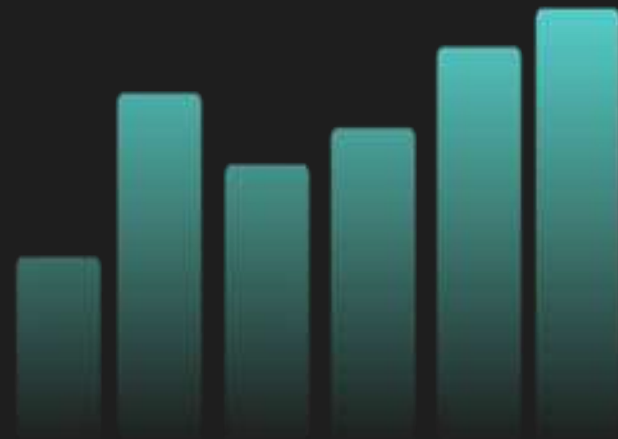


# 对晶格能的定量研究及其C++实现



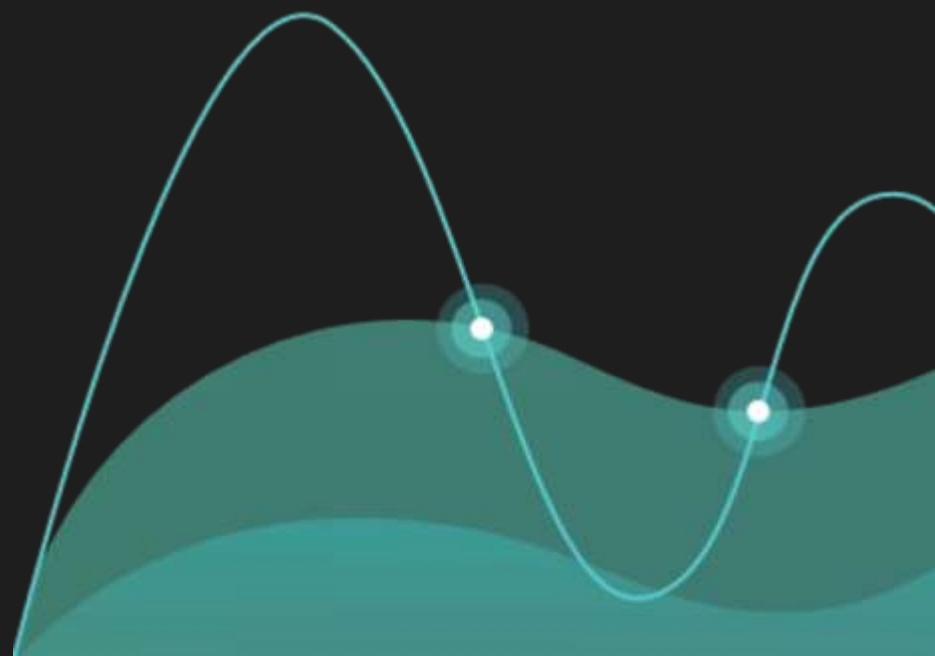
小组分工：匿名处理

# 目录

01 ▶ 晶格能理论计算的C++实现

02 ▶ 程序计算案例结果及分析

03 ▶ 总结与反思



# 导语

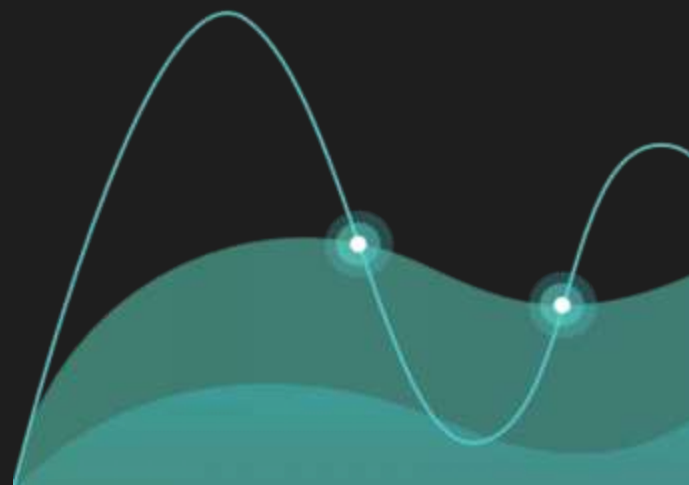
晶格能是指标准状况下，使离子晶体变成气态正离子和气态负离子时所吸收的能量，它是度量晶格稳定性的参数。离子晶格理论，晶格能的理论计算公式，主要依据玻恩-哈伯循环与玻恩-兰德公式。晶格能是判断物质稳定性与极化作用等的重要依据，在现代化学研究中有着广泛的应用，能够对晶体结构的稳定性、硬度、熔点等多种性质进行较为准确的计算，从而使得计算过程更加省时省力。

在这里，我们将对晶格能理论计算的C++实现进行简单的介绍。

# 01

Part One

## 晶格能理论计算的C++实现



# 晶格能理论计算的C++实现

## 晶格能程序整体设计思路

晶格能的计算理论计算上主流是两种方法，其中一种方法波恩兰德公式另一种是玻恩哈伯循环，在ppt末尾展示是利用公式算法计算的结果。在程序中这两种方法均被设计，根据自己的已知数据去选择想要进行的方法。

此程序整体将分为两部分，对玻恩兰德公式的程序化描述及计算与对玻恩哈伯循环的程序化描述及计算。整体采用if语句，随着离子的不同并对输入值采取不同的处理，实现对不同离子晶体的晶格能计算，并将程序运行结果进行输出。

# 晶格能理论计算的C++实现

## 玻恩哈伯循环及其程序化描述

玻恩—哈伯循环是波恩(Born)和哈伯(Haber)设计的一个化学现象，可以用来进行各种热化学数据的简单的计算，将一个反应过程进行分步来改变反应进行的途径，通过对其求解来计算原始反应的热力学数据的一种计算方法，在现代的化学研究过程中起到验证和补充的实验数据的作用。

在设计程序的过程中，波恩哈伯循环，这个循环需要的一些数据较多，但这个程序设计思路相对简单，并且需要判断的常数也较少。

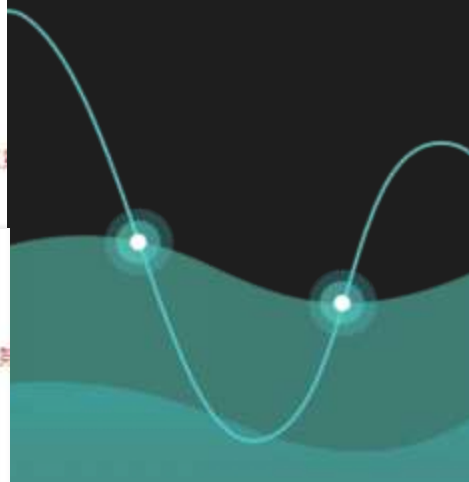
```
double m, n;  
cout<<"请输入正负阴阳离子半径大小:"<<endl;  
cin>>m>>n;  
while(m/n>0.225&& m/n<0.414)  
{  
    double a=1.638;  
    double R;  
    R=m*n;  
    int q, p;  
    cout<<"请输入离子电子层结构类似于哪个 类似于He, 按1 类似于Ne, 按2 类似于Ar, 按3, 类似于Kr 按4 类似于Xe 按5"<<endl;  
    cin>>q;  
    if(q==1)  
    {  
        p=5;  
    }  
    else if(q==2)  
    {  
        p=7;  
    }  
}
```

```

double mn, gn, pn, poh1, neh1, poh2, neh2, h, hl, ix, iy;
cout<<"温馨提示: 此次使用单位均为kJ/mol且要求晶体形成反应系数为“1”, 请认真核对单位后使用!"<<endl;
cout<<"如果是AB类型晶体请键入1, 否则键入2"<<endl;
cin>>ix;
if(ix==1)
{
cout<<"请依次输入形成该晶体的反应(金属部分化“1”时的反应系数, 从左到右, 先写金属部分, 后写非金属部分, 最后写金属晶体)的各项系数"<<endl;
cin>>mn>>pn>>gn;
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的标准态阳离子代表元素由1mol固态转化为气态的焓变(原子化热)与1mol阴离子代表元素由1mol物质转化为单原子态物质的焓变(解离能)"<<endl;
cin>>poh1>>neh1;
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的标准态金属部分1mol气态原子转化为1mol所需的价态的气态离子的焓变(第一电离能)与阴离子部分1mol气态原子转化为所需的价态的1mol气态离子的焓变(第一电子亲和能)"<<endl;
cin>>poh2>>neh2;
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的形成1mol晶体时标准态金属与阴离子代表元素结合时的焓变"<<endl;
cin>>h;
hl=-h+poh1+poh2+pn*neh1+neh2;
cout<<"您需要的晶体的晶格能为: "<<hl<<"kJ/mol"<<endl;
system("pause");
return 0;
}
if(ix==2)
{
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的标准态阳离子代表元素由1mol固态转化为气态的焓变(原子化热)与1mol阴离子代表元素由1mol物质转化为单原子态物质的焓变(解离能)"<<endl;
cin>>poh1>>neh1;
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的标准态金属部分1mol气态原子转化为1mol所需的价态的气态离子的焓变(第一、第二... 电离能)与阴离子部分1mol气态原子转化为所需的价态的1mol气态离子的焓变(第一、第二... 电子亲和能)"<<endl;
cin>>poh2>>neh2;
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的形成1mol晶体时标准态金属与阴离子代表元素结合时的焓变"<<endl;
if(ix==2)
{
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的标准态阳离子代表元素由1mol固态转化为气态的焓变(原子化热)与1mol阴离子代表元素由1mol物质转化为单原子态物质的焓变(解离能)"<<endl;
cin>>poh1>>neh1;
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的标准态金属部分1mol气态原子转化为1mol所需的价态的气态离子的焓变(第一、第二... 电离能)与阴离子部分1mol气态原子转化为所需的价态的1mol气态离子的焓变(第一、第二... 电子亲和能)"<<endl;
cin>>poh2>>neh2;
cout<<"请依次输入想要求解的晶体的形成1mol晶体时标准态金属与阴离子代表元素结合时的焓变"<<endl;
cin>>h;
hl=-h+poh1+poh2+neh1+neh2;
cout<<"您需要的晶体的晶格能为: "<<hl<<"kJ/mol"<<endl;
system("pause");
}
}

```

如上所示, 对程序进行设计, 可在输入离子半径时根据n的不同实现对晶格能不同能量区间的分类, 进而得出程序的运行结果





# 晶格能理论计算的C++实现

## 玻恩兰德公式及其程序化描述

玻恩-兰德公式是由玻恩 (M.Born) 和兰德 (Lander) 发现并给出的一个计算离子晶体晶格能的公式。

$$U = + \frac{138940 M Z_+ Z_-}{r_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

在公式中，U表示离子晶体的晶格能，M表示马德隆常数（与离子晶体结构有关），Z<sub>+</sub>，Z<sub>-</sub>表示晶体中阴、阳离子电荷。r<sub>0</sub>相邻阴、阳离子间距。U以KJ/mol为单位，r<sub>0</sub>以pm为单位。



# 晶格能理论计算的C++实现

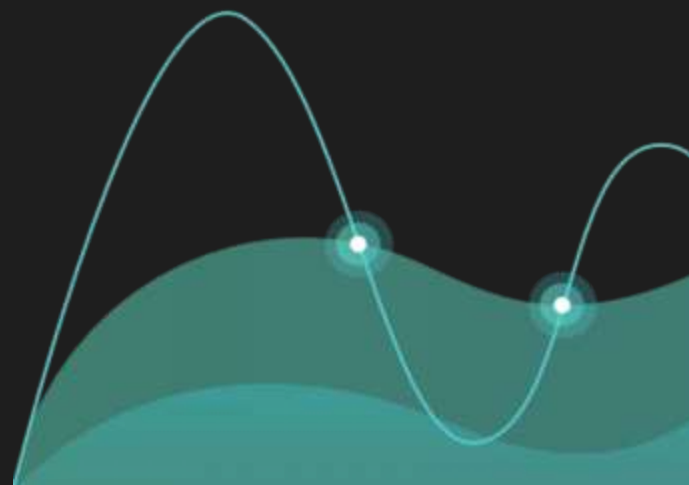
## 玻恩兰德公式及其程序化描述

在设计程序中，玻恩兰德公式中的常量值是随着离子的不同而发生改变的，所以使用一些if语句去进行判定这个常量的取值。由于玻恩兰德公式中马德隆常数已知，电荷数等条件已知，故输入离子半径值即可实现对离子晶格能的计算。

```
cin>>s>>d;  
U=138940*a*s*d*(p-1)/(R*p);  
cout<<"晶格能结果为:"<<U<<endl;
```

```
    }  
    else if(q==3)  
    {  
        p=9;  
    }  
    else if(q==4)  
    {  
        p=10;  
    }  
    else if(q==5)  
    {  
        p=12;  
    }  
    double U, s, d;  
a=1.638;  
cout<<"请输入正负电荷数"<<endl;  
cin>>s>>d;  
U=138940*a*s*d*(p-1)/(R*p);  
cout<<"晶格能结果为:"<<U<<endl;
```

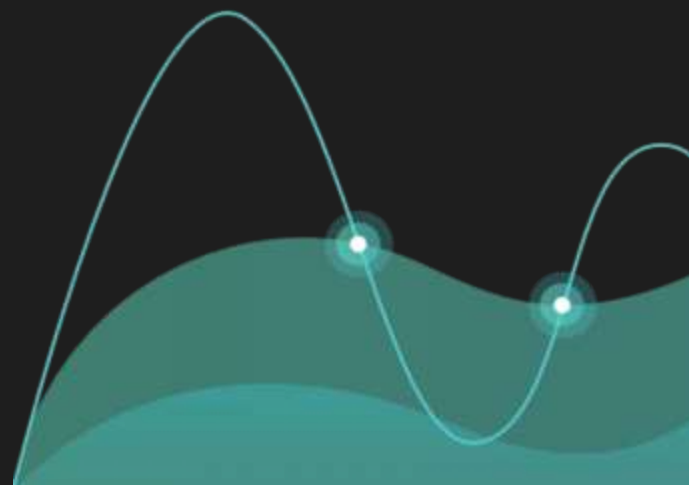
如左所示，对程序进行设计，可在输入离子半径时根据n的不同实现对晶格能不同能量区间的分类，进而得出程序的运行结果。



# 02

Part Two

## 程序计算案例结果及分析



# 程序计算案例结果及分析

## 示例：计算NaCl的晶格能大小

- 输入1选择玻恩兰德公式进行程序处理
- 输入阴阳离子的半径大小
- 输入与阴阳离子电子层结构相同的稀有气体编号
- 输入阴阳离子电荷数

```
C:\Windows\system32\cmd.exe
如果使用玻恩兰德公式按1 如果使用伯恩哈勃循环按2
1
请输入正负阴阳离子半径大小:
98 167
请输入离子电子层结构类似于哪个 类似于He, 按1 类似于Ne, 按2 类似于Ar, 按3, 类似于Kr 按4 类似于Xe 按5
2
请输入正负电荷数
1 1
晶格能结果为:785.554
请按任意键继续. . .
```

# 程序计算案例结果及分析

NaCl实际晶格能：-787.5KJ/mol

相对误差计算：

$$\frac{-787.6+787.5}{787.5} * 100\% = 0.24\%$$

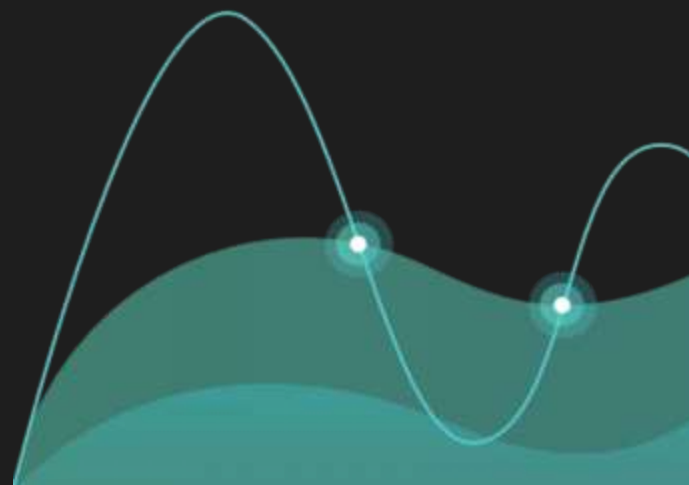
从程序运行的结果来看，NaCl的晶格能计算相对误差很小，程序具有很高的实际可行性。



# 03

Part Three

## 总结与反思





# 总结与反思

## 程序优点漫谈

将应用广泛的晶格能计算方法进行程序化操作，不仅能够提高晶格能理论计算的计算速度和精确度，将人力从繁杂的重复性计算中抽出，还使得晶格能的大量理论运算问题在应用中能够更加方便快捷地解决。

此程序的运算结果误差很小，具有较高的实际可行性，能够解决实际中出现的一些计算问题。

## 程序不足简述

此程序的设计中仍然存在很多可以改进的地方，例如在对玻恩兰德公式参数的判断中，可以通过设计一个函数的形式来代替重复出现的if语句，能使程序更加简洁。

此外，此程序仍需要人为进行简单的判断，不能做到完全的自动化。

谢谢观看

