

专题 03 晶体结构与性质

考点串讲

一、晶胞、晶体结构模型

1. 晶体与非晶体

(1)晶体与非晶体的区别

比较		晶体	非晶体
结构特征		结构微粒周期性有序排列	结构微粒无序排列
性质特征	自范性	有	无
	熔点	固定	不固定
	异同表现	各向异性	各向同性
二者区别方法	间接方法	测定其是否有固定的熔点	
	科学方法	对固体进行 X-射线衍射实验	

(2)获得晶体的三条途径

- ①熔融态物质凝固
- ②气态物质冷却不经液态直接凝固(凝华)
- ③溶质从溶液中析出

2. 晶胞

(1)概念：晶胞是描述晶体结构的基本单元。

(2)晶体中晶胞的排列——无隙并置

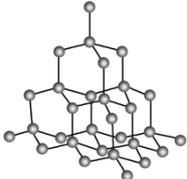
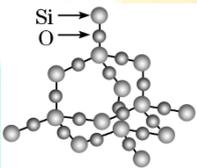
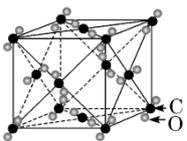
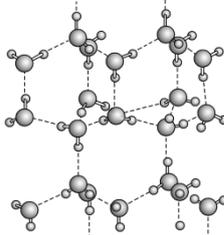
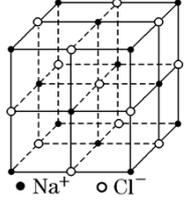
- ①无隙：相邻晶胞之间没有任何间隙。
- ②并置：所有晶胞平行排列、取向相同。

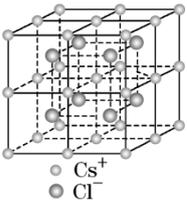
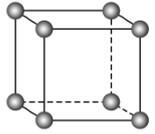
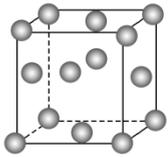
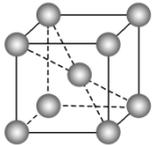
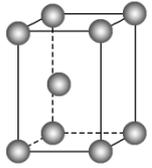
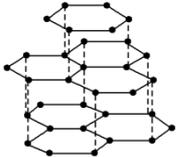
【特别提醒】(1)具有规则几何外形的固体不一定是晶体，如玻璃。

(2)晶体与非晶体的本质区别：是否有自范性。

(3)晶胞是从晶体中“截取”出来具有代表性的“平行六面体”，但不一定是最小的“平行六面体”。

### 3. 常见晶体的结构模型

晶体		晶体结构	晶体详解
共价晶体	金刚石		①每个碳与相邻4个碳以共价键结合，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组成且六原子不在同一平面内 ④每个C参与4条C—C键的形成，C原子数与C—C键数之比为1:2
	SiO <sub>2</sub>		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, $n(\text{Si}):n(\text{O})=1:2$ ③最小环上有12个原子，即6个O, 6个Si
分子晶体	干冰		①8个CO <sub>2</sub> 分子构成立方体且在6个面心又各占据1个CO <sub>2</sub> 分子 ②每个CO <sub>2</sub> 分子周围等距且紧邻的CO <sub>2</sub> 分子有12个
	冰		每个水分子与相邻的4个水分子以氢键相连接，含1 mol H <sub>2</sub> O的冰中，最多可形成2 mol 氢键
离子	NaCl型		①每个Na <sup>+</sup> (Cl <sup>-</sup> )周围等距且紧邻的Cl <sup>-</sup> (Na <sup>+</sup> )有6个，每个Na <sup>+</sup> 周围等距且紧邻的Na <sup>+</sup> 有12个 ②每个晶胞中含4个Na <sup>+</sup> 和4个Cl <sup>-</sup>

晶体	CsCl 型		①每个 $\text{Cs}^+$ 周围等距且紧邻的 $\text{Cl}^-$ 有 8 个, 每个 $\text{Cs}^+$ ( $\text{Cl}^-$ ) 周围等距且紧邻的 $\text{Cs}^+$ ( $\text{Cl}^-$ ) 有 6 个 ②如图为 8 个晶胞, 每个晶胞中含 1 个 $\text{Cs}^+$ 、1 个 $\text{Cl}^-$
	简单立方堆积		典型代表 Po, 配位数为 6, 空间利用率 52%
金属晶体	面心立方最密堆积		典型代表 Cu、Ag、Au, 配位数为 12, 空间利用率 74%
	体心立方堆积		典型代表 Na、K、Fe, 配位数为 8, 空间利用率 68%
	六方最密堆积		典型代表 Mg、Zn、Ti, 配位数为 12, 空间利用率 74%
混合晶体	石墨		①石墨层状晶体中, 层与层之间的作用是范德华力 ②平均每个正六边形拥有的碳原子个数是 2, C 原子采取的杂化方式是 $\text{sp}^2$ ③每层中存在 $\sigma$ 键和 $\pi$ 键 ④石墨的 C—C 的键长比金刚石的 C—C 的键长短, 熔点比金刚石的高 ⑤硬度不大、有滑腻感、能导电

## 二、判断晶体类型的方法

### 1. 依据构成晶体的微粒和微粒间的作用判断

- ①分子晶体的构成微粒是分子, 微粒间的作用为分子间作用力。
- ②共价晶体的构成微粒是原子, 微粒间的作用是共价键。

③金属晶体的构成微粒是金属阳离子和自由电子，微粒间的作用是金属键。



④离子晶体的构成微粒是阴、阳离子，微粒间的作用是离子键。

## 2.依据物质的分类判断

①大多数非金属单质(除金刚石、石墨、晶体硅等)、非金属氢化物、非金属氧化物(除  $\text{SiO}_2$  等外)、几乎所有的酸、绝大多数有机物(除有机盐外)是分子晶体。

②金刚石、晶体硅、晶体硼、碳化硅、二氧化硅等是共价晶体。

③金属单质(除汞外)和合金是金属晶体

④金属氧化物(如  $\text{K}_2\text{O}$ 、 $\text{Na}_2\text{O}_2$  等)、强碱( $\text{NaOH}$ 、 $\text{KOH}$  等)和绝大多数的盐类是离子晶体。

## 3.依据晶体的熔点判断

①分子晶体的熔点低

②离子晶体的熔点较高

③共价晶体的熔点很高

④金属晶体的多数熔点高，但也有少数熔点相当低合金的熔、沸点比其成分金属低

## 4.依据导电性判断

①金属晶体是电的良好导体，固体导电

②共价晶体一般为非导体，但硅为半导体

③离子晶体溶于水及熔融状态时能导电

④分子晶体为非导体，而分子晶体中的电解质(主要是酸和强极性非金属氢化物)溶于水，使分子内的化学键断裂形成自由移动的离子，也能导电

## 5.依据硬度和机械性能判断

①分子晶体硬度小且较脆

②共价晶体硬度大

③金属晶体多数硬度大，但也有较低的，且具有延展性。合金的硬度比其成分金属大

④离子晶体硬度较大、硬而脆

## 三、物质熔沸点大小的比较

1.首先看物质状态：一般情况下，固体>液体>气体。

2.其次看物质所属晶体类型：一般情况下，共价晶体>离子晶体>分子晶体。金属晶体的熔、沸点差别很大，如钨、铂等金属的熔、沸点很高，汞、铯等金属的熔、沸点很低。

3.同种类型晶体的熔、沸点的比较：

(1) 分子晶体：

①看是否含有氢键：有分子间氢键的熔沸点高，相同的分子间氢键，看氢键的个数，个数

越多，熔沸点越高②比较范德华力：组成和结构相似，相对分子质量越大，熔沸点越高

③比较分子极性：相对分子质量相近，分子极性越大，熔沸点越高

④同分异构体的支链越多，熔、沸点越低。

(2) 共价晶体：

①晶体的熔、沸点高低取决于共价键的键长和键能。键长越短，键能越大，共价键越稳定，物质的熔、沸点越高。

②若没有告知键长或键能数据时，可比较原子半径的大小。一般原子半径越小，键长越短，键能越大，晶体的熔点就越高。

(3) 金属晶体：

①金属离子半径越小，离子所带电荷数越多，其金属键越强，金属的熔、沸点越高

②合金的熔点比组成合金的纯金属低

离子晶体：

①一般地，离子所带的电荷数越多，离子半径越小，则离子间的作用力就越强，其离子晶体的熔、沸点就越高

②离子所带的电荷数的影响大于离子半径的影响

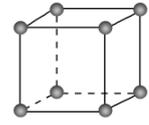
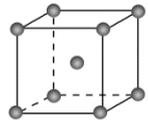
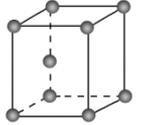
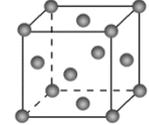
#### 四、晶体配位数的确定

晶体的配位数是指晶体中一个原子周围与其等距离的最邻近的原子的数目。

1.最密堆积晶体的配位数均为 12，如分子晶体中的干冰。

2.金刚石、碳化硅，配位数均为 4。

3.金属晶体

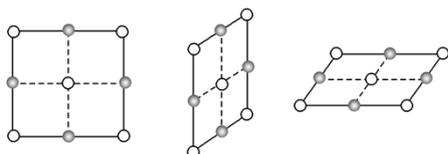
堆积模型	简单立方堆积	体心立方堆积	六方最密堆积	面心立方最密堆积
晶胞				
配位数	6	8	12	12
原子半径( $r$ )和晶胞边长( $a$ )的关系	$2r = a$	$2r = \frac{\sqrt{3}a}{2}$	/	$2r = \frac{\sqrt{2}a}{2}$
一个晶胞内	1	2	2	4

原子数目				
常见金属	Po	Na、K、Fe	Mg、Zn、Ti	Cu、Ag、Au

### 五、晶体结构的分析方法

#### 1. 晶胞结构的分析

(1)判断某种微粒周围等距且紧邻的微粒数目时,要注意运用三维想象法。如 NaCl 晶体中, Na<sup>+</sup>周围的 Na<sup>+</sup>数目(Na<sup>+</sup>用“○”表示):



每个面上有 4 个, 共计 12 个。

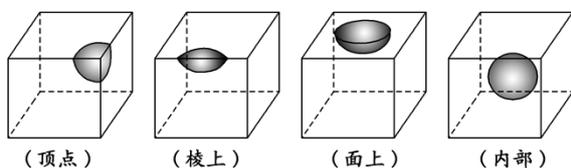
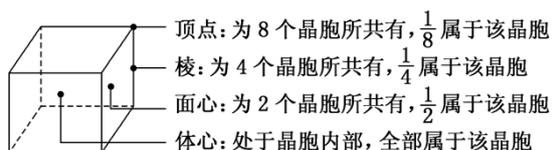
(2)记住常见晶体如干冰、冰、金刚石、SiO<sub>2</sub>、石墨、CsCl、NaCl、K、Cu 等的空间结构及结构特点。当题中信息给出的某种晶胞空间结构与常见晶胞的空间结构相同时,可以直接套用该种结构。

#### 2. 晶胞中微粒数目的计算方法——均摊法

(1)原则: 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  $\frac{1}{n}$ 。

#### (2)方法

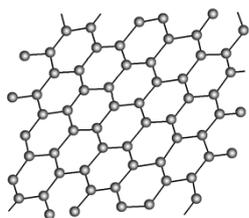
长方体(包括立方体)晶胞中不同位置的微粒数的计算方法如图所示:



#### 3. “均摊法”在晶胞组成计算中的应用

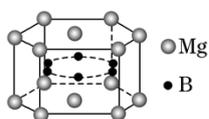
##### (1)计算一个晶胞中微粒的数目

非平行六面体形晶胞中微粒数目的计算同样可用“均摊法”, 其关键仍是确定一个微粒为几个晶胞所共有。例如, 石墨晶胞:

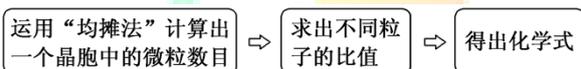


每一层内碳原子排成六边形，其顶点(1个碳原子)对六边形的贡献为 $\frac{1}{3}$ ，那么一个六边形实际有 $6 \times \frac{1}{3} = 2$ 个碳原子。

又如，六棱柱晶胞( $MgB_2$ 晶胞)中，顶点上的原子为6个晶胞(同层3个，上层或下层3个)共有，面上的原子为2个晶胞共有，因此镁原子个数为 $12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} = 3$ 个，硼原子个数为6。



## (2) 计算化学式

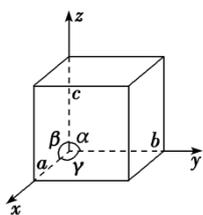


## 六、晶胞参数及相关计算

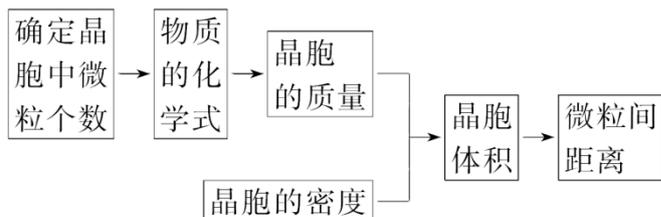
### 1. 晶胞参数的相关计算

#### (1) 晶胞参数

晶胞的形状和大小可以用6个参数来表示，包括晶胞的3组棱长 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 和3组棱相互间的夹角 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ ，即晶格特征参数，简称晶胞参数。



#### (2) 晶胞参数的计算方法



(3) 金属晶体中体心立方堆积、面心立方堆积中的几组计算公式(设棱长为 $a$ )

① 面对角线长 $=\sqrt{2}a$

②体对角线长 $=\sqrt{3}a$

③体心立方堆积  $4r=\sqrt{3}a$ ( $r$  为原子半径)

④面心立方堆积  $4r=\sqrt{2}a$ ( $r$  为原子半径)

⑤刚性原子球体积  $V(\text{球})=\frac{4}{3}\pi r^3$ ( $r$  为原子半径)

## 2. 金属晶体空间利用率的计算方法

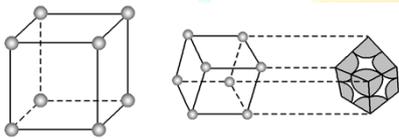
### (1)空间利用率的定义及计算步骤

空间利用率( $\eta$ ): 指构成晶体的原子、离子或分子总体积在整个晶体空间中所占有的体积百分比。

$$\text{空间利用率} = \frac{\text{晶胞中原子所占的总体积}}{\text{晶胞体积}} \times 100\%$$

### (2)金属晶体空间利用率分类简析

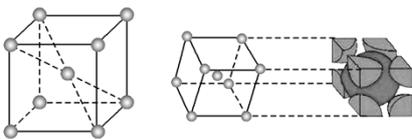
#### ①简单立方堆积



设原子半径为  $R$ , 由于原子在晶胞棱的方向上相切, 可以计算出晶胞参数:  $a=b=c=2R$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。每个晶胞中包含一个原子。

$$\eta = \frac{1 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} \times 100\% = \frac{1 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{(2R)^3} \times 100\% \approx 52.36\%$$

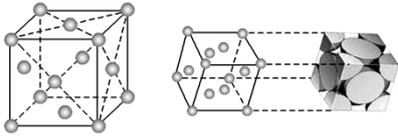
#### ②体心立方堆积



设原子半径为  $R$ , 由于原子在晶胞体对角线方向上相切, 可以计算出晶胞参数:  $a=b=c=\frac{4\sqrt{3}}{3}R$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。每个晶胞中包含两个原子。

$$\eta = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} \times 100\% = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4\sqrt{3}R}{3}\right)^3} \times 100\% \approx 68.02\%$$

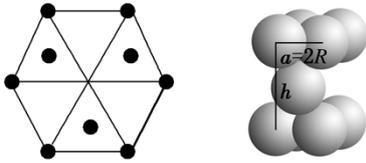
#### ③面心立方最密堆积



设原子半径为  $R$ ，由于原子在晶胞面对角线方向上相切，可以计算出晶胞参数： $a=b=c=2\sqrt{2}R$ ， $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 。每个晶胞中包含四个原子。

$$\eta = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} \times 100\% = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{(2\sqrt{2}R)^3} \times 100\% \approx 74.05\%$$

④六方最密堆积



设原子半径为  $R$ ，根据原子在晶胞中的相切关系，可以计算出晶胞参数： $a=b=2R$ ， $c=\frac{2\sqrt{6}}{3}a \approx 1.633a$ ， $\alpha=\beta=90^\circ$ ， $\gamma=120^\circ$ 。每个晶胞中包含两个原子。

$$\eta = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a \times \frac{\sqrt{3}a}{2} \times c} \times 100\% = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{2R \times \sqrt{3}R \times 1.633 \times 2R} \times 100\% \approx 74.05\%$$

七、晶体的基本类型与性质

比较 \ 类型	分子晶体	原子晶体	金属晶体	离子晶体
构成粒子	分子	原子	金属阳离子和自由电子	阴、阳离子
粒子间的相互作用力	分子间作用力	共价键	金属键	离子键
硬度	较小	很大	有的很大，有的很小	较大
熔、沸点	较低	很高	有的很高，有的很低	较高

溶解性	相似相溶	难溶于任何溶剂	常见溶剂难溶	大多易溶于水等极性溶剂
导电、传热性	一般不导电，溶于水后有的导电	一般不具有导电性	电和热的良导体	晶体不导电，水溶液或熔融态导电

## 八、配合物与超分子

### 1. 配位键

(1)概念：成键的两个原子或离子一方提供孤电子对(配体)，一方提供空轨道而形成的共价键，叫做配位键。

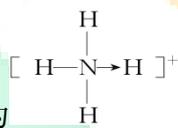
(2)配体：应含有孤电子对，可以是分子，也可以是离子，如  $\text{NH}_3$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{F}^-$ 、 $\text{OH}^-$  等。

(3)成键条件：形成配位键的一方是能够提供孤电子对的原子，另一方是具有能够接受孤电子对的空轨道的原子。

(4)配位键的表示方法：常用“ $\rightarrow$ ”来表示配位键，箭头指向接受孤电子对的原子。



电子对给予体    电子对接受体



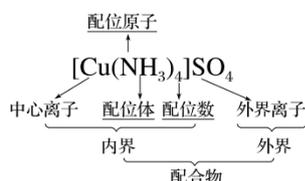
如  $\text{NH}_4^+$  可表示为  $\left[ \begin{array}{c} \text{H} \\ | \\ \text{H}-\text{N} \rightarrow \text{H} \\ | \\ \text{H} \end{array} \right]^+$ ，在  $\text{NH}_4^+$  中，虽然有一个  $\text{N}-\text{H}$  形成过程与其他 3 个  $\text{N}-\text{H}$  形成过程不同，但是一旦形成之后，4 个共价键就完全相同。

### 2. 配合物

(1)概念：金属离子(或原子)与某些分子或离子(称为配体)以配位键结合形成的化合物称为配位化合物，简称配合物。

(2)配合物的组成

如  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$



中心离子或原子：有空轨道，一般是带正电的金属离子，特别是过渡金属离子，如  $\text{Fe}^{3+}$ 、 $\text{Cu}^{2+}$ 、 $\text{Zn}^{2+}$ 、 $\text{Ag}^+$  等，但也有电中性的原子等。

配位体：其中的配位原子(配位体中直接同中心离子或原子配合的原子)有孤电子对。配位体可以是分子，如  $\text{CO}$ 、 $\text{NH}_3$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  等，也可以是离子，如  $\text{F}^-$ 、 $\text{Cl}^-$ 、 $\text{Br}^-$ 、 $\text{I}^-$ 、 $\text{CN}^-$ 、 $\text{SCN}^-$ 、

$\text{OH}^-$ 等。

【特别提醒】(1)单核配体的确认要注意是否带有电荷，如  $\text{F}^-$ 、 $\text{Cl}^-$  等，如配合物  $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}_2$ ，中心离子为  $\text{Co}^{3+}$ ，配体是  $\text{Cl}^-$  和  $\text{NH}_3$ ，而不是氯原子。

(2)有关配合物的结构示意图，不考虑空间结构，但要注意配体中的配位原子一定要与中心原子或中心离子直接相连。如  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$  中  $\text{NH}_3$  中 N 原子为配位原子，所以 N 原子必须要与铜离子直接相连。

### 3. 配合物的形成对性质的影响

#### (1)对溶解性的影响

一些难溶于水的金属氯化物、溴化物、碘化物、氰化物，可以依次溶解于含过量的  $\text{Cl}^-$ 、 $\text{Br}^-$ 、 $\text{I}^-$ 、 $\text{CN}^-$  和氨的溶液中，形成可溶性的配合物。如  $\text{Cu}(\text{OH})_2 + 4\text{NH}_3 \rightleftharpoons [\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+} + 2\text{OH}^-$ 。

#### (2)颜色的改变

当简单离子形成配离子时，其性质往往有很大差异。颜色发生变化就是一种常见的现象，根据颜色的变化就可以判断是否有配离子生成。如  $\text{Fe}^{3+}$  与  $\text{SCN}^-$  形成铁的硫氰酸根配离子，其溶液显红色。

#### (3)稳定性增强

配合物具有一定的稳定性，配合物中的配位键越强，配合物越稳定。当作为中心离子的金属离子相同时，配合物的稳定性与配体的性质有关。例如，血红素中的  $\text{Fe}^{2+}$  与  $\text{CO}$  分子形成的配位键比  $\text{Fe}^{2+}$  与  $\text{O}_2$  分子形成的配位键强，因此血红素中的  $\text{Fe}^{2+}$  与  $\text{CO}$  分子结合后，就很难再与  $\text{O}_2$  分子结合，血红素失去输送氧气的功能，从而导致人体  $\text{CO}$  中毒。

### 4. 配合物的应用

(1)在人和动物体内起输送氧气作用的血红素，是 Fe 的配合物。

(2)配合物在生产和科学技术方面的应用也很广泛，例如，在医药科学、化学催化剂、新型分子材料等领域都有着广泛的应用。

### 5. 超分子的概念

超分子是由两种或两种以上的分子通过分子间相互作用形成的分子聚集体。

### 6. 超分子内分子间的作用力

超分子内部分子之间通过非共价键相结合，包括氢键、静电作用、疏水作用以及一些分子与金属离子形成的弱配位键等。

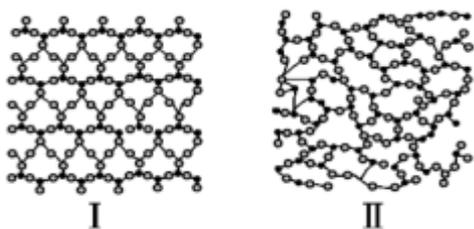
### 7. 超分子的应用

在分子识别与人工酶、酶的功能、短肽和环核酸的组装体及其功能等领域有着广阔的应用

前景。超分子化学的发展不仅与大环化学（冠醚、穴醚、环糊精、杯芳烃、 $C_{60}$ 等）的发展密切相连，而且与分子自组装（双分子膜、胶束、DNA 双螺旋等）、分子器件和新兴有机材料的研究息息相关。

## 专题过关

1.（辽宁省丹东市 2021-2022 学年高二期末教学质量监测）如图分别为物质 I 和物质 II 的微观结构示意图，下列说法错误的是



- A. 物质 I 具有能自发地呈现多面体外形的性质
- B. 物质 I 形成的固体有固定的熔、沸点
- C. 物质 II 形成的固体物理性质有各向异性
- D. 二者的 X-射线衍射图谱不相同

2.（河北省衡水第二中学 2021-2022 学年高二期末）下列说法不正确的是

- A. 超分子是由两种或两种以上的分子通过化学键作用形成的分子聚集体
- B. 过渡金属配合物远比主族金属配合物多
- C. 石墨中电子不能从一个平面跳跃到另一个平面
- D. 晶体具有自范性，某些物理性质会表现出各向异性

3.（广东实验中学 2022-2023 学年高二期末）配合物  $Na_2[Fe(CN)_5(NO)]$  可用于离子检验，下列说法错误的是

- A. 此配合物中存在离子键、配位键、极性键
- B. 配离子为  $[Fe(CN)_5(NO)]^{2-}$ ，中心离子为  $Fe^{3+}$ ，配位数为 6
- C. 1 mol 配合物中  $\sigma$  键数目为  $10N_A$
- D. 该配合物为离子化合物，1 mol 该配合物含有阴、阳离子的总数为  $3N_A$

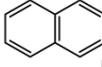
4.（重庆市渝东九校联盟 2021-2022 学年高二期中联考）下列各种物质的晶体中，化学键类型和晶体类型均完全相同的是

- A.  $MgCl_2$  和  $Na_2O_2$
- B.  $H_2O$  和  $CH_3COOH$

C.  $\text{CS}_2$  和  $\text{SiC}$

D.  $\text{NH}_4\text{Cl}$  和  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$

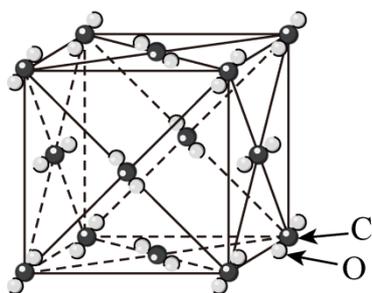
5. (甘肃省庆阳市第六中学 2021-2022 学年高二期末) 下列晶体的分类正确的一组是

选项	离子晶体	原子晶体	分子晶体	金属晶体
A	$\text{CaCl}_2$	石墨	Ar	Hg
B	$\text{NH}_4\text{Cl}$	金刚石	$\text{CH}_3\text{CH}_2$	Ag
C	$\text{CH}_3\text{CO}$	SiC		Mg
D	$\text{Ba}(\text{OH})$	Si	$\text{C}_{60}$	NaH

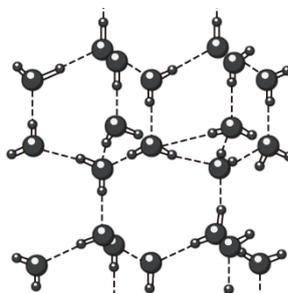
6. (山西省大同市浑源中学 2021-2022 学年高二期中) 下列有关化学键和晶体的说法正确的是

- A. 干冰属于分子晶体，其升华破坏了共价键
- B. 氯化铵固体属于离子晶体，其加热仅破坏了离子键
- C. 晶体硅属于共价晶体，其熔化破坏了共价键
- D. 汞属于分子晶体，其气化破坏了共价键

7. (黑龙江省哈尔滨市六校 2021-2022 学年高二期末联考) 干冰、冰的结构模型如图所示，下列说法正确的是



干冰的结构模型 (晶胞)



冰的结构模型

- A. 构成干冰的微粒是碳、氧原子
- B. 每个干冰晶胞中含 4 个  $\text{CO}_2$  分子

C. 冰晶胞中每个水分子周围有 2 个紧邻的水分子

D. 冰熔化时，分子中 H-O 键断裂

8. (辽宁省重点高中协作体 2022-2023 学年高二期末联考) 共价键、离子键、范德华力都是微观粒子之间不同的作用力，下列晶体在加热熔化时需要克服的作用力相同的是

① Al ② NaHSO<sub>4</sub> ③ CaO ④ SiO<sub>2</sub> ⑤ H<sub>2</sub>O

A. ①②

B. ②③

C. ④⑤

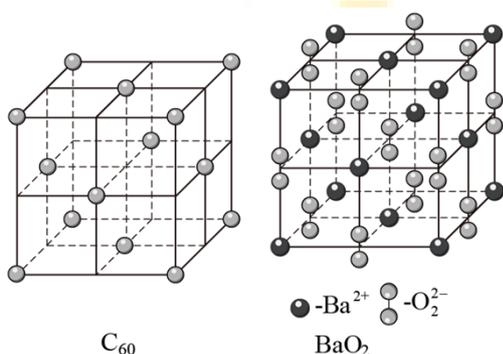
D. ③⑤

9. (山东省临沂市临沭一中 2021-2022 学年高二期末) SiCl<sub>4</sub> 与过量液氨反应生成化合物 Si(NH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>: SiCl<sub>4</sub>+8NH<sub>3</sub>=Si(NH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>+4NH<sub>4</sub>Cl。Si(NH<sub>2</sub>)<sub>4</sub> 在无氧条件下高温煅烧，生成 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 固体 (Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 是一种耐高温、耐磨材料)。下列推断正确的是

A. NH<sub>4</sub>Cl 的熔点高于 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 的熔点 B. Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 与 SiCl<sub>4</sub> 的晶体类型相同

C. SiCl<sub>4</sub> 可由 Cl<sub>2</sub> 和 Si 在一定条件下制备 D. 以上反应中有离子键的生成和断裂

10. (广东省广州市执信中学 2022-2023 学年高二期中) 下列说法正确的是



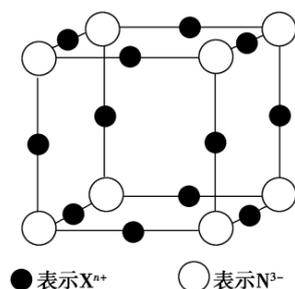
A. SiO<sub>2</sub> 和 SO<sub>3</sub> 晶体类型相同

B. C<sub>60</sub> 晶胞结构如图所示，每个 C<sub>60</sub> 分子周围与它最近且等距离的 C<sub>60</sub> 分子有 12 个

C. 晶体硅、碳化硅、金刚石的熔点依次降低

D. BaO<sub>2</sub> 晶胞结构如图所示，与每个 Ba<sup>2+</sup> 距离相等且最近的阴离子共有 5 个

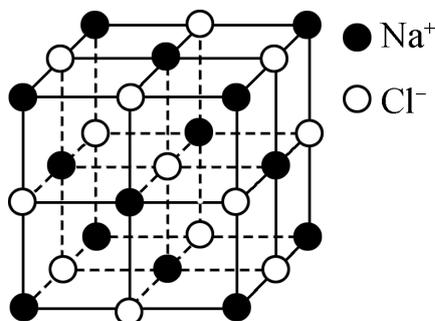
11. (福建省莆田市第一中学 2021-2022 学年高二期末) 元素 X 的某价态离子 X<sup>n+</sup> 中所有电子正好充满 K、L、M 三个电子层，它与 N<sup>3-</sup> 形成的晶体结构如图所示。下列说法错误的是



A. X 元素的原子序数是 19

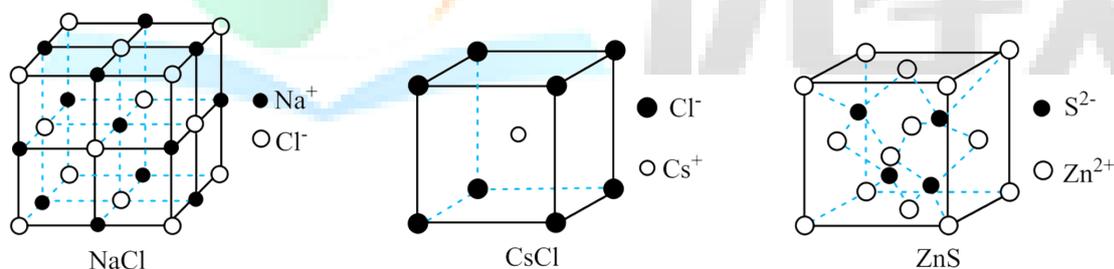
- B. 该晶体中阳离子与阴离子个数比为 3:1
- C.  $X^{n+}$ 离子中  $n=1$
- D. 晶体中与  $X^{n+}$ 最近的等距离  $N^{3-}$ 有 2 个

12. (江苏省南通市通州区 2022-2023 学年高三期中质量监测) 海水中资源的综合利用有着重要意义。下列有关说法正确的是



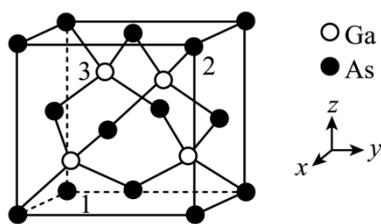
- A. 基态溴原子( $_{35}\text{Br}$ )核外电子排布式为 $[\text{Ar}]4s^24p^5$
- B. 1 个  $\text{NaCl}$  晶胞(如图所示)中含有 14 个  $\text{Na}^+$
- C. 在空气中灼烧  $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  可得到无水氯化镁
- D. 电解熔融氯化镁时, 金属镁在阴极析出

13. (辽宁省锦州市渤大附中 2022-2023 学年高三期末) 几种离子晶体的晶胞如图所示, 则下列说法正确的是



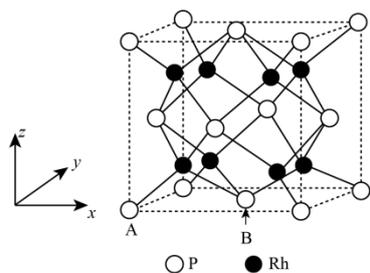
- A. 熔沸点:  $\text{NaCl} < \text{CsCl}$
- B. 在  $\text{NaCl}$  晶胞中, 距离  $\text{Na}^+$ 最近且等距的  $\text{Na}^+$ 数目为 6
- C. 若  $\text{ZnS}$  的晶胞边长为  $a\text{pm}$ , 则  $\text{Zn}^{2+}$ 与  $\text{S}^{2-}$ 之间最近距离为  $\frac{\sqrt{3}}{2}a\text{pm}$
- D. 上述三种晶胞中, 其阳离子的配位数大小关系为  $\text{ZnS} < \text{NaCl} < \text{CsCl}$

14. (广东省梅州市名校 2022-2023 学年高三期末)  $\text{Ga}$  和  $\text{As}$  均位于元素周期表第四周期, 砷化镓( $\text{GaAs}$ )是优良的半导体材料, 可用于制作微型激光器或太阳能电池的材料等, 其晶胞结构如图所示, 其中原子 1 的坐标为 $(0, 0, 0)$ , 原子 2 的坐标为 $(1, 1, 1)$ 。下列有关说法中错误的是



- A. 原子 3 的坐标为  $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$
- B. 根据元素周期律, 原子半径  $\text{Ga} > \text{As}$
- C. GaAs 的熔点为  $1238^\circ\text{C}$ , 硬度大, 晶体类型为共价晶体
- D. 若晶胞边长为  $a \text{ pm}$ , 阿伏加德罗常数的值为  $N_A$ , 则 GaAs 晶体的密度为  $\frac{5.8 \times 10^{32}}{a^3 N_A} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$

15. (辽宁省辽河油田第二高级中学 2022-2023 学年高二期末) 一种贵金属磷化物晶体的晶胞结构如图所示。已知晶胞参数为  $a \text{ nm}$ , 设  $N_A$  为阿伏加德罗常数的值。下列说法正确的是



- A. 晶体中与 P 距离最近的 Rh 的数目为 8
- B. 晶体的密度为  $\frac{237}{N_A \cdot (a \times 10^{-7})^3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$
- C. 晶胞中 Rh 的配位数为 8
- D. 晶胞中, 若 A 处原子分数坐标为  $(0, 0, 0)$ , 则 B 处原子分数坐标为  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$

16. (四川省遂宁中学校 2022-2023 学年高二期中) 根据要求填空

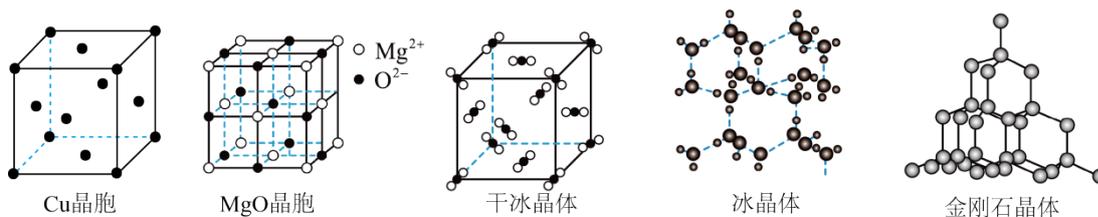
(1) 选择下列物质填空(填写序号): ①金刚石 ②干冰 ③氩晶体 ④白磷 ⑤ $\text{CaBr}_2$   
⑥ $\text{NaH}$  ⑦ $\text{K}_3\text{C}_{60}$  ⑧石墨 ⑨氯化铵 ⑩铜晶体 熔化时不破坏化学键的有\_\_\_\_\_; 含有非极性共价键的有\_\_\_\_\_。

(2) 性质比较: (填“>”、“=”或“<”, 下同)

①第一电离能  $\text{Mg}$  \_\_\_\_\_  $\text{Al}$ , 解释原因\_\_\_\_\_

②酸性强弱  $\text{HClO}_4$  \_\_\_\_\_  $\text{HClO}_3$ , 解释原因\_\_\_\_\_

(3) 下图为几种晶体或晶胞的示意图(用名称填写)

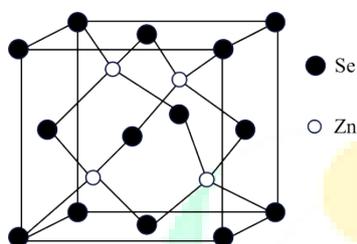


- ①上述晶体中，粒子之间以共价键结合形成的晶体是\_\_\_\_\_。
- ②冰、金刚石、MgO、干冰4种晶体的熔点由高到低的顺序为\_\_\_\_\_。

17. (四川省乐山沫若中学 2022-2023 学年高二期中)

I. 锌、铜及其化合物在日常生活中应用广泛。

(1) 硒化锌的晶胞结构如图所示，硒化锌的化学式为\_\_\_\_\_，若晶胞的边长为  $d$  pm，则硒化锌晶体的密度为\_\_\_\_\_  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$  (设  $N_A$  为阿伏加德罗常数的值，写出表达式)。



(2) 铜在周期表中位于\_\_\_\_\_区，它的活泼性不如锌，不能与稀盐酸和稀硫酸反应生成氢气，但是可以与氧化性更强的稀硝酸反应，请写出该反应的离子方程式\_\_\_\_\_。

II. 在下列物质中：① $\text{CO}_2$ 、② $\text{KCl}$ 、③ $\text{CaBr}_2$ 、④金刚石、⑤ $\text{NH}_4\text{Cl}$ 、⑥ $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 、⑦ $\text{H}_3\text{N} \cdot \text{BH}_3$ 、⑧ $\text{SiO}_2$ 、⑨ $\text{NH}_3$ 、⑩ $\text{SO}_3$ 。请用序号回答下列问题：

- (3) 既有离子键，又有极性键的是\_\_\_\_\_。
- (4) 熔融状态下可以导电的是\_\_\_\_\_。
- (5) 属于共价化合物的是\_\_\_\_\_。
- (6) 属于共价晶体是\_\_\_\_\_。

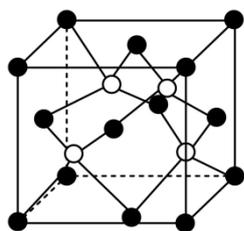
18. (天津市第四十七中学 2022-2023 学年高二期中) 用元素周期表中的部分元素及其化合物回答下列问题。

- (1) C 的基态原子的电子排布式\_\_\_\_\_；Zn 在周期表中的位置是\_\_\_\_\_区。
- (2) C、N、O 原子电负性由大到小顺序为\_\_\_\_\_，阴离子  $\text{NO}_3^-$  的空间构型为\_\_\_\_\_。
- (3)  $(\text{CN})_2$  分子中各原子都满足最外层 8 电子结构，分子中  $\sigma$  键与  $\pi$  键数目之比为\_\_\_\_\_， $(\text{CN})_2$  分子为\_\_\_\_\_。(填“极性分子”或“非极性分子”)
- (4)  $\text{N}_2$ 、 $\text{O}_2$  单质都能与  $\text{H}_2$  反应且反应能力增强，其原因是\_\_\_\_\_。
- (5) 已知  $\text{Zn}^{2+}$ 、 $\text{Au}^+$  均能与  $\text{CN}^-$  形成配离子，配位数分别为 4 和 2，工业上常用  $\text{Au}^+$  和  $\text{CN}^-$  形成

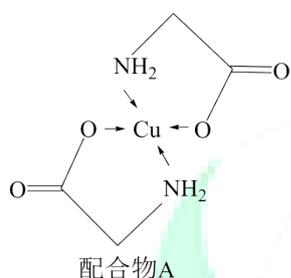
的配离子与 Zn 加发生置换反应来提取 Au，写出上述反应的离子方程式：\_\_\_\_\_。

(6)阿拉班达石(alabandite)是一种属于立方晶系的硫锰矿，其晶胞如图所示(●=Mn,○=S)。

已知该晶胞参数为 dpm，晶体密度为  $\rho \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ，则阿伏加德罗常数的值  $N_A = \underline{\hspace{2cm}} \text{mol}^{-1}$ 。



19. (陕西省西安市长安区第一中学 2022-2023 学年质量检测) 太阳能的开发利用在新能源研究中占据重要地位，单晶硅太阳能电池片在加工时，一般掺杂微量的铜、钴、硼、镓、硒等。已知铜的配合物 A 结构如图。请回答下列问题：

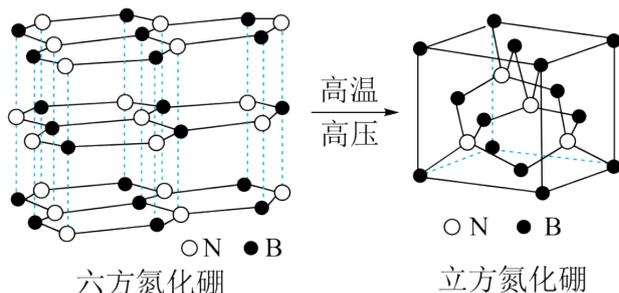


(1)基态二价铜离子的电子排布式为\_\_\_\_\_，已知高温下  $\text{Cu}_2\text{O}$  比  $\text{CuO}$  更稳定，试从核外电子排布角度解释\_\_\_\_\_。

(2)配体氨基乙酸根( $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{COO}^-$ )受热分解可产生  $\text{CO}_2$  和  $\text{N}_2$ ， $\text{N}_2$  中  $\sigma$  键和  $\pi$  键数目之比是\_\_\_\_\_； $\text{N}_2\text{O}$  与  $\text{CO}_2$  互为等电子体，则  $\text{N}_2\text{O}$  的电子式为\_\_\_\_\_。

(3)铜与  $(\text{SCN})_2$  反应生成  $\text{Cu}(\text{SCN})_2$ ， $1\text{mol}(\text{SCN})_2$  中含有  $\pi$  键的数目为\_\_\_\_\_ (用  $N_A$  表示)， $\text{HSCN}$  结构有两种，硫氰酸( $\text{H}-\text{S}-\text{C}\equiv\text{N}$ )的沸点低于异硫氰酸( $\text{H}-\text{N}=\text{C}=\text{S}$ )的原因是\_\_\_\_\_。

(4)六方氮化硼晶体结构与石墨晶体相似，层间相互作用力为\_\_\_\_\_。六方氮化硼在高温高压下，可以转化为立方氮化硼，其结构、硬度与金刚石相似，其晶胞如图，晶胞边长为  $361.5\text{pm}$ ，立方氮化硼的密度是\_\_\_\_\_  $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$  (只列算式， $N_A$  为阿伏加德罗常数的值)。



(5)关于两种晶体的说法正确的是\_\_\_\_\_ (填序号)。

- a.立方相氮化硼含有  $\sigma$  键和  $\pi$  键，所以硬度大
- b.六方相氮化硼层间作用力小，所以质地软
- c.两种晶体中的 B-N 键均为共价键
- d.两种晶体均为分子晶体



专题 03 晶体结构与性质

考点串讲

一、晶胞、晶体结构模型

1. 晶体与非晶体

(1)晶体与非晶体的区别

比较		晶体	非晶体
结构特征		结构微粒周期性有序排列	结构微粒无序排列
性质特征	自范性	有	无
	熔点	固定	不固定
	异同表现	各向异性	各向同性
二者区别方法	间接方法	测定其是否有固定的熔点	
	科学方法	对固体进行 X-射线衍射实验	

(2)获得晶体的三条途径

- ①熔融态物质凝固
- ②气态物质冷却不经液态直接凝固(凝华)
- ③溶质从溶液中析出

2. 晶胞

(1)概念：晶胞是描述晶体结构的基本单元。

(2)晶体中晶胞的排列——无隙并置

- ①无隙：相邻晶胞之间没有任何间隙。
- ②并置：所有晶胞平行排列、取向相同。

【特别提醒】(1)具有规则几何外形的固体不一定是晶体，如玻璃。

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/525144023242011320>

