

# 有关高考中晶体结构计算的题型归纳与解题对策

 广东 徐俊龙

有关晶体结构计算是每年全国卷理综化学选考题中“物质结构与性质”中的必考考点之一,从历年高考阅卷反馈情况来看,学生对相关知识掌握情况不太理想,笔者归纳高考及模拟题中常考题型及其解法与策略,总结重点及难点,希望对教学具有指导意义。

## 一、化学式的确定

考题中常给出物质结构的部分图,要求写出其化学式,再进行其他相关计算。均摊法在晶胞中求化学式是常用技巧,除了常见给出的平行六面体晶胞,有些题目为了增加陌生度和难度会给出其他不常见结构,我们要找到其重复出现单元,从而求出化学式。

### 1. 分子簇结构中化学式的确定

常考的晶胞是立方体,也有长方体或其他平行六面体,在三维坐标中有晶胞参数  $a$ 、 $b$ 、 $c$  及面夹角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ ; 考题也会考一些分子簇结构。

**【例题 1】**一种由钛(Ti)原子和碳原子构成的气态团簇分子,分子模型如图 1 所示,其中圆圈表示钛原子,黑点表示碳原子,则其化学式为\_\_\_\_\_。

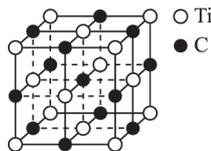


图 1

**【解析】**注意仔细审题,该结构就是其分子结构,并不是晶胞,不能用均摊法来计算,分子中含有的原子直接数总数就是其化学式:  $\text{Ti}_{14}\text{C}_{13}$ ; 若按均摊则会错数成  $\text{TiC}$ , 从而掉进命题人的命题陷阱。

**【答案】**  $\text{Ti}_{14}\text{C}_{13}$

**【对策】**在使用均摊法计算晶胞中微粒个数时,要注意晶胞的形状,不同形状的晶胞,应先分析任意位置上的一个粒子被几个晶胞所共有。原则:晶胞任意位置上的一个原子如果是被  $n$  个晶胞所共有,那么,每个晶胞对这个原子分得的份额就是  $\frac{1}{n}$ 。另外需要注意审题,如本题看清楚是否为晶胞,不能思维定式,均摊就会出错。

### 2. 二维平面形结构化学式求算

考题也会常考一些非三维立体结构,如二维平面形结构,要求判断其化学式。

**【例题 2】**(节选重组题)(1)在某硼化镁晶体中,镁原子

和硼原子是分层排布的,图 2 是该晶体微观结构的透视图,图中的硼原子和镁原子投影在同一平面上。则硼化镁的化学式为\_\_\_\_\_。

(2)已知图 3 所示晶体的硬度很可能比金刚石大,且原子间以单键结合,试根据图 3 确定该晶体的化学式为\_\_\_\_\_。

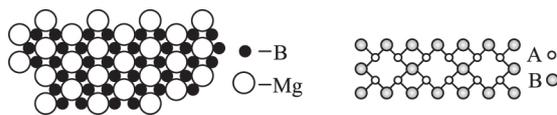


图 2

图 3

**【解析】**(1)可直接看图 2,每个 Mg 周围有 6 个 B,而每个 B 周围有 3 个 Mg,所以其化学式为  $\text{MgB}_2$ 。(2)由图 3 可知,每个 A 形成 3 个键,连三个 B,每个 B 形成 4 个单键,连 4 个 A,故化学式  $\text{B}_3\text{A}_4$  或  $\text{A}_4\text{B}_3$ 。

**【答案】**(1)  $\text{MgB}_2$  或  $\text{B}_2\text{Mg}$  (2)  $\text{B}_3\text{A}_4$  或  $\text{A}_4\text{B}_3$

**【对策】**二维晶体结构图一般是三维晶体结构(晶胞一般是平行六面体)投影得到,故截取的二维晶胞是平行四边形才有平移性。由于本题直接数有困难,可找二维晶胞,然后得出化学式,(1)如图 4 所示,任意四个白球(Mg)连成平行四边形即晶胞,黑球在晶胞内,白球均摊取  $\frac{1}{4}$ ,即得化学式为  $\text{MgB}_2$  或  $\text{B}_2\text{Mg}$ 。(2)注意上下左右前后补全,如图 5 所示,选取大黑球(B)构成的正方形即为晶胞,4 个白球(A)在晶胞内部,顶点计数  $\frac{1}{4}$ ,面上计数  $\frac{1}{2}$ ,可得 B 为 3,即得化学式:  $\text{B}_3\text{A}_4$  或  $\text{A}_4\text{B}_3$ 。

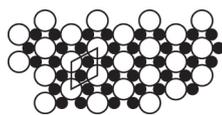


图 4

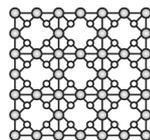


图 5

## 二、晶胞密度相关计算

有了以上知识铺垫,结合所学数学知识,就可以计算晶胞密度、晶胞参数、微粒距离、摩尔质量、阿伏加德罗常数、原子坐标参数、空间利用率等。

### 1. 高考中的常规计算

晶胞有两个基本要素:①原子坐标参数,表示晶胞内部各原子的相对位置;②晶胞参数,描述晶胞的大小和形状。常规计算一般是给出晶胞结构,且一般是立方晶胞,进行求

算诸如微粒间距离、晶体密度、原子坐标参数、晶胞参数等。

**【例题 3】**(1)(2013·全国卷 II·第 37 题节选) A(F)、B(K) 和 D(Ni) 三种元素组成的一个化合物的晶胞如图 6 所示。①该化合物的化学式为 \_\_\_\_\_, D 的配位数为 \_\_\_\_\_; ②列式计算该晶体的密度: \_\_\_\_\_  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

(2)(2016·全国卷 II·第 37 题节选) 某镍白铜合金的立方晶胞结构如图 7 所示。①晶胞中铜原子与镍原子的数目比为 \_\_\_\_\_。②若合金的密度为  $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 晶胞参数  $a =$  \_\_\_\_\_ nm。

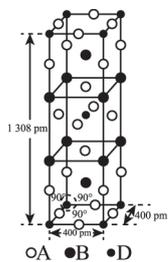


图 6

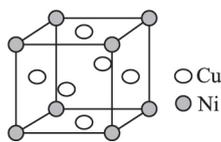


图 7

**【解析】**(1)①根据均摊法, 可以求得每个晶胞中含  $\text{F}^-$ 、 $\text{K}^+$ 、 $\text{Ni}^{2+}$  的数目分别为  $16 \times \frac{1}{4} + 4 \times \frac{1}{2} + 2 = 8$ 、 $8 \times \frac{1}{4} + 2 = 4$ 、 $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ 。故化合物的化学式为  $\text{K}_2\text{NiF}_4$ ; 直接看晶胞结构图, 中间立方体体心小黑球周围白球的个数即为配位数, 在 6 个面心, 可知配位数为 6; ②晶体的密度可由晶胞的质量除以晶胞的体积求得:

$\frac{39 \times 4 + 59 \times 2 + 19 \times 8}{6.02 \times 10^{23} \times 400^2 \times 1308 \times 10^{-30}} = 3.4 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。(2)①直接用均摊法可知晶胞中含 3 个铜、1 个镍, 比例为 3:1; ②根据  $m = \rho V$  可得, 1 mol 晶胞的质量为  $(64 \times 3 + 59) \text{ g} = (a \times 10^{-7})^3 \times d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} \times N_A$ , 则  $a = \left[ \frac{251}{6.02 \times 10^{23} \times d} \right]^{\frac{1}{3}} \times 10^7 \text{ nm}$ 。

**【答案】**(1)①  $\text{K}_2\text{NiF}_4$  6  
 ②  $\frac{39 \times 4 + 59 \times 2 + 19 \times 8}{6.02 \times 10^{23} \times 400^2 \times 1308 \times 10^{-30}} = 3.4$   
 (2)① 3:1 ②  $\left[ \frac{251}{6.02 \times 10^{23} \times d} \right]^{\frac{1}{3}} \times 10^7$

**【对策】**清楚晶体微粒与  $M$ 、 $\rho$  之间的关系: 若 1 个晶胞中含有  $n$  个微粒, 则 1 mol 晶胞中含有  $n \text{ mol}$  微粒, 其质量为  $nM \text{ g}$  ( $M$  为微粒化学式的摩尔质量); 又 1 个晶胞的质量为  $\rho V \text{ g}$  ( $V$  为晶胞的体积), 则 1 mol 晶胞的质量为  $\rho V N_A \text{ g}$ , 因此有  $nM = \rho V N_A$  或  $\rho = \frac{nM}{N_A V}$ , 利用这个式子可求算密度、晶胞参数、晶胞体积、粒子间距离、阿伏加德罗常数、摩尔质量等。此类试题的基本思路: 用均摊法确定微粒数目, 写出晶体化学式, 确定晶胞质量; 利用晶胞参数确定晶胞体积, 注意利用数学知识及单位换算, 例如:  $1 \text{ pm} = 1 \times 10^{-12} \text{ m}$ ,  $1 \text{ nm} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}$ ,  $1 \text{ cm} = 1 \times 10^{-2} \text{ m}$ , 然后利用  $\rho = \frac{m}{V}$  即可算出。解题时请看清楚题目要求是只需要列出算式还是列式计算或只需要算出结果。

## 2. 省略晶胞图的计算

有些考题需要学生熟记常见晶胞, 并以此为模板拓展到其他晶胞进行相关计算。

**【例题 4】**(1) 用晶体的 X 射线衍射法可以测得阿伏加德罗常数。对金属铜的测定得到以下结果: 晶胞为面心立方最密堆积, 边长为  $361 \text{ pm}$ 。又知铜的密度为  $9.00 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 则铜晶胞的体积是 \_\_\_\_\_  $\text{cm}^3$ 、晶胞的质量是 \_\_\_\_\_  $\text{g}$ , 阿伏加德罗常数为 \_\_\_\_\_ [列式计算, 已知  $A_r(\text{Cu}) = 63.6$ ]。

(2) Fe 能形成多种氧化物, 其中  $\text{FeO}$  晶胞结构为  $\text{NaCl}$  型。晶体中实际上存在空位、错位、杂质原子等缺陷, 晶体缺陷对晶体的性质会产生重大影响。由于晶体缺陷, 在晶体中 Fe 和 O 的个数比发生了变化, 变为  $\text{Fe}_x\text{O}$  ( $x < 1$ ) 中, 若测得某  $\text{Fe}_x\text{O}$  晶体密度为  $5.71 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 晶胞边长为  $4.28 \times 10^{-10} \text{ m}$ , 则  $\text{Fe}_x\text{O}$  中  $x =$  \_\_\_\_\_。

**【解析】**(1) 铜晶胞为面心立方晶胞,  $V = a^3 = (361 \times 10^{-10})^3 = 4.70 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$ ;  $m = \rho V = 4.70 \times 10^{-23} \text{ cm}^3 \times 9.00 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = 4.23 \times 10^{-22} \text{ g}$ ; 一个面心晶胞含 4 个原子, 则  $nM = \rho V N_A$ , 可求得:  $N_A = \frac{nM}{\rho V} =$

$$\frac{4 \times 63.6 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{4.70 \times 10^{-23} \text{ cm}^3 \times 9.00 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}} = 6.01 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} \text{ 或}$$

$$N_A = \frac{63.6 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{\frac{1}{4} \times 4.23 \times 10^{-22} \text{ g}} = 6.01 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

(2)  $\text{Fe}_x\text{O}$  晶体的晶胞结构为  $\text{NaCl}$  型, 所以每个晶胞中含有 4 个  $\text{Fe}_x\text{O}$ , 根据  $m = \rho V$  得:  $(56x + 16) \times \frac{4}{N_A} = 5.71 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} \times (4.28 \times 10^{-10} \text{ m} \times 100)^3$ , 解得:  $x = 0.92$ 。

**【答案】**(1)  $4.70 \times 10^{-23}$   $4.23 \times 10^{-22}$   $N_A = \frac{63.6 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{\frac{1}{4} \times 4.23 \times 10^{-22} \text{ g}} = 6.01 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  或  $N_A = \frac{nM}{\rho V} = \frac{4 \times 63.6 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{4.70 \times 10^{-23} \text{ cm}^3 \times 9.00 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}} = 6.01 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$   
 (2) 0.92

**【对策】**在没给出晶胞模型时不要惊慌, 要从熟悉的晶胞结构类比, 掌握常见晶胞的结构, 例如面心立方最密堆积晶胞 ( $\text{Cu}$  型或  $A_1$  型, 二氧化碳晶胞与此类似) 是 8 个顶点和 6 个面心堆积, 晶胞中含 4 个原子, 如  $\text{NaCl}$  型相当于阴离子按照面心立方堆积, 阳离子填在阴离子构成的八面体空隙中;  $\text{CaF}_2$  晶胞阳离子面心立方堆积 (金刚石与此类似, 氧化钠晶胞与此相反), 阴离子填在四面体空隙; 立方硫化锌晶胞中硫离子面心立方堆积, 锌离子填在四个相间的四面体空隙。

## 3. 空间利用率相关计算

关于晶胞空间利用率计算是晶体结构计算中较为复杂的一种, 基本思路是: 空间利用率 =  $\frac{V_{\text{原子}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\%$ ; 目前高考题中考过立方金刚石型晶胞的空间利用率计算, 与此相关

大家还要熟悉金属晶体中例如简单立方堆积(Po)、体心立方堆积(K型)、面心立方最密堆积(Cu型)、六方最密堆积(Mg型)这四类的空间利用率的计算。

**【例题5】**(经典高考试题节选重组)(1)(2016·全国卷Ⅲ·第37题节选) GaAs的熔点为1 238 ℃,密度为  $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,其晶胞结构如图8所示。该晶体的类型为 \_\_\_\_\_, Ga与As以 \_\_\_\_\_ 键相结合。Ga和As的摩尔质量分别为  $M_{\text{Ga}} \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$  和  $M_{\text{As}} \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,原子半径分别为  $r_{\text{Ga}} \text{ pm}$  和  $r_{\text{As}} \text{ pm}$ ,阿伏加德罗常数值为  $N_{\text{A}}$ ,则GaAs晶胞中原子的体积占晶胞体积的百分率为 \_\_\_\_\_。

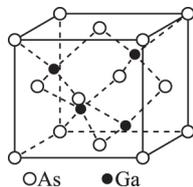


图8

(2)(2014·海南卷·第37题节选)金刚石晶胞(如图9所示)含有 \_\_\_\_\_ 个碳原子。若碳原子半径为  $r$ ,金刚石晶胞的边长为  $a$ ,根据硬球接触模型,则  $r = \frac{\sqrt{3}}{8} a$ ,列式表示碳原子在晶胞中的空间占有率: \_\_\_\_\_ (不要求计算结果)。

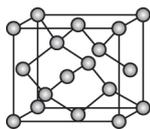


图9

**【解析】**(1) GaAs的熔点为1 238 ℃,其熔点较高,据此推知GaAs为原子晶体, Ga与As原子之间以共价键相结合。分析GaAs的晶胞结构,4个Ga原子处于晶胞体内,8个As原子处于晶胞的顶点、6个As原子处于晶胞的面心。结合均摊法计算可知,每个晶胞中含有4个Ga原子,含有As原子个数为  $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ , Ga和As的原子半径分别为  $r_{\text{Ga}} \text{ pm} = r_{\text{Ga}} \times 10^{-10} \text{ cm}$ ,  $r_{\text{As}} \text{ pm} = r_{\text{As}} \times 10^{-10} \text{ cm}$ ,则原子的总体积为  $V_{\text{原子}} = 4 \times \frac{4}{3} \pi \times [(r_{\text{Ga}} \times 10^{-10} \text{ cm})^3 + (r_{\text{As}} \times 10^{-10} \text{ cm})^3] = \frac{16\pi}{3} \times 10^{-30} (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3) \text{ cm}^3$ 。又知Ga和As的摩尔质量分别为  $M_{\text{Ga}} \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$  和  $M_{\text{As}} \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,晶胞的密度为  $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,则晶胞的体积为  $V_{\text{晶胞}} = \frac{4(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})}{\rho N_{\text{A}}} \text{ cm}^3$ ,故GaAs晶胞中原子的体积占晶胞体积的百分率为  $\frac{V_{\text{原子}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{\frac{16\pi}{3} \times 10^{-30} (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3) \text{ cm}^3}{\frac{4(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})}{\rho N_{\text{A}}} \text{ cm}^3} \times 100\% = \frac{4\pi \times 10^{-30} \times N_{\text{A}} \rho (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3)}{3(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})} \times 100\%$ 。(2)由金刚石的晶胞结构可知,晶胞内部有4个C原子,面心上有6个C原子,

顶点有8个C原子,晶胞中C原子数目为  $4 + 6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8} = 8$ ;若C原子半径为  $r$ ,金刚石的边长为  $a$ ,根据硬球接触模型,则正方体对角线长度的  $\frac{1}{4}$  就是C—C键的键长,即  $\frac{\sqrt{3}}{4} a = 2r$ ,所以  $r = \frac{\sqrt{3}}{8} a$ ,碳原子在晶胞中的空间占有率 =  $\frac{8 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi \times (\frac{\sqrt{3}}{8} a)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{16}$ 。

**【答案】**(1)原子晶体 共价  $\frac{4\pi \times 10^{-30} \times N_{\text{A}} \rho (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3)}{3(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})} \times$

100% (2)  $8 \frac{\sqrt{3}}{8} \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3}$

**【对策】**晶体结构的计算常常涉及如下数据:晶体密度、 $N_{\text{A}}$ 、 $M$ 、晶体体积、微粒间距离、微粒半径、夹角、分数坐标等,密度的表达式往往是列等式的依据。解决这类题,首先需要均摊法求微粒数目,再结合空间想象能力,利用立体几何、空间向量或解析几何、三角函数等相关数学知识搞清楚各个量之间的关系,此外需要熟悉典型晶体结构模型(特别是没给出晶胞结构时),然后融会贯通,举一反三。例如:除了原子晶体、金属晶体空间利用率计算,还可能考查离子晶体空间占有率计算、离子晶体中阴阳离子半径比计算或空隙计算,或离子半径计算,具体可参考2017年全国卷Ⅲ第35题(5)中  $\text{O}^{2-}$  及  $\text{Mn}^{2+}$  的计算,关键是将原子或离子当作刚性小球处理,找出哪些球是相切的几何关系,再具体运算即可。

#### 4. 略复杂的计算

以上计算主要围绕立方晶胞展开,下面我们再看看其他较为复杂的晶胞,以六方晶胞为例,看看相关计算。

**【例题6】**(2018届高三模拟题节选重组)(1)石墨晶体结构和晶胞结构如图10所示。已知石墨的密度是  $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , C—C键的键长为  $r \text{ cm}$ ,阿伏加德罗常数的值为  $N_{\text{A}}$ 。①石墨中含有的化学键为 \_\_\_\_\_;②石墨晶体的层间距离为 \_\_\_\_\_  $\text{cm}$ 。

(2)如图11所示,①锌的堆积方式为 \_\_\_\_\_,配位数为 \_\_\_\_\_;②若锌原子的半径为  $a \text{ pm}$ ,阿伏加德罗常数的值为  $N_{\text{A}}$ ,则锌晶体的密度为 \_\_\_\_\_  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,空间利用率为 \_\_\_\_\_ (均用代数式表示)。

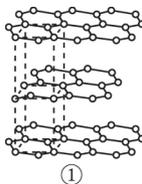


图10

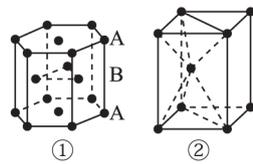


图11

**【解析】**(1)①石墨是典型的混合型晶体,由图①可知其层与层之间是范德华力,层内是共价键,但又具导电性,故其含化学键类型为共价键和金属键[或  $\sigma$  和  $\pi$ (或大  $\pi$  或

$p-p\pi$ ];图②是晶胞,利用均摊法求算碳原子个数: $8 \times \frac{1}{8} + 4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2} + 1 = 4$ ,结合图①,弄清之间的关系,作

图 12 如下所示,可列等式: $\frac{4 \times 12}{N_A \times \sqrt{3}r \times \frac{3}{2}r \times 2d} = \rho$ ,变形可

得: $d = \frac{16\sqrt{3}}{3N_A r^2 \rho}$ 。(2)①由在图 11 中,由图①可知,堆积方式为...ABAB...,是  $A_3$  型堆积(六方最密堆积),配位数为 12。

②在图 11 中,由图②为其晶胞可知:晶胞内含有两个 Zn 原子,由棱长为  $2r$  的两个正四面体相对而成,平行六面体的底面积即为菱形的面积,平行六面体的高即为正四面体高的两倍,关键要有立体几何知识,会求正四面体的高,正四面体的边长为  $2a$ ,则  $h_{\text{高}} = \frac{\sqrt{6}}{3} \times 2a$ ;而  $S_{\text{底面积}} = 2a \times \sqrt{3}a =$

$2\sqrt{3}a^2, V_{\text{晶胞}} = S_{\text{底面积}} \times 2h_{\text{高}} = 2\sqrt{3}a^2 \times \frac{\sqrt{6}}{3} \times 2 \times 2a = 8\sqrt{2}a^3,$

$\rho = \frac{nM}{N_A V} = \frac{2 \times 65}{8\sqrt{2}N_A (a \times 10^{-10})^3} = \frac{65\sqrt{2} \times 10^{30}}{8N_A a^3}$ ;空间利用

率 =  $\frac{V_{\text{原子}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 2}{8\sqrt{2}a^3} \times 100\% = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \times 100\%。$

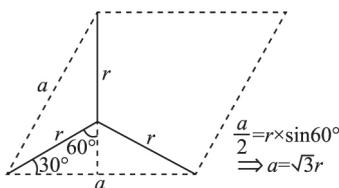


图 12 晶胞底面图

【答案】(1)①共价键和金属键[或  $\sigma$  和  $\pi$ (或大  $\pi$  或

$p-p\pi$ )] ②  $\frac{16\sqrt{3}}{3N_A r^2 \rho}$  (2)①六方最密堆积 12

②  $\frac{2 \times 65}{8\sqrt{2}N_A (a \times 10^{-10})^3}$  或  $\frac{65\sqrt{2} \times 10^{30}}{8N_A a^3}$   $\frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 2}{8\sqrt{2}a^3} \times 100\%$  或  $\frac{\sqrt{2}\pi}{6} \times 100\%$

【对策】对于复杂的计算,要学会将复杂问题简单化,关键是数学工具要灵活运用,例如六方石墨晶胞底面边长与键长之间的关系,又如六方最密堆积(镁型)计算晶胞体积,而这里必须理解连接方式,求出正四面体的高是难点。如何将化学问题转化为数学问题是此类计算的重中之重,注意熟练运用数学工具,在实战中多运用,在高考中才会立于不败之地。

### 5. 其他类型计算选讲

关于晶体结构相关计算近几年高考题中涌现出很多新考点或考查方式,各地模拟题中也会转换命题视角来推陈出新。高考“物质结构与性质”试题的命题是出自名师之手,他们对相关领域知识的掌握远在中学老师之上,因此有些不好归纳为传统题型,笔者不妨称之为“杂题”,例如 2017 年全国卷 I 第 35 题(5)实际上是考查  $KIO_3$  晶胞中的平移

问题,类似在模拟题中考查反式尖晶石  $Fe_3O_4$  结构等;有的题目考查晶胞的投影画图或识图问题,从不同角度投影降维;有的题目考查分子晶体的均摊法等;有的考查晶体缺陷或准晶或超导材料(2017 年海南卷考了  $K_3C_{60}$  化学式及密度计算)或稀有气体化合物等。

【例题 7】(2018 届高考模拟题节选重组)(1)金刚石晶胞如图 13 所示。已知金属钠的晶胞(体心立方堆积)沿其体对角线垂直在纸平面上的投影图如图 13 中 A 所示,则金刚石晶胞沿其体对角线垂直在纸平面上的投影图应该是图 \_\_\_\_\_(从 A~D 图中选填)。

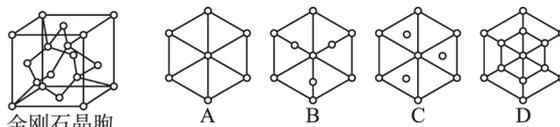


图 13

(2)可燃冰是天然气水合物,具有笼形结构如图 14(表面的小球是水分子,内部的大球是甲烷分子)。水分子成笼的作用力是 \_\_\_\_\_,该结构中其包含的氢键数为 \_\_\_\_\_;图 14 中最小的环中连接的原子总数是 \_\_\_\_\_。



图 14

【解析】(1)体心立方晶胞的体对角线上有 3 个原子,若沿体对角线垂直投影在纸面上,则这三个原子只能看到一个,另外 6 个原子将全部投影在纸面上,形成一个六边形,这就是图 A,同理,金刚石晶胞体对角线上有 4 个原子,沿体对角线垂直投影在纸面上,形成一个六边形,位于面上的 6 个原子也全部投影在纸面上,形成一个更小的六边形,因此正确答案为 D。(2)根据题意可知,固体水分子之间是通过氢键连接,直接看图 14 可知含有 20 个水分子,每个水分子形成 3 个氢键,而每个氢键被两个五元环共用,则该结构中所含氢键数目为  $20 \times 3 \times \frac{1}{2} = 30$ ;最小环是五元环,中间有 5 个氧原子,5 个氢原子,共 10 个原子。

【答案】(1)D (2)氢键 30 10

【对策】本题所列出两个小问题均不同于常规计算,遇到此类问题需要有良好的空间想象能力,才能创造性地解决问题,例如(1)中考查投影问题,要理解重叠和遮挡问题,实际可拿一个带柄水杯或粉笔盒,从不同角度练习其投影。早期在二十世纪九十年代竞赛题中出现,现在慢慢在高考及模拟题中出现。(2)常见凸多面体要熟练,例如常出现的正多面体有正四面体、立方体、正八面体、正十二面体、正二十面体等,在凸多面体中满足欧拉公式:面数+顶点数=棱数+2,高考中曾考过  $C_{60}$ 、 $C_{70}$  结构中五边形和六边形个数。■

(作者单位:广东省深圳科学高中)