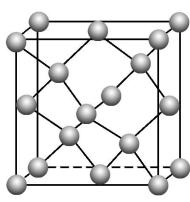
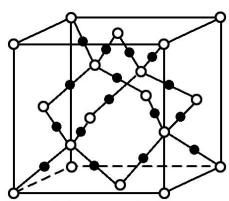
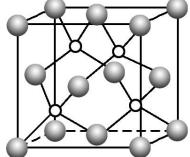


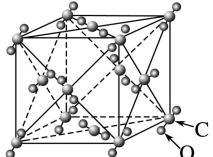
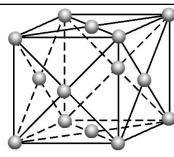
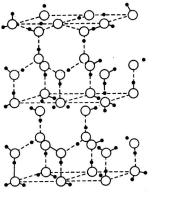
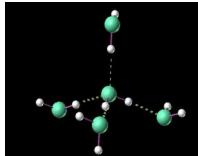
晶体计算类型归纳

一、记住常见晶体(晶胞)的结构

1、常见原子晶体结构分析

晶体	晶体结构	结构分析
金刚石	 <p style="color: blue;">原子半径(r)与边长(a)的关系: $\sqrt{3}a = 8r$</p>	<p>(1)每个碳与相邻 4 个碳以共价键结合, 形成正四面体结构, 键角均为 $109^{\circ}28'$ (2)每个金刚石晶胞中含有 8 个碳原子, 最小的碳环为 6 元环, 并且不在同一平面(实际为椅式结构), 碳原子为 sp^3 杂化 (3)每个碳原子被 12 个六元环共用, 每个共价键被 6 个六元环共用, 一个六元环实际拥有 $\frac{1}{2}$ 个碳原子 (4)C 原子数与 C—C 键数之比为 1 : 2, 12g 金刚石中有 2 mol 共价键 (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)</p>
SiO_2	 <p style="color: blue;">○Si ●O</p>	<p>(1)SiO_2 晶体中最小的环为 12 元环, 即: 每个 12 元环上有 6 个 O, 6 个 Si (2)每个 Si 与 4 个 O 以共价键结合, 形成正四面体结构, 每个正四面体占有 1 个 Si, 4 个 $\frac{1}{2}$O, $n(\text{Si}) : n(\text{O}) = 1 : 2$ (3)每个 Si 原子被 12 个十二元环共用, 每个 O 原子被 6 个十二元环共用 (4)每个 SiO_2 晶胞中含有 8 个 Si 原子, 含有 16 个 O 原子 (5)硅原子与 Si—O 共价键之比为 1: 4, 1mol SiO_2 晶体中有 4mol 共价键 (6)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)</p>
SiC 、 BP 、 AlN		<p>(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: $\rho(\text{SiC}) = \frac{4 \times 40 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$; $\rho(\text{BP}) = \frac{4 \times 42 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$; $\rho(\text{AlN}) = \frac{4 \times 41 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$ (a 为晶胞边长, N_A 为阿伏加德罗常数) (3)若 Si 与 C 最近距离为 d, 则边长(a)与最近距离(d)的关系: $\sqrt{3} a = 4d$</p>

2、常见分子晶体结构分析

晶体	晶体结构	结构分析
干冰	 <p style="color: blue;">C O</p>	<p>(1)面心立方最密堆积: 立方体的每个顶点有一个 CO_2 分子, 每个面上也还有一个 CO_2 分子, 每个晶胞中有 4 个 CO_2 分子 (2)每个 CO_2 分子周围等距且紧邻的 CO_2 分子有 12 个 (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 style="color: blue;">● P_4</p>	<p>(1)面心立方最密堆积 (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>
冰	 <p style="color: blue;">冰的结构模型</p>	 <p>(1)每个水分子与相邻的 4 个水分子以氢键相连接 (2)每个水分子实际拥有两个“氢键” (3)冰晶体和金刚石晶胞相似的原因: 每个水分子与周围四个水分子形成氢键</p>

【微点拨】

- (1)若分子间只有范德华力, 则分子晶体采取分子密堆积, 每个分子周围有 12 个紧邻的分子。在分子晶体中, 原子先以共价键形成分子, 分子再以分子间作用力形成晶体。由于分子间作用力没有方向性和饱和性, 分子间尽可能采取密堆积的排列方式。如: 干冰、 O_2 、 I_2 、 C_{60} 等分子
- (2)若分子间靠氢键形成的晶体, 则不采取密堆积结构, 每个分子周围紧邻的分子数要小于 12 个。因为氢键有方向性和饱和性, 一个分子周围其他分子的位置和数目是一定的。如: 冰晶体、苯甲酸晶体

3、常见离子晶体结构分析

晶体	晶体结构	结构分析
NaCl		<p>(1)一个 NaCl 晶胞中, 有 4 个 Na^+, 有 4 个 Cl^- (2)在 NaCl 晶体中, 每个 Na^+同时强烈吸引 6 个 Cl^-, 形成正八面体形; 每个 Cl^-同时强烈吸引 6 个 Na^+ (3)在 NaCl 晶体中, Na^+ 和 Cl^- 的配位数分别为 6、6 (4)在 NaCl 晶体中, 每个 Na^+周围与它最接近且距离相等的 Na^+共有 12 个, 每个 Cl^-周围与它最接近且距离相等的 Cl^-共有 12 个 (5)密度 = $\frac{4 \times 58.5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$ (a 为晶胞边长, N_A 为阿伏加德罗常数)</p>
CsCl		<p>(1)一个 CsCl 晶胞中, 有 1 个 Cs^+, 有 1 个 Cl^- (2)在 CsCl 晶体中, 每个 Cs^+同时强烈吸引 8 个 Cl^-, 即: Cs^+的配位数为 8, 每个 Cl^- 同时强烈吸引 8 个 Cs^+, 即: Cl^-的配位数为 8 (3)在 CsCl 晶体中, 每个 Cs^+周围与它最接近且距离相等的 Cs^+共有 6 个, 形成正八面体形, 在 CsCl 晶体中, 每个 Cl^-周围与它最接近且距离相等的 Cl^-共有 6 个 (4)密度 = $\frac{168.5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$ (a 为晶胞边长, N_A 为阿伏加德罗常数)</p>
ZnS		<p>(1)1 个 ZnS 晶胞中, 有 4 个 S^{2-}, 有 4 个 Zn^{2+} (2)Zn^{2+}的配位数为 4, S^{2-}的配位数为 4 (3)密度 = $\frac{4 \times 97 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$</p>
CaF ₂		<p>(1)1 个 CaF₂ 的晶胞中, 有 4 个 Ca^{2+}, 有 8 个 F^- (2)CaF₂ 晶体中, Ca^{2+}和 F^-的配位数不同, Ca^{2+}配位数是 8, F^-的配位数是 4 (3)密度 = $\frac{4 \times 78 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{N_A \times a^3}$</p>
离子晶体的配位数		离子晶体中与某离子距离最近的异性离子的数目叫该离子的配位数
影响离子晶体配位数的因素		<p>(1)正、负离子半径比: AB 型离子晶体中, 阴、阳离子的配位数相等, 但正、负离子半径比越大, 离子的配位数越大。如: ZnS、NaCl、CsCl (2)正、负离子的电荷比。如: CaF₂ 晶体中, Ca^{2+}和 F^-的配位数不同</p>

4、常见金属晶体结构分析

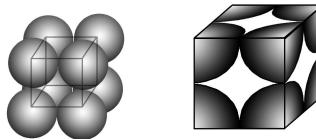
(1)金属晶体的四种堆积模型分析

堆积模型	简单立方堆积	体心立方堆积(钾型)	面心立方最密堆积(铜型)	六方最密堆积(镁型)
晶胞				
代表金属	Po	Na K Fe	Cu Ag Au	Mg Zn Ti
配位数	6	8	12	12
晶胞占有的原子数	1	2	4	6 或 2
原子半径(r)与立方体边长为(a)的关系	$a=2r$	$\sqrt{3} a=4r$	$\sqrt{2} a=4r$	—
密度的表达式				
空间利用率表达式				

(2) 金属晶胞中原子空间利用率计算: 空间利用率 = $\frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$

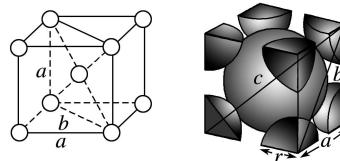
①简单立方堆积: 如图所示, 原子的半径为 r , 立方体的棱长为 $2r$, 则 $V_{\text{球}} = \frac{4}{3}\pi r^3$, $V_{\text{晶胞}} = (2r)^3 = 8r^3$, 空间利

$$\text{用率} = \frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{8r^3} \times 100\% = \frac{\pi}{6} \approx 52\%$$



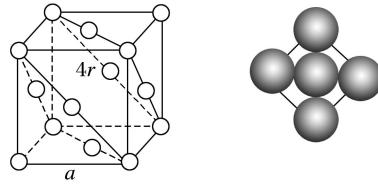
②体心立方堆积: 如图所示, 原子的半径为 r , 体对角线 c 为 $4r$, 面对角线 b 为 $\sqrt{2}a$, 由 $(4r)^2 = a^2 + b^2$ 得 $a = \frac{4}{\sqrt{3}}r$ 。1 个晶胞中有 2 个原子, 故空间利用率 =

$$\frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} \times 100\% = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{(\frac{4}{\sqrt{3}}r)^3} \times 100\% = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 68\%$$



③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

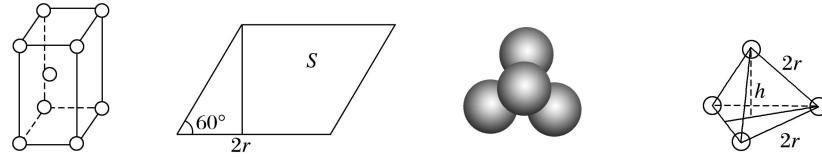
$$\text{个晶胞中有 4 个原子, 则空间利用率} = \frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{16\sqrt{2}r^3} \times 100\% = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 74\%$$



④六方最密堆积: 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 $S =$

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

$$\frac{V_{\text{球}}}{V_{\text{晶胞}}} \times 100\% = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{8\sqrt{2}r^3} \times 100\% = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 74\%$$



(3) 晶体密度的计算公式推导过程: 若 1 个晶胞中含有 x 个微粒

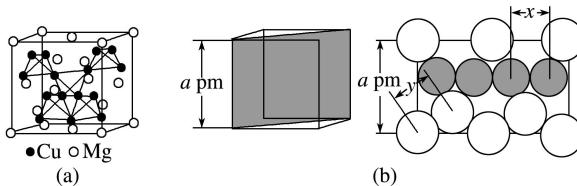
$$\text{则晶胞的物质的量为: } n = \frac{N}{N_A} = \frac{x}{N_A} \text{ mol, 晶胞的质量为: } m = n \cdot M = \frac{x}{N_A} \cdot M \text{ g}$$

$$\text{密度为: } \rho = \frac{m}{V} = \frac{\frac{x}{N_A} \cdot M}{a^3} = \frac{x \cdot M}{N_A \cdot a^3}$$

二、常见计算类型

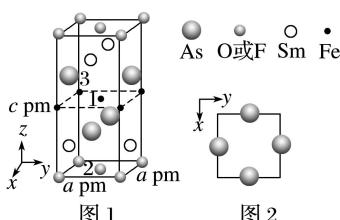
类型一 晶胞的密度的计算

- 1、[2019·全国卷I·节选]图(a)是MgCu₂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。设阿伏加德罗常数的值为N_A, 则MgCu₂的密度是_____g·cm⁻³(列出计算表达式)

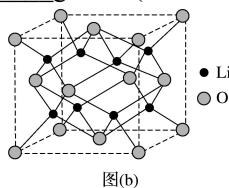


- 2、[2019·全国卷II·节选]一种四方结构的超导化合物的晶胞如图1所示。晶胞中Sm和As原子的投影位置如图2所示。图中F⁻和O²⁻共同占据晶胞的上下底面位置, 若两者的比例依次用x和1-x代表, 则该化合物的化学式表示为_____; 通过测定密度ρ和晶胞参数, 可以计算该物质的x值, 完成它们关系表达式: $\rho = \text{_____g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。以晶胞参数为单位长度建立的坐标系可以表示晶胞中各原子的位置, 称作原子分数坐标,

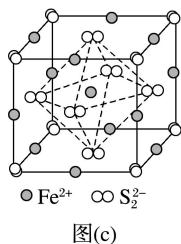
例如图1中原子1的坐标为 $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, 则原子2和3的坐标分别为_____、_____



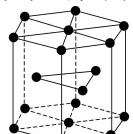
- 3、[2018·全国卷I·节选]Li₂O具有反萤石结构, 晶胞如图(b)所示。已知晶胞参数为0.4665 nm, 阿伏加德罗常数的值为N_A, 则Li₂O的密度为_____g·cm⁻³(列出计算式)



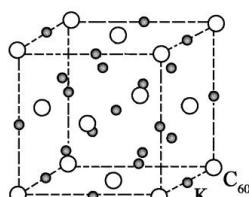
- 4、[2018·全国卷II·节选]FeS₂晶体的晶胞如图(c)所示。晶胞边长为a nm、FeS₂相对式量为M、阿伏加德罗常数的值为N_A, 其晶体密度的计算表达式为_____g·cm⁻³; 晶胞中Fe²⁺位于S²⁻所形成的正八面体的体心, 该正八面体的边长为_____nm



- 5、[2018·全国卷III·节选]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 cm, 高为c cm, 阿伏加德罗常数的值为N_A, Zn的密度为_____g·cm⁻³(列出计算式)



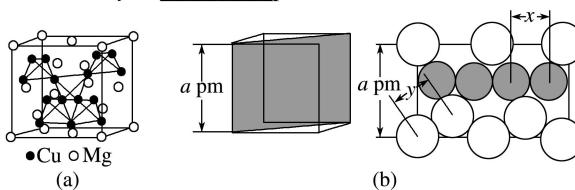
- 6、[2017·海南卷·节选]碳的另一种单质C₆₀可以与钾形成低温超导化合物, 晶体结构如图(c)所示。K位于立方体的棱上和立方体的内部, 此化合物的化学式为_____; 其晶胞参数为1.4 nm, 晶体密度为_____g·cm⁻³



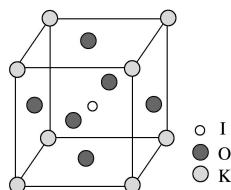
图(c)

类型二 微粒间距离的计算

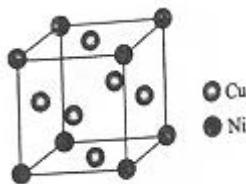
- 7、[2019·全国卷I·节选]图(a)是MgCu₂的拉维斯结构, Mg以金刚石方式堆积, 八面体空隙和半数的四面体空隙中, 填入以四面体方式排列的Cu。图(b)是沿立方格子对角面取得的截图。可见, Cu原子之间最短距离x=_____pm, Mg原子之间最短距离y=_____pm



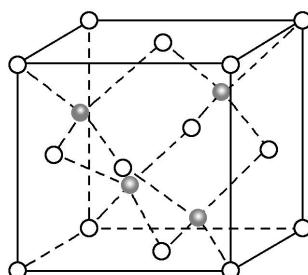
- 8、[2017·全国卷I·节选]KIO₃晶体是一种性能良好的非线性光学材料, 具有钙钛矿型的立体结构, 边长为a=0.446 nm, 晶胞中K、I、O分别处于顶角、体心、面心位置, 如图所示。K与O间的最短距离为_____nm, 与K紧邻的O个数为_____



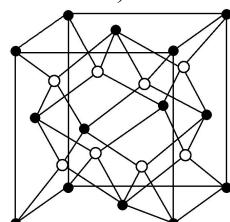
- 9、[2016·全国卷II·节选]某镍白铜合金的立方晶胞结构如图所示。



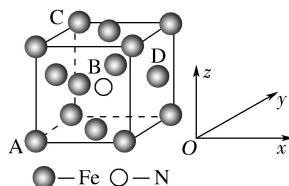
- ①晶胞中铜原子与镍原子的数量比为_____
 ②若合金的密度为dg/cm³, 晶胞参数a=_____nm
 10、Cu与F形成的化合物的晶胞结构如图所示, 若晶体密度为a g·cm⁻³, 则Cu与F最近距离为_____pm。
 (阿伏加德罗常数用N_A表示, 列出计算表达式, 不用化简; 图中○为Cu, ●为F)



- 11、如图为Na₂S的晶胞, 该晶胞与CaF₂晶胞结构相似, 设晶体密度是ρ g·cm⁻³, 试计算Na⁺与S²⁻的最短距离_____cm(阿伏加德罗常数用N_A表示, 只写出计算式)



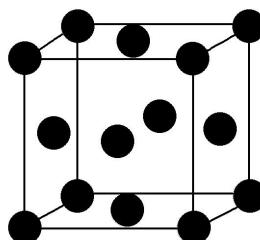
- 12、某氮化铁的晶胞结构如图所示:



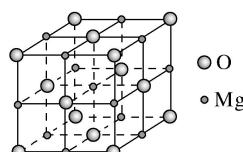
- ①原子坐标参数表示晶胞内部各原子的相对位置。如图晶胞中, 原子坐标参数A为(0, 0, 0); B为($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$); C为(0, 1, 1)。则D原子的坐标参数为_____
 ②若该晶体的密度是ρ g·cm⁻³, 则晶胞中两个最近的Fe的核间距为_____cm(用含ρ的代数式表示, 不必化简)

类型三 金属晶胞中原子半径的计算

- 13、[2019·海南卷·节选]金属锰有多种晶型,其中 $\delta\text{-Mn}$ 的结构为体心立方堆积,晶胞参数为 $a\text{pm}$, $\delta\text{-Mn}$ 中锰的原子半径为_____pm。已知阿伏加德罗常数的值为 N_A , $\delta\text{-Mn}$ 的理论密度 $\rho=$ _____g $\cdot\text{cm}^{-3}$
- 14、用晶体的X-射线衍射法对Cu的测定得到以下结果: Cu的晶胞为面心立方最密堆积(如图),已知该晶体的密度为9.00 g $\cdot\text{cm}^{-3}$,晶胞中该原子的配位数为_____; Cu的原子半径为_____cm(阿伏加德罗常数为 N_A ,要求列式计算)。

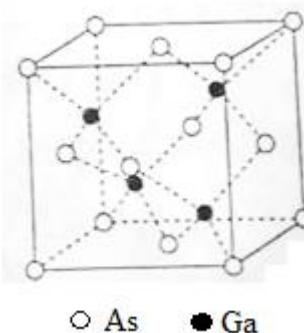


- 15、[2017·全国卷III·节选]MgO具有NaCl型结构(如图),其中阴离子采用面心立方最密堆积方式,X射线衍射实验测得MgO的晶胞参数为 $a=0.420\text{ nm}$,则 $r(\text{O}^{2-})$ 为_____nm。MnO也属于NaCl型结构,晶胞参数为 $a'=0.448\text{ nm}$,则 $r(\text{Mn}^{2+})$ 为_____nm

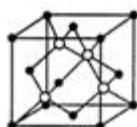


类型四 空间利用率的计算

- 16、[2016·全国卷III·节选](5)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_____



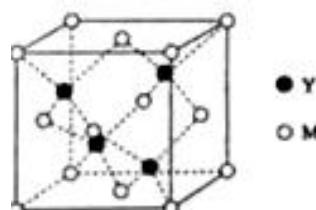
- 17、碳化硅的晶胞结构与金刚石类似(其中“●”为碳原子,“○”为硅原子)。碳化硅的结构中,与碳原子距离最近且相等的碳原子有_____个。设晶胞边长为 $a\text{ cm}$,碳原子直径为 $b\text{ cm}$,硅原子直径为 $c\text{ cm}$,则该晶胞的空间利用率为_____ (用含 a 、 b 、 c 的式子表示)



- 18、已知在氯化钠晶体中 Na^+ 的半径为以 $a\text{ pm}$, Cl^- 的半径为 $b\text{ pm}$,它们在晶体中是紧密接触的,则在氯化钠晶体中离子的空间利用率为_____ (用含 a 、 b 的式子表示)

【课后作业】

- 1、[2016·海南卷·节选]M(Cu)与Y(Cl)形成的一种化合物的立方晶胞如图所示。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_____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)

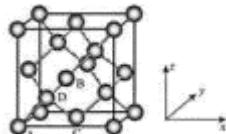


2、[2017·全国卷Ⅱ·节选]R的晶体密度为 $d\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$,其立方晶胞参数为 $a\text{ nm}$,晶胞中含有 y 个 $[(\text{N}_5)_6(\text{H}_3\text{O})_3(\text{NH}_4)_4\text{Cl}]$ 单元,该单元的相对质量为 M ,则 y 的计算表达式为_____。

3、[2016·全国卷Ⅰ·节选]晶胞有两个基本要素:

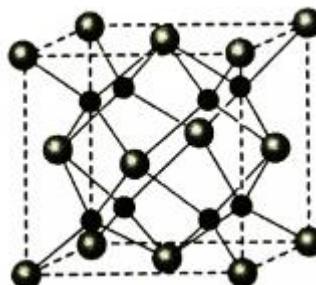
①原子坐标参数,表示晶胞内部各原子的相对位置,下图为Ge单晶的晶胞,其中原子坐标参数A为(0,0,0);

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_____。



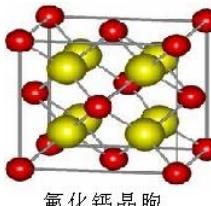
②晶胞参数,描述晶胞的大小和形状。已知Ge单晶的晶胞参数 $a=565.76\text{ pm}$,其密度为_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$

4、[2015·全国卷Ⅱ·节选]A(O)和B(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_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。



5、铜晶体为面心立方最密堆积,铜的原子半径为 127.8 pm ,列式计算晶体铜的密度_____。

6、已知 CaF_2 晶体的密度为 $\rho\text{ g}/\text{cm}^3$, N_A 为阿伏加德罗常数,相邻的两个 Ca^{2+} 的核间距为 $a\text{ cm}$,则 CaF_2 的相对分子质量可以表示为_____。



氟化钙晶胞

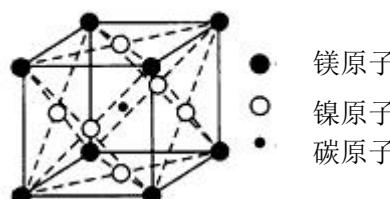
7、 C_{60} 分子中每个原子接2个单键和一个双键,它与 F_2 发生加成反应,其加成产物为_____; C_{60} 的晶体中,每个 C_{60} 晶胞的质量为_____ (用含 N_A 的式子表示)

8、C与孔雀石共热可以得到金属铜,铜原子的原子结构示意图为_____,金属铜采用面心立方最密堆积,则Cu的晶体中Cu原子的配位数为_____.已知Cu单质的晶体密度为 $\rho\text{ g}/\text{cm}^3$,Cu的相对原子质量为M,阿伏伽德罗常数 N_A ,则Cu的原子半径为_____。

9、在离子晶体中正、负离子间力求尽可能多的接触,以降低体系的能量,使晶体稳定存在。已知 Na^+ 半径是 Cl^- 的a倍, Cs^+ 半径是 Cl^- 的b倍,请回顾课本上 NaCl 和 CsCl 的晶胞,其晶胞边长比为_____。

10、Fe为体心立方密堆积,则铁原子的配位数是_____,假设铁原子的半径是 $r\text{ cm}$,该晶体的密度是 $\rho\text{ g}/\text{cm}^3$,则铁的相对原子质量为_____ (设阿伏加德罗常数的值为 N_A)。

11、据报道,只含镁、镍和碳三种元素的晶体竟然也具有超导性。鉴于这三种元素都是常见元素,从而引起广泛关注。该晶体的结构可看作由镁原子和镍原子在一起进行面心立方最密堆积,如图,晶体中每个镁原子周围距离最近的镍原子有_____个,若已知晶胞的边长为 $a\text{ pm}$,阿伏伽德罗常数为 N_A ,则该晶体的密度的数学表达式为_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (用 a 和 N_A 表示,只列式,可不用化简)



12、一种铜金合金晶体具有面心立方最密堆积的结构。在晶胞中,Au原子位于顶点,Cu原子位于面心,则该合金中Au原子与Cu原子个数之比为_____,若该晶胞的边长为 $a\text{ pm}$,则合金的密度为_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (只要求列算式,不必计算出数值,阿伏伽德罗常数为 N_A)

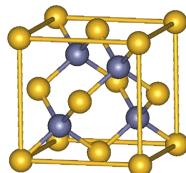
13、一种 Al-Fe 合金的立体晶胞如下图所示。请据此回答下列问题：

①确定该合金的化学式_____

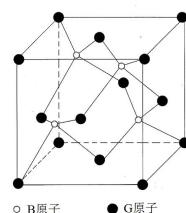
②若晶体的密度 = ρ g/cm³, 则此合金中最近的两个 Fe 原子之间的距离(用含 ρ 的代数式表示, 不必化简)为_____cm



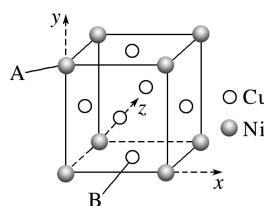
14、砷化镓晶体中最近的砷和镓原子核间距为 a cm, 砷化镓的摩尔质量为 b g·mol⁻¹, 阿伏伽德罗常数值为 N_A , 则砷化镓晶体密度的表达式_____g·cm⁻³



15、已知晶体中 B 与 G 原子的最近距离为 a pm, 则该晶体的密度的表达式为_____g/cm³
(图中: B 为硼原子, G 为磷原子)



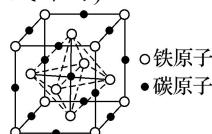
16、铜镍合金的立方晶胞结构如图所示, 其中原子 A 的坐标参数为(0,1,0)



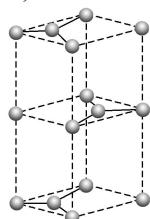
(1)原子 B 的坐标参数为_____

(2)若该晶体密度为 d g·cm⁻³, 则铜镍原子间最短距离为_____pm

17、奥氏体是碳溶解在 γ -Fe 中形成的一种间隙固溶体, 无磁性, 其晶胞为面心立方结构, 如图所示, 则该物质的化学式为_____。若晶体密度为 d g·cm⁻³, 则晶胞中最近的两个碳原子的距离为_____pm(阿伏加德罗常数的值用 N_A 表示, 写出简化后的计算式即可)



18、石墨是一种混合型晶体, 具有多种晶体结构, 其一种晶胞的结构如图所示。该晶胞中的碳原子有_____种原子坐标; 若该晶胞底面边长为 a pm, 高为 c pm, 则石墨晶体中碳碳键的键长为_____pm, 密度为_____g·cm⁻³(设阿伏加德罗常数的值为 N_A)



【晶体计算类型归纳】答案

类型一 晶胞的密度的计算

$$1、\frac{8 \times 24 + 16 \times 64}{N_A a^3 \times 10^{-30}}$$

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。

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

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, O²⁻的比例为 $1 - x$, 故该化合物的化学式为 SmFeAsO_{1-x}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 $\left[0, 0, \frac{1}{2} \right]$ 。

$$3、\frac{8 \times 7 + 4 \times 16}{N_A \cdot 0.4665 \times 10^{-7} \text{ cm}^3}$$

解析: 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 Li₂O 晶胞的质量为 $\frac{8 \times 7 + 4 \times 16}{N_A} \text{ g}$, 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 $\frac{8 \times 7 + 4 \times 16}{N_A \cdot 0.4665 \times 10^{-7} \text{ cm}^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

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

解析: 分析晶胞结构可知, Fe²⁺位于棱心和体心, S²⁻位于顶点和面心, 因此每个晶胞中含有的 Fe²⁺个数为 $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$, 每个晶胞中含有的 S²⁻个数为 $6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8} = 4$, 即每个晶胞中含有 4 个 FeS₂。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 $= \frac{4M}{N_A a \times 10^{-7} \text{ cm}^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = \frac{4M}{N_A a^3} \times 10^{21} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。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 $\frac{\sqrt{2}}{2}a \text{ nm}$ 。

$$5、\text{六方最密堆积(A}_3\text{型)} \quad \frac{65 \times 6}{N_A \times 6 \times \frac{\sqrt{3}}{4} \times a^2 c}$$

解析: 金属 Zn 晶体为六方最密堆积方式(A₃型)。六棱柱底边边长为 a cm, 则六棱柱上下面的面积均为 $6 \times \frac{\sqrt{3}}{4}a^2 \text{ cm}^2$, 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、K₃C₆₀, 2.0

解析: 根据晶胞的结构, C₆₀位于顶点和面心, 个数为 $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$, K 为与棱上和内部, 个数为 $12 \times 1/4 + 9 = 12$, 因此化学式为 K₃C₆₀, 晶胞的质量为 $\frac{4 \times 837}{N_A} \text{ g}$, 晶胞的体积为 $(1.4 \times 10^{-7})^3 \text{ cm}^3$, 根据密度的定义, 则晶胞的密度

为 2.0 g/cm^3 。

类型二 微粒间距离的计算

7、 $\frac{\sqrt{2}}{4}a$ $\frac{\sqrt{3}}{4}a$

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 $(a\times10^{-10})^3\text{ cm}^3$, 代入密度公式计算即可。

8、 0.315 (或 $\frac{\sqrt{2}}{2}\times0.446$) 12

解析: 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 $\frac{\sqrt{2}\times0.446}{2}\text{ nm}\approx0.315\text{ nm}$ 。K、O构成面心立方, 配位数为12(同层4个, 上、下层各4个)

9、①3:1 ② $\left[\frac{251}{6.02\times10^{23}\times d}\right]^{\frac{1}{3}}\times10^7$

10、 $\frac{\sqrt{3}}{4}\sqrt[3]{\frac{4\times83}{a\cdot N_A}}\times10^{10}$

解析: 设晶胞的棱长为 $x\text{ cm}$, 在晶胞中, Cu的数目: $8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}=4$; F的数目: 4, 其化学式为 CuF 。 $a\cdot x^3\cdot N_A=4M(\text{CuF})$, $x=\sqrt[3]{\frac{4M(\text{CuF})}{a\cdot N_A}}$ 。最短距离为小立方体对角线的一半, 小立方体的体对角线为 $\sqrt{\left(\frac{x}{2}\right)^2+\left(\frac{x}{2}\right)^2+\left(\frac{x}{2}\right)^2}=\frac{\sqrt{3}}{2}x$ 。所以最短距离为 $\frac{\sqrt{3}}{2}x\cdot\frac{1}{2}=\frac{\sqrt{3}}{4}\sqrt[3]{\frac{4\times83}{a\cdot N_A}}\times10^{10}\text{ pm}$ 。

11、 $\frac{\sqrt{3}}{4}\sqrt[3]{\frac{4\times78}{\rho\cdot N_A}}$

解析: 晶胞中, ●个数为 $8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}=4$, ○个数为8, 其个数之比为1:2, 所以●代表 S^{2-} , ○代表 Na^+ 。

设晶胞边长为 $a\text{ cm}$, 则 $a^3\cdot\rho\cdot N_A=4\times78$, $a=\sqrt[3]{\frac{4\times78}{\rho\cdot N_A}}$,

面对角线为 $\sqrt{2}\times\sqrt[3]{\frac{4\times78}{\rho\cdot N_A}}\text{ cm}$, 面对角线的 $\frac{1}{4}$ 为 $\frac{\sqrt{2}}{4}\times\sqrt[3]{\frac{4\times78}{\rho\cdot N_A}}\text{ cm}$, 边长的 $\frac{1}{4}$ 为 $\frac{1}{4}\times\sqrt[3]{\frac{4\times78}{\rho\cdot N_A}}\text{ cm}$, 所以其最短距离为 $\sqrt{\left(\frac{\sqrt{2}}{4}\times\sqrt[3]{\frac{4\times78}{\rho\cdot N_A}}\right)^2+\left(\frac{1}{4}\times\sqrt[3]{\frac{4\times78}{\rho\cdot N_A}}\right)^2}\text{ cm}=\frac{\sqrt{3}}{4}\sqrt[3]{\frac{4\times78}{\rho\cdot N_A}}\text{ cm}$ 。

12、① $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ② $\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt[3]{\frac{238}{\rho N_A}}$

解析: ①D位于该晶胞侧面的面心, 可知其坐标参数为 $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。②该晶胞中Fe的个数为 $8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}=4$, N的个数为1。设两个最近的Fe核间距为 $x\text{ cm}$, 晶胞的边长为 $a\text{ cm}$, 则 $\sqrt{2}a=2x$, 故 $a=\sqrt{2}x$ 。则 $\rho\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}\times(\sqrt{2}x\text{ cm})^3=56\times4+14$, $x=\frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt[3]{\frac{238}{\rho N_A}}$ 。

类型三 金属晶胞中原子半径的计算

13、 $\frac{\sqrt{3}a}{4}$ $\frac{2\times55}{N_A a^3 \times 10^{-30}}$

14、12 $\frac{\sqrt{2}}{4}\times\sqrt[3]{\frac{4\times64}{9.00\times6.02\times10^{23}}}\approx1.27\times10^{-8}$

解析: 设晶胞的边长为 $a\text{ cm}$, 则 $a^3\cdot\rho\cdot N_A=4\times64$, $a=\sqrt[3]{\frac{4\times64}{\rho\cdot N_A}}$,

面对角线为 $\sqrt{2}a$, 面对角线的 $\frac{1}{4}$ 为Cu原子半径, $r=\frac{\sqrt{2}}{4}\times\sqrt[3]{\frac{4\times64}{9.00\times6.02\times10^{23}}}\approx1.27\times10^{-8}\text{ cm}$ 。

15. 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 $2[r(\text{Mn}^{2+})+r(\text{O}^2-)] = a'$, $r(\text{Mn}^{2+}) = 0.076 \text{ nm}$ 。

类型四 空间利用率的计算

16、原子晶体; 共价键 $\frac{4\pi \times 10^{-30} N_A \rho (r_{\text{Ga}}^3 + r_{\text{As}}^3)}{3(M_{\text{Ga}} + M_{\text{As}})} \times 100\%$

解析: GaAs 的熔点为 1238°C , 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。根据晶胞结构可知晶胞中 Ca 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 $r_{\text{As}} \text{ pm}$, 阿伏加德罗常数值为 N_A , 则 GaAs 晶胞中原子

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

17、12 $[2\pi (b^3 + c^3) / 3a^3] \times 100\%$

18、 $\frac{2\pi}{3} \times \frac{(a^3 + b^3)}{(a+b)^3} \times 100\%$

【课后作业】

1、① CuCl $\frac{4 \times 99.5}{N_A \times (0.542)^3 \times 10^{-21}}$ 或 $\frac{4 \times M(\text{CuCl})}{N_A \times a^3 \times 10^{-21}}$ (每空 2 分, 共 4 分)

(3) 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 , 1mol 晶胞中含有 4mol CuCl , 1mol 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 $\frac{4 \times M(\text{CuCl})}{N_A \times a^3 \times 10^{-21}} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

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

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

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

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

5、 $\frac{4 \times 64}{N_A (2\sqrt{2} \times 127.8 \times 10^{-10})^3} = 9.0 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$

6、 $\frac{\sqrt{2}}{2}a^3 \rho N_A$

7、 $\text{C}_{60}\text{F}_{60}$ $2880/N_A \text{ g}$

8、 $\text{(-29) } \left(\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 8 & 18 & 1 \end{array} \right) \text{ (1 分)} \quad 12 \text{ (1 分)} \quad \frac{\sqrt{2}}{4} \times \frac{3\sqrt[3]{4M}}{N_A} \text{ cm (2 分)}$

9、 $\frac{\sqrt{3}(1+a)}{1+b}$

$$\frac{32\sqrt{3}}{3} \rho N_A r^3$$

10、8;

9

$$11、12 \quad \frac{24 + 3 \times 58.7 + 12}{N_A (a \times 10^{-10})^3}$$

$$12、1:3 \quad (197+64 \times 3) \times 10^{30} / (a^3 N_A)$$

$$13、\textcircled{1} \text{Fe}_2\text{Al} \quad \textcircled{2} \quad \sqrt[3]{\frac{139}{8\rho N_A}}$$

$$14、\frac{3\sqrt{3} \cdot b}{16a^3 N_A}$$

$$15、\frac{4 \times 42}{N_A \times \left(\frac{4}{\sqrt{3}} a \times 10^{-10}\right)^3}$$

$$16、\textcircled{1} \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \quad \textcircled{2} \frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{251}{dN_A}} \times 10^{10}$$

解析: (1)根据 A 点的坐标, 可以判断晶胞底面的面心上的原子 B 的坐标参数为 $\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$ 。

(2)处于面对角线上的 Ni、Cu 原子之间距离最近, 设二者之间距离为 a pm, 晶胞面对角线长度等于 Ni、Cu 原子距离的 2 倍, 而面对角线长度等于晶胞棱长的 $\sqrt{2}$ 倍, 故晶胞棱长 =

$$2a \text{ pm} \times \frac{\sqrt{2}}{2} = \sqrt{2}a \text{ pm}, \text{ 晶胞质量} = \frac{59+64 \times 3}{N_A} \text{ g, 故} (\sqrt{2}a \times 10^{-10} \text{ cm})^3 \times d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = \frac{59+64 \times 3}{N_A} \text{ g, 解得} a = \frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{251}{dN_A}} \times 10^{10} \text{ pm}$$

$$17、\text{FeC(或 Fe}_4\text{C}_4) \quad \frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{272}{dN_A}} \times 10^{10}$$

解析: 根据晶胞结构可知, 晶胞中铁原子个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$, 碳原子个数为 $1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4$, 因此该物质的化学式为 FeC(或 Fe₄C₄); 晶胞中最近的两个碳原子之间的距离为面对角线的一半, 晶胞的边长为

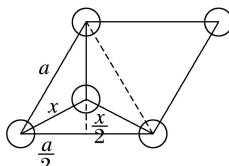
$$= \sqrt[3]{\frac{4 \times 68 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} \times N_A \text{ mol}^{-1}}}$$

$$= \sqrt[3]{\frac{272}{dN_A}} \text{ cm} \times \sqrt{2}, \text{ 所以晶胞中最近的碳原子之间的距离为} \frac{\sqrt[3]{\frac{272}{dN_A}} \text{ cm} \times \sqrt{2}}{2} =$$

$$\frac{\sqrt{2}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{272}{dN_A}} \times 10^{10} \text{ pm.}$$

$$18、4 \quad \frac{\sqrt{3}a}{3} \quad \frac{32\sqrt{3}}{a^2 c N_A} \times 10^{30}$$

解析: 每个石墨晶胞有碳原子 $8 \times \frac{1}{8} + 4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2} + 1 = 4$ 个, 则有 4 种原子坐标;



晶胞底面图

设碳碳键的键长为 x pm, 则 $x^2 = \left(\frac{x}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2$, 解得 $x = \frac{\sqrt{3}a}{3}$;

晶胞底面的高为 $\sqrt{a^2 - \left(\frac{a}{2}\right)^2}$ pm = $\frac{\sqrt{3}a}{2}$ pm, 一个晶胞体积 = $(a \times 10^{-10}) \times \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} \times 10^{-10}\right) \times (c \times 10^{-10}) \text{ cm}^3$,

一个晶胞质量为 $\frac{4}{N_A} \times 12 \text{ g}$, 故石墨晶体密度为 $\frac{32\sqrt{3}}{a^2 c N_A} \times 10^{30} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。