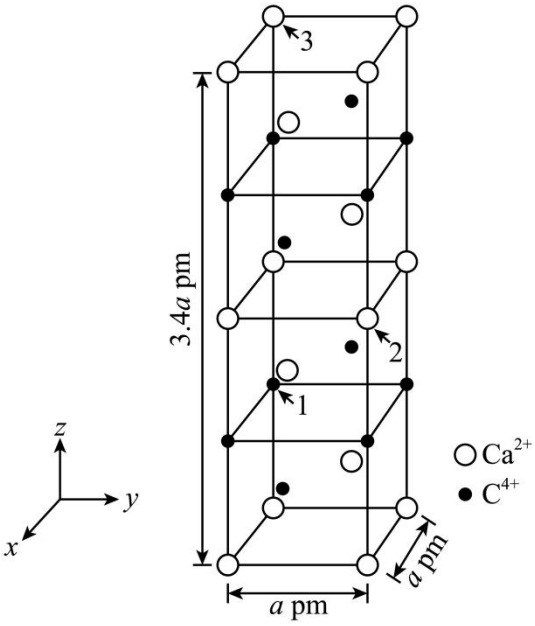
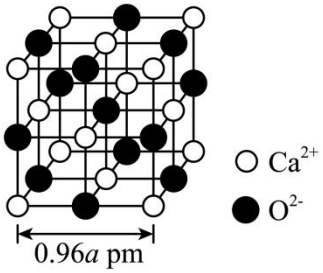
【核心考点028】晶胞中原子的分数坐标

考点一、直角坐标系晶胞 1
考点二、六方晶胞 7
考点三、坐标与距离换算 9
考点四、原子坐标种类 12
答案与解析 13

考点一、直角坐标系晶胞

1．（2025四川，12）$CaCO_3$的四方晶胞(晶胞参数α=β=γ = 90°，省略CO_3^{2-}中的氧，只标出C^{4+})和CaO的立方晶胞如图所示，N_A为阿伏加德罗常数的值。





下列说法错误的是

A．$CaCO_3$晶胞中1位C^{4+}的分数坐标为$\left(0,0,\frac{1}{4}\right)$

B．……

C．……

D．……

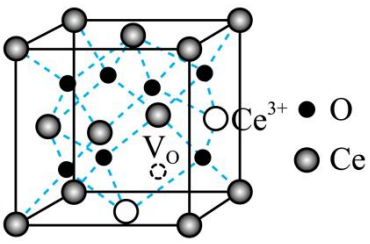
2．（2025江西，14）CeO_2晶格中的O被去除，产生一个氧空位(V_O)，V_O相对原点的分数坐标为$\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right)$，则图中$Ce^{3+}$的分数坐标分别为

A．$\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right),\left(1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$

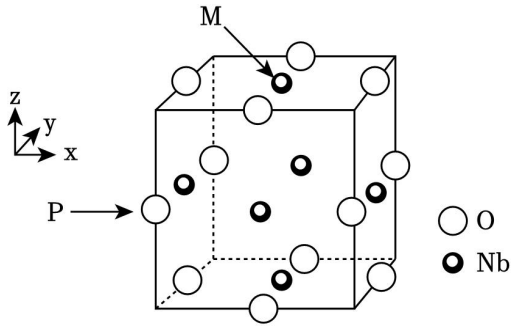
B．$\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right),(1,0,0)$

C．$\left(0,\frac{1}{2},0\right),\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$

D．$\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right),\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$



3．（2024 江西，12）NbO 的立方晶胞如图，晶胞参数为 anm，P 的分数坐标为(0，0，0)，阿伏加德罗常数的值 M 为 N_A，下列说法正确的是



A.

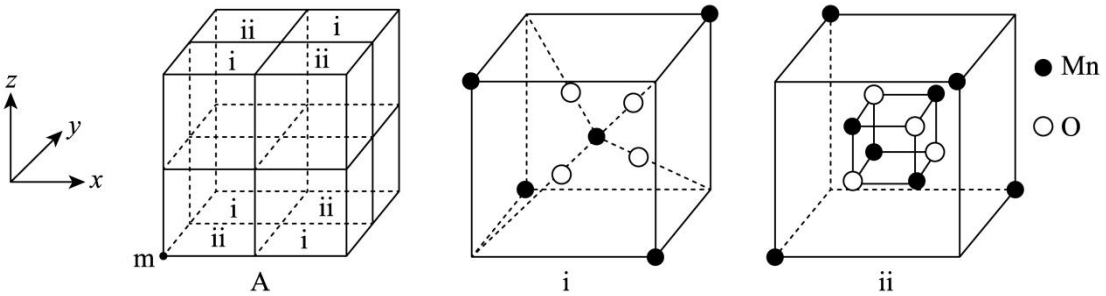
B.

C.

D．M 的分数坐标为$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$

4．（2025 烟台德州二模，16）锰及其化合物在生产生活中应用广泛。回答下列问题：

（3）锰的某种氧化物具有一定催化效果，其晶胞结构如图中 A 所示(Mn 和 O 原子省略)，晶胞棱长为 apm。A 可看作是由 i 、ii 两种基本单元交替排列而成；ii 中单元内的锰和氧均位于体对角线上离顶点$\frac{1}{4}$处。

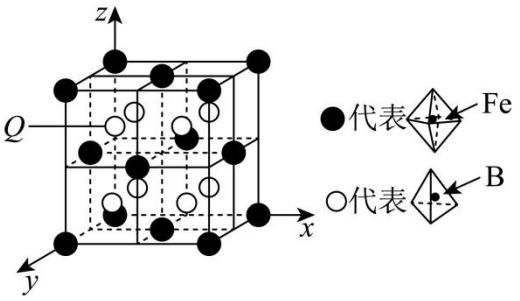


①晶胞 A 中，距离 m 原子$(0,0,0)$最近的 O 原子分数坐标为_____；i 、ii 单元中 Mn 的配位数之比为_____。

②该氧化物的晶体密度为_____$g\cdot cm^{-3}$(列出计算式)。

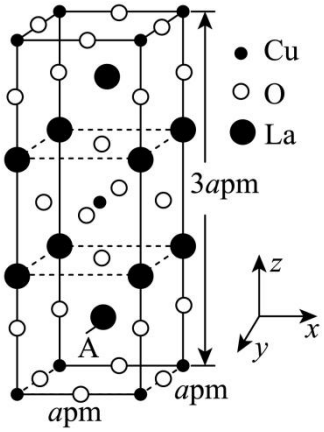
5．（2025 济宁一模，16）氮及其化合物具有较大应用价值，回答下列问题：

（3）某种由 NH_3 作为配体形成的新型储氢材料的晶胞结构如图，其中 NH_3 为正八面体的顶点，H 为正四面体的顶点，若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，称作原子分数坐标，则 Q 的原子分数坐标为_____；若晶胞参数为 anm，阿伏加德罗常数的值为N_A，则该晶体的密度为_____g/cm³。



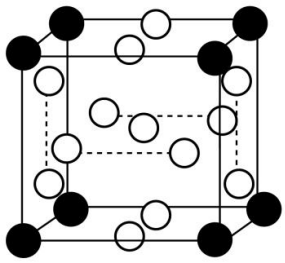
6．（2025 威海三模，16）铜及其化合物在生产、生活和科研领域应用广泛。回答下列问题：

（3）化合物 X 由 La、Cu 和 O 三种元素组成，它是第一个被发现的氧化物超导体，其晶胞结构如图所示，晶胞棱边夹角均为 $90°$。晶胞中每个 Cu 原子处于最近的若干个 O 原子构成的空间结构的中心，则这若干个 O 原子构成的空间构型为_____。化合物 X 的化学式为_____；A 点原子的分数坐标为_____；若阿伏加德罗常数的值为 N_A，则晶胞密度 ρ=_____ $g\cdot cm^{-3}$ (用含 a、N_A 的代数式表示)。



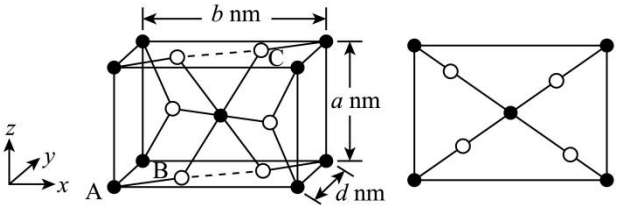
7．（2024 济宁二模，16）卤族元素的化合物在科研和生产中有着重要的作用。请回答下列问题：

（3）在极高压强下，氯化钠可以和氯气化合生成 $NaCl_x$。$NaCl_x$ 是立方系晶胞，结构如图所示，其中两个氯原子的坐标为 $(0.00,0.50,0.15)$、$(0.00,0.50,0.85)$，晶体的化学式为_____；与 Na 距离最近的且相等的 Cl 有_____个；Cl_2 在晶体中键长为 0.20nm，晶胞棱长为_____nm（保留 2 位有效数字）。



8．（2025 菏泽一模，16）钴和锂在电池材料、超级合金等高科技领域中发挥着关键作用。回答下列问题：

(3)CoO_2 的四方晶胞及其在 xy 平面的投影如图所示，晶胞棱边夹角均为 90°。A、B 点原子的分数坐标分别为(0，0，0)、(0.31，0.31，0)，则 C 点原子的分数坐标为_____。则该晶体密度ρ=_____g/cm^3(用含 N_A 的代数式表示)。

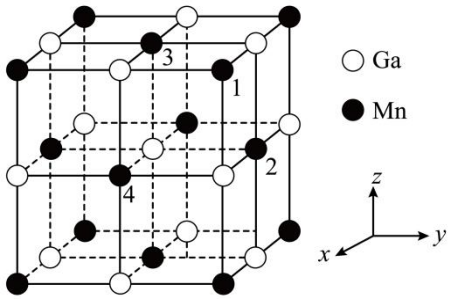


9．（2025 泰安一模，16）

(4)已知以晶胞参数为单位长度建立的坐标系可以表示晶胞中原子的位置，称作原子分数坐标。铁的一种立方晶系晶体结构中，每个晶胞平均含有 2 个 Fe，Fe 原子分数坐标为 $(0,0,0)$ 和 $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$。已知该晶体中距离最近的 Fe 原子核之间的距离为 a pm，阿伏加德罗常数是 N_A，则晶体的密度为_____ $g\cdot cm^{-3}$。

10．（2024 日照二模，16）过渡金属不但能够与非金属元素形成化合物，还能与其他金属元素形成金属互化物。回答下列问题：

（3）锰和镓形成的金属互化物立方晶胞如图所示。



①若将晶胞中体心的 Ga 原子作为晶胞的一个顶点，则距该 Ga 原子最近的 Ga 原子在新晶胞中位置为_____(填标号)。

A．面心　　B．体心　　C．顶点　　D．棱心

②晶胞中，相邻 Mn 原子构成的正四面体空隙完全由镍原子填充，可用于制备碳基金属催化剂。1 号 Mn 原子坐标参数为$(1,1,1)$，则填充在 1、2、3、4 号 Mn 构成的四面体空隙中心的镍原子的坐标参数为_____；晶胞参数为 a nm，则填充镍后的晶胞的密度 $\rho=$_____$g\cdot cm^{-3}$(用含 N_A、a 的代数式表示)。

11．（2024 泰安三模，17）

（6）$FeO\cdot Cr_2O_3$ 的立方晶胞可看作 4 个如图 1 所示的结构单元移至图 2 的相应位置。图 1 中 M 点在晶胞中的位置为面心或_____；若 M 点在面心位置，则其原子坐标参数为_____。

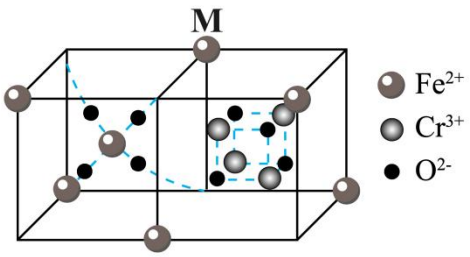


图1

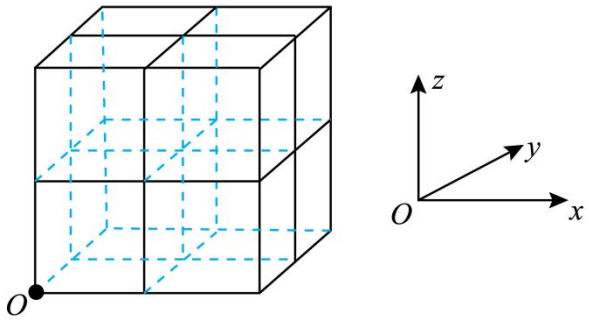
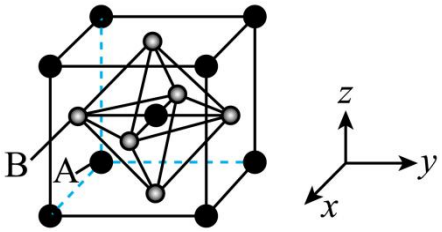
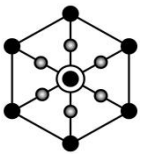
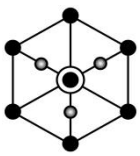
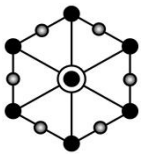
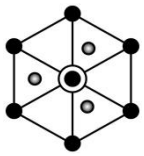


图2

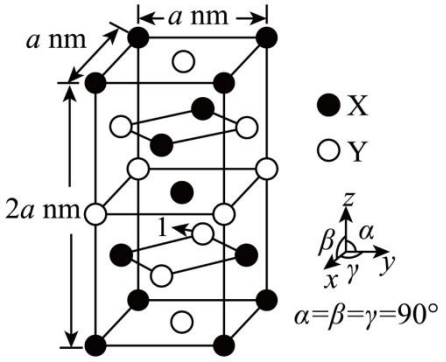
12．（2025 日照一模，16）碱土金属元素在生产、生活和科研中应用广泛。回答下列问题：

(3)某碱土金属防锈颜料的晶胞结构如图所示，晶胞参数为 apm，A 点的原子分数坐标为(0，0，0)，B 点原子分数坐标为_____，相邻 ● 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)。



A. 
B. 
C. 
D. 

13．（2025 潍坊二模，8）某晶体结构如图所示，下列说法错误的是



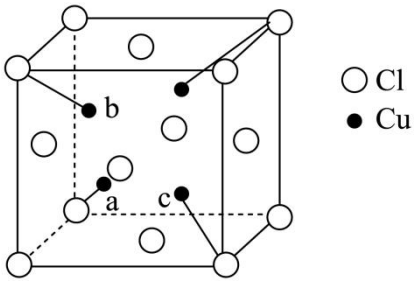
A．

B．

C．标号为“1”的 Y 的原子分数坐标为$\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{4}\right)$

D．

14．（2025 聊城三模，6）铜的一种化合物的晶胞如图所示，晶胞的边长为 xpm，N_A 为阿伏加德罗常数的值，铜原子 b 的分数坐标为$\left(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right)$，下列说法错误的是



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

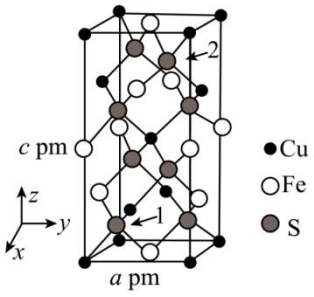
B．

C．

D．

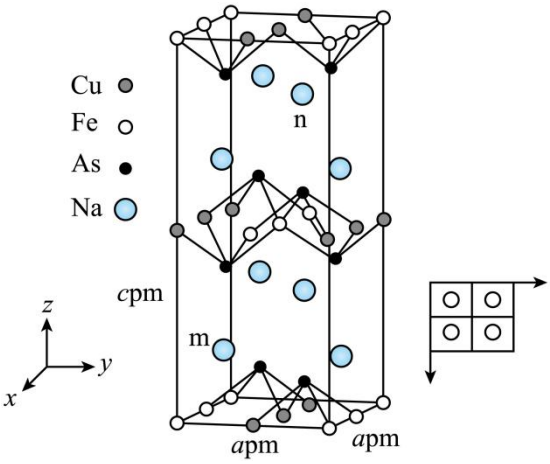
15．（2024 临沂一模，16）

（3）黄铜矿晶胞结构如图所示(晶胞参数 a≠c，α=β=γ=90°，与单个 Fe 键合的 S 有_____个。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，如原子 1 的分数坐标为($\frac{3}{4}$，$\frac{1}{4}$，$\frac{1}{8}$)，则原子 2 的分数坐标为_____；若 N_A 为阿伏加德罗常数的值，则晶胞密度ρ=_____g•cm^{-3}。



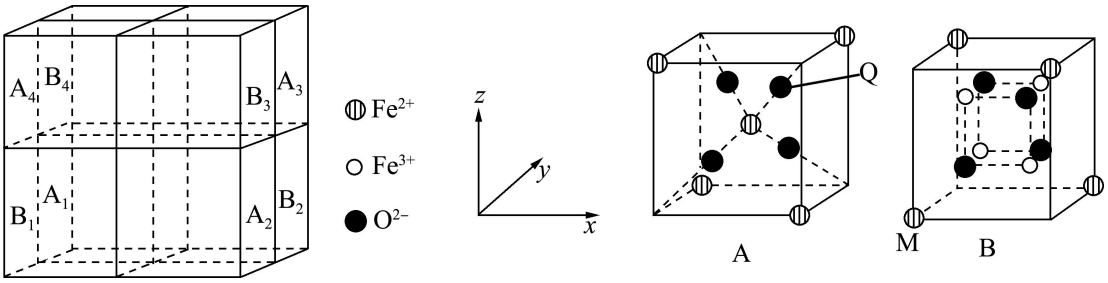
16．（2024 潍坊二模，16）氮族元素可以形成多种多样的化合物，回答下列问题：

（5）砷与金属钠、铁、铜可形成一种绝缘体材料，其晶胞结构图钠原子沿 z 轴投影如图所示，已知 m 原子的分数坐标为 $(0.75,0.25,0.20)$，晶胞参数为 $a=b\neq c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$。铜周围距离最近的砷原子的个数是_____，n 原子的分数坐标是_____，若阿伏加德罗常数值为 N_A，该晶体密度是_____ $g\cdot cm^{-3}$（用含 N_A 的代数式表示）。



17．（2025 日照三模，16）C、Fe、N、Li 及其化合物在生产生活中有重要作用。

（5）某种离子型铁氧化物的晶胞结构如下图所示，它由 A、B 两种正方体单元构成，且两种正方体单元中氧离子的空间位置相同。通过 Li^+嵌入或脱嵌晶胞的棱心和体心，可将该晶体设计为某锂电池的正极材料 $LiFe_mO_n/Li_{1-x}Fe_mO_n$ (m、n 为正整数)。



已知：脱嵌率 $=\dfrac{\text{一个晶胞中脱嵌出的}Li^+\text{数}}{\text{一个晶胞中嵌入}Li^+\text{的最大值}}\times 100\%$。

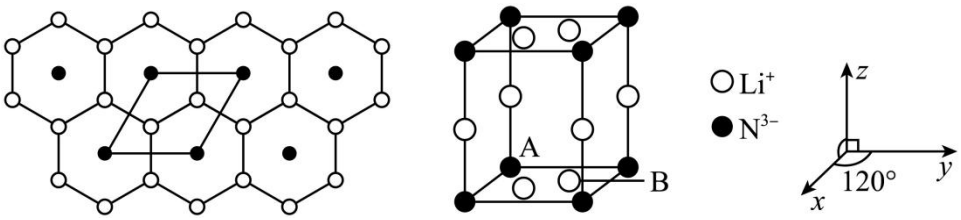
①B_1 中 M 原子分数坐标为(0，0，0)，则 A_3 中 Q 原子分数坐标为_____。

②若该锂电池正极材料中 $n(Fe^{2+})$：$n(Fe^{3+})=5$：7，则 Li^+的脱嵌率为_____。

考点二、六方晶胞

1．（2025 日照二模，16）第 VA 族元素及其化合物在生产、生活和科研中应用广泛。回答下列问题：

（4）氮化锂具有高离子电导率可用作固体电解质，其晶体结构如图所示。

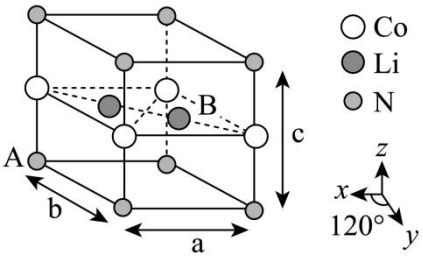


①氮化锂晶胞中有_____种不同化学环境的 Li^+，N^{3-}的配位数为(晶胞参数 apm、apm、高 bpm，b＞2a)_____。

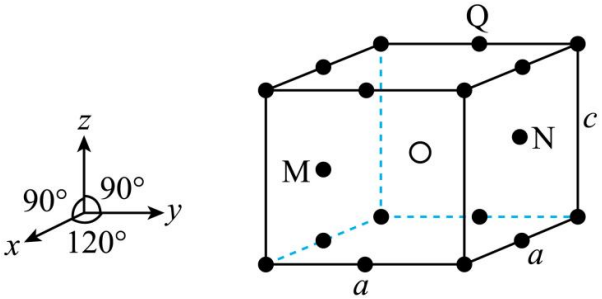
②若 A 点的原子分数坐标为(0，0，0)，则 B 点的坐标为_____；晶胞参数为 a pm、apm、bpm，N_A 为阿伏加德罗常数，则晶体的密度为_____$g\cdot cm^{-3}$。

2．（2025 烟台德州东营一模，16）氮元素被称为“生命元素”，不仅是蛋白质的重要组成元素，还在医药、化工、农业生产等领域应用广泛。回答下列问题：

（4）某含氮催化剂的六方晶胞如图，晶胞参数为 a=b≠c，α=β=90°，γ=120°。其化学式为_____；若 A 点原子的分数坐标为(1，0，0)，则 B 点原子的分数坐标为_____；1 个 N 原子周围距离相等且最近的 Li 原子数目为_____。



3．（2025 河北，11）$SmCo_k(k>1)$是一种具有优异磁性能的稀土永磁材料，在航空航天等领域中获得重要应用。$SmCo_k$ 的六方晶胞示意图如下，晶胞参数 $a=500pm$、$c=400pm$，M、N 原子的分数坐标分别为$\left(\frac{5}{6},\frac{1}{6},\frac{1}{2}\right)$、$\left(\frac{1}{6},\frac{5}{6},\frac{1}{2}\right)$。设 N_A 是阿伏加德罗常数的值。



下列说法错误的是

A．……

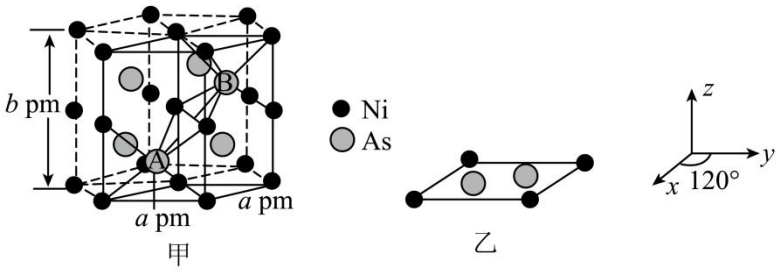
B．体心原子的分数坐标为$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$

C．……

D．……

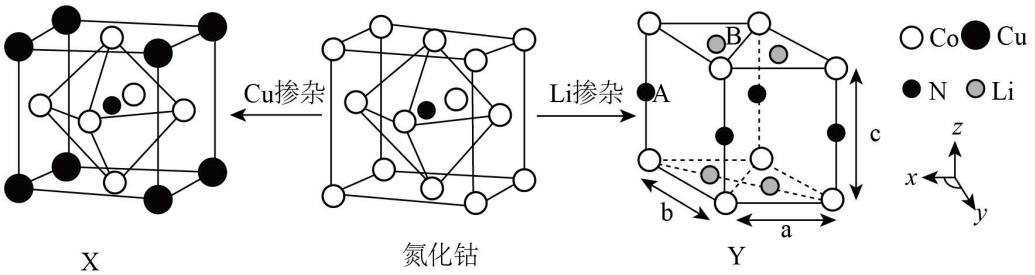
4．（2024 威海二模，16）金属镍及其化合物在工业、科研等领域应用广泛。回答下列问题：

（4）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，称作原子的分数坐标。NiAs 晶体结构如图甲所示，其晶胞俯视图如图乙所示。A 点原子的分数坐标为$\left(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{4}\right)$，则 B 点原子的分数坐标为_____，A、B 两点间距离为_____pm。



甲　　乙

5．（2024 淄博一模，16）



X　　氮化钴　　Y

Y 属于六方晶系，晶胞参数为$a=b\neq c$，$\alpha=\beta=90°$，$\gamma=120°$，如 A 点原子的分数坐标为$\left(1,0,\frac{1}{2}\right)$，则 B 点 Li 原子的分数坐标为_____。

6．（2024 日照三模，16）铁、碳可形成许多结构和性质特殊的物质。回答下列问题：

（5）已知石墨晶体的一个六方晶胞如图 2 所示，晶胞内 N 点碳的原子坐标_____。已知石墨层间距 334. 8pm，C−C 键长 142pm，计算石墨晶体密度 $\rho=$_____$\mathrm{g\cdot cm^{-3}}$（用含 N_A 的表达式表示）。

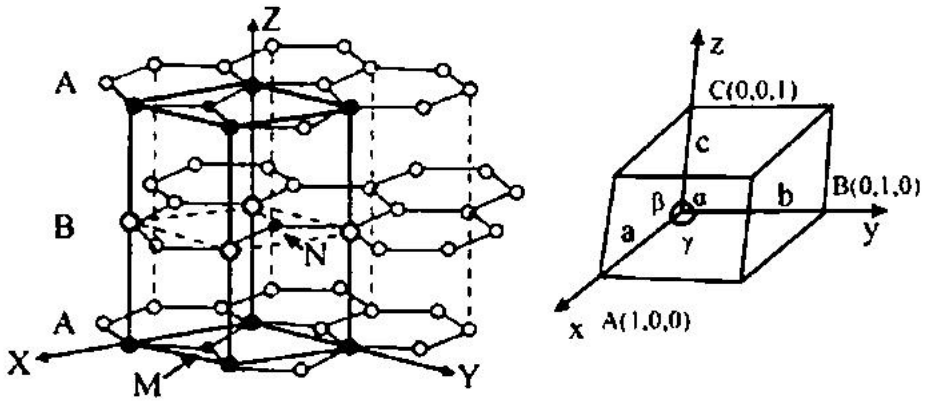
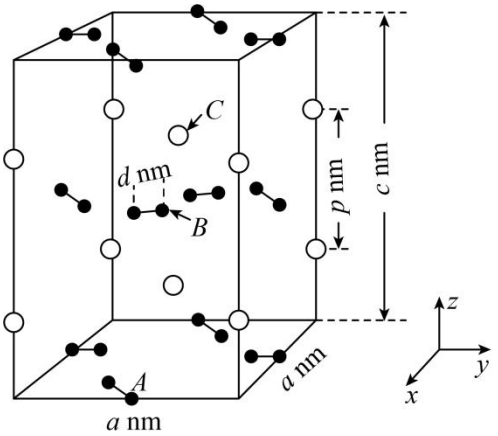


图 2

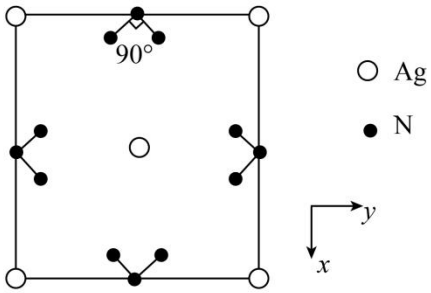
考点三、坐标与距离换算

1．（2025 淄博一模，16）氨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 $a=b\neq c$， $\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$)。



X的四方晶胞

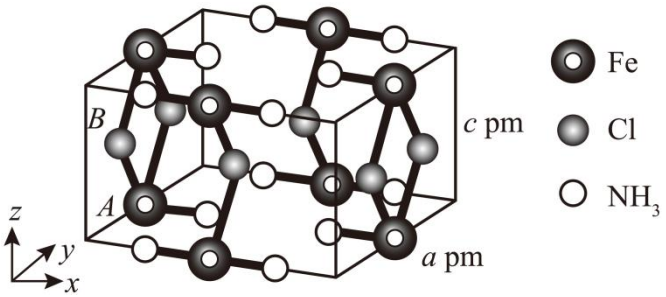


X沿z轴的投影图

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

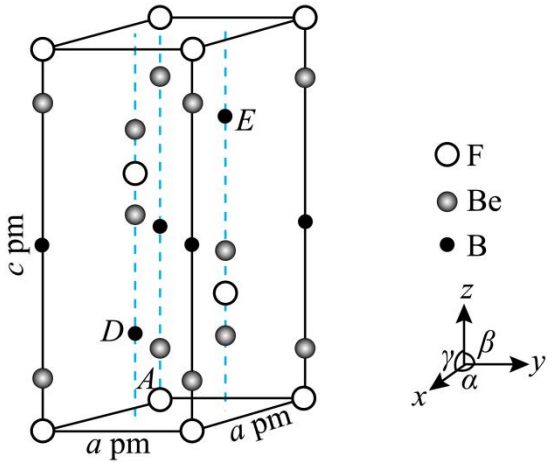
2．（2025 济南二模，16）含氨配合物在生产、检测、医药中发挥着重要作用。回答下列问题：

（2）某铁氨配合物的晶胞如图所示，晶胞参数为 $\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$， $a=b\neq c$ 。该晶体的化学式为_____；晶体类型为_____；铁元素的配位数为_____。原子分数坐标可用于表示晶胞内部各原子的相对位置，A 原子分数坐标为(0，$\frac{1}{2}$，0)，桥连相同两个铁原子的两个氯原子间距离为 xpm，则 B 原子的分数坐标为_____。



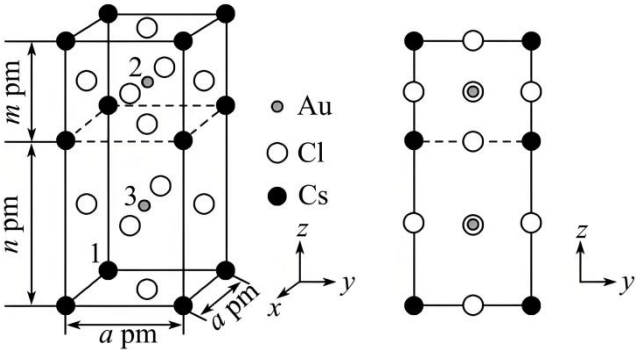
3．（2024 淄博三模，16）

（3）一定条件下，B_2O_3、KBF_4、BeO 发生非氧化还原反应可制得晶体 $Be_xB_yO_zF_m$，其晶胞结构如图所示（氧原子未画出），晶胞参数 $a=b\neq c$， $\alpha=120^{\circ}$， $\beta=\gamma=90^{\circ}$，若 A、D、E 三点的原子分数坐标分别为 $(0,0,0)$ 、$\left(\frac{2}{3},\frac{1}{3},d\right)$、$\left[\frac{1}{3},\frac{2}{3},(1-d)\right]$，晶胞中 D、E 间距离为_____ pm 。设阿伏加德罗常数的值为 N_A，该晶体的密度为_____ $g\cdot cm^{-3}$（用含 N_A 的代数式表示）。

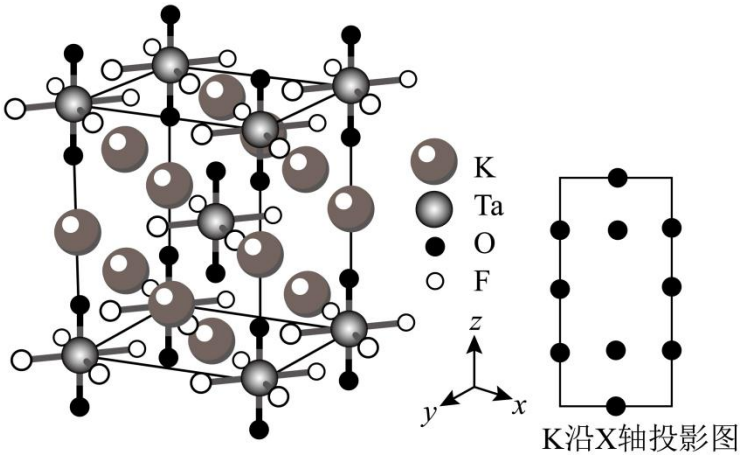


4．（2025 淄博三模，16）铜、金可形成许多结构与性质特殊的化合物。回答下列问题：

（3）由 Au、Cs 和 Cl 组成的晶胞属于四方晶系，结构如图所示，2、3 为两种不同价态和化学环境的 Au，m<a<n 。则两种环境 Au 的配离子化学式分别为_____。点 1 原子的分数坐标为(0，0，0)，则点 2 原子的分数坐标为_____。



5．（2024 济宁三模，9）Ta_2O_5 和 KHF_2 按计量比混合，一定条件下，获得晶体产物的晶胞结构如图所示，晶胞参数 $a=b\neq c$ nm，$\alpha=\beta=\gamma=90°$，Ta—O 键键长为 xnm。下列说法错误的是



A.

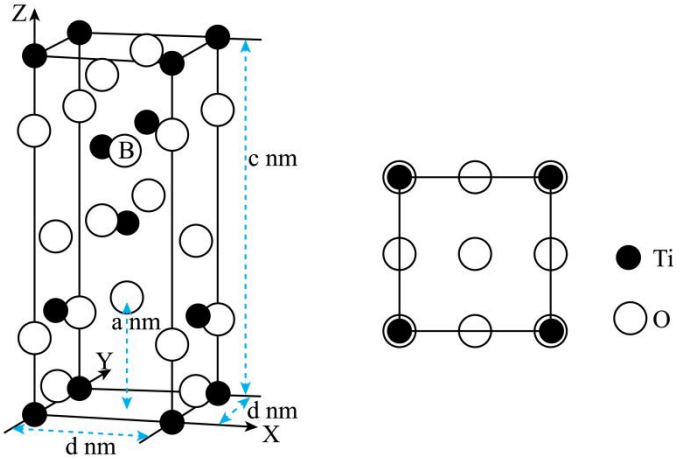
B．O 原子分数坐标可能为 $\left(0,0,\frac{c-x}{c}\right)$，$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{c-2x}{2c}\right)$

C.

D.

6．（2025 济宁三模，16）镁离子电池是具有大规模储能应用潜力的电池体系。

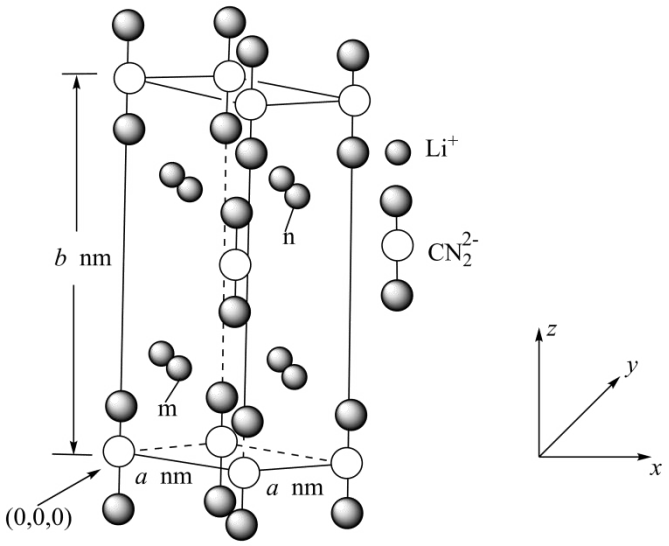
（4）TiO_X 可做镁离子电池负极材料，TiO_X 的晶胞及其在 Z 轴方向的投影如图所示。



该晶胞的密度=_____$g\cdot cm^3$，B 点原子的分数坐标为_____。

7．（2025 滨州二模，16）氮形成的一系列化合物广泛应用于科研、医疗、化工等领域。回答下列问题：

（4）活性氮物质 Li_2CN_2 能用于合成多种高附加值含氮化合物，其晶胞形状为长方体，结构如图。

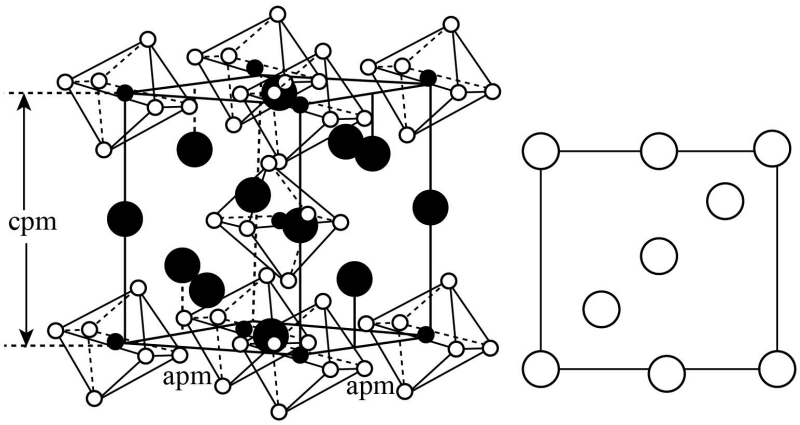


以晶胞参数为单位长度建立的坐标系可以表示晶胞中各原子的位置，称作原子分数坐标。图中 m 处 Li^+ 的分数坐标为 $\left(\frac{1}{2},0,\frac{p}{b}\right)$（$p$nm 为 m 处 Li^+ 到底面的垂直距离），则 n 处 Li^+ 的分数坐标为_____；该晶体的密度 $\rho=$_____$g\cdot cm^{-3}$（N_A 表示阿伏加德罗常数的值，用含 a、b、N_A 的代数式表示）。

考点四、原子坐标种类

1．（2024 潍坊一模，16）硼族元素可形成许多结构和性质特殊的化合物。回答下列问题：

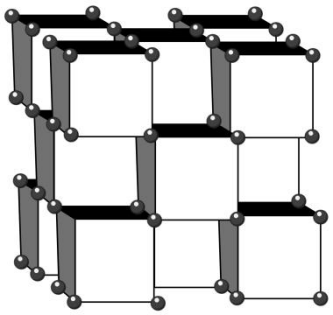
（3）一定条件下，NH_4F、NaF 和 $NaAlO_2$ 反应生成 NH_3、H_2O 和化合物 X。X 晶胞及晶胞中某一原子的俯视投影如图所示，晶胞参数为 apm、cpm, $\alpha=\beta=\gamma=90°$。



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

2．（2024 菏泽一模，16）短周期元素可形成许多结构和性质不同的化合物，回答下列问题：

（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 $\left(\frac{1}{2},0,0\right)$、$\left(0,0,\frac{1}{2}\right)$，还有_____；若晶体的密度为 $\rho g\cdot cm^{-3}$，阿伏加德罗常数的值为 N_A，晶胞的边长 $a=$_____ pm (用含 ρ, N_A 的代数式表示)。



答案与解析

考点一、直角坐标系晶胞

1．（2025 四川，12）$CaCO_3$ 的四方晶胞(晶胞参数 α=β=γ = 90°，省略 CO_3^{2-} 中的氧，只标出 C^{4+})和 CaO 的立方晶胞如图所示，N_A 为阿伏加德罗常数的值。

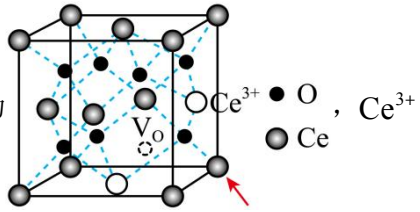
【解析】A．根据图示，$CaCO_3$ 晶胞中 1 位 C^{4+} 位于晶胞的棱角，其分数坐标为$(0,0,\frac{1}{4})$，故 A 正确。

2．（2025 江西，14）CeO_2 晶格中的 O 被去除，产生一个氧空位(V_O)，V_O 相对原点的分数坐标为$\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right)$，则图中 Ce^{3+} 的分数坐标分别为

【答案】D

【解析】

【详解】由晶胞结构可知，V_O 相对原点的分数坐标为$\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right)$，则坐标原点为



，Ce^{3+} 位于面心，位于底面面心的 Ce^{3+} 分数坐标为$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$，位于侧面面心的 Ce^{3+} 分数坐标为$\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$，故选 D。

3．（2024 江西，12）NbO 的立方晶胞如图，晶胞参数为 anm，P 的分数坐标为(0，0，0)，阿伏加德罗常数的值 M 为 N_A，下列说法正确的是

【解析】D．P 的分数坐标为（0，0，0），M 位于正方体的面心，M 的分数坐标为（$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{2}$），故 D 正确。

4．（2025 烟台德州二模，16）锰及其化合物在生产生活中应用广泛。回答下列问题：

【答案】

（3）　①. $\left(\frac{1}{8},\frac{1}{8},\frac{1}{8}\right)$　②. 4:3　③. $\frac{(24\times55+32\times16)}{N_A\cdot(a\times10^{-10})^3}$

【解析】

①在单元 i 中，Mn 原子与 4 个 O 原子配位，因此配位数为 4；在单元 ii 中，Mn 原子与 3 个 O 原子配位，因此配位数为 3，所以 Mn 的配位数之比为 4:3。O 原子位于体对角线上离顶点 $\frac{1}{4}$ 处，因此其坐标为 $\left(\frac{1}{8},\frac{1}{8},\frac{1}{8}\right)$。这是因为体对角线的长度为 $\sqrt{3}$倍，离顶点 $\frac{1}{4}$ 处的坐标为 $\left(\frac{1}{8},\frac{1}{8},\frac{1}{8}\right)$。

②把 i 和 ii 摆为 A 的样子，锰原子位于晶胞的 8 个顶点和 6 个面心，以及 4 个 i 的内部各个，4 个 ii 的内部各 4 个，所以一个 A 中含有锰原子为：$8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}+4\times1+4\times4=24$个，氧原子均在晶胞内部，故氧原子为：$4\times8=32$个，所以其氧化物的化学式为：$Mn_{24}O_{32}$。该氧化物的晶体密度为：$\frac{(24\times55+32\times16)}{(a\times10^{-10})^3\cdot N_A}g/cm^3$。

5．（2025 济宁一模，16）氮及其化合物具有较大应用价值，回答下列问题：

【答案】

（3） ①. $\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right)$ ②. $\frac{7.52\times10^{23}}{a^3N_A}$

【解析】

【小问 3 详解】

若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，称作原子分数坐标，根据晶胞结构可知 Q 的原子分数坐标为$\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right)$；$NH_3$为正八面体的顶点，H 为正四面体的顶点，由晶胞结构可知，BH_4的个数为 8，$Fe(NH_3)_6$的个数为$8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}=4$，若晶胞参数为 anm，阿伏加德罗常数的值为$N_A$，则该晶体的密度为$\frac{8\times(11+4)+4\times(56+17\times6)}{N_A\left(a\times10^{-7}\right)^3}g/cm^3=\frac{7.52\times10^{23}}{a^3N_A}g/cm^3$。

6．（2025 威海三模，16）铜及其化合物在生产、生活和科研领域应用广泛。回答下列问题：

【答案】

（3） ①. 正八面体形 ②. La_2CuO_4 ③. $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{6})$ ④. $\frac{8.12\times10^{32}}{3N_A\cdot a^3}$

【解析】

如图所示，晶胞棱边夹角均为$90°$，铜原子位于体心，O 原子位于晶胞内、棱上和侧面面心，晶胞中每个Cu 原子处于最近的 6 个 O 原子构成的正八面体空间结构的中心；由晶胞图可知，Cu 原子位于顶点和体心，个数为$1+8\times\frac{1}{8}=2$，La 原子位于体内和棱上，个数为$2+8\times\frac{1}{4}=4$，氧原子位于晶胞内、棱上和侧面面心，个数为$2+16\times\frac{1}{4}+4\times\frac{1}{2}=8$，则 La、Cu、O 原子的原子个数比为 4∶2∶8=2∶1∶4，则化合物 X 的化学式为La_2CuO_4；A 原子位于晶胞的体内，从俯视图可知，x 和 y 的坐标均为$\frac{1}{2}$，从侧视图可知，z 的坐标为$\frac{1}{6}$，A 点原子的分数坐标为$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{6})$；由晶胞图可知，Cu 原子位于顶点和体心，个数为$1+8\times\frac{1}{8}=2$，La 原子位于体内和棱上，个数为$2+8\times\frac{1}{4}=4$，O 原子位于晶胞内、棱上和侧面面心，个数为$2+16\times\frac{1}{4}+4\times\frac{1}{2}=8$，则晶胞的质量$m=\frac{64\times2+139\times4+16\times8}{N_A}g=\frac{812}{N_A}g$，晶胞的体积$V=\left(a\times10^{-10}\times a\times10^{-10}\times3a\times10^{-10}\right)cm^3=3a^3\times10^{-30}cm^3$，则由$\rho=\frac{m}{V}$可得，晶胞密度$\rho=\frac{m}{V}=\frac{\frac{812}{N_A}}{3a^3\times10^{-30}}g/cm^3=\frac{8.12\times10^{32}}{3a^3\cdot N_A}g/cm^3$。

7．（2024 济宁二模，16）卤族元素的化合物在科研和生产中有着重要的作用。请回答下列问题：

【答案】

（3） ①. $NaCl_7$ ②. 12 ③. 0.67

【解析】

由晶胞结构可知，晶胞中位于顶点的钠原子个数为 $8\times\frac{1}{8}=1$，位于面上和体心的氯原子个数为 $12\times\frac{1}{2}+1=7$，则晶体的化学式为 $NaCl_7$；晶胞中位于顶点的钠原子与位于面上的氯原子距离最近，则与钠原子距离最近的且相等的氯原子有 12 个；由两个氯原子的坐标为 $(0.00,0.50,0.15)$、$(0.00,0.50,0.85)$ 可知，晶胞棱长为 $0.20\text{nm}\times\frac{10}{3}\approx0.67$，故答案为：$NaCl_7$；12；0.67。

8．（2025 菏泽一模，16）钴和锂在电池材料、超级合金等高科技领域中发挥着关键作用。回答下列问题：

【答案】

(3)　　(0.69, 0.69, 1)　　$\frac{1.82\times10^{23}}{N_A\times abd}$

【详解】

（3）C 点原子的分数坐标：根据四方晶胞的对称性，C 点原子的坐标应为(1 - 0.31， 1 - 0.31， 1)，即(0.69， 0.69，1)。晶体密度计算：四方晶胞的体积为 $abd\times10^{-21}cm^3$，每个晶胞中含有 2 个 CoO_2 单元（每个晶胞中 $O:4\times\frac{1}{2}+2=4$；$Co:8\times\frac{1}{8}+1=2$），因此密度ρ = $\frac{1.82\times10^{23}}{N_A\times abd}$ g/cm³。

9．（2025 泰安一模，16）

【答案】

(4) $\frac{42\sqrt{3}}{a^3N_A}\times10^{30}$

【详解】

（4）每个晶胞平均含有 2 个 Fe，Fe 原子分数坐标为 $(0,0,0)$ 和 $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$，则晶胞中铁原子分别位于 8 个顶点和体心，晶胞的质量为 $\frac{56\times2}{N_A}$g，已知该晶体中距离最近的 Fe 原子核之间的距离为 a pm，则晶胞的体对角线为 2a pm，则晶胞的边长为 $\frac{2}{\sqrt{3}}apm$，体积为 $\left(\frac{2}{\sqrt{3}}a\times10^{-10}\right)^3cm^3$，则晶体的密度为 $\frac{42\sqrt{3}}{a^3N_A}\times10^{30}\ g\cdot cm^{-3}$。

10．（2024 日照二模，16）过渡金属不但能够与非金属元素形成化合物，还能与其他金属元素形成金属互化物。回答下列问题：

【答案】

（3）　①. A　②. $\left(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right)$　③. $\frac{972}{(a\times10^{-7})^3N_A}$

【解析】

【小问 1 详解】

锰元素是第 25 号元素，位于周期表的第四周期ⅦB，属于 d 区元素，基态锰原子的价电子轨道表示式为

3d					4s
↑	↑	↑	↑	↑	↑↓

；

【小问 2 详解】

①二茂铁熔点低于铁的原因为：二茂铁属于分子晶体，铁属于金属晶体，铁晶体中金属健强度大于二茂铁晶体中分子间作用力；

②在 $C_5H_5^-$中的每个碳原子上都有一个未参与σ键的电子，这些电子占据与环的平面垂直的 p 轨道上，5 个碳原子的 5 个 p 轨道肩并肩，外加得到一个电子重叠形成大π键，其大π键可表示为 Π_5^6；

③ Fe^{2+} 的价电子排布式是 $3d^6$， Fe^{2+} 与两个 $C_5H_5^-$ 离子形成配位键后，使 Fe^{2+} 的 3d、4s、4p 能级中共具有 18 电子的稳定结构，则 3d、4s、4p 能级均填满电子，所以 $C_5H_5^-$ 提供了 12 个电子，即 6 对电子对，所以配位键的数目为 6 个；

【小问 3 详解】

①当将晶胞中体心的 Ga 原子作为晶胞的一个顶点时，整个晶胞中原子的坐标均移动 1/2 个单位，距该 Ga 原子最近的 Ga 原子在新晶胞中位置为面的中心，即面心的位置；

②1 号 Mn 原子坐标参数为 $(1,1,1)$，则原点为左下靠后的 Mn 原子，则填充在 1、2、3、4 号 Mn 构成的四面体空隙中心的镍原子的坐标参数为 $\left(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right)$；填充镍后的晶胞中 Ni 的个数为：8 个，Mn 的个数为：8×1/8+6×1/2=4 个，Ga 的个数为：12×1/4+1=4 个，晶胞的密度 $\rho=\frac{n\times M}{V\times N_A}=\frac{4\times 243}{(a\times 10^{-7})^3\times N_A}\ g\cdot cm^{-3}=\frac{972}{(a\times 10^{-7})^3 N_A}\ g\cdot cm^{-3}$。

11．（2024 泰安三模，17）

【答案】

（6） ①．棱心或体心 ②． $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$或$\left(\frac{1}{2},\ 0,\frac{1}{2}\right)$或$\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$

【解析】

晶胞为对称结构，则图 1 中 M 点在晶胞中的位置为面心或棱心或体心；若 M 点在面心位置，则其原子坐标参数为 $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$或$\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$或$\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$。

12．（2025 日照一模，16）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：

【答案】

(3) $(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$ $\frac{\sqrt{2}}{2}a$ A

【详解】

结合晶胞结构，A 点的原子分数坐标为(0，0，0)，B 点原子分数坐标为$(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$；相邻 ● 之间的最短距离等于面对角线的一半，即为：$\frac{\sqrt{2}}{2}a$ pm；该晶胞沿体对角线方向的投影，对角线上的黑球投影为体心，其余黑球投影为正六边形的顶点，灰球投影到六边形的对角线的四等分点，则投影图为 A。

13．（2025 潍坊二模，8）某晶体结构如图所示，下列说法错误的是

【解析】

C．由题干晶胞示意图可知，标号为“1”的 Y 的原子在 x 轴方向的原点，位于 y 轴方向棱的$\frac{1}{2}$处，位于 z 轴方向棱

的$\frac{1}{4}$处，则其分数坐标为(0，$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{4}$)，C 正确。

14．（2025 聊城三模，6）铜的一种化合物的晶胞如图所示，晶胞的边长为 xpm，N_A 为阿伏加德罗常数的值，铜原子 b 的分数坐标为$\left(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right)$，下列说法错误的是

【解析】

A．铜原子 b 的分数坐标为$\left(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right)$，根据分数坐标定义，晶胞中对称位置的原子坐标应满足各分量互补（1-坐标值），则 a 的坐标为$\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)$，故 A 正确。

15．（2024 临沂一模，16）

【答案】（3）　①. 4　②. ($\frac{3}{4}$，$\frac{3}{4}$，$\frac{7}{8}$)　③. $\frac{7.36\times10^{32}}{a^2bN_A}$

【解析】观察晶胞可知，与单个 Fe 键合的 S 有 4 个，原子 1 的分数坐标为($\frac{3}{4}$，$\frac{1}{4}$，$\frac{1}{8}$)，则原子 2 的分数坐标为($\frac{3}{4}$，$\frac{3}{4}$，$\frac{7}{8}$)。晶胞中 Cu 的个数为$8\times\frac{1}{8}+4\times\frac{1}{2}+1=4$，晶胞中 Fe 的个数为$4\times\frac{1}{4}+6\times\frac{1}{2}=4$，晶胞中 S 的个数为 8 个。故晶胞密度$\rho=\frac{4\times(64+56+32\times2)}{N_A(a^2b)\times(10^{-10})^3}g\cdot cm^{-3}=\frac{7.36\times10^{32}}{a^2bN_A}g\cdot cm^{-3}$。

16．（2024 潍坊二模，16）氮族元素可以形成多种多样的化合物，回答下列问题：

【答案】（5）　①. 4　②. $(0.75,0.75,0.8)$　③. $\frac{4\times316\times10^{30}}{a^2\cdot c\cdot N_A}$.

【解析】

以上顶面中心的 Cu 为例，与其距离最近的砷原子位于其下方的两个和上方晶胞底部的两个，因此铜周围距离最近的砷原子的个数为 4。已知 m 原子的坐标为(0.75，0.25，0.20)，N 原子位于晶胞上方靠前的位置，坐标为(0.75，0.75，0.8)。该晶胞中含有 Cu 个数为$\frac{1}{4}\times8+\frac{1}{2}\times4$=4，Fe 个数为$\frac{1}{8}\times8+\frac{1}{4}\times4+\frac{1}{2}\times2+1$=4，As 个数为 8，Na 个数为 8，则其密度为$\frac{4\times316}{N_Aa^2c\times10^{-30}}$g/cm³=$\frac{4\times316\times10^{30}}{a^2\cdot c\cdot N_A}$g/cm³。

17．（2025 日照三模，16）C、Fe、N、Li 及其化合物在生产生活中有重要作用。

【答案】

（5）　①. ($\frac{7}{8}$，$\frac{5}{8}$，$\frac{7}{8}$)　②. 50%

【解析】

①B_1 中 M 原子分数坐标为(0，0，0)，A、B 单元的边长为 1，Q 在 A_3 的体对角线的$\frac{3}{4}$处，其在晶胞中 x、y、z 轴上投影坐标分别为$\frac{7}{8}$、$\frac{5}{8}$、$\frac{7}{8}$，因此 Q 原子分数坐标应为($\frac{7}{8}$，$\frac{5}{8}$，$\frac{7}{8}$)；

②由 A、B 两种正方体单元可知，离子型铁的氧化物晶胞中，顶点、面心和体内的 Fe^{2+}个数为：$4\times(4\times\frac{1}{8}+4\times\frac{1}{8}+1)=8$，位于体内的 Fe^{3+}个数为：$4\times4=16$，Fe^{2+}和 Fe^{3+}的总数为 8+16=24，位于体内的氧离子个数为：$4\times8=32$；嵌入或脱嵌在晶胞的棱心和体心的 Li^{+}，最大值为：$12\times\frac{1}{4}+1=4$。若该正极材料中 $n(Fe^{2+})$：$n(Fe^{3+})=5$：7，则其中含有 Fe^{2+}个数为：$24\times\frac{5}{12}=10$，Fe^{3+}的数目为：$24\times\frac{7}{12}=14$，设晶胞中含 y 个 Li^{+}，由化合物中各元素化合价代数和为零可知，$10\times2+14\times3+y=32\times2$，解得 y =2，则 1 个晶胞中脱嵌出 2 个 Li^{+}，含有 2 个 Li^{+}，故 Li^{+}的脱嵌率为 $\frac{2}{4}\times100\%=50\%$。

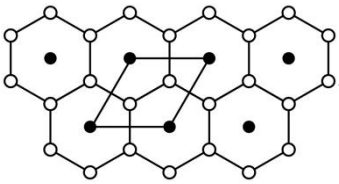
考点二、六方晶胞

1．（2025 日照二模，16）第 VA 族元素及其化合物在生产、生活和科研中应用广泛。回答下列问题：

【答案】（4）　①. 2　②. 6　③. $(\frac{1}{3},\frac{2}{3},0)$　④. $\frac{70\sqrt{3}}{3a^2bN_A}\times10^{30}$

【解析】

①由晶胞结构可知，氮化锂晶胞中位于棱上和面上的锂离子的化学环境不同，共有 2 种；由



可知，离氮离子距离最近的锂离子个数为 6，即氮离子的配位数为 6，故答案为：2；6；

②位于顶点的 A 点的原子分数坐标为(0，0，0)，则晶胞的边长为 1，位于面对角线上的 B 点的原子分数坐标为$(\frac{1}{3},\frac{2}{3},0)$；由晶胞结构可知，晶胞中位于顶点的氮离子个数为 $8\times\frac{1}{8}=1$，位于棱上和面上的锂离子个数为 $4\times\frac{1}{2}+4\times\frac{1}{4}=3$，设晶体的密度为 dg/cm^3，由晶胞的质量公式可得：$\frac{35}{N_A}=(10^{-10}a\times\frac{\sqrt{3}}{2}\times10^{-10}a\times10^{-10}b)d$，解得 $d=\frac{70\sqrt{3}}{3a^2bN_A}\times10^{30}$，故答案为：$(\frac{1}{3},\frac{2}{3},0)$；$\frac{70\sqrt{3}}{3a^2bN_A}\times10^{30}$。

2．（2025 烟台德州东营一模，16）氮元素被称为“生命元素”，不仅是蛋白质的重要组成元素，还在医药、化工、农业生产等领域应用广泛。回答下列问题：

【答案】

（4）　①. Li_2CoN　②. $(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{2})$　③. 12

【解析】

根据均摊法可知，晶胞中含有 2 个 Li，$2\times\frac{1}{6}+2\times\frac{1}{3}=1$ 个 Co，$4\times\frac{1}{12}+4\times\frac{1}{6}=1$ 个 N，故化学式为 Li_2CoN；

若 A 点原子的分数坐标为(1，0，0)， B 点在对角线的三分之二处，根据坐标可知，则 B 点原子的分数坐标为$(\frac{1}{3},$

$\frac{2}{3}$，$\frac{1}{2}$)；

以钝角顶点的 N 原子为研究对象，其周围最近的 2 个 Li 原子位于晶胞内部，钝角顶点的 N 原子被 6 个晶胞共用，故 1 个 N 原子周围距离相等且最近的 Li 原子数目为 12。

3．（2025 河北，11）$SmCo_k(k>1)$是一种具有优异磁性能的稀土永磁材料，在航空航天等领域中获得重要应用。$SmCo_k$ 的六方晶胞示意图如下，晶胞参数 $a=500pm$、$c=400pm$，M、N 原子的分数坐标分别为$\left(\frac{5}{6},\frac{1}{6},\frac{1}{2}\right)$、$\left(\frac{1}{6},\frac{5}{6},\frac{1}{2}\right)$。设 N_A 是阿伏加德罗常数的值。

【解析】体心原子位于晶跑的中心，其分数坐标为$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$，B 正确；

4．（2024 威海二模，16）金属镍及其化合物在工业、科研等领域应用广泛。回答下列问题：

【答案】

（4）　①. $(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{3}{4})$　②. $\sqrt{\frac{3a^2}{4}+\frac{b^2}{4}}$

【解析】

A、B 在底面的投影分别在底面菱形分成的两个正三角形中心，A 点原子的分数坐标为$(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{4})$，根据对称性，A 到下底面距离和 B 到上底面距离相等，故 B 点原子的分数坐标为$(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{3}{4})$，底面菱形边长为 a pm，较长对角线长为$\sqrt{3}$a pm，AB 水平方向距离为$\frac{\sqrt{3}}{2}$a pm，AB 竖直距离为晶胞高度一半，为$\frac{b}{2}$ pm，根据勾股定理，A、B 两点间距离为$\sqrt{\frac{3a^2}{4}+\frac{b^2}{4}}$ pm。

5．（2024 淄博一模，16）

【答案】$\left(\frac{2}{3},\frac{1}{3},1\right)$

【解析】B 点在三角形中心，则 Li 原子的分数坐标为$\left(\frac{2}{3},\frac{1}{3},1\right)$；六方最密堆积配位数为 12，故 1 个 N 原子周围距离相等且最近的 Li 原子数目为 12。

6．（2024 日照三模，16）铁、碳可形成许多结构和性质特殊的物质。回答下列问题：

【答案】（5）　①. $\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{2}\right)$　②. $\frac{4\times12}{N_A\times142\sqrt{3}\times\frac{\sqrt{3}}{2}\times142\sqrt{3}\times2\times334.8\times10^{-30}}$

【解析】

晶胞内 N 点碳的原子坐标，从 Z 轴投影，可知 N 位于面对角线的 1/3 处，再分别沿 x，y 轴投影，又由图可以看出在 Z 轴的一半处，所以坐标可表示$\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{2}\right)$，由图可知晶胞长宽一样，底面是一个平行四边形，根据勾股定理得

到 $\frac{晶胞长}{键长}=\frac{2}{\frac{\sqrt{3}}{2}}$，晶胞长=$142\sqrt{3}$ pm，$\frac{晶胞高}{晶胞长}=\frac{\sqrt{3}}{2}$，得晶胞高=$142\sqrt{3}\times\frac{\sqrt{3}}{2}$ pm，底面面积

=$142\sqrt{3}\times\frac{\sqrt{3}}{2}\times142\sqrt{3}$ pm²，晶胞体积为$142\sqrt{3}\times\frac{\sqrt{3}}{2}\times142\sqrt{3}\times2\times334.8\,pm^3$，一个晶胞有 4 个 C（上下面：

$4\times\frac{1}{6}+4\times\frac{1}{12}+2\times\frac{1}{2}$，中心 1，棱上$2\times\frac{1}{6}+2\times\frac{1}{3}$），每个晶胞的

$\rho=\frac{m}{V}=\frac{\frac{4\times12}{NA}}{142\sqrt{3}\times\frac{\sqrt{3}}{2}\times142\sqrt{3}\times2\times334.8\times10^{-30}}=\frac{4\times12}{N_A\times142\sqrt{3}\times\frac{\sqrt{3}}{2}\times142\sqrt{3}\times2\times334.8\times10^{-30}}g\cdot cm^{-3}$，答案：

$\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{2}\right)$、$\frac{4\times12}{N_A\times142\sqrt{3}\times\frac{\sqrt{3}}{2}\times142\sqrt{3}\times2\times334.8\times10^{-30}}$。

考点三、坐标与距离换算

1．（2025 淄博一模，16）氨及其化合物应用广泛。回答下列问题：

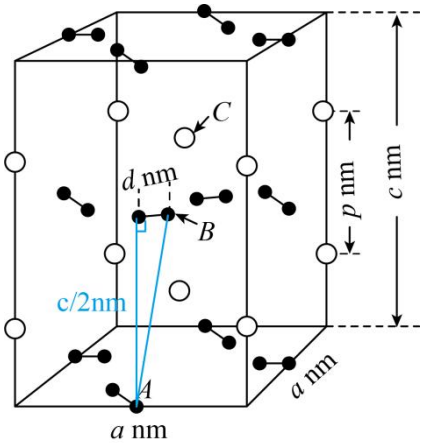
【答案】

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

【解析】

一个化合物 X 的晶胞中，含有 Ag 的个数为$8\times\frac{1}{4}+2=4$，N 的个数为$8\times\frac{1}{4}+12\times\frac{1}{2}+4=12$，所以其化学式为$AgN_3$；

对比 A 点原子的分数坐标，可知 C 点原子的分数坐标为$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{c+p}{2c}\right)$；如图所示，



，

所以晶胞中 A 、B 间距离为$\sqrt{d^2+\left(\frac{c}{2}\right)^2}$。

2．（2025 济南二模，16）含氨配合物在生产、检测、医药中发挥着重要作用。回答下列问题：

【答案】

（2）　①. $[Fe(NH_3)_2Cl_2]$　②. 混合型晶体　③. 6　④. $(0,\frac{a-x}{2a},\frac{1}{2})$

【解析】

某铁氨配合物的晶胞中，Fe^{2+}位于棱上，含Fe^{2+}离子数目为$8\times\frac{1}{4}$=2；有 4 个Cl^-位于面上，2 个Cl^-位于体内，含Cl^-的数目为$4\times\frac{1}{2}+2$=4；8 个NH_3分子位于棱上，4 个NH_3分子位于面上，含NH_3分子数目为$8\times\frac{1}{4}+4\times\frac{1}{2}$=4，该晶胞中，$Fe^{2+}$、$Cl^-$、$NH_3$的个数比为 2:4:4=1:2:2，则晶体的化学式为$[Fe(NH_3)_2Cl_2]$；在晶体中，微粒间存在共价键和氢键，则晶体类型为：混合型晶体；我们设定棱上的亚铁离子为研究对象，每个亚铁离子与 4 个Cl^-和 2 个NH_3分子形成配位键，则铁元素的配位数为 6。原子分数坐标可用于表示晶胞内部各原子的相对位置，A 原子分数坐标为(0，$\frac{1}{2}$，0)，桥连相同两个铁原子的两个氯原子间距离为 xpm，则 B 原子在侧面上，离 Z 轴的垂直距离为$\frac{a-x}{2}$pm，离 Y 轴的垂直距离为$\frac{1}{2}$c pm，所以 B 原子的分数坐标为$(0,\frac{a-x}{2a},\frac{1}{2})$。

3．（2024 淄博三模，16）

【答案】

（3）　①. $\sqrt{\left(\frac{\sqrt{3}}{3}a\right)^2+(c-2cd)^2}$　②. $\frac{192\sqrt{3}}{a^2cN_A}\times10^{30}$

【解析】

D、E 之间的高度差为：[d-(1-d)]cpm，由于$\alpha=120°$，D、E 水平面间的距离为$2\times\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\times\left(\frac{2}{3}-\frac{1}{3}\right)\right)apm=\frac{\sqrt{3}}{2}apm$，D、E 间距离为$\sqrt{\left(\frac{\sqrt{3}}{3}a\right)^2+(c-2cd)^2}$ pm；F：$8\times\frac{1}{8}+2=3$，Be：$8\times\frac{1}{4}+4=6$，B：$4\times\frac{1}{4}+2=3$，发生非氧化还原反应可知各元素化合价不变，可知 O 的个数为 9，化学式为Be_2BO_3F，故设阿伏加德罗常数的值为N_A，1pm=10^{-10}cm，根据$\rho=\frac{m}{V}=\frac{\frac{nM}{N_A}}{V}=\frac{3\times96g/mol}{\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c\times10^{-30}\right)cm^{-3}N_A}$，该晶体的密度为$\frac{192\sqrt{3}}{a^2cN_A}\times10^{30}\ g\cdot cm^{-3}$。

——

4．（2025 淄博三模，16）铜、金可形成许多结构与性质特殊的化合物。回答下列问题：

【答案】

（3）　①. $[AuCl_2]^-$、$[AuCl_4]^-$　②. $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{n+0.5m}{m+n})$

【解析】

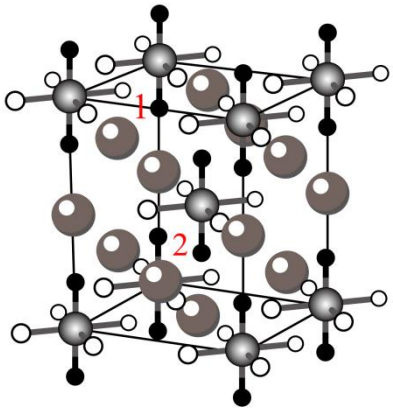
①因为 m<a<n 所以距离点 2（Au）的最近的Cl^- 有：上面的面心和中间体内的Cl^-，故点 2（Au）的配离子化学式为$[AuCl_2]^-$；距离点 2（Au）的最近的Cl^- 有：下面六面体的前后左右四个面的面心位置的Cl^-，故点 3（Au）的配离子化学式为$[AuCl_4]^-$；

②分数坐标是指 x、y、z 三个方向上的距离分别占晶胞长宽高的比例，如图所示，晶胞内部点 2 位于上面立方体的体心位置，以原子 1 为原点建立坐标系，小白球位于上部分的体心，高为 m+n，则小白球的分数坐标为：

$(0.5,0.5,\frac{n+0.5m}{m+n})$。

5．（2024 济宁三模，9）Ta_2O_5 和 KHF_2 按计量比混合，一定条件下，获得晶体产物的晶胞结构如图所示，晶胞参数 $a=b\neq c$ nm，$\alpha=\beta=\gamma=90°$，Ta—O 键键长为 xnm。下列说法错误的是

【解析】

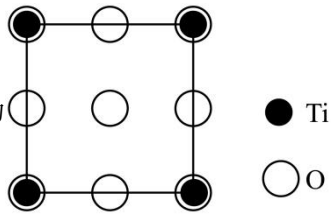
B． Ta—O 键键长为 xnm，O 原子位于棱上和体心，如图所示， 

O 原子 1 号分数坐标 $\left(0,0,\frac{c-x}{c}\right)$，O 原子 2 号分数坐标 $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{c-2x}{2c}\right)$，B 正确。

6．（2025 济宁三模，16）镁离子电池是具有大规模储能应用潜力的电池体系。

【答案】（4） ①. $\frac{3.2\times10^{23}}{d^2cNA}$ ②. $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{c-a}{c}\right)$或$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},1-\frac{a}{c}\right)$

【解析】

由图可知，沿 z 轴方向的投影图为 

，则经均摊可知，每个晶胞有 $8\times\frac{1}{8}+4\times\frac{1}{2}+1=4$ 个 Ti，$8\times\frac{1}{4}+8\times\frac{1}{2}+2=8$ 个 O，所以密度 $\rho=\frac{m}{V}=\frac{(4\times48+8\times16)}{d^2cN_A\times10^{-21}}=\frac{3.2\times10^{23}}{d^2cN_A}$；B 点 Z 轴分数坐标为 $\frac{c-a}{c}$，故 B 点原子的分数坐标为$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{c-a}{c}\right)$或$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},1-\frac{a}{c}\right)$。

7．（2025 滨州二模，16）氮形成的一系列化合物广泛应用于科研、医疗、化工等领域。回答下列问题：

【答案】

（4） ①. $(1,\frac{1}{2},\frac{b-p}{b})$ ②. $\frac{108}{a^2b\cdot N_A}\times10^{21}$

【解析】

图中 m 处 Li^+ 的分数坐标为$\left(\frac{1}{2},0,\frac{p}{b}\right)$(p nm 为 m 处 Li^+ 到底面的垂直距离)，由晶胞结构可知 n 处 Li^+ 的分数坐标为$\left(1,\frac{1}{2},\frac{b-p}{b}\right)$，$CN_2^{2-}$ 的个数为 $8\times\frac{1}{8}+1=2$，Li^+的个数为 $8\times\frac{1}{2}=4$，设 N_A 表示阿伏加德罗常数的值，该晶体的密度

$\rho=\frac{4\times7+40\times2}{a^2b\cdot N_A}\times10^{21}g\cdot cm^{-3}=\frac{108}{a^2b\cdot N_A}\times10^{21}g\cdot cm^{-3}$。

考点四、原子坐标种类

1．（2024 潍坊一模，16）硼族元素可形成许多结构和性质特殊的化合物。回答下列问题：

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

【解析】

用原子分数坐标来描述晶胞中所有●原子的位置，需要确定 0 点、顶点(两种)、面上、面心、体内 6 组原子分数坐标，晶体中有 3 种化学环境的●原子。

——

2．（2024 菏泽一模，16）短周期元素可形成许多结构和性质不同的化合物，回答下列问题：

【答案】（5）①. $\left(0,\frac{1}{2},0\right)$、$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$　②. $\sqrt[3]{\frac{200}{\rho N_A}}\times10^{10}$

【解析】由于将 He 取在晶胞顶点，位于顶点电子对$\left(2e^-\right)$在晶胞中的分数坐标为$\left(\frac{1}{2},0,0\right)$、$\left(0,0,\frac{1}{2}\right)$，观察结构不难得出除此之外还有$\left(0,\frac{1}{2},0\right)$，那么位于体心电子对$\left(2e^-\right)$在晶胞中的分数坐标为$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$；每个小立方体中有 $8\times\frac{1}{8}=1$ 个钠离子，电子对($2e^-$)和氦原子交替分布填充在立方体的中心，所以该晶体的晶胞应是由 8 个小立方体形成的大立方体，其中有一半小立方体中有 He 原子，一半有电子对，所以晶胞中有 8 个钠离子、4 个 He 原子，则晶胞的质量为$\frac{23\times8+4\times4}{N_A}g=\frac{200}{N_A}g$，已知晶体的密度为$\rho g\cdot cm^{-3}$，阿伏加德罗常数的值为$N_A$，晶胞边长为 apm，所以体积为 $a^3pm^3=a^3\times10^{-30}cm^3$，则密度为$\rho=\frac{200}{a^3\times N_A\times10^{-30}}$，可得 $a=\sqrt[3]{\frac{200}{\rho N_A}}\times10^{10}$，故答案为：$\left(0,\frac{1}{2},0\right)$、$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$；$\sqrt[3]{\frac{200}{\rho N_A}}\times10^{10}$。