

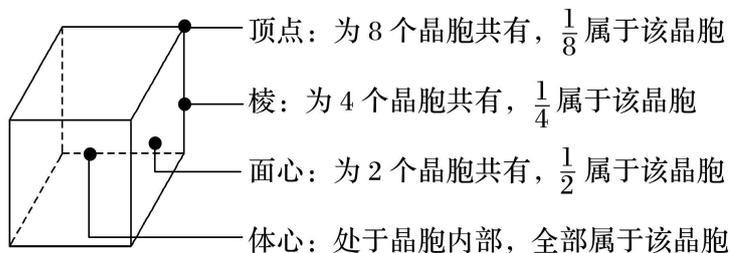
晶体结构中的有关计算

山西省临汾市第一实验中学 张安荣 VX:13835366036 公众号:一轮大化学

一、总论

1. 根据晶体晶胞的结构特点确定晶体的化学式

晶胞中粒子数目的计算(均摊法)

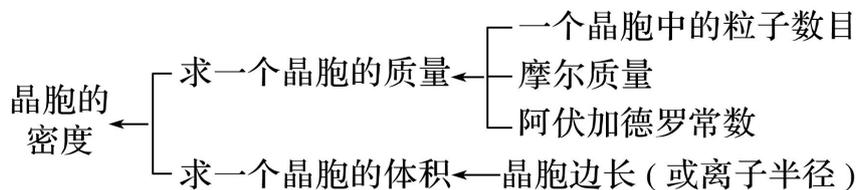


注意 ①当晶胞为六棱柱时, 其顶点上的粒子被 6 个晶胞共用, 每个粒子属于该晶胞的部分为 $\frac{1}{6}$, 而不是 $\frac{1}{8}$ 。

②审题时一定要注意的是“分子结构”还是“晶体结构”, 若是分子结构, 其化学式由图中所有实际存在的原子个数决定, 且原子个数可以不互质(即原子个数比可以不约简)。

2. 根据晶体晶胞的结构特点和有关数据, 求算晶体的密度或晶体晶胞的体积或晶胞参数 a (晶胞边长)

对于立方晶胞, 可建立如下求算途径:



得关系式: $\rho = \frac{n \times M}{a^3 \times N_A}$ (a 表示晶胞边长, ρ 表示密度, N_A 表示阿伏加德罗常数的数值, n 表示 1 mol 晶胞所含基

本粒子或特定组合的物质的量, M 表示摩尔质量)。

3. 两种单位换算:

$$1\text{nm} = 10^{-7}\text{cm} \quad 1\text{pm} = 10^{-10}\text{cm}$$

4. 金属晶体中体心立方堆积、面心立方堆积中的几组公式(设棱长为 a)

①面对角线长 = $\sqrt{2}a$ 。

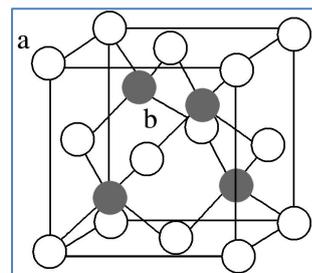
②体对角线长 = $\sqrt{3}a$ 。

③体心立方堆积 $4r = \sqrt{3}a$ (r 为原子半径)。

④面心立方堆积 $4r = \sqrt{2}a$ (r 为原子半径)。

晶体经典计算习题及其解析

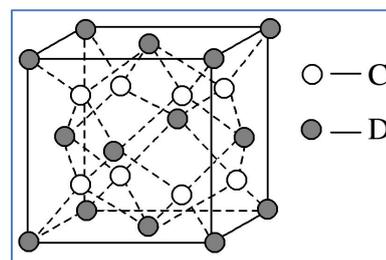
1. ZnS 晶胞结构如图(已知 a 为硫离子, b 为锌离子)所示, ZnS 晶体的熔点约为 1700 °C。已知晶体密度为 $\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, N_A 为阿伏加德罗常数的值。则 1 个 ZnS 晶胞的体积为 _____ cm^3 。



【答案】 $\frac{388}{\rho N_A}$ **【解析】** 由题图知, 一个 ZnS 晶胞中含有 4 个 Zn^{2+} , 含 S^{2-} 的个数为

$$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4, \text{ 1 个 ZnS 晶胞的质量为 } \frac{4 \times 65 + 4 \times 32}{N_A} \text{ g, 故 1 个 ZnS 晶胞的体积为 } \frac{388}{\rho N_A} \text{ cm}^3.$$

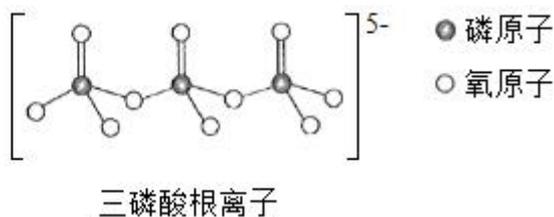
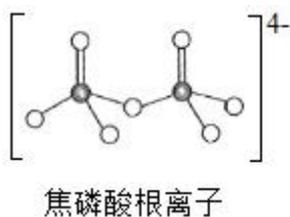
2. (2017 江西五市八校第二次联考) C 和 D (F 和 Ca) 形成的化合物的晶胞结构如图所示, 已知晶体的密度为 $\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, N_A 为阿伏加德罗常数的值, 则晶胞边长 $a =$ _____ cm (用 ρ 、 N_A 的计算式表示)。



【答案】 $\sqrt[3]{\frac{312}{\rho N_A}}$ **【解析】** C 和 D 形成的化合物是 CaF_2 , 一个晶胞中有 4 个“ CaF_2 ”

所以一个晶胞质量是 $\frac{78 \times 4}{N_A} \text{ g}$, 一个晶胞的体积是 $a^3 \text{ cm}^3$, 根据 $\rho = \frac{m}{V} = \frac{78 \times 4}{N_A a^3} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, 则 $a = \sqrt[3]{\frac{312}{\rho N_A}} \text{ cm}$ 。

3. 【2019 新课标 III 卷】 $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ 和 LiFePO_4 属于简单磷酸盐, 而直链的多磷酸盐则是一种复杂磷酸盐, 如: 焦磷酸钠、三磷酸钠等。焦磷酸根离子、三磷酸根离子如图所示: 这类磷酸根离子的化学式可用通式表示为 (用 n 代表 P 原子数)。



● 磷原子
○ 氧原子

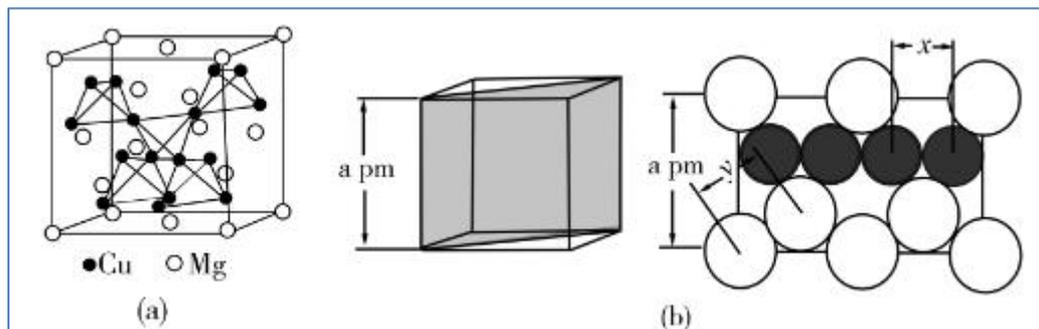


【答案】 $(\text{P}_n\text{O}_{3n+1})^{(n+2)-}$

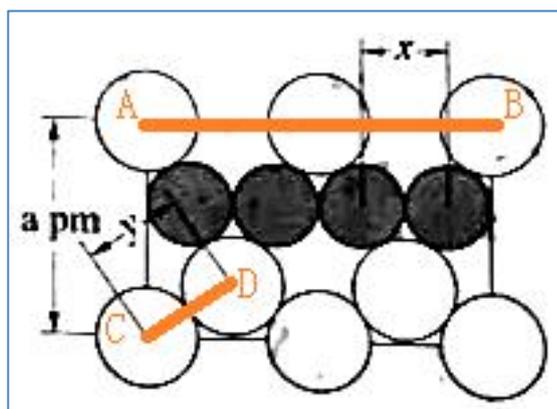
【解析】 由图可知, 2 个 P 原子时存在 7 个 O, 3 个 P 原子时存在 11 个 O, 存在 n 个 P 时存在 $(3n+1)$ 个 O,

则这类磷酸根离子的化学式可用通式表示为 $(\text{P}_n\text{O}_{3n+1})^{(n+2)-}$ 。

4. 【2019 新课标 I】 图 (a) 是 MgCu_2 的拉维斯结构, Mg 以金刚石方式堆积, 八面体空隙和半数的四面体空隙中, 填入以四面体方式排列的 Cu. 图 (b) 是沿立方格子对角面取得的截图. 可见, Cu 原子之间最短距离 $x =$ pm , Mg 原子之间最短距离 $y =$ pm . 设阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则 MgCu_2 的密度是 $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$



【答案】 $\frac{\sqrt{2}}{4}a$; $\frac{\sqrt{3}}{4}a$; $\frac{8 \times 24 + 16 \times 64}{a^3 \times 10^{-30} N_A}$



【解析】 如图所示, AB 之间的距离为面

对角线长度 $= \sqrt{2}apm$, AB 之间距离相当于 4 个 Cu 原子直径, x 距离 1 个 Cu 原子直径 $= \frac{\sqrt{2}apm}{4}$; 体对角线长

度 $= \sqrt{3}$ 棱长 $= \sqrt{3} \times apm$, CD 距离为 y , 该长度为体对角线 BC 长度的 $\frac{1}{4} = \frac{1}{4} \times \sqrt{3} \times apm = \frac{\sqrt{3}}{4}apm$; 该晶胞中

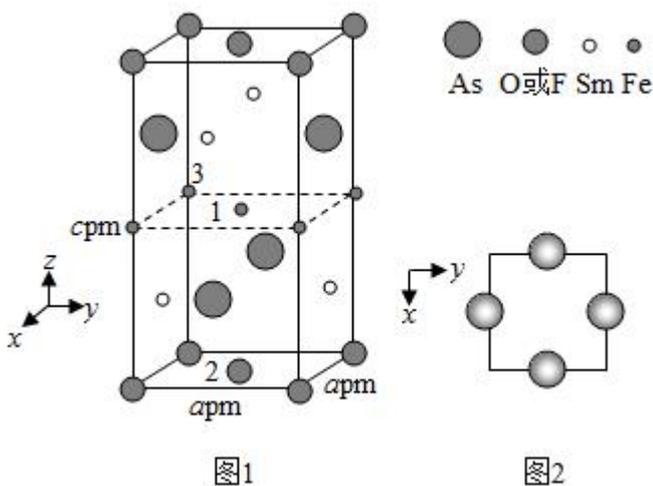
Mg 原子位于 8 个顶点上、6 个面心上, 在晶胞内部有 4 个 Mg 原子, 所以 Mg 原子个数 $= 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} + 4 = 8$,

Cu 原子都位于晶胞内部, 有 16 个; 晶胞体积 $= (a \times 10^{-10} \text{ cm})^3$, 所以:

$$\text{晶胞密度} = \frac{m}{V} = \frac{N_A}{(a \times 10^{-10})^3} \text{g/cm}^3 = \frac{8 \times 24 + 16 \times 64}{a^3 \times 10^{-30} N_A} \text{g/cm}^3.$$

5. 【2019 新课标Ⅱ卷】一种四方结构的超导化合物的晶胞结构如图 1 所示，晶胞中 Sm 和 As 原子的投影位置如图 2 所示。图中 F⁻ 和 O²⁻ 共同占据晶胞的上下底面位置，若两者的比例依次用 x 和 $1-x$ 代表，则该化合物的化学式表示为_____，通过测定密度 ρ 和晶胞参数，可以计算该物质的 x 值，完成它们关系表达式： $\rho = \underline{\hspace{2cm}} \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

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，例如图 1 中原子 1 的坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ，则原子 2 和 3 的坐标分别为_____、_____。



【答案】 $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ $\frac{2[281+16(1-x)+19x]}{a^3cN_A \times 10^{-30}}$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $(0, 0, \frac{1}{2})$

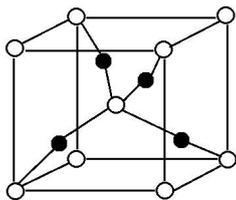
【解析】 由图 1 可知，每个晶胞中含 Sm 原子： $4 \times \frac{1}{2} = 2$ ，含 Fe 原子： $4 \times \frac{1}{4} + 1 = 2$ ，含 As 原子： $4 \times \frac{1}{2} = 2$ ，含 O 原子： $(8 \times \frac{1}{8} + 2 \times \frac{1}{2})(1-x) = 2(1-x)$ ，含 F 原子： $(8 \times \frac{1}{8} + 2 \times \frac{1}{2})x = 2x$ ，所以该化合物的化学式为 $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ ；

根据该化合物的化学式为 $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ ，一个晶胞的质量为 $\frac{2[281+16(1-x)+19x]}{N_A}$ ，一个晶胞的体积为

$a^2c \times 10^{-30} \text{cm}^3$ ，则密度 $\rho = \frac{2[281+16(1-x)+19x]}{a^2cN_A \times 10^{-30}} \text{g/cm}^3$ 。

根据原子 1 的坐标 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ，可知原子 2 和 3 的坐标分别为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 、 $(0, 0, \frac{1}{2})$

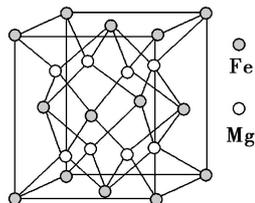
6. 【2019 江苏卷 21】一个 Cu_2O 晶胞 (见图 2) 中, Cu 原子的数目为_____。



【答案】4

【解析】该晶胞中白色球个数 = $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ 、黑色球个数为 4, 则白色球和黑色球个数之比 = $2 : 4 = 1 : 2$, 根据其化学式知, 白色球表示 O 原子、黑色球表示 Cu 原子, 则该晶胞中 Cu 原子数目为 4。

7. (2019·黑龙江哈尔滨统考)铁镁合金是目前已发现的储氢密度最高的储氢材料之一, 其晶胞结构如图所示。则铁镁合金的化学式为_____, 若该晶胞的参数为 $d \text{ nm}$, 则该合金的密度为_____ (不必化简, 用 N_A 表示阿伏加德罗常数)。



答案 $\text{Mg}_2\text{Fe} \frac{416}{10^{-21} d^3 N_A} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (或其他合理答案)

解析 依据均摊规则, 晶胞中共有 4 个铁原子, 8 个镁原子, 故化学式为 Mg_2Fe , 一个晶胞中含有 4 个 “ Mg_2Fe ”,

其质量为 $\frac{4}{N_A} \times 104 \text{ g} = \frac{416}{N_A} \text{ g}$, $1 \text{ nm} = 10^{-7} \text{ cm}$, 体积为 $10^{-21} d^3 \text{ cm}^3$, 由此可求出其密度。

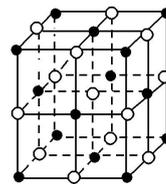
8. (2018·河南八市二模)白磷(P_4)晶体中分子堆积方式属于分子密堆积, 每个分子周围紧邻的分子有_____个。若白磷晶体晶胞的棱长为 $y \text{ pm}$, 阿伏伽德罗常数的数值用 N_A 表示, 则白磷晶体的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

【答案】12 $\frac{4.96 \times 10^{32}}{y^3 N_A}$

【解析】白磷(P_4)晶体中分子堆积方式属于分子密堆积, 类比金属晶体中金属原子的密堆积, 可知每个分子周围紧邻的分子有 12 个。密堆积可能是面心立方堆积也可能是六方堆积, 每个晶胞中有 4 个白磷分子, 白磷晶体晶胞的棱长为 $y \text{ pm}$ 阿伏伽德罗常数的数值用 N_A 表示 则 N_A 个晶胞的质量和体积分别是 496 g 和 $N_A (y \times 10^{-10})^3 \text{ cm}^3$,

则白磷晶体的密度为 $\frac{4.96 \times 10^{32}}{y^3 N_A} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

9. (2018·江西南昌二模) KI 的晶胞结构如图所示, 每个 K^+ 的配位数为_____。KI 晶体的密度为_____ $\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, K 和 I 的摩尔质量分别为 $M_k\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ 和 $M_l\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$, 原子半径分别为 $r_k\text{cm}$ 和 $r_l\text{cm}$, 阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则 KI 晶胞中的空间利用率为_____



【答案】: $6 \frac{M_k + M_l}{2N_A (r_k + r_l)^3} [4\pi(r_k^3 + r_l^3)\rho N_A \times 100\%]/[3(M_k + M_l)]$ 或 $[2\pi(r_k^3 + r_l^3) \times$

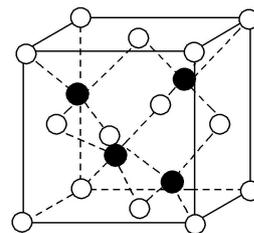
$100\%]/3(r_k + r_l)^3$

【解析】 根据晶胞结构可知 KI 晶胞与 NaCl 晶胞结构相似, 每个 K^+ 紧邻 6 个 I^- , 每个 K^+ 的配位数为 6; 晶胞中 K 和 I 均是 4 个, 原子半径分别为 $r_k\text{cm}$ 和 $r_l\text{cm}$, 则晶胞的边长是 $2r_k\text{cm} + 2r_l\text{cm}$, 因此 KI 晶体的密度为

$$\frac{4}{N_A} \times \frac{M_k + M_l}{(2r_k + 2r_l)^3} \text{g/cm}^3 = \frac{M_k + M_l}{2N_A (r_k + r_l)^3} \text{g/cm}^3, \text{ KI 晶胞中的空间利用率为 } \frac{\frac{4}{8} \pi r_k^3 \times 4 + \frac{4}{8} \pi r_l^3 \times 4}{(2r_k + 2r_l)^3} \times 100\% =$$

$$\frac{2\pi (r_k^3 + r_l^3)}{3 (r_k + r_l)^3} \times 100\%.$$

10. (2019·河北衡水检测) Fe 和 S 形成的某种晶胞如图所示: 其中白球表示 S, 黑球表示 Fe, 则该物质的化学式为_____。该晶胞中硫原子的配位数为_____; 假设该晶胞的密度为 $\rho \text{ g/cm}^3$, 用 N_A 表示阿伏加德罗常数, 则该晶胞中距离最近的 S 原子之间的距离为_____ pm.



【答案】 O_2^{2+} 或 C_2^{2-} (7)FeS $4 \frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{352}{N_A \rho}} \times 10^{10}$

【解析】: 黑球铁处于晶胞内部, 晶胞中含有 4 个 Fe 原子, 白球 S 处于顶点和面心, 晶胞中含有 S 原子数目为

$$\frac{1}{8} \times 8 + 8 \times \frac{1}{2} = 4, \text{ 约成最简整数比即得化学式为 FeS, 根据图示, 每个铁原子周围有四个硫原子, 即晶胞中铁原子的}$$

配位数为 4, 则硫原子的配位数也为 4; 晶胞质量为 $4 \times \frac{56 + 32}{N_A} \text{g}$, 假设该晶胞的边长为 $a \text{ cm}$, 则 $(a \text{ cm})^3 \times \rho \text{ g/cm}^3$

$$= 4 \times \frac{56 + 32}{N_A} \text{g}, \text{ 则 } a = \sqrt[3]{\frac{352}{N_A \rho}}, \text{ 距离最近的 S 原子之间距离为晶胞边长的 } \frac{\sqrt{2}}{2}, \text{ 故 S 原子之间距离为 } \frac{\sqrt{2}}{2} \times$$

$$\sqrt[3]{\frac{352}{N_A \rho}} \text{cm} = \frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{352}{N_A \rho}} \times 10^{10} \text{pm}.$$

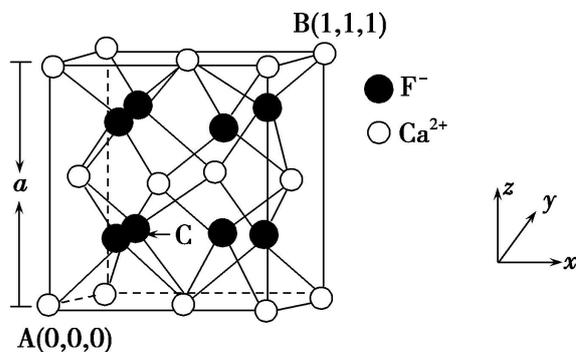
11. (2019·山东日照诊断) CaF_2 的晶体结构如图所示。

① CaF_2 晶胞中, Ca^{2+} 的配位数为_____ ; F^- 的配位数为_____。

② 原子坐标参数可表示晶胞内部各原子的相对位置, 已知

A、B 两点的原子坐标参数如图所示, 则 C 点的原子坐标参数为_____。

③ 晶胞参数可描述晶胞的大小和形状, CaF_2 晶胞的晶胞参数 $A = 546.2 \text{ pm}$, 则其密度为_____ (列出计算式即可) g/cm^3 。



【答案】 ① 8 4 ② $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$ ③ $\frac{4 \times 78 \times 10^7}{6.02 \times 546.2^3}$

【解析】 ① 根据 CaF_2 晶胞结构, 每个 F^- 周围有 4 个距离相等且最近的 Ca^{2+} , 这 4 个钙离子构成正四面体结构, F^- 的配位数为 4, 在 CaF_2 晶胞中 Ca^{2+} 与 F^- 的个数比为 1 : 2, 则 Ca^{2+} 的配位数为 8 ; ② 根据 CaF_2 的晶体结构, 氟离子分布在晶胞内, A、B 原子的坐标参数依次为 (0,0,0)、(1,1,1), 氟离子分布在晶胞内, 8 个氟离子构成立方结构, 每侧的 4 个负离子所在平面距离最近的晶胞的侧面为晶胞边长的 $\frac{1}{4}$, 因此 C 点的原子坐标参数为 $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$;

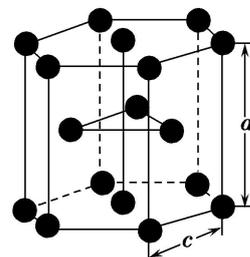
③ 根据 CaF_2 晶胞结构, 晶胞中含有 8 个氟离子, 则含有 4 个钙离子, 晶胞参数 $A = 546.2 \text{ pm}$, 则其密度为

$$\frac{4 \times 78}{N_A} \text{g/cm}^3 = \frac{4 \times 78}{6.02 \times 10^{23} \times 546.2^3 \times 10^{-30}} \text{g/cm}^3 = \frac{4 \times 78 \times 10^7}{6.02 \times 546.2^3} \text{g/cm}^3$$

10. (2019·山东济南联考) 金属钛有两种同素异形体, 常温下是六方堆积, 高温下是体心

立方堆积。如图所示是钛晶体的一种晶胞, 晶胞参数 $a = 0.469 \text{ nm}$, $c = 0.295 \text{ nm}$, 则

该钛晶体的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (用 N_A 表示阿伏加德罗常数的值, 列出计算式即可)。

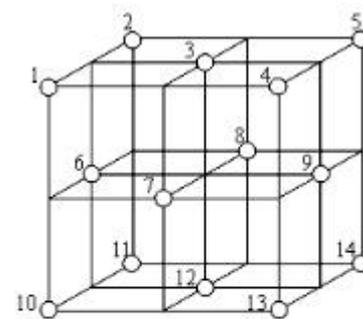


【答案】 $\frac{6 \times 48}{\frac{3\sqrt{3}}{2} \times 2.95 \times 10^{-8}^2 \times 4.69 \times 10^{-8} N_A}$

【解析】 根据均摊法, 该晶胞含有的 Ti 原子数是 $12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$, 一个晶胞的体积是 $\frac{3\sqrt{3}}{2} \times (2.95 \times 10^{-8})^2$

$\times 4.69 \times 10^{-8} \text{ cm}^3$, 所以晶体密度是 $\frac{6 \times 48}{\frac{3\sqrt{3}}{2} \times 2.95 \times 10^{-8}^2 \times 4.69 \times 10^{-8} N_A} \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

11. (2019·四川绵阳一诊) Fe_3O_4 晶体中, O^{2-} 的重复排列方式如图所示, 该排列方式中存在着由如 1、3、6、7 的 O^{2-} 围成的正四面体空隙和 3、6、7、8、9、12 的 O^{2-} 围成的正八面体空隙。 Fe_3O_4 中有一半 Fe^{3+} 填充在正四面体空隙中, 另一半 Fe^{3+} 和 Fe^{2+} 填充在正八面体空隙中, 则 Fe_3O_4 晶体中, 正四面体空隙数与 O^{2-} 数之比为_____, 有_____ %的正八面体空隙没有填充阳离子。 Fe_3O_4 晶胞中有 8 个图示结构单元, 晶体密度为 5.18 g/cm^3 , 则该晶胞参数 $a =$ _____ pm。(写出计算表达式)



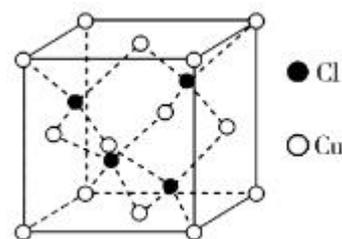
O^{2-} 的重复排列方式
(白球表示 O^{2-})

【答案】 2 : 1 50 $\sqrt[3]{\frac{8 \times 232}{5.18 \times 6.02 \times 10^{23}} \times 10^{10}}$

【解析】 如图结构中如 1、3、6、7 的 O^{2-} 围成的正四面体空隙有 8 个, O^{2-} 数目为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$, 故正四面体空隙数与 O^{2-} 数目之比为 $8 : 4 = 2 : 1$; 如图结构单元中每个棱心均为正八面体空隙中心, 每个棱心被 4 个图示结构单元所共用, 故 1 个图示结构单元中正八面体空隙数目为 $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$, 1 个结构单元中有 4 个 O^{2-} , 故有 2 个 Fe^{3+} 和 1 个 Fe^{2+} , 由题可知 1 个 Fe^{3+} 和 1 个 Fe^{2+} 填充在正八面体空隙中, 即还有 2 个正八面体空隙没有填充阳离子, 有 50% 的正八面体空隙没有填充阳离子。晶胞中有 8 个图示结构单元, 1 mol 晶胞的质量为 $8 \times (3 \times 56$

$+ 4 \times 16) \text{ g} = 8 \times 232 \text{ g}$, 则晶体密度 $= \frac{8 \times 232 \text{ g}}{6.02 \times 10^{23} \times a^3 \times 10^{-30} \text{ cm}^3} = 5.18 \text{ g/cm}^3$, $a = \sqrt[3]{\frac{8 \times 232}{5.18 \times 6.02 \times 10^{23}} \times 10^{10}}$

12. 【2016 年高考海南卷】(6 分) Cu 与 Cl 形成的一种化合物的立方晶胞如图所示。①该化合物的化学式为_____, 已知晶胞参数 $a = 0.542 \text{ nm}$, 此晶体的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。(写出计算式, 不要求计算结果。阿伏加德罗常数为 N_A)



【答案】 ① CuCl $\frac{4 \times 99.5}{N_A \times (0.542)^3 \times 10^{-21}}$ 或 $\frac{4 \times M(\text{CuCl})}{N_A \times a^3 \times 10^{-21}}$

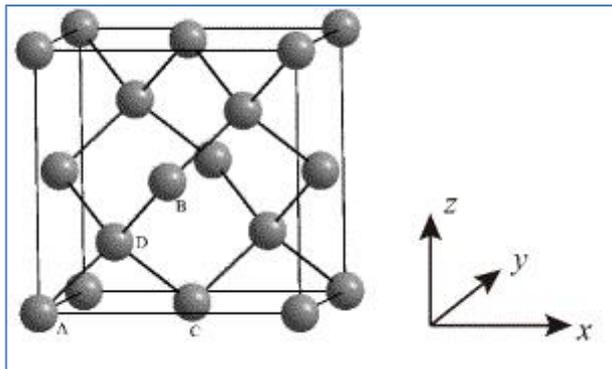
【解析】 ①根据晶胞结构利用切割法分析, 每个晶胞中含有铜原子个数为 $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$, 氯原子个数为 4, 该化合物的化学式为 CuCl , 则 1 mol 晶胞中含有 4 mol CuCl , 1 mol 晶胞的质量为 $4 \times 99.5 \text{ g}$, 又晶胞参数 $a = 0.542$

nm , 此晶体的密度为 $\frac{4 \times 99.5}{N_A \times (0.542)^3 \times 10^{-21}}$ 或 $\frac{4 \times M(\text{CuCl})}{N_A \times a^3 \times 10^{-21}} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

13. 【2016 年高考新课标 I 卷】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，下图为 Ge

单晶的晶胞，其中原子坐标参数 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 原子的坐标参数为_____。



②晶胞参数，描述晶胞的大小和形状，已知 Ge 单晶的晶胞参数

$a=565.76 \text{ pm}$ ，其密度为_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (列出计算式即可)。

【答案】① $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ② $\frac{8 \times 73}{6.02 \times 565.76^3} \times 10^7$

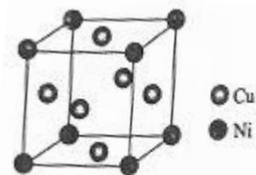
【解析】①根据各个原子的相对位置可知，D 在各个方向的 $\frac{1}{4}$ 处，所以基坐标是 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ；②根据晶胞结构可知，

在晶胞中含有的 Ge 原子是 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} + 4 = 8$ ，所以晶胞的密度是

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{8 \times 73 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}}{N_A \times 565.76 \times 10^{-10} \text{ cm}^3} = \frac{8 \times 73}{6.02 \times 10^{23} \times 565.76 \times 10^{-10} \text{ cm}^3} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3} = \frac{8 \times 73}{6.02 \times 565.76^3} \times 10^7 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$$

14. 【2016 年高考新课标 II 卷】某镍白铜合金的立方晶胞结构如图所示。

①晶胞中铜原子与镍原子的数量比为_____。②若合金的密度为 $d \text{ g}/\text{cm}^3$ ，晶胞参数



$a =$ _____ nm

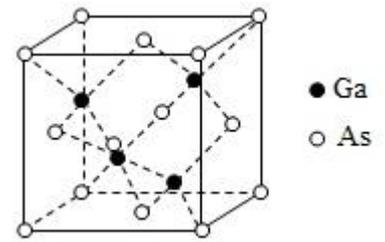
【答案】①3:1 ② $\left[\frac{251}{6.02 \times 10^{23} \times d} \right]^{\frac{1}{3}} \times 10^7$

【解析】①根据均摊法计算，晶胞中铜原子个数为 $6 \times \frac{1}{2} = 3$ ，镍原子的个数为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$ ，则铜和镍的数量比为 3:1。②根据上述分析，该晶胞的组成为 Cu_3Ni ，合金的密度为 $d \text{ g}/\text{cm}^3$ ，根据 $\rho = m \div V = 251 \div [(a^3 \times N_A)] = d$ ，

$1 \text{ cm} = 10^7 \text{ nm}$ ，则晶胞参数 $a = \left[\frac{251}{6.02 \times 10^{23} \times d} \right]^{\frac{1}{3}} \times 10^7 \text{ nm}$ 。



15. 【2016 年高考新课标Ⅲ卷】GaAs 的熔点为 1238℃，密度为 $\rho \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ，其晶胞结构如图所示。该晶体的类型为_____，Ga 与 As 以_____键键合。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 $r_{\text{As}} \text{pm}$ ，阿伏伽德罗常数值为 N_A ，则 GaAs 晶胞中原子的体积占晶胞体积的百分率为_____。



$$\frac{4\pi N_A \rho (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3)}{3(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})} \times 100\%$$

【答案】原子晶体；共价键；

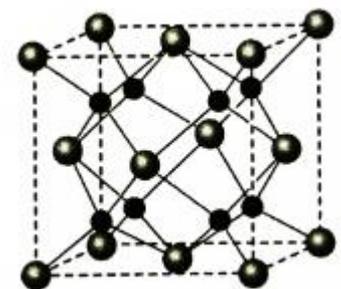
【解析】由于 GaF_3 是离子晶体， GaCl_3 是分子晶体，所以离子晶体 GaF_3 的熔沸点高；GaAs 的熔点为 1238℃，密度为 $\rho \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ，其晶胞结构如图所示，熔点很高，所以晶体的类型为原子晶体，其中 Ga 与 As 以共价键键合。

$$\frac{4}{N_A} \times (M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})$$

根据晶胞晶胞可知晶胞中 Ga 和 As 的个数均是 4 个，所以晶胞的体积是 $\frac{4}{N_A} \times (M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}}) / \rho$ 。二者的原子半径分别为 $r_{\text{Ga}} \text{pm}$ 和 $r_{\text{As}} \text{pm}$ ，阿伏伽德罗常数值为 N_A ，则 GaAs 晶胞中原子的体积占晶胞体积的百分率为

$$\frac{4 \times \frac{4}{3} \pi (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3)}{\frac{4}{N_A} \times (M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}}) / \rho} \times 100\% = \frac{4\pi N_A \rho (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3)}{3(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})} \times 100\%$$

16. 【2015 新课标Ⅱ卷理综化学】(5) O 和 Na 能够形成化合物 F，其晶胞结构如图所示，晶胞参数， $a = 0.566 \text{nm}$ ，F 的化学式为_____；晶胞中 A 原子的配位数为_____；列式计算晶体 F 的密度($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$)_____。

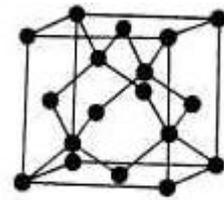


【答案】 Na_2O ；8； $\frac{4 \times 62 \text{g/mol}}{(0.566 \times 10^{-7} \text{cm})^3 \times 6.02 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}} = 2.27 \text{g/cm}^3$

【解析】：根据晶胞结构可知氧原子的个数 = $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ，Na 全部在晶胞中，共计是 8 个，则 F 的化学式为 Na_2O 。以顶点氧原子为中心，与氧原子距离最近的钠原子的个数 8 个，即晶胞中 A 原子的配位数为 8。晶体 F 的

密度 = $\frac{m}{V} = \frac{4 \times 62 \text{g/mol}}{(0.566 \times 10^{-7} \text{cm})^3 \times 6.02 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}} = 2.27 \text{g/cm}^3$

17. 【2014 年高考海南卷】金刚石的结构图：金刚石晶胞含有_____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）。



【答案】 $8 \times \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{16}$

【解析】共价金刚石的立体网状结构金刚石晶胞，属 A4 型，顶点 8 个，相当于 1 个 C 原子，然后面心上 6 个，相当于 3 个 C 原子，而在其 8 个四面体空隙中有一半也是 C 原子，且在晶胞内，故还有 4 个 C 原子，加在一起，可得一个金刚石晶胞中有 8 个 C 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，则正方体

对角线的 $\frac{1}{4}$ 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

$$\omega = \frac{8 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{8 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}}{8}a\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{16}$$

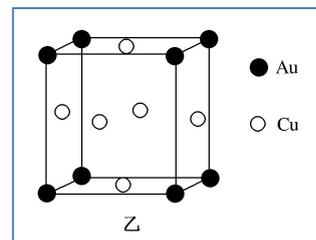
18. 【2014 年高考新课标 I 卷第 37 题】铝单质为面心立方晶体，其晶胞参数 $a = 0.405\text{nm}$ ，晶胞中铝原子的配位数为_____。列式表示铝单质的密度_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (不必计算出结果)

【答案】 12； $\rho = \frac{4 \times 27}{N_A \cdot (4.05 \times 10^{-8})^3}$

【解析】因为 Al 是立方面心结构，所以在一个晶胞中含有的 Al 原子的个数是 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 。单 Al 的密度

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{4 \times 27\text{g}}{N_A \cdot (0.405 \times 10^{-7}\text{cm})^3} = \frac{4 \times 27}{N_A \cdot (4.05 \times 10^{-8})^3} \text{g/cm}^3$$

19. (2018·河北三市联考)(5)铜与金形成的金属互化物的晶胞结构如图乙所示，其晶胞边长为 $a\text{nm}$ ，那么该金属互化物的密度为_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (用含 a 、 N_A 的代数式表示)。



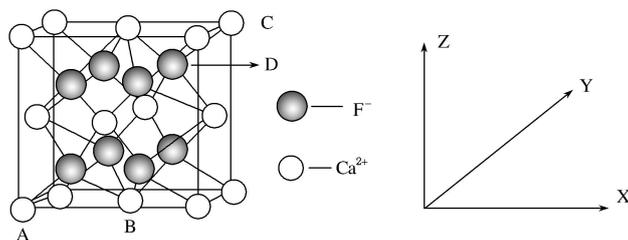
【答案】 $\frac{3.89 \times 10^{23}}{a^3 N_A}$ (或其他合理答案)

【解析】根据均摊法，铜与金形成的金属互化物晶胞中 Cu 的个数为 $6 \times \frac{1}{2} = 3$ ，Au 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$ ，该金属互

化物的化学式为 Cu_3Au ，该金属互化物的密度为 $\frac{\frac{1}{N_A} \times 3 \times 64 + 1 \times 197}{a \times 10^{-7} \text{ }^3} \text{g}\cdot\text{cm}^{-3} = \frac{3.89 \times 10^{23}}{a^3 N_A} \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

20. (2018·东莞质检)晶胞有两个基本要素：①原子坐标参数：表示晶胞内部各微粒的相对位置。下图是 CaF_2 的

晶胞，其中原子坐标参数 A 处为 $(0,0,0)$ ；B 处为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ；C 处为 $(1,1,1)$ 。则 D 处微粒的坐标参数为_____。



②晶胞参数：描述晶胞的大小和形状。已知 CaF_2 晶体的密度为 $c \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，则晶胞中 Ca^{2+} 与离它最近的 F^- 之间的距离为_____ nm (设 N_A 为阿伏加德罗常数的值，用含 c 、 N_A 的式子表示；相对原子质量：Ca—40 F—19)。

【答案】 $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ $\frac{\sqrt{3}}{4} \times \sqrt[3]{\frac{78 \times 4}{c N_A} \times 10^7}$ 或 $\frac{\sqrt{3}}{4} \times \sqrt[3]{\frac{312}{c N_A} \times 10^7}$

【解析】 氟化钙晶胞中，阳离子 Ca^{2+} 呈立方密堆积，阴离子 F^- 填充在四面体空隙中，面心立方点阵对角线的 $\frac{1}{4}$ 和 $\frac{3}{4}$ 处；根据晶胞中 D 点的位置看出，D 点的位置均为晶胞中 $\frac{3}{4}$ 处；已知一个氟化钙晶胞中有 4 个氟化钙；设晶胞中棱长为 $L \text{ cm}$ ；氟化钙的式量为 78；根据密度计算公式： $\rho = m/V = 4 \times 78 / N_A \times L^3 = c$ ，所以 $L =$

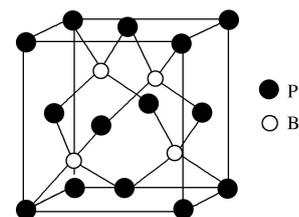
$\sqrt[3]{\frac{78 \times 4}{c N_A}}$ ，由晶胞中结构看出，与 Ca^{2+} 最近的 F^- 距离为 $\frac{\sqrt{3}}{4} L$ ，即 $\frac{\sqrt{3}}{4} \times \sqrt[3]{\frac{78 \times 4}{c N_A}} \text{ cm} = \frac{\sqrt{3}}{4} \times \sqrt[3]{\frac{78 \times 4}{c N_A} \times 10^7} \text{ nm}$ 。

21. (2018·广东五校诊断)磷化硼(BP)是一种超硬耐磨涂层材料，图甲为其晶胞，硼

原子与磷原子最近的距离为 $a \text{ cm}$ 。用 $M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 表示磷化硼的摩尔质量， N_A 表示

阿伏加德罗常数的值，则磷化硼晶体的密度为_____。

【答案】 (4) $\frac{3\sqrt{3}M}{16N_A a^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (其他合理答案均可)



【解析】 设该晶胞的边长为 $x \text{ cm}$ ，硼原子与磷原子最近的距离为晶胞体对角线的 $\frac{1}{4}$ ，则 $\frac{\sqrt{3}}{4} x = a$ ， $x = \frac{4}{\sqrt{3}} a$ 。该

晶胞中含有的 B 原子数为 4，P 原子数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ，即含有 4 个 BP，故磷化硼晶体的密度为 $\frac{M \times 4}{N_A} \text{ g} \div$

$(\frac{4}{\sqrt{3}} a \text{ cm})^3 = \frac{3\sqrt{3}M}{16N_A a^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

22. 前四周期原子序数依次增大的元素 A、B、C、D 中，A 和 B 的价电子层中未成对电子均只有 1 个，并且 A^- 和 B^+ 的电子数相差为 8；与 B 位于同一周期的 C 和 D，它们价电子层中的未成对电子数分别为 4 和 2，且原子序数相差为 2。

回答下列问题：

A、B 和 D 三种元素组成的一个化合物的晶胞如图所示。

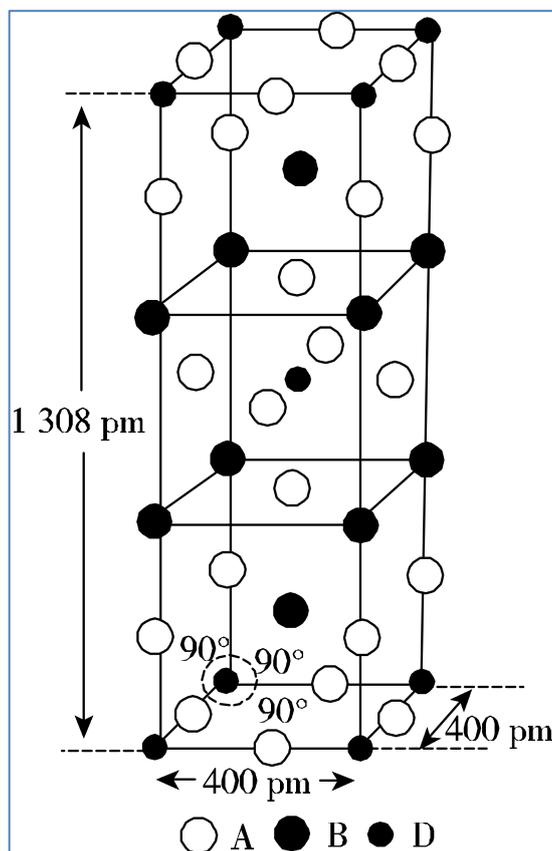
(1) 该化合物的化学式为 _____；D 的配位数为 _____。

(2) 列式计算该晶体的密度为 _____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

【答案】 (1) K_2NiF_4 6

$$(2) \frac{39 \times 4 + 59 \times 2 + 19 \times 8}{6.02 \times 10^{23} \times 400^2 \times 1308 \times 10^{-30}} = 3.4$$

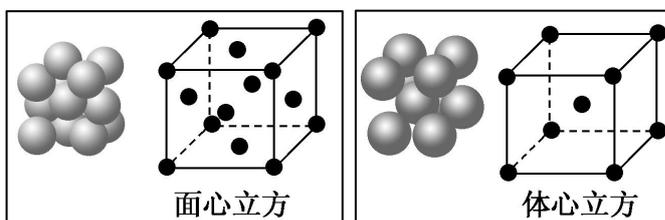
【解析】 根据分摊法，可以求得化合物的化学式为 K_2NiF_4 ，晶体的密度可由晶胞的质量除以晶胞的体积求得。



23. 单质铁的晶体在不同温度下有两种堆积方式，晶胞分别如图所示，面心立方晶胞和体心立方晶胞中实际含有的铁原子个数之比为 _____，面心立方堆积与体心立方堆积的两种铁晶体的晶胞参数分别为 a pm 和 b

pm，则 $\frac{a}{b} =$ _____。

【答案】 2 : 1 $\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}$



【解析】 面心立方晶胞中 Fe 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ，体心立方晶胞中 Fe 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ ，故铁原子个数比为 2 : 1。

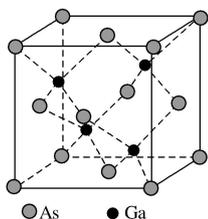
设铁原子的半径为 r pm，根据题图，面心立方晶胞中面对角线为 $\sqrt{2}a = 4r$ ， $a = \frac{4}{\sqrt{2}}r$ ，体心立方晶胞中体对角线为 $\sqrt{3}b = 4r$ ， $b = \frac{4}{\sqrt{3}}r$ ，故 $\frac{a}{b} = \frac{\frac{4}{\sqrt{2}}r}{\frac{4}{\sqrt{3}}r} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}$ 。

24. 砷化镓(GaAs)是优良的半导体材料,可用于制作微型激光器或太阳能电池的材料等。请回答下列问题:

GaAs 的熔点为 1 238 °C,密度为 $\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$,其晶胞结构如图所示。该晶体的类型为_____ ,Ga 与 As 以_____

键键合。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_A , 则 GaAs 晶胞中原子的体积占晶胞体积的百分率为_____。



【答案】 原子晶体 共价
$$\frac{4\pi N_A \rho}{3} \frac{r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3 \times 10^{-30}}{M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}}} \times 100\%$$

【解析】 (2)GaAs 的熔点为 1 238 °C, 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

键合。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 $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$ (个),

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 $V_{\text{晶胞}} = 4(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})/\rho N_A \text{ cm}^3$, 故 GaAs 晶胞

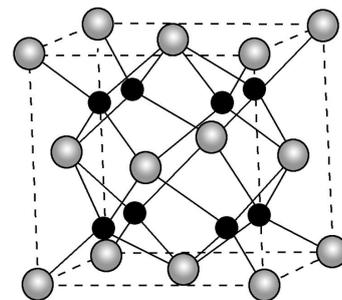
中原子的体积占晶胞体积的百分率为
$$\frac{V_{\text{原子}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{\frac{16}{3} \pi \times 10^{-30} (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3) \text{ cm}^3}{\frac{4}{\rho N_A} (M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}}) \text{ cm}^3} \times 100\% =$$

$$\frac{4\pi N_A \rho}{3} \frac{r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3 \times 10^{-30}}{M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}}} \times 100\%。$$

25.(2015•全国卷II, 37) A 和 B 能够形成化合物 F, 其晶胞结构如图所示, 晶胞

参数 $a = 0.566 \text{ nm}$, F 的化学式为_____ ; 晶胞中 A 原子的配位数为_____ ;

列式计算晶体 F 的密度($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$)_____。



【答案】 Na_2O $8 \frac{4 \times 62 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}}{0.566 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 \times 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} \approx 2.27 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$

【解析】 (5)根据化合物 F 的晶胞结构, 利用均摊法可计算出氧原子个数: $N(\text{O}) = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$, 钠原子全部

在晶胞内, $N(\text{Na}) = 8$, 因此 F 的化学式为 Na_2O ; 以顶角氧原子为中心, 与氧原子距离最近且等距离的钠原子有

8 个, 即晶胞中 A 原子的配位数为 8; 晶胞参数即晶胞的棱长 $a = 0.566 \text{ nm}$,

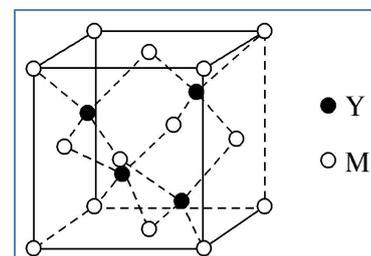
晶体 F 的密度 $\rho = \frac{m}{V} = \frac{4 \times 62 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}}{0.566 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 \times 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} \approx 2.27 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。



26. M 与 Y (Cu 与 Cl)形成的一种化合物的立方晶胞如图所示。①该化合物的化学

式为_____ , 已知晶胞参数 $a = 0.542 \text{ nm}$, 此晶体的密度为

_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。



(写出计算式, 不要求计算结果。阿伏加德罗常数为 N_A)

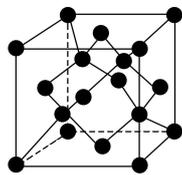
【答案】 ① CuCl $\frac{4 \times 99.5}{N_A \times 0.542^3 \times 10^{-21}}$ (或 $\frac{4 \times M \text{ CuCl}}{N_A \times a^3 \times 10^{-21}}$)

【解析】 ①根据晶胞结构利用均摊法分析, 每个晶胞中含有铜原子个数为 $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$, 氯原子个数为 4,

该化合物的化学式为 CuCl ; 则 1 mol 晶胞中含有 4 mol CuCl , 1 mol 晶胞的质量为 $4 \times 99.5 \text{ g}$, 又晶胞参数 a

$= 0.542 \text{ nm}$, 此晶体的密度为 $\frac{4 \times 99.5}{N_A \times 0.542^3 \times 10^{-21}}$ 或 $\frac{4 \times M \text{ CuCl}}{N_A \times a^3 \times 10^{-21}} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

27.(2016·湖南省怀化市高三下学期第一次模拟)金刚石晶胞结构模型如下图,立方 BN 结构与金刚石相似,硬度与金刚石相当。在立方 BN 晶体中,B 原子与 N 原子之间共价键与配位键数目比为_____ ;每个 N 原子周围最近且等距离的 N 原子数为_____ ;如果阿伏加德罗常数近似取 $6 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$,立方 BN 的密度为 $a \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$,摩尔质量为 $b \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$,计算晶体中最近的两个 N 原子间距离是_____ nm(用含 a 、 b 代数式表示)。



【答案】 $3 : 1$ 12 $\frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{b}{150a}}$

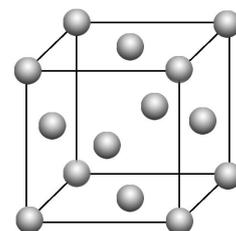
【解析】由金刚石的晶胞结构可知,晶胞内部有 4 个碳原子,面心上有 6 个碳原子,顶点有 8 个碳原子,在 BN 晶体中,每个 B 原子和 4 个 N 原子形成共价键,B 原子的配位数为 4,B 原子与 N 原子之间共价键的数目是 12,所以 B 原子和 N 原子之间共价键的数目与配位键的数目比为 $3 : 1$ 。根据晶胞结构图,以晶胞顶点上的氮原子为例,与该氮原子距离最近的氮原子位于经过该顶点的面的面心上,这样的原子有 12 个,根据均摊可知,一个晶胞中氮

原子数目为 4,B 原子数目也是 4,则根据密度 = 质量/体积,可知晶胞的体积为 $V = \frac{4b}{6 \times 10^{23} a} \text{ cm}^3$,所以晶胞的边

长为 $\sqrt[3]{\frac{4b}{6 \times 10^{23} a}} \text{ cm}$,最近的两个氮原子间距是晶胞面对角线的一半,所以晶体中最近的两个氮原子间距是 $\frac{1}{2} \times$

$$\sqrt{2} \times \sqrt[3]{\frac{4b}{6 \times 10^{23} a}} \text{ cm} = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{4b}{6 \times 10^{23} a}} \text{ cm} = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{b}{150a}} \text{ nm}。$$

28. 黄铜合金可以表示为 Cu_3Zn ,为面心立方晶胞,晶体密度为 $8.5 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$,求晶胞的边长(只写计算式,不求结果)_____。



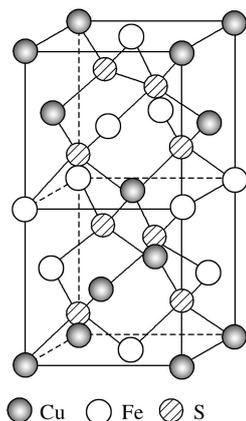
【答案】 $\sqrt[3]{\frac{257}{8.5 N_A}} \text{ cm}$ (或 $\sqrt[3]{\frac{257}{8.5 \times 6.02 \times 10^{23}}} \text{ cm}$)

【解析】1 mol 晶胞所占有的体积为 $V = \frac{M}{\rho} = \frac{3 \times 64 + 65}{8.5} \text{ cm}^3 = \frac{257}{8.5} \text{ cm}^3$,而每个晶胞的体积为 $V_0 = \frac{V}{N_A} = \frac{257}{8.5 N_A}$

cm^3 ,则晶胞的边长为 $a = \sqrt[3]{V_0} = \sqrt[3]{\frac{257}{8.5 N_A}} \text{ cm}。$

29.(5)CuFeS₂的晶胞如图所示，晶胞参数 $a = 0.524 \text{ nm}$ ， $c = 1.032 \text{ nm}$ ；CuFeS₂的晶胞中每个 Cu 原子与

_____个 S 原子相连，列式计算晶体密度 $\rho =$ _____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。



答案 (5) $4 \frac{4 \times 184 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}}{0.524 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 \times 1.032 \times 10^{-7} \text{ cm} \times 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} \approx 4.31 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$

解析 由图可看出，每个铜原子与 4 个 S 原子相连。棱心原子占 1/4，体心占 1，面心占 1/2，顶点占 1/8，晶体

密度计算公式为 $\frac{4 \times 184 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}}{0.524 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 \times 1.032 \times 10^{-7} \text{ cm} \times 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} \approx 4.31 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

30.(2016·福建省漳州八校高三下学期第三次联考) 有一种氮化钛晶体的晶胞与 NaCl 晶胞相似，如图 3 所示，该晶胞中 N、Ti 之间最近距离为 $a \text{ pm}$ ，则该氮化钛的密度为 _____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$

(N_A 为阿伏加德罗常数的值，只列计算式)。该晶体中与 N 原子距离相等且最近的 N 原子有 _____ 个。

【答案】：(4) $\frac{4 \times 62}{N_A \times (2a \times 10^{-10})^3} \quad 12$

【解析】 根据均摊法，可知该晶胞中 N 原子个数为 $6 \times 1/2 + 8 \times 1/8 = 4$ ，该晶胞中 Ti 原子个数为 $1 + 12 \times 1/4$

$= 4$ ，所以晶胞的质量 $m = \frac{4 \times 62}{N_A} \text{ g}$ ，而晶胞的体积 $V = (2a \times 10^{-10})^3 \text{ cm}^3$ ，所以晶体的密度 $\rho = \frac{4 \times 62}{N_A \times (2a \times 10^{-10})^3}$

$\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ；以晶胞顶点 N 原子研究，与之距离相等且最近的 N 原子处于面心位置，每个顶点为 8 个晶胞共用，每

个面为 2 个晶胞共用，故与之距离相等且最近的 N 原子为 $\frac{3 \times 8}{2} = 12$ 。

微信公众号:一轮大化学



微信

