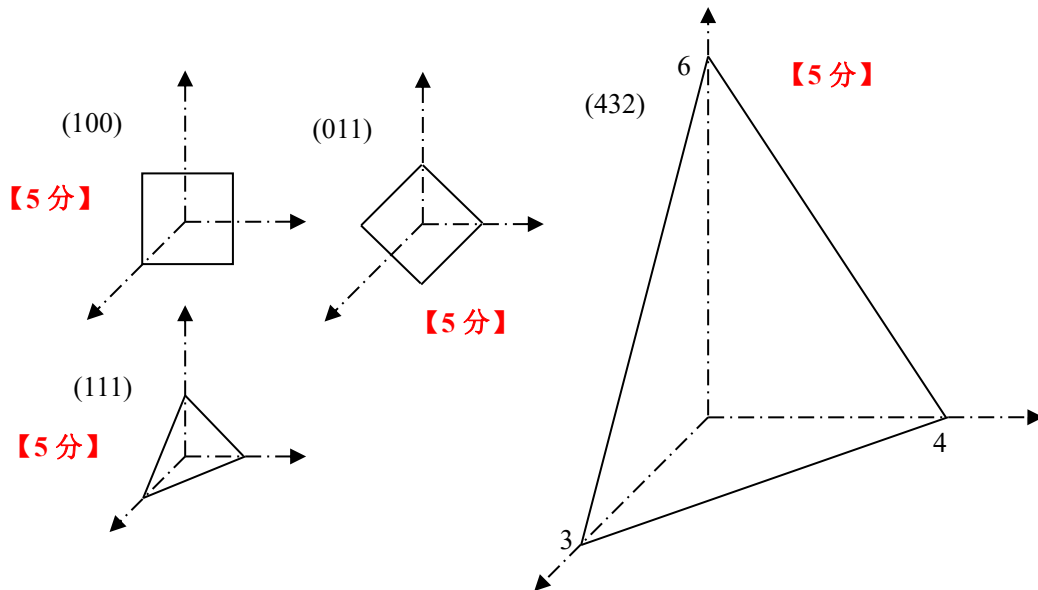


1.1 【7分】(a) 面心 4 个原子

【7分】(b) 体心 2 个原子

【6分】(c) 金刚石 8 个原子 (1/8 个角, 3/6 个面, 4/4 个内部)

1.6



1.10 【7分】(a) 最近的原子半径 1.34\AA , 所以最近距离 2.68\AA , 面心立方体边长为 $\sqrt{2} \times 2.68 = 3.79 \times 10^{-8} \text{cm}$

$$\frac{4}{(3.79 \times 10^{-8})^3} = 7.34 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$$

【7分】(b) 最近 (100) 面之距离为 2.68\AA

【6分】(c) (100 面内) $\frac{1}{4} \times 4 + 1 = 2$

$$\text{所以 } \frac{2}{(3.79 \times 10^{-8})^2} = 1.39 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$$

第一章补充题:

1、计算等径圆球做金刚石最密堆积的空隙率。【3 位有效数字】

解:

【2分】有效数字

【3分】金刚石结构的晶格常数为 a , 晶胞的体积为 a^3

【2分】对角线长度为 $3^{0.5}a$

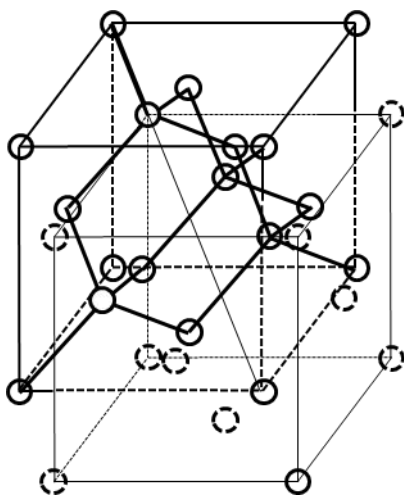
【3分】最小的 2 个等径圆球间距是顶角圆球与相应对角线 1/4 处的圆球之间的间距: 圆球半径为 r , 最密堆积为这 2 个圆球相切: $3^{0.5}a/4 = 2r$

【2分】圆球半径 $r = 3^{0.5}a/8$

【3分】1 个金刚石结构的晶胞有 8 个结构基元 (8 个等径圆球), 8 个等径圆球的总体积为 $8 \times 4\pi r^3/3 = 32\pi(3^{0.5}a/8)^3/3$

【5分】所以空隙率为:

$$1 - \text{等径圆球的总体积/晶胞的体积} = 1 - 32\pi(3^{0.5}/8)^3/3 = 1 - 3^{0.5}\pi/16 = 0.660 = 66.0\%$$



2、面心立方紧密堆积的金属晶体，其原子量为 M ，密度是 8.94 g/cm^3 。试计算晶格常数和最小原子间距。【注意有效数字】

解：

【2分】有效数字

【2分】设晶格常数为 a ，单位为 cm ；1 个面心立方晶格的原子数为 4 个，1 个有效原子的体积为 $a^3/4$

【2分】阿伏伽德罗常数 $N_A = 6.02 \times 10^{23}$ 为 0.0120 kg 重的 ^{12}C 所含的原子数，1 摩尔任何物质均含 N_A 个微粒

【2分】由于原子量为 M ，1 摩尔的质量为 M ，单位为 g

【2分】1 摩尔的原子数为 N_A ，1 摩尔的体积为 $N_A a^3/4$ 。

【2分】密度 = 1 摩尔的质量 / 1 摩尔的的体积 = $M / (a^3 N_A / 4) = 4M / (a^3 N_A) = 8.94 \text{ g/cm}^3$

【3分】晶格常数 $a = [4M / (8.94 \times N_A)]^{1/3} = 9.06 \times 10^{-9} \times M^{1/3} \text{ cm}$ 。

【2分】设球体半径为 r ，面心立方紧密堆积，顶角原子与面心原子相切： $4r = 2^{0.5}a$

【3分】最小原子间距为顶角原子与面心原子的间距： $2r = 2^{0.5}a/2 = 6.41 \times 10^{-9} \times M^{1/3} \text{ cm}$