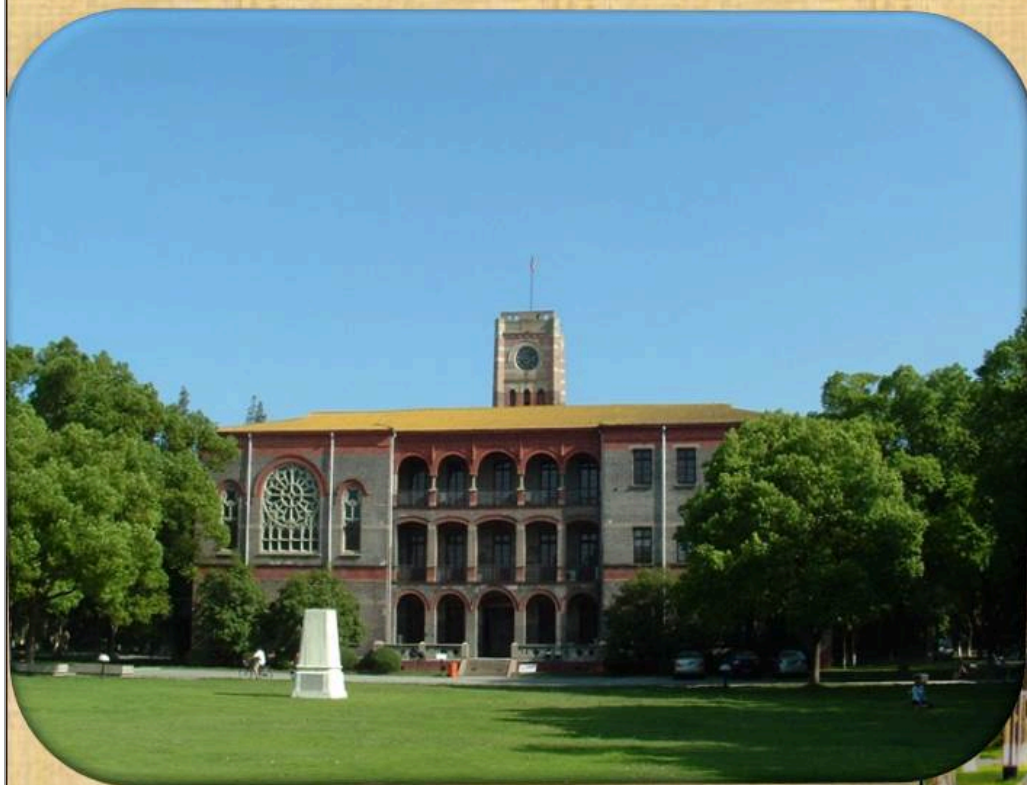




结构化学

结构化学学习题参考答案



2025/6/18





1. 与 a 轴垂直的晶面，其晶面指标是：

- (A) (010) (B) (200) (C) (100)

2. 晶体只可能属于多少种点群之一：

- (A) 3 (B) 8 (C) 32

3. 晶面指标中 k 等于0的晶面平行于：

- (A) a (B) b (C) c

4. 某晶面与晶轴 x 、 y 、 z 的截数分别为4、2、1，其晶面指标为：

- (A) (124) (B) (421) (C) $(1/4, 1/2, 1)$

2025/6/18

2



5. 单质Na (A2型) 中原子的配位数是:

(A) 3

(B) 12

(C) 8

6. A3型金属单质的晶胞是:

(A) 六方晶胞

(B) 立方晶胞

(C) 正交晶胞

7. Ge晶体 (A4) 的空间利用率小于W晶体 (A2), 关于晶胞中的原子数目说法正确的是:

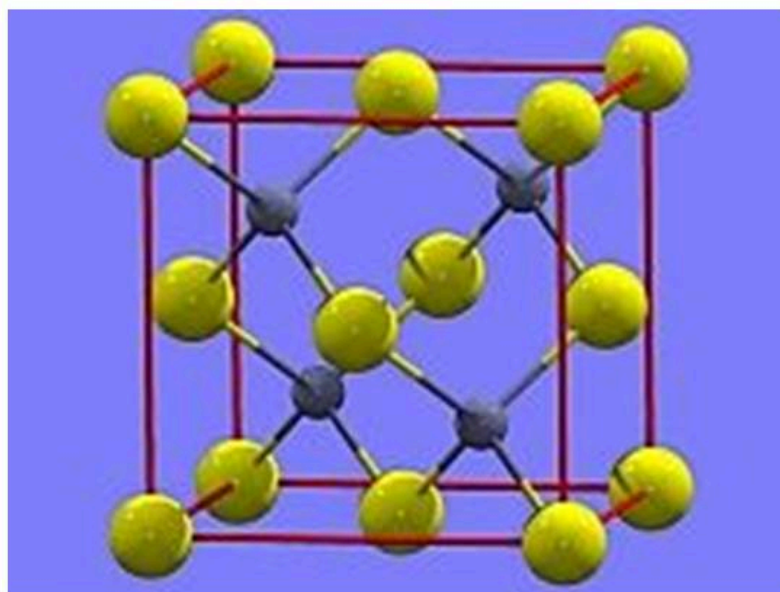
(A) Ge晶体少于W晶体

(B) Ge晶体多于W晶体

(C) 两者相等



二. 下图所示为立方ZnS晶体的晶胞结构，设大球代表S，小球代表Zn。请指出该晶胞的晶胞类型，计算所含的 Zn^{2+} 和 S^{2-} 数目，并写出对应的分数坐标。

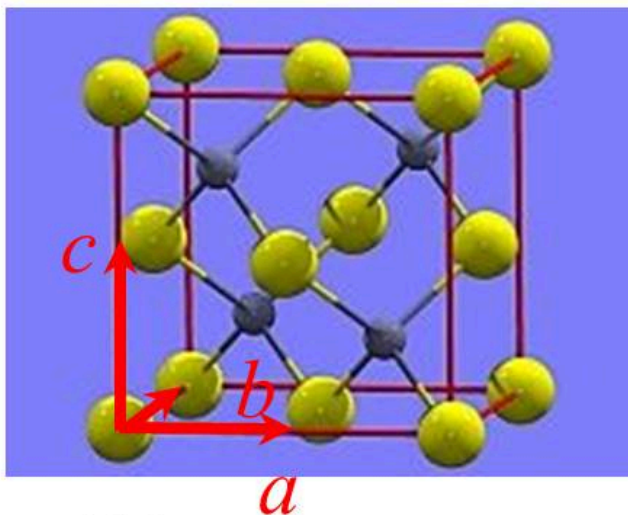


2025/6/18

4



解：选S原子作为点阵点，面心立方晶胞



含 S^{2-} 数（顶点和面心）：

$$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

含 Zn^{+} 数（体内）：4个

顶点：1个 $(0,0,0)$

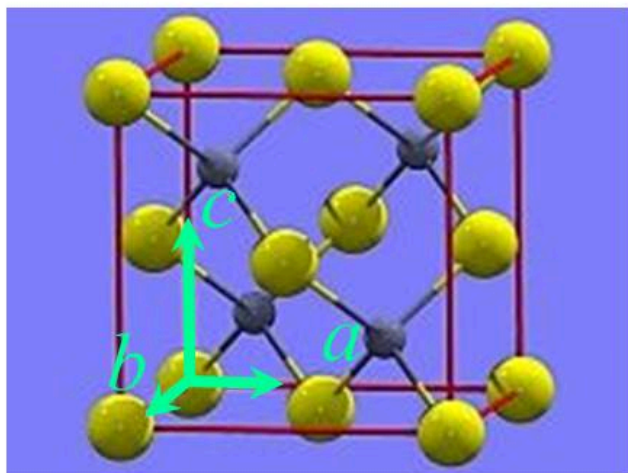
面心：3个 $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$

体内（阴影原子球）：4个

$(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$



(另一种坐标系选法:)



顶点: 1个 $(0,0,0)$

面心: 3个

$(0,1/2,1/2)$ $(1/2, 0,1/2)$ $(1/2,1/2, 0)$

体内 (阴影原子球): 4个

$(3/4,1/4,1/4)$ $(1/4,3/4,1/4)$

$(1/4,1/4,3/4)$ $(3/4,3/4,3/4)$