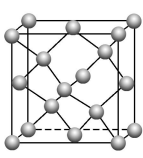
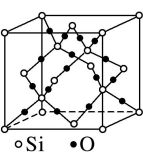
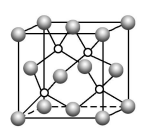


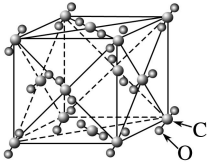
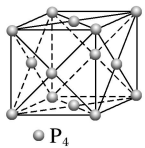
晶胞的结构及相关计算

一、晶胞的结构

1. 常见原子晶体结构

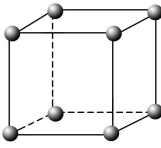
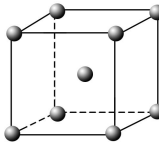
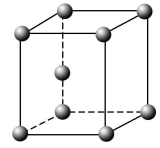
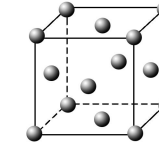
晶体	晶体结构	结构分析
金刚石		(1)每个 C 与相邻 4 个 C 以共价键结合, 形成正四面体结构 (2)键角均为 $109^{\circ} 28'$ (3)最小碳环由 6 个 C 组成且 6 个 C 不在同一平面内 (4)每个 C 参与 4 个 C—C 键的形成, C 原子数与 C—C 键数之比为 1 : 2 (5)密度 = $\frac{8 \times 12 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$ (a 为晶胞边长, N_A 为阿伏加德罗常数)
SiO ₂		(1)每个 Si 与 4 个 O 以共价键结合, 形成正四面体结构 (2)每个正四面体占有 1 个 Si, 4 个 " $\frac{1}{2}$ O", 因此二氧化硅晶体中 Si 与 O 的个数比为 1 : 2 (3)最小环上有 12 个原子, 即 6 个 O, 6 个 Si (4)密度 = $\frac{8 \times 60 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$ (a 为晶胞边长, N_A 为阿伏加德罗常数)
SiC、AlN		(1)每个原子与另外 4 个不同种类的原子形成正四面体结构 (2)密度 : $\rho(\text{SiC}) = \frac{4 \times 40 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$; $\rho(\text{AlN}) = \frac{4 \times 41 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$ (a 为晶胞边长, N_A 为阿伏加德罗常数)

2. 常见分子晶体结构分析

晶体	晶体结构	结构分析
干冰		<p>(1) 每 8 个 CO₂ 构成 1 个立方体且在 6 个面的面心又各有 1 个 CO₂</p> <p>(2) 每个 CO₂ 分子周围紧邻的 CO₂ 分子有 12 个</p> <p>(3) 密度 = $\frac{4 \times 44 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$ (a 为晶胞边长, N_A 为阿伏加德罗常数)</p>
白磷		<p>(1) 面心立方最密堆积</p> <p>(2) 密度 = $\frac{4 \times 124 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$ (a 为晶胞边长, N_A 为阿伏加德罗常数)</p>

3. 常见金属晶体结构分析

(1) 金属晶体的四种堆积模型分析

堆积模型	简单立方堆积	体心立方堆积	六方最密堆积	面心立方最密堆积
晶胞				
配位数	6	8	12	12
原子半径(r)和晶胞边长(a)的关系	$2r = a$	$2r = \frac{\sqrt{3}a}{2}$		$2r = \frac{\sqrt{2}a}{2}$
一个晶胞内原子数目	1	2	2	4
原子空间利用率	52%	68%	74%	74%

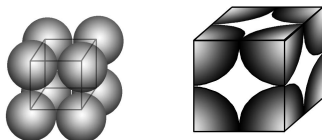
(2) 金属晶胞中原子空间利用率计算

空间利用率 = $\frac{\text{球体积}}{\text{晶胞体积}} \times 100\%$, 球体积为金属原子的总体积。

① 简单立方堆积

如图所示, 原子的半径为 r , 立方体的棱长为 $2r$, 则 $V_{\text{球}} = \frac{4}{3}\pi r^3$, $V_{\text{晶胞}} = (2r)^3 =$

$$8r^3, \text{ 空间利用率} = \frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{8r^3} \times 100\% \approx 52\%.$$

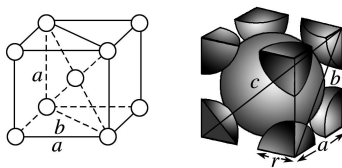


② 体心立方堆积

如图所示, 原子的半径为 r , 体对角线 c 为 $4r$, 面对角线 b 为 $\sqrt{2}a$, 由 $(4r)^2 = a^2 + b^2$ 得 $a =$

$$\frac{4}{\sqrt{3}}r. \text{ 1 个晶胞中有 2 个原子, 故空间利用率} = \frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}r\right)^3} \times 100\% =$$

$$\frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{64}{3\sqrt{3}}r^3} \times 100\% \approx 68\%.$$

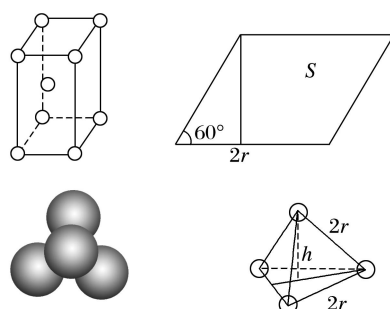


③ 六方最密堆积

如图所示, 原子的半径为 r , 底面为菱形(棱长为 $2r$, 其中一个角为 60°), 则底

面面积 $S = 2r \times \sqrt{3}r = 2\sqrt{3}r^2$, $h = \frac{2\sqrt{6}}{3}r$, $V_{\text{晶胞}} = S \times 2h = 2\sqrt{3}r^2 \times 2 \times \frac{2\sqrt{6}}{3}r = 8\sqrt{2}r^3$

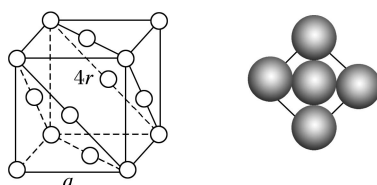
$$\text{个晶胞中有 2 个原子, 则空间利用率} = \frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{8\sqrt{2}r^3} \times 100\% \approx 74\%.$$



④面心立方最密堆积

如图所示，原子的半径为 r ，面对角线为 $4r$ ， $a = 2\sqrt{2}r$ ， $V_{\text{晶胞}} = a^3 = (2\sqrt{2}r)^3 =$

$16\sqrt{2}r^3$ 。1 个晶胞中有 4 个原子，则空间利用率 $= \frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{16\sqrt{2}r^3} \times 100\% \approx 74\%$ 。



(3)晶体微粒与 M 、 ρ 之间的关系

若 1 个晶胞中含有 x 个微粒，则 1 mol 该晶胞中含有 $x \text{ mol}$ 微粒，其质量为 $xM \text{ g}$ (M 为微粒的相对分子质量)；若该晶胞的质量为 $\rho a^3 \text{ g}$ (a^3 为晶胞的体积)，则 1 mol 晶胞的质量为 $\rho a^3 N_A \text{ g}$ ，因此有 $xM = \rho a^3 N_A$ 。

4. 常见离子晶体结构分析

(1)典型离子晶体模型

		NaCl 型	CsCl 型	ZnS 型	CaF ₂ 型
晶胞					
配位数及影响因素	配位数	6	8	4	F ⁻ : 4; Ca ²⁺ : 8
	影响因素	阳离子与阴离子的半径比值越大，配位数越多，另外配位数还与阴、阳离子的电荷比有关等			
密度的计算(a 为晶胞边长， N_A 为阿伏加德罗常数)		$\frac{4 \times 58.5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$	$\frac{168.5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$	$\frac{4 \times 97 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$	$\frac{4 \times 78 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$

(2)晶格能

①定义：气态离子形成 1 摩离子晶体释放的能量。晶格能是反映离子晶体稳定性的数据，可以用来衡量离子键的强弱，晶格能越大，离子键越强。

②影响因素：晶格能的大小与阴阳离子所带电荷、阴阳离子间的距离、离子晶体的结构类型有关。离子所带电荷越多，半径越小，晶格能越大。

③对离子晶体性质的影响：晶格能越大，形成的离子晶体越稳定，而且熔点越高，硬度越大。

二：晶胞结构的相关计算

考前 23 天，特整合近三年高考中的晶胞结构的相关计算作为专题推出，希望能够给同行教师以及同学们带来帮助，习题整理如下：

2019 · 课标全国 I · T35(4)

2019 · 课标全国 II · T35(4)

2018 · 课标全国 I · T35(5)

2018 · 课标全国 II · T35(5)

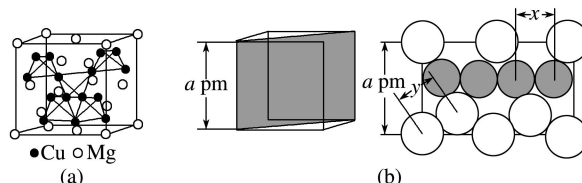
2018 · 课标全国 III · T35(5)

2017 · 课标全国 I · T35 (4) (5)

2017 · 课标全国 III · T35(4)

1. [2019 · 全国卷 I, 35(4)]

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 $x = \text{_____pm}$ ，Mg 原子之间最短距离 $y = \text{_____pm}$ 。设阿伏加德罗常数的值为 N_A ，则 MgCu_2 的密度是 $\text{_____g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (列出计算表达式)。



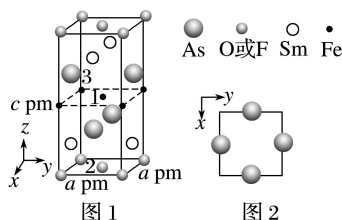
答案 $\frac{\sqrt{2}}{4}a$ $\frac{\sqrt{3}}{4}a$ $\frac{8 \times 24 + 16 \times 64}{N_A a^3 \times 10^{-30}}$

解析 观察图(a)和图(b)知，4 个铜原子相切并与面对角线平行，有 $(4x)^2 = 2a^2$ ， $x = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ 。镁原子堆积方式类似金刚石，有 $y = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ 。已知 $1 \text{ cm} = 10^{10} \text{ pm}$ ，晶胞体

积为 $(a \times 10^{-10})^3 \text{ cm}^3$, 代入密度公式计算即可。

2. [2019 · 全国卷 II, 35(4)]

一种四方结构的超导化合物的晶胞如图 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 O^{2-} 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: $\rho = \text{_____} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。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 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, 则原子 2 和 3 的坐标分别为_____、_____。



答案 $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ $\frac{2[281 + 16(1-x) + 19x]}{a^2 c N_A \times 10^{-30}} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) \left(0, 0, \frac{1}{2}\right)$

解析 由晶胞结构中各原子所在位置可知, 该晶胞中 Sm 的原子个数为 $4 \times \frac{1}{2} = 2$,

Fe 的原子个数为 $1 + 4 \times \frac{1}{4} = 2$, As 的原子个数为 $4 \times \frac{1}{2} = 2$, O 或 F 的原子个数为

$8 \times \frac{1}{8} + 2 \times \frac{1}{2} = 2$, 即该晶胞中 O 和 F 的个数之和为 2, F^- 的比例为 x , O^{2-} 的比例

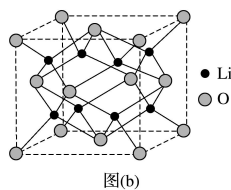
为 $1-x$, 故该化合物的化学式为 $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ 。1 个晶胞的质量为 $\frac{2 \times [150 + 56 + 75 + 16 \times (1-x) + 19x]}{N_A} \text{ g} = \frac{2[281 + 16(1-x) + 19x]}{N_A} \text{ g}$, 1 个晶胞

的体积为 $a^2 c \text{ pm}^3 = a^2 c \times 10^{-30} \text{ cm}^3$, 故密度 $\rho = \frac{2[281 + 16(1-x) + 19x]}{a^2 c N_A \times 10^{-30}} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

原子 2 位于底面面心, 其坐标为 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$; 原子 3 位于棱上, 其坐标为 $\left(0, 0, \frac{1}{2}\right)$ 。

3. [2018 · 全国卷 I, 35(5)]

Li_2O 具有反萤石结构, 晶胞如图(b)所示。已知晶胞参数为 0.4665 nm , 阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则 Li_2O 的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (列出计算式)。

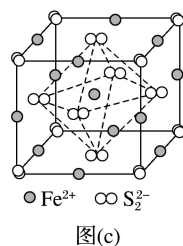


答案 (5) $\frac{8 \times 7 + 4 \times 16}{N_A \cdot 0.4665 \times 10^{-7}^3}$

解析(5)由题给图示可知, Li 位于晶胞内部, O 位于顶点和面心, 因此一个晶胞有 8 个 Li, O 原子个数 $= 6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8} = 4$ 。因此一个 Li_2O 晶胞的质量为 $\frac{8 \times 7 + 4 \times 16}{N_A}$ g, 一个晶胞的体积为 $(0.4665 \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3$, 即该晶体的密度为 $\frac{8 \times 7 + 4 \times 16}{N_A \cdot 0.4665 \times 10^{-7}^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

4. [2018 · 全国卷 II, 35(5)]

FeS_2 晶体的晶胞如图(c)所示。晶胞边长为 $a \text{ nm}$ 、 FeS_2 相对式量为 M 、阿伏加德罗常数的值为 N_A , 其晶体密度的计算表达式为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$; 晶胞中 Fe^{2+} 位于 S_2^{2-} 所形成的正八面体的体心, 该正八面体的边长为_____ nm 。



答案 $\frac{4M}{N_A a^3} \times 10^{21} \quad \frac{\sqrt{2}}{2} a$

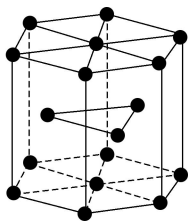
解析 分析晶胞结构可知, Fe^{2+} 位于棱心和体心, S_2^{2-} 位于顶点和面心, 因此每个晶胞中含有的 Fe^{2+} 个数为 $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$, 每个晶胞中含有的 S_2^{2-} 个数为 $6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8} = 4$, 即每个晶胞中含有 4 个 FeS_2 。一个晶胞的质量 $= \frac{4M}{N_A} \text{ g}$, 晶胞的体积 $= (a \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3$, 该晶体的密度 $= \frac{4M}{N_A \cdot a \times 10^{-7}^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = \frac{4M}{N_A a^3} \times 10^{21} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

正八面体的边长即为两个面心点的距离, 因此正八面体的边长为 $\frac{\sqrt{2}}{2} a \text{ nm}$ 。

5. [2018 · 全国卷 III, 35(5)]

金属 Zn 晶体中的原子堆积方式如图所示, 这种堆积方式称为_____。六棱柱底边边长为 $a \text{ cm}$, 高为 $c \text{ cm}$, 阿伏加德罗常数的

值为 N_A , Zn 的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (列出计算式)。



答案 六方最密堆积(A_3 型)
$$\frac{65 \times 6}{N_A \times 6 \times \frac{\sqrt{3}}{4} \times a^2 c}$$

解析 金属 Zn 晶体为六方最密堆积方式(A_3 型)。六棱柱底边边长为 $a \text{ cm}$, 则六棱柱上下底面的面积均为 $6 \times \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 \text{ cm}^2$, 则六棱柱的体积为 $6 \times \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 c \text{ cm}^3$, 锌原子

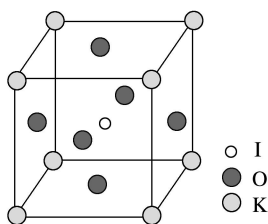
在六棱柱的顶点、上下面心和晶胞内, 一个晶胞含锌原子个数为 $12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} +$

$3 = 6$, 因此一个晶胞中 Zn 的质量 = $\frac{65 \times 6}{N_A} \text{ g}$, 由此可知, Zn 的密度为

$$\frac{65 \times 6}{N_A \times 6 \times \frac{\sqrt{3}}{4} \times a^2 c} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

6. [2017·全国卷 I, 35(4)(5)]

(4) KIO_3 晶体是一种性能良好的非线性光学材料, 具有钙钛矿型的立体结构, 边长为 $a = 0.446 \text{ nm}$, 晶胞中 K、I、O 分别处于顶角、体心、面心位置, 如图所示。K 与 O 间的最短距离为_____ nm , 与 K 紧邻的 O 个数为_____。



(5) 在 KIO_3 晶胞结构的另一种表示中, I 处于各顶角位置, 则 K 处于_____位置, O 处于_____位置。

答案 (4) 0.315 (或 $\frac{\sqrt{2}}{2} \times 0.446$) 12 (5) 体心 棱心

解析 (4) 根据晶胞结构可知, K 与 O 间的最短距离为面对角线的一半, 即 $\frac{\sqrt{2} \times 0.446}{2} \text{ nm} \approx$

0.315 nm 。K、O 构成面心立方, 配位数为 12 (同层 4 个, 上、下层各 4 个)。(5)

由(4)可知 K、I 的最短距离为体对角线的一半, I 处于顶角, K 处于体心, I、O 之间的最短距离为边长的一半, I 处于顶角, O 处于棱心。

7. [2017·全国卷Ⅱ, 35(4)]

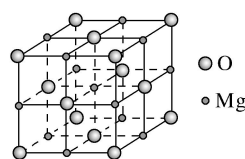
R 的晶体密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 其立方晶胞参数为 $a \text{ nm}$, 晶胞中含有 y 个 $[(\text{N}_5)_6(\text{H}_3\text{O})_3(\text{NH}_4)_4\text{Cl}]$ 单元, 该单元的相对质量为 M , 则 y 的计算表达式为_____。

答案 $\frac{602a^3d}{M}$ (或 $\frac{a^3dN_A}{M} \times 10^{-21}$)

解析 根据密度的定义: $d = \frac{\frac{y}{N_A} \times M}{a \times 10^{-7}^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 解得 $y = \frac{d \times a \times 10^{-7}^3 \times N_A}{M}$
 $= \frac{602a^3d}{M}$ (或 $\frac{a^3dN_A}{M} \times 10^{-21}$)。

8. [2017·全国卷Ⅲ, 35(5)]

MgO 具有 NaCl 型结构(如图), 其中阴离子采用面心立方最密堆积方式, X 射线衍射实验测得 MgO 的晶胞参数为 $a = 0.420 \text{ nm}$, 则 $r(\text{O}^{2-})$ 为_____nm。MnO 也属于 NaCl 型结构, 晶胞参数为 $a' = 0.448 \text{ nm}$, 则 $r(\text{Mn}^{2+})$ 为_____nm。



答案 0.148 0.076

解析 由题意知在 MgO 中, 阴离子采用面心立方最密堆积方式, 氧离子沿晶胞的面对角线方向接触, 所以 $\frac{\sqrt{2}}{2}a = 2r(\text{O}^{2-})$, $r(\text{O}^{2-}) \approx 0.148 \text{ nm}$; MnO 的晶胞参数比 MgO 更大, 说明阴离子之间不再接触, 阴、阳离子沿坐标轴方向接触, 故 $2[r(\text{Mn}^{2+}) + r(\text{O}^{2-})] = a'$, $r(\text{Mn}^{2+}) = 0.076 \text{ nm}$ 。

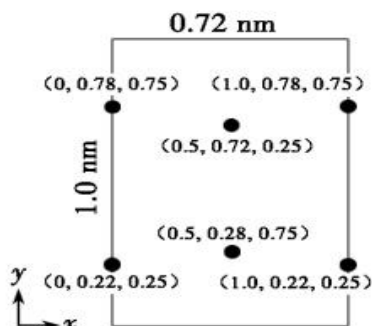
【模拟汇编 30 道】

1.[福建省莆田市 2020 届 3 月质量检测(5)]

2019 年诺贝尔化学奖授予三位化学家, 以表彰其对研究开发锂离子电池作出的卓越贡献。LiFePO₄、聚乙二醇、LiPF₆、LiAsF₆ 和 LiCl 等可作锂离子电池的材料。回答下列问题:

(5) 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。LiCl·3H₂O 属正交晶系 (长方体形)。晶胞参数为 0.72 nm、1.0 nm、0.56 nm。如图为沿 x 轴投影的晶胞中所有 Cl 原子的分布图和原子分

数坐标。据此推断该晶胞中 Cl 原子的数目为_____。LiCl · 3H₂O 的摩尔质量为 $M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，设 N_A 为阿伏加德罗常数的值，则 LiCl · 3H₂O 晶体的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (列出计算表达式)。

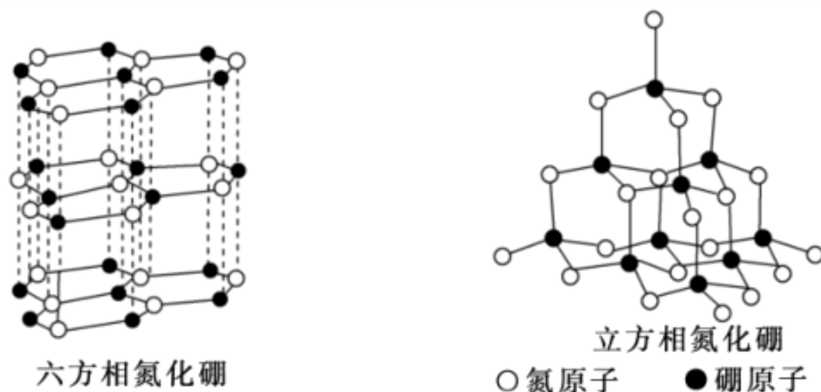


(5) 如图为沿 x 轴投影的晶胞中所有 Cl 原子的分布图和原子分数坐标。其中 2 个 Cl 原子在晶胞内部，4 个 Cl 在晶胞的面上，则该晶胞中 Cl 原子的数目为 $2 + 4 \times \frac{1}{2} = 4$ 个；晶胞参数为 0.72 nm、1.0 nm、0.56 nm。则晶胞的体积为 $0.72 \text{ nm} \times 1.0 \text{ nm} \times 0.56 \text{ nm} = (0.72 \times 1.0 \times 0.56) \text{ nm}^3 = (0.72 \times 1.0 \times 0.56 \times 10^{-21}) \text{ cm}^3$ ，晶胞中含有 4 个 Cl 原子，即含有 4 个 LiCl · 3H₂O，则晶胞的质量为 $\frac{4M}{N_A} \text{ g}$ ，则 LiCl · 3H₂O 晶体的密度为

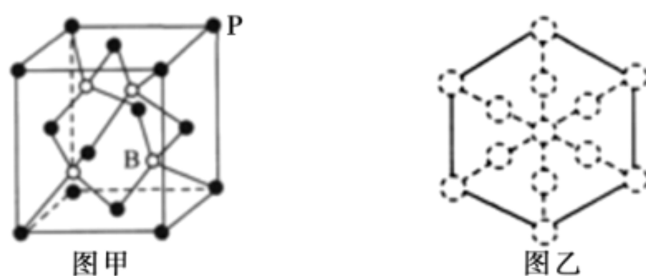
$$\frac{\frac{4M}{N_A} \text{ g}}{(0.72 \times 1.0 \times 0.56 \times 10^{-21}) \text{ cm}^3} = \frac{4M \times 10^{21}}{1.0 \times 0.72 \times 0.56 \times N_A} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

2.[安徽省蚌埠市 2020 届第三次质检(6)]

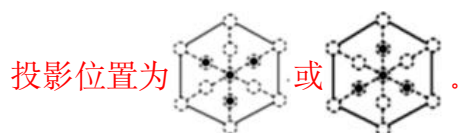
磷化硼是一种典型的超硬无机材料，常以 BCl₃、PH₃ 为原料制备，氮化硼(BN)和磷化硼相似。六方相氮化硼是通常存在的稳定相，与石墨相似，具有层状结构，可作高温润滑剂，立方相氮化硼是超硬材料，有优异的耐磨性。晶体多种相结构如图所示。



(6) 磷化硼晶胞的示意图如图甲所示，其中实心球表示 P 原子，空心球表示 B 原子，晶胞中 P 原子空间堆积方式为_____；
 设阿伏加德罗常数的值为 N_A ，晶胞参数为 $a\text{ cm}$ ，磷化硼晶体的密度为_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ；
 若磷化硼晶胞沿着体对角线方向的投影如图乙所示（虚线圆圈表示 P 原子的投影），请在图乙中用实心圆点画出 B 原子的投影位置_____。



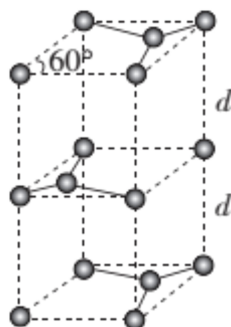
(6) 磷化硼晶胞中，P 原子分布在面心和顶点，由此可确定空间堆积方式为面心立方最密堆积；在磷化硼晶胞中，含有 P 原子的个数为 $\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$ ，含有 B 原子个数为 4，由此可求出 1 个晶胞的质量，再由晶胞参数 $a\text{ cm}$ ，可求出晶胞的体积，由此求出磷化硼晶体的密度 $\rho = \frac{m}{V} = \frac{11 \times 4 + 31 \times 4}{N_A \times a^3}$ ；若磷化硼晶胞沿着体对角线方向的投影如图乙所示（虚线圆圈表示 P 原子的投影），则 B 原子与面心中的 P 原子间隔重叠，则在图乙中用实心圆点画出 B 原子的



3. [广东福建等省 2020 届 4 月联考]

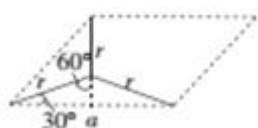
碳、磷、硫等元素形成的单质和化合物在生活、生产中有重要的用途。

(6) 石墨的晶胞结构如图所示。已知石墨的密度为 $\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, C-C 键的键长为 $r \text{ cm}$, N_A 为阿伏加德罗常数的值, 则石墨晶体的层间距 $d=$ _____cm。



(6) 晶胞中 C 原子的数目为 $1+2\times\frac{1}{2}+8\times\frac{1}{8}+4\times\frac{1}{4}=4$, 所以晶胞质量为 $\frac{4\times 12}{N_A} \text{ g}$;

设晶胞的底边长为 $a \text{ cm}$, 晶胞的高为 $h \text{ cm}$, 层间距为 $d \text{ cm}$, 则 $h=2d$, 底面

图为 , 则 $\frac{a}{2}=r\times\sin 60^\circ$, 所以 $a=\sqrt{3}r$, 则底面面积为

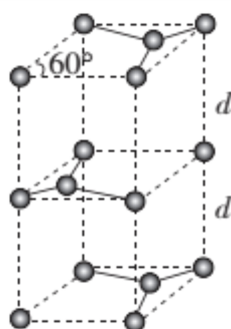
$(\sqrt{3}r)^2\times\sin 60^\circ \text{ cm}^2$, 则晶胞体积为 $V=\left[(\sqrt{3}r)^2\times\sin 60^\circ\times 2d\right] \text{ cm}^3$, 所以有

$$\frac{\frac{4\times 12}{N_A} \text{ g}}{\left[(\sqrt{3}r)^2\times\sin 60^\circ\times 2d\right] \text{ cm}^3}=\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}, \text{ 解得 } d=\frac{16\sqrt{3}}{3N_A r^2 \rho}.$$

4.[广东福建等省 2020 届 4 月联考]

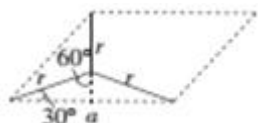
碳、磷、硫等元素形成的单质和化合物在生活、生产中有重要的用途。

(6) 石墨的晶胞结构如图所示。已知石墨的密度为 $\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, C-C 键的键长为 $r \text{ cm}$, N_A 为阿伏加德罗常数的值, 则石墨晶体的层间距 $d=$ _____cm。



(6) 晶胞中 C 原子的数目为 $1+2\times\frac{1}{2}+8\times\frac{1}{8}+4\times\frac{1}{4}=4$ ，所以晶胞质量为 $\frac{4\times 12}{N_A}\text{g}$ ；

设晶胞的底边长为 $a\text{cm}$ ，晶胞的高为 $h\text{cm}$ ，层间距为 $d\text{cm}$ ，则 $h=2d$ ，底面

图 2 为 ，则 $\frac{a}{2}=r\times\sin 60^\circ$ ，所以 $a=\sqrt{3}r$ ，则底面面积为

$(\sqrt{3}r)^2\times\sin 60^\circ\text{cm}^2$ ，则晶胞体积为 $V=[(\sqrt{3}r)^2\times\sin 60^\circ\times 2d]\text{cm}^3$ ，所以有

$$\frac{\frac{4\times 12}{N_A}\text{g}}{[(\sqrt{3}r)^2\times\sin 60^\circ\times 2d]\text{cm}^3}=\rho\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}, \text{ 解得 } d=\frac{16\sqrt{3}}{3N_A r^2 \rho}.$$

5.[安徽省合肥市 2020 届第二次质检]

硒 (Se) 是一种非金属元素。可以用作光敏材料、电解锰行业催化剂、动物体必需的营养元素和植物有益的营养元素等。请回答下列问题：

(4) 硒化锌 (ZnSe) 是一种重要的半导体材料，其晶胞结构如上图 2 所示，其中阴离子采用面心立方最密堆积方式，X 射线衍射实验测得 ZnSe 的晶胞参数 $a=0.560\text{nm}$ ，则 Se^{2-} 的离子半径 $r(\text{Se}^{2-})= \text{nm}$ (计算结果保留 3 位有效数字，下同)；硒化锌晶体的密度为 $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

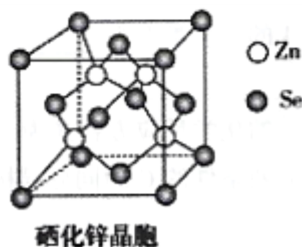


图 2

(4) Se^{2-} 采取面心立方最密堆积方式，设 $r(\text{Se}^{2-})=r\text{nm}$ ，则 $4r=\sqrt{2}a$ ，解得 $r\approx 0.198$ ；

一个晶胞中含有 Se^{2-} 个数为 $8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}=4$ ，含有 Zn^{2+} 个数为 4，硒化锌晶体的

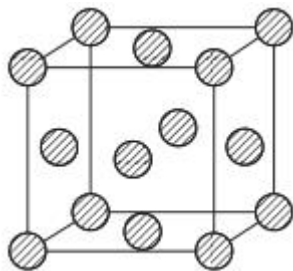
$$\rho=\frac{m}{V}=\frac{\frac{4\times(65+79)}{N_A}\text{g}}{(a\times 10^{-7}\text{cm})^3}\approx 5.45\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$$

密度

6.[百校联盟 2020 届模拟考试]

第四周期元素在生产生活中具有重要的作用。回答下列问题:

(5) 金属铜采用面心立方堆积方式, 其晶胞结构如图所示。已知该晶胞的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 晶胞参数为 $a \text{ nm}$, 阿伏加德罗常数为 N_A , 则铜原子的相对原子质量的表达式为_____ (用含有 ρ 、 a 、 N_A 的表达式表示)。



(5) 根据晶胞的结构, Cu 原子位于顶点和面心, 个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$, 晶胞的

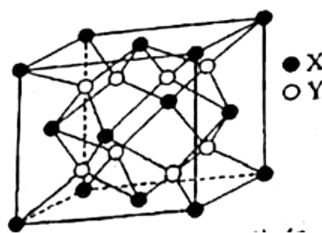
质量为 $\frac{4}{N_A} \times M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 晶胞的体积为 $(a \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3$, 根据密度的定义,

$$\rho = \frac{\frac{4}{N_A} \times M}{(a \times 10^{-7})^3}, \text{ 推出 } M = \frac{\rho N_A a^3 \times 10^{-21}}{4}.$$

7.[福建省三明市 2020 届 5 月质检]

形形色色的物质, 构成了我们这个五彩缤纷的世界。世上万物, 神奇莫测, 常常超乎人们按“常理”的想象。学习物质结构和性质的知识, 能使你想象的翅膀变得更加有力。

(5) 某离子晶体的晶胞结构如图所示。



① 晶体中在每个 X 周围与它最近且距离相等的 X 共有___个。

② 设该晶体的摩尔质量为 $M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 晶胞的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 阿伏加德罗常数为 N_A , 则晶体中两个最近的 X 间的距离为___cm。

(5) ①根据晶胞结构图, X 原子构成面心立方晶胞, 所以每个 X 周围与它最近且距离相等的 X 共有 12 个;

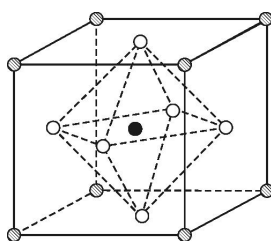
②根据均摊原则, 每个晶胞含有 4 个 X 原子、8 个 Y 原子, 设该晶体的摩尔

质量为 $M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-3}$ ，密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，阿伏加德罗常数为 N_A ，晶胞边长为 $a \text{ cm}$ ，则 $\rho = \frac{4M}{a^3 N_A}$ ， $a = \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho N_A}}$ ，晶体中两个最近的 X 间的距离为晶胞面对角线的一半，距离为 $\frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho N_A}} \text{ cm}$ 。

8.[福州一中 2020 届下学期质检]

Na_3OCl 是一种良好的离子导体，具有反钙钛矿晶体结构。回答下列问题：

(4) Na_3OCl 晶体属于立方晶系，其晶胞结构如右所示。已知：晶胞参数为 $a \text{ nm}$ ，密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。



① Na_3OCl 晶胞中，Cl 位于各顶点位置，Na 位于_____位置，两个 Na 之间的最短距离为_____nm。

② 用 a 、 d 表示阿伏加德罗常数的值 $N_A = \text{_____}$ (列计算式)。

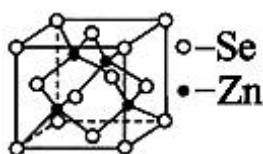
(4) ① Na_3OCl 晶体结构中空心白球类原子 $6 \times \frac{1}{2} = 3$ 、顶点阴影球类原子 $8 \times \frac{1}{8} = 1$ 、实心黑球类原子 $1 \times 1 = 1$ ，根据 Na_3OCl 化学式，可判断钠原子应为空心白球，处在晶体结构的面心，两个钠原子之间的最短距离为晶体结构中两个面心的距离，即为一半边长的 $\sqrt{2}$ 倍，即 $\frac{\sqrt{2}}{2} a \text{ nm}$ ；

② 已知：晶胞参数为 $a \text{ nm}$ ，密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，则 $d \text{ g} \cdot$

$$\text{cm}^{-3} = \frac{M(\text{Na}_3\text{OCl})}{\frac{N_A}{V}} = \frac{120.5 \text{ g}}{N_A (a \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3}, \text{ 解得: } N_A = \frac{1.205 \times 10^{23}}{a^3 d}.$$

9.[山西省临汾市 2020 届二模]

硒可防止人体因氧化而引起的衰老、组织硬化。回答下列问题：



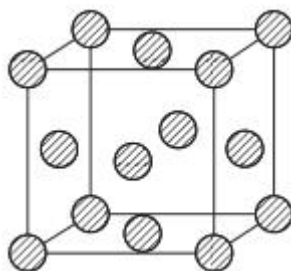
(5) Se 和 Zn 组成的某种晶胞如图所示, 则该晶体的化学式为
_____, 若已知该晶胞的密度为 $\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, 则该晶胞的棱长
 $a=\text{_____cm}$ 。

(5) 根据均摊法, 一个晶胞中 Zn 的个数为 4 个, Se 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 个, 故约成最简整数比后, 该晶胞的化学式为 ZnSe, 根据公式 $\rho \times N_A \times a^3 = 4 \times (65+79)$, 故 $a = \sqrt[3]{\frac{576}{N_A \cdot \rho}}$ 。

10.[百校联盟 2020 届模拟考试]

第四周期元素在生产生活中具有重要的作用。回答下列问题:

(5) 金属铜采用面心立方堆积方式, 其晶胞结构如图所示。已知该晶胞的密度为 $\rho \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, 晶胞参数为 $a \text{ nm}$, 阿伏加德罗常数为 N_A , 则铜原子的相对原子质量的表达式为_____ (用含有 ρ 、 a 、 N_A 的表达式表示)。



(5) 根据晶胞的结构, Cu 原子位于顶点和面心, 个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$, 晶胞的

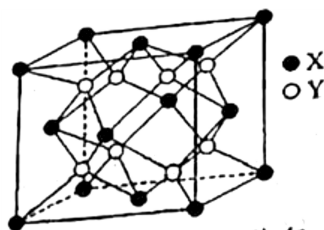
质量为 $\frac{4}{N_A} \times M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 晶胞的体积为 $(a \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3$, 根据密度的定义,

$$\rho = \frac{\frac{4}{N_A} \times M}{(a \times 10^{-7})^3}, \text{ 推出 } M = \frac{\rho N_A a^3 \times 10^{-21}}{4}.$$

11.[福建省三明市 2020 届 5 月质检]

形形色色的物质, 构成了我们这个五彩缤纷的世界。世上万物, 神奇莫测, 常常超乎人们按“常理”的想象。学习物质结构和性质的知识, 能使你想象的翅膀变得更加有力。

(5) 某离子晶体的晶胞结构如图所示。



- ① 晶体中在每个 X 周围与它最近且距离相等的 X 共有__个。
 ② 设该晶体的摩尔质量为 $M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-3}$ ，晶胞的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，阿伏加德罗常数为 N_A ，则晶体中两个最近的 X 间的距离为__cm。

(5) ①根据晶胞结构图，X 原子构成面心立方晶胞，所以每个 X 周围与它最近且距离相等的 X 共有 12 个；

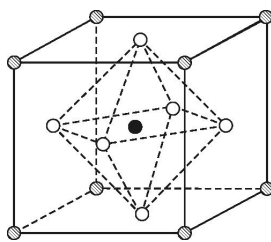
②根据均摊原则，每个晶胞含有 4 个 X 原子、8 个 Y 原子，设该晶体的摩尔质量为 $M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-3}$ ，密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，阿伏加德罗常数为 N_A ，晶胞边长为 a cm，则 $\rho = \frac{4M}{a^3 N_A}$ ， $a = \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho N_A}}$ ，晶体中两个最近的 X 间的距离为晶胞

面对角线的一半，距离为 $\frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho N_A}} \text{ cm}$ 。

12.[福州一中 2020 届下学期质检]

Na_3OCl 是一种良好的离子导体，具有反钙钛矿晶体结构。回答下列问题：

(4) Na_3OCl 晶体属于立方晶系，其晶胞结构如右所示。已知：晶胞参数为 a nm，密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。



- ① Na_3OCl 晶胞中，Cl 位于各顶点位置，Na 位于_____位置，两个 Na 之间的最短距离为_____nm。
 ② 用 a、d 表示阿伏加德罗常数的值 $N_A = \text{_____}$ (列计算式)。

(4) ① Na_3OCl 晶体结构中空心白球类原子 $6 \times \frac{1}{2} = 3$ 、顶点阴影球类原子 $8 \times$

$\frac{1}{8} = 1$ 、实心黑球类原子 $1 \times 1 = 1$ ，根据 Na_3OCl 化学式，可判断钠原子应为空心白球，处在晶体结构的面心，两个钠原子之间的最短距离为晶体结构中两个

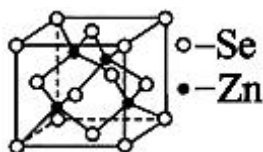
面心的距离，即为一半边长的 $\frac{\sqrt{2}}{2}$ 倍，即 $\frac{\sqrt{2}}{2}a \text{ nm}$ ；

②已知：晶胞参数为 $a \text{ nm}$ ，密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，则 $d \text{ g} \cdot$

$$\text{cm}^{-3} = \frac{M(\text{Na}_3\text{OCl})}{N_A} = \frac{120.5 \text{ g}}{N_A (a \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3}, \text{ 解得: } N_A = \frac{1.205 \times 10^{23}}{a^3 d}.$$

13.[山西省临汾市 2020 届二模]

硒可防止人体因氧化而引起的衰老、组织硬化。回答下列问题：



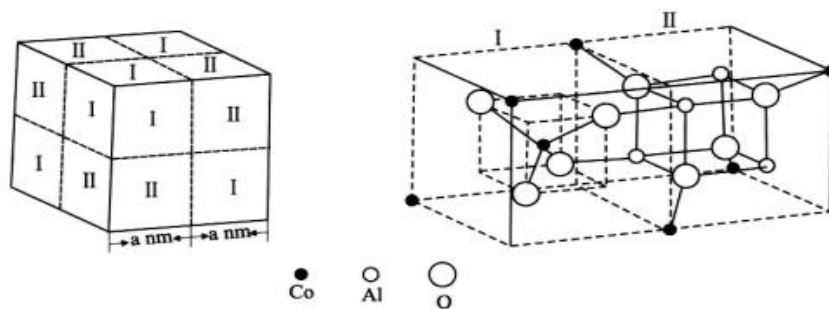
(5) Se 和 Zn 组成的某种晶胞如图所示，则该晶体的化学式为 _____，若已知该晶胞的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，则该晶胞的棱长 $a = \text{_____ cm}$ 。

(5) 根据均摊法，一个晶胞中 Zn 的个数为 4 个，Se 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 个，故约成最简整数比后，该晶胞的化学式为 ZnSe ，根据公式 $\rho \times N_A \times a^3 = 4 \times (65 + 79)$ ，故 $a = \sqrt[3]{\frac{576}{N_A \cdot \rho}}$ 。

14.[广东省六校联盟 2020 届联考二]

2019 年诺贝尔化学奖授予约翰·古德伊纳夫、斯坦利·惠廷厄姆和吉野彰三位科学家，以表彰他们在锂电池领域所做出的巨大贡献。请回答下列问题：

(4) 钴蓝晶体结构如图，该立方晶胞由 4 个 I 型和 4 个 II 型小立方体构成，其化学式为 _____，晶体中 Al^{3+} 占据 O^{2-} 形成的 _____ (填“四面体空隙”或“八面体空隙”)。 N_A 为阿伏加德罗常数的值，钴蓝晶体的密度为 _____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (列计算式)。



(4) 根据钴蓝晶体晶胞结构分析，一个晶胞中含有的 Co、Al、O 个数分别为： $4 \times (4 \times \frac{1}{2}) \times 2 + 4 = 8$ ， $4 \times 4 = 16$ ， $8 \times 4 = 32$ ，所以化学式为 CoAl_2O_4 ；根据结构观

察, 晶体中 Al^{3+} 占据 O^{2-} 形成的八面体空隙; 该晶胞的体积为 $(2a \times 10^{-7})^3$, 该晶

胞的质量为 $\frac{32 \times 16 + 16 \times 27 + 8 \times 59}{N_A} = \frac{8(59 + 2 \times 27 + 4 \times 16)}{N_A}$, 所以密度为

$$\frac{8(59 + 2 \times 27 + 4 \times 16)}{N_A (2a \times 10^{-7})^3}.$$

15.[福建省厦门市 2020 届 4 月质检]

一种 Ru 络合物与 g- C_3N_4 复合光催化剂将 CO, 还原为 HCOOH 的原理图如图所示。

6) 一种类石墨的聚合物半导体 g- C_3N_4 , 其单层平面结构如图 1, 晶胞结构如图 2。

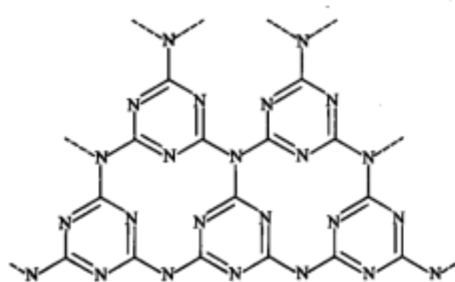


图1

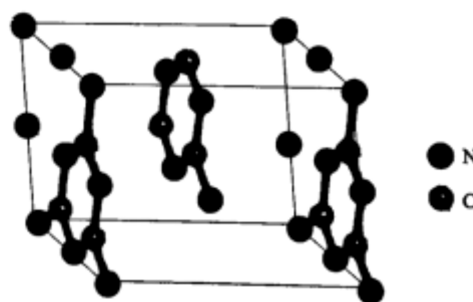


图2

- ① g- C_3N_4 中氮原子的杂化类型是_____。
- ② 根据图 2, 在图 1 中用平行四边形画出一个最小重复单元。_____
- ③ 已知该晶胞的体积为 $V \text{ cm}^3$, 中间层原子均在晶胞内部。设阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则 g- C_3N_4 的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

(6) ① 该物质中 N 原子价层电子对数为 3, 根据价层电子对互斥理论判断 N 原子杂化类型为 sp^2 杂化;

② 由图二可知, 重复的结构单元为六元环和外加三个 N 原子形成的结构,

如图所示: ;

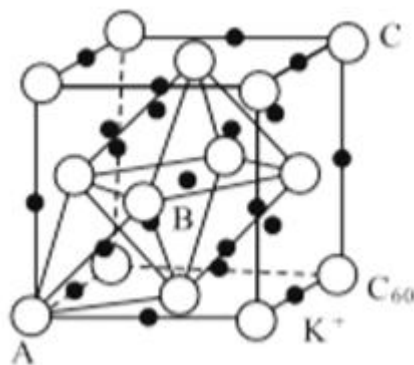
- ③ 由均摊法可知, 该晶胞中 N 原子个数 $= 8 \times \frac{1}{8} + 8 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2} + 4 = 8$, C 原子个数 $= 3 + 6 \times \frac{1}{2} = 6$, 1 个晶胞的质量 $= \frac{8 \times 14 + 6 \times 12}{N_A} \text{ g}$, 密度 ρ

$$= \frac{\frac{8 \times 14 + 6 \times 12}{N_A} \text{g}}{V \text{cm}^3} = \frac{184}{VN_A} \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

16.[武汉市 2020 届质检]

2019 年 10 月 1 日, 在庆祝中华人民共和国成立 70 周年的阅兵仪式上, 最后亮相的 DF-31A 洲际战略导弹是我国大国地位、国防实力的显著标志。其制作材料中包含了 Fe、Cr、Ni、C 等多种元素。

(5) 碳的一种同素异形体的晶体可采取非最密堆积, 然后在空隙中插入金属离子获得超导体。如图为一种超导体的面心立方晶胞, C_{60} 分子占据顶点和面心处, K^+ 占据的是 C_{60} 分子围成的_____空隙和_____空隙 (填几何空间构型); 若 C_{60} 分子的坐标参数分别为 $A(0, 0, 0)$, $B(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $C(1, 1, 1)$ 等, 则距离 A 位置最近的阳离子的原子坐标参数为_____。



(6) Ni 可以形成多种氧化物, 其中一种 Ni_aO 晶体晶胞结构为 NaCl 型, 由于晶体缺陷, a 的值为 0.88, 且晶体中的 Ni 分别为 Ni^{2+} 、 Ni^{3+} , 则晶体中 Ni^{2+} 与 Ni^{3+} 的最简整数比为_____, 晶胞参数为 428pm, 则晶体密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (N_A 表示阿伏加德罗常数的值, 列出表达式)。

(5) 碳的一种同素异形体的晶体可采取非最密堆积, 然后在空隙中插入金属离子获得超导体。如图为一种超导体的面心立方晶胞, C_{60} 分子占据顶点和面心处, 由 C_{60} 分子围成的构型分别为正四面体和正八面体, 则 K^+ 占据的是 C_{60} 分子围成的正四面体和正八面体的空隙中; 若 C_{60} 分子的坐标参数分别为 $A(0, 0, 0)$, $B(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $C(1, 1, 1)$ 等, 说明该晶胞的棱长是 1, 则距离 A 位置 C_{60} 分子最近的 K^+ 为形成的正四面体体心上的, 为晶胞棱长的 $\frac{1}{4}$, 则距离 A 位置最近的阳离子的原子坐标参数为 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$;

(6) 设晶体中 Ni^{2+} 与 Ni^{3+} 的最简整数比为 $x : y$, 根据 Ni_aO 中化合价代数和为

零可知: $\frac{2x+3y}{x+y} \times 0.88=2$, 解得 $x:y=8:3$; Ni_aO 晶体的晶胞结构为 NaCl 型,

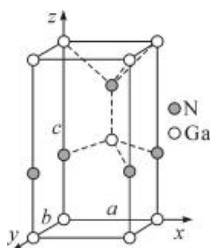
所以每个晶胞中含有 4 个 O 原子, 有 4 个 “ Ni_aO ”, 则晶体密度

$$= \frac{4 \times \frac{59 \times 0.88 + 16}{N_A} g}{(428 \times 10^{-10} \text{ cm})^3} = \frac{4 \times (59 \times 0.88 + 16)}{N_A \times (428 \times 10^{-10})^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

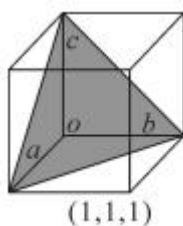
17.[湖北省七市州 2020 届 5 月联考]

氮化镓(GaN)是制造 SG 芯片的材料, 氮化铝 LED 灯可发出紫外光。回答下列问题:

(4) 氮化镓为六方晶胞, 结构如图所示。该晶体密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 晶胞参数 $a=b \neq c$ (单位: pm), a 、 b 夹角为 120° , 阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则晶胞参数 $c=$ _____ pm (用含 a 、 ρ 、 N_A 的代数式表示)。



(5) 在立方晶胞中, 与晶胞体对角线垂直的面在晶体学中称为(1, 1, 1)晶面。如图, 该立方晶胞中(1, 1, 1)晶面共有 _____ 个。



(4) Ga 位于顶点和体内, 个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$, N 位于棱上和体内, 个数为

$4 \times \frac{1}{4} + 1 = 2$, 该晶胞的质量为 $\frac{2}{N_A} \times (70+14) \text{ g}$, 晶胞的体积为 $(a \times 10^{-10})^2 \sin 60^\circ$

$\times c \times 10^{-10} \text{ cm}^3$, 根据密度的定义得出 $\rho \text{ g/cm}^3 = \frac{2}{N_A} \times (70+14) \text{ g} \div [(a \times 10^{-10})^2 \sin 60^\circ \times c \times 10^{-10} \text{ cm}^3]$, 解得 $c = \frac{112\sqrt{3} \times 10^{30}}{a^2 \times N_A \times \rho} \text{ pm}$;

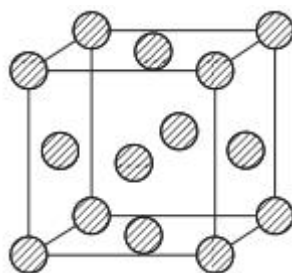
(5) 在立方晶胞中, 与晶胞体对角线垂直的面在晶体学中称为(1, 1, 1)晶

面，有 8 个顶点，即有 8 个这样的面，该立方晶胞中(1, 1, 1)晶面共有 8 个。

18.[百校联盟 2020 届模拟考试]

第四周期元素在生产生活中具有重要的作用。回答下列问题：

(5) 金属铜采用面心立方堆积方式，其晶胞结构如图所示。已知该晶胞的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，晶胞参数为 $a \text{ nm}$ ，阿伏加德罗常数为 N_A ，则铜原子的相对原子质量的表达式为_____ (用含有 ρ 、 a 、 N_A 的表达式表示)。



(5) 根据晶胞的结构，Cu 原子位于顶点和面心，个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ，晶胞的

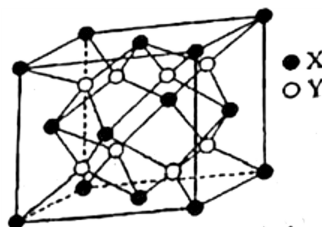
质量为 $\frac{4}{N_A} \times M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，晶胞的体积为 $(a \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3$ ，根据密度的定义，

$$\rho = \frac{\frac{4}{N_A} \times M}{(a \times 10^{-7})^3}, \text{ 推出 } M = \frac{\rho N_A a^3 \times 10^{-21}}{4}.$$

19.[福建省三明市 2020 届 5 月质检]

形形色色的物质，构成了我们这个五彩缤纷的世界。世上万物，神奇莫测，常常超乎人们按“常理”的想象。学习物质结构和性质的知识，能使你想象的翅膀变得更加有力。

(5) 某离子晶体的晶胞结构如图所示。



① 晶体中在每个 X 周围与它最近且距离相等的 X 共有___个。

② 设该晶体的摩尔质量为 $M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，晶胞的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，阿伏加德罗常数为 N_A ，则晶体中两个最近的 X 间的距离为___cm。

(5) ①根据晶胞结构图, X 原子构成面心立方晶胞, 所以每个 X 周围与它最近且距离相等的 X 共有 12 个;

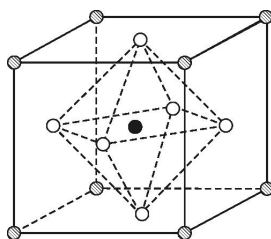
②根据均摊原则, 每个晶胞含有 4 个 X 原子、8 个 Y 原子, 设该晶体的摩尔质量为 $M \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, 密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 阿伏加德罗常数为 N_A , 晶胞边长为 $a \text{ cm}$, 则 $\rho = \frac{4M}{a^3 N_A}$, $a = \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho N_A}}$, 晶体中两个最近的 X 间的距离为晶胞

面对角线的一半, 距离为 $\frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho N_A}} \text{ cm}$ 。

20.[福州一中 2020 届下学期质检]

Na_3OCl 是一种良好的离子导体, 具有反钙钛矿晶体结构。回答下列问题:

(4) Na_3OCl 晶体属于立方晶系, 其晶胞结构如右所示。已知: 晶胞参数为 $a \text{ nm}$, 密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。



① Na_3OCl 晶胞中, Cl 位于各顶点位置, Na 位于_____位置, 两个 Na 之间的最短距离为_____nm。

② 用 a 、 d 表示阿伏加德罗常数的值 $N_A = \text{_____}$ (列计算式)。

(4) ① Na_3OCl 晶体结构中空心白球类原子 $6 \times \frac{1}{2} = 3$ 、顶点阴影球类原子 $8 \times$

$\frac{1}{8} = 1$ 、实心黑球类原子 $1 \times 1 = 1$, 根据 Na_3OCl 化学式, 可判断钠原子应为空心白球, 处在晶体结构的面心, 两个钠原子之间的最短距离为晶体结构中两个

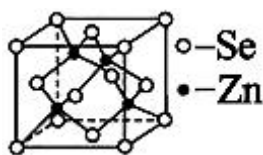
面心的距离, 即为一半边长的 $\sqrt{2}$ 倍, 即 $\frac{\sqrt{2}}{2} a \text{ nm}$;

②已知: 晶胞参数为 $a \text{ nm}$, 密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 则 $d \text{ g} \cdot$

$$\text{cm}^{-3} = \frac{M(\text{Na}_3\text{OCl})}{N_A} = \frac{120.5 \text{ g}}{N_A (a \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3}, \text{ 解得: } N_A = \frac{1.205 \times 10^{23}}{a^3 d}。$$

21.[山西省临汾市 2020 届二模]

硒可防止人体因氧化而引起的衰老、组织硬化。回答下列问题:



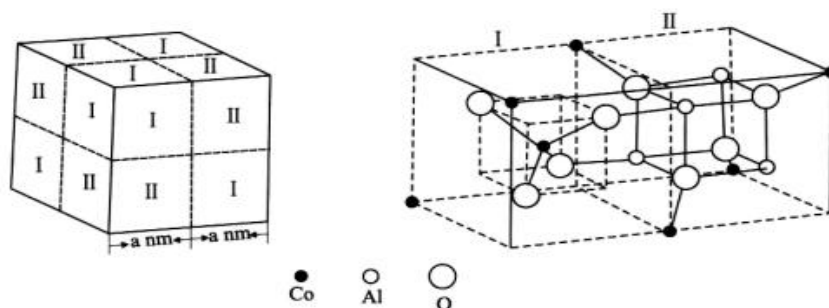
(5) Se 和 Zn 组成的某种晶胞如图所示, 则该晶体的化学式为 _____, 若已知该晶胞的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 则该晶胞的棱长 $a = \text{_____ cm}$ 。

(5) 根据均摊法, 一个晶胞中 Zn 的个数为 4 个, Se 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 个, 故约成最简整数比后, 该晶胞的化学式为 ZnSe, 根据公式 $\rho \times N_A \times a^3 = 4 \times (65 + 79)$, 故 $a = \sqrt[3]{\frac{576}{N_A \cdot \rho}}$ 。

22.[广东省六校联盟 2020 届联考二]

2019 年诺贝尔化学奖授予约翰·古德伊纳夫、斯坦利·惠廷厄姆和吉野彰三位科学家, 以表彰他们在锂电池领域所做出的巨大贡献。请回答下列问题:

(4) 钴蓝晶体结构如图, 该立方晶胞由 4 个 I 型和 4 个 II 型小立方体构成, 其化学式为 _____, 晶体中 Al^{3+} 占据 O^{2-} 形成的 _____ (填“四面体空隙”或“八面体空隙”)。 N_A 为阿伏加德罗常数的值, 钴蓝晶体的密度为 _____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (列计算式)。



(4) 根据钴蓝晶体晶胞结构分析, 一个晶胞中含有的 Co、Al、O 个数分别为: $4 \times (4 \times 1/2) \times 2 + 4 = 8$, $4 \times 4 = 16$, $8 \times 4 = 32$, 所以化学式为 CoAl_2O_4 ; 根据结构观察, 晶体中 Al^{3+} 占据 O^{2-} 形成的八面体空隙; 该晶胞的体积为 $(2a \times 10^{-7})^3$, 该晶

胞的质量为 $\frac{32 \times 16 + 16 \times 27 + 8 \times 59}{N_A} = \frac{8(59 + 2 \times 27 + 4 \times 16)}{N_A}$, 所以密度为

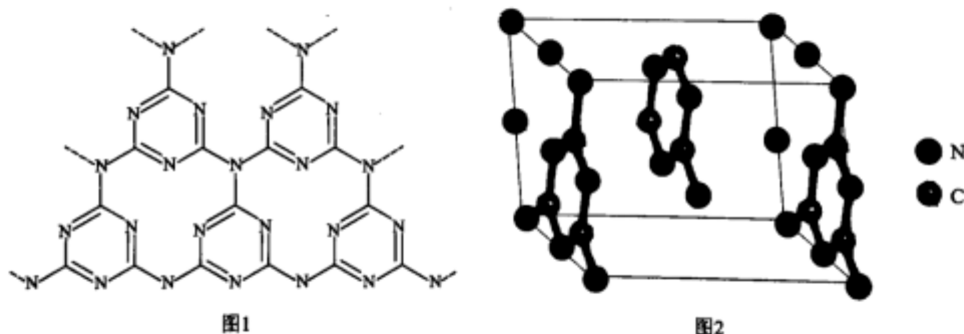
$$\frac{8(59 + 2 \times 27 + 4 \times 16)}{N_A (2a \times 10^{-7})^3}。$$

23.[福建省厦门市 2020 届 4 月质检]

一种 Ru 络合物与 g- C_3N_4 复合光催化剂将 CO, 还原为 HCOOH 的原理图如

图所示。

6) 一种类石墨的聚合物半导体 $g-C_3N_4$, 其单层平面结构如图 1, 晶胞结构如图 2。



- ① $g-C_3N_4$ 中氮原子的杂化类型是_____。
- ② 根据图 2, 在图 1 中用平行四边形画出一个最小重复单元。_____
- ③ 已知该晶胞的体积为 $V \text{ cm}^3$, 中间层原子均在晶胞内部。设阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则 $g-C_3N_4$ 的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

(6) ① 该物质中 N 原子价层电子对数为 3, 根据价层电子对互斥理论判断 N 原子杂化类型为 sp^2 杂化;

② 由图二可知, 重复的结构单元为六元环和外加三个 N 原子形成的结构,

如图所示: ;

- ③ 由均摊法可知, 该晶胞中 N 原子个数 $= 8 \times \frac{1}{8} + 8 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2} + 4 = 8$, C 原子个数 $= 3 + 6 \times \frac{1}{2} = 6$, 1 个晶胞的质量 $= \frac{8 \times 14 + 6 \times 12}{N_A} \text{ g}$, 密度 ρ

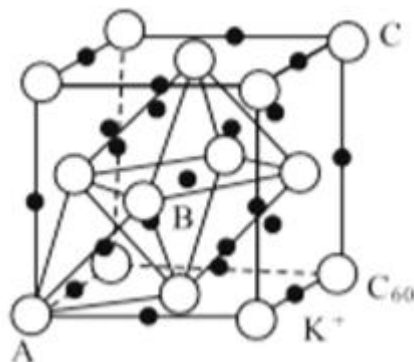
$$= \frac{\frac{8 \times 14 + 6 \times 12}{N_A} \text{ g}}{V \text{ cm}^3} = \frac{184}{VN_A} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

24.[武汉市 2020 届质检]

2019 年 10 月 1 日, 在庆祝中华人民共和国成立 70 周年的阅兵仪式上, 最后亮相的 DF-31A 洲际战略导弹是我国大国地位、国防实力的显著标志。其制作材料中包含了 Fe、Cr、Ni、C 等多种元素。

(5) 碳的一种同素异形体的晶体可采取非最密堆积, 然后在空隙中插入金属离子获得超导体。如图为一种超导体的面心立方晶胞, C_{60} 分子占据顶点和面心处, K^+ 占据的是 C_{60} 分子围成的_____空隙和_____空隙 (填几

何空间构型); 若 C_{60} 分子的坐标参数分别为 $A(0, 0, 0)$, $B(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $C(1, 1, 1)$ 等, 则距离 A 位置最近的阳离子的原子坐标参数为_____。



(6) Ni 可以形成多种氧化物, 其中一种 Ni_aO 晶体晶胞结构为 NaCl 型, 由于晶体缺陷, a 的值为 0.88, 且晶体中的 Ni 分别为 Ni^{2+} 、 Ni^{3+} , 则晶体中 Ni^{2+} 与 Ni^{3+} 的最简整数比为_____, 晶胞参数为 428pm, 则晶体密度为_____ $g \cdot cm^{-3}$ (N_A 表示阿伏加德罗常数的值, 列出表达式)。

(5) 碳的一种同素异形体的晶体可采取非最密堆积, 然后在空隙中插入金属离子获得超导体。如图为一种超导体的面心立方晶胞, C_{60} 分子占据顶点和面心处, 由 C_{60} 分子围成的构型分别为正四面体和正八面体, 则 K^+ 占据的是 C_{60} 分子围成的正四面体和正八面体的空隙中; 若 C_{60} 分子的坐标参数分别为 $A(0, 0, 0)$, $B(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $C(1, 1, 1)$ 等, 说明该晶胞的棱长是 1, 则距离 A 位置 C_{60} 分子最近的 K^+ 为形成的正四面体体心上的, 为晶胞棱长的 $\frac{1}{4}$, 则距离 A 位置最近的阳离子的原子坐标参数为($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$);

(6) 设晶体中 Ni^{2+} 与 Ni^{3+} 的最简整数比为 $x : y$, 根据 Ni_aO 中化合价代数和为零可知: $\frac{2x+3y}{x+y} \times 0.88 = 2$, 解得 $x : y = 8 : 3$; Ni_aO 晶体的晶胞结构为 NaCl 型,

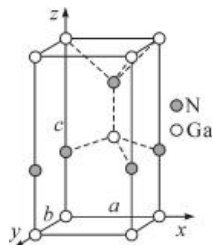
所以每个晶胞中含有 4 个 O 原子, 有 4 个 “ Ni_aO ”, 则晶体密度

$$= \frac{4 \times \frac{59 \times 0.88 + 16}{N_A} g}{(428 \times 10^{-10} cm)^3} = \frac{4 \times (59 \times 0.88 + 16)}{N_A \times (428 \times 10^{-10})^3} g \cdot cm^{-3}.$$

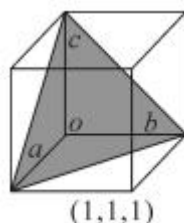
25.[湖北省七市州 2020 届 5 月联考]

氮化镓(GaN)是制造 SG 芯片的材料, 氮化铝 LED 灯可发出紫外光。回答下列问题:

(4) 氮化镓为六方晶胞，结构如图所示。该晶体密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，晶胞参数 $a=b \neq c$ (单位: pm)， a 、 b 夹角为 120° ，阿伏加德罗常数的值为 N_A ，则晶胞参数 $c=$ _____pm (用含 a 、 ρ 、 N_A 的代数式表示)。



(5) 在立方晶胞中，与晶胞体对角线垂直的面在晶体学中称为(1, 1, 1)晶面。如图，该立方晶胞中(1, 1, 1)晶面共有_____个。



(4) Ga 位于顶点和体内，个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ ，N 位于棱上和体内，个数为 $4 \times \frac{1}{4} + 1 = 2$ ，该晶胞的质量为 $\frac{2}{N_A} \times (70+14) \text{ g}$ ，晶胞的体积为 $(a \times 10^{-10})^2 \sin 60^\circ$

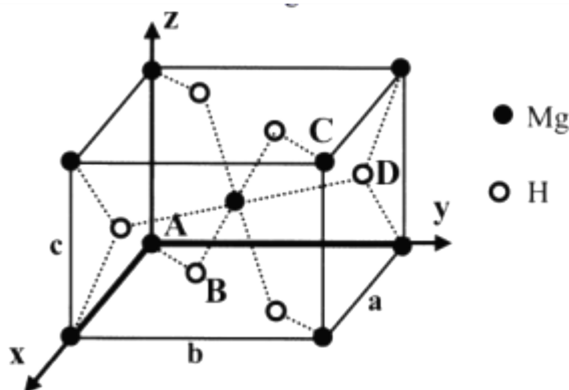
$\times c \times 10^{-10} \text{ cm}^3$ ，根据密度的定义得出 $\rho \text{ g/cm}^3 = \frac{2}{N_A} \times (70+14) \text{ g} \div [(a \times 10^{-10})^2 \sin 60^\circ \times c \times 10^{-10} \text{ cm}^3]$ ，解得 $c = \frac{112\sqrt{3} \times 10^{30}}{a^2 \times N_A \times \rho} \text{ pm}$ ；

(5) 在立方晶胞中，与晶胞体对角线垂直的面在晶体学中称为(1, 1, 1)晶面，有 8 个顶点，即有 8 个这样的面，该立方晶胞中(1, 1, 1)晶面共有 8 个。

26.[广东省佛山市 2020 届二模]

科学家预测 21 世纪中叶将进入“氢能经济”时代，下列物质都是具有广阔应用前景的储氢材料。回答下列问题：

(5) MgH_2 晶体属四方晶系，结构如图，晶胞参数 $a = b = 450 \text{ pm}$ ， $c = 301 \text{ pm}$ ，原子坐标为 A(0, 0, 0)、B(0.305, 0.305, 0)、C(1, 1, 1)、D(0.195, 0.805, 0.5)。



- ① Mg^{2+} 的半径为 72 pm, 则 H^+ 的半径为 _____ pm (列出计算表达式)
 ② 用 N_A 表示阿伏加德罗常数, MgH_2 晶体中氢的密度是标准状况下氢气密度的 _____ 倍(列出计算表达式, 氢气密度为 $0.089 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$)。

(5) ① 在晶胞下底面作一条经过 AB 两点的面对角线和经过 B 点的垂直 y 轴的辅助线, 利用相似三角形规则可知, $\frac{AB}{450\text{pm} \times \sqrt{2}} = \frac{0.305}{1}$, 则 AB 的距离
 $= 0.305 \times 450\text{pm} \times \sqrt{2} = \text{Mg}^{2+}$ 的半径 + H^+ 的半径, H^+ 的半径 =

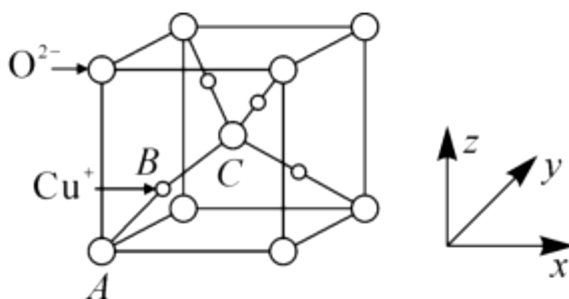
$(0.305 \times 450\sqrt{2} - 72) \text{ pm}$; ② 晶胞中 H^+ 个数为 $4 \times \frac{1}{2} + 2 = 4$, 则晶胞中氢的

$$\text{密度 } \rho = \frac{m}{V} = \frac{4}{N_A \times (450 \times 10^{-10})^2 \times 301 \times 10^{-10} \times 8.9 \times 10^{-5}} \text{ 或 } \frac{4 \times 10^{35}}{N_A \times 450^2 \times 301 \times 8.9}.$$

27.[安徽省名校 2020 届冲刺]

工业上合成氨, CO 易与铁触媒作用导致铁触媒失去催化活性: $\text{Fe} + 5 \text{CO} = \text{Fe}(\text{CO})_5$ 。为了防止催化剂铁触媒中毒, 要除去 CO , 发生的反应为 $\text{Cu}(\text{NH}_3)_2\text{OOCCH}_3 + \text{CO} + \text{NH}_3 = \text{Cu}(\text{NH}_3)_3(\text{CO})\text{OOCCH}_3$ 。回答下列问题:

(5) 已知铜的一种氧化物 Cu_2O 晶体的晶胞结构如图所示:



- ① 若坐标参数 A 为 $(0, 0, 0)$, B 为 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, 则 C 的坐标参数为 _____;
 ② 若阿伏加德罗常数为 N_A , 该晶胞的边长为 a pm, 则晶体的密度为 _____

$\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

(5) ① 根据晶胞结构分析, C 位于晶胞体心, 则 C 的原子坐标为: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$;

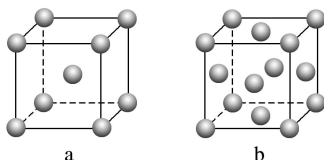
② 1 mol 晶胞, 即有 N_A 个晶胞, 质量为 $m=2 \times (64 \times 2+16) \text{ g}=144 \times 2 \text{ g}$, 所

以密度为 $\rho = \frac{m}{V} = \frac{144 \times 2}{N_A a^3} \times 10^{30} \text{ g/cm}^3$ 。

28.[2019·河北省武邑中学高三下学期第一次模拟]

铁氰化钾, 化学式为 $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$, 主要应用于制药、电镀、造纸、钢铁生产等工业。其煅烧分解生成 KCN 、 FeC_2 、 N_2 、 $(\text{CN})_2$ 等物质。

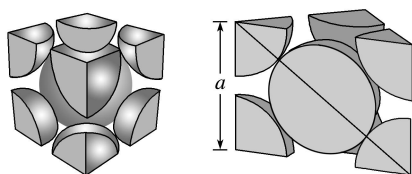
(4) 下图是金属单质常见的两种堆积方式的晶胞模型。



① 铁采纳的是 a 堆积方式, 铁原子的配位数为_____, 该晶体中原子总体积占晶体体积的比值为_____ (用含 π 的最简代数式表示)。

② 常见的金属铝采纳的是 b 堆积方式, 铝原子的半径为 $r \text{ pm}$, 则其晶体密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (用含有 r 、 N_A 的最简代数式表示)。

解析 (4) ① 铁的 a 堆积方式为体心立方堆积, 与一个铁原子最近的铁原子距离为立方体边长的 $\frac{\sqrt{3}}{2}$, 这样的原子有 8 个, 所以铁的配位数为 8; 如图所示:

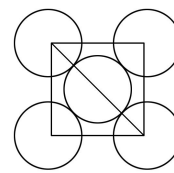


, 晶胞中铁原子数为: $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$, 体心立方晶

胞中铁原子半径 $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$, 所以铁原子总体积为 $2 \times \frac{4}{3}\pi r^3 = 2 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3 = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi a^3$,

晶胞体积为 a^3 , 则该晶体中原子总体积占晶体体积的比值为 $\frac{\sqrt{3}}{8}\pi$ 。

② 铝的 b 堆积方式为面心立方最密堆积, 晶胞中含有 Al 原子数为: $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} =$



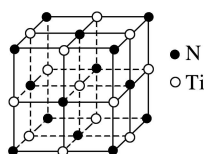
4, 则晶胞质量为: $\frac{4 \times 27}{N_A} \text{g}$; 该晶胞结构侧面可用如图表示: , 设晶

胞边长为 $a \text{ cm}$, 晶胞边长 a 与铝原子的半径 r 的关系为: $2a^2 = (4r \times 10^{-10})^2$, 解得 $a = 2\sqrt{2}r \times 10^{-10}$, 所以晶胞体积为: $(2\sqrt{2}r \times 10^{-10})^3 \text{cm}^3$, 根据密度 = 质量 ÷ 体积,

$$\text{则晶体密度为: } \frac{\frac{4 \times 27}{N_A} \text{ g}}{(2\sqrt{2}r \times 10^{-10})^3 \text{cm}^3} = \frac{27\sqrt{2} \times 10^{30}}{8N_A \cdot r^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

29.[2019·临川一中、南昌二中名校高三3月联考]

氮和氮的相关化合物在很多领域有着广泛的应用。请回答:



(6)氮化钛晶体的晶胞与 NaCl 晶胞相似(如图所示), 该氮化钛的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 则该晶胞中 N、Ti 之间的最近距离为 _____ nm (N_A 为阿伏加德罗常数的值, 只列计算式)。该晶体中与氮原子距离相等且最近的钛原子围成的空间几何体为 _____。

解析 (6)根据均摊法, 可以知道该晶胞中 N 原子个数为: $6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8} = 4$, 该晶

胞中 Ti 原子个数为: $1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4$, 则晶胞的质量 $m = 4 \times \frac{62}{N_A} \text{g}$, 设晶胞中 N、Ti

之间的最近距离为 $a \text{ nm}$, 则晶胞的体积 $V = (2a \times 10^{-7})^3 \text{cm}^3$, 根据 $\rho = \frac{m}{V}$ 得, m

$$= \rho V, \text{ 即 } 4 \times \frac{62}{N_A} \text{g} = \rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} \times (2a \times$$

$$10^{-7})^3 \text{cm}^3, \text{ 解得 } a = \frac{1}{2} \times \sqrt[3]{\frac{4 \times 62}{N_A \rho}} \times 10^7. \text{ 以晶胞顶点 N 原子研究, 与之距离相等}$$

且最近的 Ti 原子共计 6 个, 围成的空间几何体为正八面体。

30.[2019·南昌市高三第一次联考]

中国海军航母建设正在有计划、有步骤地向前推进, 第一艘国产航母目前正在进行海试。建造航母需要大量的新型材料。航母的龙骨要耐冲击, 航母的甲板要耐高温, 航母的外壳要耐腐蚀。

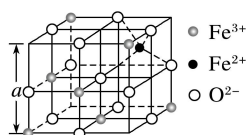


图 2

(4)海底金属软泥是在海洋底覆盖着的一层红棕色沉积物，蕴藏着大量的资源，含有硅、铁、锰、锌等。如图 2 是从铁氧体离子晶体 Fe_3O_4 中取出的能体现其晶体结构的一个立方体，则晶体中的 O^{2-} 是否构成了面心立方堆积？_____ (填“是”或“否”)；该立方体是不是 Fe_3O_4 的晶胞？_____ (填“是”或“否”)；立方体中铁离子处于 O^{2-} 围成的_____ (填空间结构)空隙；根据如图计算 Fe_3O_4 晶体的密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。(图中 $a = 0.42 \text{ nm}$ ，计算结果保留两位有效数字)

解析 (4) O^{2-} 构成面心立方最密堆积，根据晶胞粒子的排布，该立方体是 Fe_3O_4 的晶胞，立方体中 Fe^{3+} 处于 O^{2-} 围成的正八面体空隙，以立方体计算，1 个立方体中含有 Fe^{3+} 的个数为 $4 \times \frac{1}{8} + \frac{1}{2} \times 3 = 2$ ，含有 Fe^{2+} 的个数为 1，含有 O^{2-} 的个数为

为 $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$ ，1 个立方体的质量为 $m = \frac{56 \times 3 + 16 \times 4}{N_A} \text{g}$ ，1 个立方体体积为 $V =$

$a^3 \text{ nm}^3 = (a \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3$ ，则晶体密度为 $\rho = \frac{m}{N_A V} = \frac{56 \times 3 + 16 \times 4}{(6.02 \times 10^{23}) \times (0.42 \times 10^{-7})^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} \approx 5.2 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。