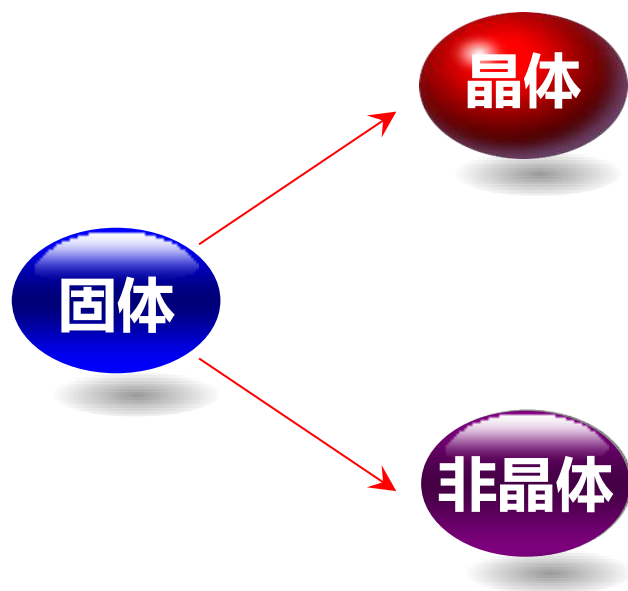




第一节

晶体结构的测定及相关计算

区别晶体和非晶体最可靠的科学方法是什么呢？



区别

对固体进行
X射线衍射实验

1867

X射线衍射实验



伦琴

发现X射线，
获1901年
物理学奖



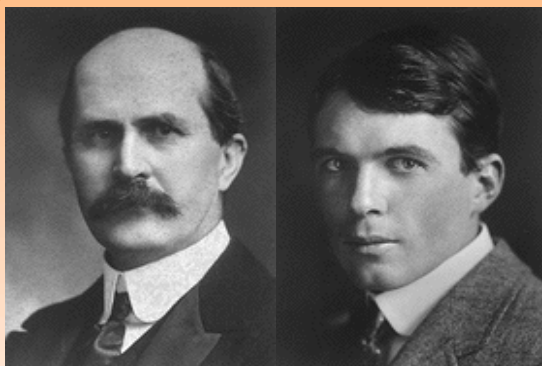
劳厄

发现X射
线在晶体
中的衍射
效应

1901

1914物理学奖

1915物理学奖



布拉格父子

用X射线
衍射研究
晶体结构

利用X射线
等技术研究
分子结构

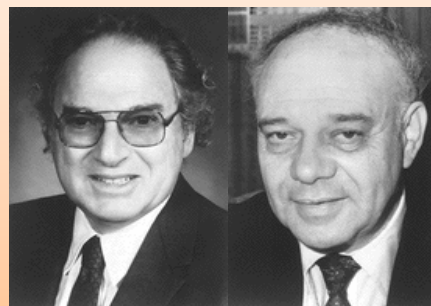
1936化学奖

1962化学奖

X射线衍射
法测定蛋白
质晶体结构

X射线衍射法
测定复杂晶体
与大分子结构

1964化学奖



Hauptman与Karle

X射线衍射确定
DNA核苷酸顺
序与基因结构

1980化学奖

1985化学奖

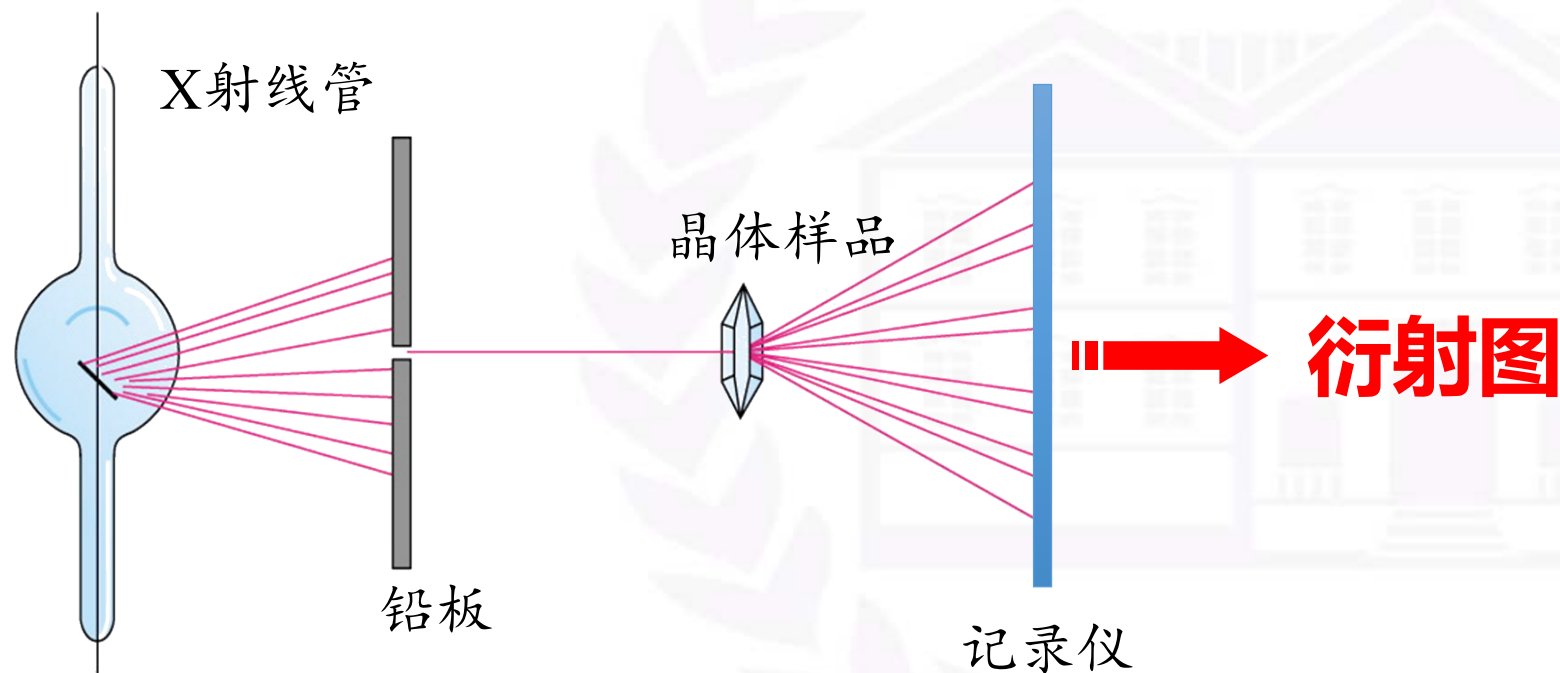
发展了X射
线衍射确定
晶体与分子
结构的方法。

.....

当**单一波长的X射线**通过晶体时，**X射线和晶体**中的电子相互作用，在记录仪上形成衍射图谱。会在记录仪上看到**分立的斑点或者明锐的衍射峰**



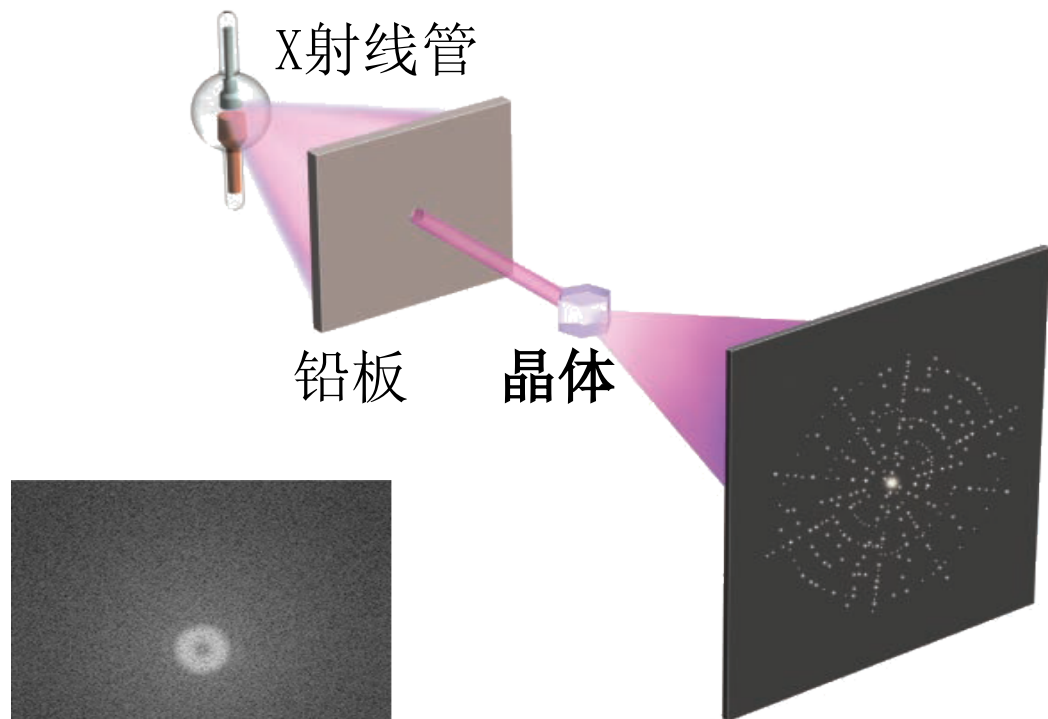
X射线衍射仪



人们对衍射图的数据进行处理，即可获得晶体结构的有关信息。

晶体结构的测定

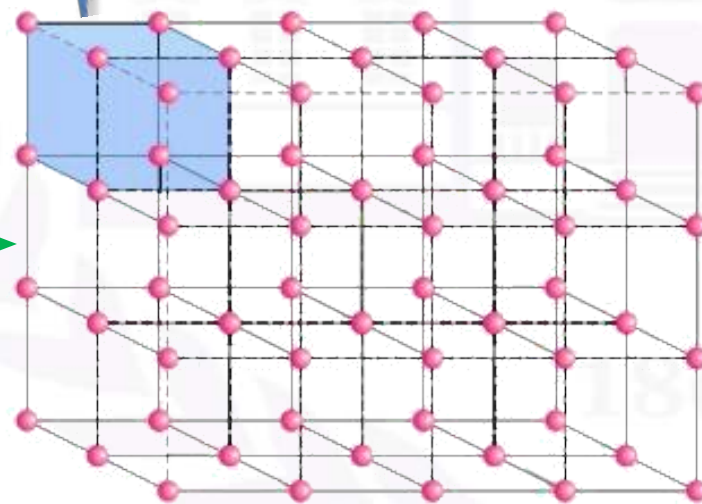
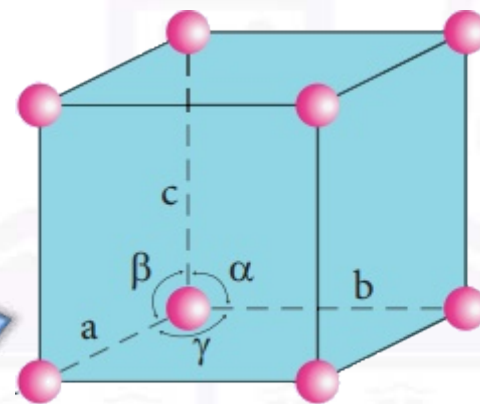
1. X射线衍射方向——晶胞的形状、大小与取向



非晶体衍射图谱

晶体能产生分立的斑点

数据处理

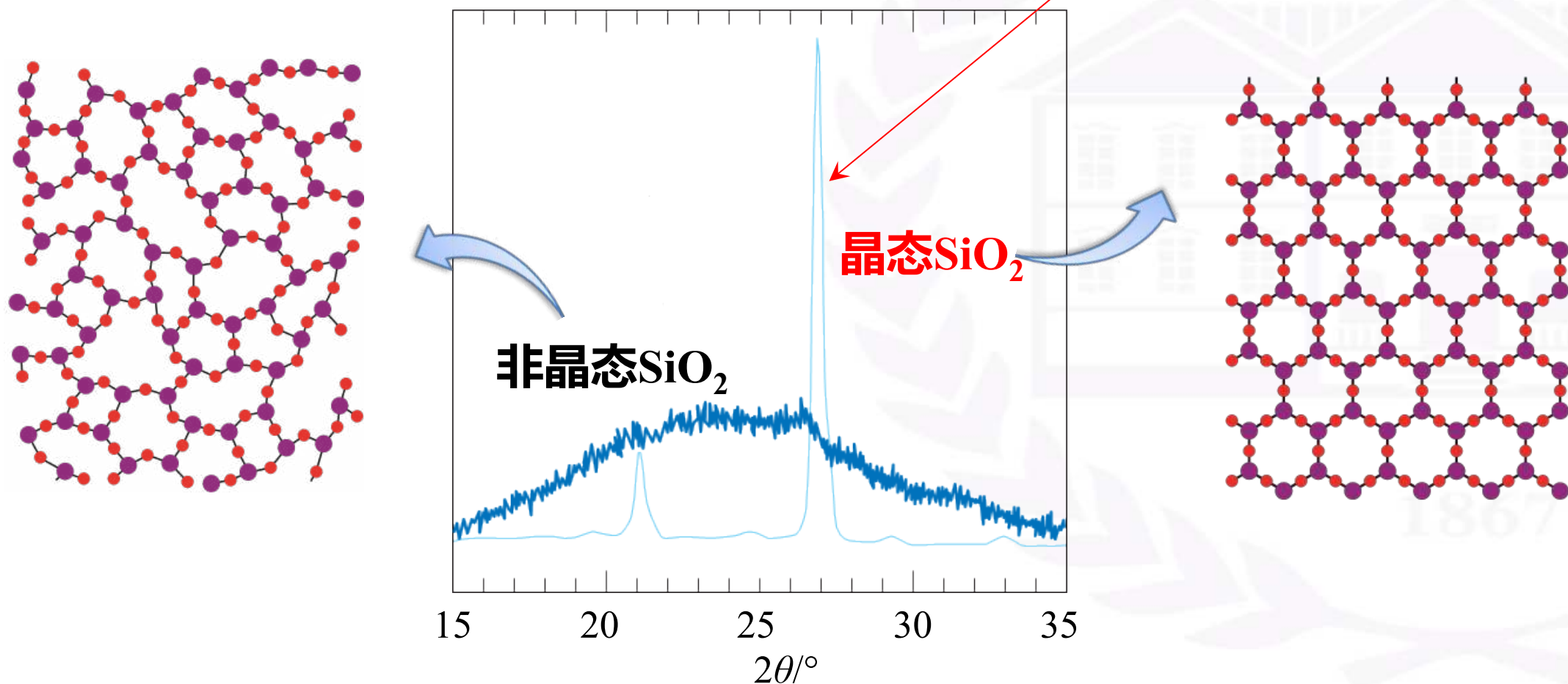


晶体的周期性结构

晶体结构的测定

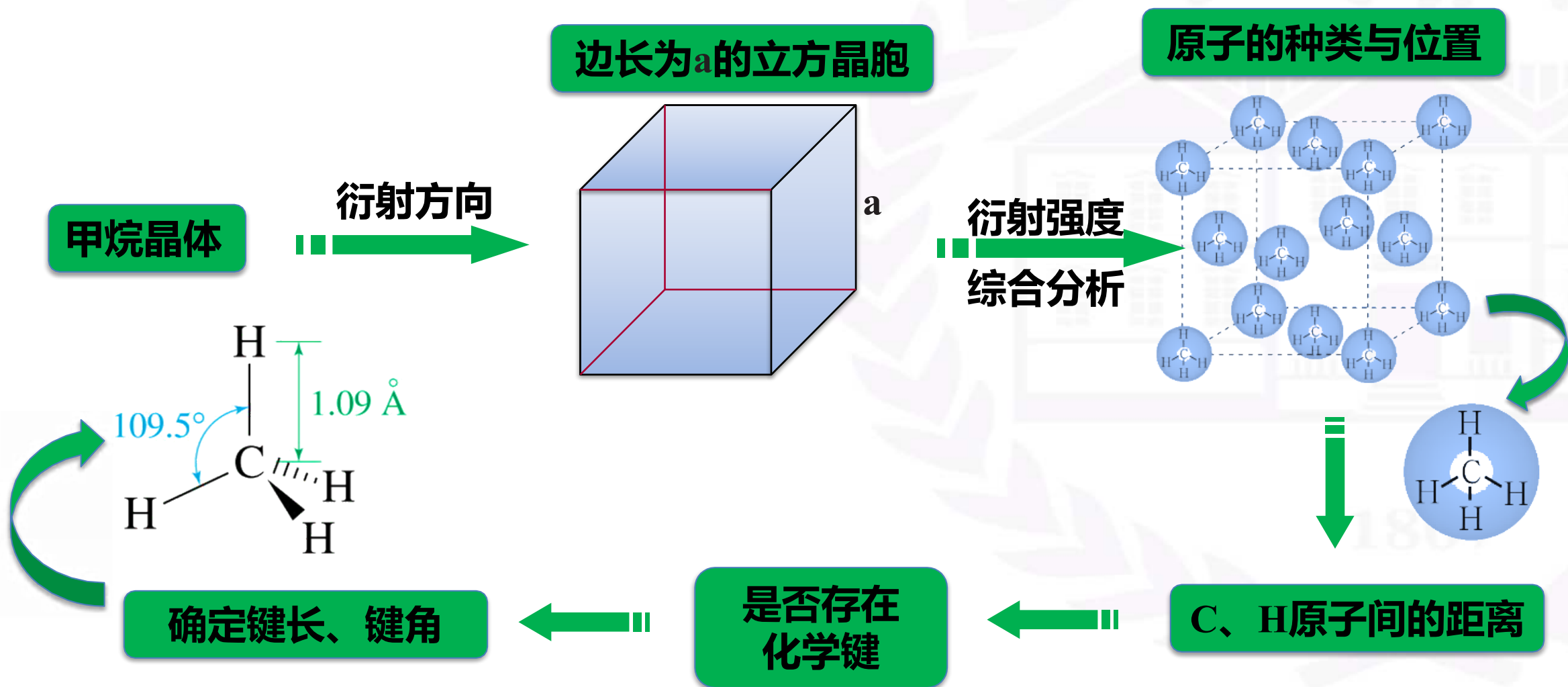
2. X射线衍射强度——原子的种类与位置

晶体能产生明锐的衍射峰



晶体结构的测定

3. X射线衍射测定分子结构



衍射图

计算

晶体
结构
信息

晶胞信息

晶胞形状和大小

分子或原子有序排列呈现的对称类型

原子在晶胞中的数目和位置

结合晶体

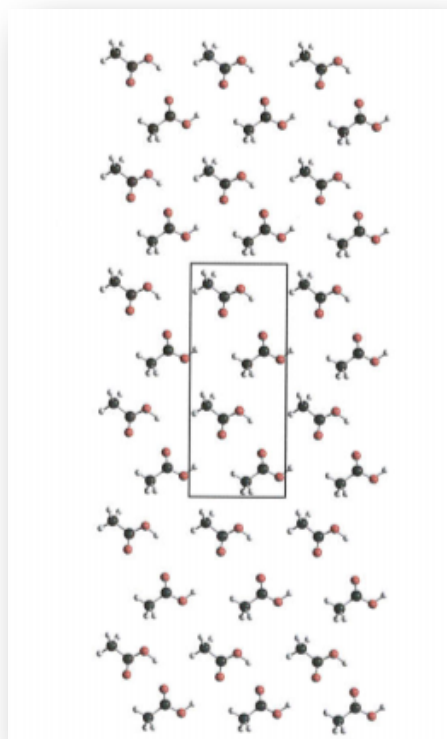
化学组成

推出原子之间

的相互关系

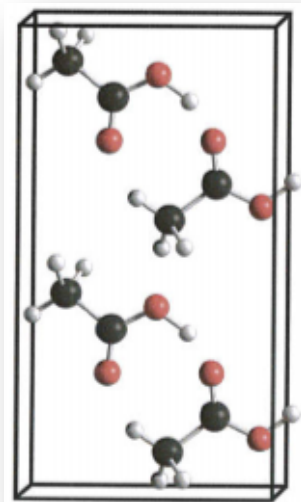
分子信息

测定晶胞中各个原子的位置(坐标),根据原子坐标,可以计算原子间的距离,判断哪些原子之间存在化学键,确定键长和键角,得出分子的空间结构



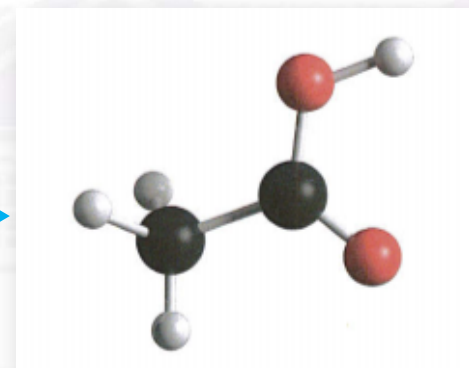
乙酸晶体

得到晶胞
含 4 个乙酸分子



乙酸晶胞

测定原子坐标，计算原子距离，判断化学键，确定键长和键角



乙酸分子的空间结构

1. 不能够支持石墨是晶体这一事实的选项是(**A**)

- A. 石墨和金刚石是同素异形体
- B. 石墨中的碳原子呈周期性有序排列
- C. 石墨的熔点为 $3625\text{ }^{\circ}\text{C}$
- D. 在石墨的X射线衍射图谱上有明锐的衍射峰

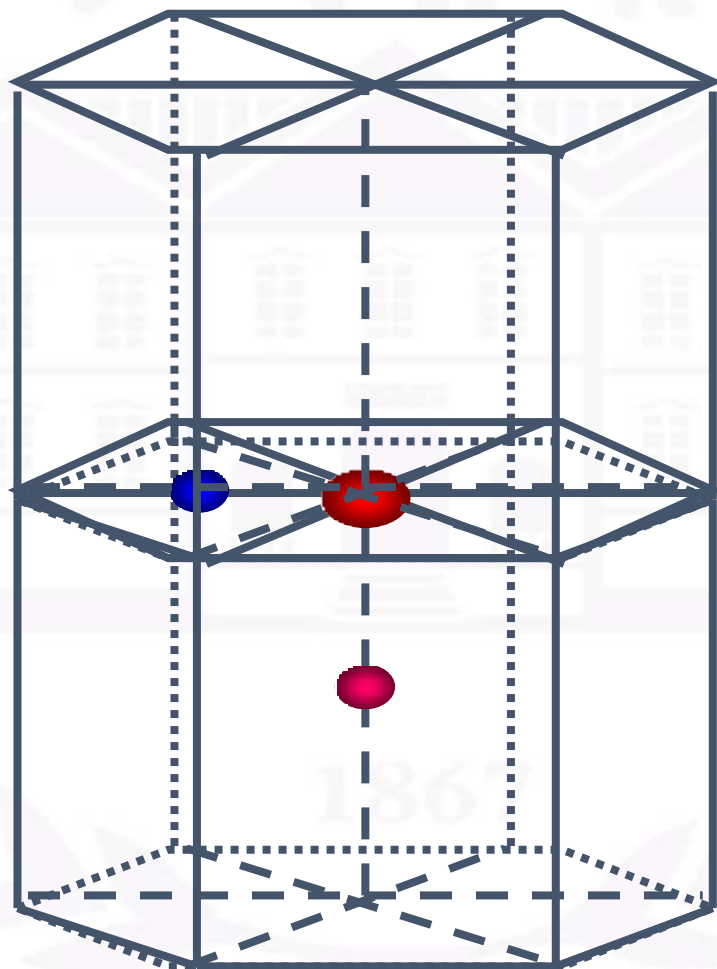
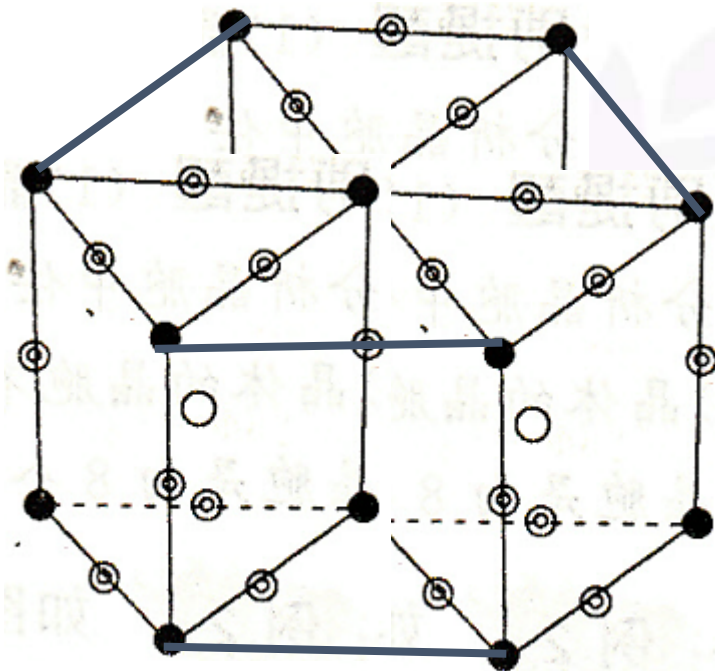
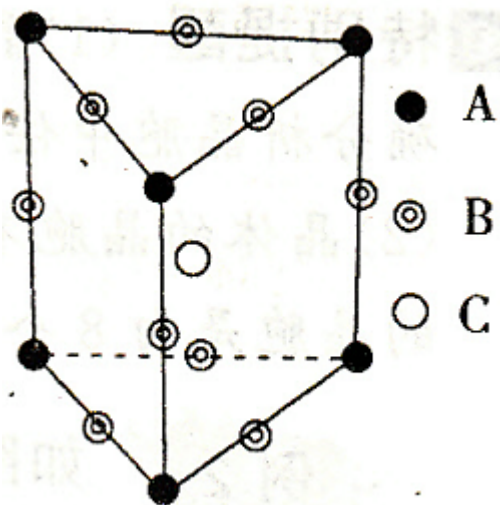
2. 关于测定晶体结构**错误**的是(**A**)

- A. 对乙酸晶体进行测定，晶胞中含有1个乙酸分子
- B. 经过计算可以从衍射图形获得晶胞形状和大小
- C. 经过计算可以从衍射图形获得分子或原子在微观空间有序排列呈现的对称类型
- D. 经过计算可以从衍射图形获得原子在晶胞里的数目和位置

晶体的相关计算



1. 正三棱柱中粒子的计算方法



三棱柱

体心

1

面心

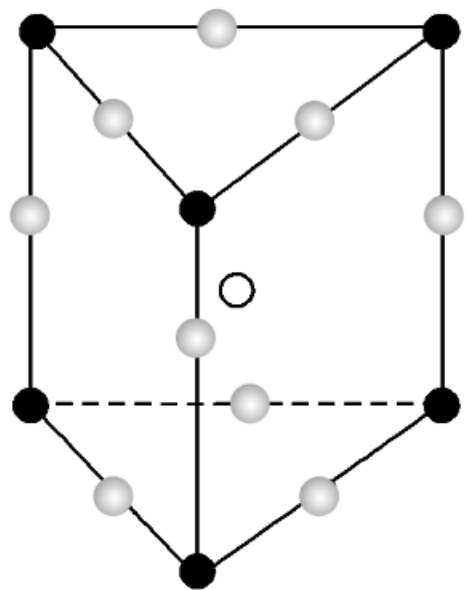
1/2

棱边

水平1/4 竖1/6

顶点

1/12



● A
● B
○ C

晶体中，A、B、C三种粒子数之是：**1:4:2**

。

注意：正三棱柱不具有平移性，不能无隙并置，

所以正三棱柱不是晶胞，但仍然可以用均摊法计算粒子数

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/487152114054006056>