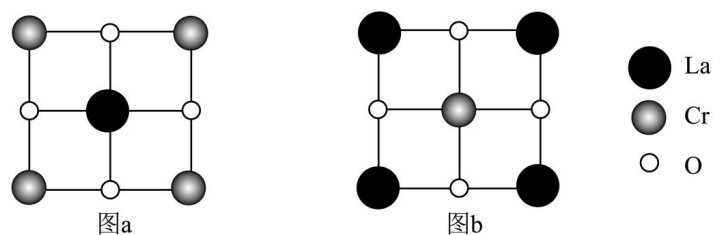


【核心考点 025】晶胞投影图

一、例题

1. (2024·陕西商洛模拟)

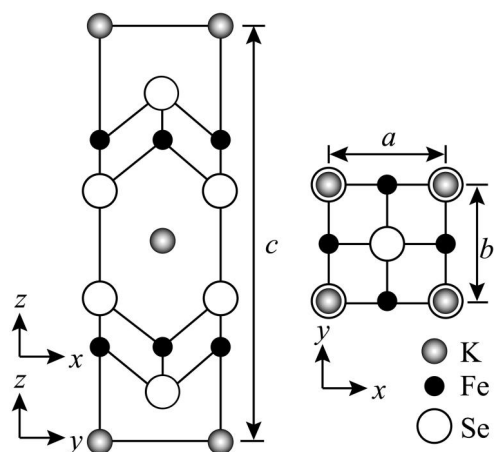
一种立方钙钛矿型晶体 LaCrO_3 有两种晶胞结构, 其三视图如下(重叠处仅画出大的微粒), La 的配位数均是 12。



②图 a 晶胞中 O 的位置为_____ (填“体心”“顶点”“面心”“棱心”, 下同); 图 b 晶胞中 O 的位置为_____。图 a 的晶胞参数为 393.9pm, 则 O 与 O 的最小核间距为_____pm(写出表达式)。

2. (2022 湖南卷)

钾、铁、硒可以形成一种超导材料, 其晶胞在 xz 、 yz 和 xy 平面投影分别如图所示:



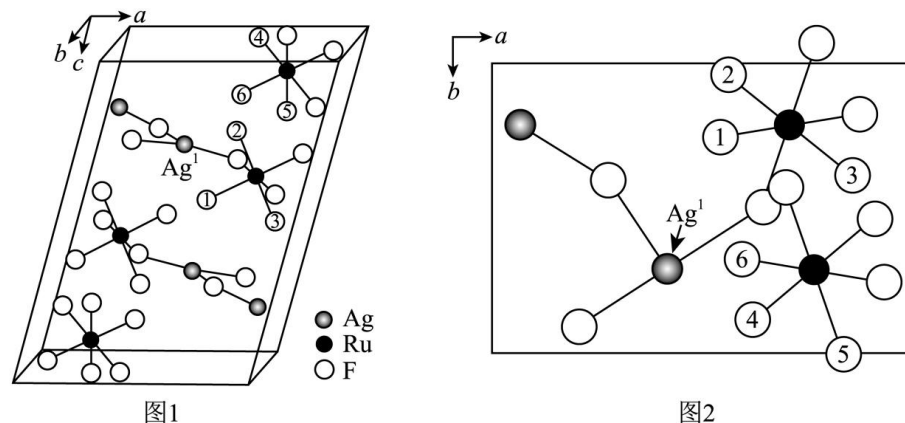
①该超导材料的最简化学式为_____;

②Fe 原子的配位数为_____;

③该晶胞参数 $a=b=0.4\text{nm}$ 、 $c=1.4\text{nm}$ 。阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则该晶体的密度为_____ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (列出计算式)。

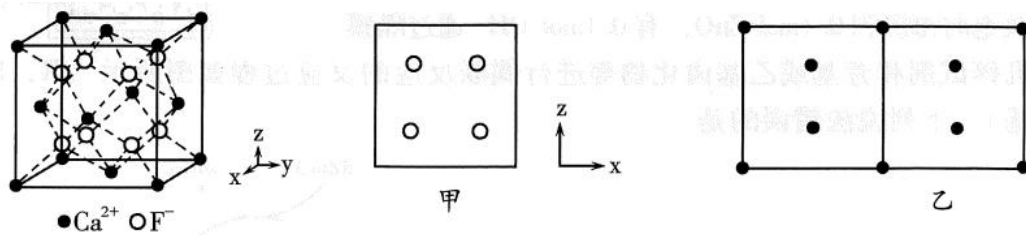
3. (2025 海南卷)

一种可用作强氧化剂的含钌多氟化物的晶体晶胞, 如图 1 所示, 完成(6)、(7)题。



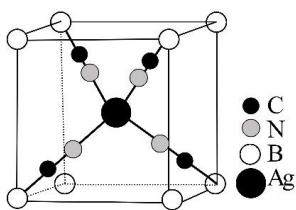
(7)每个 Ag 原子周围的紧邻氟原子围成规则配位结构, Ag^+ 与该晶胞中氟原子的配位关系均已在图 1 呈现。沿 c 方向投影, 见图 2(已放大处理)。b 方向紧邻晶胞中与 Ag^+ 配位的氟原子标号是_____。(紧邻晶胞中相应氟原子标号与图示晶胞相同)。

4. (2023 潍坊二模) CaF_2 的晶胞结构和部分离子的投影位置如图所示, 下列说法错误的是

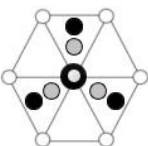


- A. CaF_2 属于离子晶体
- B. Ca^{2+} 的配位数为 8
- C. 图甲为 F^- 沿 y 轴投影图
- D. 图乙为 Ca^{2+} 沿面对角线投影图

5. (2025 陕晋宁青卷) 一种负热膨胀材料的立方晶胞结构如图, 晶胞密度为 $d \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 阿伏加德罗常数的值为 N_A , 下列说法错误的是



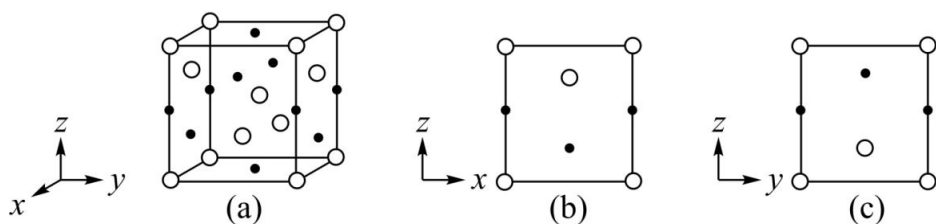
A. 沿晶胞体对角线方向的投影图为



- B. Ag 和 B 均为 sp^3 杂化
- C. 晶体中与 Ag 最近且距离相等的 Ag 有 6 个
- D. Ag 和 B 的最短距离为 $\frac{\sqrt{3}}{2} \times \sqrt[3]{\frac{223}{N_A d}} \times 10^{10} \text{ pm}$

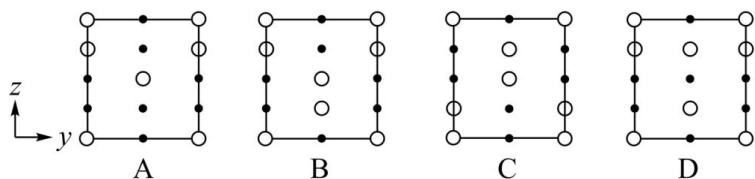
6. (2021 河北卷)

(7) 分别用 \circ 、 \bullet 表示 H_2PO_4^- 和 K^+ , KH_2PO_4 晶体的四方晶胞如图(a)所示, 图(b)、图(c)分别显示的是 H_2PO_4^- 、 K^+ 在晶胞 xz 面、 yz 面上的位置:



①若晶胞底边的边长均为 $a \text{ pm}$ 、高为 $c \text{ pm}$, 阿伏加德罗常数的值为 N_A , 晶体的密度 $\underline{\hspace{2cm}} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (写出表达式)。

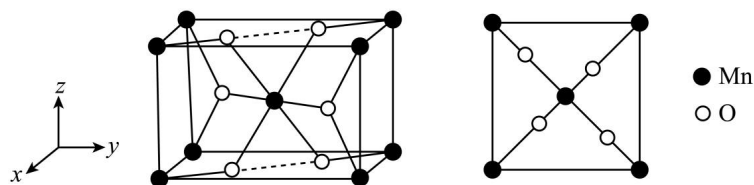
②晶胞在 x 轴方向的投影图为 $\underline{\hspace{2cm}}$ (填标号)。



二、练习题

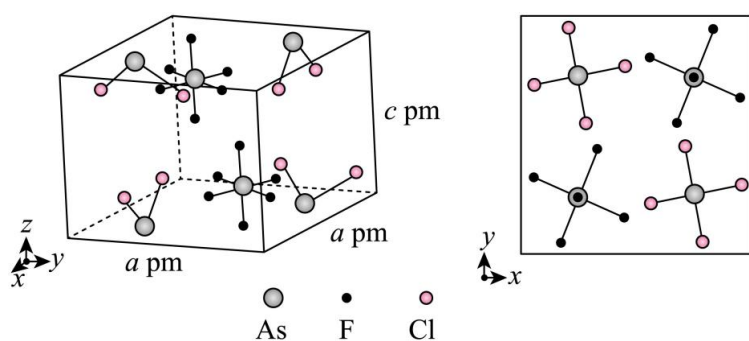
1. (2024 山东卷) 锰氧化物具有较大应用价值, 回答下列问题:

(2) Mn 如某种氧化物 MnO_x 的四方晶胞及其在 xy 平面的投影如图所示, 该氧化物化学式为_____。



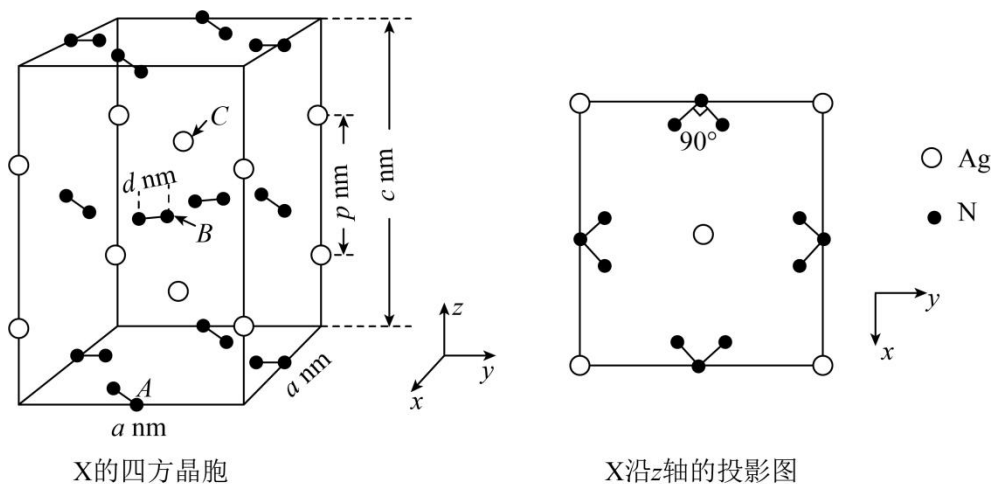
2. (2025 临沂二模) 砷及其化合物具有较大应用价值。回答下列问题:

(4) 某正五价含砷化合物属四方晶系, 晶胞参数以及晶胞沿 z 轴方向的投影如图所示, 晶胞棱边夹角均为 90° 。该化合物可由 ClF_3 和 $AsCl_3$ 反应得到, 反应的化学方程式为_____; 晶体中阳离子的空间构型为_____; 该晶体密度为_____ $g \cdot cm^{-3}$ (N_A 为阿伏加德罗常数的值)。



3. (2025 淄博一模) 氮及其化合物应用广泛。回答下列问题:

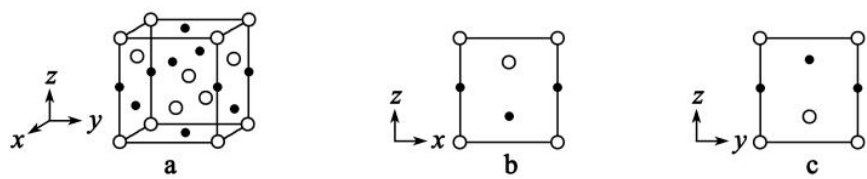
(4) 银氮化合物 X 属于四方晶系, 晶体中 Ag、N 原子分别形成二维层状结构, 晶胞结构如图所示(晶胞参数 $a = b \neq c$, $a = \beta = \gamma = 90^\circ$)。



化合物 X 的化学式为_____; 已知 A 点原子的分数坐标为 $(1, \frac{1}{2}, 0)$, 则 C 点原子的分数坐标为_____, 晶胞中 A、B 间距离为_____ nm。

4. (2025 枣庄一模) 氮、磷元素可形成许多结构和性质特殊的化合物。回答下列问题:

(3) 用●、○分别表示 K^+ 和某未知微粒, 其构成的四方晶胞如图 a 所示, 图 b、图 c 分别显示的是 K^+ 和该未知微粒在晶胞 xz 面、 yz 面上的位置:

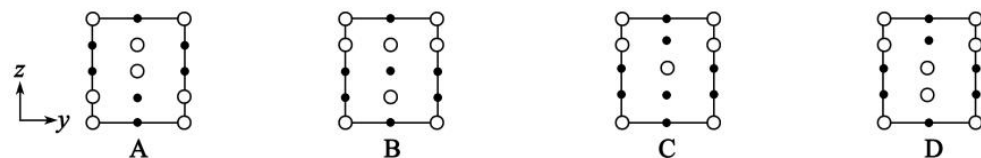


①未知微粒为____(填标号)。

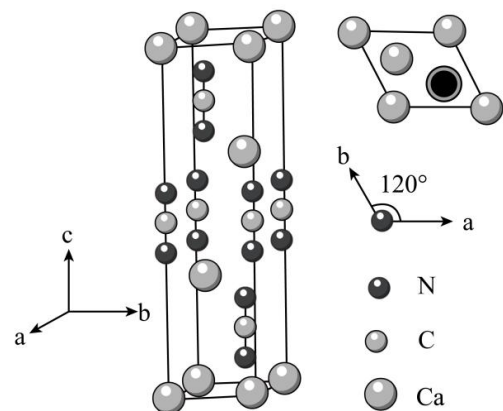
A. PO_4^{3-} B. HPO_4^{2-} C. $H_2PO_4^-$

②若晶体的密度为 $\rho \text{ g/cm}^3$, 晶胞高为 $c \text{ pm}$, 阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则晶胞正方形底边的边长为____ pm (填代数式)。

③晶胞在 x 轴方向的投影图为____(填标号)。



5. (2023.6 浙江卷) 氮的化合物种类繁多, 应用广泛。

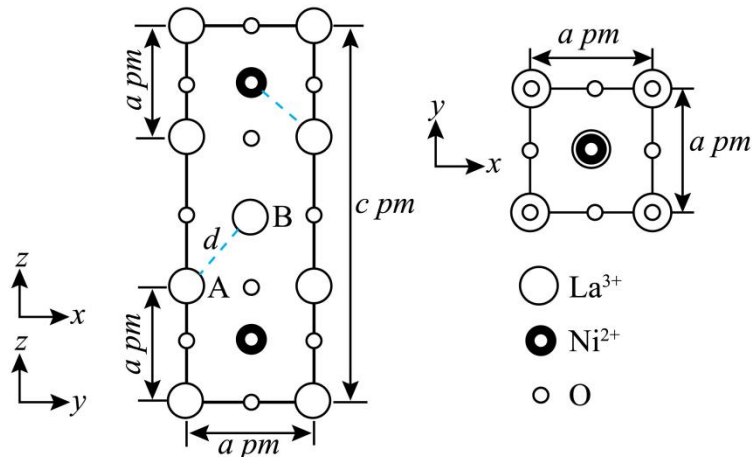


请回答:

(3)某含氮化合物晶胞如图, 其化学式为_____, 每个阴离子团的配位数(紧邻的阳离子数)为_____。

6. (2024 淄博二模) 镍及其化合物应用广泛。回答下列问题:

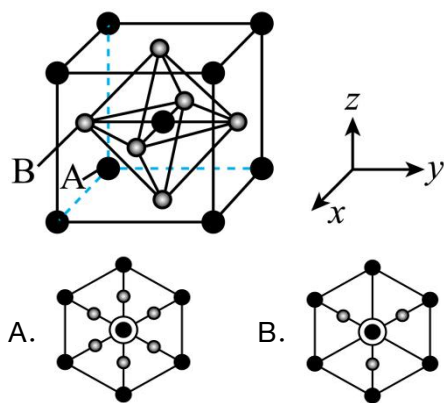
(3) 某镧镍氧化物的晶胞在 xz 、 yz 和 xy 平面投影分别如图所示:



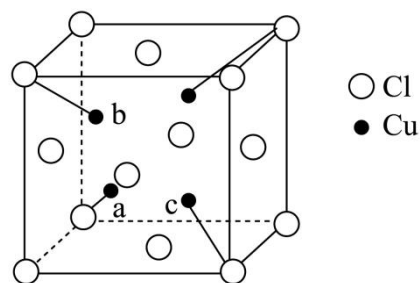
晶胞中 1 个 Ni^{2+} 周围距离相等且最近的 O^{2-} 形成的空间结构为_____, La^{3+} 离子 A、B 间距离 $d =$ _____ pm , 若阿伏加德罗常数的值为 N_A , 该晶体的密度 $\rho =$ _____ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (用含 N_A 的代数式表示)。

7. (2025 日照一模) 碱土金属元素在生产、生活和科研中应用广泛。回答下列问题:

(3) 某碱土金属防锈颜料的晶胞结构如图所示, 晶胞参数为 $a\text{pm}$, A 点的原子分数坐标为 $(0, 0, 0)$, B 点原子分数坐标为 _____, 相邻 \bullet 之间的最短距离为 _____ pm 。该晶胞沿体对角线方向的投影图为 _____ (填标号)。

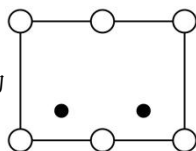


8. (2025 聊城三模) 铜的一种化合物的晶胞如图所示, 晶胞的边长为 $x\text{pm}$, N_A 为阿伏加德罗常数的值, 铜原子 b 的分数坐标为 $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$, 下列说法错误的是



A. 铜原子 a 的分数坐标为 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

B. 将晶胞从上下两面对角线方向切开得到的切面图为



C. a、c 两个铜原子间的距离为 $\frac{\sqrt{3}}{2}x\text{pm}$

D. 晶体中与 Cl 最近且等距离的 Cl 有 12 个

三、答案

例题

1. (2024·陕西商洛模拟)

【答案】棱心 面心 $\frac{\sqrt{2}}{2} \times 393.9$ 或 278.5

2. (2022 湖南卷)

【答案】 KFe_2Se_2 4 $\frac{2 \times (39 + 56 \times 2 + 79 \times 2)}{N_A \times 0.4 \times 0.4 \times 1.4 \times 10^{-21}}$

3. (2025 海南卷)

【答案】(7)2

4. (2023 潍坊二模)

【答案】D

5. (2025 陕晋宁青卷)

【答案】A

6. (2021 河北卷)

【答案】 $\frac{4 \times 136}{10^{-30} N_A a^2 c}$ B

练习题

1. (2024 山东卷)

【答案】 MnO_2

2. (2025 临沂二模)

【答案】①. $ClF_3 + AsCl_3 = Cl_2 + AsCl_2F_3$ ②. 正四面体 ③. $\frac{812}{a^2 c N_A} \times 10^{30}$

3. (2025 淄博一模)

【答案】①. AgN_3 ②. $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{c+p}{2c}\right)$ ③. $\sqrt{d^2 + \left(\frac{c}{2}\right)^2}$

4. (2025 枣庄一模)

【答案】①. C ②. $\sqrt{\frac{544}{\rho c N_A} \times 10^{-30}}$ ③. D

5. (2023.6 浙江卷)

【答案】 $CaCN_2$ 6

6. (2024 淄博二模)

【答案】①. 正八面体形 ②. $\sqrt{\left(\frac{c}{2} - a\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{2}}{2} a\right)^2}$ ③. $\frac{139 \times 4 + 59 \times 2 + 16 \times 8}{a^2 c^2 \times N_A} \times 10^{30}$

7. (2025 日照一模)

【答案】 $\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$ $\frac{\sqrt{2}}{2} a$ A

8. (2025 聊城三模)

【答案】C