

六方最密堆積的研究

王德俊 師大附中



金屬晶體中原子的堆積，面心立方及體心立方的單位立方格子（unit cell）的圖形在一大一普化（註一）或其他參考書中很容易找到，也比較沒有問題，如圖一及圖二，在面心立方，每個單位立方格子中含有 $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$ 個原子，在體心立方每個格子含有 $8 \times 1/8 + 1 = 2$ 個原子。但六方最密堆積的單位立方格子則比較會引起問題，從坊間高中化學教本（註二）及美國高中化學（註三）查知六方最密堆積每個格子中所含的原子數為 $1/6 \times 12 + 1/2 \times 2 + 3 = 6$ 個原子，如此則原子片層的原子數取法為 7 個—3 個—7 個，其單位立方格子的分解圖形為：將三層放在一起，如從垂直於 a 原子面看，則成圖三，其立體圖形如圖四所示：

這樣就引起幾個問題。

(1) 何以格子中有三原子（即 C 原子）凸出界面？

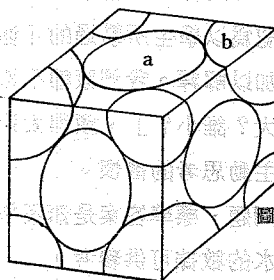
從下圖中可以看出，原子按六方最密堆積時，是突出六邊形的界外，且凸出的部份恰等於相鄰凹下的部份，圖中塗黑者：

因為 C 原子凸出界面，顯得與面心或體心格子（無原子凸出界面）的差異。

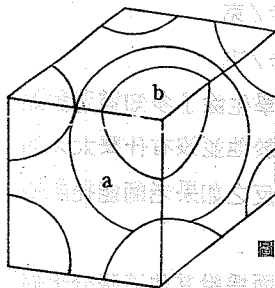
（註一）Principles of Chemistry Grath. L. Lee 1970.

（註二）高級中學化學（自然科組）原編者陳朝棟王澄霞，改編者陶金華，東華書局修訂三版。

（註三）Chemistry-experimental foundations Robert W Parry 等四人 1970.



圖一：面心立方格子
a：1/2 個原子
b：1/8 個原子

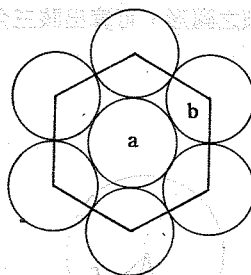
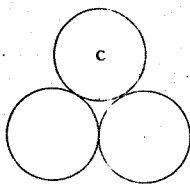
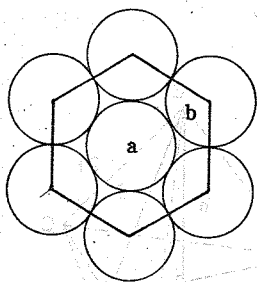


圖二：體心立方格子
a：完整原子
b：1/8 個原子

(2) 如不使 C 原子凸出界面，格子的圖形應如何？

如將 C 原子凸出的部份切去（即 C_1 ）則成圖五，此時 C 原子不為一完全原子，因 $C_1 = C_2$ ，故 $C = C_1 + C_2$ ，在圖五共有三個 C_1 及三個 C_2 ，加起來也是三個原子。

從圖四看，符合 $12 \times 1/6 + 2 \times 1/2 + 3$



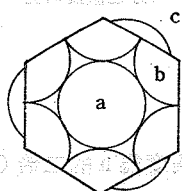
圖三：六方最密堆積單位立方格子分解圖

a : 1/2 個原子

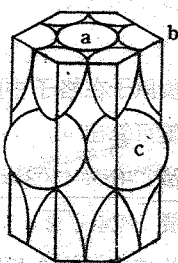
b : 1/6 個原子

c : 完整原子

= 6 的數學式，但中間的 C 原子却凸出格子界面，是否妥當？從圖五看，各原子皆在格子內，但却不符合 $12 \times 1/6 + 2 \times 1/2 + 3 = 6$ 的數學式中的 3，是否妥當？



頂視圖

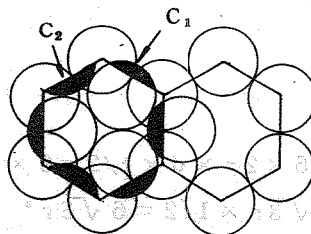


側視圖

圖四：六方最密堆積單位立方格子

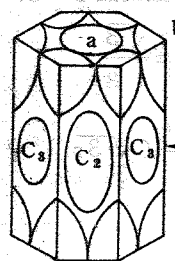
注意：

C 原子突出界面



C₁ : 凸出部份

C₂ : 凹下部份



C₃ = C - C₁

C₂ = C₁

C₁ 已被切去

圖五：六方最密堆積分解圖

3) 六方最密堆積中，原子半徑 (r) 與原子片層間距離 (d) 的關係如何？

二者的關係從圖六可看出：

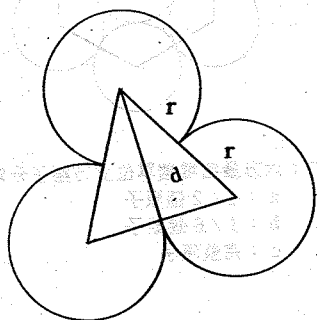
$$d^2 = (2r)^2 - r^2 = 3r^2$$

$$\text{故 } d = \sqrt{3}r$$

這個關係不論從同一層或上下二層來看，都是一樣的。

(4) 正六邊形的面積是多少？

從上(3)項之圖形，可算出該三角形之面積，



圖六：原子片層與半徑關係圖

$$A = 6 \times 2r \times d \times 1/2 = 6 \times 2r \times \sqrt{3}r \times 1/2 = 6\sqrt{3}r^2$$

(5) 六方柱體的體積如何？

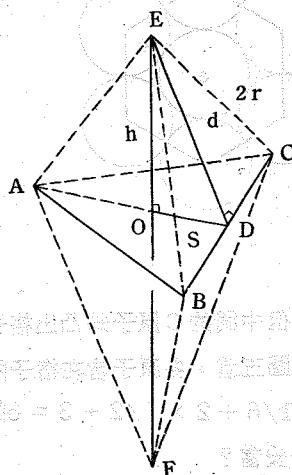
必須求出該柱體的高度，從圖七可知 $\triangle ABC$ 為一正三角形， O 點為重心，故

$$\overline{OD} = S = \frac{\sqrt{3}}{3}r$$

$$\text{則 } \overline{OE} = h, h^2 = (\sqrt{3}r)^2 - \left(\frac{\sqrt{3}}{3}r\right)^2$$

$$\text{故 } h = 2\sqrt{\frac{2}{3}}r$$

而正六邊形由六個這種三角形構成，故正六邊形之面積為：



圖七：六方柱體幾何圖

但六方柱體之高度為 h 的二倍（即 $\overline{EF}$ ）

$$\text{則六方柱體的體積為 } V = 6\sqrt{3}r^2 \cdot 4\sqrt{\frac{2}{3}}r = 24\sqrt{2}r^3$$

(6) 六方最密堆積原子在格子中所佔之體積如何？

由下列比值可算出。

$$\frac{\text{原子的體積}}{\text{格子的體積}} = \frac{6 \times 4/3 \pi r^3}{24\sqrt{2}r^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

而面心立方之比值與此完全相同。

