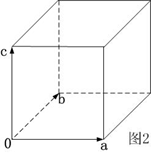
**第一章作业2答案**

1、以基矢量为坐标轴（以晶格常数a为度量单位，如图2），在闪锌矿结构的一个立方单胞中，写出各原子的坐标。



答：

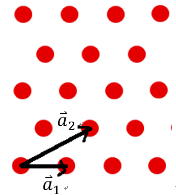
⑴八个顶点原子：（0，0，0）；（0，0，1）a；（0，1，0）a;（1，0，0）a；（1，1，0）a；（0，1，1）a；（1，0，1）a；（1，1，1）a

⑵六个面原子：（1/2，1/2，0）a；（0，1/2，1/2）a；（1/2，0，1/2）a；（1，1/2，1/2）a；（1/2，1/2，1）a；（1/2，1，1/2）a；

⑶四个体内原子（有两种）：

①、（1/4，1/4，1/4）a；（3/4，3/4，1/4）a；（3/4，1/4，3/4）a；（1/4，3/4，3/4）a

②、（1/4，1/4，3/4）a；（3/4，3/4，3/4）a；（1/4，3/4，1/4）a；（3/4，1/4，1/4）a

2、上面的晶格结构的原基矢量分别是：，，求倒基矢和倒原胞面积，画出4X4的倒格子。

答：的方向选择垂直向上，单位矢量k。

设，从而Ω=·（×）=

由倒基矢计算公式得== ==

倒原胞面积S=×=

倒格子如下：红色为，黑色为.

