

作业 5

廖汶锋

2024 年 4 月 7 日

5.1. 计算金刚石或闪锌矿结构中 (100)、(110) 和 (111) 面的悬挂键密度。

解. (1) (100) 面:

原子面密度为 $2/a^2$, 表面上每一个原子有 2 个悬挂键, 所以
(100) 面的悬挂键密度为 $2\left(\frac{2}{a_1^2} - \frac{2}{a_2^2}\right) = 4\left(\frac{1}{a_1^2} - \frac{1}{a_2^2}\right) \approx \frac{8\Delta a}{a^3}$

(2) (110) 面:

原子面密度为 $2\sqrt{2}/a^2$, 表面上每一个原子有 1 个悬挂键, 所以
(110) 面的悬挂键密度为 $\frac{2\sqrt{2}}{a_1^2} - \frac{2\sqrt{2}}{a_2^2} = 2\sqrt{2}\left(\frac{1}{a_1^2} - \frac{1}{a_2^2}\right) \approx \frac{4\sqrt{2}\Delta a}{a^3}$

(3) (111) 面:

原子面密度为 $4/(\sqrt{3}a^2)$, 表面上每一个原子有 1 个悬挂键, 所以
(111) 面的悬挂键密度为 $\frac{4}{\sqrt{3}a_1^2} - \frac{4}{\sqrt{3}a_2^2} = \frac{4}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{a_1^2} - \frac{1}{a_2^2}\right) \approx \frac{8\Delta a}{\sqrt{3}a^3}$