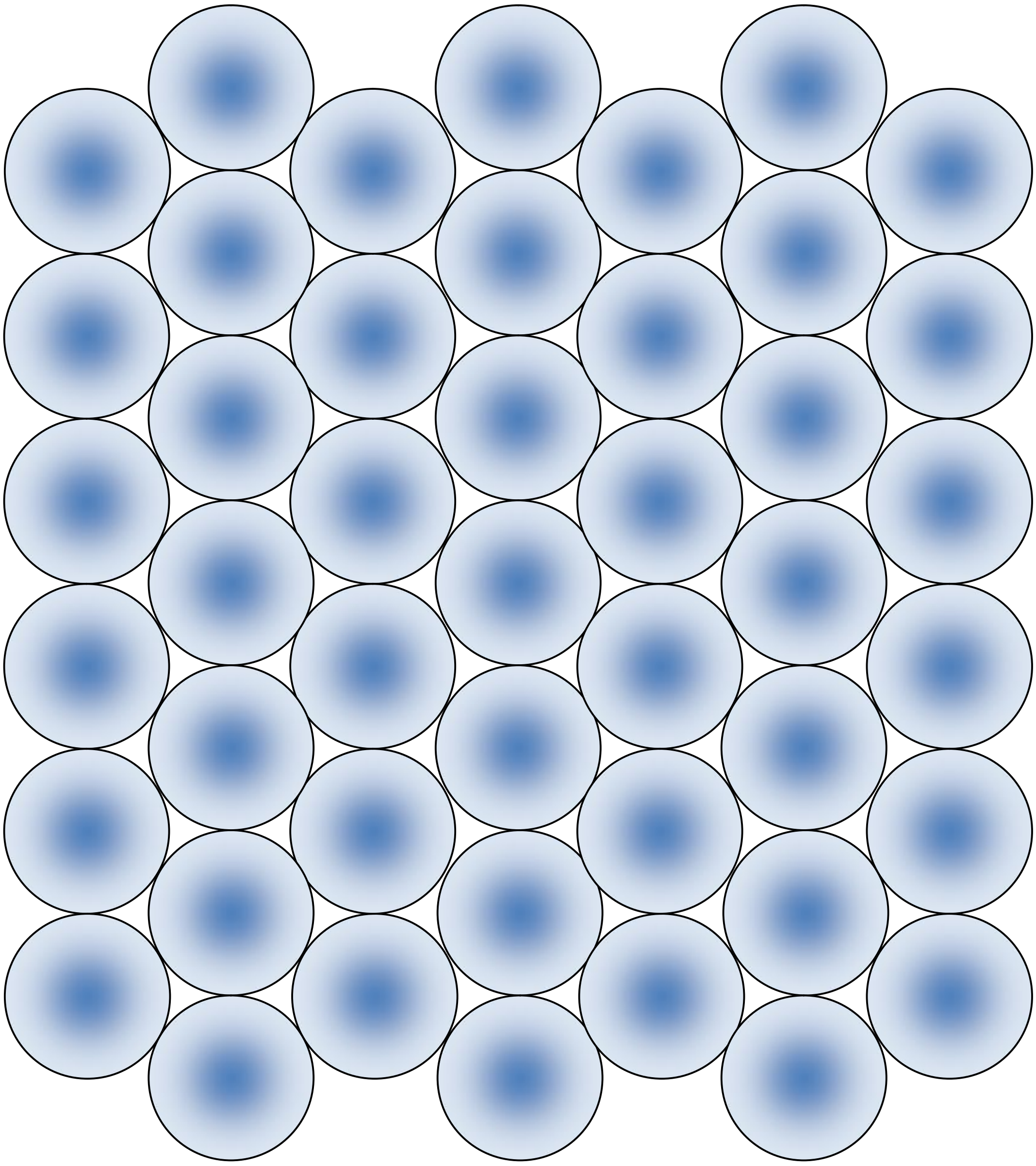
よって，体心立方構造では任意の剛球と最近接する剛球の数は 8 である。



剛球の積み重ね方と面心立方構造・六方最密構造

B を土台に剛球を積み重ねてできる立体構造が最密充填構造である。
最密充填構造は，その積み重ね方により 2 種類存在し，
それぞれの繰り返し単位を面心立方構造，六方最密構造という。

1 段目

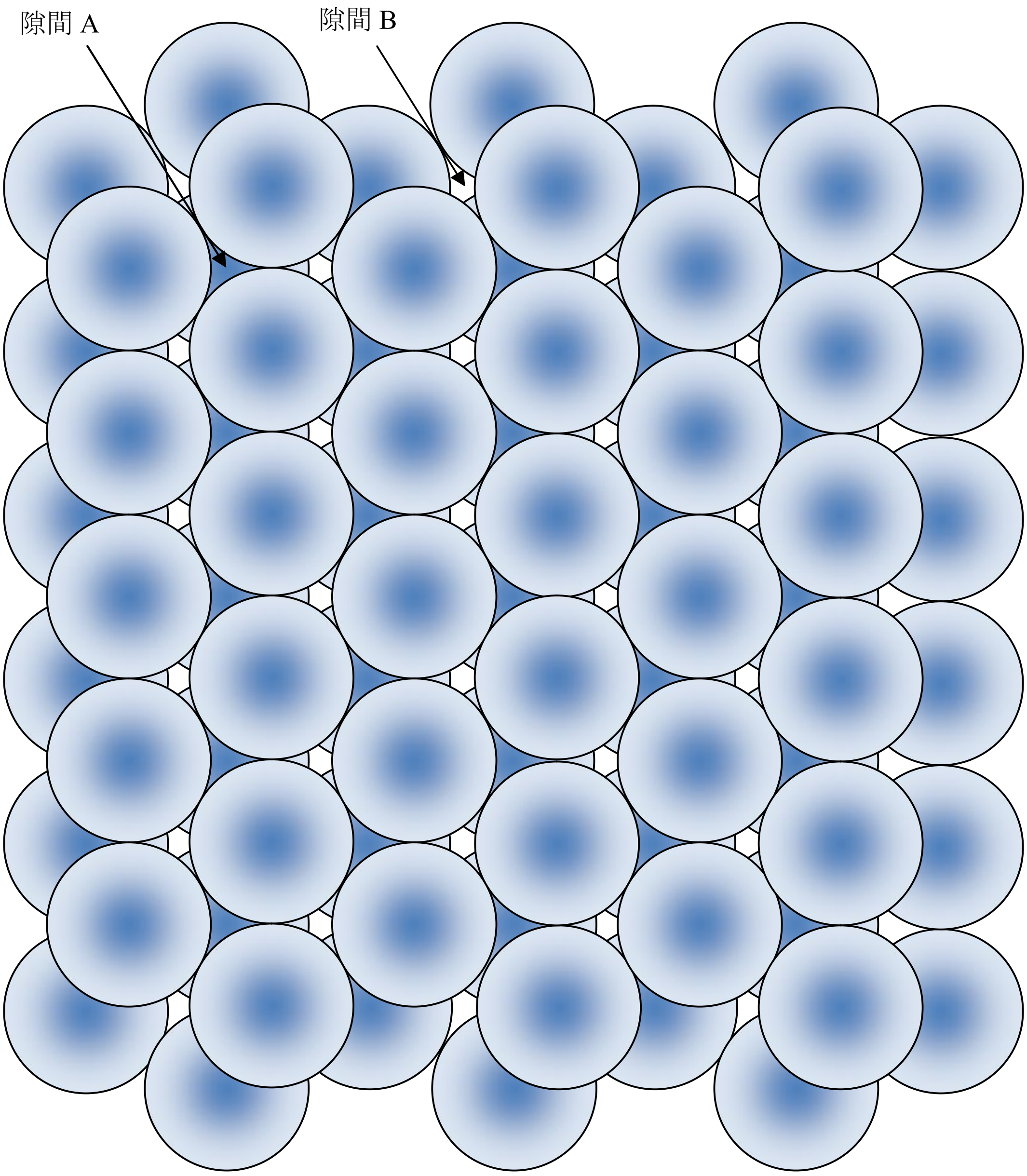


2 段目

2 段目の剛球がつくる隙間には 2 つのタイプがあり,

1 つは 1 段目の剛球の上にできる隙間（隙間 A）で,

1 つは 1 段目の剛球がつくる隙間の真上にできる隙間（隙間 B）である。



3 段目

3 段構造には, 3 段目の剛球を隙間 A に載せてできるものと隙間 B に載せてできるものがあり,

前者の構造の繰り返しを「A 方式」, 後者の構造の繰り返しを「B 方式」と呼ぶことにすると,

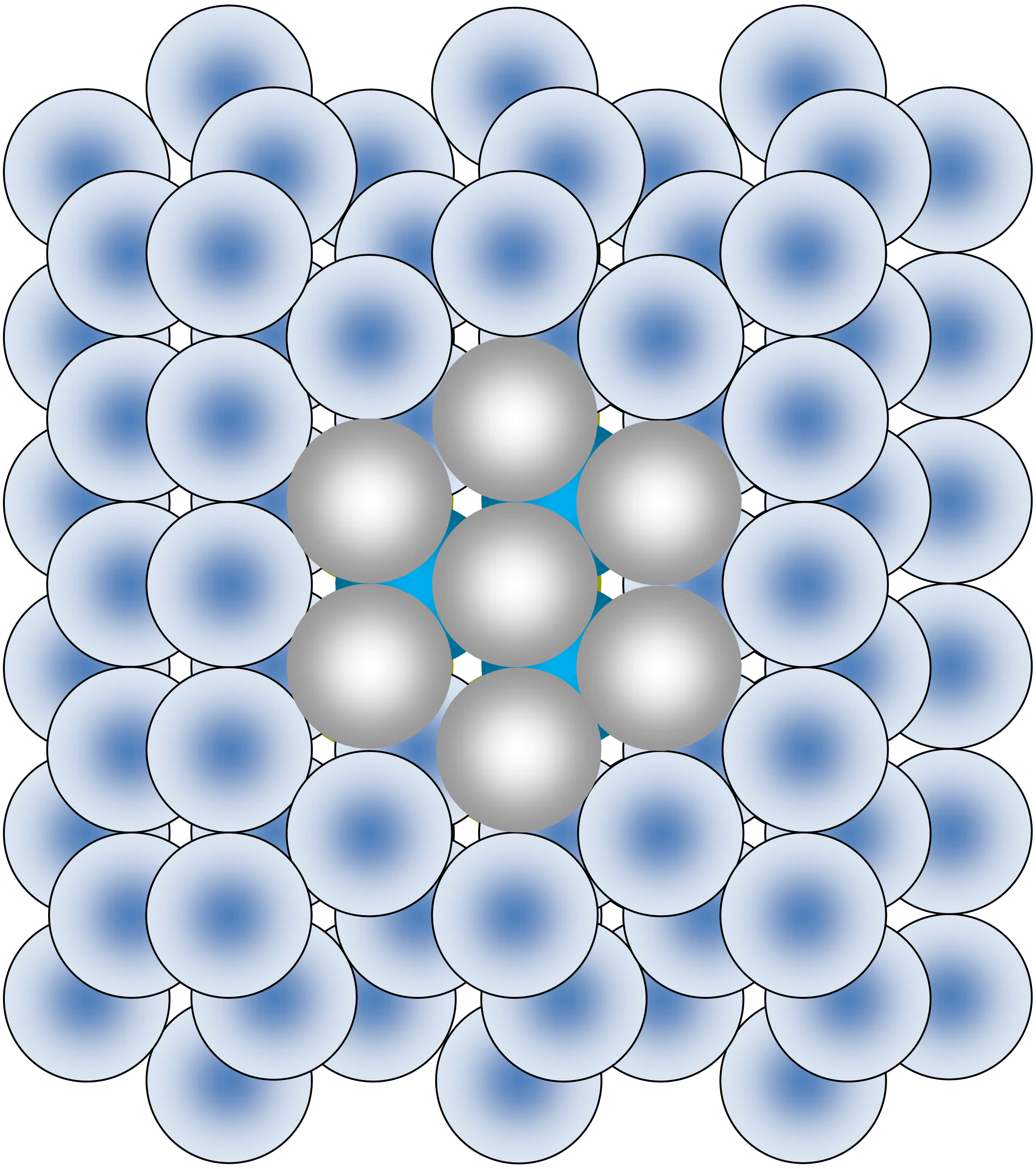
六方最密構造は A 方式による構造の繰り返し単位構造であり,

面心立方構造は B 方式による構造の最小繰り返し単位構造である。

六方最密構造

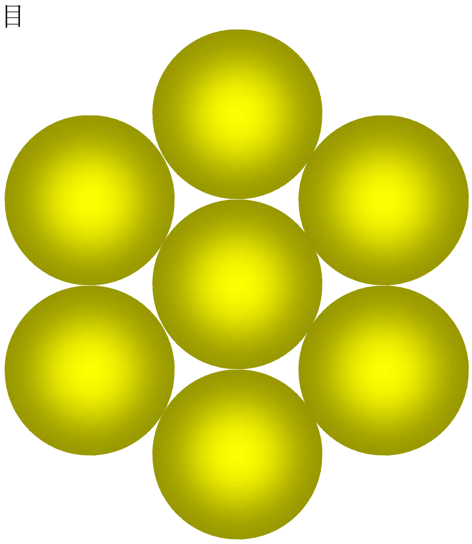
下図は，A 方式による 3 段構造を真上から見たものである。

他と色で区別した部分は繰り返し単位構造（六方最密構造）である。

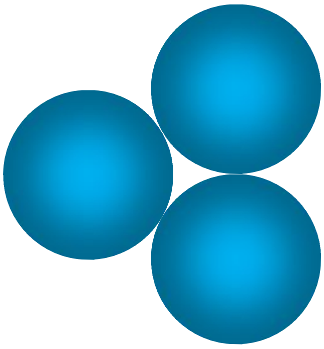


繰り返し単位構造のつくり方

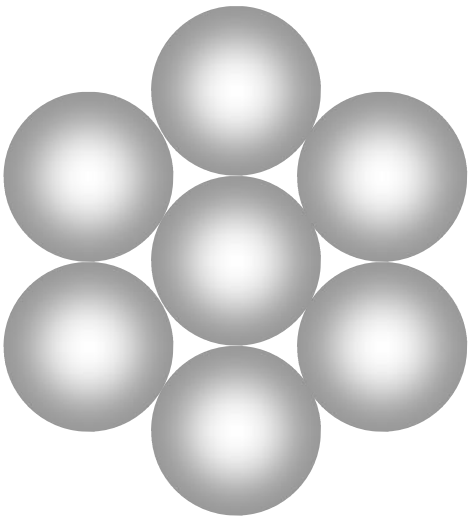
1 段目



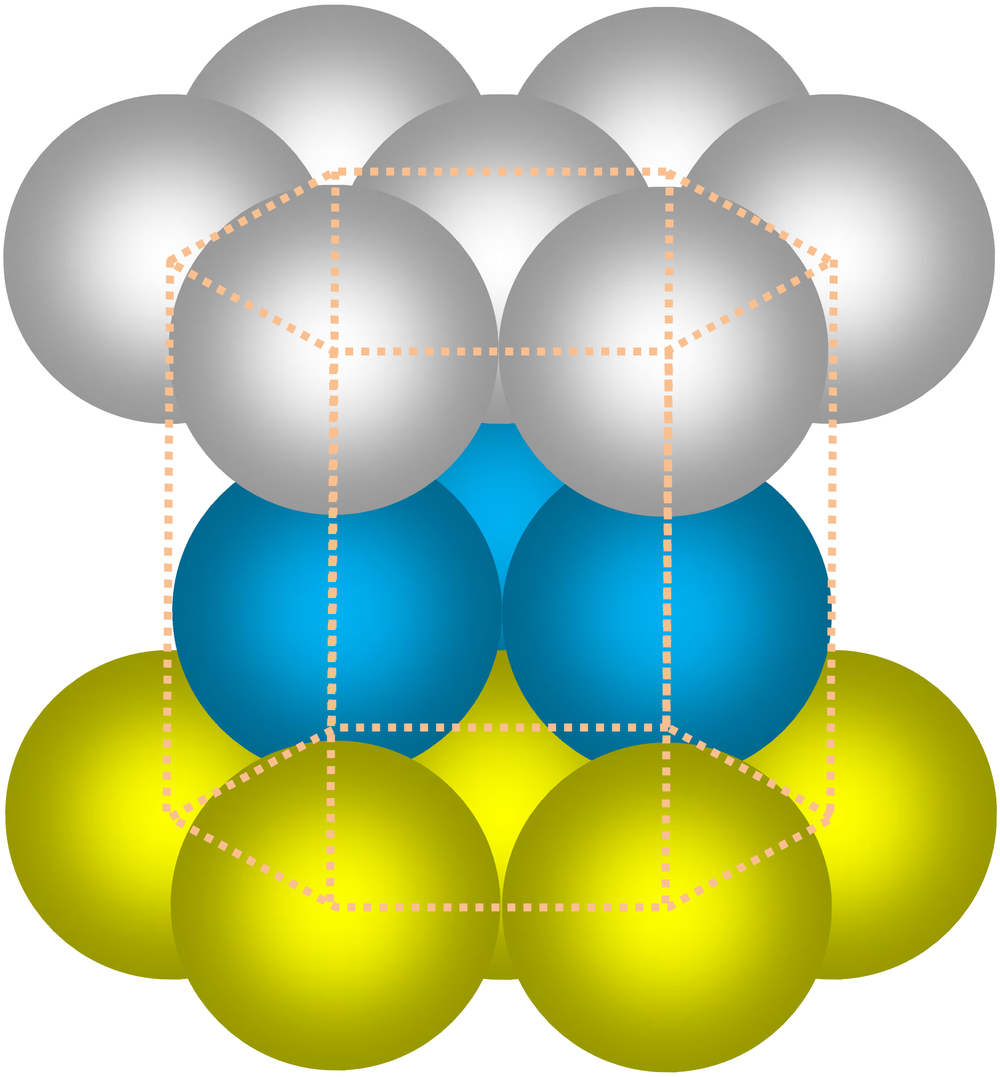
2 段目



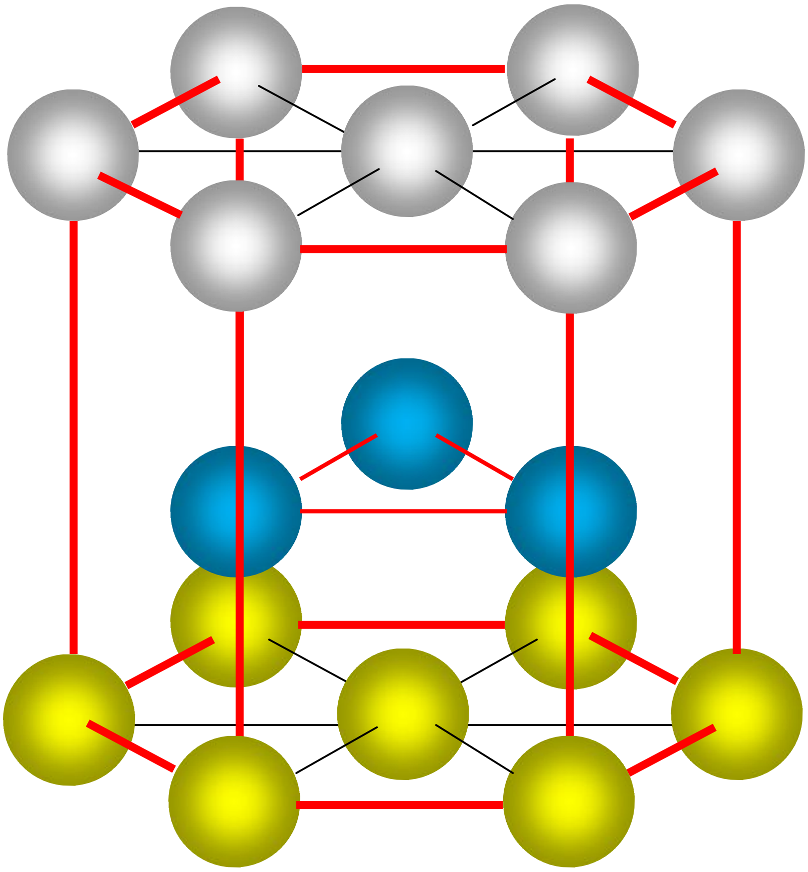
3 段目



3 段を重ねて繰り返し単位の六方最密構造が完成する。



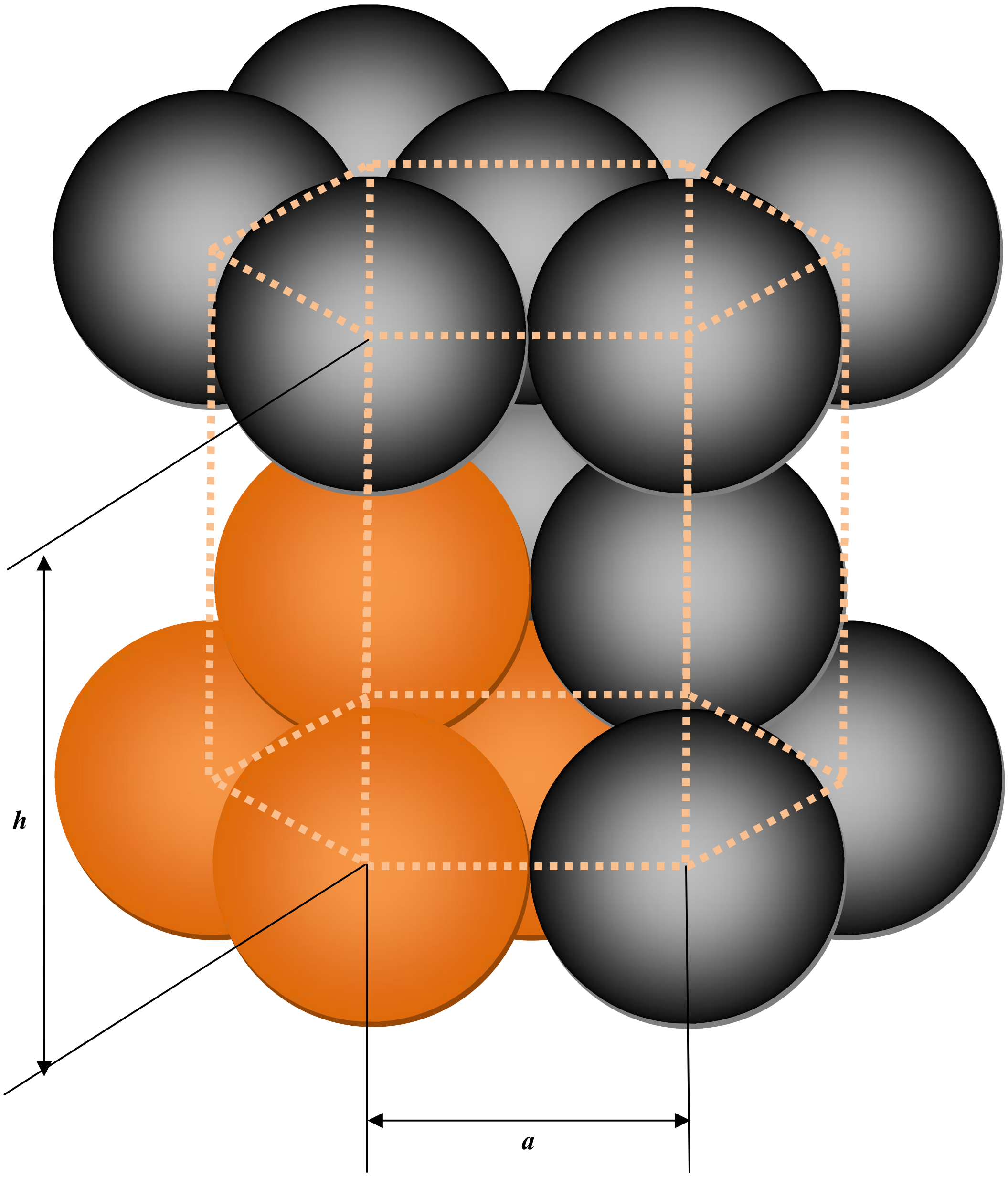
剛球を小さくし，見やすくしたのが下図
赤色実線の六角柱は六方最密格子
六方最密格子は最小繰り返し単位の結晶格子，すなわち単位格子ではないことに注意



六方最密構造の正六角柱の体積

底面の正六角形の 1 辺の長さを a とし，正六角柱の体積を求めてみよう。

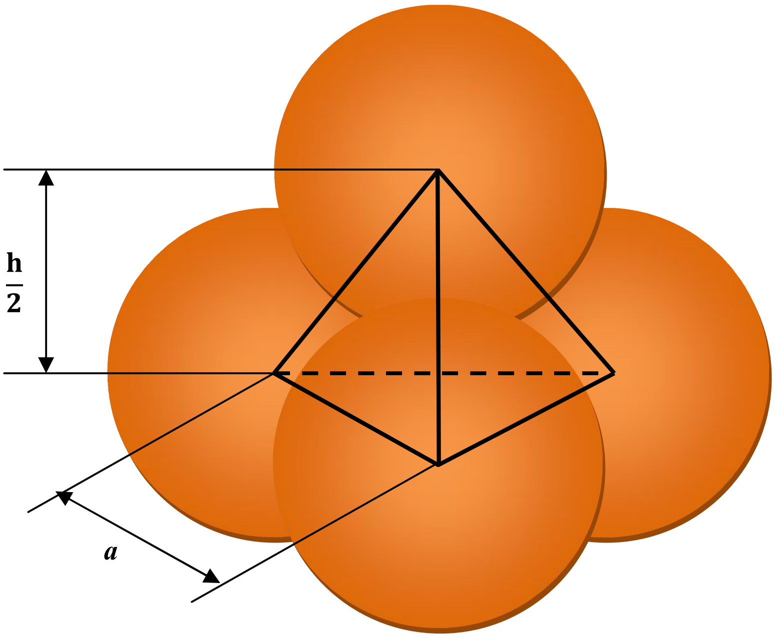
取り敢えず正六角柱の高さを h とし，下図オレンジ色の剛球に注目することにする。



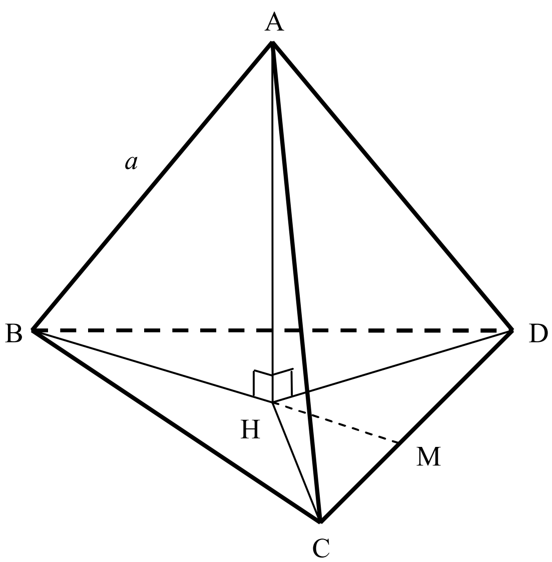
底面の正六角形は 1 辺の長さ a の正三角形が 6 個集まったものと見なせるから，

底面積＝$6\times\frac{1}{2}a^2\sin 60^\circ=\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2$　　・・・①

続いて，高さ h を a で表してみることにする。
4 個のオレンジ色剛球の中心を線分で結ぶと 1 辺の長さが a の正四面体ができる。
また，六方最密構造は 2 段目の層について上下対称だから，正四面体の高さは $\frac{h}{2}$ である。



一辺の長さ a の正四面体 ABCD の頂点 A から底面に下ろした垂線の足を H とする。



$\Delta AHB \equiv \Delta AHC \equiv \Delta AHD$ および $BC = CD = DB$ より,
直線 BH，直線 CH，直線 DH はそれぞれ辺 CD，辺 DB，辺 BC の中線である。
よって，H は正三角形 BCD の重心である。
辺 CD の中点を M とすると，直角三角形 ABH について,

$$BH = \frac{2}{3}BM = \frac{2}{3}BC\sin\angle BCM = \frac{2}{3}BC\sin 60^\circ = \frac{2}{3}a \times \frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{\sqrt{3}}{3}a$$

三平方の定理より,

$$AH = \sqrt{AB^2 - BH^2} = \sqrt{a^2 - \frac{a^2}{3}} = \sqrt{\frac{2}{3}}a = \frac{\sqrt{6}}{3}a$$

これと $AH = \dfrac{h}{2}$ より,

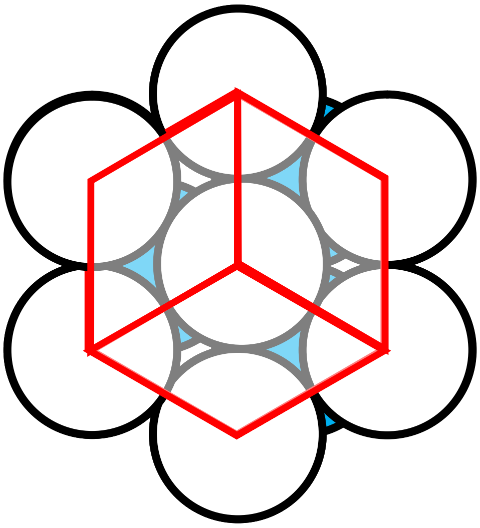
$$h = \frac{2\sqrt{6}}{3}a \quad ・・・②$$

①，②より,

$$六角柱の体積 = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2 \times \frac{2\sqrt{6}}{3}a = 3\sqrt{2}a^3$$

六方最密構造の単位格子に含まれる剛球の数は 2

六方最密構造の六角柱は，縦切りにより底面がひし形の四角角柱に 3 等分割でき（下図），このひし形四角柱が六方最密構造の単位格子である。



単位格子に含まれる剛球の数

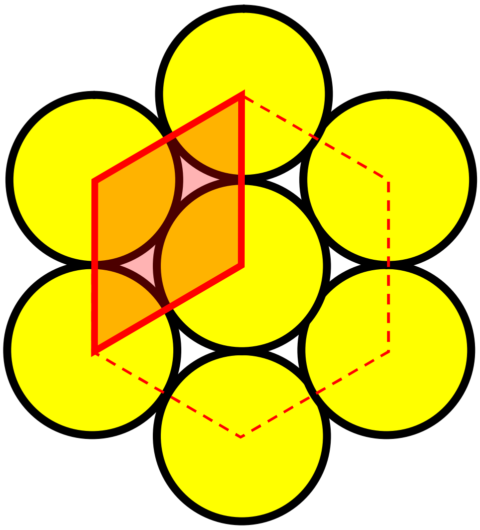
1 段目

剛球の上側半球のうち，下図ひし形で囲まれた部分である。

それぞれの剛球の中心はひし形の頂点でもあるから，

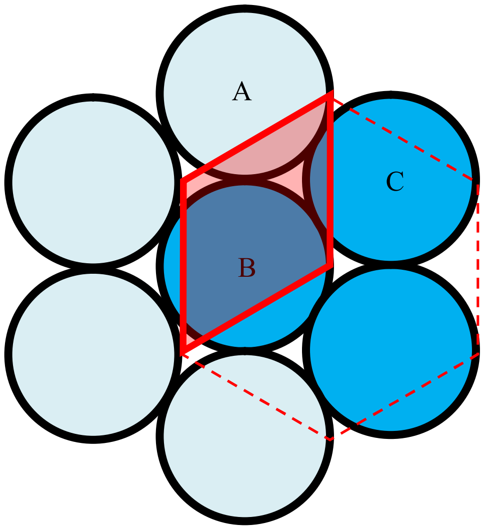
ひし形で囲まれた部分の中心角の和＝四角形の内角の和＝360°

よって，1 段目は剛球 $\frac{1}{2}$ 個分を含む。



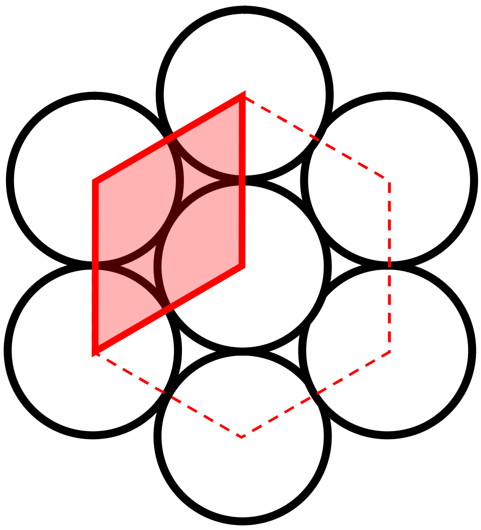
2 段目

ひし形は四辺の長さが等しく且つ平行だから，
上下方向では，
剛球 A のひし形に含まれる部分と剛球 B のひし形の下からはみ出した部分の体積が，
左右方向では，
剛球 C のひし形に含まれる部分と剛球 B のひし形から左にはみ出した部分の体積が
それぞれ等しい。
よって，2 段目は剛球 1 個分を含む。



3 段目

1 段目と同じで，剛球 $\frac{1}{2}$ 個分を含む。



以上より，六方最密構造の単位格子に含まれる剛球の数は，$\frac{1}{2}+1+\frac{1}{2}=2$ 個である。

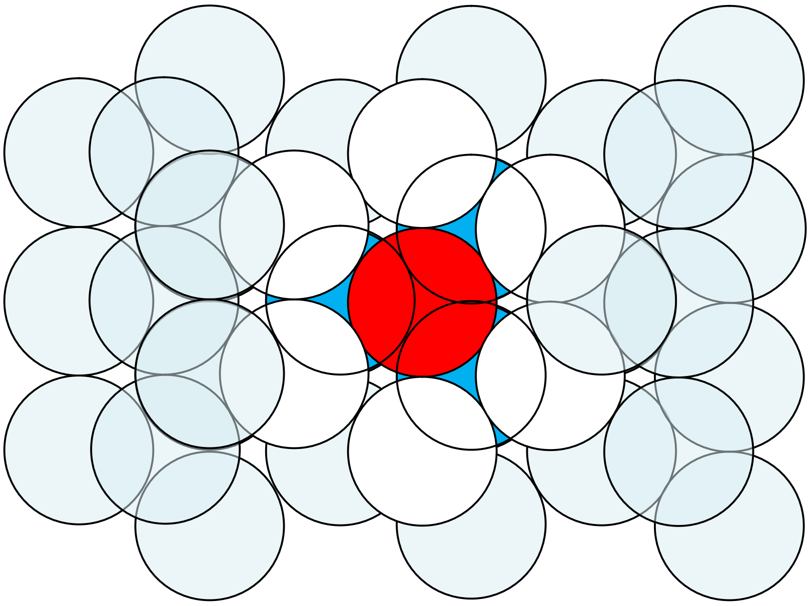
尚，六方最密構造の正六角柱に含まれる剛球の数となれば，

正六角柱はひし形四角柱 3 つの集合体だから，$3\times 2=6$ 個である。

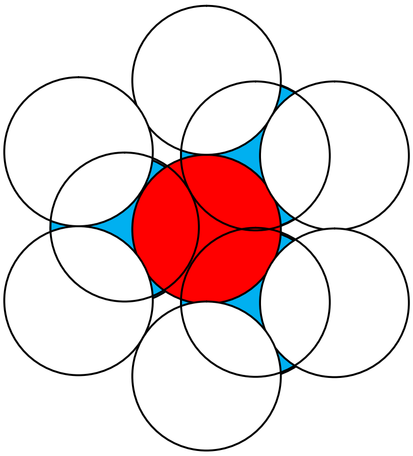
六方最密構造の任意の剛球と最近接する剛球の数は 12

体心立方構造と同様，どの剛球に注目してもその剛球と最近接する剛球の数は変わらない。

六方最密構造のもととなる A 方式（p.10）による 3 段構造を真上から見たのが下図であり，



赤色剛球に注目すると，12 個の剛球が最近接しているのがわかる。

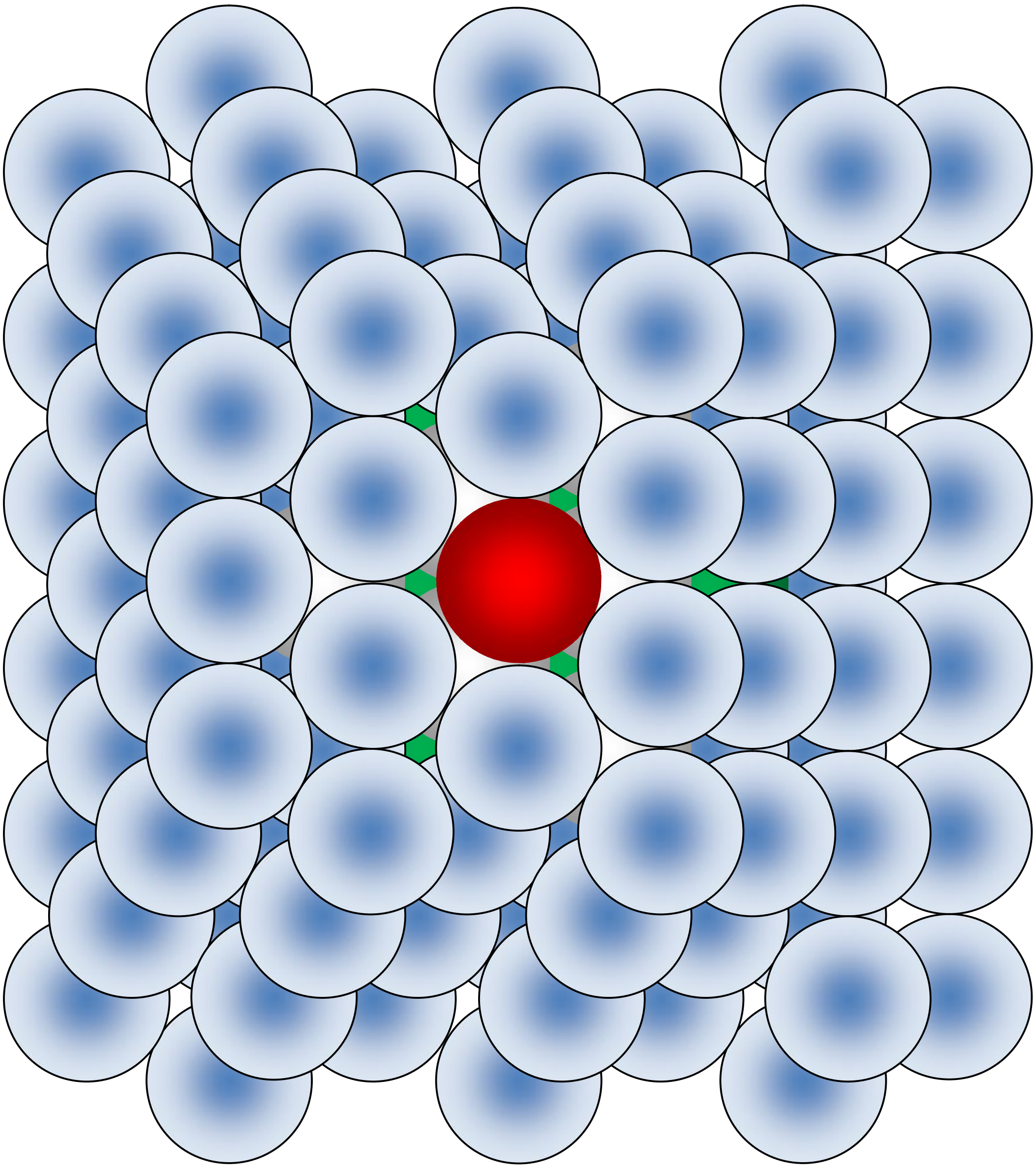


よって，六方最密構造の任意の剛球と最近接する剛球の数は 12 である。

面心立方構造

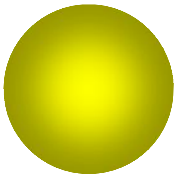
下図は，B 方式（p.10）による 4 段構造を真上から見たものである。

他と色で区別した部分は最小繰り返し単位構造（面心立方構造）である。

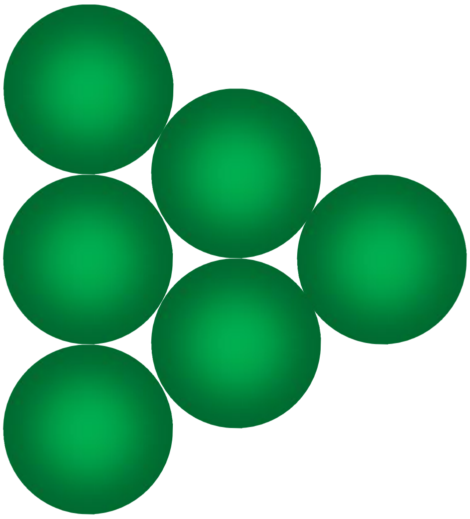


面心立方構造のつくり方

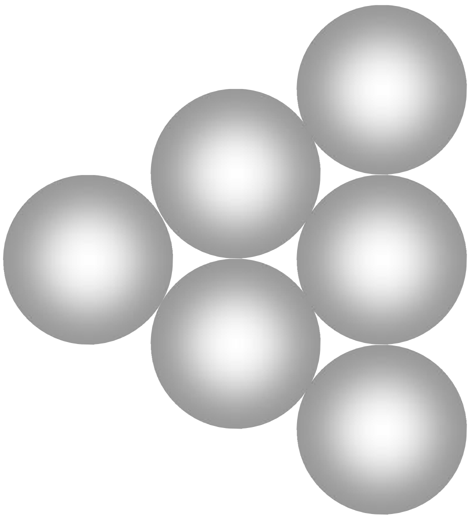
一段目



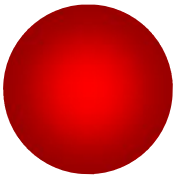
ニ段目



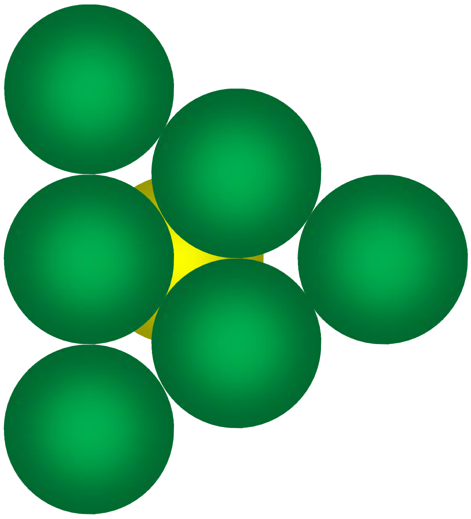
三段目



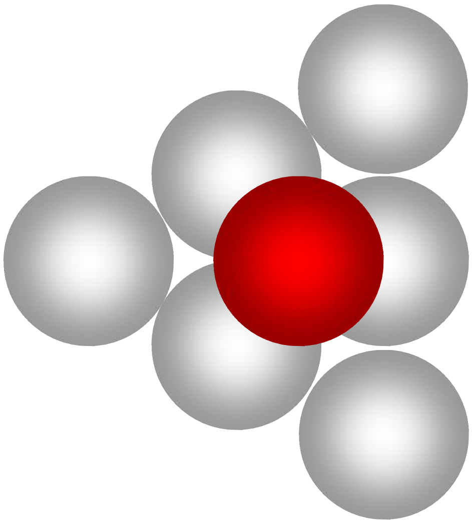
四段目



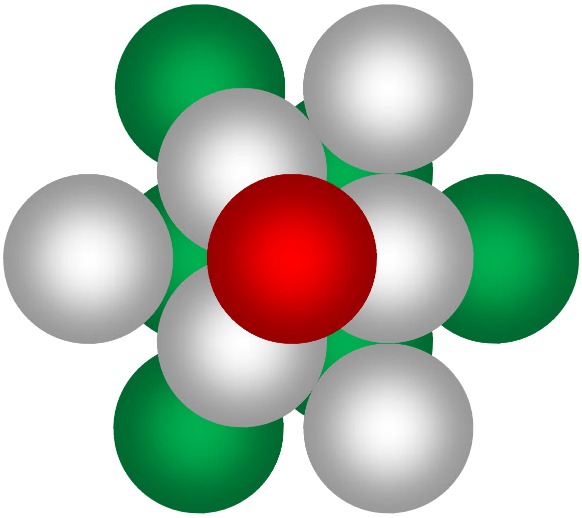
1 段目＋2 段目



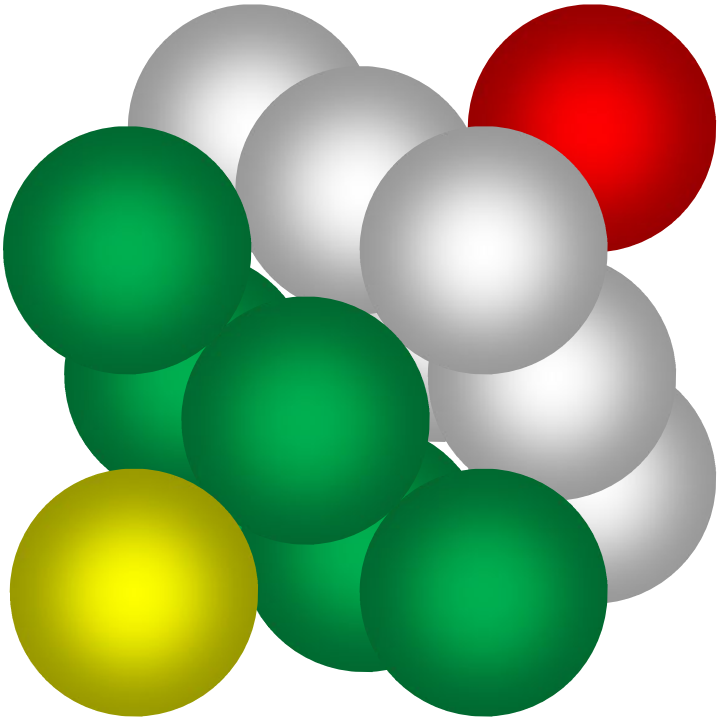
3 段目＋4 段目



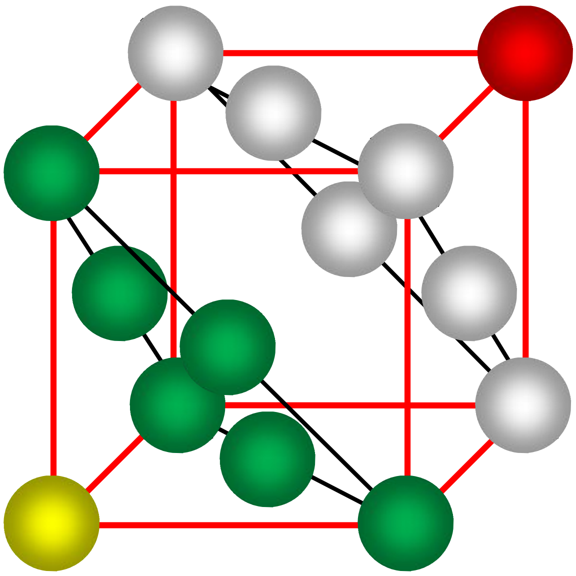
1 段目と 4 段目が真上から見てぴったりと重なるようにすると完成



これをある角度から眺めると立方体に見え，この立方体構造が面心立方構造である。



剛球を小さくし，見やすくしたのが下図



赤色実線は単位格子（面心立方格子）

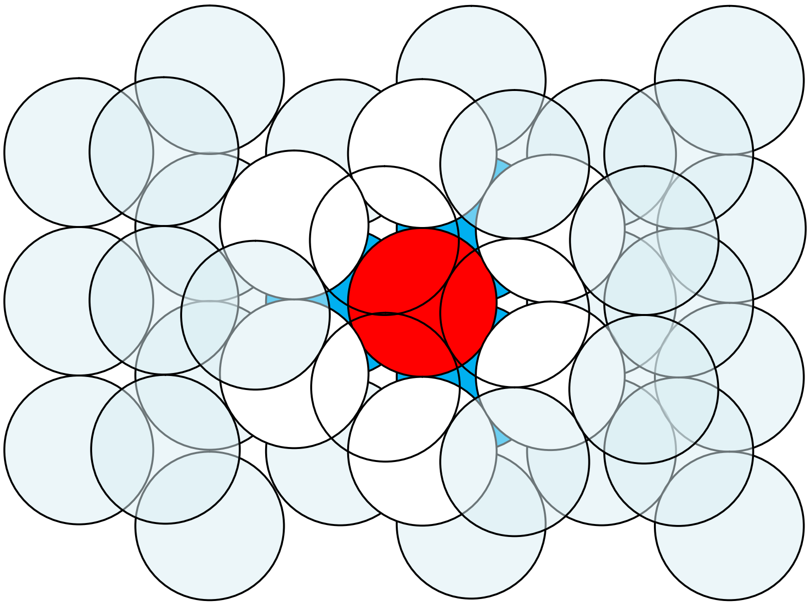
面心立方構造の任意の剛球と最近接する剛球の数は 12

結論から言うと，面心立方構造も六方最密構造と同じく最密構造だから

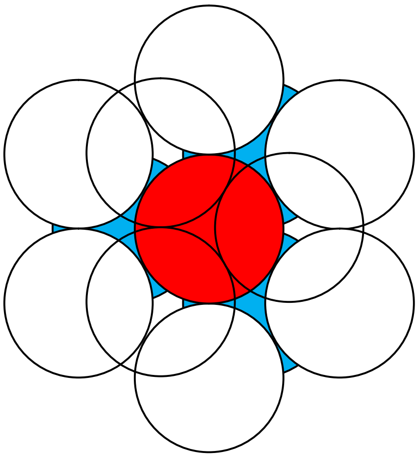
面心立方構造の任意の剛球と最近接する剛球の数も 12 である。

解説

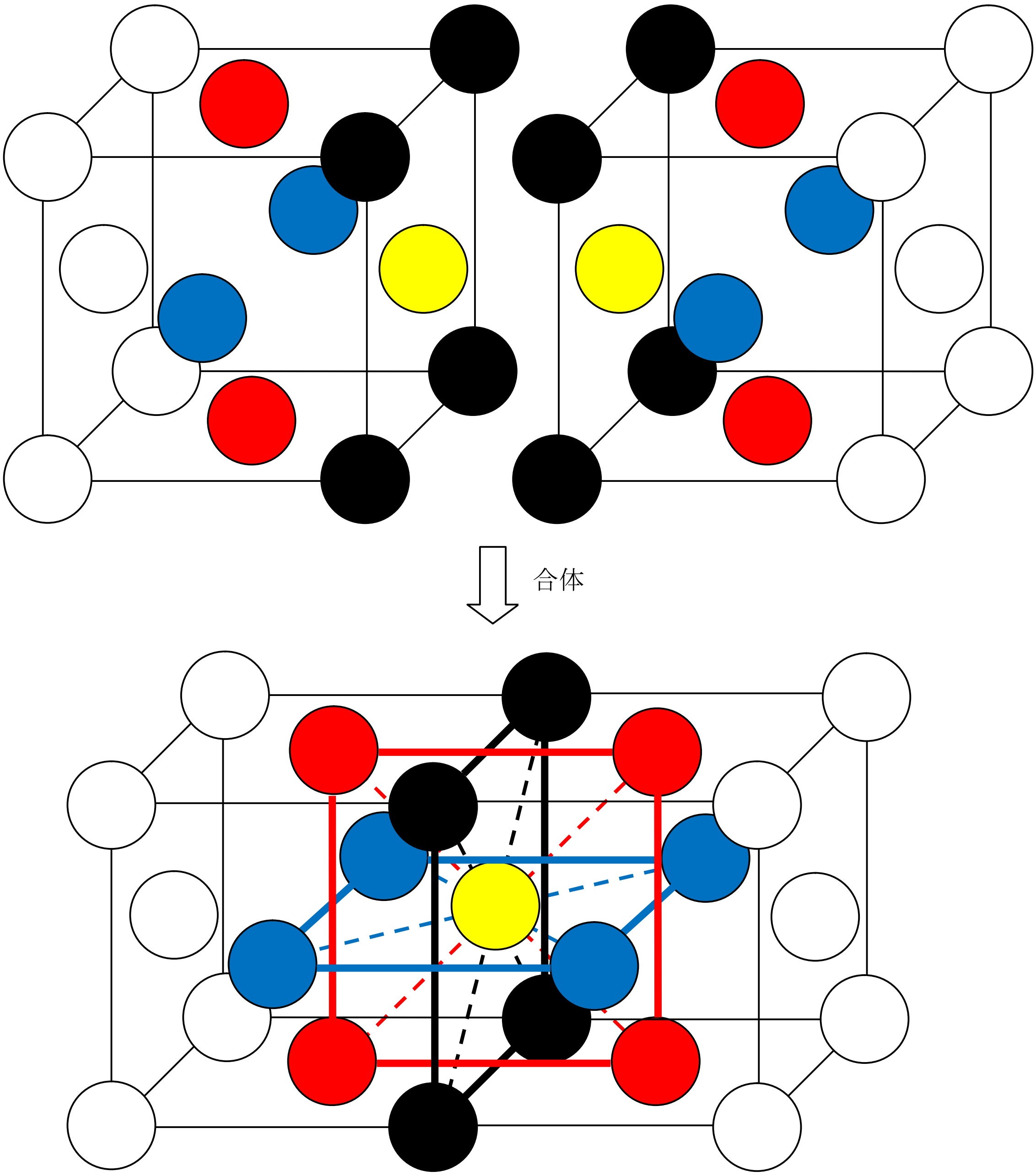
面心立方構造のもととなる B 方式（p.10）による 3 段構造を真上から見たのが下図であり，



赤色剛球に注目すると，12 個の剛球が最近接しているのがわかる。



あるいは，2 つの面心立方構造を合体させると，



中心の黄色剛球に赤色，青色，黒色の剛球がそれぞれ 4 個ずつ最近接している。
よって，面心立方構造の任意の剛球と最近接する剛球の数は 12 である。