

## 依托氯化钠的晶体结构模型 速解一类晶体结构习题

梁峻峰

(平泉县第一中学, 河北承德 067500)

**摘要:** 依托氯化钠晶体结构模型, 详细地分析和解答一例晶体结构习题(高考试题), 进而得出此类习题的快速求解方法。

**关键词:** NaCl; 密度; 摩尔质量; 核间距; 阿伏加德罗常数

**文章编号:** 1005-6629(2009)04-0066-02

**中图分类号:** G632.479

**文献标识码:** B

晶体结构题目有较好的区分度, 它不仅能够考查学生的观察能力, 而且能够考查学生对知识的迁移能力及空间想象能力, 并常常可以将数学和化学知识有机地结合起来进行考查。中学化学中NaCl型的晶体结构是学生必须熟悉而又常被考查的知识点, 本文兹举几例进行解析, 以帮助学生掌握其中一类问题的解题方法。

### 1 计算晶体的密度

例1. 中学教材中展示了NaCl的晶体结构, 它是向三维空间延伸得到的完美晶体。NiO(氧化镍)晶体的结构与NaCl的相同,  $\text{Ni}^{2+}$ 与最邻近 $\text{O}^{2-}$ 的核间距离为 $a \times 10^{-8}$  cm, 计算NiO晶体的密度(已知NiO的摩尔质量为 $74.7 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $N_A$ 为 $6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ )。

**解析:** 右图1是NaCl的晶体结构模型(球棍), 它表示NaCl晶体结构中

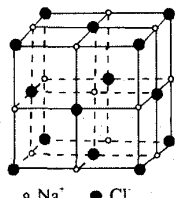


图1 NaCl的晶体结构模型(球棍)

的一个晶胞, 根据均摊原则可以计算出一个晶胞拥有的离子数。即:

(1) 立方体中处于顶点的粒子, 同时为8个晶胞所共有, 每个粒子有 $1/8$ 属于该晶胞;

(2) 处于棱上的粒子, 同时为4个晶胞所共有, 每个粒子有 $1/4$ 属于该晶胞;

(3) 处于面上的粒子, 同时为2个晶胞所共有, 每个粒子有 $1/2$ 属于该晶胞;

(4) 处于晶胞内部的粒子, 则完全属于该晶胞。

由此可以求得, 氯化钠晶体的一个晶胞占有4个 $\text{Na}^+$ 和4个 $\text{Cl}^-$ , 即4个 $\text{Na}^+-\text{Cl}^-$ 离子对。因NiO的晶体结构与NaCl的相同, 则NiO晶体的一个晶胞占有4个 $\text{Ni}^{2+}$ 和4个 $\text{O}^{2-}$ , 即4个 $\text{Ni}^{2+}-\text{O}^{2-}$ 离子对。

根据等效转换的原则, 宏观上NiO晶体的密度可以转变为微观上晶胞密度的求解。

因 $M(\text{NiO})=74.7 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $N_A=6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ , 则1个 $\text{Ni}^{2+}-\text{O}^{2-}$ 离子对的质量是 $\frac{74.7 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{6.02 \times 10^{23} \text{ mol}}$ , 那么, 4个

据。如果镍粉仅仅催化反应I, 那么随着甲酸产量增加, 反应II速率加快, 最终体系甲酸的量应当增加。而甲酸量下降则表示反应II的速率增加将略超过反应I的速率增加, 这是镍粉催化反应II的结果。

甲烷与氢气: 镍粉从1 mmol到10 mmol, 甲烷量增加约12 mmol, 氢气减少约25 mmol, 如果忽略含量极少的中间体, 从1 mmol  $\text{CO}_2$ 生成1 mmol  $\text{CH}_4$ , 共消耗4 mmol  $\text{H}_2$ 。甲烷的增加量应是氢气减少量的四分之一, 而实际只有约二分之一。这是因为 $3\text{Fe}+4\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{Fe}_3\text{O}_4+4\text{H}_2$ 是可逆反应, 在加热条件下, 氢气也能还原 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 的。当反应I和II速率加快时, 氢气消耗加快, 平衡正向移动, 提供了较多的氢气, 使其减少量变小。

万方数据

双纵坐标图在科学论文中常见, 但在高考中出现还是首次, 它的信息量大。首先要分清两侧坐标表示的曲线, 既要独立的分析各条曲线, 还要能找到曲线之间的联系。学生要能够处理此类新图, 还需要更多训练, 这正是目前中学化学所缺少的。

天然气资源相对丰富, 研究 $\text{CO}_2$ 合成 $\text{CH}_4$ 的意义不大。从碳一化学的角度, 也多是由 $\text{CO}$ 、 $\text{CH}_4$ 、 $\text{CH}_3\text{OH}$ 及 $\text{HCHO}$ 合成醋酸、汽油等多碳有机物。 $\text{CO}_2$ 很稳定, 从反应条件上看, 能耗很高; 从能量上看, 这是一个吸收能量的反应, 所以即便能减少温室气体, 也是得不偿失的。该课题组研究意义为何, 我愿与读者共探讨之。

$\text{Ni}^{2+}-\text{O}^{2-}$ 离子对即NiO晶体的一个晶胞的质量为  $\frac{74.7 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{6.02 \times 10^{23} \text{ mol}} \times 4$ 。又知NiO晶体中 $\text{Ni}^{2+}$ 与最近 $\text{O}^{2-}$ 的核间距离为 $a \times 10^{-8} \text{ cm}$ ,则晶胞的棱长为 $2a \times 10^{-8} \text{ cm}$ ,晶胞的体积为 $(2a \times 10^{-8} \text{ cm})^3$ 。因此,NiO晶体的密度

$$\rho = \frac{\frac{74.7 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{6.02 \times 10^{23} \text{ mol}} \times 4}{(2a \times 10^{-8} \text{ cm})^3} = \frac{62}{a^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

当然,本题也可以其晶胞中的一个小立方体为单位进行求解。如图2,根据均摊法可以求得一个小立方体占有 $\text{Ni}^{2+}$ : $1/8 \times 4 = 1/2$ ,占有 $\text{O}^{2-}$ : $1/8 \times 4 = 1/2$ ,即晶胞的一个小立方体占有 $1/2$ 个 $\text{Ni}^{2+}-\text{O}^{2-}$ 离子对,其质量为  $\frac{74.7 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{6.02 \times 10^{23} \text{ mol}} \times \frac{1}{2}$ 。又知NiO晶体中 $\text{Ni}^{2+}$ 与最近 $\text{O}^{2-}$ 的核间距离为 $a \times 10^{-8} \text{ cm}$ ,则小立方体的体积为 $(a \times 10^{-8} \text{ cm})^3$ 。因此,NiO晶体的密度:

$$\rho = \frac{\frac{74.7 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{6.02 \times 10^{23} \text{ mol}} \times \frac{1}{2}}{(a \times 10^{-8} \text{ cm})^3} = \frac{62}{a^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

根据上述推理和计算,我们可以得出一个有益的认识:宏观上晶体密度的求解可以转变为通过求解微观上晶体的一个晶胞的密度来实现,对于NaCl型晶体的密度[式中 $M$ 表示物质的摩尔质量( $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ), $N_A$ 表示阿伏加德罗常数(近似值为 $6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ ), $N$ 表示晶体的一个晶胞所占有的与物质化学组成相同的离子对的数目, $d$ 表示NaCl型晶体的晶胞棱长( $\text{cm}$ )。因此,只要上述计算式中 $\rho$ 、 $M$ 、 $N_A$ 、 $N$ 、 $d$ 中的四个量已知,就可以求得另一个量,从而依托氯化钠的晶体结构模型结合上述结论即可实现同类晶体结构习题的快速求解。

## 2 计算晶体的摩尔质量

例2. 已知 $\text{Fe}_x\text{O}$ 晶体的晶胞为NaCl型,由于晶体存在缺陷, $x < 1$ 。实验测得 $\text{Fe}_x\text{O}$ 的密度= $5.71 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,并经X射线测知 $\text{Fe}_x\text{O}$ 晶体的晶胞棱长为 $4.28 \times 10^{-10} \text{ m}$ ,试确定 $\text{Fe}_x\text{O}$ 中 $x$ 的值(精确到小数点后两位)。

解析: 本题求 $\text{Fe}_x\text{O}$ 中 $x$ 的值,可转化为先求 $\text{Fe}_x\text{O}$ 的摩尔质量,再确定 $\text{Fe}_x\text{O}$ 中 $x$ 的值。题中所给已知条件有: $\text{Fe}_x\text{O}$ 晶体的晶胞为NaCl型,晶体的密度= $5.71 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,晶胞的棱长为 $4.28 \times 10^{-10} \text{ m}$ 即 $d = 4.28 \times 10^{-8} \text{ cm}$ ,阿伏加德罗常数 $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ 。令 $\text{Fe}_x\text{O}$ 的摩尔质量为 $M(\text{Fe}_x\text{O})$ ,根据上题计算式可以快速得出:

$$5.71 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = \frac{M(\text{Fe}_x\text{O})}{(4.28 \times 10^{-8} \text{ cm})^3} \times 4,$$

解得: $M(\text{Fe}_x\text{O}) = 67.38 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。则 $56x + 16 = 67.38$ ,求得 $x = 0.92$ 。

万方数据

## 3 计算晶体中粒子间的核间距

例3.  $\text{FeO}$ 晶体的结构与NaCl的相同,若 $N_A$ 表示阿伏加德罗常数, $\rho$ 代表 $\text{FeO}$ 的密度( $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ),则晶体中相邻最近的 $\text{Fe}^{2+}$ 的核间距离是多少?

解析: 依题意, $\text{FeO}$ 晶体的结构与NaCl的相同,因此,可以依据NaCl的晶体结构模型构建出 $\text{FeO}$ 晶体的晶胞剖面比例模型如图3。设 $\text{FeO}$ 晶体中 $\text{Fe}^{2+}$ 与最近 $\text{O}^{2-}$ 的核间距离为 $d$ ,则相邻最近的两个 $\text{Fe}^{2+}$ 之间的核间距离为 $\sqrt{2}d$ , $\text{FeO}$ 晶体的晶胞棱长为 $2d$ 。根据题中所给的已知量和例1中的计算式可以快速得出:

$$\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = \frac{72 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \text{ mol}^{-1}} \times 4 \frac{1}{(2d)^3}, \text{ 解得 } d = \sqrt[3]{\frac{36}{\rho N_A}} \text{ cm}.$$

因此, $\text{FeO}$ 晶体中相邻最近的两个 $\text{Fe}^{2+}$ 之间的核间距为 $\sqrt{2} \times \sqrt[3]{\frac{36}{\rho N_A}} \text{ cm}$ 。

## 4 测定阿伏加德罗常数

例4. 一种测定阿伏加德罗常数的方法如下:  $20^\circ\text{C}$ 时,将纯净的固体食盐研细干燥后,准确称取 $m \text{ g}$ 转入容量瓶中;用滴定管向容量瓶中加入苯,并不断震荡,直至液体凹液面的最低点与容量瓶的刻度线相切,根据容量瓶的容积与所加入苯的总体积之差,计算出固体食盐的体积为 $V \text{ mL}$ (取三次实验数据的平均值);经X射线测得NaCl晶体的晶胞中最邻近的 $\text{Na}^+$ 与 $\text{Cl}^-$ 的平均距离为 $a \text{ cm}$ 。若NaCl的摩尔质量用 $M (\text{g} \cdot \text{mol}^{-1})$ 表示,试写出利用上述实验方法测定的阿伏加德罗常数的数学表达式。

解析: 根据题中所给已知条件和例1所得计算

$$\text{式,有: } \frac{m \text{ g}}{V \text{ cm}^3} = \frac{M}{(2a \text{ cm})^3} \times 4, \text{ 解得 } N_A = \frac{MV}{2ma^3} \text{ mol}^{-1}.$$

综上所述,解答此类习题的关键主要是晶体数学模型的构建和宏观上的体积、质量、密度与微观上的体积、质量等的关系及确定晶胞所占有的粒子数。同时也启示我们,在学习要善于观察、乐于动脑、勤于练习,加强知识点间的联系并注重时时总结。

## 参考文献:

- [1] 人民教育出版社化学室. 全日制普通高级中学教科书(必修加选修)化学第三册. 第2版[M]. 北京: 人民教育出版社, 2007: 2.
- [2] 贾珍贵. 晶体计算难题例析[J]. 化学教学, 2004, (11): 45.
- [3] 李侠. 晶体结构题型分析[J]. 中学化学教学参考, 2006, (3): 38~