

金属晶体晶胞中原子空间利用率的计算

黑龙江省望奎县第一中学 152100 李春文

金属晶体中原子堆积方式复杂,每种堆积中原子空间利用率不尽相同,掌握金属晶体里晶胞中原子空间利用率对于解决所有晶胞的原子空间利用率问题具有触类旁通的作用。研究金属晶体里晶胞中原子空间利用率,首先应该掌握求算它的基本步骤:先找到晶胞中所含原子数,然后根据晶胞中紧邻原子的位置关系找到原子半径与晶胞边长的关系,再根据空间利用率的求算方法即晶胞中原子所占的实际体积与晶胞中原子围成的几何图形的体积之比,求得空间利用率。

一、简单立方堆积

简单立方堆积指的是相邻非密置层原子的原子核在同一直线上的堆积。这种堆积使晶胞结构为立方体型(如图1所示),处于顶点的两个原子紧邻。

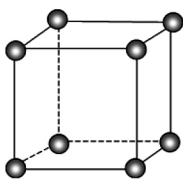


图1

晶胞中所含原子数为 $8 \times$

$\frac{1}{8} = 1$,该原子所占的实际体

积为 $\frac{4}{3}\pi r^3$ 。由于处于顶点的两个原子紧邻,则原子半径与晶胞边长的关系为 $a = 2r$,那么晶胞中原子所围成的立方体的体积为 $(2r)^3$,所以简单立方堆

积中原子空间利用率为 $\eta = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} \times 100\% = 52\%$ 。

二、体心立方堆积

体心立方堆积指的是非密置层的另一种堆积方式,即将上层金属原子填入下层的金属原子形成的凹穴中,并使非密置层的原子稍稍分离。每层均照此堆积,这种堆积方式称为体心立方堆积。这种堆积方式使处于体对角线上的原子紧邻(如图2所示)。

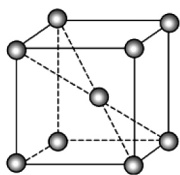


图2

晶胞中所含原子数为 $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$,则晶胞

中所含原子的实际体积为 $\frac{4}{3}\pi r^3 \times 2$ 。由于处于体对角线的原子紧邻,则原子半径与晶胞边长的关系为 $\sqrt{3}a = 4r$,那么晶胞中原子围成的几何图形的体积为 $a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3$,所以体心立方堆积中原子空

间利用率为 $\eta = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 2}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} \times 100\% = 68\%$ 。

三、六方最密堆积

每层都是密置层堆积,堆积方式是将上层原子填入下层原子形成的凹穴中,这样的堆积会得到两种基本堆积方式,按 ABABAB……的方式堆积称为六方最密堆积;按 ABCABCABC……的方式堆积称为面心立方最密堆积。

如图3所示,在六方最密堆积的晶胞结构中,体内原子位于平行六面体的一半的体心,即正三棱柱的体心,该原子与上下6个原子紧邻,则该原子与下面(或上面)3个原子构成正四面体结构。

平行六面体中上下底面为菱形,内角分别为 60° 和 120° ,上下底面所占有的原子数为 $4 \times \frac{1}{12} + 4 \times \frac{1}{6} = 1$,体内还有1个原子,则晶胞中所含原子数为2,那么原子的实际

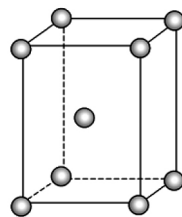


图3

体积为 $\frac{4}{3}\pi r^3 \times 2$ 。在晶胞内部

的正四面体结构中,设晶胞边长为 a ,则 $a = 2r$ 。要想求晶胞体积,需要求晶胞的高。在正四面体结构中,底面边长为 $2r$,底面中心到顶点的距离为 $2r \times \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{2}{3}$,则正四面体的高为 $h =$

$\sqrt{(2r)^2 - \left(2r \times \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{2}{3}\right)^2} = \frac{2\sqrt{6}}{3}r$,而平行六面体

的高为正四面体的高的2倍,即 $H = \frac{4\sqrt{6}}{3}r$ 。平 ▶

金属在溶液中反应的有关量变化规律探究*

江苏省海安县城东镇西场初级中学 226621 许波兰

在各地中考化学试题中常出现一些金属与酸、金属与盐溶液进行置换反应时有关量变化的题型,这类试题多数设计成选择、填空,能否简便、准确、快速地作出结果,重要在于知识的牢固、灵活掌握的能力。

一、金属与酸的置换反应

规律 1:等质量不同种活泼金属的单质与非氧化性稀酸反应,放出 H_2 质量比等于反应生成盐中各金属元素化合价和金属的相对原子质量之比,其中比值最大的放出 H_2 的质量最多,同理,要得到相同质量的 H_2 所需金属的质量比应为:相对原子质量与化合价之比。

例 1 将质量为 m g Zn、Fe、Mg、Al 分别投入到足量的稀盐酸中,置换出氢气质量从多到少的顺序_____。

解析 由题意知:Zn、Fe、Mg、Al 分别与盐酸反应生成的盐分别为 $ZnCl_2$ 、 $FeCl_2$ 、 $MgCl_2$ 、 $AlCl_3$ 。按上述规律可求它们所生成的氢气的质量比为: $2/65:2/56:2/24:3/27 = 1/32.5:1/28:1/12:1/9$,所以上述金属置换出 H_2 的质量由多到少的顺序

为: $Al > Mg > Fe > Zn$ 。

规律 1 也可用于判定等质量金属的碳酸盐和稀酸反应放出 CO_2 气体的质量的多少,即用反应生成盐中金属元素的化合价与相对原子质量之比来衡量,比值大的放出 CO_2 气体的质量较多,相反则较少。

规律 2:等质量、等浓度的不同种稀酸溶液与足量的活泼金属单质(也可指不同种活泼金属)反应,放出 H_2 的质量比等于各酸酸根的化合价与其酸的相对分子质量的比,其中比值大的放出 H_2 质量多。

例 2 浓度相同、质量均为 w g 的稀盐酸、稀硫酸、稀磷酸的溶液分别跟足量金属锌反应,放出 H_2 质量由多到少顺序为_____。

解析 HCl 、 H_2SO_4 、 H_3PO_4 中各酸根的化合价和其酸的相对分子质量比分别为 $1/36.5$ 、 $2/98$ 、 $3/98$,即 $1/36.5$ 、 $1/49$ 、 $1/32.7$,因此上述三种酸按放出 H_2 的质量由多到少的顺序为: $H_3PO_4 > HCl > H_2SO_4$ 。

规律 3:等质量、等浓度同一种稀酸溶液与不同种活泼金属的单质完全反应或等质量同一种活

▶行六面体的底面积 $S = 2r \times 2r \times \frac{\sqrt{3}}{2} = 2\sqrt{3}r^2$,则

平行六面体的体积为 $V = S \times H = 2\sqrt{3}r^2 \times \frac{4\sqrt{6}}{3}r =$

$8\sqrt{2}r^3$ 。所以六方最密堆积中原子空间利用率为 η

$$= \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 2}{8\sqrt{2}r^3} \times 100\% = 74\%。$$

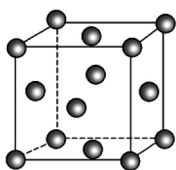


图 4

四、面心立方最密堆积

面心立方最密堆积就是每一层都是密置层堆积,按 AB-CABCABC...的方式堆积(已叙述)这样的堆积使处于立方体面对角线上的原子紧邻如图 4 所示。晶胞中所含原子数为 $6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8}$

$= 4$ 那么原子实际占有的体积为 $\frac{4}{3}\pi r^3 \times 4$ 。由于

处于面对角线上的原子紧邻,则原子半径与晶胞边长的关系为 $\sqrt{2}a = 4r$,那么晶胞中原子围成的几何图形的体积为 $a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3 = (2\sqrt{2}r)^3$,所以该晶胞

$$\text{中原子空间利用率为 } \eta = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 4}{(2\sqrt{2}r)^3} \times 100\% = 74\%。$$

原子空间利用率的计算是选三的难点,亦是高考的难点,但它又不是无章可循。通过金属晶体里晶胞中原子空间利用率的计算,以及金刚石晶胞中原子空间利用率的计算,不难看出,无论多复杂的晶胞结构,想计算原子空间利用率,必须先求得晶胞中原子个数及晶胞边长与原子半径的关系,要想知道晶胞边长与原子半径的关系,必须知道晶胞中原子堆积特点,即处于晶胞的什么位置上的原子紧邻。
(收稿日期:2018-11-10)