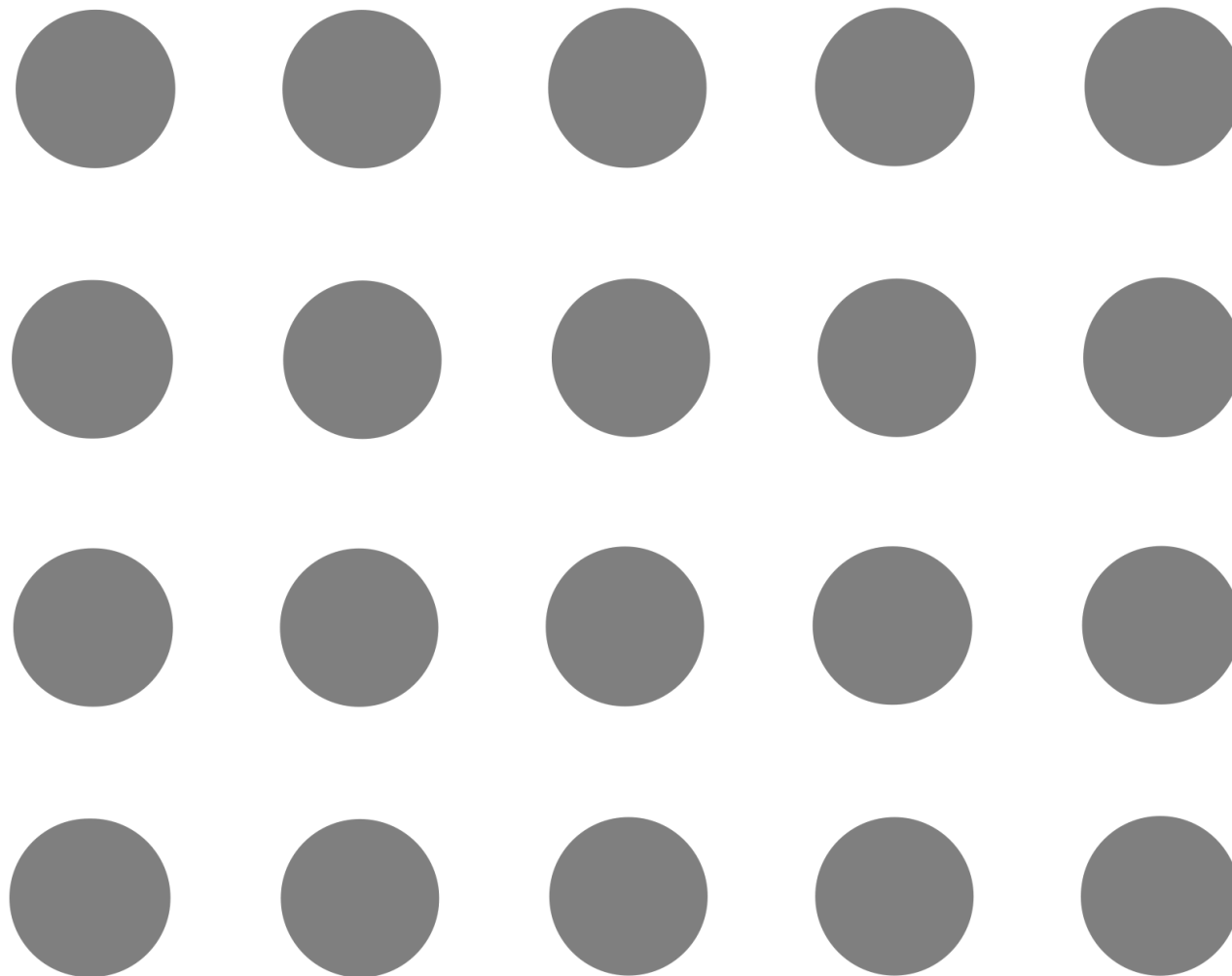
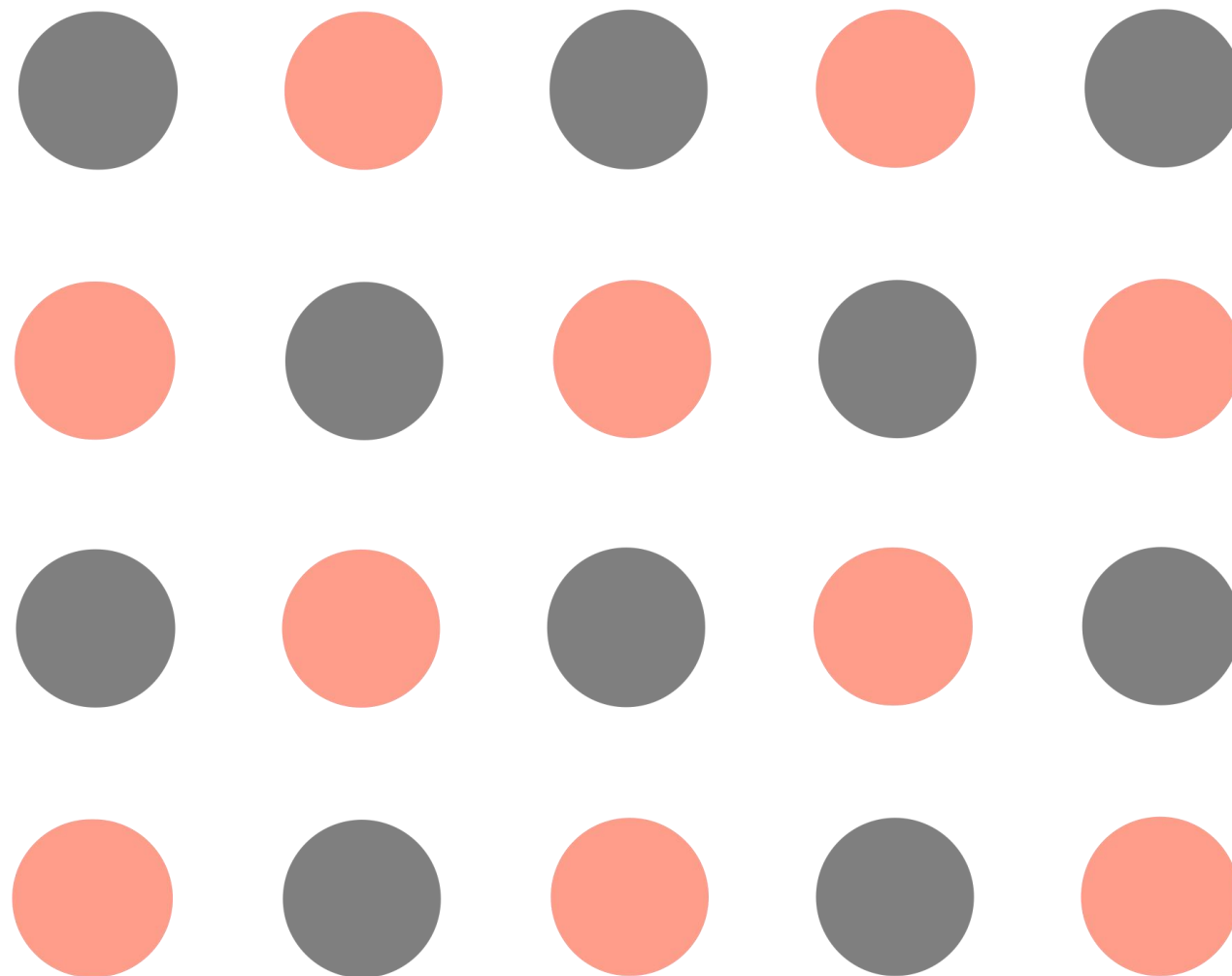


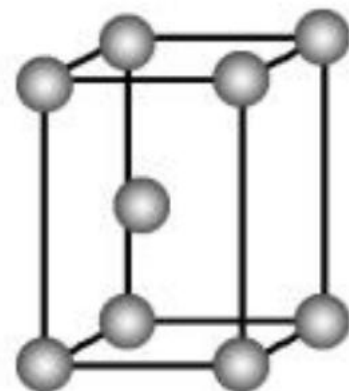
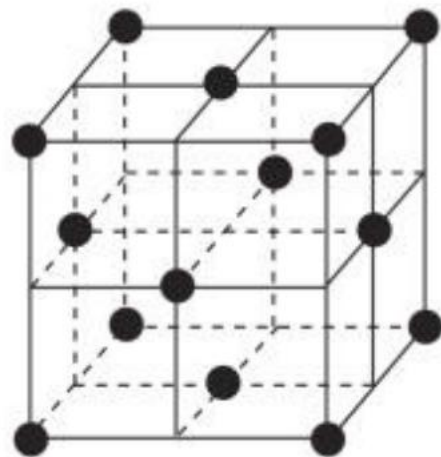
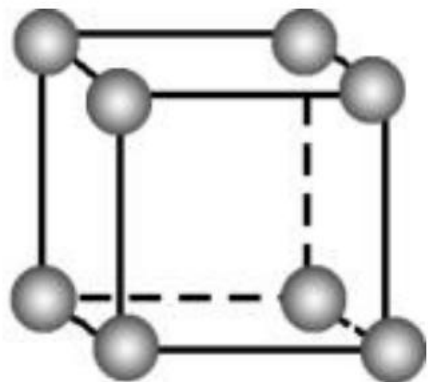
# 「无隙」 & 「并置」



# 「无隙」 & 「并置」



# 「无隙」 & 「并置」



## 应用一、晶胞选取

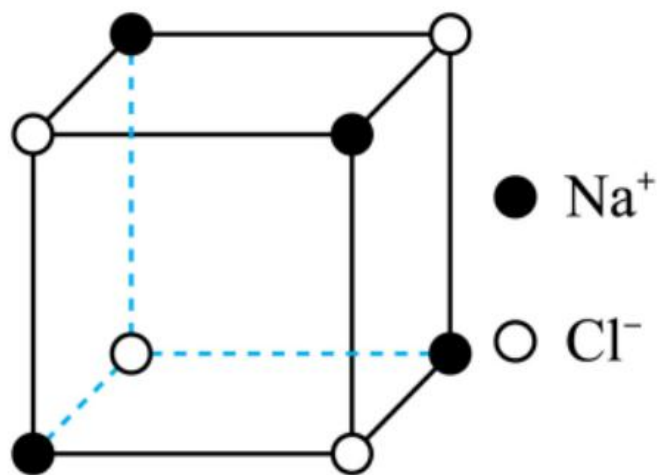
1. (2025 济宁三模) 下列化学用语或相关表述错误的是

A. ....

B. ....

C. ....

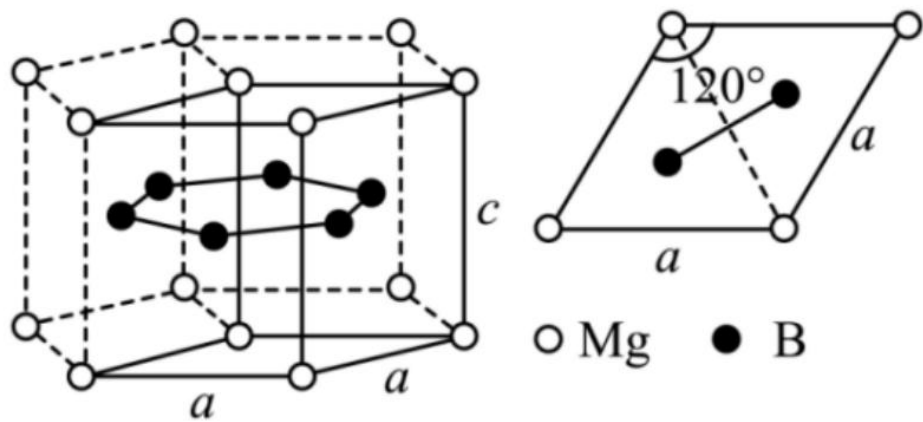
D. NaCl 的晶胞示意图:



## 应用一、晶胞选取

### 2. (2023 全国乙 35)

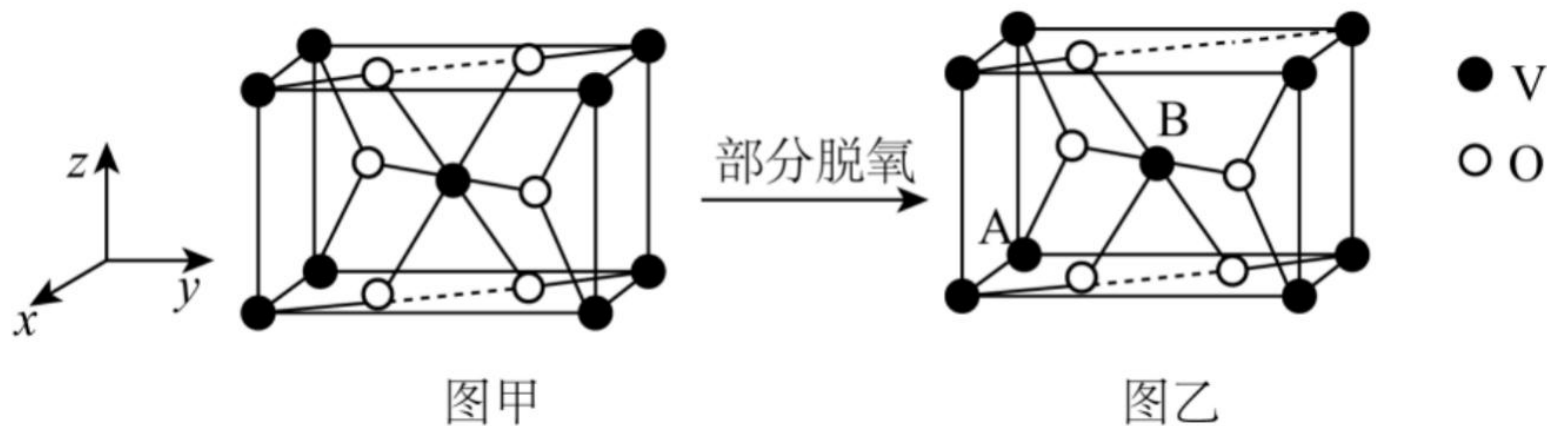
(3) 一种硼镁化合物具有超导性能，晶体结构属于六方晶系，其晶体结构、晶胞沿  $c$  轴的投影图如下所示，晶胞中含有\_\_\_\_\_个  $\text{Mg}$ 。该物质化学式为\_\_\_\_\_， $\text{B-B}$  最近距离为\_\_\_\_\_。



## 应用一、晶胞选取

### 3. (2026 济南一模)

(3)  $\text{VO}_2$  的四方晶胞如图甲所示。当  $\text{VO}_2$  中脱出部分 O 原子，形成  $\text{VO}_m$ ，结构示意图如图乙所示，则  $m=$ \_\_\_\_\_；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\_\_\_\_\_。



## 应用一、晶胞选取

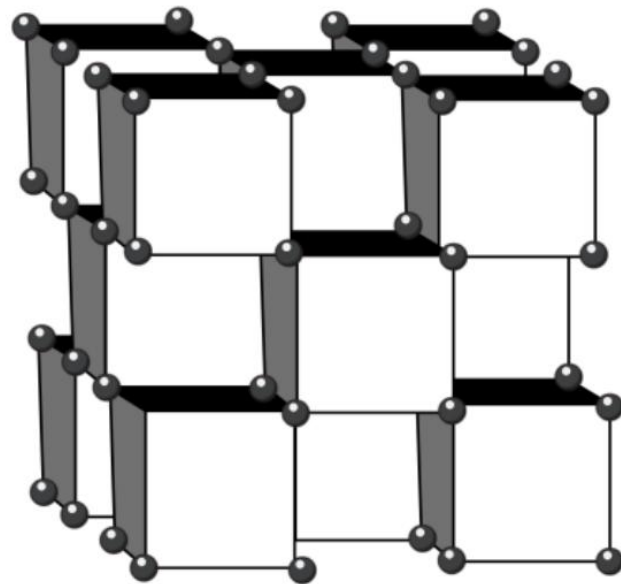
### 4. (2024 菏泽一模, 16)

(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  $\text{Na}_8$  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  $\left(\frac{1}{2}, 0, 0\right)$ 、 $\left(0, 0, \frac{1}{2}\right)$ , 还有\_\_\_\_\_;

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

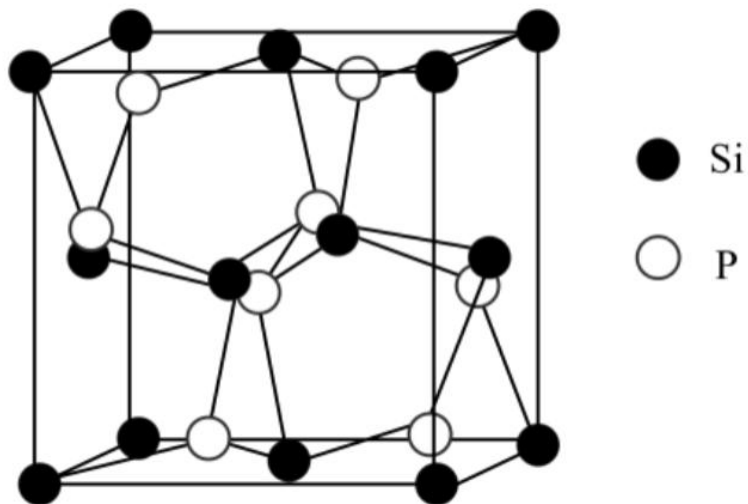
$a = \underline{\hspace{2cm}} \text{pm}$  (用含  $\rho, N_A$  的代数式表示)。



## 应用二、粒子位置判断

5. (2023.1 浙江 17) 硅材料在生活中占有重要地位。请回答:

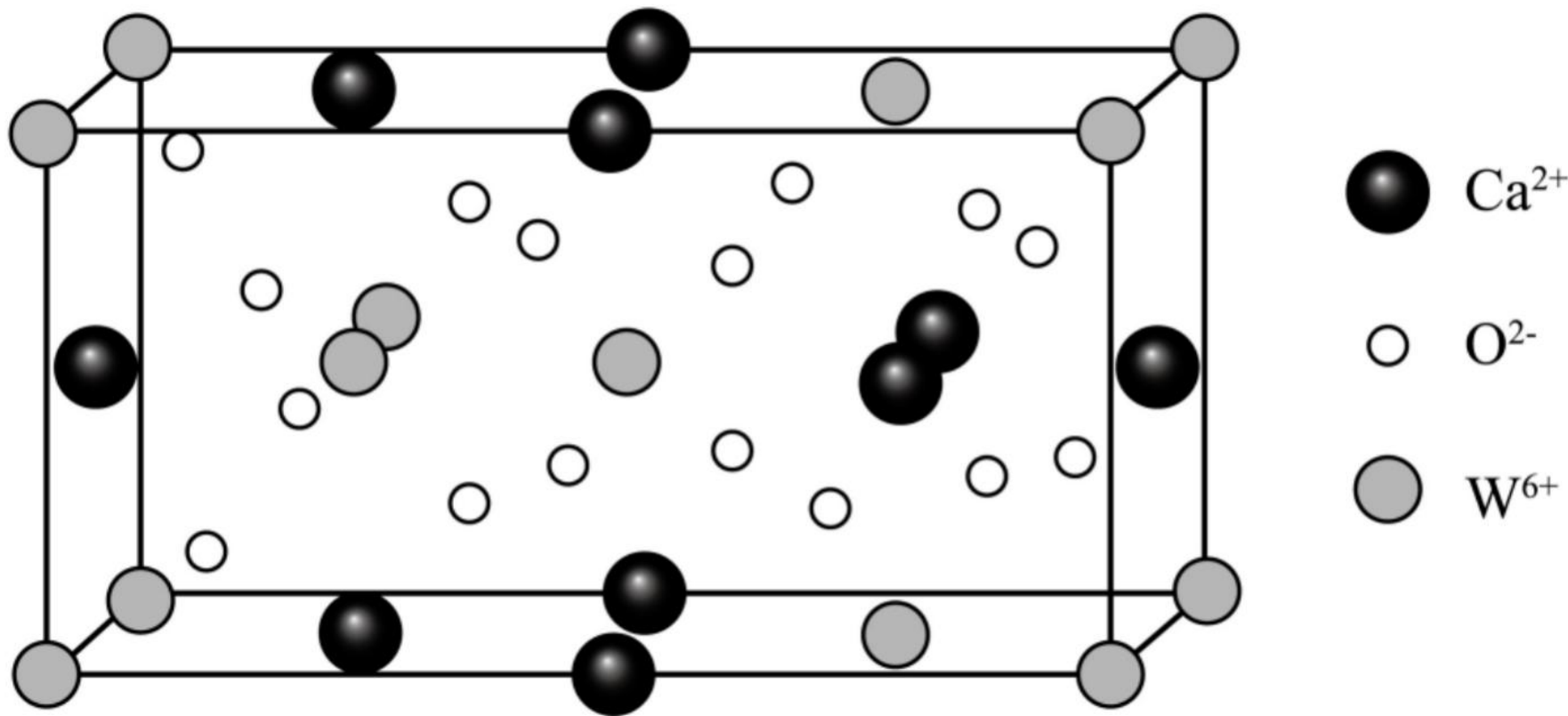
(3) Si 与 P 形成的某化合物晶体的晶胞如图。该晶体类型是\_\_\_\_\_，该化合物的化学式为\_\_\_\_\_。



## 应用二、粒子位置判断

6. (2025 上海, 2)

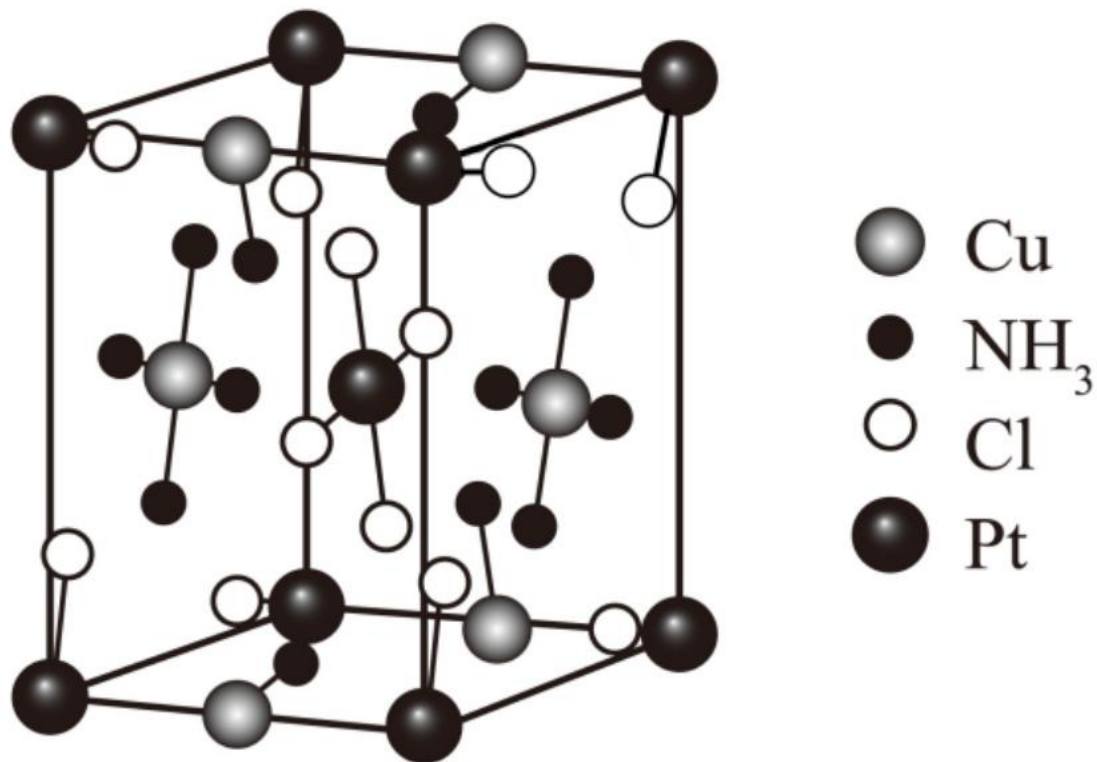
白钨矿的主要成分的钨酸钙( $\text{CaWO}_4$ ),  $\text{CaWO}_4$ 的晶胞结构如下图:



## 应用二、粒子位置判断

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\_\_\_\_\_。



## 应用二、粒子位置判断

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\_\_\_\_\_  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$  ( $N_A$  为阿伏加德罗常数的值)。

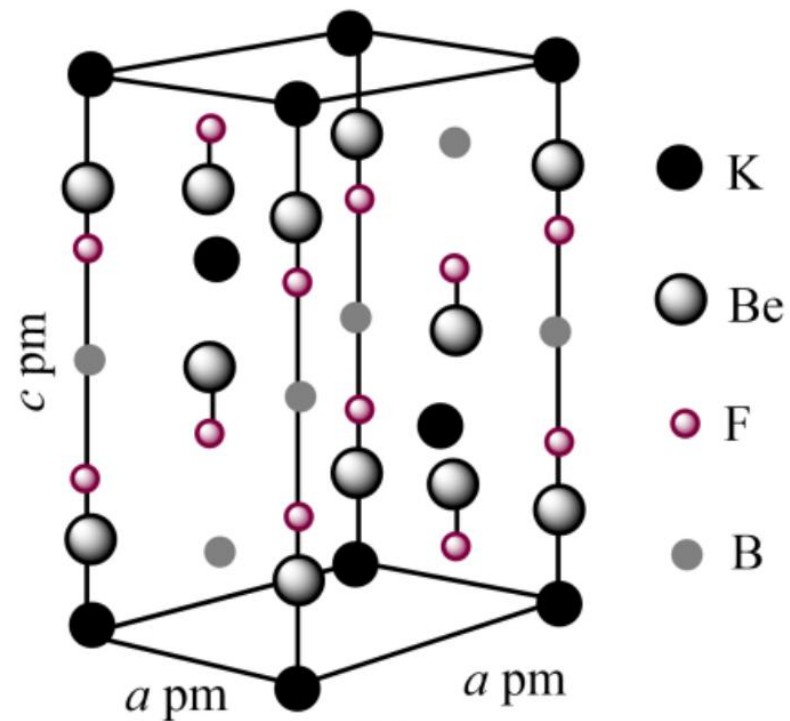


图2

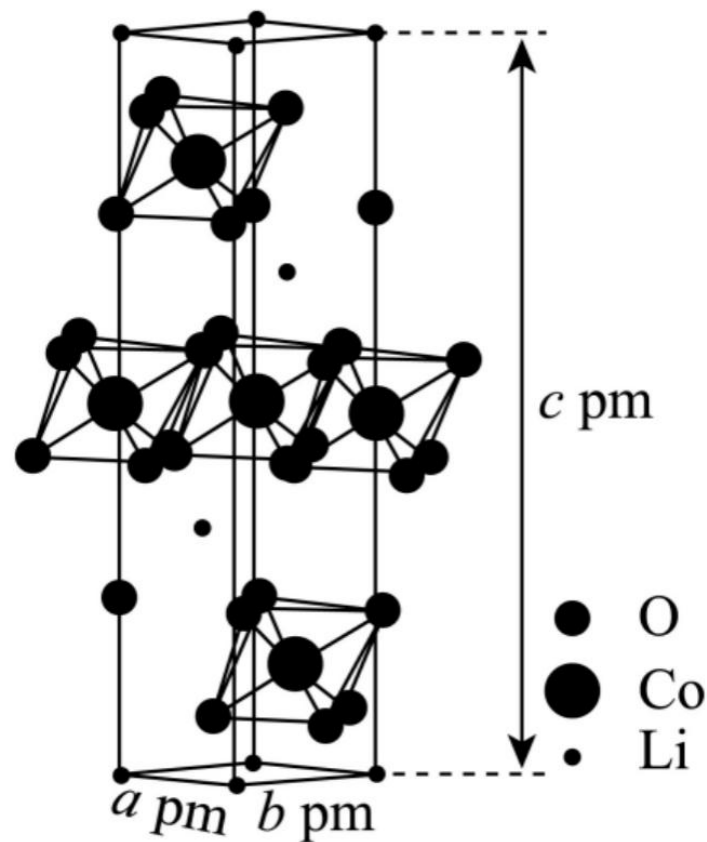
## 应用2——粒子位置判断

9. (2024 德州二模, 16)

(3) 钴酸锂 ( $\text{LiCoO}_2$ ) 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  $a = b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ ), 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  $\text{Li}^+$  层交替排列。在充放电过程中,  $\text{Li}^+$  在层间脱出或嵌入。

①晶胞中 Co 的个数为\_\_\_\_\_； $\text{Li}^+$  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\_\_\_\_\_。

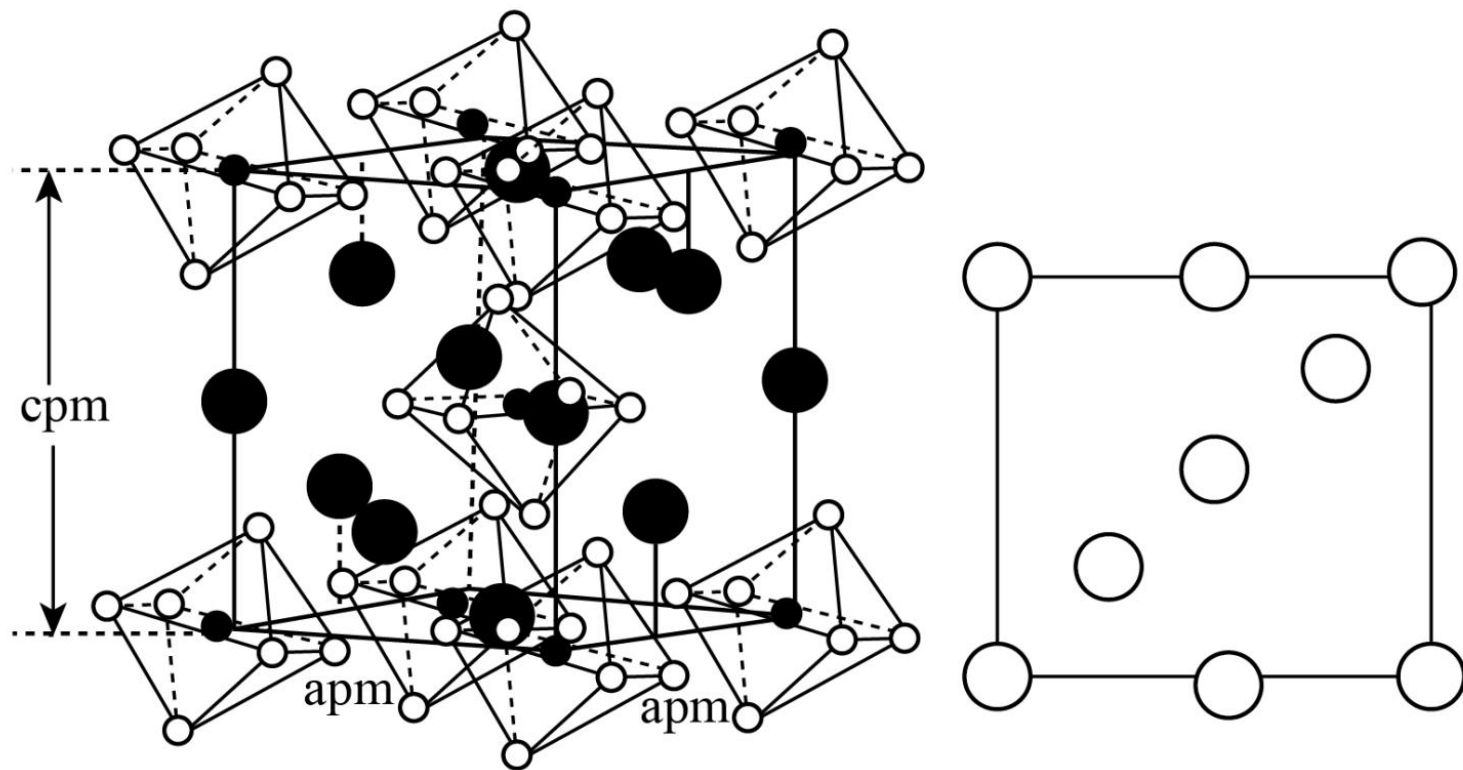
②若阿伏加德罗常数的值为  $N_A$ , 则晶体密度为\_\_\_\_\_  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$  (用代数式表示)。



## 应用二、粒子位置判断

10. (2024 潍坊一模, 16)

(3) 一定条件下,  $\text{NH}_4\text{F}$ 、 $\text{NaF}$  和  $\text{NaAlO}_2$  反应生成  $\text{NH}_3$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  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  $a\text{pm}$ 、 $c\text{pm}$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 。

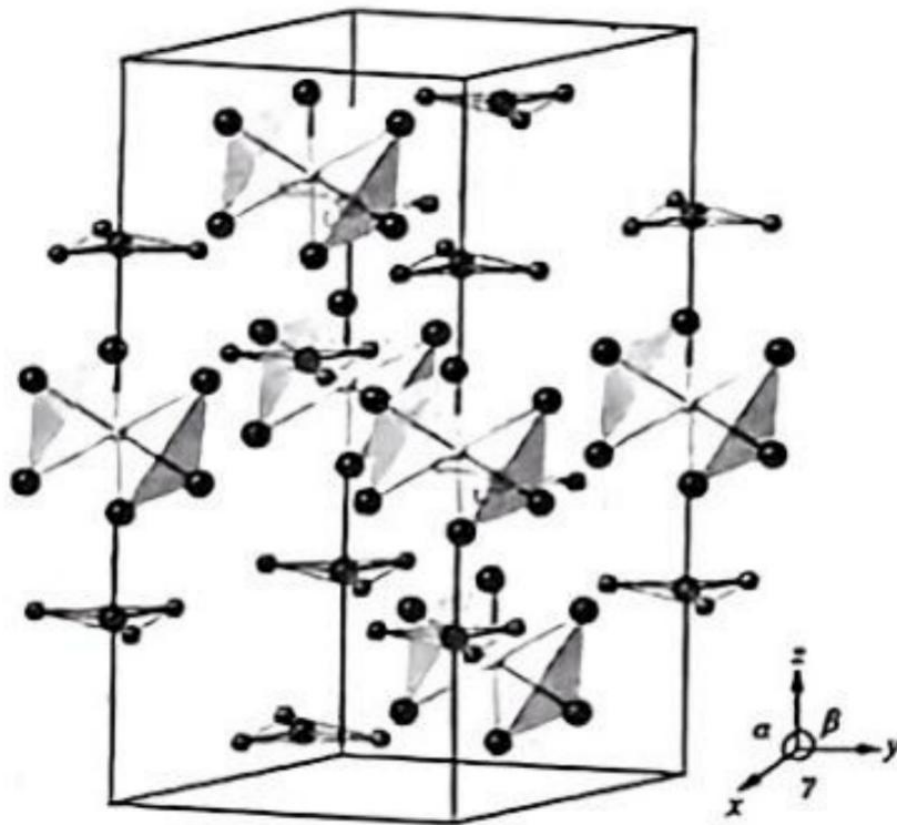


## 应用二、粒子位置判断

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。

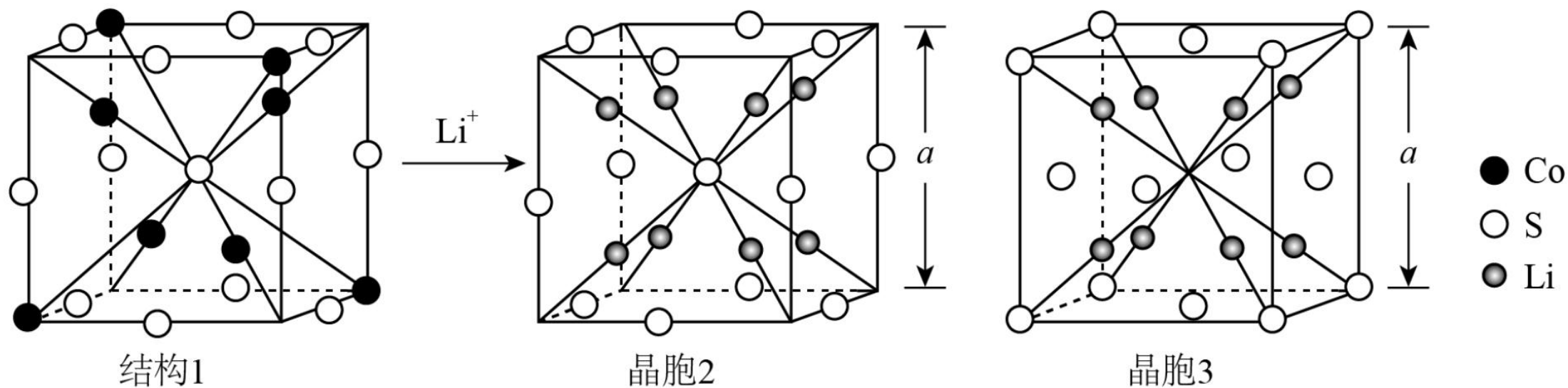
(4) 该晶体中含有的八面体和平面三角形的个数比为 \_\_\_\_\_, 晶体的化学式为 \_\_\_\_\_。

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



### 应用三、晶胞平移变换

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