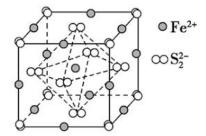
## 【选必二 晶体】【考点精华】晶体密度计算题型(重要)

【2018全国II卷】 $FeS_2$ 晶体的晶胞如图所示。晶胞边长为a nm、 $FeS_2$ 相对式量为M,阿伏加德罗常数的值为 $N_A$ ,其晶体密度的计算表达式为

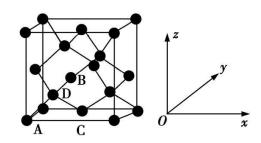


【2016 全国 I 卷】晶胞有两个基本要素:

 $g \cdot cm^{-3}$ ;

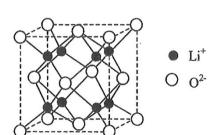
原子坐标参数,表示晶胞内部各原子的相对位置。如图为 Ge 单晶的晶胞,其中原子坐标参数

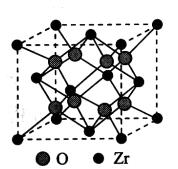
A 为(0, 0, 0); B 为( $\frac{1}{2}$ , 0,  $\frac{1}{2}$ ); C 为( $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$ , 0)。则 D 原子的坐标参数为\_\_\_\_\_。



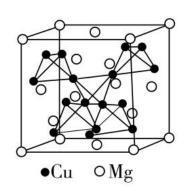
晶胞参数,描述晶胞的大小和形状。已知 Ge 单晶的晶胞参数  $a=565.76 \, \mathrm{pm}$ ,其密度为\_\_\_\_\_g·cm<sup>-3</sup>(列出计算式即可)(Ge=73)。

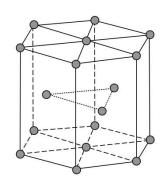
【2018 全国I卷】 $Li_2O$  具有反萤石结构,晶胞如图所示。已知晶胞参数为 0.4665 nm,阿伏加德罗常数的值为  $N_A$ ,则  $Li_2O$  的密度为 \_\_\_\_\_\_g·cm<sup>-3</sup> (列出计算式)。



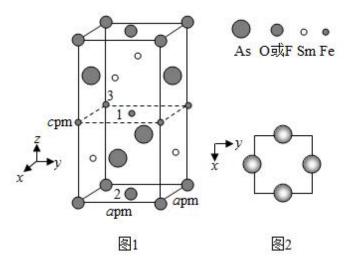


【2019全国I卷】图是MgCu2 的拉维斯结构,Mg以金刚石方式堆积, 八面体空隙和半数的四面体空隙中,填入以四面体方式排列的Cu。 设阿伏加德罗常数的值为NA,则MgCu2 的密度是\_\_\_\_\_\_\_g·cm<sup>-3</sup> (列出计算表达式)。

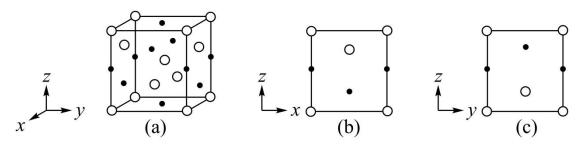




【2019 全国 2 卷】一种四方结构的超导化合物的晶胞结构如图 1 所示,晶胞中 Sm 和 As 原子的投影位置如图 2 所示。



图中  $F^-$ 和  $O^2$ -共同占据晶胞的上下底面位置,若两者的比例依次用 x 和 1-x 代表,则该化合物的化学式表示为\_\_\_\_\_\_\_,通过测定密度 $\rho$ 和晶胞参数,可以计算该物质的 x 值,完成它们关系表达式:  $\rho$ = g·cm $^{-3}$ 。(O=16、F=19、Fe=56、As=75、Sm=150)



【2021 广东新高考】理论计算预测,由汞(Hg)、锗(Ge)、锑(Sb)形成的一种新物质 X 为潜在的拓扑绝缘体材料。X 的晶体可视为 Ge 晶体(晶胞如图 a 所示)中部分 Ge 原子被 Hg 和 Sb 取代后形成。

- 1. 图 c 为 X 的晶胞, X 的晶体中与 Hg 距离最近的 Sb 的数目为\_\_\_\_\_\_; 该晶胞中粒子个数比 Hg: Ge: Sb \_\_\_\_\_\_
- 2. 设 X 的最简式的式量为 M<sub>r</sub>,则 X 晶体的密度为\_\_\_\_\_\_g/cm<sup>3</sup>(列出算式)。

