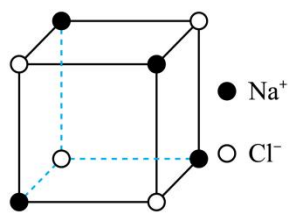


1. (2025 济宁三模) 下列化学用语或相关表述错误的是

- A.
B.
C.

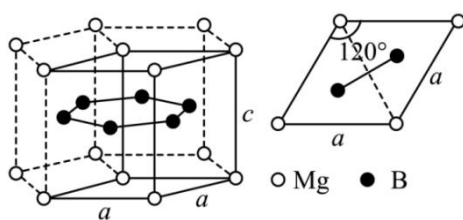


D. NaCl 的晶胞示意图:

【答案】D

2. (2023 全国乙 35)

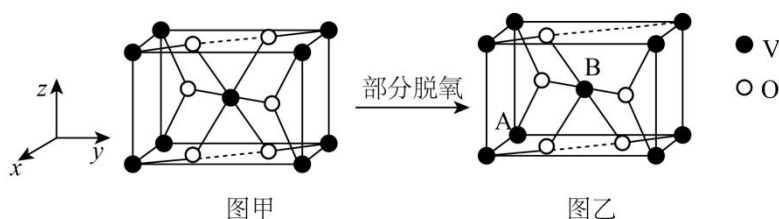
(3) 一种硼镁化合物具有超导性能, 晶体结构属于六方晶系, 其晶体结构、晶胞沿 c 轴的投影图如下所示, 晶胞中含有 $\underline{\hspace{1cm}}$ 个 Mg 。该物质化学式为 $\underline{\hspace{1cm}}$, B-B 最近距离为 $\underline{\hspace{1cm}}$ 。



【答案】(3) 1 MgB_2 $\frac{\sqrt{3}}{3}a$

3. (2026 济南一模)

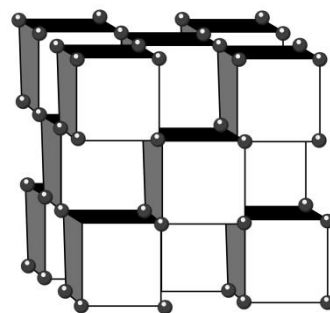
(3) VO_2 的四方晶胞如图甲所示。当 VO_2 中脱出部分 O 原子, 形成 VO_m , 结构示意图如图乙所示, 则 $m = \underline{\hspace{1cm}}$; 原子分数坐标可用于表示晶胞内部各原子的相对位置, 根据晶胞“无隙并置”的特性, 脱氧后的晶胞中, A 的原子分数坐标为 $(0, 0, 0)$, 则 B 的原子分数坐标为 $\underline{\hspace{1cm}}$ 。



答案: (3) 1.75 (2分; 转化为答案的式子均给分) $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4})$ (2分; 小数表示也给分)

4. (2024 菏泽一模, 16)

(5) 在超高压下, 金属钠和氦可形成化合物。结构中的钠离子按简单立方排布, 形成 Na_8 立方体空隙如图, 电子对 $(2e^-)$ 和氦原子交替分布填充在立方体的中心。若将氦原子放在晶胞顶点, 则电子对 $(2e^-)$ 在该晶胞中的所有分数坐标除了 $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ 、 $(0, 0, \frac{1}{2})$, 还有 $\underline{\hspace{1cm}}$; 若晶体的密度为 $\rho \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 阿伏加德罗常数的值为 N_A , 晶胞的边长 $a = \underline{\hspace{1cm}} \text{pm}$ (用含 ρ, N_A 的代数式表示)。

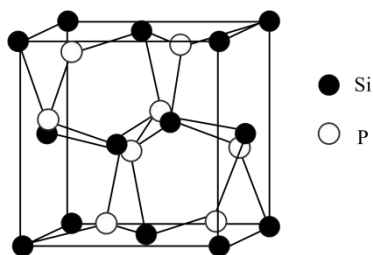


【答案】

(5) ①. $(0, \frac{1}{2}, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ②. $\sqrt[3]{\frac{200}{\rho N_A}} \times 10^{10}$

5. (2023.1 浙江 17) 硅材料在生活中占有重要地位。请回答:

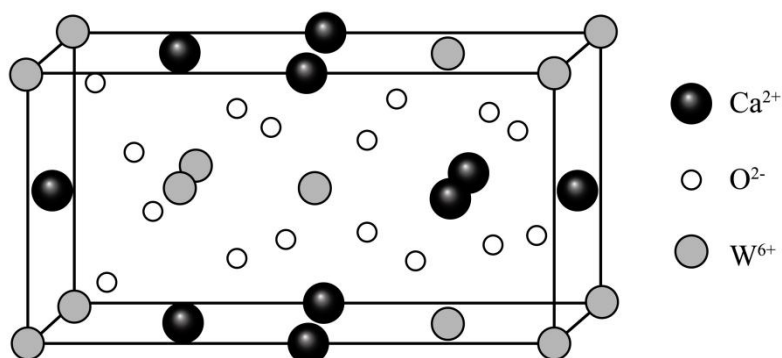
(3) Si 与 P 形成的某化合物晶体的晶胞如图。该晶体类型是_____，该化合物的化学式为_____。



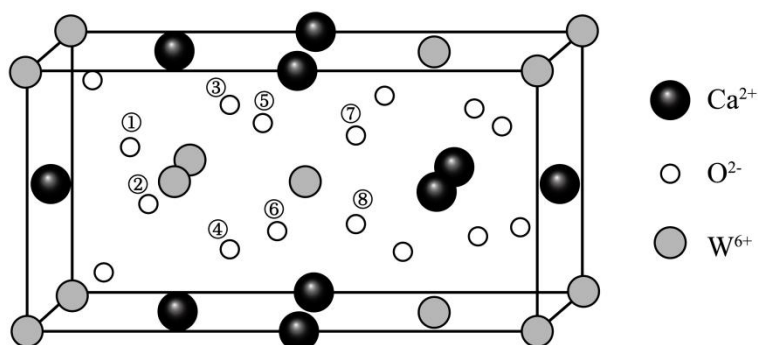
【答案】(3) 共价晶体 SiP_2

6. (2025 上海, 2)

白钨矿的主要成分的钨酸钙(CaWO_4), CaWO_4 的晶胞结构如下图:



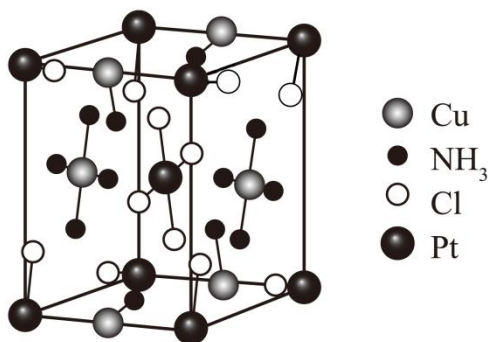
(6) 下图晶胞中只有一个完整的 WO_4^{2-} , 其包含的四个 O^{2-} 的编号是_____。(选填编号①~⑧)



【答案】(6) ⑤⑥⑦⑧

7. (2025.6 浙江, 17)

(2) 一种铜化合物的晶胞如图, 写出由配离子表示的该化合物的化学式_____。



【答案】(2) $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4][\text{PtCl}_4]$

8. (2024 临沂二模, 16)

(4) 非线性光学材料氟代硼铍酸钾 ($K_xBe_yB_zO_mF_n$) 具有重大战略价值。已知其属于四方晶系, 晶胞结构如图 2 所示(氧原子未画出, 晶胞参数 $a \neq c$, $a = \beta = \gamma = 90^\circ$)。……氟代硼铍酸钾的化学式为_____；晶体的密度为_____ $g \cdot cm^{-3}$ (N_A 为阿伏加德罗常数的值)。

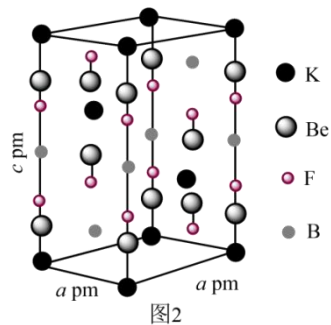
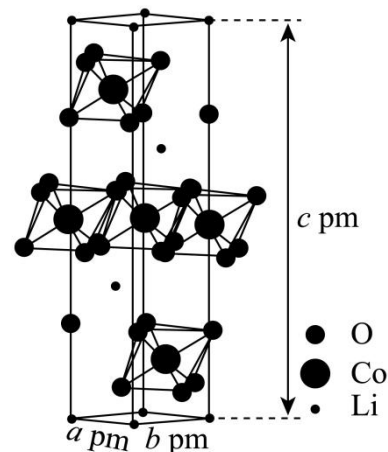


图2

【答案】(4) ①. $KBe_2BO_3F_2$ ②. $\frac{3.08 \times 10^{32}}{a^2 c N_A}$

9. (2024 德州二模, 16)

(3) 钴酸锂 ($LiCoO_2$) 是常见的锂离子电池正极材料, 其晶体属六方晶系(晶胞参数 $a = b \neq c$, $a = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$), 晶胞结构如图。晶体中 O 围绕 Co 形成八面体, 八面体共棱形成带负电的层状空间结构, 与 Li^+ 层交替排列。在充放电过程中, Li^+ 在层间脱出或嵌入。



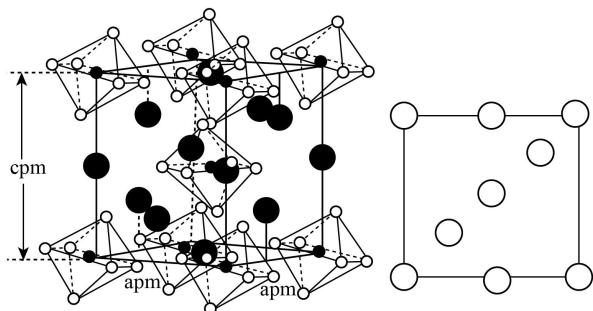
①晶胞中 Co 的个数为_____； Li^+ 在充电过程中会从八面体层间脱出导致晶胞高度 c 变大, 原因是_____。

②若阿伏加德罗常数的值为 N_A , 则晶体密度为_____ $g \cdot cm^{-3}$ (用代数式表示)。

【答案】(3) ①. 3 ②. Li^+ 层和 Co-O 层吸引力减弱, Co-O 层之间的斥力使层间距离增大 ③. $\frac{294}{N_A \times (a \times b \times c) 10^{-30}}$

10. (2024 潍坊一模, 16)

(3) 一定条件下, NH_4F 、 NaF 和 $NaAlO_2$ 反应生成 NH_3 、 H_2O 和化合物 X。X 晶胞及晶胞中某一原子的俯视投影如图所示, 晶胞参数为 $a pm$ 、 $c pm$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 。



上述反应的化学方程式为_____，X 晶体内含有的作用力有_____ (填字母)。

a. 配位键 b. 离子键 c. 氢键 d. 金属键

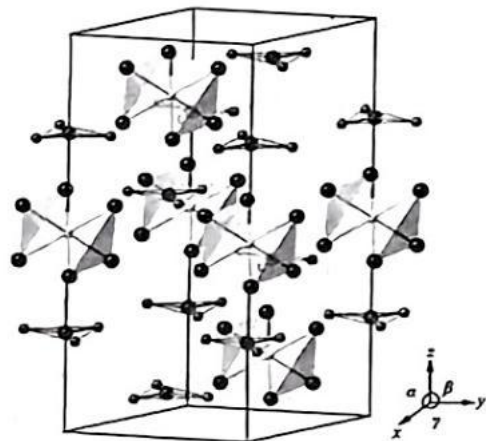
用原子分数坐标来描述晶胞中所有 \bullet 原子的位置, 需要_____组原子分数坐标, 晶体中有_____种化学环境的 \bullet 原子。

(4) 阿伏加德罗常数的值为 N_A 。化合物 X 的密度为_____ $g \cdot cm^{-3}$ (用含 a, c 的代数式表示)。

【答案】(3) ①. $4NH_4F + 2NaF + NaAlO_2 = Na_3AlF_6 + 4NH_3 + 2H_2O$ ②. ab ③. 6 ④. 3

(4) $\frac{4.2 \times 10^{32}}{a^2 c N_A}$

11. (2024 济南一模, 16) 含氮物质在工业上应用非常广泛。将单质钡(Ba)、铼(Re)以一定比例混合, 于特制容器中加热, 依次通入 N_2 、 O_2 可制得某黑色晶体, 该晶体晶胞如图所示, 含有多个由 $Ba(+2)$ 、 $Re(+4)$ 、 $O(-2)$ 和 $N(-3)$ 组成的八面体与平面三角形, 括号中为其化合价。



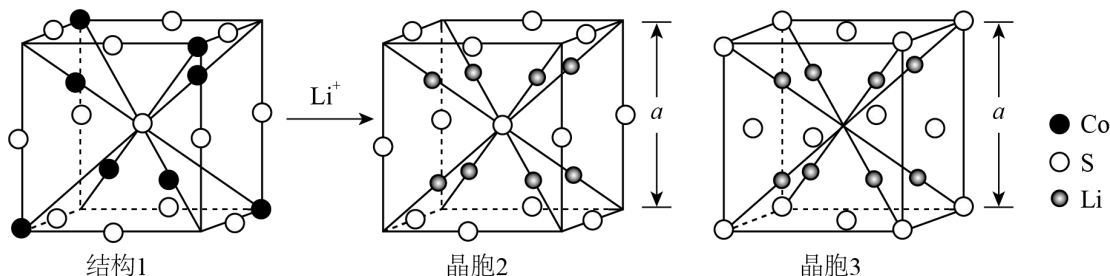
(4) 该晶体中含有的八面体和平面三角形的个数比为_____，晶体的化学式为_____。

(5) 晶胞参数为 apm 、 apm 、 cpm , $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, 该晶体的密度为_____ $g \cdot cm^{-3}$ (写出表达式)。

【答案】 (4) ①. 1 : 2 ②. $Ba_6O(ReN_3)_2$

(5) $\frac{3 \times 1294}{\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c N_A} \times 10^{30}$

12. (2024 东三省, 14) 某锂离子电池电极材料结构如图。结构 1 是钴硫化物晶胞的一部分, 可代表其组成和结构; 晶胞 2 是充电后的晶胞结构; 所有晶胞均为立方晶胞。下列说法错误的是



A.
C.

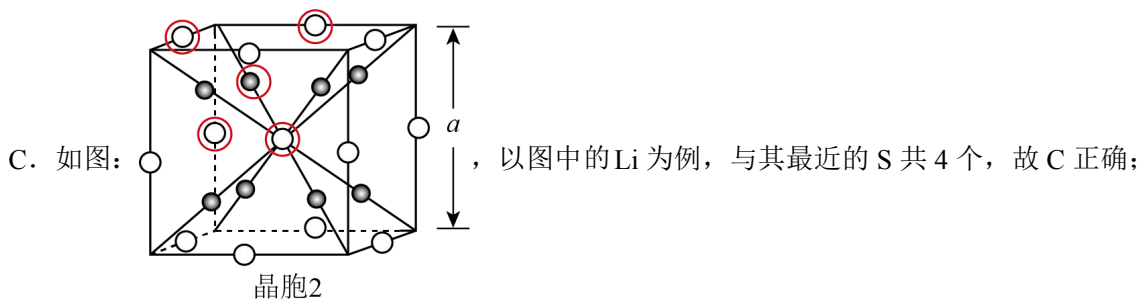
B.
D. 晶胞 2 和晶胞 3 表示同一晶体

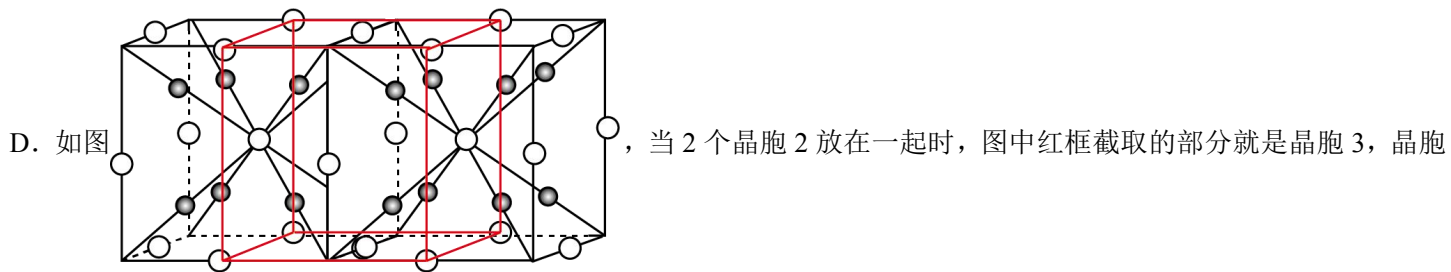
【答案】 B

【解析】

【详解】 A. 由均摊法得, 结构 1 中含有 Co 的数目为 $4 + 4 \times \frac{1}{8} = 4.5$, 含有 S 的数目为 $1 + 12 \times \frac{1}{4} = 4$, Co 与 S 的原子个数比为 9 : 8, 因此结构 1 的化学式为 Co_9S_8 , 故 A 正确;

B. 由图可知, 晶胞 2 中 S 与 S 的最短距离为面对角线的 $\frac{1}{2}$, 晶胞边长为 a , 即 S 与 S 的最短距离为: $\frac{\sqrt{2}}{2} a$, 故 B 错误;





2 和晶胞 3 表示同一晶体, 故 D 正确;

故选 B。