

投稿類別:數學類

篇名:

堆積的奧秘-探討金屬原子之化學晶型堆積方式

作者:

葉宇軒。高雄中學。高二 24 班

指導老師:

黃仁杰 老師

壹 • 前言

一、研究動機

十七世紀，德國著名的天文學家，克普勒，為了解決「如何在船上最有效的堆積砲彈」，提出了著名的克普勒猜想。猜想內容認為，球體最有效的堆積方式就和水果攤商的水果堆堆積方式相同。金屬的原子堆積也是各個相同大小的球體堆疊起來。希望藉由討論不同種類的金屬原子堆積方式來認識克普勒猜想的意義與精髓。

二、研究目的

討論不同堆積方式，其晶格的形狀以及其密度的差異

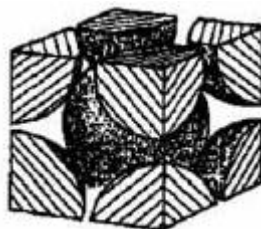
貳 • 正文

金屬晶體的堆積主要分成體心立方堆積(BCC)、面心立方堆積(FCC)、六方最密堆積(HCP)三種，以下將分項來討論。

一、體心立方堆積(Body Centered Cubic Crystal Structure)



圖一



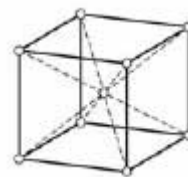
圖二

(一)每一個原子皆與 8 顆原子相連接，故其配位數為 8。

(二)晶格形狀為正方體。晶格內 8 個角落各有 $\frac{1}{8}$ 個金屬原子，加上中間一個完整的原子，單位晶格內共有 2 個原子。

(三)設晶格邊長為 L ，原子半徑為 R 。晶格之對角線恰為 4 個原子半徑長，可知其邊長與原子半徑關係為

$$\sqrt{3}L=4R \text{ 即 } R=\frac{\sqrt{3}}{4}L$$



圖三

(四)由 R 與 L 之關係，可以推知其單位晶格內之原子空間占有率：

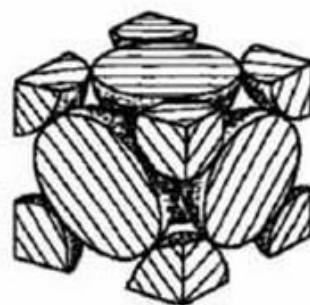
$$=\frac{\sqrt{3}\pi}{8} \sim 68\%$$

(五)

二、面心立方堆積(Face Centered Cubic Crystal Structure)



圖四



圖五

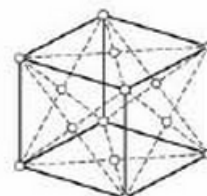
(一)每一個原子皆與 12 顆原子相連接，故其配位數為 12。

(二)晶格形狀為正方體。晶格內 8 個角落各有 $\frac{1}{8}$ 個金屬原子，在晶格 6

個面上各有 $\frac{1}{2}$ 個原子，單位晶格內共有 4 個原子。

(三)設晶格邊長為 L ，原子半徑為 R 。晶格一個面之對角線恰為 4 個原子半徑長，可知其邊長與原子半徑關係為

$$\sqrt{2}L=4R \text{ 即 } R=\frac{\sqrt{2}}{4}L$$



圖六

(四)由 R 與 L 之關係，可以推知其單位晶格內之原子空間占有率：

$$\frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \sim 74\%$$

三、六方最密堆積(Hexagonal Close Packed Crystal Structure)



圖七



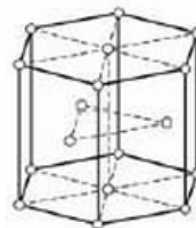
圖八

(一)每一個原子皆與 12 顆原子相連接，故其配位數為 12。

(二)晶格形狀為六角柱。晶格內 12 個角落各有 $\frac{1}{6}$ 個金屬原子，加上中間 3 個完整的原子以及上下面各 $\frac{1}{2}$ ，單位晶格內共有 6 個原子。

(三)設晶格六角形邊長為 L_1 ，晶格高為 L_2 ，原子半徑為 R 。晶格之對角線恰為 4 個原子半徑長，可知其邊長與原子半徑關係為

$$L_1 = 2R \quad \text{及} \quad L_2 = \frac{4\sqrt{6}}{3}R$$

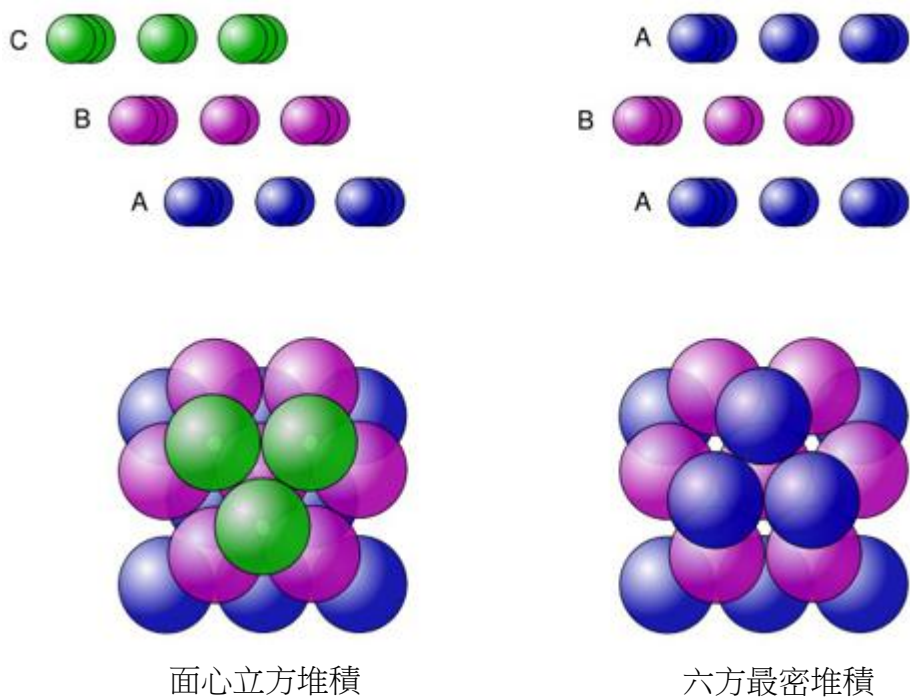


圖九

(四)由 R 與 L 之關係，可以推知其單位晶格內之原子空間占有率：

$$\frac{6 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{6\sqrt{3}R^2 \cdot \frac{4\sqrt{6}}{3}R} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \sim 74\%$$

值得注意的是，將面心立方堆積之晶格轉 45 度後由上往下看，也會呈現六角柱的形狀。但是其排列方式與六方最密堆積有所不同。面心立方堆積為 ABCABC 的堆積方式；而六方最密堆積則為 ABABAB 的堆積方式。如圖十所示。



圖十

參 • 結論

總整理:

	體心立方堆積	面心立方堆積	六方最密堆積
原子配位數	8	12	12
單位晶格原子數	2	4	6
空間占有率	68%	74%	74%
舉例	1A 族金屬、鉕、 鉻、鐵...等	鈣、鎵、鋁...等	鈹、鎂、鈦、鈦、 鋅...等

肆 • 引注資料

圖片一~九來源 <http://www.fivejd.com/zczsk/jsxrcl/jsxhrc13.htm> 無錫市五創機電設備網

圖片十來源: http://www.guancha.cn/Science/2014_05_14_229463.shtml

晶體的結構:高中化學學科中心

http://r.search.yahoo.com/_ylt=A2oKmMtEtw1UrisA82iX2At.;;_ylu=X3oDMTBy

堆積的奧秘-探討金屬原子之化學晶型堆積方式

MjhxODA5BHNIYwNzcgRwb3MDMwRjb2xvA3NnMwR2dGlkAw--/RV=2/RE=141
0213829/RO=10/RU=http%3a%2f%2fchem.kshs.kh.edu.tw%2fTeaching%2520r
esource%2fe-teaching%2f2006-2.ppt/RK=0/RS=0yCTC39LVltlqIhtzCx9JsMAJ9E-

Power Point 簡報 tea.ymsb.tp.edu.tw/gallery/369/369-9625.ppt