



第三章 晶体结构和性质

第一节 物质的聚集状态与晶体的常识

第2课时 晶胞及其计算

板块导航

- 01/学习目标 明确内容要求，落实学习任务
- 02/思维导图 构建知识体系，加强学习记忆
- 03/知识导学 梳理教材内容，掌握基础知识
- 04/效果检测 课堂自我检测，发现知识盲点
- 05/问题探究 探究重点难点，突破学习任务
- 06/分层训练 课后训练巩固，提升能力素养

part.

01

学习目标

1. 认识简单的晶胞，通过典型晶胞的学习，类推其他晶胞的分析方法
2. 学会晶胞中微粒数的计算方法(均摊法)，能根据晶胞的结构确定微粒个数和化学式。
3. 知道 X 射线衍射实验是测定晶体结构的常用方法。
4. 初步学习晶体密度计算的方法。

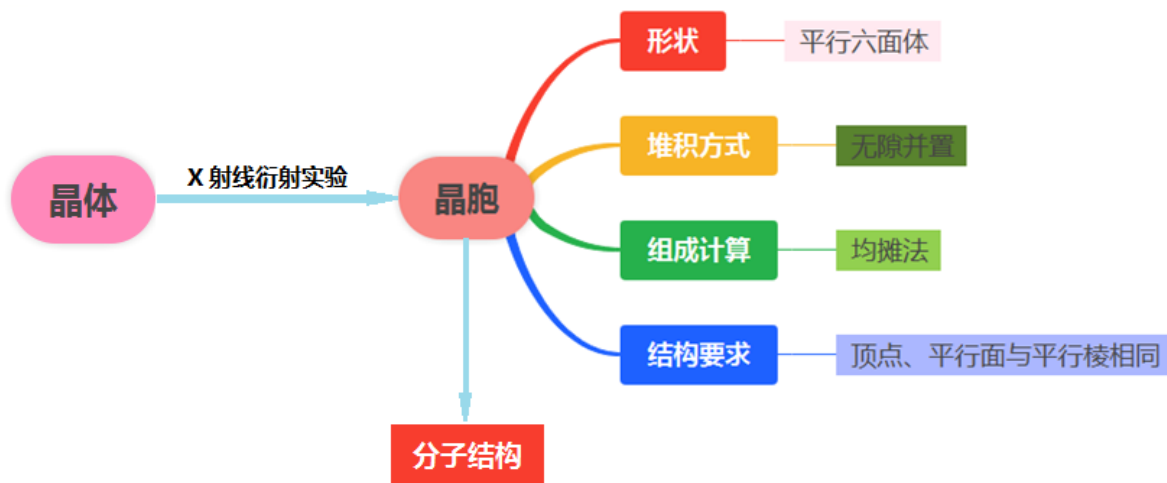
重点：晶胞的形状、堆积方式以及结构特点；均摊法计算晶胞的化学组成。

难点：晶胞的无隙并置堆积方式及其结构特点。

part.

02

思维导图





一、晶胞

1. **晶胞的概念**：晶胞是描述晶体结构的基本单元，晶胞是晶体中最小的重复结构单元。

2. **晶胞与晶体的关系**：晶胞(微观)一般都是平行六面体，晶体(宏观)是由无数晶胞无隙并置而成。

(1)无隙：相邻晶胞之间无任何间隙。两个晶胞共用同一个平面：上面晶胞的下底面，就是下面晶胞的上底面。

(2)并置：所有晶胞都是平行排列的，取向相同。即：将任意晶胞沿着晶胞的周期性排列方向移动到相邻或其他晶胞时，能够完全重合，过程中无须转动或改变方向。

(3)所有晶胞的形状及其内部的原子种类、个数及几何排列是完全相同的。

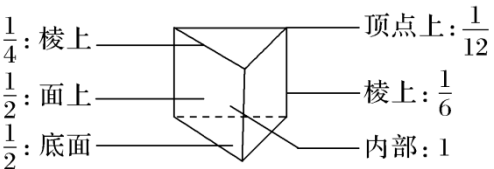
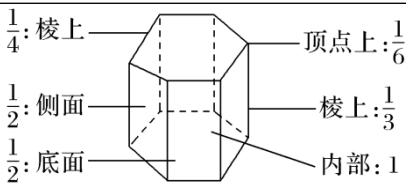
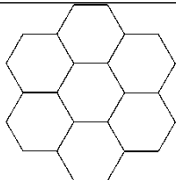
3. 晶胞的结构：

(1)晶胞的外形：常规的晶胞都是平行六面体。晶胞是8个顶角相同、三套各4根平行棱分别相同、三套各两个平行面分别相同的最小平行六面体，即8个顶点、六个面、12条棱。

(2)立方晶胞中微粒数的计算方法如下：晶胞中任意位置上的一个原子如果是被n个晶胞所共有，那么，每个晶胞对这个原子分得的份额就是 $\frac{1}{n}$ 。

对于立方晶胞而言，每个晶胞实际含有的微粒数=顶点微粒数 $\times \frac{1}{8}$ +棱上微粒数 $\times \frac{1}{4}$ +面上微粒数 $\times \frac{1}{2}$ +体内微粒数 $\times 1$ 。

(3)非长方体晶胞中粒子视具体情况而定

三棱柱	 $\frac{1}{4}$: 棱上 $\frac{1}{2}$: 面上 $\frac{1}{2}$: 底面 顶点上: $\frac{1}{12}$ 棱上: $\frac{1}{6}$ 内部: 1
六棱柱	 $\frac{1}{4}$: 棱上 $\frac{1}{2}$: 侧面 $\frac{1}{2}$: 底面 顶点上: $\frac{1}{6}$ 棱上: $\frac{1}{3}$ 内部: 1
平面型	 石墨晶胞每一层内碳原子排成六边形，其顶点(1个碳原子)被三个六边形共有，每个六边形占$\frac{1}{3}$

(4)有关上述的计算必须明确：由晶胞构成的晶体，其化学式不是表示一个晶胞中含有多少个某原子，而是表示每个晶胞中平均含有各类原子的最简个数比。

教材【思考与讨论】参考答案：





(1)晶胞有三套各四条平行棱，三套各两个平行面。

(2)利用“均摊法”，可确定四种晶胞中平均所含原子(或分子)个数：

金属钠： $8 \times (1/8) + 1 = 2$

金属锌： $8 \times (1/8) + 1 = 2$

碘：所含碘原子数为 $2 \times [8 \times (1/8) + 6 \times (1/2)] = 8$

金刚石：一个晶胞平均含碳原子数为 $8 \times (1/8) + 6 \times (1/2) + 4 = 8$

教材【探究——准晶】参考答案：

(1)准晶的概念：准晶是在急冷的 Al-Mn 合金中发现的，是一种介于晶体和非晶体之间的固体。

(2)准晶的结构：准晶具有完全有序的结构，然而又不具有晶体所具有的平移对称性，因而可以具有晶体所不允许的宏观对称性。准晶是具有准周期平移格子构造的固体，其中的原子常呈定向有序排列，但不作周期性平移重复，其对称要素包含与晶体空间格子不相容的对称。

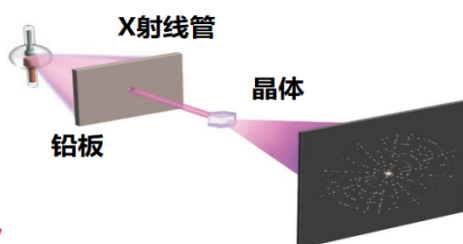
(3)准晶的特性：准晶具有独特的属性，坚硬又有弹性、非常平滑，而且与大多数金属不同的是其导电性、导热性很差，因此在日常生活中大有用武之地。

二、晶胞结构的测定

1. 测定仪器：X 射线衍射仪



最常用的仪器是X射线衍射仪



2. X 射线衍射原理：单一波长的 X 射线通过晶体时，X 射线和晶体中的电子相互作用，会在记录仪上产生分立的斑点或明锐的衍射峰。

3. 测定方法：

(1)X 射线衍射仪 $\xrightarrow{\text{发出}}$ 单一波长的 X 射线 $\xrightarrow{\text{通过}}$ 晶体 $\xrightarrow{\text{X射线和晶体中的电子相互作用}}$ 记录仪 $\xrightarrow{\text{产生}}$ 分立的斑点或明锐的衍射峰。

(2)X 射线衍射仪 $\xrightarrow{\text{发出}}$ 单一波长的 X 射线 $\xrightarrow{\text{通过}}$ 非晶体 $\xrightarrow{\text{X射线和晶体中的电子相互作用}}$ 记录仪 $\xrightarrow{\text{产生}}$ 连续的谱线。

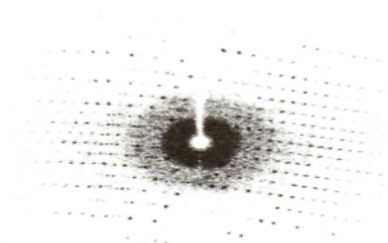


图 3-13 单晶衍射图

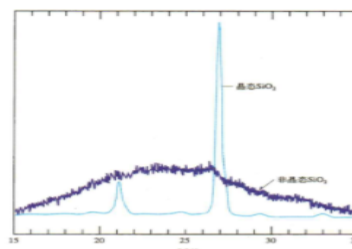


图 3-14 非晶态和晶态 SiO_2 粉末衍射图谱的对比

4. X 射线衍射图谱的应用：经过计算可以从衍射图形获得晶体结构的相关信息。





(1)通过 X 射线衍射图,通过计算获得晶体结构的相关信息,包括晶体形状和大小、分子或原子在微观空间有序排列呈现的对称类型、原子在晶胞里的数目和位置等。

(2)根据原子坐标,可以计算原子间的距离,判断哪些原子之间存在化学键,确定键长和键角,得出分子的空间结构。

三、晶胞的有关计算

1. 求化学式:

(1)概念:一般地,晶体的化学式表示的是晶体(也可以说是每个晶胞)中各类原子或离子数目的最简整数比。

(2)计算方法:均摊法

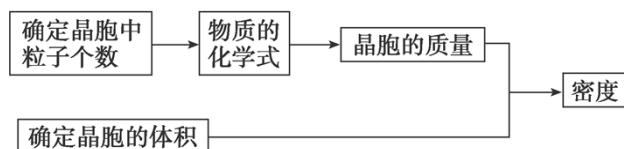
①立方晶胞:每个顶点上的粒子被 8 个晶胞共用,每个粒子只有(1/8)属于该晶胞;每条棱上的粒子被 4 个晶胞共用,每个粒子只有(1/4)属于该晶胞;每个面心上的粒子被 2 个晶胞共用,每个粒子只有(1/2)属于该晶胞;晶胞内的粒子完全属于该晶胞。

②六方晶胞:每个顶点上的粒子被 6 个晶胞共用;每条横棱上的粒子被 4 个晶胞共用;每条纵棱上的粒子被 3 个晶胞共用;每个面心上的粒子被 2 个晶胞共用;晶胞内的粒子完全属于该晶胞。

③三棱晶胞:每个顶点上的粒子被 12 个晶胞共用;每条横棱上的粒子被 4 个晶胞共用;每条纵棱上的粒子被 6 个晶胞共用;每个面心上的粒子被 2 个晶胞共用;晶胞内的粒子完全属于该晶胞。

2. 计算晶体密度的方法

(1)思维流程



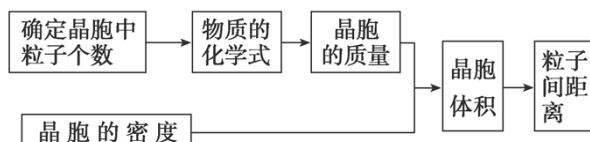
$$\rho = \frac{NM}{N_A \cdot a^3}$$

(2)计算公式: $\rho = \frac{NM}{N_A \cdot a^3}$ (N 为晶胞中的粒子数, M 为晶胞化学式的摩尔质量, N_A 为阿伏加德罗常数, a 为晶胞边长)。

(3)常用到的单位换算: $1\text{m}=10^2\text{cm}=10^9\text{nm}=10^{10}\text{\AA}=10^{12}\text{pm}$ 。

3. 计算晶体中粒子间距离的方法

(1)思维流程



(2)计算方法:微粒间距离的计算常常涉及晶体密度、 N_A 、 m 、晶体体积等数据,解答这类题目时,一要掌握“均摊法”原理,二要熟悉常见晶体的结构特征,三要明确微粒的位置,结合数学知识,找出所求微粒间的距离与晶胞边长、面对角线或者体对角线的关系。



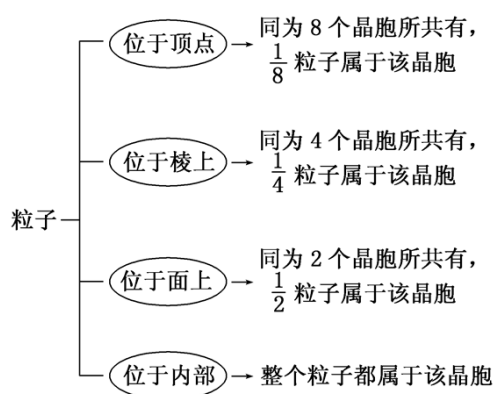


八、晶胞

概念	晶体结构中最小的 <u>重复单元</u>
形状	大小、形状完全相同的 <u>平行六面体</u>
类型	六方最密堆积—— <u>六方</u> 晶胞
	面心立方最密堆积—— <u>面心立方</u> 晶胞
“切割法”计算	某晶胞中的微粒，如果被 n 个晶胞所共有，则微粒的 <u>$\frac{1}{n}$</u> 属于该晶胞

九、晶胞中粒子数目的计算方法——切割法

1. 平行六面体晶胞



2. 非平行六面体晶胞

晶胞中粒子对晶胞的贡献视具体情况而定，如正六棱柱形晶胞，顶点上的每个微粒对晶胞的贡献为 $\frac{1}{6}$ ，

水平棱边为 $\frac{1}{4}$ ，竖直棱边为 $\frac{1}{3}$ ，面为 $\frac{1}{2}$ ，内部为 1。

part. 04 效果检测

1. 请判断下列说法的正误(正确的打“√”，错误的打“×”)

(1)晶胞是晶体结构中最小的重复单元()

【答案】√

【解析】晶体结构中的最小重复单元是晶胞，正确。

(2)晶胞是晶体中最小的平行六面体()

【答案】×

【解析】大部分晶体是由平行六面体形晶胞无隙并置而成，但不是所有晶体，错误。

(3)晶胞中的粒子都完全属于该晶胞()

【答案】×

【解析】由于晶胞要无隙并置排列，必然出现相邻晶胞共用粒子的情况，错误。

(4)不同晶体中晶胞的大小和形状均相同()

【答案】×





【解析】不同晶体中的晶胞形状可能相同，但晶胞的大小不相同，如果形状和大小均相同，则是同一种晶胞，错误。

(5)若晶胞为平行六面体，则侧棱上的粒子为2个晶胞共用()

【答案】×

【解析】若晶胞为平行六面体，则侧棱属于4个平行六面体，侧棱上的粒子为4个晶胞共用，不正确。

(6)晶胞中不可能存在多个粒子()

【答案】×

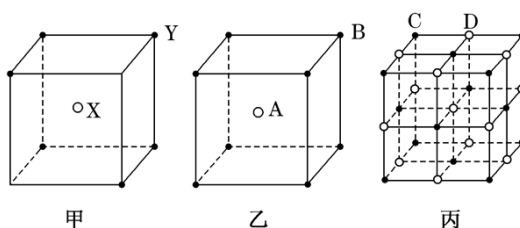
【解析】晶胞中可能存在多个粒子，如氯化钠晶胞，不正确。

(7)晶胞中的任何一个粒子都完全属于该晶胞()

【答案】×

【解析】处于晶胞内部的粒子完全属于该晶胞，处于顶点、面心和棱边上的微粒与其它晶胞共用，错误。

2. 如下图所示，现有甲、乙、丙三种晶体的晶胞：

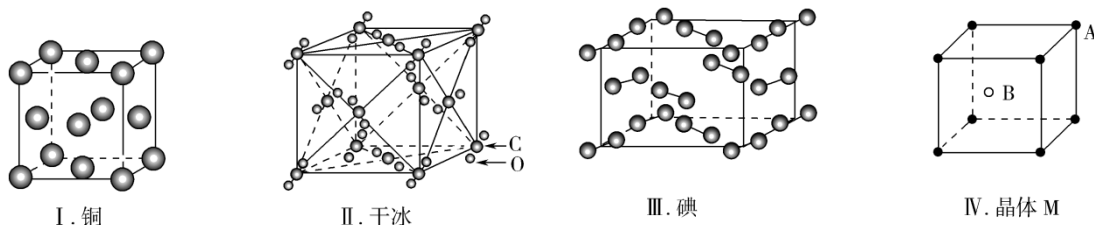


甲中 X 处于晶胞的中心，乙中 A 处于晶胞的中心，可推知，甲晶体中 X 与 Y 的个数比是_____，乙是 A 与 B 的个数比是_____，丙晶胞中有_____个 C 离子，有_____个 D 离子。

【答案】4:3 1:1 4 4

【解析】注意甲中并不是8个顶点上都有Y，而只有6个顶点上存在Y原子。甲中 $N(X):N(Y)=1:(6 \times \frac{1}{8})=4:3$ ；乙中 $N(A):N(B)=1:(8 \times \frac{1}{8})=1:1$ ；丙中 C 的个数为 $(8 \times \frac{1}{8})+6 \times \frac{1}{2}=4$ ，D 的个数为 $(12 \times \frac{1}{4})+1=4$ 。

3. 根据下列四种晶体的晶胞示意图回答问题：



(1)根据图I分析，铜晶胞平均含有的铜原子数是_____。

(2)根据图II分析，干冰晶胞平均含有的 CO_2 分子数是_____。

(3)根据图III分析，碘晶体中碘分子的排列有_____种不同的方向。

(4)根据图IV分析，晶体M的化学式可能是_____。

【答案】(1)4 (2)4 (3)2 (4)AB(或BA)





【解析】(1)铜晶胞平均含有的铜原子数为 $\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$ 。(2)干冰晶胞平均含有的 CO_2 分子数为 $\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$ 。(3)根据碘晶胞中碘分子的排列方向可知，碘晶体中碘分子的排列有2种不同的方向。(4)晶体M的晶胞中， $N(\text{A}) : N(\text{B}) = \left(\frac{1}{8} \times 8\right) : 1 = 1 : 1$ ，故M的化学式可能为AB(或BA)。

part.

05

问题探究

►问题一 晶胞概念的理解

【典例1】下列有关晶胞的叙述，正确的是()

- A. 所有的晶胞都是平行六面体
- B. 不同的晶体中晶胞的大小和形状都相同
- C. 晶胞中的任何一个粒子都属于该晶胞
- D. 已知晶胞的组成就可推知晶体的组成

【答案】D

【解析】习惯采用的晶胞是平行六面体，A项不正确；相同晶体中晶胞的大小和形状完全相同，不同晶体的晶胞大小一般不相同，B选项错误；晶体中的粒子被若干个晶胞所共有，不专属于某个晶胞，C选项错误；知道晶胞的组成，利用“分摊法”，即可推知晶体的组成，D选项正确。

【解题必备】

对晶胞的理解

“无隙”指相邻的晶胞之间没有任何间隙，一个晶胞与相邻的晶胞完全共顶点、共棱、共面。

“并置”指所有晶胞都是平行排列的，取向相同。一个晶胞到另一个晶胞只需平移，不需转动。

“完全等同”指同一晶体中所有晶胞的形状、内部的原子种类、个数及几何排列完全相同。

【变式1-1】下列有关晶胞的叙述中正确的是()

- A. 晶胞的结构就是晶体的结构
- A. 不同的晶体中，晶胞的大小和形状都相同
- C. 晶胞中的任何一个粒子都完全属于该晶胞
- D. 已知晶胞的组成就可推知晶体的组成

【答案】D

【解析】由晶胞的定义可知A错误；相同晶体中晶胞的大小和形状完全相同，不同晶体的晶胞大小和形状不一定相同，B错误；晶体中的大部分粒子被若干个晶胞所共有，不完全属于某个晶胞，C错误；知道晶胞的组成，利用“均摊法”即可推知晶体的组成，D正确。

【变式1-2】整块晶体可以看作是数量巨大的晶胞“无隙并置”而成。对这句话的理解错误的是()

- A. 相邻晶胞之间没有任何间隙
- A. 晶体是晶胞简单、随意堆积而成
- C. 晶胞排列时，取向相同
- D. “并置”是指所有晶胞都是平行排列的

【答案】B

【解析】晶体并不是晶胞简单、随意堆积而成，而是晶胞平行排列而成的，且相邻晶胞之间没有任何间隙。





►问题二 晶胞中粒子数目及晶体化学式的确定

【典例2】认真下列示意图，有关叙述不正确的是

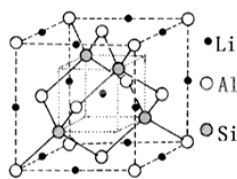


图 1

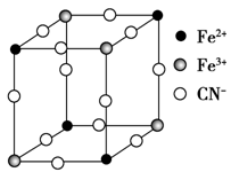


图 2

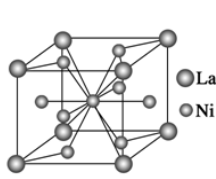


图 3

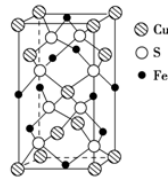


图 4

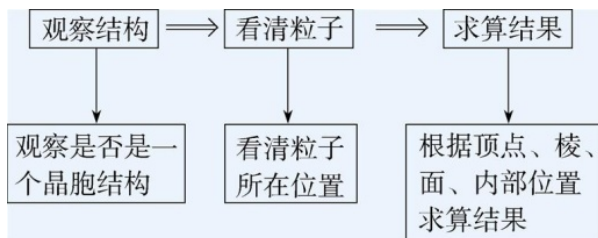
- A. 图 1 表示由 Li、Al、Si 构成的某三元化合物固态晶体结构，该化合物化学式可表示为 LiAlSi
- B. 图 2 表示某蓝色晶体 $[\text{M}_x\text{Fe}_y(\text{CN})_6]$ 的阴离子的最小结构单元，该晶体的化学式为 $\text{MFe}_2(\text{CN})_6$ ，M 呈 +2 价
- C. 图 3 表示金属镍与镧(La)形成的合金晶胞结构，该合金的化学式为 LaNi_5
- D. 图 4 表示某种铁化合物的晶胞如图所示(硫原子均在晶胞内)，该物质化学式为 CuFeS_2

【答案】B

【解析】A 项，该晶胞中 Li 的个数为 $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$ ，Al 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ，Si 的个数为 4，原子个数比为 1:1:1，则该化合物化学式可表示为 LiAlSi ，A 正确；B 项，由图可推出晶体中阴离子的最小结构单元中含 Fe^{2+} 个数为： $4 \times \frac{1}{8} = \frac{1}{2}$ ，同样可推出含 Fe^{3+} 个数也为 $\frac{1}{2}$ ， CN^- 为 $12 \times \frac{1}{4} = 3$ ，因此阴离子为 $[\text{Fe}_2(\text{CN})_6]^-$ ，则该晶体的化学式只能为 $\text{MFe}_2(\text{CN})_6$ ，由阴、阳离子形成的晶体为离子晶体，M 的化合价为 +1 价，B 错误；C 项，由图示可以看出，La 原子均在晶体的 8 个顶点上，而 Ni 原子有 1 个在中心，另外的 8 个在面上，故 La 原子个数 $= 8 \times \frac{1}{8} = 1$ ，Ni 原子个数 $= 1 + 8 \times \frac{1}{2} = 5$ ，故化学式为 LaNi_5 ，C 正确；D 项，晶胞中：Cu 个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 4 \times \frac{1}{2} + 1 = 4$ ；Fe 个数为 $6 \times \frac{1}{2} + 4 \times \frac{1}{4} = 4$ ，S 原子个数为 8 个，Fe、Cu、S 个数比为 $4:4:8 = 1:1:2$ ，D 正确。

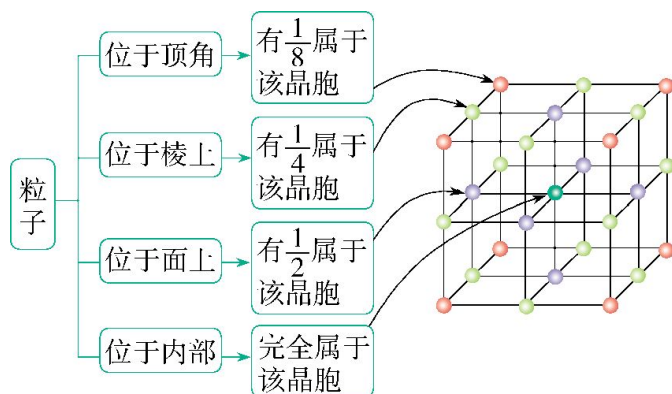
【解题技巧】

判断晶胞中粒子个数的步骤：

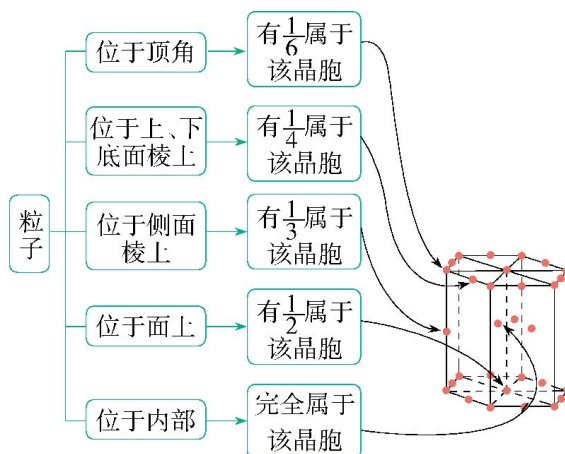


(1)长方体形(正方体形)晶胞中不同位置的粒子对晶胞的贡献

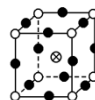
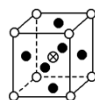
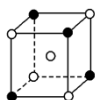
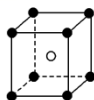




(2) 六方晶胞中不同位置粒子对晶胞的贡献



【变式 2-1】 下列是晶体结构中具有代表性的最小重复单元(晶胞)的排列方式, 其对应的化学式正确的是(图中: $\square$ —X, $\bullet$ —Y, $\otimes$ —Z)()



A. X_2Y

B. XY_3

C. XY_3Z

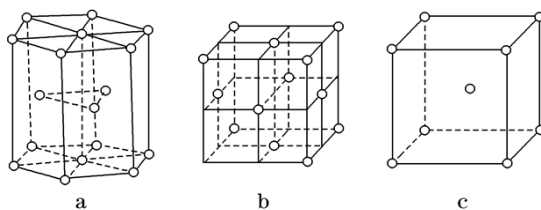
D. XYZ

【答案】C

【解析】 A 图所示的晶胞中 X 的个数为 1, Y 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$, 化学式为 XY; B 图所示的晶胞中 X 的个数为 $1 + 4 \times \frac{1}{8} = \frac{3}{2}$, Y 的个数为 $4 \times \frac{1}{8} = \frac{1}{2}$, 化学式为 X_3Y ; C 图所示的晶胞中 X 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$, Y 的个数为 $6 \times \frac{1}{2} = 3$, Z 的个数为 1, 化学式为 XY_3Z ; D 图所示的晶胞中 X 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$, Y 的个数为 $12 \times \frac{1}{4} = 3$, Z 的个数为 1, 化学式为 XY_3Z 。

【变式 2-2】 金属晶体中金属原子有三种常见的堆积方式: 六方堆积、面心立方堆积和体心立方堆积。a、b、c 分别代表这三种晶胞的结构, 其晶胞 a、b、c 内金属原子个数比为()



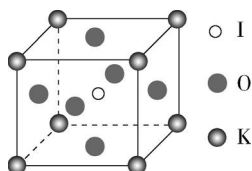


- A. 3:2:1 B. 11:8:4 C. 9:8:4 D. 21:14:9

【答案】A

【解析】a 晶胞中原子个数： $12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$ (个)，b 晶胞中原子个数： $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ (个)，c 晶胞中原子个数： $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ (个)，所以 a、b、c 晶胞中原子个数比为 6:4:2=3:2:1。

【变式 2-3】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，晶胞中 K、I、O 分别处于顶角、体心、面心位置，如图所示，下列有关说法正确的是 ()



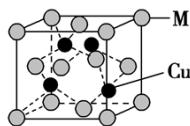
- A. 每个晶胞中含有 8 个 K、6 个 O、1 个 I
 A. IO₃⁻ 的空间构型为四面体形
 C. 与 K 紧邻的 O 的个数为 6 个
 D. 在 KIO₃ 晶胞结构的另一种表示中，若 I 处于各顶角位置，O 处于棱心位置，则 K 处于体心位置

【答案】D

【解析】K 位于晶胞的顶点，O 位于晶胞的面心，I 位于晶胞的体内，故每个晶胞中含有 1 个 K、3 个 O、1 个 I，A 错误；IO₃⁻ 中 I 的价层电子对数为 $3 + \frac{7+1-2 \times 3}{2} = 4$ ，I 采取 sp³ 杂化，则 IO₃⁻ 的空间构型为三角锥形，B 错误；O 位于面心，K 位于顶点，与 K 紧邻的 O 的个数为 12 个，C 错误；在 KIO₃ 晶胞结构的另一种表示中，I 处于各顶角位置，个数为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$ ，O 位于棱心位置，每个棱为 4 个晶胞共有，O 个数为 $12 \times \frac{1}{4} = 3$ ，K 的个数为 1，应位于体心位置，D 正确。

► 问题三 晶胞的计算

【典例 3】M 原子的外围电子排布式为 3s²3p⁵，与铜形成化合物的晶胞如图所示(黑点代表铜原子)。



- (1) 该晶体的化学式为_____。
 (2) 已知该晶体的密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，阿伏加德罗常数为 N_A ，则该晶体中铜原子和 M 原子之间的最短距离为_____cm(只写计算式)。

【答案】(1) CuCl





$$(2) \frac{\sqrt{3}}{4} \times \sqrt[3]{\frac{4 \times 99.5}{N_A \times d}} \text{ 或 } \frac{\sqrt[3]{\frac{4 \times 99.5}{N_A \times d}}}{2\sqrt{2}\sin 54^\circ 44'} \text{ 或 } \frac{\sqrt[3]{\frac{4 \times 99.5}{N_A \times d}}}{2\sqrt{2}\cos 35^\circ 16'}$$

【解析】(1)根据价电子排布式判断出 M 原子为 Cl 原子，由晶胞结构可知，Cu 原子处于晶胞内部，晶胞中含有 4 个 Cu 原子，Cl 原子属于顶点与面心上，晶胞中含有 Cl 原子数目为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ，故化学式为

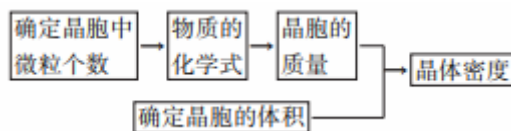
CuCl。(2)一个晶胞的质量为 $\frac{64 + 35.5 \times 4}{N_A} \text{ g}$ ，晶胞体积为 $\frac{64 + 35.5 \times 4}{N_A \cdot d} \text{ cm}^3$ ，晶胞的边长为

$\sqrt[3]{\frac{4 \times 99.5}{N_A \cdot d}} \text{ cm}$ ，根据晶胞的结构可知，铜原子和 M 原子之间的最短距离为立方体体对角线的 $\frac{1}{4}$ ，而体对角线

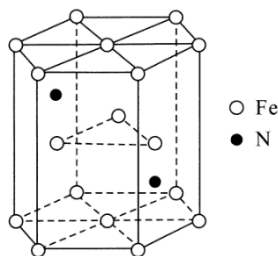
为晶胞边长的 $\sqrt{3}$ 倍，所以铜原子和 M 原子之间的最短距离为 $\frac{\sqrt{3}}{4} \times \sqrt[3]{\frac{4 \times 99.5}{N_A \cdot d}} \text{ cm}$ 。

【解题技巧】

晶胞密度的计算方法：



【变式 3-1】某种磁性氮化铁的结构如图所示，N 随机排列在 Fe 构成的正四面体空隙中。正六棱柱底边长为 a cm，高为 c cm，阿伏加德罗常数的值为 N_A ，则该磁性氮化铁的晶体密度为 $\frac{728}{3\sqrt{3} \times ca^2 N_A} \text{ g/cm}^3$ (列出计算式)。



【答案】 $\frac{728}{3\sqrt{3} \times ca^2 N_A}$

【解析】图中结构单元底面为正六边形，边长为 a cm，底面面积为 $6 \times \frac{1}{2} \times a \text{ cm} \times a \text{ cm} \times \sin 60^\circ = \frac{3\sqrt{3}}{2} \times a^2$

cm^2 ；结构单元的体积 $V = \frac{3\sqrt{3}}{2} \times a^2 \text{ cm}^2 \times c \text{ cm} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \times ca^2 \text{ cm}^3$ ，结构单元中含有 N 原子数为 2，含有的 Fe 原子

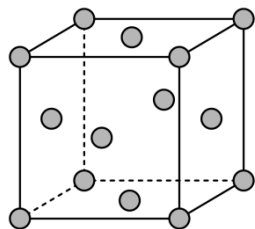
数为： $\frac{1}{6} \times 12 + \frac{1}{2} \times 2 + 3 = 6$ ，该晶胞在原子总质量 $m = \frac{2 \times 14 + 6 \times 56}{N_A} = \frac{364}{N_A} \text{ g}$ ，所以该晶体密度 $\rho =$

$$\frac{m}{V} = \frac{\frac{364}{N_A} \text{ g}}{\frac{3\sqrt{3}}{2} \times ca^2 \text{ cm}^3} = \frac{728}{3\sqrt{3} \times ca^2 N_A} \text{ g/cm}^3。$$





【变式3-2】 C_{60} 的晶胞结构为面心立方结构。已知一定条件下晶胞的棱长为 $a\text{ cm}$ ，阿伏加德罗常数为 N_A ，则该条件下 C_{60} 的摩尔体积(单位物质的量的物质的体积)为_____ $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ (用含 a 、 N_A 的代数式表示，下同)，晶体密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。



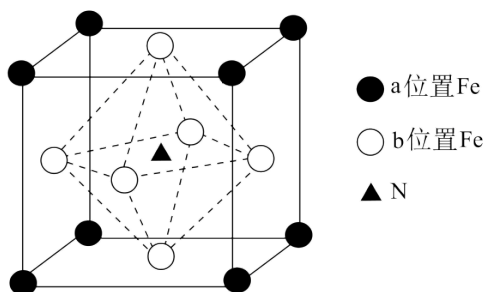
C_{60} 的晶胞结构示意图

【答案】 $\frac{a^3 N_A}{4} \text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ $\frac{48}{a^3 N_A} = \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$

【解析】由晶胞结构可知，每个晶胞中含有 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 个 C_{60} 分子，则该条件下 C_{60} 的摩尔体积为

$$\frac{(a\text{cm})^3}{4} = \frac{a^3 N_A}{4} \text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}; \text{晶体密度为 } \rho = \frac{m}{V} = \frac{4 \times 12}{\frac{N_A}{a^3}} = \text{g} \cdot \text{cm}^{-3} = \frac{48}{a^3 N_A} = \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}。$$

【变式3-3】铁氮化合物(Fe_xN_y)在磁记录材料领域有着广泛的应用前景。某立方 Fe_xN_y 的晶胞如图所示，晶胞参数为 $a\text{ pm}$ ，该晶体密度为_____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (设 N_A 为阿伏加德罗常数的值，写出表达式)，Cu 完全替代该晶体中 b 位置 Fe，形成 Cu 替代型产物 $\text{Fe}_{(x-n)}\text{Cu}_n\text{N}_y$ ，n: y=_____。



Fe_xN_y 晶胞结构示意图

【答案】 $\frac{238 \times 10^{30}}{N_A a^3}$ 3: 1

【解析】根据晶胞结构，Fe 原子位于顶点和面心，所含的原子的数目为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ，N 原子位于体心，共有 1 个，该晶胞的化学式为 Fe_4N ，晶胞质量为： $m = \frac{56 \times 4 + 14}{N_A} \text{g} = \frac{238}{N_A} \text{g}$ ，晶胞参数为 $a\text{ pm}$ ，晶胞体积为 $V = (a \times 10^{-10})^3 \text{cm}^3$ ，该晶体密度为 $\rho = \frac{m}{V} = \frac{238 \times 10^{30}}{N_A a^3} \text{g/cm}^3$ ；Cu 替代 b 位置的 Fe，形成晶胞中 N 原子处于

体心、Cu 原子处于面心、Fe 原子处于顶点，晶胞中 N 原子数目=1， $N(\text{Cu}) = 6 \times \frac{1}{2} = 3$ ， $N(\text{Fe}) = 8 \times \frac{1}{8} = 1$ ，其化

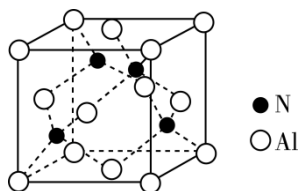




学式为： FeCu_3N ， $n: y=3: 1$ 。

►问题四 晶体中粒子间距离的计算

【典例 4】由 Al 元素和 N 元素形成的某种化合物的晶胞如图所示，已知 N 原子位于晶胞体对角线的 $\frac{1}{4}$ 处。假设该化合物晶体的密度为 $\rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ， N_A 为阿伏加德罗常数的值，则晶胞中相距最近的两个 N 原子之间的距离为



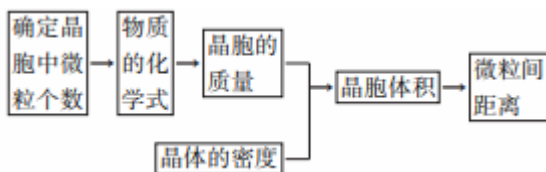
- A. $\frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{164}{\rho N_A}} \text{ cm}$ B. $\frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{164\rho}{N_A}} \text{ cm}$ C. $\frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{164N_A}{\rho}} \text{ cm}$ D. $\frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{\rho N_A}{164}} \text{ cm}$

【答案】A

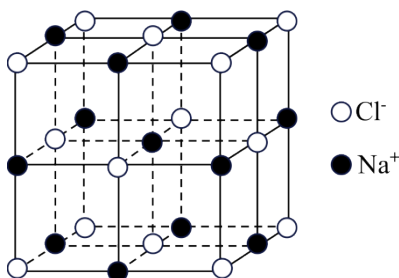
【解析】晶胞中 Al 原子位于顶点和面心，一个晶胞中 Al 原子数目为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ ，N 原子位于晶胞内部，一个晶胞中 N 原子数目为 4，则晶胞质量为 $\frac{4 \times 27 + 4 \times 14}{N_A} \text{ g} = \frac{164}{N_A} \text{ g}$ ；晶胞中距离最近的两个 N 原子距离为底面对角线长度的二分之一，设为 $a \text{ cm}$ ，则晶胞边长为 $\sqrt{2}a \text{ cm}$ ，则晶胞体积为 $(\sqrt{2}a)^3 \text{ cm}^3$ ，所以密度为 $\frac{m}{V} = \frac{\frac{164}{N_A} \text{ g}}{(\sqrt{2}a)^3 \text{ cm}^3} = \frac{164}{(\sqrt{2}a)^3 N_A} \text{ g/cm}^3 = \rho \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ，则 $a = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{164}{\rho N_A}} \text{ cm}$ 。故选 A。

【解题技巧】

计算晶体中微粒间距离的方法：



【变式 4-1】NaCl 晶胞如图所示，在晶胞中，●表示 Cl^- ，○表示 Na^+ 。已知 NaCl 晶体的密度为 $\rho \text{ g/cm}^3$ ，NaCl 的摩尔质量为 $M \text{ g/mol}$ ，阿伏加德罗常数为 N_A ，则在 NaCl 晶体中每个 Na^+ 和与之等距且最近的 Na^+ 之间的距离为()



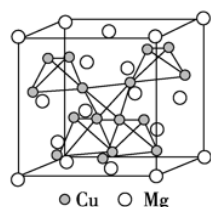


A. $\sqrt[3]{\frac{2M}{\rho N_A}} \text{ cm}$ B. $\sqrt[3]{\frac{\sqrt{2}M}{\rho N_A}} \text{ cm}$ C. $\sqrt[3]{\frac{2N_A}{\rho M}} \text{ cm}$ D. $\sqrt[3]{\frac{M}{8\rho N_A}} \text{ cm}$

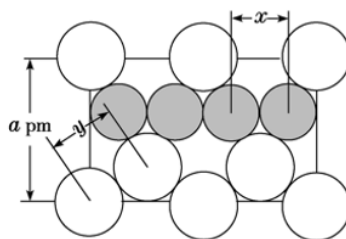
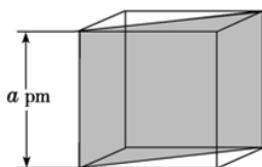
【答案】B

【解析】设晶胞的边长为 a ，则其体积为 a^3 ，1 个晶胞中含 Cl^- ： $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 、 Na^+ ： $12 \times \frac{1}{4} + 1 = 4$ ，根据 $\rho \text{ g/cm}^3 = \frac{m}{V} = \frac{4M}{a^3 \cdot N_A}$ ，求出 $a = \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho N_A}} \text{ cm}$ ，在 NaCl 晶体中每个 Na^+ 和与之等距且最近的 Na^+ 的距离为面对角线的 $\frac{1}{2}$ ，根据勾股定理，距离为 $\frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt[3]{\frac{4M}{\rho N_A}} \text{ cm} = \sqrt[3]{\frac{\sqrt{2}M}{\rho N_A}} \text{ cm}$ ；故选 B。

【变式 4-2】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 $x = \underline{\hspace{2cm}}$ pm，Mg 原子之间最短距离 $y = \underline{\hspace{2cm}}$ pm。



图(a)

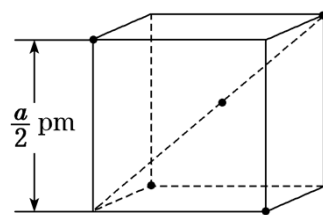


图(b)

【答案】 $\frac{\sqrt{2}a}{4}$ $\frac{\sqrt{3}a}{4}$

【解析】由图(b)可知，立方格子面对角线长为 $\sqrt{2}a \text{ pm}$ ，即为 4 个 Cu 原子直径之和，则 Cu 原子之间最短距离为 $\frac{\sqrt{2}a}{4} \text{ pm}$ ；由图(b)可知，若将每个晶胞分为 8 个小立方体，则 Mg 原子之间最短距离 y 为晶胞内

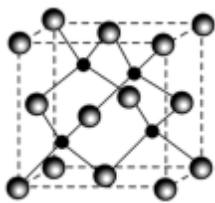
位于小立方体体对角线中点的 Mg 原子与顶点 Mg 原子之间的距离(如图所示)



即小立方体体对角线长的一半，则 $y = \frac{a}{2} \text{ pm} \times \sqrt{3} \times \frac{1}{2} = \frac{\sqrt{3}a}{4} \text{ pm}$ 。

【变式 4-3】Zn 与 S 形成晶胞结构如图所示，晶体密度为 $\rho \text{ g/cm}^3$ ，则晶胞中距离最近的 Zn、S 之间的核间距离是 $\underline{\hspace{2cm}}$ pm。(NA 表示阿伏加德罗常数，用含 ρ 、 N_A 等的代数式表示)





【答案】 $\frac{\sqrt{3}}{4} \times \sqrt[3]{\frac{388}{\rho \cdot N_A}} \times 10^{10}$

【解析】 Zn、S 的配位数相等，图中两种黑色球的数目均为 4，则晶胞中 Zn、S 原子数目均为 4，晶

胞质量为 $4 \times \frac{65+32}{N_A} \text{g}$ ，晶体密度为 $\rho \text{g/cm}^3$ ，则晶胞边长 $x = \sqrt[3]{\frac{4 \times \frac{65+32}{N_A} \text{g}}{\rho \text{g/cm}^3}} = \sqrt[3]{\frac{388}{\rho \cdot N_A}} \text{cm}$ ，即晶胞边长为 $x =$

$\sqrt[3]{\frac{388}{\rho \cdot N_A}} \times 10^{10} \text{pm}$ ，S 原子与周围 4 个 Zn 原子形成正四面体结构，令 S 与 Zn 之间的距离为 y ，则正四面体

中心到底面中心的距离为 $\frac{y}{3}$ ，正四面体的高为 $\frac{4y}{3}$ ，正四面体棱长 $= \frac{\sqrt{2}x}{2}$ ，则正四面体侧面的高为 $\frac{\sqrt{2}x}{2} \times$

$\frac{\sqrt{3}}{2}$ ，底面中心到边的距离为 $\frac{\sqrt{2}x}{2} \times \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{1}{3}$ ，故 $(\frac{4y}{3})^2 + (\frac{\sqrt{2}x}{2} \times \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{1}{3})^2 = (\frac{\sqrt{2}x}{2} \times \frac{\sqrt{3}}{2})^2$ ，整理得

$y = \frac{\sqrt{3}x}{4}$ ，故 S 与 Zn 的距离为 $\frac{\sqrt{3}}{4} \times \sqrt[3]{\frac{388}{\rho \cdot N_A}} \times 10^{10} \text{pm}$ 。

part.

06

分层训练

基

础

强

化

1. 下列关于晶胞的说法不正确的是

A. 所有的晶胞都是平行六面体

B. 晶胞是晶体结构的基本单元

C. 晶胞和晶体的各原子个数比相等

D. 晶胞和晶体的密度相同

【答案】A

【解析】A 项，常规的晶胞都是平行六面体，但并非所有的晶胞都是平行六面体，A 项错误；B 项，晶胞是晶体中基本的重复结构单元，故 B 正确；C 项，整块晶体可看作是数量巨大的晶胞“无隙并置”而成，所以晶胞和晶体的各原子个数比相等，故 C 正确；D 项，整块晶体可看作是数量巨大的晶胞“无隙并置”而成，故晶胞和晶体的密度相同，D 项正确；故选 A。

2. 整块晶体可以看作是数量巨大的晶胞“无隙并置”而成。对这句话的理解错误的是()

A. 相邻晶胞之间没有任何间隙

B. 晶体是晶胞简单、随意堆积而成

C. 晶胞排列时，取向相同

D. “并置”是指所有晶胞都是平行排列的

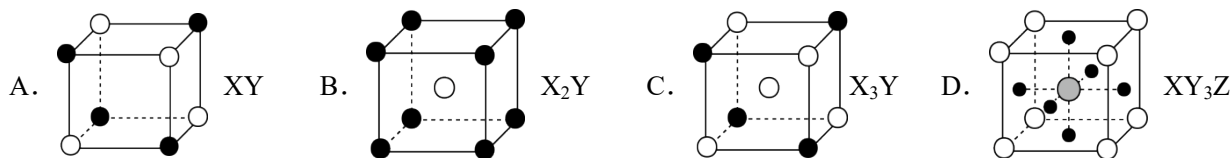
【答案】B





【解析】晶体并不是晶胞简单、随意堆积而成，而是晶胞平行排列而成的，且相邻晶胞之间没有任何间隙。故选 B。

3. 如图所示是晶体结构中的一部分，图中○、●、⊙分别表示原子 X、Y、Z。其对应的化学式不正确的是()



【答案】B

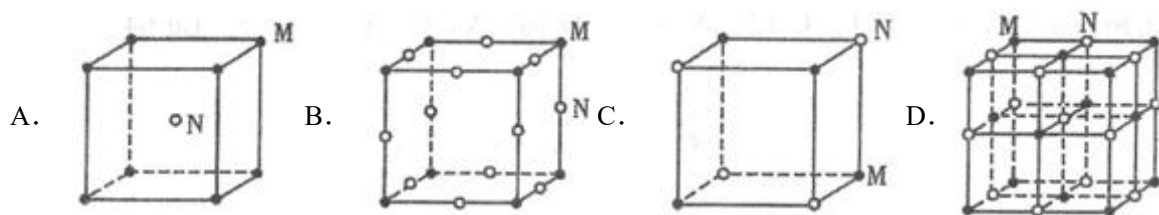
【解析】A. 该晶胞中，X、Y 的数目均为 $4 \times \frac{1}{8} = \frac{1}{2}$ ，粒子数目比为 1:1，化学式为 XY，故 A 正确；

B. 该晶胞中 X 位于体心，数目为 1，Y 的数目为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$ ，粒子数目比为 1:1，化学式为 XY，故 B 错误；

C. 该晶胞中，X 位于体心和顶点，数目为 $1 + 4 \times \frac{1}{8} = \frac{3}{2}$ ，Y 位于顶点，数目为 $4 \times \frac{1}{8} = \frac{1}{2}$ ，粒子数目比为 3:1，

化学式为 X₃Y，故 C 正确；D. 该晶胞中，X 的数目为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$ ，Y 的数目为 $6 \times \frac{1}{2} = 3$ ，Z 的数目为 1，粒子数目比为 1:3:1，化学式为 XY₃Z，故 D 正确；故选 B。

4. 现有四种晶体的晶胞，原子的排列方式如下图所示，化学式为 MN₃的是()



【答案】B

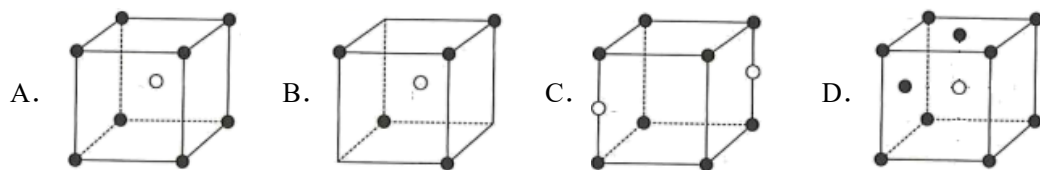
【解析】A 项，晶胞中 M 原子数目为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$ 、N 原子数目为 1，化学式为 MN，故 A 项错误；B 项，

晶胞中 M 原子数目为 $8 \times \frac{1}{8} = 1$ 、N 原子数目为 $12 \times \frac{1}{4} = 3$ ，化学式为 MN₃，故 B 项正确；C 项，晶胞中 M

原子数目为 $4 \times \frac{1}{8} = \frac{1}{2}$ 、N 原子数目为 $4 \times \frac{1}{8} = \frac{1}{2}$ ，化学式为 MN，故 C 项错误；D 项，晶胞中 M 原子数目

为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 、N 原子数目为 $1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4$ ，化学式为 MN，故 D 项错误。故选 B。

5. (2024·黑龙江省大庆市高二期末)所列图形表示的晶体结构中，符合晶胞特点的是()



【答案】A



以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/006012205110011013>