

研究晶体结构中的“切割法”策略

江苏省大丰高级中学 224100 陈建华

一、晶体结构中切割法的应用基本原理

晶体从宏观上来看是一种有规则几何外形的固体。如果从其微观结构来看,他的宏观的规则几何外形来自于其晶体内部的微粒的规则排列所致。不管形成晶体的元素种类是一种、两种还是更多种,不管是离子还是原子,他们必然是每隔一定数目的原子或离子就会重复出现,我们称之为周期,而在这种周期性的指导下,就可以找出形成一个晶体的最小重复结构单元,这种结构单元称为晶胞。那么,把一个晶体按晶胞进行切割就可以形成无数个相同的结构单元,从而只需要研究好晶胞中粒子数和粒子构成就可以得到整个晶体的组成与结构。这就是切割法成立的原理。

在常见的晶体中有面立方、体心立方及六方晶胞等,他们的晶体中都存在着一定的粒子间排布规则。如图 1 所示即为一个采取六方密堆积的晶体中粒子排列的特征,在它的结构中存在着两种排列方式,从上到下可以表示为 $ABA\cdots$,它采取的是六方最密堆积,从串起线上可以看出以上层中心球为例,它的配位数(也就是每一个球都会有与它距离相等且最近的球的数目)为 12。我们可以将其演化为质点模型,如图 2。如果要计算该晶体中的粒子组成,就可以把整个晶体进行切割而形成如图 3 所示的图形,从而就可以得到了他的组成,构成该晶胞的粒子数为: $(1/6) \times 12 + (1/2) \times 2 + 3 = 6$ 。



图 1

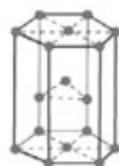


图 2

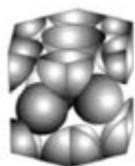


图 3

再如,石墨能与熔融金属钾作用,形成石墨间隙化合物,钾原子填充在石墨层间。比较常见的石墨间隙化合物是青铜色的化合物,其化学式可写作 C_xK ,其平面图形如图 4 所示,那么由图中可得该化合物的化学式应该是怎样的呢?由图可知,晶体中沿连接三个钾原子的线“切割”出一个三角形,它是晶体中重复的最小的结构单元,从切割出来的三角形中可以看出,每个钾原子被 6 个三角形所共有,而每个三角形内有 4 个碳原子,所以在晶体中的钾原子与碳原子数之比为 $(3 \times \frac{1}{6}) : 4 = 1 : 8$,即该化合物的化学式为 C_8K 。

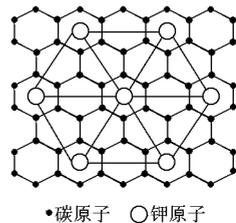


图 4

其他类型的晶体这里就不一一赘述。

二、例解切割法在问题解决中的应用

例 1 元素 X 位于第四周期,其基态原子的

▶ 了自身离子增加的水解效果,从而有效地增加了溶液中的 H^+ 数量,从而在 pH 的变化上,不会有大幅度的变化。而强酸溶液则不会出现这种问题,所以导致了这一情况的出现。同时在进行中和的过程中,对强碱溶液的消耗上,弱酸溶液需要的强碱溶液更多。

4. 强碱溶液和弱碱溶液同 pH 的稀释问题

强碱和弱碱溶液的稀释过程中所出现的相关问题和强酸弱酸溶液的问题极为类似,只是在计算的过程中仍存在一定的差异,这和上面提及的

计算方式类似,就不做细说。

5. 溶液中的沉淀问题

在进行溶液的混合过程中,某些酸碱物质是不易溶解的物质,所以在混合的过程中,若进行混合,就可能导致沉淀,这样对于整体的酸碱结构上,都会产生很大的影响,所以在进行这一类溶液的混合过程中,还需要结合实际情况进行分析。只不过这一类问题只是极个别的特例,在进行混合的时候,并不常见。

(收稿日期: 2015 - 03 - 20)

内层轨道全部排满电子,且最外层电子数为 2。元素 Y 基态原子的 3p 轨道上有 4 个电子。X 与 Y 所形成化合物晶体的晶胞如图 5 所示。

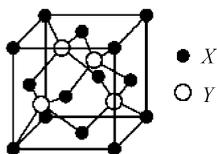
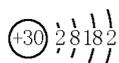


图 5

(1) 在 1 个晶胞中, X 离子的数目为 _____。

(2) 该化合物的化学式为 _____。

解析 本题是江苏高考真题作了删减。题中已知元素 X 是第四周期元素,其基态原子的内层轨道全部排满电子,且最外层电子数为 2。根据核外电子排布的规律可得其原子结构示意图为:



从而可得 X 为锌元素;而元素 Y 基态

原子的 3p 轨道上有 4 个电子。根据原子核外电子排布的规律可得 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$, 则可推断得到 Y 为硫元素。从晶胞图上可以看到黑色的 X 离子,立方体的顶点有 8 个,面心有 6 个;白色的球是 Y 离子,他们都在晶胞立方体的内部,合计为 4 个(Y 离子处于 X 离子形成的四面体空隙中),则根据切割法的原理可以计算出 X、Y 离子的个数: X 离子的个数 = $\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$; Y 离子的个数 = $4 \times 1 = 4$ 。所以也就可以得到了该晶体中 X 与 Y 的离子个数的最简比为 1:1,即可以得到该晶体的化学式为 ZnS。

例 2 钼有一种含氧酸根 $[\text{Mo}_x\text{O}_y]^{z-}$, 式中 x、y、z 都是正整数;钼为 +6 价, O 为 -2 价。可按下面的步骤来理解该含氧酸根的结构: A. 所有钼原子的配位数都是 6, 形成 $[\text{MoO}_6]^{2-}$, 呈正八面体, 称为“小八面体”(如图 6 所示, 只画出部分, 下同); B. 6 个“小八面体”共棱连接可构成一个“超八面体”(如图 7 所示); C. “孪超八面体”可由两个“超八面体”共用 2 个小八面体形成(如图 8 所示)。



图 6



图 7



图 8

则: ① 小八面体的化学式 $[\text{MoO}_6]^{n-}$ 的 $n =$ _____。

② 超八面体的化学式是 _____。

③ “孪超八面体”的化学式是 _____。

解析 ① 根据初中所学的分子中元素化合价代数和为零, 即可求得 n 值:

$$n = 1 \times 6 + 6 \times (-2) = 1 - 6 = -6$$

② 对于 $[\text{MoO}_6]^{2-}$ 来说形成的是一个八面体结构, 对此结构比较简单, 可以通过简单的想象即可得到结论, 这里也采用“切割”法, 将八面体进行切割而形成图 9 的三个小图, 这样就可以很一目了然地了解到该离子的构成, 而对超八面体首先可以想象到先将四个小八面体“并置”在一起, 然后从上面和下面各放进一个小八面体, 这样就形成了“超八面体”的结构, 但这样形成的图形难画出来, 也难从想象图中计算其化学式, 这时可以采用同样的方法进行“切割”得到了如图 10 所示的图形, 也就可以得到 Mo 的个数为 6 个, 而 O 的个数为 19 个, 再根据在该离子中的 Mo 为 +6 价, O 为 -2 价, 所以也就可以得到了其化学式为 $[\text{Mo}_6\text{O}_{19}]^{2-}$ 。



图 9

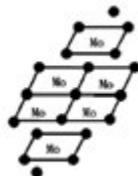


图 10

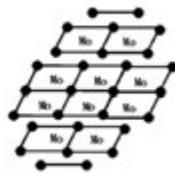


图 11

③ 对于孪超八面体来说, 在超八面体的基础上进行想象, 应该不难得到他的基本图形, 然后我们再用“切割”法将其进行切割而得到如图 11 所示的平面图形, 这样也就将抽象的立体结构变为简单的点线的平面结构, 就能比较直观地数出该结构中的原子的数目, 再根据化合价规则而得到它的化学式为 $[\text{Mo}_{10}\text{O}_{28}]^{4+}$ 。

总之, 由于晶体结构比较复杂, 直接从晶体中计算其化学式一般比较困难。但用“切割”法就可以将其从繁到简, 将晶体演化成晶胞, 将比较复杂的晶胞立体结构还可以通过“切割”法将其进行二次切割而形成平面的点、线、面的结构, 这样也就可以更为简洁地去分析并理清晶体的结构。

(收稿日期: 2015 - 01 - 26)