



## 结构化学

# 结构化学习题参考答案



2025/6/18





## 结构化学

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



## 结构化学

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:

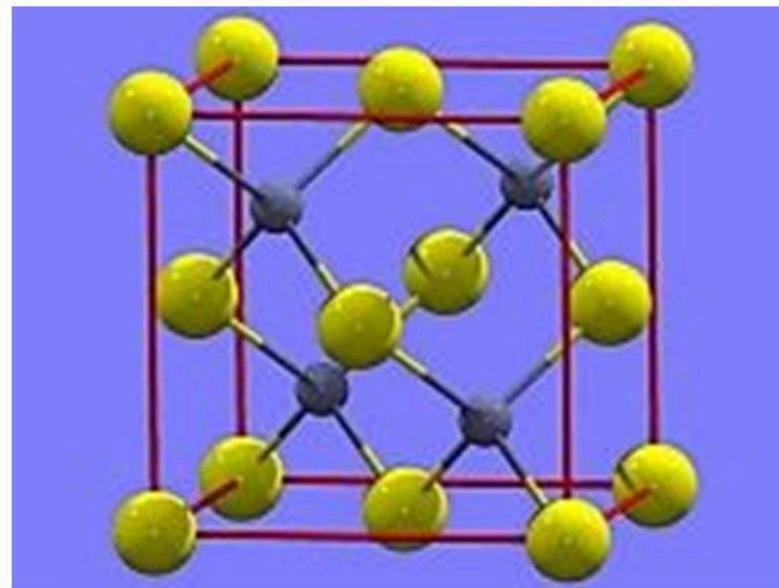
(A) Ge晶体少于W晶体

(B) Ge晶体多于W晶体

(C) 两者相等

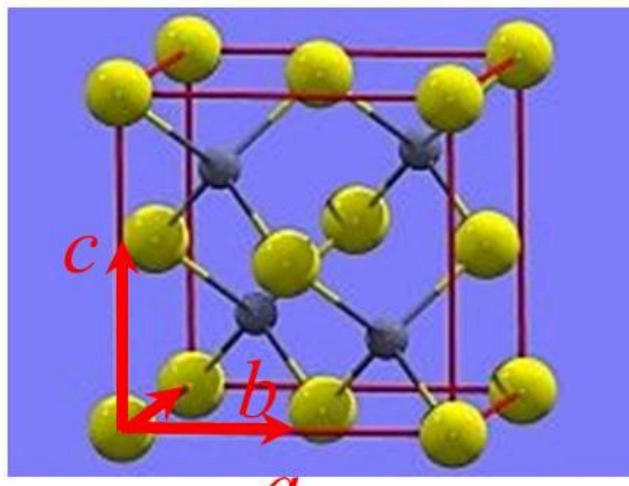


二. 下图所示为立方ZnS晶体的晶胞结构，设大球代表S，小球代表Zn。请指出该晶胞的晶胞类型，计算所含的 $Zn^{2+}$ 和 $S^{2-}$ 数目，并写出对应的分数坐标。





解：选S原子作为点阵点，面心立方晶胞



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

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

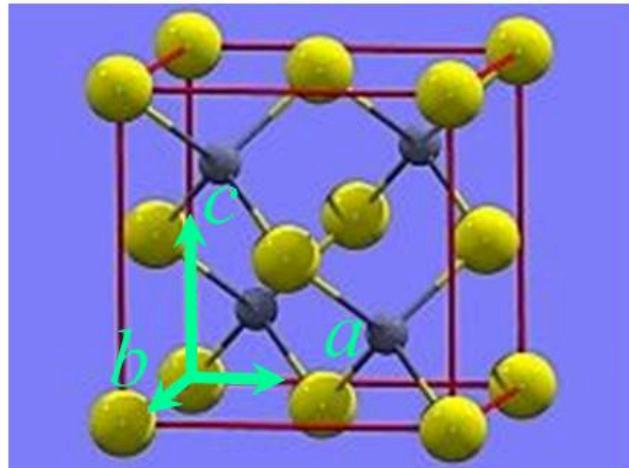
含  $S^{2-}$  数（顶点和面心）：

$$8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$$

含  $Zn^+$  数（体内）：4个



(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

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

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