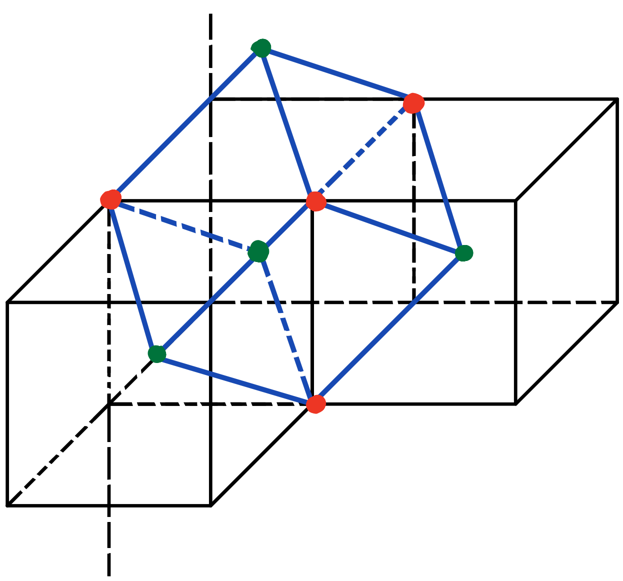
1. 晶胞：晶格中的重复单元，保留晶体的特征。

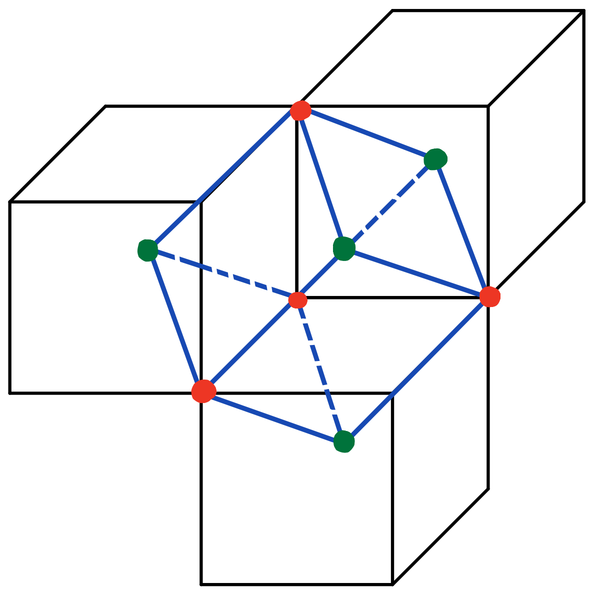
原胞：体积最小的晶胞，即最小的重复单元，含一个格点。

2. 体心立方原胞如下

角隅
体心



或



3. 在金刚石结构下，格点间距：

$$d = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

填充体积：

$$V = 8 \times \frac{4\pi}{3} \left(\frac{d}{2}\right)^3 = 0.3401\, a^3$$

致密度：

$$K = 0.34$$

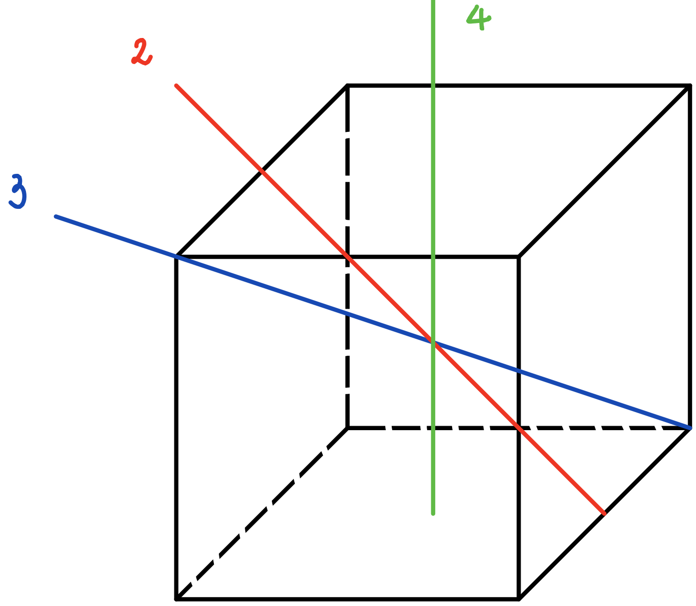
结构特点：面心立方，与每个格点联系的初基基元含两个金刚原子位于(000)和$(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$。

4 米勒指数：又叫晶面指数，为了描写一个平面，可以用它在基矢坐标下的截距。米勒指数是晶面在三个基矢坐标上截距的倒数的互质整数。

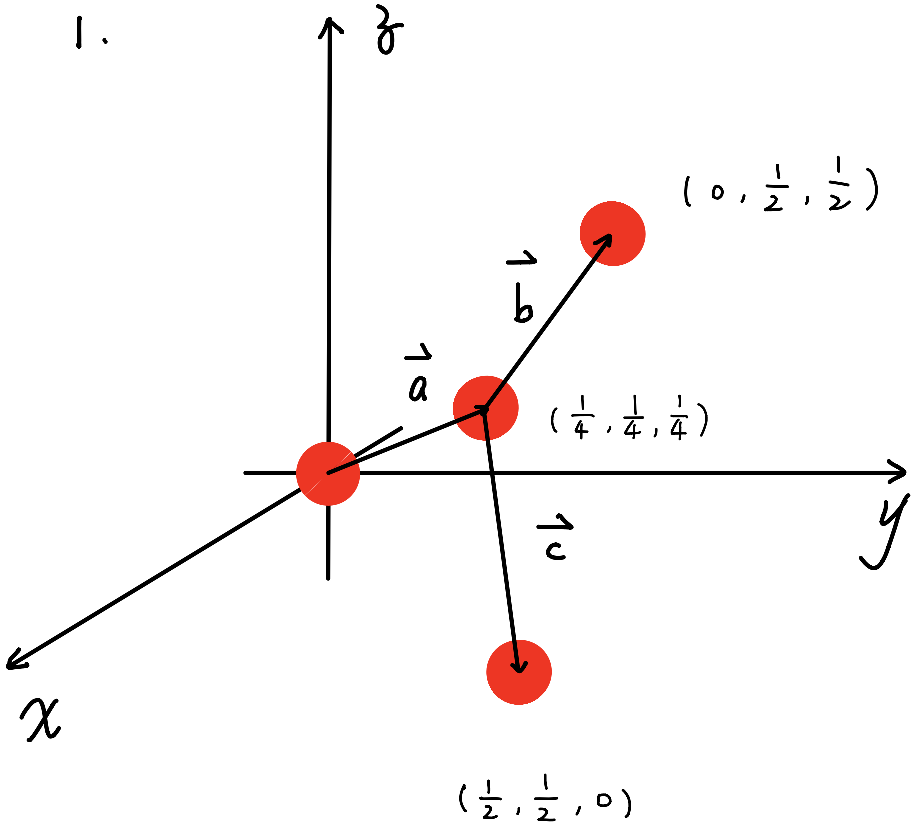
5 简单立方具有如下的旋转对称

$$\left.\begin{array}{lllll}
\text{不转：} & 1 & & & \\
\text{2度轴的旋转：} & 1\ (180^\circ) & \times 6 & = & 6 \\
\text{3度轴的旋转：} & 2\ \left(\begin{array}{c}60^\circ \\ 120^\circ\end{array}\right) & \times 4 & = & 8 \\
\text{4度轴的旋转：} & 3\ \left(\begin{array}{c}90^\circ, 180^\circ \\ 270^\circ\end{array}\right) & \times 3 & = & 9
\end{array}\right\} 24$$

(O群)


4
2
3

1.



四面体键中，只需证明两个相互套嵌的fcc上，角隅一角隅的键 $\vec{a}$ 面心一角隅的键 $\vec{b}$, $\vec{c}$ 间角都相等即可

$$\begin{cases} \vec{a} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ \vec{b} = (-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ \vec{c} = (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}) \end{cases}$$

$$\cos(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{|\vec{a}||\vec{b}|} = \frac{1}{3}$$

同理可计算得这些键角都是

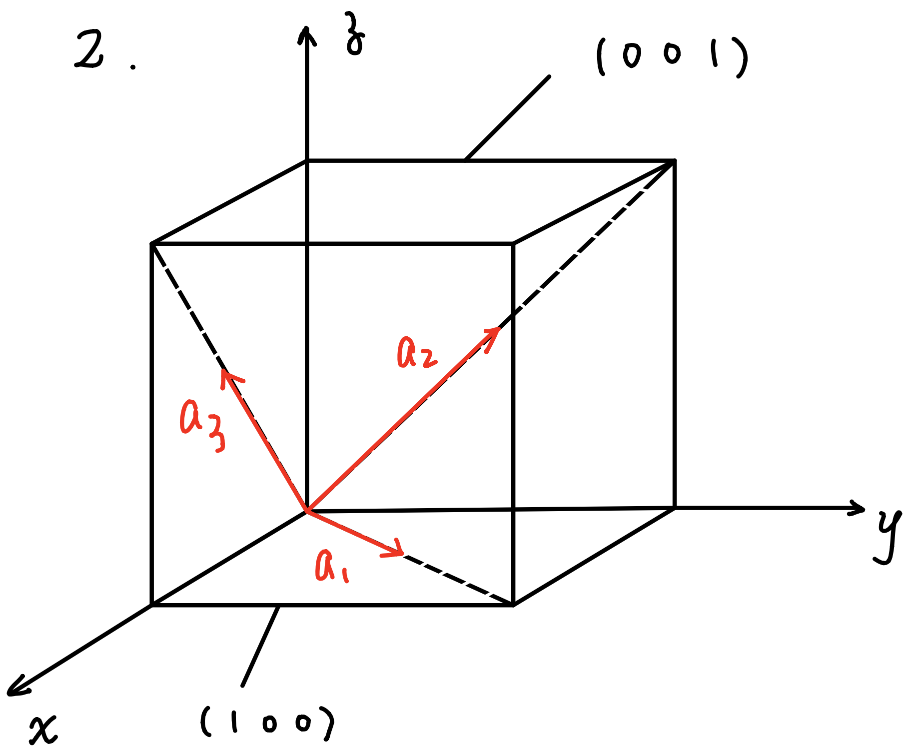
$$\theta = \cos^{-1}\left(\pm\frac{1}{3}\right) = 70°31' / 109°28'$$

而立方体立体对角线夹角（$\vec{a_1}, \vec{a_2}$ 为例）

$$\cos(\vec{a_1}, \vec{a_2}) = \frac{\vec{a_1}\cdot\vec{a_2}}{|\vec{a_1}||\vec{a_2}|} = \frac{-\frac{1}{4}a^2}{\frac{3}{4}a^2} = -\frac{1}{3}$$

这表明，这两夹角都是 $109°28'$

2.

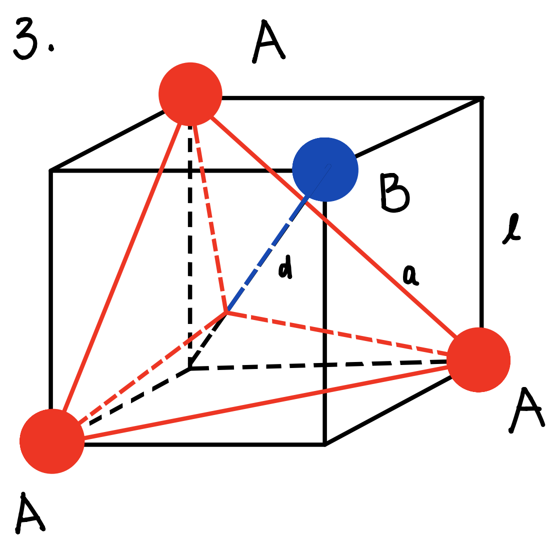


在新初基轴下，(1 0 0) 晶面截距是

2, 2, ∞ 则指数是 (1 1 0)

(001) 晶面截距是 ∞，2，2 ，则指数是 (011)

3.



右示立方体内 hcp 结构 A层与B层的关系

设立方体边长是 l，A之间距 a，B与A层间距是 d，利用简单的立体几何方法得：

$$\begin{cases} d = \frac{2}{\sqrt{3}} l \\ a = \sqrt{2}\, l \end{cases}$$

而上方A层与下方A层间距 c，得：

$$c = 2d = \frac{4}{\sqrt{3}} l$$

得：

$$c \quad = \left(\quad 8 \quad \right)^{1/2}$$

$$\frac{\quad}{a} = \left(\frac{\quad}{3} \right)$$