



数学视角在晶体计算中的运用

◇ 贵州 程智慧

选修教材“物质结构与性质”晶体部分隐含着丰富的计算内容,要求学生用数学视角去分析和认识晶体的结构,以利培养学生的观察能力、思维能力、空间想象能力、逻辑推理能力。

1 晶体密度的计算

晶体密度计算是建立在微观晶胞结构单元基础之上,晶胞结构一般为平行六面体,只要知道晶胞的边长和晶胞中拥有的微粒数,然后将微粒数和晶胞体积同时扩大 N_A 倍,即可转化为宏观物质的质量和体积,其两者的比值即为晶体的密度。

例 1 Ca 和 F 形成的离子化合物的晶胞结构如图 1 所示,图中白球是____(填 Ca^{2+} 或 F^-),组成该晶体的化学式为____;每个 Ca^{2+} 邻近且等距的 F^- 有____个;已知该晶胞的边长为 a cm,则晶体的密度为____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (列出算式)。

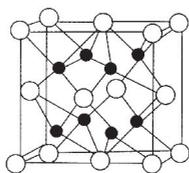


图 1

分析 据图 1 知,该晶胞拥有白球为 4 个,黑球为 8 个(晶胞体内),白球与黑球数目比为 1:2,即白球是 Ca^{2+} ,黑球是 F^- ,组成该晶体的化学式为 CaF_2 ;每个 Ca^{2+} 邻近且等距的 F^- 有 8 个。每个晶胞中含有 4 个 CaF_2 ,将微粒数扩大 N_A 倍,其质量为 4×78 g,1 个晶胞体积扩大 N_A 倍后其体积为 $a^3 \times N_A$ cm^3 。晶体密度为质量除以体积,即 $\rho = \frac{312}{N_A a^3} \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

2 金属晶体中空间利用率的计算

金属原子在三维空间的堆积方式不同,其空间利用率不同。下面以体心立方堆积和面心立方最密堆积方式计算晶体中空间利用率以及其他相关计算。

例 2 金属铁的晶体在不同温度下有 2 种堆积方式,晶胞分别如图 2、图 3 所示。请仔细观察晶胞的结构,回答下列问题:(1)体心立方晶胞和面心立方晶胞中实际拥有的 Fe 原子个数之比为____;(2)体心立方晶胞和面心立方晶胞的密度之比为____。

分析 (1) 体心立方晶胞中拥有原子数为 $1+8 \times 1/8=2$;面心立方晶胞中拥有原子数为 $6 \times 1/2+8 \times 1/8=4$ 。体心立方晶胞和面心立方晶胞中实际拥有的 Fe 原子个数之比为 $2/4=1/2$ 。(2) 设体心立方晶胞密

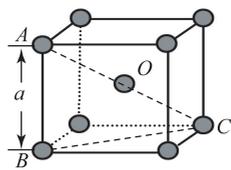


图 2 体心立方晶胞

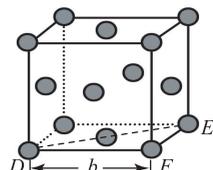


图 3 面心立方晶胞

度为 ρ_1 ,面心立方晶胞密度为 ρ_2 , $(a \text{ cm})^3 N_A / \text{mol} \times \rho_1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3} = 2 \times 56 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$, $(b \text{ cm})^3 N_A / \text{mol} \times \rho_2 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3} = 4 \times 56 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$,体心立方晶胞和面心立方晶胞的密度之比为 $\rho_1 / \rho_2 = 3\sqrt{6} / 8 = 34 / 37$ 。其实,同种金属构成的不同类型晶体,空间利用率之比等于密度之比。

3 原子晶体中共价键键长的计算

虽然原子晶体中所有原子都以共价键相连接,一粒晶体即为 1 个“巨分子”,但其晶体仍可看作是数量巨大的晶胞“无隙并置”而成。因此,在晶胞结构中存在原子间共价键的键长和键角的相应关系。

例 3 图 4 是金刚石晶体中的一个晶胞,已知金刚石晶胞的边长为 3.56×10^{-10} cm,碳原子进行 sp^3 杂化。回答下列问题:

(1) 求金刚石晶体中 C—C 键长_____。

(2) 有一颗金刚石晶体,其质量为 0.12 g,则该晶体中有_____个金刚石晶胞的结构单元,有_____个 C—C 单键,有_____个“金刚石分子”。

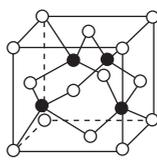


图 4 金刚石晶胞

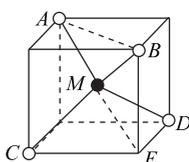


图 5

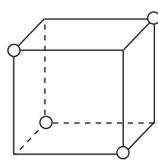


图 6

分析 (1) 把图 4 的立方晶胞分割成 8 个体积相等的小立方体,其中 4 个如图 5,另 4 个如图 6(它们彼此交错排列构成金刚石晶胞)。图 5 小立方体体对角线(AE)是 2 倍 C—C 键长(AM),令晶胞边长为 x ,则小立方体棱长 $BE = x/2$,小立方体体对角线 $AE = \sqrt{3}x/2$, $AM = AE/2 = \sqrt{3}x/4$ 。将 $x = 3.56 \times 10^{-10}$ cm 代入计算式得 C—C 键长,即 $3.56 \times 10^{-10} \text{ cm} \times \sqrt{3}/4 = 1.54 \times 10^{-10} \text{ cm}$ 。(2) 0.12 g 金刚石中碳原子数为 $0.01 N_A$,1 个金刚石晶胞中拥有 8 个 C 原子,0.12 g 金刚石中晶胞数为 $N_A/800$ 。金刚石中 C 原子数与 C—C 单键数之比为 1:2,则 0.12 g 金刚石中 C—C 键数为 $0.02 N_A$ 。由于金刚石晶体中碳原子进行 sp^3 杂化,所有原子以共价键结合形成空间网状结构,一粒晶体就是一个“巨分子”。

(作者单位:贵州省道真中学)