

## 第 10 章 化学键和分子间力理论

### 习 题 解 答

1. 设谐振子基态变分函数为  $\psi = N \exp(-cx^2)$ , 试用归一化法求系数  $N$ , 并用变分法计算基态平均能量和参数  $c$ 。已知

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2^{n+1} a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}}; \quad \int_0^\infty e^{-a^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a}$$

$$\text{解: } \int \psi^2 d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} N^2 e^{-2cx^2} dx = N^2 \sqrt{\frac{\pi}{2c}} = 1$$

$$\therefore N^2 = \sqrt{\frac{2c}{\pi}}; \quad N = \left(\frac{2c}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + 2\pi^2 \mu \nu_0^2 x^2$$

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int \psi \hat{H} \psi dx \\ &= N^2 \left[ \left( 2\pi^2 \mu \nu_0^2 - \frac{2\hbar^2 c^2}{\mu} \right) \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2cx^2} dx + \frac{c\hbar^2}{\mu} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2cx^2} dx \right] \end{aligned}$$

利用积分公式可得

$$\langle E \rangle = N^2 \left[ \left( 2\pi^2 \mu \nu_0^2 - \frac{2\hbar^2 c^2}{\mu} \right) \frac{1}{4c} \sqrt{\frac{\pi}{2c}} + \frac{c\hbar^2}{\mu} \sqrt{\frac{\pi}{2c}} \right] = \frac{\pi^2 \mu \nu_0^2}{2c^2} + \frac{c\hbar^2}{2\mu}$$

$$\frac{\partial}{\partial c} \langle E \rangle = -\frac{\pi^2 \mu \nu_0^2}{2c^3} + \frac{\hbar^2}{2\mu} = 0$$

$$\therefore c = \frac{\pi \mu \nu_0^2}{\hbar}$$

$$\langle E \rangle_0 = \frac{\pi \nu_0 \hbar}{2} + \frac{\pi \nu_0 \hbar}{2} = \pi \nu_0 \hbar = \frac{1}{2} h \nu_0$$

$$N = \left( \frac{2c}{\pi} \right)^{1/4} = \left( \frac{2\mu\nu_0}{\hbar} \right)^{1/4}$$

2. 某极性分子 AB 中最外层成键分子轨道  $\psi = c_1\phi_A + c_2\phi_B$  上占有一个电子。已知分子的电子云偏向于 A 原子，假定该轨道上的电子在原子 A 附近出现的概率是在原子 B 附近出现的概率的 4 倍。试求该分子轨道的组合系数  $c_1$  和  $c_2$ 。

**解：**电子在原子 A 附近出现的概率为在原子 B 附近出现概率的 4 倍，即存在

$$c_1^2 = 4c_2^2, \quad c_1^2 + c_2^2 = 1$$

解上述两式，可得  $c_1^2 = 0.8, \quad c_2^2 = 0.2$

所以  $c_1 = \sqrt{0.8}, \quad c_2 = \sqrt{0.2}$

$$\psi = \sqrt{0.8}\phi_A + \sqrt{0.2}\phi_B$$

3. 试写出  $\text{Cl}_2$ 、 $\text{CN}^-$ 、 $\text{O}_2^-$  和  $\text{HCl}$  分子的电子组态，并指出它们的键级和分子的顺反磁性。

**解：** $\text{Cl}_2$   $[\text{KKLL}(\sigma_g 3s)^2(\sigma_u^* 3s)^2(\sigma_g 3p)^2(\pi_u 2p_x)^2(\pi_u 2p_y)^2(\pi_g^* 2p_x)^2(\pi_g^* 2p_y)^2]$ ，生成一个  $\sigma$  单键  $(\sigma_g 3p)^2$ ，键级为 1。电子全部配对，为反磁性分子。

$\text{CN}^-$   $[\text{KK}(3\sigma)^2(4\sigma)^2(1\pi)^4(5\sigma)^2]$ ，其中  $(3\sigma)^2$  和  $(4\sigma)^2$  能量相消，生成一个  $\sigma$  键  $(5\sigma)^2$  和 2 个  $\pi$  键  $(1\pi)^4$ ，键级为 3。电子全部配对，为反磁性分子。

$$\text{O}_2^- [\text{KK}(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u^* 2s)^2(\sigma_g 2p)^2(\pi_u 2p_x)^2(\pi_u 2p_y)^2(\pi_g^* 2p_x)^2(\pi_g^* 2p_y)^2]$$

$(\pi_g^* 2p_y)^1]$ , 分子中存在一个  $\sigma$  单键  $(\sigma_g 2p)^2$ , 一个三电子  $\pi$  键  $(\pi_u 2p_y)^2 (\pi_g^* 2p_y)^1$ , 键级为 1.5, 为顺磁性分子。

HCl  $[KL(3\sigma)^2]$ , 分子中存在一个  $\sigma$  键  $(3\sigma)^2$ , 键级为 1, 为反磁性分子。

4. 氧分子  $O_2$  的键能比其离子  $O_2^+$  的小, 键长要长; 而氮分子  $N_2$  的键能却比其离子  $N_2^+$  的大, 键长要短。试由它们的电子组态加以说明。

解:  $O_2$   $[KK(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u^* 2s)^2(\sigma_g 2p)^2(\pi_u 2p_x)^2(\pi_u 2p_y)^2(\pi_g^* 2p_x)^1(\pi_g^* 2p_y)^1]$ , 键级为 2。

$O_2^+$   $[KK(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u^* 2s)^2(\sigma_g 2p)^2(\pi_u 2p_x)^2(\pi_u 2p_y)^2(\pi_g^* 2p_x)^1]$ , 键级为 2.5。

由此可见  $O_2$  的键级小于  $O_2^+$ , 所以  $O_2$  键能小于  $O_2^+$ , 键长要长。

$N_2$   $[KK(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(1\pi_u)^4(3\sigma_g)^2]$ , 键级为 3。

$N_2^+$   $[KK(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(1\pi_u)^4(3\sigma_g)^1]$ , 键级为 2.5。

由此可见  $N_2$  的键级大于  $N_2^+$ , 所以  $N_2$  的键能大于  $N_2^+$ , 键长要短。

5. 试用分子轨道理论讨论硼分子  $B_2$  和氮分子负离子  $N_2^-$  基态的电子组态, 并推出它们的分子光谱项。

解:  $B_2$   $[KK(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(1\pi_u)^2]$ , 其中  $(1\pi_u)^2$  中是两个电子分占两个简并  $\pi$  轨道。  $\Lambda = 0$ ,  $S = 1$ , 分子光谱项为  $^3\Sigma_g^-$ 。

$N_2^-$   $[KK(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(1\pi_u)^4(3\sigma_g)^2(1\pi_g)^1]$ , 只有  $(1\pi_g)^1$  对光谱项有

贡献。  $\Lambda = 1$ ,  $S = \frac{1}{2}$ , 分子光谱项为  $^2\Pi_g$ 。

6. 假设 sp 等性杂化轨道的两个轨道与 x 轴平行, 试用正交、归一化方法求这组杂化轨道的波函数。

解: 因两个杂化轨道在 x 方向, 所以是 s 和  $p_x$  杂化而成

$$\psi_1 = c_{11}\phi_s + c_{12}\phi_{p_x}$$

$$\psi_2 = c_{21}\phi_s + c_{22}\phi_{p_x}$$

由于是等性杂化, 所以两个杂化轨道中的 s 轨道成分相同, 各占 1/2。

因此  $c_{11} = c_{21} = \sqrt{\frac{1}{2}}$

$$\text{根据 } \int \psi_1^2 d\tau = 1, \quad \text{可得 } c_{12} = \sqrt{\frac{1}{2}}, \quad \psi_1 = \sqrt{\frac{1}{2}}(\phi_s + \phi_{p_x})$$

$$\text{根据 } \int \psi_1 \psi_2 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{22} = -\sqrt{\frac{1}{2}}, \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{1}{2}}(\phi_s - \phi_{p_x})$$

7. 假设  $sp^2$  等性杂化轨道中有一个轨道与坐标系 x 轴平行, 其它轨道均处于 xy 平面内, 试用正交、归一化方法求出这组杂化轨道。

解: 由于 3 个杂化轨道处在 xy 平面内, 所以是 s、 $p_x$  和  $p_y$  杂化而成。又因  $\psi_1$  与 x 轴平行, 所以  $\psi_1$  与  $p_y$  无关, 可得下列轨道

$$\psi_1 = c_{11}\phi_s + c_{12}\phi_{p_x}$$

$$\psi_2 = c_{21}\phi_s + c_{22}\phi_{p_x} + c_{23}\phi_{p_y}$$

$$\psi_3 = c_{31}\phi_s + c_{32}\phi_{p_x} + c_{33}\phi_{p_y}$$

由于这是一组等性杂化轨道, 所以  $c_{11} = c_{21} = c_{31} = \sqrt{\frac{1}{3}}$

$$\text{根据 } \int \psi_1^2 d\tau = 1, \quad \text{可得 } c_{12} = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

$$\text{根据 } \int \psi_1 \psi_2 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{22} = -\sqrt{\frac{1}{6}}$$

$$\text{根据 } \int \psi_1 \psi_3 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{32} = -\sqrt{\frac{1}{6}}$$

$$\text{根据 } \int \psi_2^2 d\tau = 1, \quad \text{可得 } c_{23} = \sqrt{\frac{1}{2}}$$

$$\text{根据 } \int \psi_2 \psi_3 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{33} = -\sqrt{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore \psi_1 = \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_s + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{p_x}$$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_s - \sqrt{\frac{1}{6}}\phi_{p_x} + \sqrt{\frac{1}{2}}\phi_{p_y}$$

$$\psi_3 = \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_s - \sqrt{\frac{1}{6}}\phi_{p_x} - \sqrt{\frac{1}{2}}\phi_{p_y}$$

8. 假设  $sp^3$  等性杂化轨道中  $\psi_1$  轨道在  $x$  轴方向,  $\psi_2$  轨道处在  $xy$  平面内。试用正交、归一化方法求出这组杂化轨道 (即各组合系数)。

**解:** 由于  $\psi_1$  在  $x$  方向, 所以  $\psi_1$  与  $p_y$  和  $p_z$  无关,  $\psi_2$  在  $xy$  平面内, 所以  $\psi_2$  与  $p_z$  无关。

$$\psi_1 = c_{11}\phi_s + c_{12}\phi_{p_x}$$

$$\psi_2 = c_{21}\phi_s + c_{22}\phi_{p_x} + c_{23}\phi_{p_y}$$

$$\psi_3 = c_{31}\phi_s + c_{32}\phi_{p_x} + c_{33}\phi_{p_y} + c_{34}\phi_{p_z}$$

$$\psi_4 = c_{41}\phi_s + c_{42}\phi_{p_x} + c_{43}\phi_{p_y} + c_{44}\phi_{p_z}$$

由于这组杂化轨道为等性杂化, 所以  $c_{11} = c_{21} = c_{31} = c_{41} = \sqrt{1/4}$

$$\text{根据 } \int \psi_1^2 d\tau = 1, \quad \text{可得 } c_{12} = \sqrt{3/4}$$

$$\text{根据 } \int \psi_1 \psi_2 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{22} = -\sqrt{1/12}$$

$$\text{根据 } \int \psi_2^2 d\tau = 1, \quad \text{可得 } c_{23} = \sqrt{2/3}$$

$$\text{根据 } \int \psi_1 \psi_3 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{32} = -\sqrt{1/12}$$

$$\text{根据 } \int \psi_2 \psi_3 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{33} = -\sqrt{1/6}$$

$$\text{根据 } \int \psi_3^2 d\tau = 1, \quad \text{可得 } c_{34} = \sqrt{1/2}$$

$$\text{根据 } \int \psi_1 \psi_4 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{42} = -\sqrt{1/12}$$

$$\text{根据 } \int \psi_2 \psi_4 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{43} = -\sqrt{1/6}$$

$$\text{根据 } \int \psi_3 \psi_4 d\tau = 0, \quad \text{可得 } c_{44} = -\sqrt{1/2}$$

$$\therefore \psi_1 = \sqrt{\frac{1}{4}}\phi_s + \sqrt{\frac{3}{4}}\phi_{p_x}$$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{1}{4}}\phi_s - \sqrt{\frac{1}{12}}\phi_{p_x} + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{p_y}$$

$$\psi_3 = \sqrt{\frac{1}{4}}\phi_s - \sqrt{\frac{1}{12}}\phi_{p_x} - \sqrt{\frac{1}{6}}\phi_{p_y} + \sqrt{\frac{1}{2}}\phi_{p_z}$$

$$\psi_4 = \sqrt{\frac{1}{4}}\phi_s - \sqrt{\frac{1}{12}}\phi_{p_x} - \sqrt{\frac{1}{6}}\phi_{p_y} - \sqrt{\frac{1}{2}}\phi_{p_z}$$

9. 用 HMO 法求烯丙基 ( $\text{CH}_2 = \text{CH} - \dot{\text{C}}\text{H}_2$ ) 的离域  $\pi$  键各分子轨道

和对应的能级，并求该分子的基态离域能。

解：在久期方程和久期行列式中令  $x = \frac{E_0 - E}{\beta}$ ，则有

$$\begin{cases} c_1 x + c_2 = 0 \\ c_1 + c_2 x + c_3 = 0 \\ c_2 + c_3 x = 0 \end{cases} \quad \begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

解行列式得  $x^3 - 2x = 0$ ， $x(x^2 - 2) = 0$

$$x = 0, \pm\sqrt{2}$$

令  $x_1 = -\sqrt{2}$ ，代入方程组后可得  $c_1 = c_3$ ， $c_2 = \sqrt{2}c_1$

由于  $\int \psi_1^2 d\tau = 1$ ，可得  $c_1 = c_3 = \frac{1}{2}$ ， $c_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}$ ，故有

$$\psi_1 = \frac{1}{2}\phi_1 + \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3, \quad E_1 = E_0 + \sqrt{2}\beta$$

令  $x_2 = 0$ ，代入方程组，并结合  $\int \psi_2^2 d\tau = 1$ ，可得

$$\psi_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_3, \quad E_2 = E_0$$

令  $x_3 = \sqrt{2}$ ，代入方程组，并结合  $\int \psi_3^2 d\tau = 1$ ，可得

$$\psi_3 = \frac{1}{2}\phi_1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3, \quad E_3 = E_0 - \sqrt{2}\beta$$

该分子的基态为  $\psi_1^2\psi_2^1$ ，离域能  $= (3E_0 + 2\sqrt{2}\beta) - (3E_0 + 2\beta) = 0.828\beta$

10. 写出下列分子中离域  $\pi$  键的类型，用符号  $\Pi_n^m$  表示（其中“ $n$ ”表示参加共轭的分子轨道数；“ $m$ ”表示离域  $\pi$  键中的  $\pi$  电子数）。(1)  $\text{CH}_2 = \text{C} = \text{CH}_2$ ；(2) 己三烯；(3)  $\text{BF}_3$ ；(4)  $\text{NO}_2$ ；(5)  $\text{CH}_2 = \text{C} = \text{O}$ 。

解: (1)  $\Pi_{2x}^2$ ,  $\Pi_{2y}^2$

(2)  $\Pi_6^6$

(3)  $\Pi_4^6$

(4)  $\Pi_3^3$

(5)  $\Pi_{2x}^3$ ,  $\Pi_{2y}^2$

11. 比较下列各分子在解离出氯离子  $\text{Cl}^-$  前后, 离域  $\pi$  键的类型  $\Pi_n^m$ , 由此判断下列各分子中氯离子  $\text{Cl}^-$  的活泼性。(1)  $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$ ; (2)  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{Cl}$ ; (3)  $(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{CHCl}$ ; (4)  $(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{CCl}$ 。

解: 解离前

解离后

(1)  $\text{C}_6\text{H}_5-\text{Cl}$ ,  $\Pi_7^8$

$\text{C}_6\text{H}_5^+$ ,  $\Pi_6^5$

(2)  $\text{C}_6\text{H}_5-\text{CH}_2\text{Cl}$ ,  $\Pi_6^6$

$\text{C}_6\text{H}_5-\text{CH}_2^+$ ,  $\Pi_7^6$

(3)  $(\text{C}_6\text{H}_5)_2-\text{CHCl}$ ,  $\Pi_6^6$  (2 个)  $(\text{C}_6\text{H}_5)_2-\text{CH}^+$ ,  $\Pi_{13}^{12}$

(4)  $(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{CCl}$ ,  $\Pi_6^6$  (3 个)  $(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{C}^+$ ,  $\Pi_{19}^{18}$

由于生成的离域  $\pi$  键愈大, 系统能量愈低, 愈稳定, 所以氯的活泼性从(1)至(4)依次增大。

12. 在水溶液中以  $\text{Mn}^{2+}$  为中心离子、 $\text{H}_2\text{O}$  为配位体的八面体配合物离子不如以  $\text{CN}^-$  为配位体的八面体配合物离子稳定。试计算金属离子在形成这两种配合物离子前后 d 电子的能量变化。

解:  $\text{Mn}^{2+}$  在水中以  $\text{H}_2\text{O}$  分子为配位体, 形成高自旋配合物, 在形成配合物前后, 5 个 d 电子未发生新排, 能量不变。以  $\text{CN}^-$  为配位体是形成低自旋配合物, 5 个 d 电子进入  $t_{2g}$  轨道, 能量降低  $20D_q$ , 所以

$[\text{Mn}(\text{CN}^-)_6]^{4-}$  配合物离子比  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$  配合物离子稳定。



13. 用分子轨道理论说明中心离子和配位体之间  $\pi$  型轨道的生成, 使  $\text{CN}^-$  离子是强场配位体, 卤素离子为弱场配位体。

**解:** 配位体  $\text{CN}^-$  有空的  $\pi$  型轨道 ( $1\pi_g$ ) 能与中心离子的  $t_{2g}$  轨道进一步组合, 使场强参数  $\Delta$  增加, 成为强场配位体。

配位体卤素离子有占据电子的  $\pi$  型轨道 ( $np$ )<sup>2</sup> 能与中心离子的  $t_{2g}$  轨道进一步组合, 使场强参数  $\Delta$  变小, 成为弱场配位体。

14. 用题 9 结果进一步计算烯丙基 ( $\text{CH}_2 = \text{CH} - \dot{\text{C}}\text{H}_2$ ) 基态各碳原子附近的  $\pi$  电荷密度和各碳原子间  $\pi$  键的键级。

**解:** 题 9 的计算结果为

$$\psi_1 = \frac{1}{2}\phi_1 + \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3$$

$$\psi_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_3$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2}\phi_1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3$$

基态电子组态为  $\psi_1^2\psi_2^1$

$$q_1 = 2\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 = 1$$

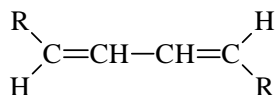
$$q_2 = 2\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 = 1$$

$$q_3 = 2\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(-\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 = 1$$

$$P_{12} = 2\left(\frac{1}{2} \times \frac{\sqrt{2}}{2}\right) = \frac{\sqrt{2}}{2} = 0.707$$

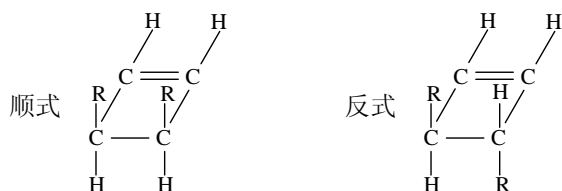
$$P_{23} = 2 \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \times \frac{1}{2} \right) = 0.707$$

15. 用前沿轨道理论推出下面的分子在加热环化和光照环化后分别可以得到什么产物。



**解：**该分子为  $\Pi_4^4$  共轭类型分子，类似于丁二烯的大  $\pi$  键，当分子在加热环化时，处于基态  $\psi_1^2\psi_2^2$ ，HOMO 轨道为  $\psi_2$  轨道，该轨道具有  $C_2$  对称性，轨道只有顺旋才能保持  $C_2$  对称性，所以产生顺旋环化，得到顺式环丁烯衍生物。

当光照时，分子处于激发态  $\psi_1^2\psi_2^1\psi_3^1$ ，HOMO 轨道为  $\psi_3$  轨道，该轨




道具有镜面对称性，只能对旋环化，得到反式环丁烯衍生物。


16. 用对称操作的矩阵表示证明，只要图形中存在  $C_2$  旋转轴和垂直于该轴的镜面  $\sigma_h$ ，则必定存在对称中心  $i$ 。

$$\hat{C}_2^1(z) \cdot \hat{\sigma}_{xy} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \hat{i}$$

**证：**设  $\hat{C}_2$  旋转操作为  $\hat{C}_2(z)$ ，则  $\hat{\sigma}_h$  为  $\hat{\sigma}_{xy}$ ，

17. 找出下列分子或离子中的最高次旋转轴。

(1)  $O_2$ ; (2)  $CO$ ; (3) 苯  $C_6H_6$ ; (4) 蒽 ;

(5) 对二氯苯 -Cl; (6)  $CO_3^{2-}$  (平面正三角形)。

解: (1)  $C_\infty$ ; (2)  $C_\infty$ ; (3)  $C_6$ ; (4)  $C_2$ ; (5)  $C_2$ ; (6)  $C_3$ 。

18. 正交晶系中相邻两晶面的晶面间距为

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}}$$

已知 NaCl 晶体的晶胞参数  $a = 5.58 \times 10^{-10} \text{ m}$ , 试计算 NaCl 晶体中 (220) 晶面的相邻两晶面间距。

解: NaCl 为立方晶系, 所以  $a = b = c$

则

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$\begin{aligned} d_{220} &= \frac{5.58 \times 10^{-10} \text{ m}}{\sqrt{8}} \\ &= 1.97 \times 10^{-10} \text{ m} \end{aligned}$$

19. 找出立方晶胞和四方晶胞所具有的独立的旋转轴。

解: 立方晶胞有:  $4 \times \underline{3}$ 、 $3 \times \underline{4}$ 、 $6 \times \underline{2}$ 。

四方晶胞有:  $\underline{4}$ 、 $4 \times \underline{2}$ 。