

微专题4

关于晶胞结构的三个常考点

一、原子分数坐标参数

1.概念

原子分数坐标参数，表示晶胞内部各原子的相对位置。

2.原子分数坐标的确定方法

(1)依据已知原子的坐标确定坐标系取向。

(2)在坐标轴中一般以正方体的棱长为1个单位。

(3)从原子所在位置分别向 x 、 y 、 z 轴作垂线，所得坐标轴上的截距即为该原子的分数坐标。

3.原子分数坐标的意义

通过原子分数坐标既能确定晶胞中原子的相对位置，又可以计算各原子间的距离，进而可以计算晶胞的体积及晶体的密度。

4.原子分数坐标确定的步骤

(1)由已知坐标确定晶胞参数值和坐标原点。

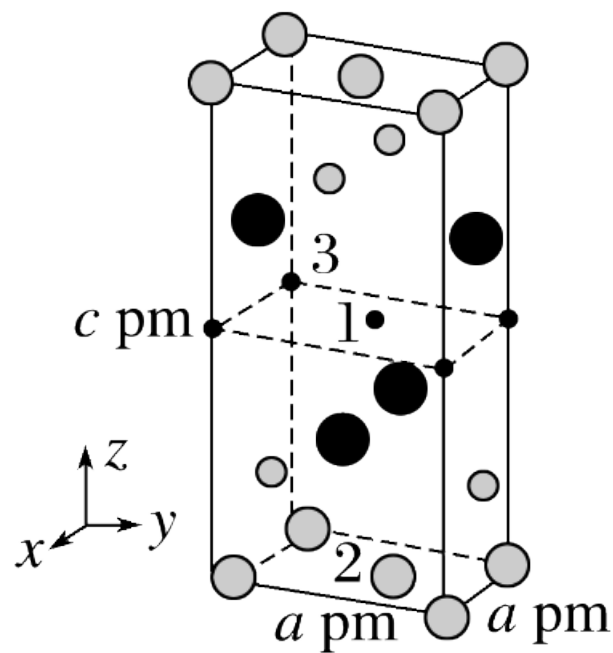
(2)由原子在晶胞中的相对位置确定原子与坐标原点的距离。

(3)确定原子在晶胞中的坐标。

例1 以晶胞参数为单位长度建立的坐标系可以表示晶胞中各原子的位置，称作原子分数坐标。如图中

原子1的坐标为 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ ，则原子2和3的坐标分别

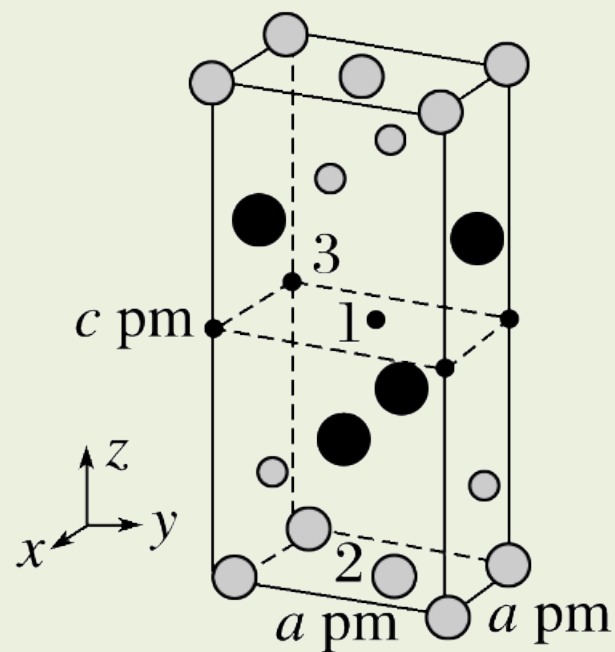
为 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$ 、 $\left(0, 0, \frac{1}{2}\right)$ 。



解析

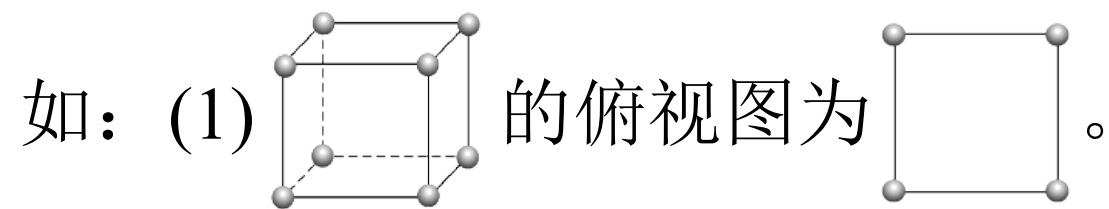
原子2位于底面面心，其坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ；

原子3位于棱上，其坐标为 $(0, 0, \frac{1}{2})$ 。



二、俯视图有关的晶体分析

从晶胞正上方向下看可得晶胞的俯视图



例2 BaFe₂As₂的晶胞结构如图1所示。图2是该晶胞的俯视图，将图补充完整。

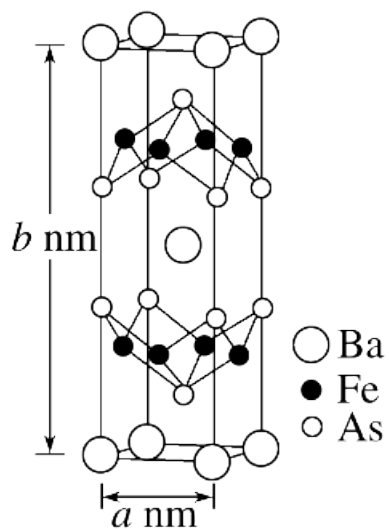


图 1

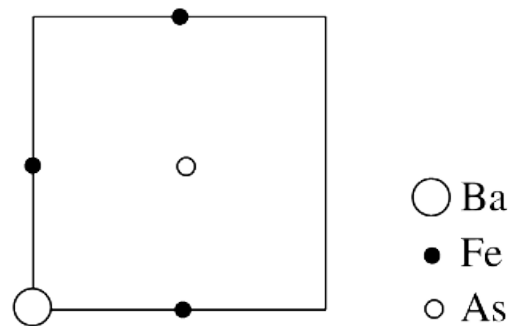
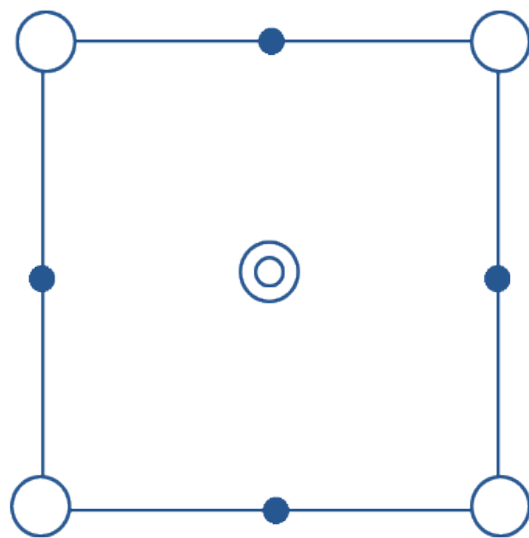
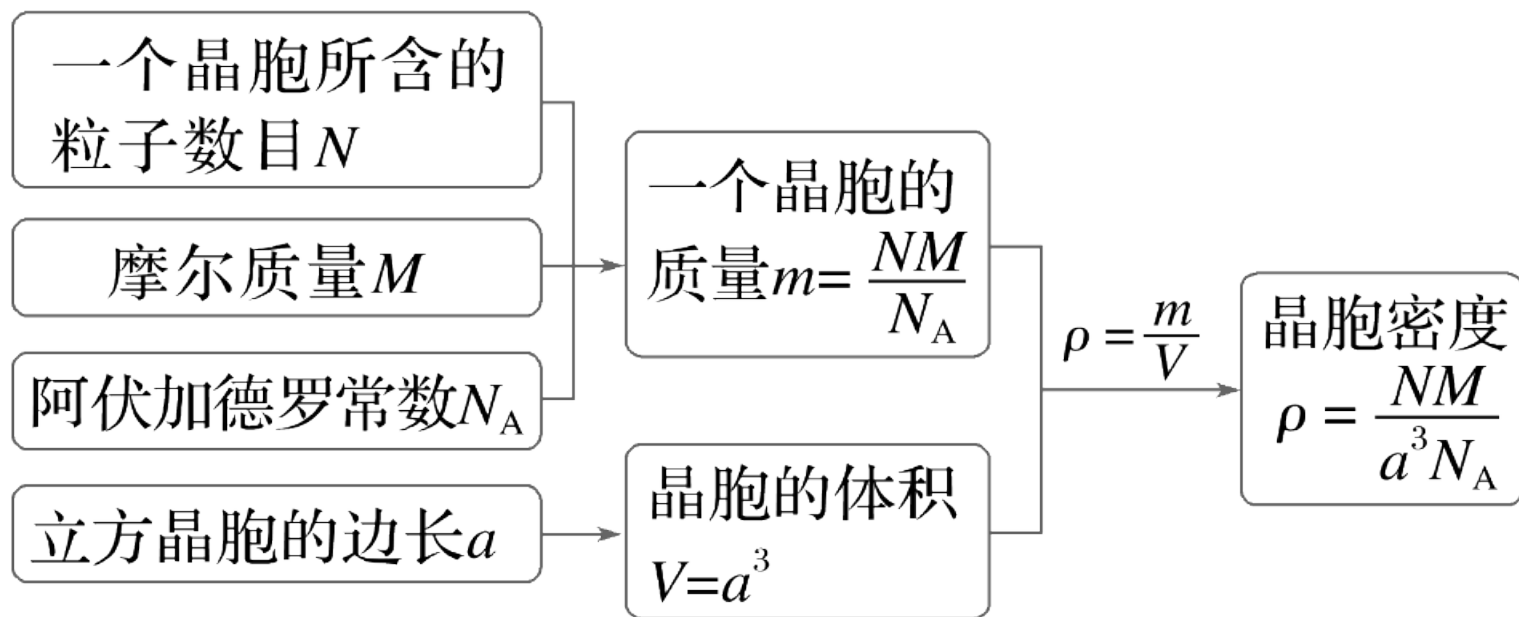


图 2

答案



三、晶体密度的相关计算



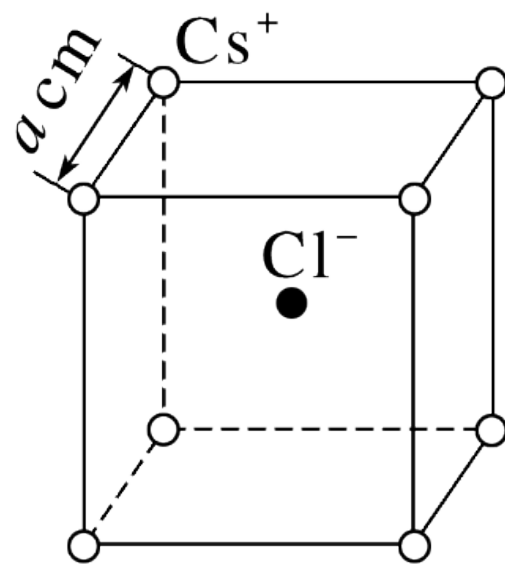
例3 氯化铯的晶胞结构如图， Cs^+ 核间距为 $a\text{ cm}$ ，氯化铯的相对分子质量为 M_r ， N_A 为阿伏加德罗常数的值，则氯化铯晶体的密度是

A. $\frac{8M_r}{N_A a^2} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$

B. $\frac{M_r a^2}{8N_A} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$

C. $\frac{M_r}{N_A a^3} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$

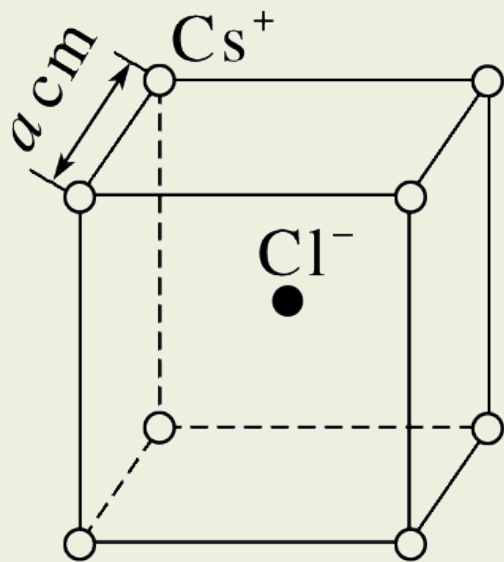
D. $\frac{M_r a^3}{N_A} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$



解析

根据“均摊法”可知，1个氯化铯晶胞中有1个 Cs^+ 和1个 Cl^- ，则1 mol氯化铯的体积为 $N_{\text{A}}a^3\text{cm}^3$ ，

故氯化铯晶体的密度为 $\frac{M_{\text{r}}}{N_{\text{A}}a^3}\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。



跟踪训练

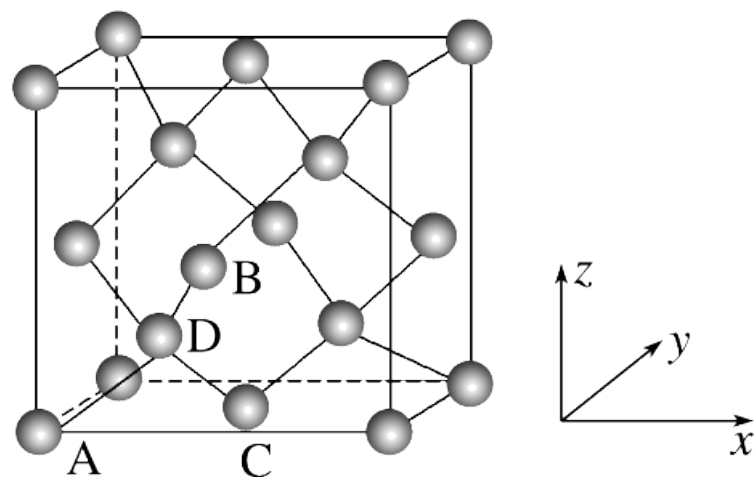
1. 原子分数坐标表示晶胞内部各原子的相对位置。如图为Ge单晶的晶胞，其中原子分数坐标参数A为 $(0, 0, 0)$ ；B为 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ ；C为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 。则D原子的分数坐标为

A. $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$

B. $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$

C. $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

D. $(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$



跟踪训练

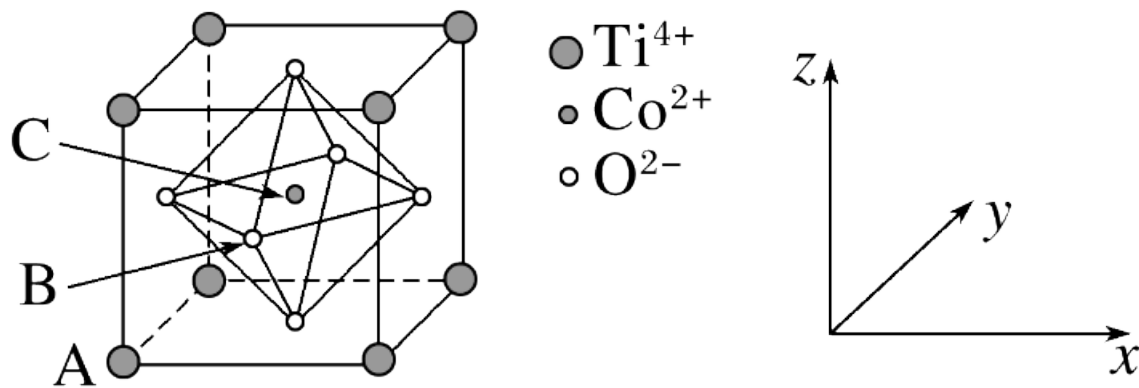
2. 钴的一种化合物的晶胞结构如图所示，已知A点的原子坐标为(0, 0, 0)，B点为 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ 。下列说法错误的是

A. 化合物中 Co^{2+} 的价层电子排布式为 $3d^7$

B. 钴的周围有6个等距且最近的 O^{2-}

C. C点的原子坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

D. 该物质的化学式为 TiCoO_2



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/896005241132011011>