

第6讲 晶体结构与性质

【复习目标】

- 1.了解晶体中微粒的空间排布存在周期性,认识简单的晶胞。能根据晶体结构计算微粒的数目。
- 2.借助分子晶体、共价晶体、离子晶体、金属晶体等模型认识晶体的结构特点。知道介于典型晶体之间的过渡晶体及混合型晶体是普遍存在的。

目录索引

考点1 晶胞中微粒数、密度的计算

考点2 晶体类型、结构与性质

考点1 晶胞中微粒数、密度的计算

必备知识·梳理

1. 晶胞

(1) 概念

晶胞是描述晶体结构的_____，是从晶体中“截取”出来具有代表性的最小重复单元。

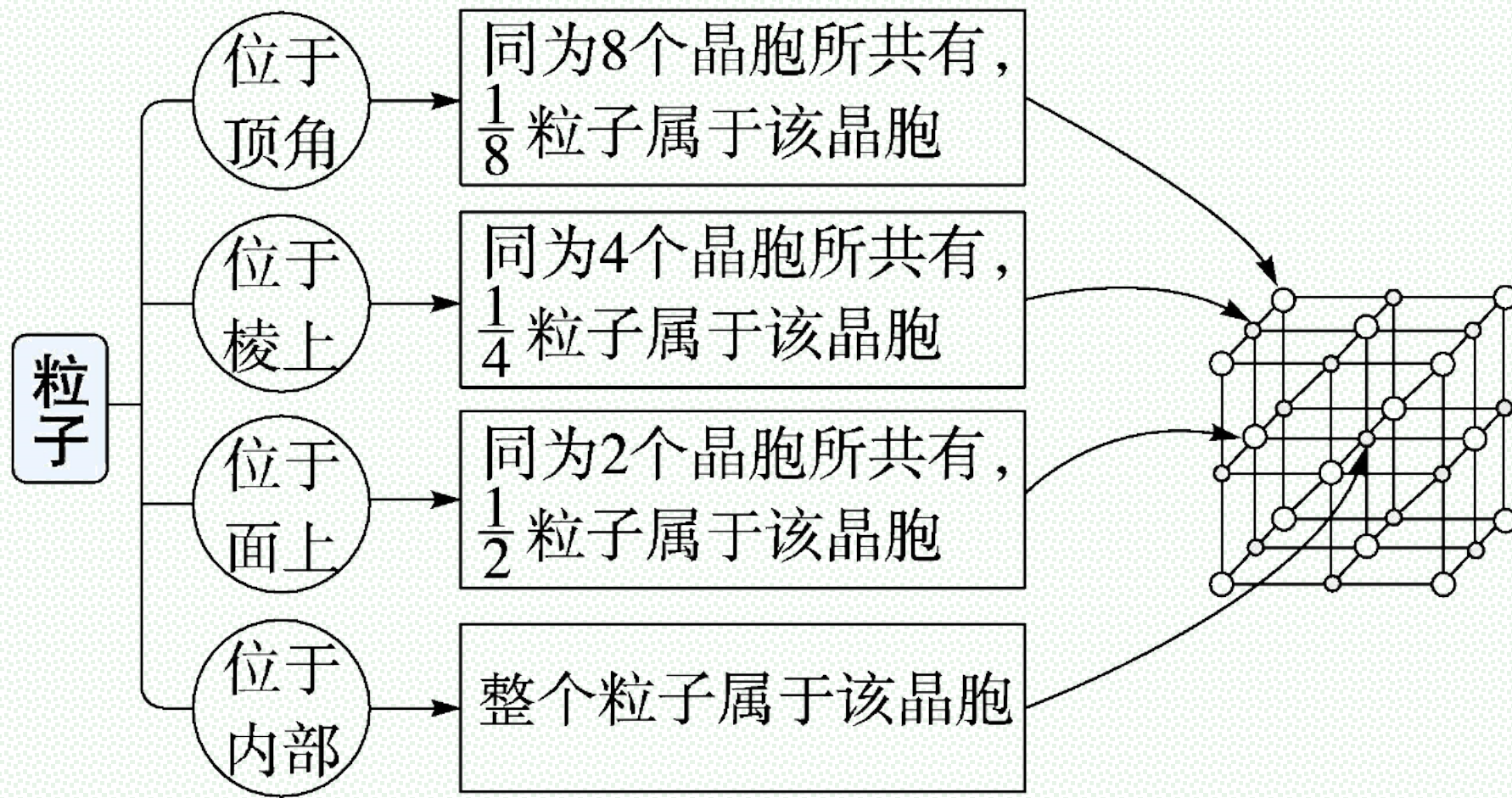
(2) 晶胞的特点 -----> 晶体中晶胞的排列——无隙并置

无隙——相邻晶胞之间没有_____

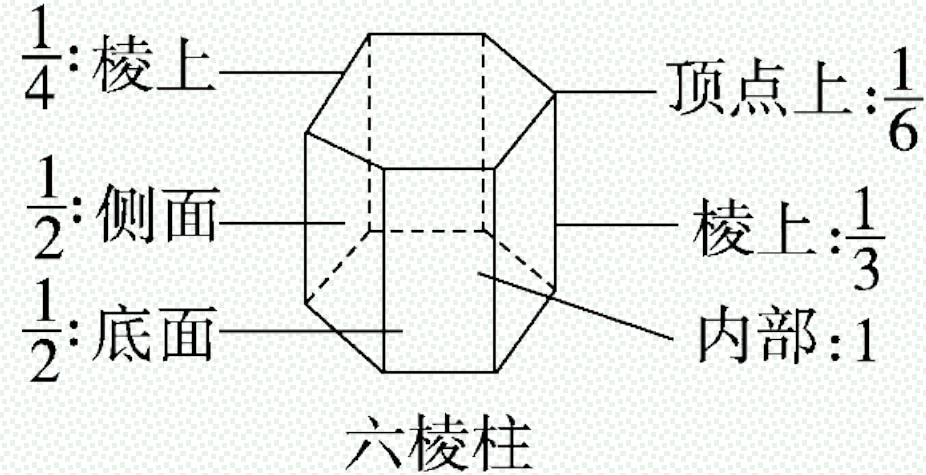
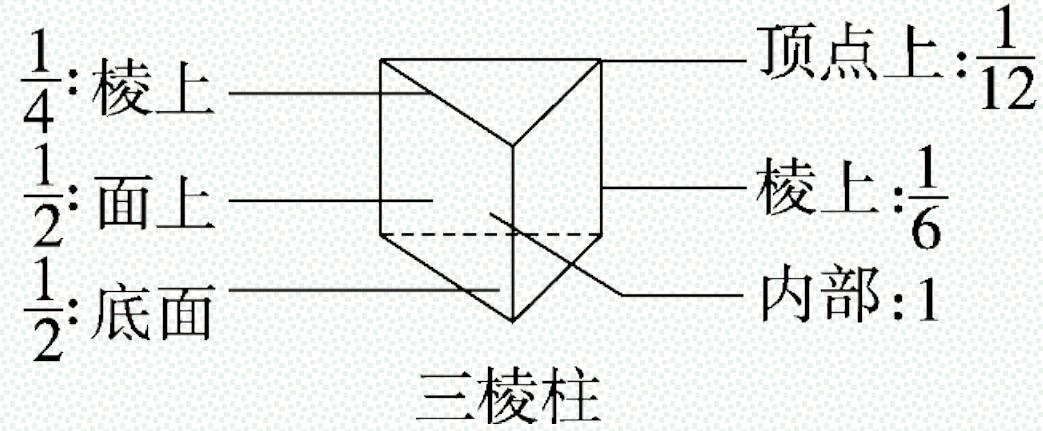
并置——所有晶胞_____排列、_____相同

2. 计算晶胞中粒子数的方法——均摊法

(1) 长方体(包括立方体)晶胞中不同位置的粒子数的计算



(2)“三棱柱”晶胞和“六棱柱”晶胞中不同位置粒子数的计算



3.晶体结构的相关计算

(1)空间利用率 $=\frac{\text{晶胞中微粒体积}}{\text{晶胞体积}}\times 100\%$ 。

(2)金属晶体中体心立方堆积、面心立方堆积中的几组计算公式(设棱长为 a)

①面对角线长 $=\sqrt{2}a$ 。②体对角线长 $=\sqrt{3}a$ 。③体心立方堆积 $r=\frac{\sqrt{3}}{4}a$ (r 为原子半径)。

④面心立方堆积 $r=\frac{\sqrt{2}}{4}a$ (r 为原子半径)。

(3)晶体密度的计算(以立方晶胞为例)

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{NM}{a^3 N_A} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$$

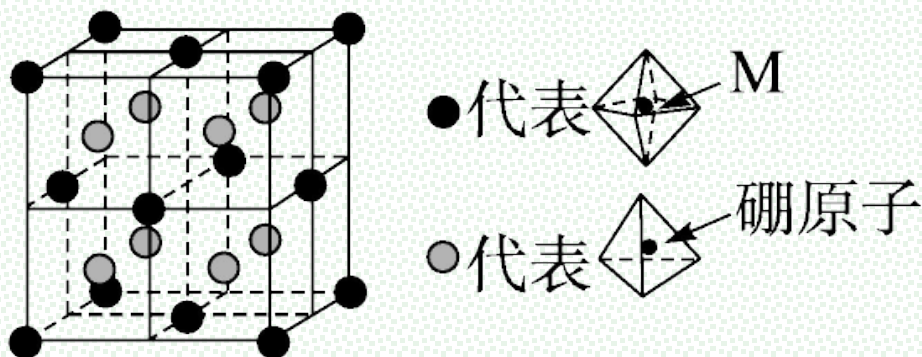
M :摩尔质量, N :一个晶胞所含的粒子数目,

a :立方晶胞的边长, N_A :阿伏加德罗常数。

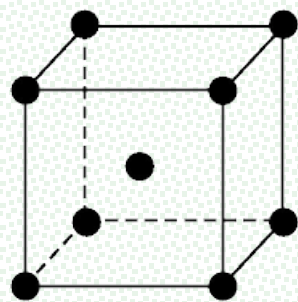
关键能力·提升

考向1 确定晶体中粒子数目及化学式

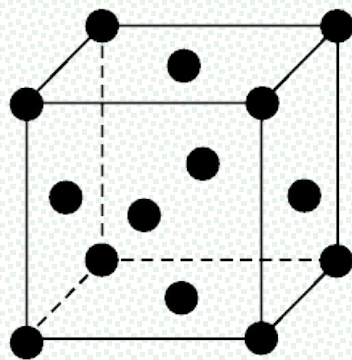
典例1(1)[2022·辽宁卷]某种新型储氢材料的晶胞如图,八面体中心为M金属离子,顶点均为NH₃配体;四面体中心为硼原子,顶点均为氢原子。若其摩尔质量为188 g·mol⁻¹,则M元素为 Fe (填元素符号);在该化合物中,M离子的价电子排布式为 3d⁶。



(2)[2021·天津卷]用X射线衍射测定,得到Fe的两种晶胞A、B,其结构如图所示。晶胞A中每个Fe原子紧邻的原子数为8。每个晶胞B中含Fe原子数为4。



晶胞A



晶胞B

解析 (1)根据“均摊法”可知,每个晶胞中含有●个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$,含有○个数为 8,即含 4 个 $M(\text{NH}_3)_6$ 和 8 个 BH_4 ,二者个数之比为 1 : 2,故该晶体的化学式为 $M(\text{NH}_3)_6(\text{BH}_4)_2$ 。又知该化合物的摩尔质量为 $188 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$,则有 $M_r(\text{M}) + 17 \times 6 + 15 \times 2 = 188$,解得 $M_r(\text{M}) = 56$,故 M 元素为 Fe。根据化合物中各元素化合价代数和为 0 推知,Fe 显 +2 价,则 Fe^{2+} 的价电子排布式为 $3d^6$ 。(2)晶胞 A 为体心立方结构,体心 Fe 原子与顶角的 8 个 Fe 原子紧邻;晶胞 B 为面心立方结构,每个晶胞中含有 Fe 原子个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 。

【归纳总结】 确定晶胞中粒子配位数的方法

- (1) 晶体中原子(或分子)的配位数:若晶体中的粒子是同种原子(或分子),则某个原子(或分子)的配位数是指与该原子(或分子)等距离且最近的原子(或分子)的数目。
- (2) 离子晶体的配位数:是指某个离子周围等距离且最近的带异种电荷离子的数目。

[对点训练 1](2024·江苏南通模拟)某太阳能光伏电池的有机半导体材料晶胞结构如图所示,其中 A 为 CH_3NH_3^+ , 另两种离子为 I 和 Pb^{2+} 。下列说法正确的是

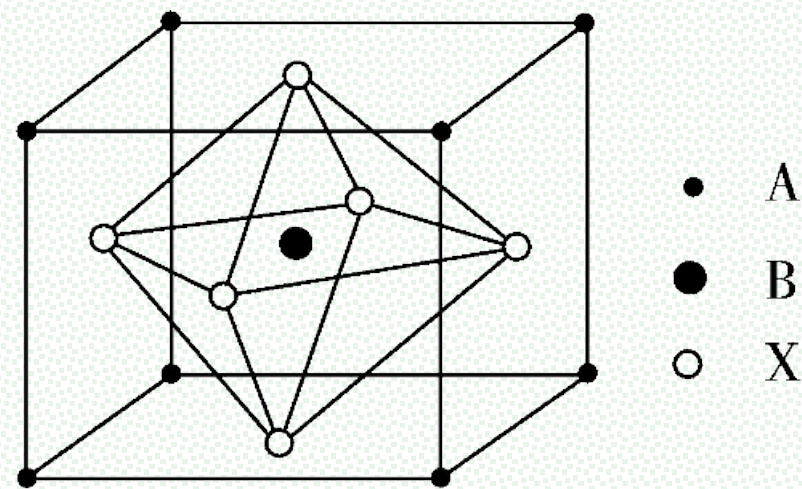
()

A. CH_3NH_3^+ 中 C 和 N 的轨道杂化方式相同

B. X 为 Pb^{2+}

C. 晶胞中距离 A 最近的 X 有 6 个

D. 该晶胞中含有 8 个 A



答案 A

解析 根据 CH_3NH_3^+ 中 C 和 N 的成键方式可知,均为 sp^3 杂化,A 正确;根据均摊法,晶胞中有 A: $8 \times \frac{1}{8} = 1$,有 B:1,有 X: $6 \times \frac{1}{2} = 3$,根据化合物各元素化合价代数和为 0 可知,X 为 I,B 错误;在一个晶胞中,距离 A 最近且距离相等的 X 有 3 个,位于以 A 为顶点的三个面心上,通过该 A 可形成 8 个晶胞,每个 X 重复计算两次,则晶胞中距离 A 最近的 X 有 $\frac{3 \times 8}{2} = 12$,C 错误;根据均摊法,晶胞中有 A: $8 \times \frac{1}{8} = 1$,D 错误。

考向2 晶体密度的计算

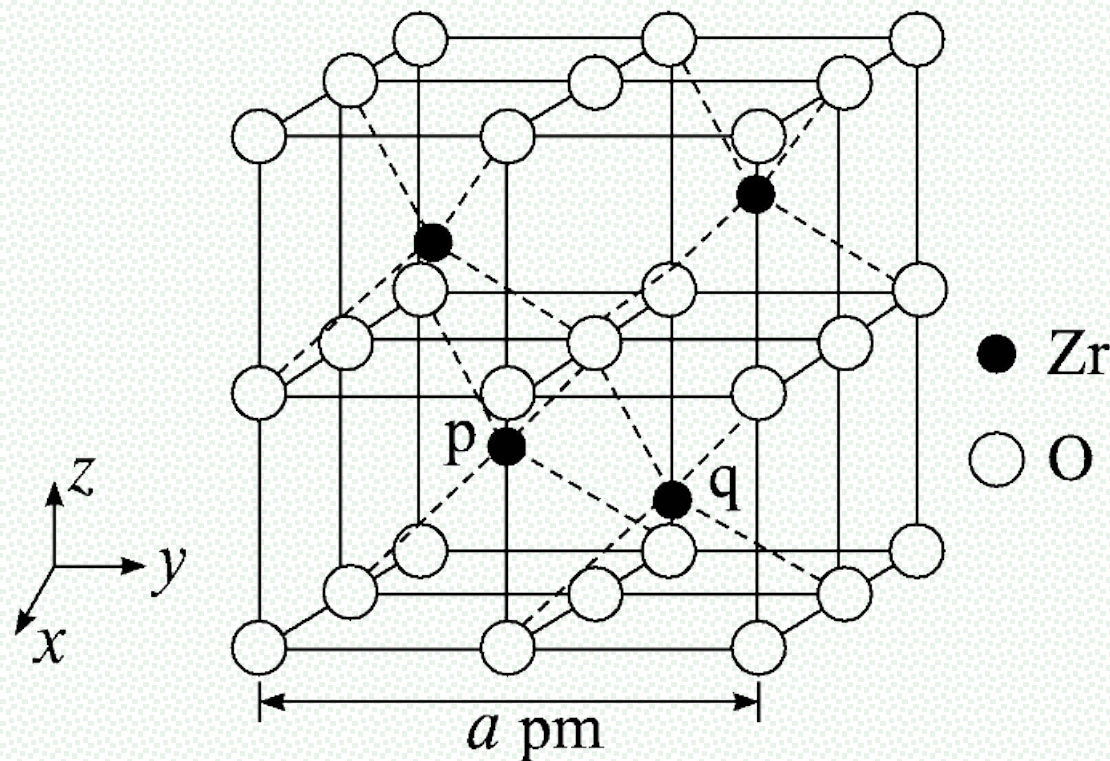
典例2(2023·河北卷)锆(Zr)是重要的战略金属,可从其氧化物中提取。下图是某种锆的氧化物晶体的立方晶胞, N_A 为阿伏加德罗常数的值。下列说法错误的是(B)

A. 该氧化物的化学式为 ZrO_2

B. 该氧化物的密度为 $\frac{123 \times 10^{30}}{N_A \cdot a^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$

C. Zr 原子之间的最短距离为 $\frac{\sqrt{2}}{2}a \text{ pm}$

D. 若坐标取向不变,将 p 点 Zr 原子平移至原点,则 q 点 Zr 原子位于晶胞 xy 面的面心



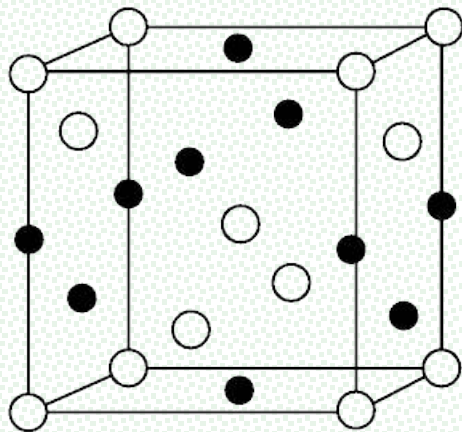
解析 根据均摊法,一个晶胞中含 4 个 Zr、 $8 \times \frac{1}{8} + 12 \times \frac{1}{4} + 6 \times \frac{1}{2} + 1 = 8$ 个 O,则立方氧

化锆的化学式为 ZrO_2 ,A 正确;结合 A 分析可知,晶体密度为 $\rho = \frac{\frac{123 \times 4}{N_A}}{(a \times 10^{-10})^3}$

$\text{g} \cdot \text{cm}^{-3} = \frac{492 \times 10^{30}}{N_A \cdot a^3} \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$,B 错误;Zr 原子之间的最短距离为面对角线的一半,即

$\frac{\sqrt{2}}{2}a \text{ pm}$,C 正确;p 点 Zr 原子、q 点 Zr 原子的连线与晶胞的底面平行,两原子之间的距离是面对角线的一半,两原子在 xy 面的投影位于底面小正方形的中心若坐标取向不变,将 p 点 Zr 原子平移至原点,则 q 点 Zr 原子位于晶胞 xy 面的面心,D 正确。

[对点训练2](2021·河北卷,17,节选)分别用○、●表示 H_2PO_4^- 和 K^+ , KH_2PO_4 晶体的四方晶胞如图所示,若晶胞底边的边长均为 a pm、高为 c pm,阿伏加德罗常数的值为 N_A ,晶体的密度为 $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (写出表达式)。



答案 $\frac{136 \times 4}{N_A \cdot a^2 c \times 10^{-30}}$

解析 根据均摊法,一个晶胞中含 $8 \times \frac{1}{8} + 4 \times \frac{1}{2} + 1 = 4$ 个 H_2PO_4^- 、 $4 \times \frac{1}{4} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 个 K^+ ,

则晶体的密度 $\rho = \frac{\frac{136 \times 4}{N_A}}{a^2 c \times 10^{-30}} \text{g}\cdot\text{cm}^{-3} = \frac{136 \times 4}{N_A \cdot a^2 c \times 10^{-30}} \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

考点2 晶体类型、结构与性质

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：
<https://d.book118.com/098036035074006141>