最密構造と面心立方格子

東京電機大学　理工学部　類家正稔

平成 21 年 6 月 3 日

1　最密格子

基本的な結晶格子として単純立方格子，体心立方格子，面心立方格子，六方最密格子があります。これらのうち，面心立方格子と六方最密格子の 2 つは**最密充填**しているという共通点があります[1]。最密充填している結晶格子を最密格子と呼びます。すなわち，六方最密格子は最密充填している格子である事は明らかです。しかし，もうひとつ面心立方格子もじつは最密充填している最密格子の仲間なのです。単位格子を切り取ると特徴的な**面心構造**が浮き彫りになるので面心立方格子という名前で通っていますが，確かに最密構造でもあるのです。以下で，それについて説明します。

1.1　最密格子のくみあげ方

■ 1 層目

同じ大きさの球を多数[2]用意します。**きっちりと**詰めて球をならべると，1 個の球の周りに 6 個の球が接するようにならべることができます。（図 1 参照）これを A 層と呼びます。（図 2(a) も同時に参照して下さい）

■ 2 層目

A 層をよく見ると，3 個の球の間に隙間があるのが分かります。ここは**凹み**になっているのでこれを利用して 2 層目を積み上げていきます。図 1 の a_1 の凹みをに球を置き，その次に a_2 の凹みに球を置き，その次に a_3 の凹みに ... という具合です。その横方向の一列が終わったら，次の一列を作ります。その時に利用できる凹みは b_1 ではなく，c_1 です。そして，c_2，c_3... という具合に一列を作っていきます。これを繰り返していくと，2 層目が完成します。これを B 層と呼びます。（図 2(b) 参照）

■ 3 層目

3 層目を積み上げるやり方は 2 通り考えられます。

- まずひとつ目は，先ほど利用しなかった凹み b_1，b_2，b_3... を利用するやり方です[3]。これを C 層と呼びます。（図 2(c) 参照）
- もう 1 通りのやり方は，3 層目を 1 層目と同じ位置に置くやり方です，つまり，3 層目は A 層そのものです。（図 2(d) 参照）

[1] 最密充填とは，同じ大きさの球を単位体積に最も密に詰める事を意味し，その理論値は **74 %**である事が知られています。
[2] 実際に試してみるには最低 20 個程度必要です。
[3] これは 1 層目にできた凹みでしたが，2 層目を積み上げた後でも凹みになっている事に注意して下さい。

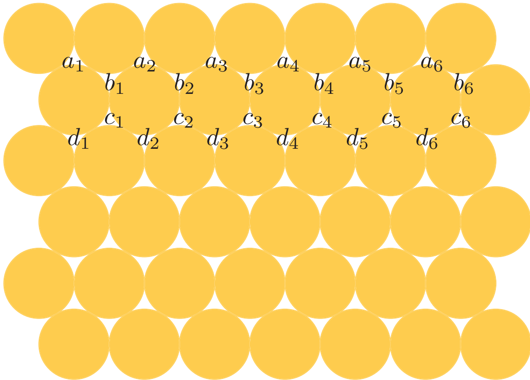

図 1: 最密充填の作成 1。凹みの確認

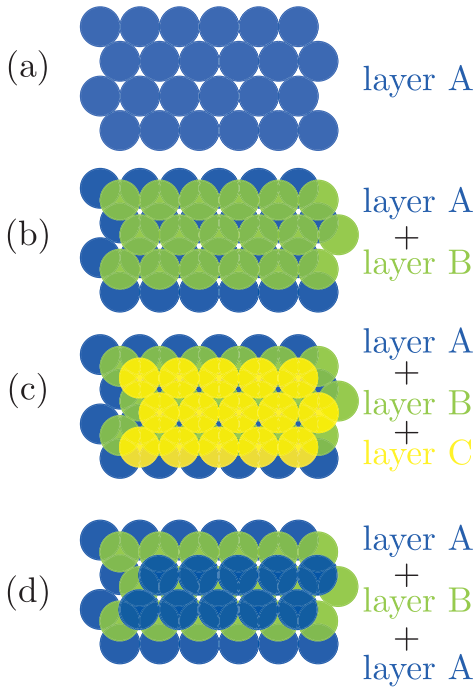

図 2: 最密充填の作成 2。積み上げ方

1.2 立方最密格子と六方最密格子

立方最密格子

ABCABCABC. . . で積み上げられる構造を**立方最密格子**と呼びます。充填率は 74 %で最接近粒子数は 12 個です。**この立方最密格子を斜めから見ると，面心立方格子になります。**

六方最密格子

ABABAB. . . で積み上げられる構造を**六方最密格子**と呼びます。充填率は 74 %で最接近粒子数は 12 個です。

2　隠れた fcc を見つける

前節では非常に簡単なルールで最密構造を**積み上げる**事ができるという事を説明しました[4]。そこで，今度は結晶構造の基本である単位格子をその最密構造の中に見つけます。

2.1　六方最密格子

六方最密構造は簡単に見つけることができます。図 3 を見て下さい。この図では AB2 層しか積み上げていませんが，色を濃くして強調している A 層の 6 角形と B 層の 3 角形が六方最密格子の一部である事が分かると思います。これに A 層の 6 角形をもう一段積み上げれば六方最密**格子**の単位格子が出来上がります。

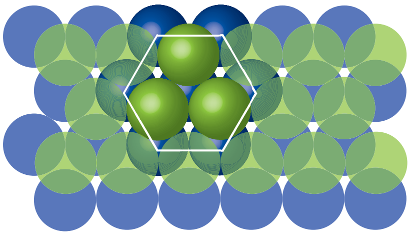

図 3: 最密構造の中の六方最密格子

2.2　面心立方格子

前節で説明したやり方で積み上げた最密構造中に面心立方構造を見つけるのは，じつは**容易な事ではありません**。様々なテキストには，**斜めから見れば面心立方に見えます**と書かれていますが，初めて見た人が見つけるのはほとんど無理ではないかと思っています。そこで，できるだけ分かりやすく図示したものが，図 4 です。図 4(a) では，ABC の 3 層の中に面心立方格子に特徴的な**面心**の構造が**斜め**に存在する事を示しています。図 4(b) は面心立方格子の単位格子を強調して示しています。単位格子を見つけるのには，ABC の 3 層だけでは不足で，ABCA の 4 層の積み上げが必要になります。また，図 4(c) と (d) はこの単位格子を構成している球がそれぞれ A 層，B 層，C 層のいずれに属しているかを分かりやすく示した（つもりの）図です。

分かってみると大した事はないのですが，この単位格子を初めて見つけるには少々骨が折れると思います。要は，立方体をその 1 つの頂角で立たせ，その頂角と対頂角を結ぶ直線が垂直になるようにした形で単位格子が隠れているわけです。

[4]正確には,「こういう積み上げ方をすれば最密構造になるそうですよ」と紹介しただけです。これが最密充填である事を**証明**するのは結構難しいようです。というのも，前節で紹介した積み上げ方が最密構造になると**予想**したのは彼のケプラー（Johannes Kepler）で，1611 年の事だそうです。これを証明したのはトーマス・ヘールズで 1998 年の事です。つまり，この予想の証明におよそ 400 年かかっていることになります。私はその証明を見た事はありませんが，コンピュータを使って証明しているそうです。また，この証明は（規則性のある）格子系だけでなく不規則な構造も含めて証明されているそうです。これに関する解説本が出ているそうなので紹介しておきます。ジョージ・G・スピーロ (著), 青木 薫 (翻訳) ，ケプラー予想，新潮社， 2005 年

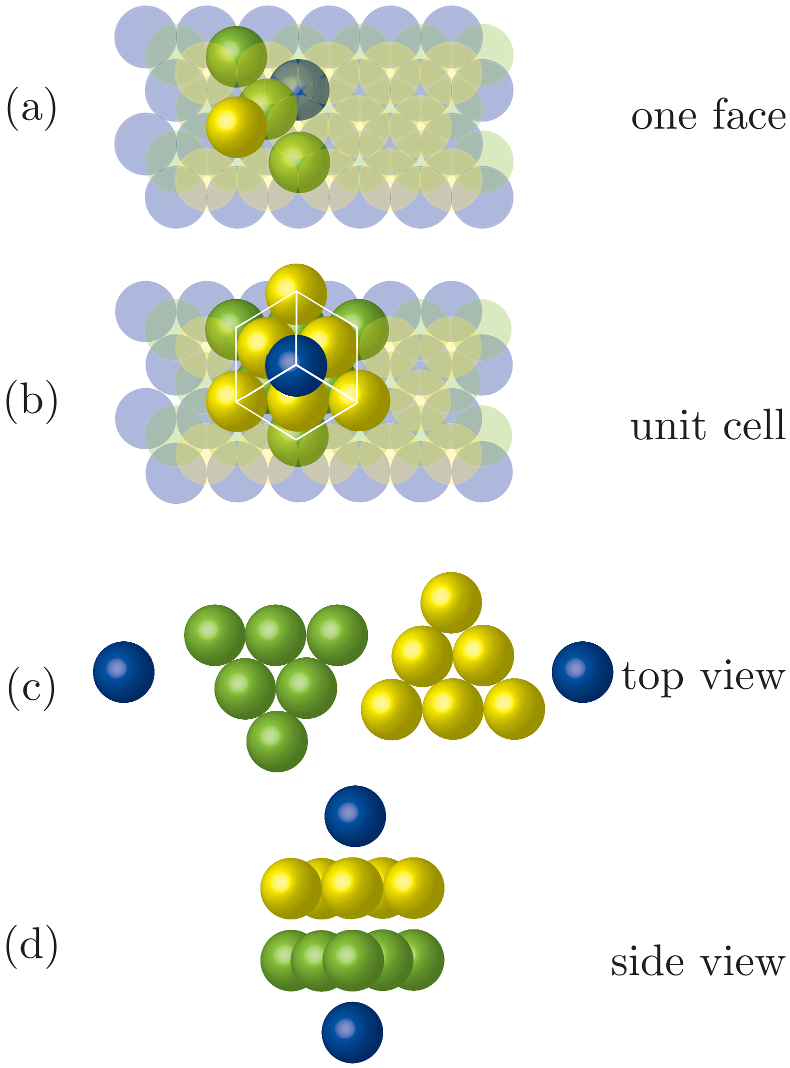

図 4: 最密構造の中の面心立方格子