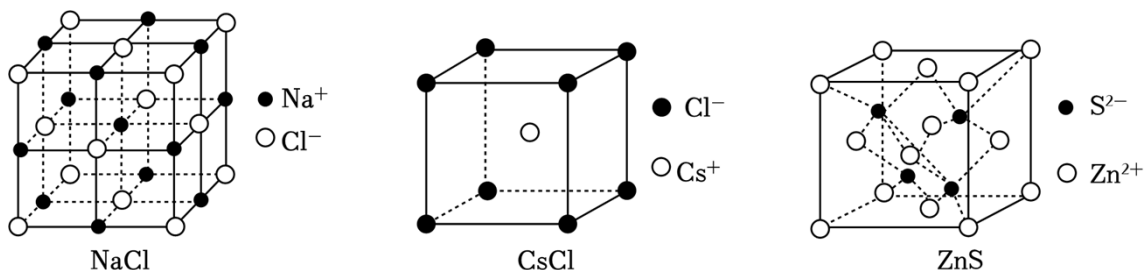


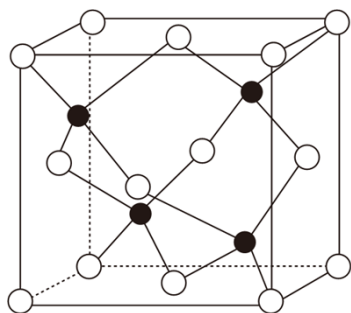
2025 高考新题速递之晶体的结构与性质（9 月）

一. 选择题（共 25 小题）

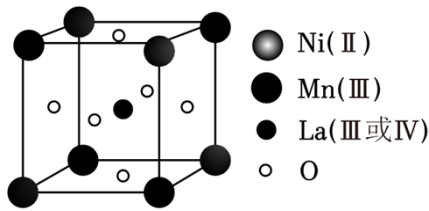
- 1.（2024•重庆开学）晶胞是晶体结构的基本单元，几种常见离子晶体的晶胞如图所示。已知离子键强弱主要取决于离子半径的大小和离子带电荷的多少，则下列说法错误的是（ ）



- A. 熔沸点：NaCl>CsCl
- B. 在 NaCl 晶胞中，阳离子 Na⁺配位数为 6
- C. 在 CsCl 晶胞中，距离 Cl⁻最近且等距的 Cs⁺数目为 8
- D. 若 ZnS 的晶胞边长为 $a\text{pm}$ ，则 Zn²⁺与 S²⁻之间最近距离为 $\sqrt{3}a/2\text{pm}$
- 2.（2024 春•亳州期中）地壳中各种物质存在各种转化，如金属铜的硫化物经生物氧化会转化为 CuSO₄，流经 ZnS 或 FeS 等含硫矿石又可以转化为 CuS[$K_{sp}(\text{ZnS})=2\times 10^{-22}$ ， $K_{sp}(\text{CuS})=6\times 10^{-36}$]，下列说法错误的是（ ）

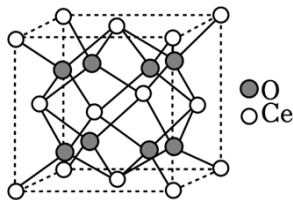


- A. 工业上可用 ZnS、FeS 等金属硫化物处理含有某些重金属离子的废水
- B. 当溶液中有 ZnS 和 CuS 共存时，溶液中 $\frac{c(\text{Zn}^{2+})}{c(\text{Cu}^{2+})}=3\times 10^{-14}$
- C. 基态 Cu²⁺的轨道表示式为 $\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$ 3d
- D. FeS 的晶胞结构如图所示，晶胞中与 S 紧邻的 Fe 为 4 个
- 3.（2024•全国二模）具有双钙钛矿型氧化物通过掺杂改性可用作固体电解质材料，其晶体的一种完整结构单元如图所示，但真实的晶体中存在 5%的 O 空位缺陷，下列说法错误的是（ ）



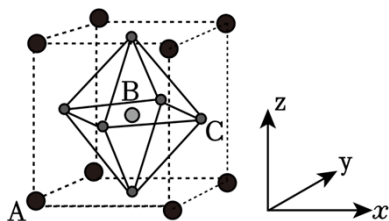
- A. Ni 原子与 Mn 原子的配位数相等
- B. 不考虑晶体缺陷，该晶体的化学式为 $\text{La}_2\text{MnNiO}_3$
- C. O 空位的形成有利于 O^{2-} 的传导
- D. 考虑晶体缺陷，该晶体的+3 价与+4 价 La 原子个数比为 4: 1

4. (2024 秋·新郑市校级月考) 科学工作者发现了一种光解水的催化剂，其晶胞结构如图所示，已知晶胞参数为 $a\text{pm}$ ，设 N_A 为阿伏加德罗常数的值。下列说法中错误的是 ()



- A. O 位于由 Ce 构成的四面体空隙中
- B. Ce 在晶胞中的配位数为 8
- C. Ce 与 Ce 最近的距离为 $\frac{\sqrt{2}}{2} a\text{pm}$
- D. 该晶体的摩尔体积 $V_m = \frac{a^3 \cdot 10^{-30} N_A}{4} \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

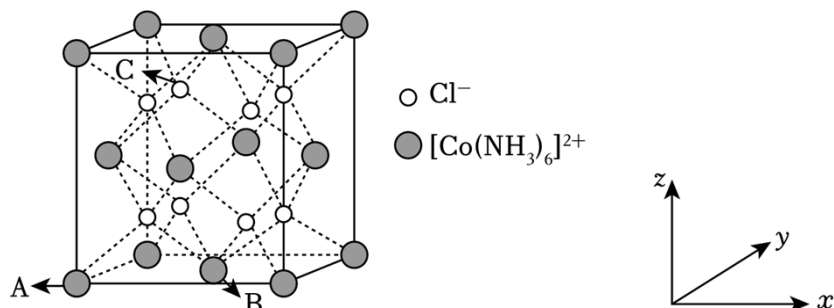
5. (2024 秋·雨花区校级月考) 钙钛矿类杂化材料 $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{PbI}_4$ 在太阳能电池领域具有重要的价值，其晶胞结构如图所示，B 代表 Pb^{2+} ，A 的原子分数坐标为 $(0, 0, 0)$ ，B 的原子分数坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。下列说法中错误的是 ()



- A. A 的配位数为 12
- B. A 代表 CH_3CH_3^+
- C. B 原子处于 C 原子所形成的正四面体空隙中

D. C 的原子分数坐标: $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

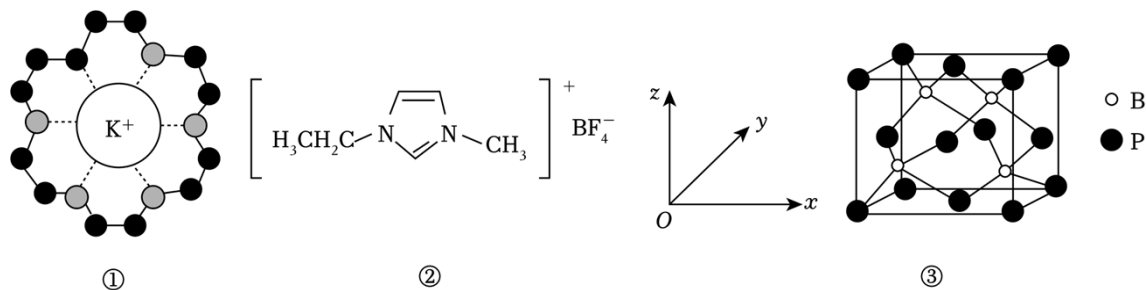
6. (2024 秋·东西湖区校级月考) $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 晶体的晶胞如图所示 (已知该立方晶胞的边长为 $a\text{pm}$, 阿伏加德罗常数的值为 N_A), 以下说法正确的是 ()



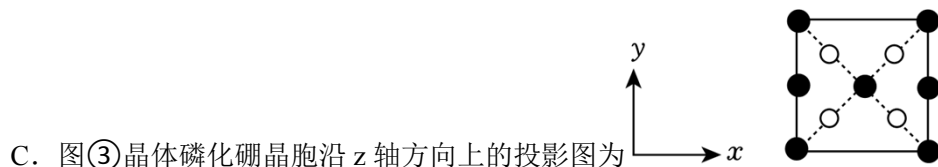
- A. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 中, 该配合物中心离子 Co^{2+} 的配位数为 8
 B. 距 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 最近的 Cl^- 有 4 个
 C. 若 A 点原子坐标为 $(0, 0, 0)$, B 点原子坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, 则 C 点原子坐标为 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$

D. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 晶体的密度为 $\frac{928}{a^3 N_A} \times 10^{21} \text{g/cm}^3$

7. (2024·石家庄模拟) 下列有关物质结构的说法正确的是 ()

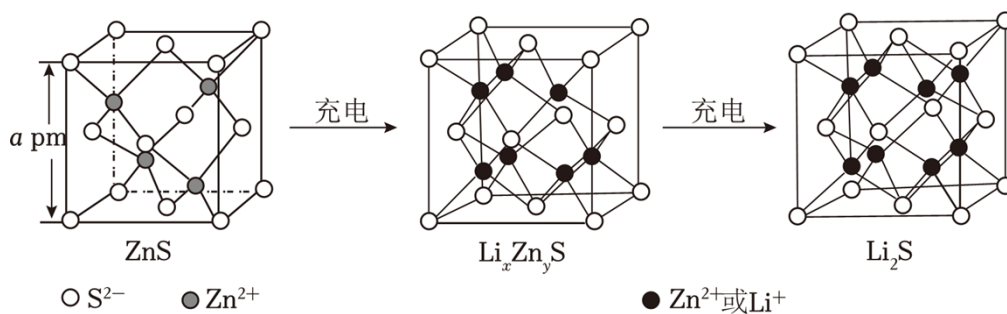


- A. 图①中 18 - 冠 - 6 通过离子键与 K^+ 作用, 体现了超分子“分子识别”的特征
 B. 图②物质相较 NaBF_4 摩尔质量更大, 具有更高的熔沸点



D. 图③晶胞参数为 $d\text{nm}$, 则晶体的密度为 $\frac{168}{N_A \times d^3} \times 10^{21} \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$

8. (2024 秋·武汉月考) ZnS 是一种优良的锂离子电池负极材料。在充电过程中, 负极材料晶胞的组成变化如图所示。



下列说法正确的是 ()

A. 基态 Zn^{2+} 的价电子排布式为 $3d^84s^2$

B. ZnS 的 V_m 为 $\frac{a^3 \times 10^{-27} \times N_A}{4} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

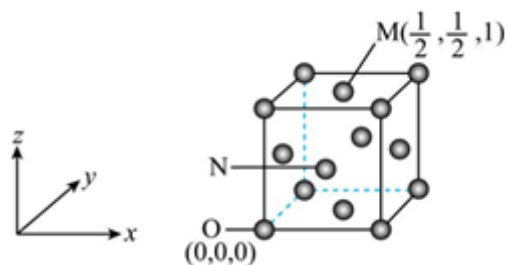
C. 图示的 $\text{Li}_x\text{Zn}_y\text{S}$ 晶胞中 $x : y = 6 : 1$

D. Li_2S 晶胞中 S^{2-} 的配位数为 4

9. (2024 秋·东湖区校级月考) 莫桑德于 1839 年在含有杂质的硝酸铈中发现了镧 (La), 镧主要用于制造特种合金精密光学玻璃、高折射光学纤维板等。La 晶胞为最密面心立方, 如图所示。

已知: La 晶胞的晶胞参数为 $a \text{ nm}$, N_A 为阿伏加德罗常数的值。

下列叙述正确的是 ()



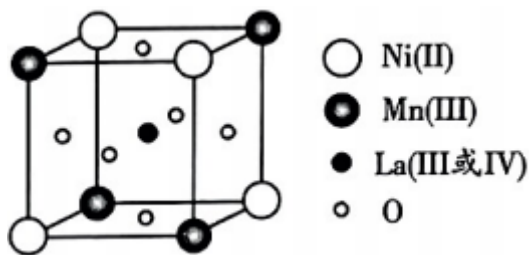
A. 与 La 最近且等距离的 La 有 6 个

B. La 原子半径 $r(\text{La}) = \frac{\sqrt{2}}{4} a \text{ nm}$

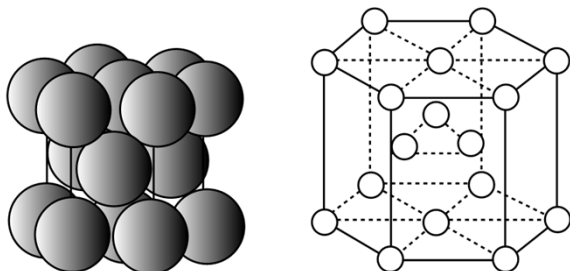
C. N 点的分数坐标为 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

D. La 晶体密度 $\rho = \frac{5.56 \times 10^{32}}{a^3 \times N_A} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$

10. (2024·潍坊开学) 某种晶体的完整结构单元如图所示, 该晶体的实际结构中存在约 5% 的氧空位 (可提高氧离子电导性能)。下列说法错误的是 ()

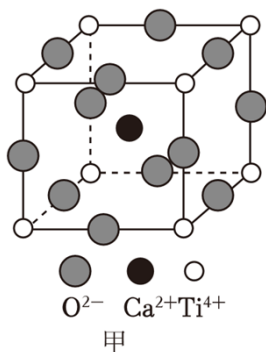


- A. 晶体中与 Ni 原子距离最近的 Mn 原子构成正八面体
- B. 该晶体的一个完整晶胞中含有 8 个 La 原子
- C. 该晶体实际结构的化学式为 $\text{La}_2\text{NiMnO}_{5.7}$
- D. 该晶体的实际结构中 La (III) 与 La (IV) 原子个数比为 1:1
11. (2024•青羊区校级开学) 铋合金可用于自动喷水器的安全塞, 一旦发生火灾时, 安全塞会“自动”熔化, 喷出水来灭火。铋的晶胞结构如图乙所示, 下列有关铋的说法错误的是 ()



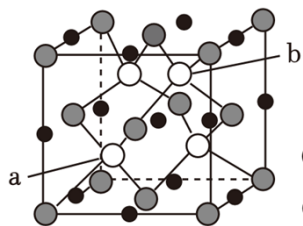
甲 金属铋的结构示意图 乙 金属铋的晶胞

- A. 金属铋晶胞中铋原子的配位数为 6
- B. 铋与氮同主族, Bi 的第一电离能小于 N
- C. 配合物 $(\text{NH}_4)_3[\text{BiCl}_6]$ 中 Bi 的化合价为 +3 价, 内界为 $[\text{BiCl}_6]^{3-}$
- D. 已知铋位于第六周期第 VA 族, 其价电子排布式为 $6s^26p^3$
12. (2024•沙坪坝区校级开学) 钛酸钙是一种具有优异介电特性、温度特性、机械特性以及光学特性的基础无机介电材料, 钛酸钙晶胞结构如图甲所示。一种立方钙钛矿结构的金属卤化物光电材料的组成为 Pb^{2+} 、 I^- 和有机碱离子 CH_3NH_3^+ , 其晶胞如图乙所示 (I^- 均在面心上)。下列说法错误的是 ()

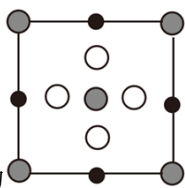


- A. 晶胞乙中 CH_3NH_3^+ 周围有 12 个最近且等距的 I^-
- B. 有机碱离子 CH_3NH_3^+ 中, 氮原子的杂化轨道类型为 sp^3
- C. 有机碱离子 CH_3NH_3^+ 与 Pb^{2+} 间能形成配位键
- D. 钛酸钙的化学式为 CaTiO_3 , 基态钛原子的价层电子排布式为 $3\text{d}^24\text{s}^2$, 属于 d 区

13. (2024·河南开学) 稀磁半导体 $\text{Li}_x\text{Zn}_y\text{As}_x$ 的立方晶胞结构如图所示, 已知晶胞边长为 ωnm , a 点原子的分数坐标为 $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, 阿伏加德罗常数的值为 N_A 。下列说法正确的是 ()



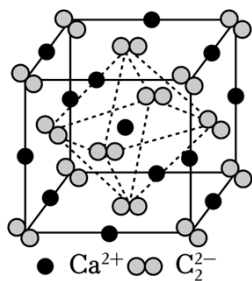
- A. 该晶体中, 每个 Li 原子周围紧邻且距离相等的 Zn 原子共有 4 个
- B. b 点原子的分数坐标为 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$



C. 晶胞 x 轴方向的投影图为

D. 该晶体的密度为 $\frac{5.88 \times 10^{23}}{\omega^3 N_A} \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$

14. (2023 秋·无锡期末) 碳化钙的晶胞如图所示, 反应 $\text{CaC}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{C}_2\text{H}_2 \uparrow + \text{Ca}(\text{OH})_2$ 常用于制备 C_2H_2 , 下列有关说法正确的是 ()



- A. 1 个 C_2H_2 中含 1 个 π 键
- B. C_2^{2-} 的电子式为 $[\text{C}::\text{C}]^{2-}$
- C. 碳化钙晶胞中含 4 个 C_2^{2-}

D. $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 属于共价晶体

15. (2024·香坊区校级四模) 半导体光催化可以将太阳能直接转化为化学能, 在解决能源危机方面具有广阔的发展前景。GaN 材料属于新兴的第三代半导体, 其晶体存在六方纤锌矿型 (图1) 和立方闪锌矿型 (图2) 两种不同的晶体结构, 下列说法错误的是 ()

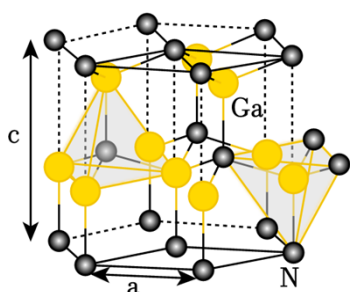


图1

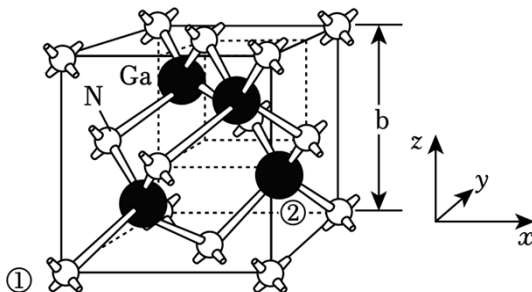


图2

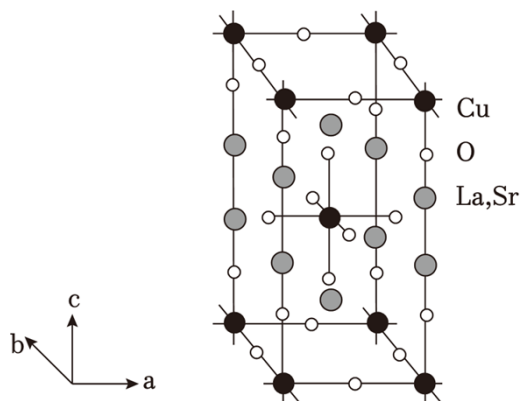
A. 两种晶体结构中, N 原子的配位数均为 4

B. 在图1中, 设 N_A 为阿伏加德罗常数的数值, 则晶胞密度为 $\frac{6 \times 84 \times 10^{21}}{N_A \times \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 c} \text{g/cm}^3$

C. 在图2中, 若①号原子坐标为 $(0, 0, 0)$, 则②号原子坐标为 $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$

D. 在图2中, 相邻的两个 Ga 原子之间距离为 $\frac{\sqrt{3}}{2} b \text{nm}$

16. (2024·安徽模拟) 铜氧化物常被用作高温超导基础材料, 向其中掺杂一些特定元素可以改变材料的电子结构和能带结构。一种镧锶铜氧 (LSCO) 单胞结构如图所示, 已知 c 轴方向上 Cu - O 之间距离大于 a 轴和 b 轴方向上 Cu - O 之间距离。下列说法正确的是 ()



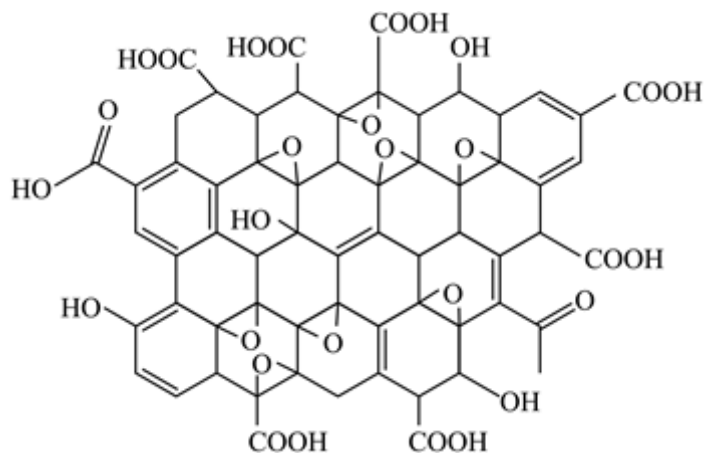
A. 改变掺杂镧和锶的比例不会影响该材料的超导效果

B. LSCO 的化学式可表示为 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

C. Cu 的第一电离能大于 Cu 的第二电离能

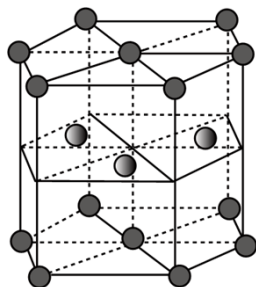
D. 由图可知 Cu 填充在由 O 形成的正八面体空隙中

17. (2024•潍坊模拟) 石墨烯(单层石墨)可转化为其他多种新型材料。例如:部分氧化后可转化为氧化石墨烯,局部结构如图;与 H_2 发生加成反应得到石墨烷。下列有关说法正确的是()



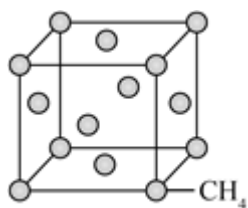
- A. 石墨是共价晶体,熔点很高
 B. 石墨烯能导电,不是因为存在金属键
 C. 氧化石墨烯水溶性小于石墨烯
 D. 石墨烷不是每个碳原子上都有氢原子
18. (2024•贵州开学) 铍晶体的部分结构如图所示。下列叙述错误的是()

已知: N_A 为阿伏加德罗常数的值,底边边长为 $a\text{nm}$,高为 $2a\text{nm}$ 。



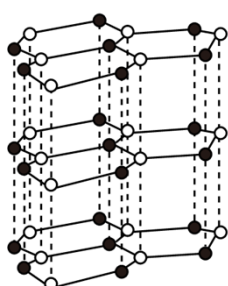
- A. 基态 Be 原子电子云轮廓图为球形
 B. 铍晶体只含阳离子,不含阴离子
 C. $BeCl_2$ 分子是直线形非极性分子
 D. 铍晶体的密度为 $\frac{6\sqrt{3}}{a^3 N_A} \times 10^{23} \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$

19. (2024春•南充期末) 甲烷晶体熔点为 -182.5°C ,沸点为 -161.5°C ,晶胞结构如图所示,下列说法错误的是()

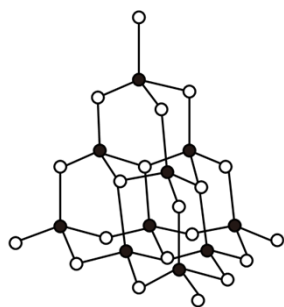


- A. 甲烷晶体是共价晶体
- B. CH_4 分子中的共价键是 $s - \text{sp}^3 \sigma$ 键
- C. 每个晶胞中含有 4 个 CH_4 分子
- D. 一个 CH_4 分子周围紧邻的 CH_4 分子有 12 个

20. (2024•望城区校级开学) 氮化硼 (BN) 晶体有多种相结构。它们的两种晶体结构如图所示。关于这两种晶体的说法, 不正确的是 ()



六方相氮化硼

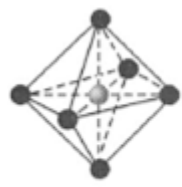


立方相氮化硼

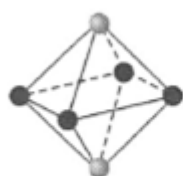
○ 氮原子 ● 硼原子

- A. 六方相氮化硼含有 BN 小分子
- B. 六方相氮化硼层间作用力小, 所以质地软
- C. 立方氮化硼中熔点高、硬度大
- D. 六方相氮化硼晶体其结构与石墨相似却不导电, 原因是没有可以自由移动的电子

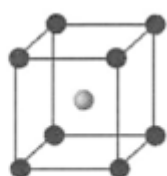
21. (2024•惠山区校级开学) 从 NaCl 或 CsCl 晶体结构中分割出来的部分结构图如图, 其中属于从 NaCl 晶体中分割出来的结构图是 ()



①



②



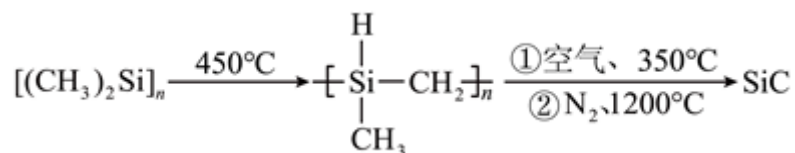
③



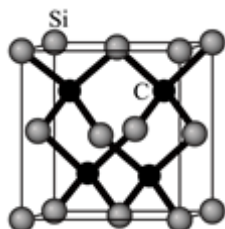
④

- A. ①和③
- B. ②和③
- C. ①和④
- D. 只有④

22. (2024•安徽开学) 碳化硅是一种半导体材料, 一定条件下可由聚硅烷而来, 反应过程为:



其中 SiC 的晶胞结构如图，晶胞参数为 $a\text{pm}$ 。



下列说法错误的是 ()

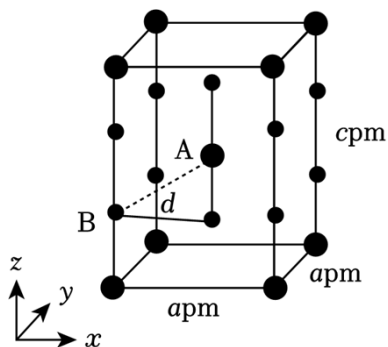
- A. 聚硅烷属于混合物
- B. 该晶胞中 Si 的配位数为 4
- C. 该晶胞中 C 原子与 C 原子的最短距离为 $\frac{\sqrt{3}}{2}a\text{pm}$
- D. 该晶胞的密度为 $\frac{160}{N_A \times (a \times 10^{-10})^3} \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$

23. (2024 春·越秀区校级期末) 观察下列模型，判断下列说法错误的是 ()

金刚石	碳化硅	二氧化硅	石墨烯	C ₆₀

- A. 物质的量相同的金刚石和碳化硅，共价键个数之比为 1: 1
- B. SiO₂ 晶体中 Si 和 Si—O 键个数比为 1: 4
- C. 石墨烯中碳原子和六元环个数比为 2: 1
- D. C₆₀ 晶体堆积属于分子密堆积

24. (2024·江岸区校级模拟) XeF₂ 晶体属四方晶系，晶胞参数如图所示，晶胞棱边夹角均为 90°。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，称为原子的分数坐标，如 A 点原子的分数坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。已知 Xe - F 键长为 $r\text{pm}$ ，下列说法不正确的是 ()



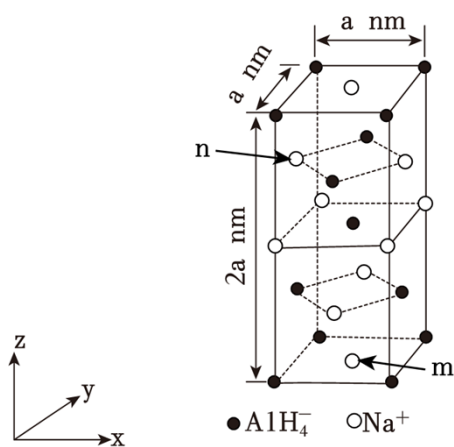
A. 该晶体的密度为 $\frac{3.38 \times 10^{32}}{a^2 c N_A} \text{g/cm}^3$

B. B 点原子的分数坐标为 $(0, 0, r)$

C. 晶胞中 A、B 间距离 $d = \sqrt{\frac{1}{2} a^2 + (\frac{c}{2} - r)^2} \text{pm}$

D. 基态 F 原子的核外电子空间运动状态有 5 种

25. (2024•道里区校级模拟) 晶体世界丰富多彩、复杂多样, 各类晶体具有的不同结构特点, 决定着它们具有不同的性质和用途。氢化铝钠 (NaAlH_4) 是一种新型轻质储氢材料, 其晶胞结构如图所示, 为长方体。设阿伏加德罗常数的值为 N_A 。下列说法错误的是 ()



A. AlH_4^- 中中心原子 Al 的杂化方式为 sp^3 杂化

B. NaAlH_4 晶体中, 与 AlH_4^- 紧邻且等距的 Na^+ 有 4 个

C. 若 m 的分数坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, 则 n 的分数坐标为 $(0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4})$

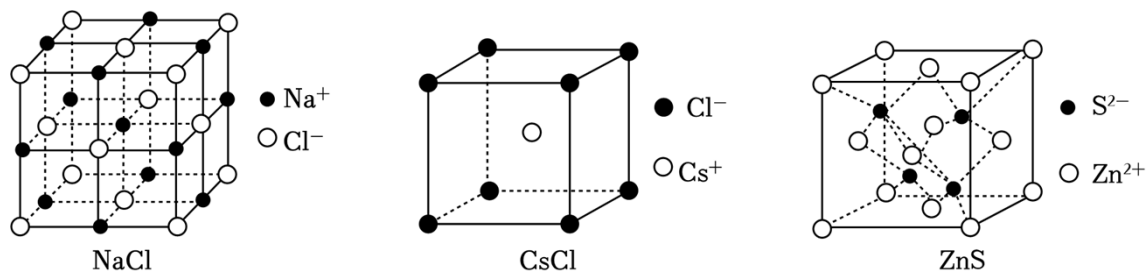
D. NaAlH_4 晶体的密度为 $\frac{1.08 \times 10^{23}}{a^3 N_A} \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$

2025 高考新题速递之晶体的结构与性质（9 月）

参考答案与试题解析

一. 选择题（共 25 小题）

1. （2024•重庆开学）晶胞是晶体结构的基本单元，几种常见离子晶体的晶胞如图所示。已知离子键强弱主要取决于离子半径的大小和离子带电荷的多少，则下列说法错误的是（ ）



- A. 熔沸点： $\text{NaCl} > \text{CsCl}$
- B. 在 NaCl 晶胞中，阳离子 Na^+ 配位数为 6
- C. 在 CsCl 晶胞中，距离 Cl^- 最近且等距的 Cs^+ 数目为 8
- D. 若 ZnS 的晶胞边长为 $a\text{pm}$ ，则 Zn^{2+} 与 S^{2-} 之间最近距离为 $\frac{\sqrt{3}a}{2}\text{pm}$

【答案】 D

【分析】 A. NaCl 和 CsCl 均为离子晶体， Na^+ 半径小于 Cs^+ 半径，则氯化钠内离子键较强；

B. 在 NaCl 晶胞中，距离 Na^+ 最近且等距的 Cl^- 为 6 个；

C. 在 CsCl 晶胞中， Cl^- 位于顶点且被 8 个晶胞共用， Cs^+ 为体心；

D. 根据 ZnS 的晶胞结构可知， Zn^{2+} 与 S^{2-} 之间最近距离为体对角线的 $\frac{1}{4}$ 。

【解答】 解：A. NaCl 和 CsCl 均为离子晶体， Na^+ 半径小于 Cs^+ 半径，则氯化钠内离子键较强，因此熔沸点： $\text{NaCl} > \text{CsCl}$ ，故 A 正确；

B. 在 NaCl 晶胞中，距离 Na^+ 最近且等距的 Cl^- 为 6 个，则 Na^+ 配位数为 6，故 B 正确；

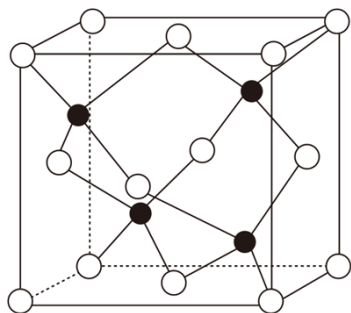
C. 在 CsCl 晶胞中， Cl^- 位于顶点且被 8 个晶胞共用， Cs^+ 为体心，则距离 Cl^- 最近且等距的 Cs^+ 数目为 8，故 C 正确；

D. 根据 ZnS 的晶胞结构可知， Zn^{2+} 与 S^{2-} 之间最近距离为体对角线的 $\frac{1}{4}$ ，若晶胞边长为 $a\text{pm}$ ，则 Zn^{2+} 与 S^{2-} 之间最近距离为 $\frac{\sqrt{3}a}{4}\text{pm}$ ，故 D 错误；

故选：D。

【点评】 本题考查晶体结构，侧重考查学生晶胞结构的掌握情况，试题难度中等。

2. (2024 春·亳州期中) 地壳中各种物质存在各种转化, 如金属铜的硫化物经生物氧化会转化为 CuSO_4 , 流经 ZnS 或 FeS 等含硫矿石又可以转化为 CuS [$K_{\text{sp}}(\text{ZnS}) = 2 \times 10^{-22}$, $K_{\text{sp}}(\text{CuS}) = 6 \times 10^{-36}$], 下列说法错误的是 ()



A. 工业上可用 ZnS 、 FeS 等金属硫化物处理含有某些重金属离子的废水

B. 当溶液中有 ZnS 和 CuS 共存时, 溶液中 $\frac{c(\text{Zn}^{2+})}{c(\text{Cu}^{2+})} = 3 \times 10^{-14}$



C. 基态 Cu^{2+} 的轨道表示式为

3d

D. FeS 的晶胞结构如图所示, 晶胞中与 S 紧邻的 Fe 为 4 个

【答案】 B

【分析】 A. 难溶的电解质可转化为更难溶的电解质;

$$\text{B. } \frac{c(\text{Zn}^{2+})}{c(\text{Cu}^{2+})} = \frac{c(\text{Zn}^{2+}) \times c(\text{S}^{2-})}{c(\text{Cu}^{2+}) \times c(\text{S}^{2-})} = \frac{K_{\text{sp}}(\text{ZnS})}{K_{\text{sp}}(\text{CuS})};$$

C. 铜为 29 号元素, 形成离子失去 2 个电子;

D. 观察图像, 可知黑球周围的最近白球有 4 个。

【解答】 解: A. 难溶的电解质可转化为更难溶的电解质, 故工业上可以用 ZnS 、 FeS 等难溶的金属硫化物去沉淀更难溶的一些重金属离子, 故 A 正确;

$$\text{B. } \frac{c(\text{Zn}^{2+})}{c(\text{Cu}^{2+})} = \frac{c(\text{Zn}^{2+}) \times c(\text{S}^{2-})}{c(\text{Cu}^{2+}) \times c(\text{S}^{2-})} = \frac{K_{\text{sp}}(\text{ZnS})}{K_{\text{sp}}(\text{CuS})} = \frac{2 \times 10^{-22}}{6 \times 10^{-36}} \approx 3.3 \times 10^{13}, \text{ 故 B 错误};$$

C. 铜为 29 号元素, 形成离子失去 2 个电子, 故基态 Cu^{2+} 的价电子排布式为 $3d^9$, 轨道表示式为



3d

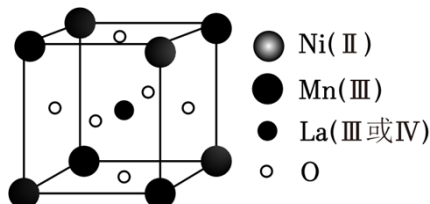
, 故 C 正确;

D. 观察图像, 可知黑球周围的最近白球有 4 个, 根据化学式可知白球周围最近的黑球也为 4 个, 故 D 正确;

故选：B。

【点评】 本题考查物质结构与性质和难溶电解质溶解平衡，涉及晶胞结构、难溶电解质的转化与平衡，掌握基础是关键，题目难度中等。

3. (2024•全国二模) 具有双钙钛矿型氧化物通过掺杂改性可用作固体电解质材料，其晶体的一种完整结构单元如图所示，但真实的晶体中存在 5% 的 O 空位缺陷，下列说法错误的是 ()



- A. Ni 原子与 Mn 原子的配位数相等
B. 不考虑晶体缺陷，该晶体的化学式为 $\text{La}_2\text{MnNiO}_3$
C. O 空位的形成有利于 O^{2-} 的传导
D. 考虑晶体缺陷，该晶体的 +3 价与 +4 价 La 原子个数比为 4: 1

【答案】 B

【分析】 A. Ni 与 Mn 原子均位于顶点，且个数相同；

B. La 个数是 1，Ni 与 Mn 个数均为 $4 \times \frac{1}{8} = 0.5$ ，O 的个数为 $6 \times \frac{1}{2} = 3$ ；

C. O 空位的形成有利于 O^{2-} 的传导，因为空位处动能大；

D. 晶体化学式为 $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ ，考虑缺陷则是 $\text{La}_2\text{NiMnO}_{5.7}$ ，设 +3 价 La 为 x 个，+4 价 La 为 y 个，则 $x+y=2$ ， $3x+4y+5=5.7 \times 2=11.4$ ，解得 $x=1.6$ ， $y=0.4$ 。

【解答】 解：A. Ni 与 Mn 原子均位于顶点，则 Ni 原子与 Mn 原子的配位数相等，故 A 正确；

B. Ni 与 Mn 个数均为 $4 \times \frac{1}{8} = 0.5$ ，La 个数是 1，O 的个数为 $6 \times \frac{1}{2} = 3$ ，其化学式为 $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ ，故 B 错误；

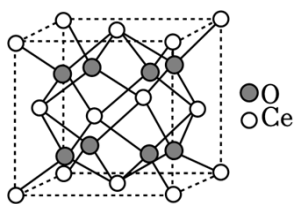
C. O 空位的形成有利于 O^{2-} 的传导，空位处动能大，离子移动快，故 C 正确；

D. 晶体化学式为 $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ ，考虑缺陷是 $\text{La}_2\text{NiMnO}_{5.7}$ ，设 +3 价 La 为 x 个，+4 价 La 为 y 个， $x+y=2$ ， $3x+4y+5=5.7 \times 2=11.4$ ，则 $x=1.6$ ， $y=0.4$ ，+3 价与 +4 价 La 原子个数比为 4: 1，故 D 正确；

故选：B。

【点评】 本题考查晶体结构，侧重考查学生晶胞计算的掌握情况，试题难度中等。

4. (2024 秋•新郑市校级月考) 科学工作者发现了一种光解水的催化剂，其晶胞结构如图所示，已知晶胞参数为 $a\text{pm}$ ，设 N_A 为阿伏加德罗常数的值。下列说法中错误的是 ()



- A. O 位于由 Ce 构成的四面体空隙中
- B. Ce 在晶胞中的配位数为 8
- C. Ce 与 Ce 最近的距离为 $\frac{\sqrt{2}}{2} a$
- D. 该晶体的摩尔体积 $V_m = \frac{a^3 \cdot 10^{-30} N_A}{4} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

【答案】D

【分析】A. 晶胞中 O 位于体内，Ce 位于顶点和面心；

B. 以底面面心的 Ce 为例，上、下层各有 4 个氧原子；

C. Ce 与 Ce 最近的距离为 Ce 与 Ce 最近的距离为面对角线一半；

D. 1 个晶胞体积为 $a^3 \times 10^{-36} \text{ m}^3$ ，含有 4 个 Ce 和 8 个 O，则该晶体的摩尔体积为 $\frac{1}{4} \times a^3 \times 10^{-36} \text{ m}^3 \times N_A$ 。

【解答】解：A. 晶胞中 O 位于体内，Ce 位于顶点和面心；根据晶胞结构可知 O 位于 Ce 构成的正四面体空隙中，故 A 正确；

B. 以面心的 Ce 为例，上、下层各有 4 个氧原子，故在晶胞中的配位数为 8，故 B 正确；

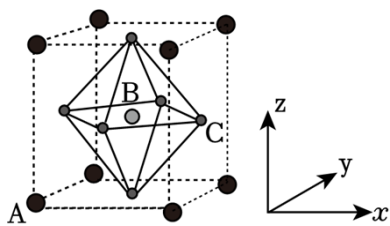
C. Ce 与 Ce 最近的距离为面对角线一半，为 $\frac{\sqrt{2}}{2} a$ ，故 C 正确；

D. 1 个晶胞体积为 $a^3 \times 10^{-36} \text{ m}^3$ ，含有 4 个 Ce 和 8 个 O，则该晶体的摩尔体积为 $\frac{1}{4} \times a^3 \times 10^{-36} \text{ m}^3 \times N_A = \frac{a^3 \cdot 10^{-36} N_A}{4} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ，故 D 错误；

故选：D。

【点评】本题考查晶体结构，侧重考查学生晶胞计算的掌握情况，试题难度中等。

5. (2024 秋·雨花区校级月考) 钙钛矿类杂化材料 $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{PbI}_4$ 在太阳能电池领域具有重要的价值，其晶胞结构如图所示，B 代表 Pb^{2+} ，A 的原子分数坐标为 $(0, 0, 0)$ ，B 的原子分数坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。下列说法中错误的是 ()



- A. A 的配位数为 12
- B. A 代表 CH_3CH_3^+
- C. B 原子处于 C 原子所形成的正四面体空隙中
- D. C 的原子分数坐标: $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

【答案】C

【分析】A. 距离 A 最近且等距离的 C 在面心，一个横截面有 4 个，三个横截面；

B. A 位于顶点，个数为 1；

C. B 原子处于 C 原子所形成的正八面体空隙中；

D. 原子分数坐标 A 为 $(0, 0, 0)$ ，B 为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 。

【解答】解：A. 距离 A 最近且等距离的 C 在面心，一个横截面有 4 个，三个横截面，因此共有 12 个，故 A 正确；

B. A 位于顶点，个数为 1，A 代表 CH_3CH_3^+ ，故 B 正确；

C. B 原子处于 C 原子所形成的正八面体空隙中，故 C 错误；

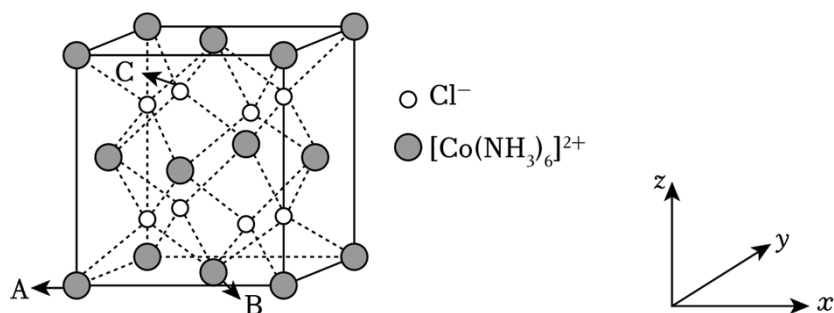
D. 若原子分数坐标 A 为 $(0, 0, 0)$ ，B 为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ，则 C 的原子分数坐标为 $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ，故 D

正确；

故选：C。

【点评】本题考查晶体结构，侧重考查学生晶胞结构的掌握情况，试题难度中等。

6. (2024 秋·东西湖区校级月考) $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 晶体的晶胞如图所示 (已知该立方晶胞的边长为 $a\text{pm}$ ，阿伏加德罗常数的值为 N_A)，以下说法正确的是 ()



- A. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 中, 该配合物中心离子 Co^{2+} 的配位数为 8
- B. 距 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 最近的 Cl^- 有 4 个
- C. 若 A 点原子坐标为 $(0, 0, 0)$, B 点原子坐标为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, 则 C 点原子坐标为 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$
- D. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 晶体的密度为 $\frac{928}{a^3 N_A} \times 10^{21} \text{g/cm}^3$

【答案】 C

【分析】 A. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 中的中心离子为 Co^{2+} , 其配位原子为 N, 配位数为 6;

B. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 中 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 周围等距离且最近的 Cl^- 在体内;

C. C 位于晶胞内部, 若把晶胞分为 8 个相等的小立方体, 则 C 位于左后上的小立方体的体心;

D. 根据均摊法, 一个晶胞含有的 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 个, 含有的 Cl^- 的个数为 8

个, 故每个晶胞中含有 4 个 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 的摩尔质量是 232g/mol , 晶胞的质量为

$\frac{232 \times 4}{N_A} \text{g}$, 晶胞体积为 $a^3 \times 10^{-30} \text{cm}^3$, 则晶胞的密度为 $\frac{928}{a^3 N_A} \times 10^{30} \text{g/cm}^3$.

【解答】 解: A. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 中的中心离子为 Co^{2+} , 其配位原子为 N, 配位数为 6, 故 A 错误;

B. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 中 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 周围等距离且最近的 Cl^- 在体内, 有 8 个, 故 B 错误;

C. C 位于晶胞内部, 若把晶胞分为 8 个相等的小立方体, 则 C 位于左后上的小立方体的体心, C 的原子坐标 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$, 故 C 正确;

D. 根据均摊法, 一个晶胞含有的 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 的个数为 $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ 个, 含有的 Cl^- 的个数为 8

个, 故每个晶胞中含有 4 个 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 的摩尔质量是 232g/mol , 晶胞的质量为

$\frac{232 \times 4}{N_A} \text{g}$, 晶胞体积为 $a^3 \times 10^{-30} \text{cm}^3$, 则晶胞的密度为 $\frac{928}{a^3 N_A} \times 10^{30} \text{g/cm}^3$, 故 D 错误;

故选: C。

【点评】 本题主要考查晶胞的计算, 为高频考点, 掌握晶胞的计算方法为解题的关键, 题目难度中等。

7. (2024•石家庄模拟) 下列有关物质结构的说法正确的是 ()

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/638004022114006131>