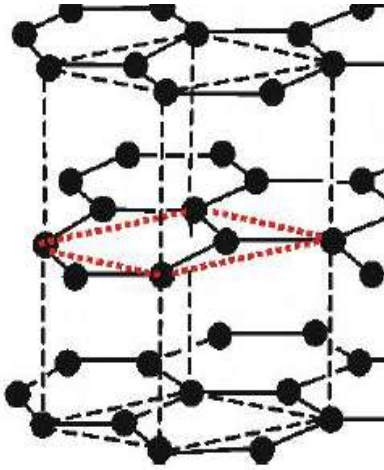


## 作业 2

### 1. P62 石墨晶体结构中结构基元中碳原子个数以及坐标。



结构基元中一共 4 个碳原子 ( $8 \times 1/8 + 4 \times 1/4 + 2 \times 1/2 + 1 = 4$ )  
(注：石墨的平面结构层中的结构基元才是 2 个)

坐标分别为：

$(0, 0, 0)$        $(1/3, 2/3, 0)$   
 $(0, 0, 1/2)$      $(1/3, 2/3, 1/2)$

### 1. 有一组点周期地分布在空间里，它的平行六面体单位如图 1 所示。这组点是否构成一点阵？是否构成一点阵结构？并指出有没有点阵和平移群可以概括它的周期性。

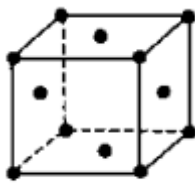
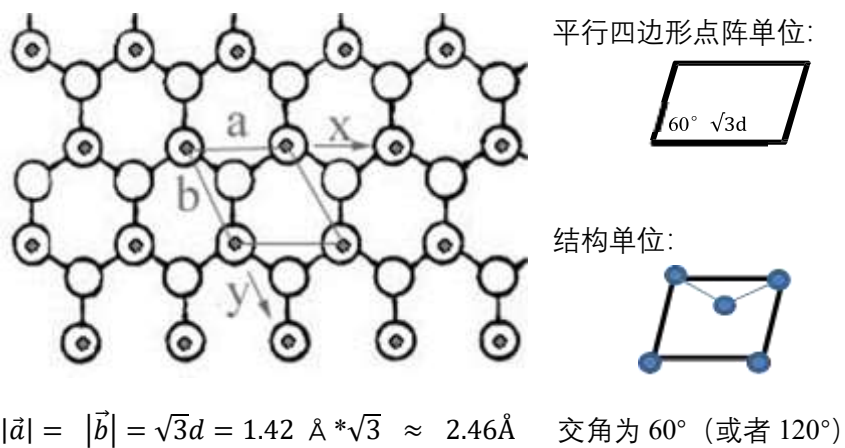


图 1

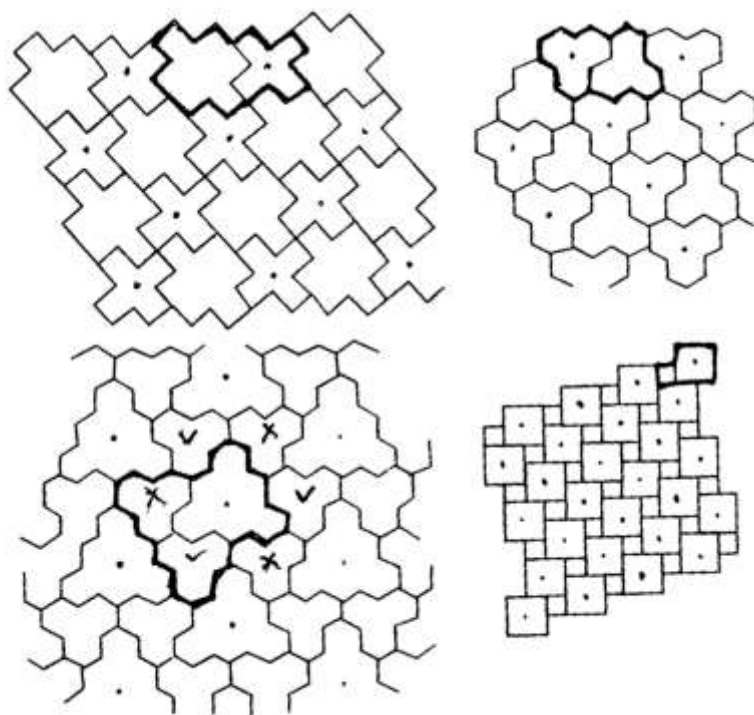
不构成点阵，按连接图中任意两点的向量进行平移后，图形不能复原，因此不能构成点阵，但可以构成一点阵结构。有点阵和平移群可以概括它的周期。

3 个点分别为（顶点、两个面上的点）为一结构基元，顶点、底面和侧面的点分属三套等同点，点阵类型为简单格子。  
设晶胞的三个素向量为  $a$ 、 $b$  和  $c$ ，则平移群为  $T = ma + nb + pc$  ( $m, n, p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \infty$ )

2. 在图 1-14 中示出了石墨层的一部分，整个石墨层为一平面点阵结构，请从结构中引出一个平行四边形的点阵单位和结构单位，并给出向量  $a, b$  长度和交角，图中相邻原子距离为  $1.42 \text{ \AA}$ 。





3. 判断图 2 中的平面点阵和结构基元。




结构分别是： 单斜格子 单斜格子 六方格子 单斜格子


4.请从图 3 中的各种无限周期重复花样中，找出其结构基元，并画出平面格子。


(1) 结构基元:  单斜格子,

(2) 结构基元:  单斜格子,

(3) 结构基元  正交P 格子,


(4) 结构基元  正交P 格子,


(5) 结构基元  正交P 格子,

(6) 结构基元  正交C 格子,

(7) 结构基元  正交P 格子,


(8) 结构基元  正交P 格子,

(9) 结构基元  正交C 格子,

(10) 结构基元  四方格子,

(11) 结构基元  四方格子,

(12) 结构基元  四方格子,

(13) 结构基元  六方格子,

(14) 结构基元  六方格子,

(15) 结构基元  六方格子,

(16) 结构基元  六方格子，

(17) 结构基元:  六方格子。

5. 图 4 中画出了一个立方体的点阵，其中规定立方单位的一套向量  $a, b, c$ ，而规定菱面体素单位的向量为  $A, B, C$ ，试验证下列关系并阐述其意义

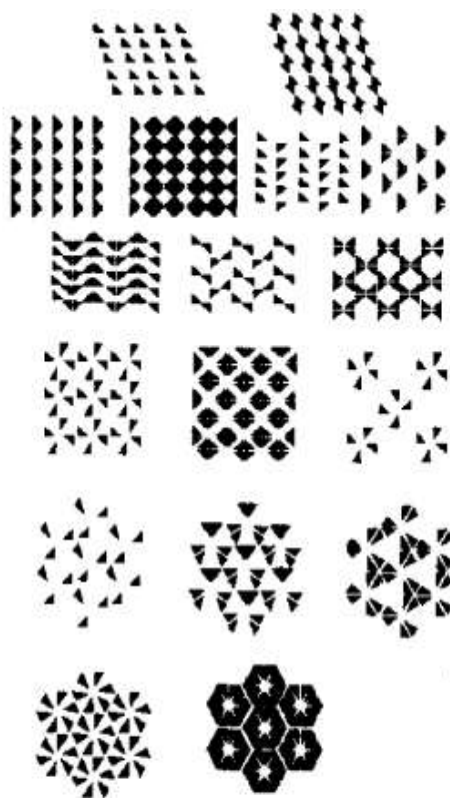


图 3 17 种平面点阵

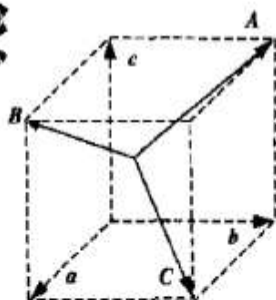
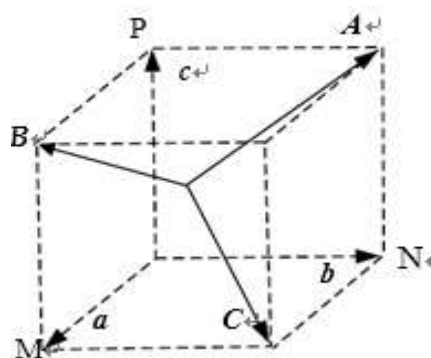


图 4

设  $a, b, c$  的交点为  $O$ ，反向延长  $A$  交立方体的顶点为  $M$  点， $b$  和  $c$  交顶点分别为  $N, P$  点，如图所示



所以:  $A = 1/2(-a+b+c)$ , 同理, 也可以得到  $B = 1/2(a-b+c)$ ,  $C = 1/2(a+b-c)$ 。

可以得到下列关系

$$[A \cdot B \times C] = 1/2 * (a \cdot b \times c)$$

将题目中的关系带入, 即可证明。  
意义合理解释均可

(例如  $OA, OB, OC$  两两垂直;  $A, B, C$  关于  $a+b+c$  对称等)

$$A = \frac{1}{2}(-a+b+c),$$

$$B = \frac{1}{2}(a-b+c),$$

$$C = \frac{1}{2}(a+b-c).$$