

## 读书笔记部分略

### 画图部分略

#### 1. 1、

**解：**实验表明，很多元素的原子或离子都具有或接近于球形对称结构。因此，可以把这些原子或离子构成的晶体看作是很多刚性球紧密堆积而成。这样，一个单原子的晶体原胞就可以看作是相同的小球按点阵排列堆积起来的。它的空间利用率就是这个晶体原胞所包含的点的数目 $n$ 和小球体积 $V$ 所得到的总体积 $nV$ 与晶体原胞体积 $V_c$ 之比，即：晶体原胞的空间利

$$\text{用率, } x = \frac{nV}{V_c}$$

(1) 对于简立方结构：(见教材P2图1-1)

$$a=2r, \quad V=\frac{4}{3}\pi r^3, \quad V_c=a^3, \quad n=1$$

$$\therefore x = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{8r^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

$$(2) \text{ 对于体心立方：晶胞的体对角线 } BG = \sqrt{3}a = 4r \Rightarrow a = \frac{4\sqrt{3}}{3}r$$

$$n=2, \quad V_c=a^3$$

$$\therefore x = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4\sqrt{3}}{3}r\right)^3} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0.68$$

$$(3) \text{ 对于面心立方：晶胞面对角线 } BC = \sqrt{2}a = 4r, \Rightarrow a = 2\sqrt{2}r$$

$$n=4, \quad V_c=a^3$$

$$x = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{(2\sqrt{2}r)^3} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi \approx 0.74$$

$$(4) \text{ 对于六角密排：} a=2r \text{ 晶胞面积：} S=6 \times S_{\triangle ABO} = 6 \times \frac{a \times a \sin 60}{2} = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2$$

$$\text{晶胞的体积：} V=S \times C = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2 \times \sqrt{\frac{8}{3}}a = 3\sqrt{2}a^3 = 24\sqrt{2}r^3$$

$$n=12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6 \text{ 个}$$

$$x = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{24\sqrt{2}r^3} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi \approx 0.74$$

$$(5) \text{ 对于金刚石结构，晶胞的体对角线 } BG = \sqrt{3}a = 4 \times 2r \Rightarrow a = \frac{8r}{\sqrt{3}} \quad n=8, \quad V_c=a^3$$

$$x = \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\frac{8^3}{3\sqrt{3}} r^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{6} \approx 0.34$$

1.3、证明：面心立方的倒格子是体心立方；体心立方的倒格子是面心立方。

证明：（1）面心立方的正格子基矢（固体物理学原胞基矢）：

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j}) \end{cases}$$

由倒格子基矢的定义：  $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

$$\because \Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \begin{vmatrix} 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4}, \quad \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^2}{4}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

$$\therefore \vec{b}_1 = 2\pi \times \frac{4}{a^3} \times \frac{a^2}{4}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

同理可得：  $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$  即面心立方的倒格子基矢与体心立方的正格基矢相同。

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

所以，面心立方的倒格子是体心立方。

（2）体心立方的正格子基矢（固体物理学原胞基矢）：

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \end{cases}$$

由倒格子基矢的定义：  $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

$$\because \Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \begin{vmatrix} -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}, \quad \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} = \frac{a^2}{2}(\vec{j} + \vec{k})$$

$$\therefore \vec{b}_1 = 2\pi \times \frac{2}{a^3} \times \frac{a^2}{2}(\vec{j} + \vec{k}) = \frac{2\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{k})$$

同理可得：即体心立方的倒格子基矢与面心立方的正格基矢相同。

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$$

所以，体心立方的倒格子是面心立方。

### 1.7

解答：

晶格	最近邻数	次近邻数	单胞体积	原胞体积	最近邻距离	次近邻距离
体心立方	8	6	$a^3$	$a^3/2$	$\sqrt{3}a/2$	$a$
面心立方	12	6	$a^3$	$a^3/4$	$\sqrt{2}a/2$	$a$

### 3.

1) 1 个甲基胺离子，3 个碘离子，1 个铅离子，化学式：CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>

$$2) r_{\text{CH}_3\text{NH}_3} + r_{\text{I}} = \sqrt{2}(r_{\text{I}} + r_{\text{Pb}})$$

3) 注意一个原胞中有 5 个等价原子，设晶胞边长为  $a$ ，则有

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3| = a$$

布拉伐格子为  $\tau_\alpha + l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$ ， $\alpha=1,2,3,4,5$ ，其中

$$\vec{\alpha}_1=\mathbf{0}$$

$$\vec{\alpha}_2=\frac{\sqrt{3}}{2}(\vec{\mathbf{a}}_1+\vec{\mathbf{a}}_2+\vec{\mathbf{a}}_3)$$

$$\vec{\alpha}_3=\frac{1}{2}(\vec{\mathbf{a}}_1+\vec{\mathbf{a}}_2)$$

$$\vec{\alpha}_4=\frac{1}{2}(\vec{\mathbf{a}}_1+\vec{\mathbf{a}}_3)$$

$$\vec{\alpha}_5=\frac{1}{2}(\vec{\mathbf{a}}_2+\vec{\mathbf{a}}_3)$$