

晶体计算难题例析

贾珍贵

(京山一中, 湖北京山) 431800

文章编号: 1005-6629(2004)11-0045-02 中图分类号: G633.8 文献标识码: C

[例1] 食盐晶体是由钠离子和氯离子组成的, 且均为等距离的交错排列。已知食盐的密度是 $2.2\text{g}/\text{cm}^3$, 阿伏加德罗常数为 $6.02 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$ 。在食盐晶体中两个距离最近的钠离子中心间的距离最接近于()。

- A. $3.0 \times 10^{-8} \text{cm}$ B. $3.5 \times 10^{-8} \text{cm}$
C. $4.0 \times 10^{-8} \text{cm}$ D. $5.0 \times 10^{-8} \text{cm}$

解: 根据均摊原则计算一个晶胞拥有的离子数

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;

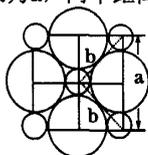
3. 处于表面上的粒子, 同时为2个晶胞所共有, 每个粒子有 $1/2$ 属于该晶胞;

4. 处于该晶胞内部的粒子, 则完全属于该晶胞。

由此计算, 在一个氯化钠晶胞中, 拥有4个钠离子和4个氯离子。

如右图, 设该晶胞的边长为 a , 两个距离最近的钠离子中心间的距离为 b , 则

$$b^2 + b^2 = a^2, b = \frac{\sqrt{2}a}{2}$$



依据 1mol 氯化钠固体的体积建立等量关系式。

1mol 氯化钠的质量为 58.5g , 由密度得体积为 $58.5\text{g}/2.2\text{g} \cdot \text{cm}^3$, 1mol 氯化钠含有的晶胞数为 $N_A/4$, 一个晶胞的体积是 a^3 , 故 1mol 氯化钠的体积是 $N_A \cdot a^3/4$ 。即:

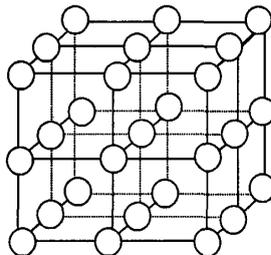
$$58.5\text{g}/2.2\text{g} \cdot \text{cm}^3 = N_A \cdot a^3/4$$

$$a = 5.6 \times 10^{-8} \text{cm}$$

$$b = 2a/2 = 4.0 \times 10^{-8} \text{cm}$$

[例2] 最近发现一种钛原子和碳原子构成的气态团簇分子, 如图所示, 顶角和面心的原子是钛原子, 棱的中心和体心的原子是碳原子, 它的化学式为_____。

[解] 由于钛原子和碳原子构成的是单个气态团簇分子, 是分子晶体, 边界原子不会分摊, 都属该分子拥有, 故它的化学式为 $\text{Ti}_{14}\text{C}_{13}$ 。



[例3] 石墨的结构如课本所示, 已知石墨的密度 $2.22\text{g}/\text{cm}^3$, 石墨晶体的层状结构中 C—C 键键长为 $1.43 \times 10^{-10}\text{m}$, 试求石墨晶体中的层间距。(已知六棱柱体积公式为: $1/2 \times 6\sin 60^\circ \times a^2 \times b$)

[解] 从石墨晶体中选取一个六棱柱(如下图), 六棱柱中每个碳原子被6个六棱柱共用, 所以, 一个六棱柱所拥有的碳原子数为 $12 \times 1/6 = 2$ 。

石墨中六棱柱的体积为

$$V = 1/2 \times 6\sin 60^\circ \times (1.43 \times 10^{-10})^2 \times b$$

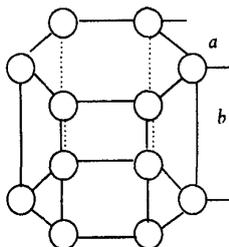
石墨中每个六棱柱所拥有的碳的质量为 $2 \times 12\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}/6.02 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$

由石墨的密度可得:

$$2.22\text{g}/\text{cm}^3 = \frac{2 \times 12\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}/6.02 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}}{1/2 \times 6\sin 60^\circ \times (1.43 \times 10^{-8} \text{cm})^2 \times b}$$

$$\text{故 } b = 3.38 \times 10^{-8} \text{cm} = 3.38 \times 10^{-10} \text{m}.$$

即石墨晶体中的层间距为 $3.38 \times 10^{-10} \text{m}$



晶体计算的难点主要是晶体数学模型的构建和

宏观体积、质量、密度与微观体积、质量等的关系及确定晶胞所拥有的原子数。石墨是片层结构, 通常的习题中是确定在同一层内, 每个六边形所拥有的碳原子数, 只考虑同一层时, 每个六边形所拥有的碳原子数为2(每个碳与另外三个碳相连, 实际拥有1/3), 往往容易认为一个六棱柱所拥有的碳原子数为4, 这样计算出错。

一类重要的有机反应——聚合反应

陈月潮

(绍兴鲁迅中学, 浙江绍兴 312000)

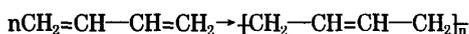
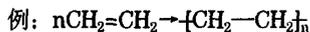
文章编号: 1005-6629(2004)11-0046-02 中图分类号: G631.5 文献标识码: C

1 反应类型

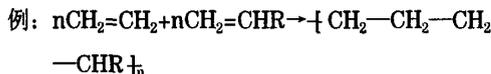
1.1 加聚反应

由一种或两种以上单体在一定条件下, 单体中的不饱和键断裂而连接成高分子化合物的反应。这类反应在中学阶段有以下两类:

一类是只由一种单体加聚的单一乙烯型或1, 3-丁二烯型:



另一类是由两种以上单体加聚的混合型:

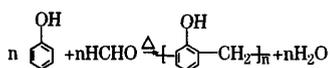


无论类型如何变化, 加聚反应机理的关键是确定不饱和碳原子, 就是发生加聚反应的单体中必定含有不饱和键, 且反应恰好就发生在不饱和键上, 加聚产物也是唯一的, 且产物中的键节与单体具有相同的组成。加聚反应结构变化特点是断键加合。

1.2 缩聚反应

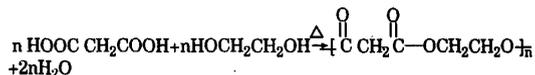
由一种或两种以上单体在一定条件下, 单体中活性基团之间去小分子(如 H_2O 、 HCl 等)而连接成高分子化合物的反应。中学阶段缩聚反应有以下几种类型:

(1) 苯酚和甲醛的缩聚

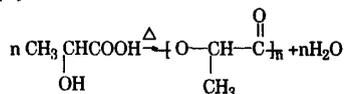


(2) 醇羟基和羧基酸化而缩聚

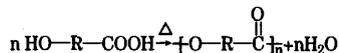
(I) 二元酸和二元醇的缩聚, 例如合成聚酯纤维:



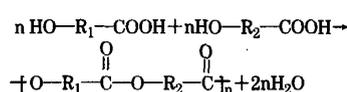
(II) 醇酸的酯化缩聚, 如



此类反应若单体为一种物质, 则通式为:

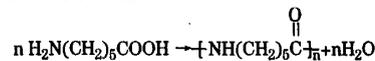


若有两种或两种以上单体, 则通式为:

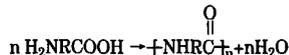


(3) 氨基与羟基的缩聚

如合成聚酰胺6:



此类反应若只有一种单体, 则通式为:



若有两种或两种以上单体, 则通式为:



由缩聚反应的类型可知, 缩聚反应书写的关键是确定反应的活性基因, 即就是参加缩聚反应的单体必须有两个或两个以上的活性基团, 且反应在活