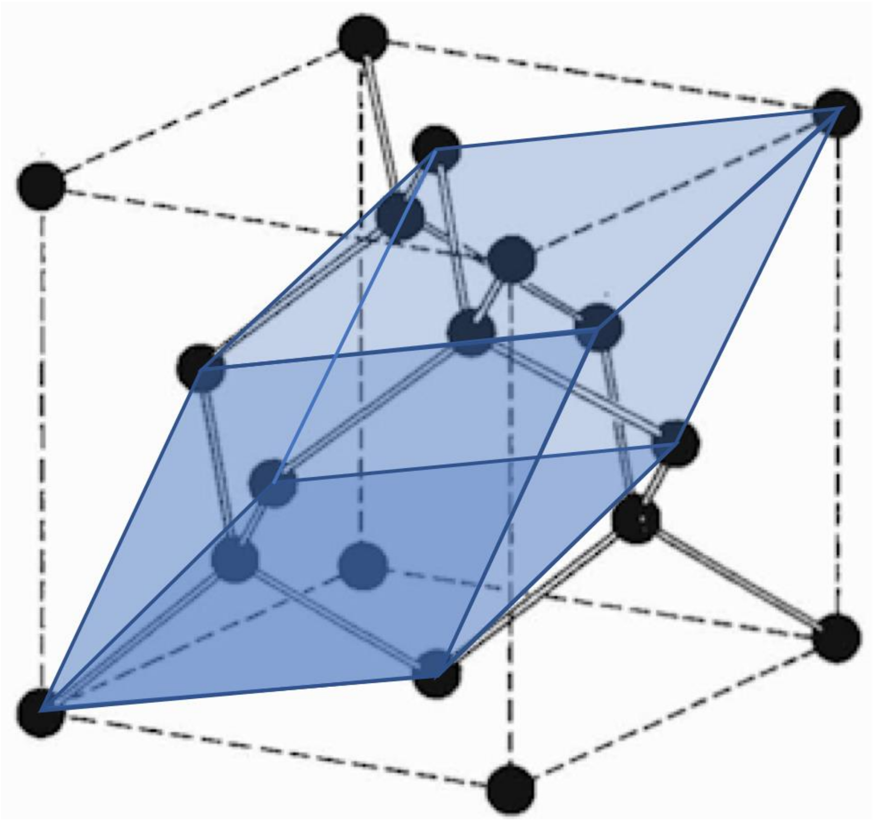
Chapter 1.1: 课后作业

1. 分别画出硅(silicon)晶体的一个单胞(unit cell)和一个原胞(primitive cell)，并分别指出其各自含有的硅原子数目。
2. 分别画出硅晶体(100)、(110)和(111)面上的原子排列。

提交时间：3月3日之前

提交方式：手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

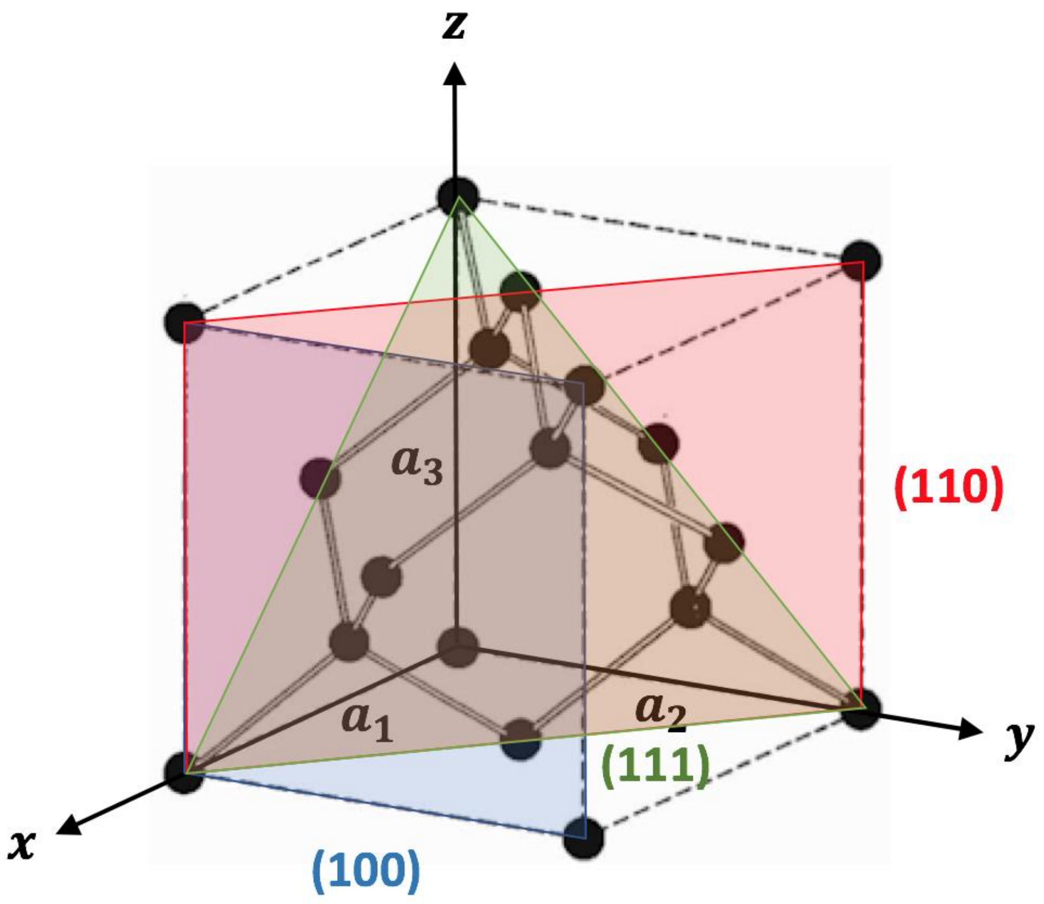
1. 分别画出硅(silicon)晶体的一个单胞(unit cell)和一个原胞(primitive cell)，并分别指出其各自含有的硅原子数目。

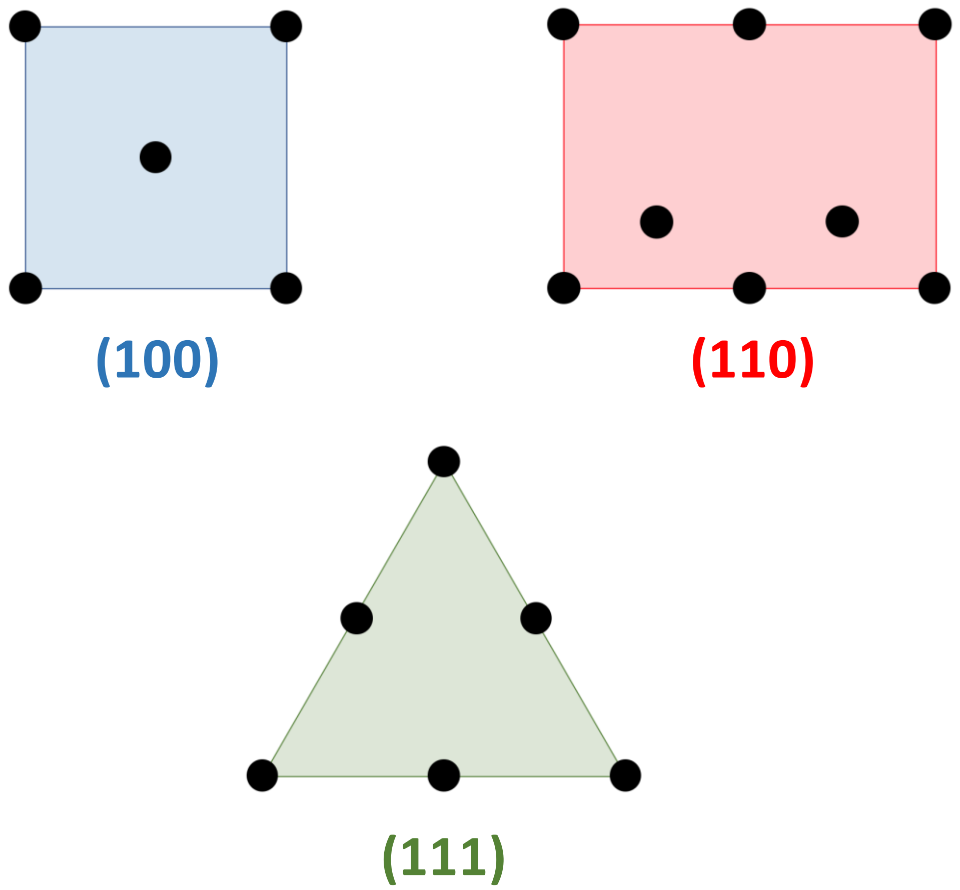


单胞: 8个硅原子

原胞: 2个硅原子

2. 分别画出硅晶体(100)、(110)和(111)面上的原子排列。





Chapter 1.2: 课后作业

1. 列出硅(silicon)晶体所属的点群、晶系、布拉维格子等信息，并在单胞中画出可能的点对称元素。

2. 用 Materials Studio 软件画出硅晶体的一个单胞（截图到作业纸上），标出任意一条4度螺旋轴，并熟悉 Materials Studio 软件的使用。

（Materials Studio 下载链接: https://pan.baidu.com/s/1zQ5qVycOEhFmpxZZTpTZWQ?pwd=m8m5 提取码: m8m5）

提交时间：3月3日之前

提交方式：手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

Chapter 1.2: 课后作业-答案

1. 列出硅(silicon)晶体所属的点群、晶系、布拉维格子等信息，并在单胞中画出可能的点对称元素。

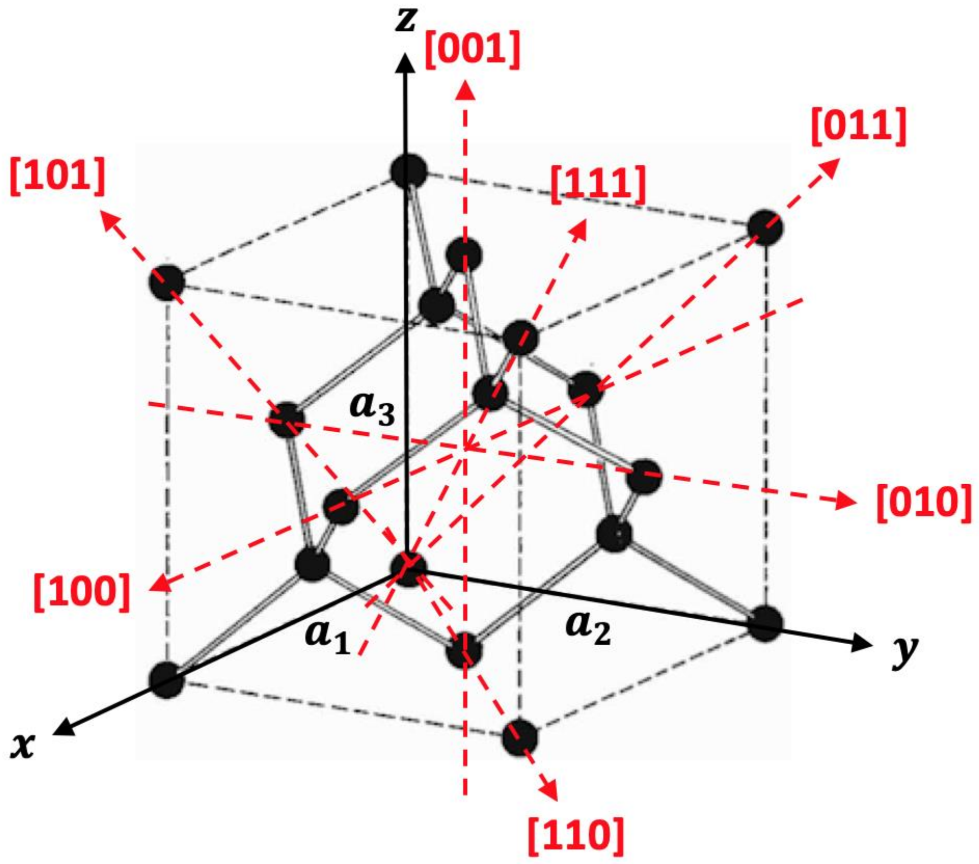
点群	点对称元素个数	晶系	布拉维格子
O_h	48	立方晶系	面心立方(*fcc*)
	E, $8C_3$, $6C_2$, $6C_4$, $3C_2$, i, $6S_4$, $8S_3$, 3σ, 6σ		

Chapter 1.2: 课后作业-答案

1. 列出硅(silicon)晶体所属的点群、晶系、布拉维格子等信息，并在单胞中画出可能的点对称元素。

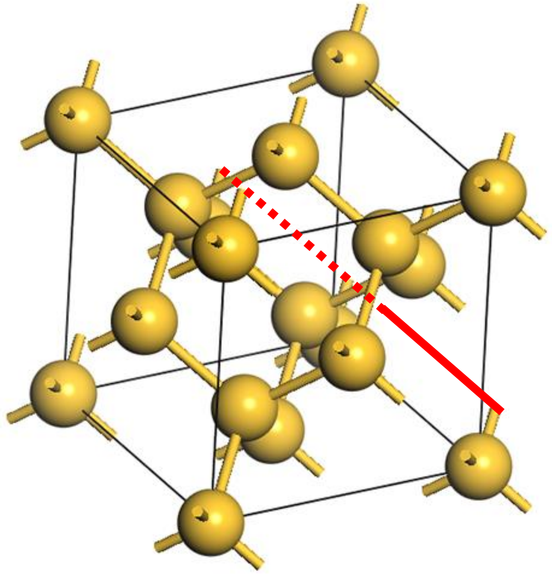
恒等	E	
3个等价的2重转轴	$3C_2$	[100], [010], [001]
6个等价的4重转轴	$6C_4$	[100], [010], [001], $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$
6个等价的2重转轴	$6C_2$	[110], [101], [011], $[1\bar{1}0]$, $[10\bar{1}]$, $[01\bar{1}]$
8个等价的3重转轴	$8C_3$	[111], $[11\bar{1}]$, $[1\bar{1}1]$, $[\bar{1}11]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$
反演中心	i	
3个等价的反映面	3σ	(100), (010), (001)
6个等价的4重反轴	$6S_4$	[100], [010], [001], $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$
6个等价的反映面	6σ	(110), (101), (011), $(1\bar{1}0)$, $(10\bar{1})$, $(01\bar{1})$
8个等价的3重反轴	$8S_3$	[111], $[11\bar{1}]$, $[1\bar{1}1]$, $[\bar{1}11]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$

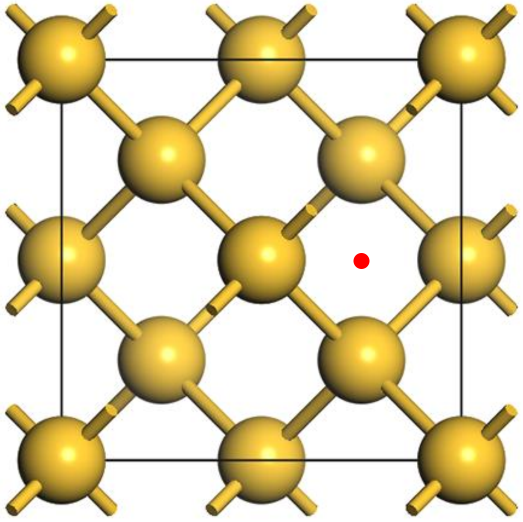
1. 列出硅(silicon)晶体所属的点群、晶系、布拉维格子等信息，并在单胞中画出可能的点对称元素。



Chapter 1.2: 课后作业-答案

2. 用 Materials Studio 软件画出硅晶体的一个单胞（截图到作业纸上），标出任意一条4度螺旋轴，并熟悉 Materials Studio 软件的使用。





Chapter 1.3: 课后作业

如果将等体积球分别排列成下列结构, 计算出钢球所占体积与总体积之比:

1) 简单立方, 2) 体心立方, 3) 面心立方, 4) 六角密堆, 5) 金刚石结构

提交时间： **3月3日之前**

提交方式： **手写**（**写明姓名学号**）**后拍照**，**通**过本班课代表统一提交电子版

如果将等体积球分别排列成下列结构, 计算出钢球所占体积与总体积之比:

1) 简单立方

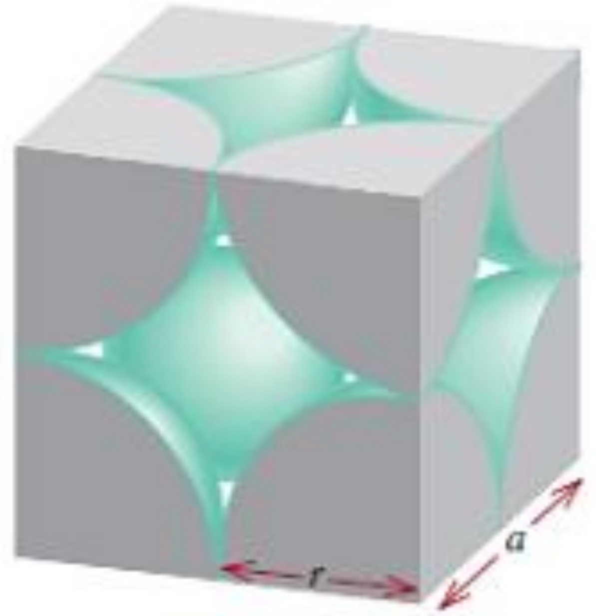
晶胞体积: $V = a^3$

钢球体积: $v = \frac{4}{3}\pi r^3$

钢球半径: $r = \frac{a}{2}$

每个晶胞包含$n = 1$个钢球

体积比: $\frac{nv}{V} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0.52$



如果将等体积球分别排列成下列结构, 计算出钢球所占体积与总体积之比:

2) 体心立方

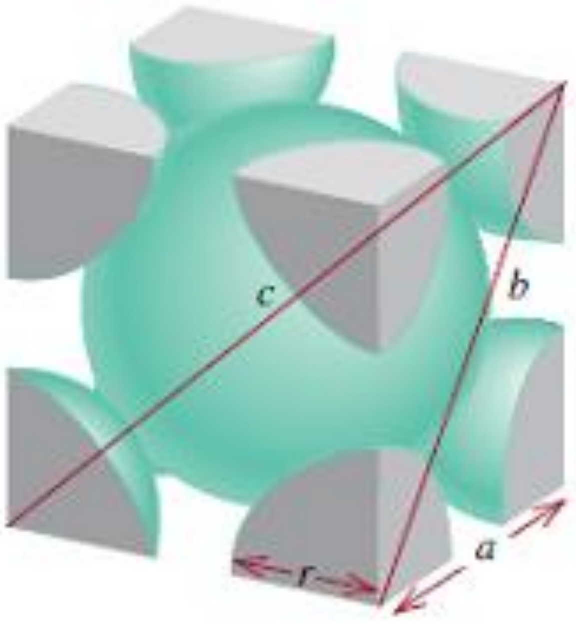
晶胞体积: $V = a^3$

钢球体积: $v = \frac{4}{3}\pi r^3$

钢球半径: $r = \frac{c}{4} = \frac{\sqrt{3}}{4}a$

每个晶胞包含$n = 2$个钢球

体积比: $\frac{nv}{V} = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.68$



如果将等体积球分别排列成下列结构, 计算出钢球所占体积与总体积之比:

3) 面心立方

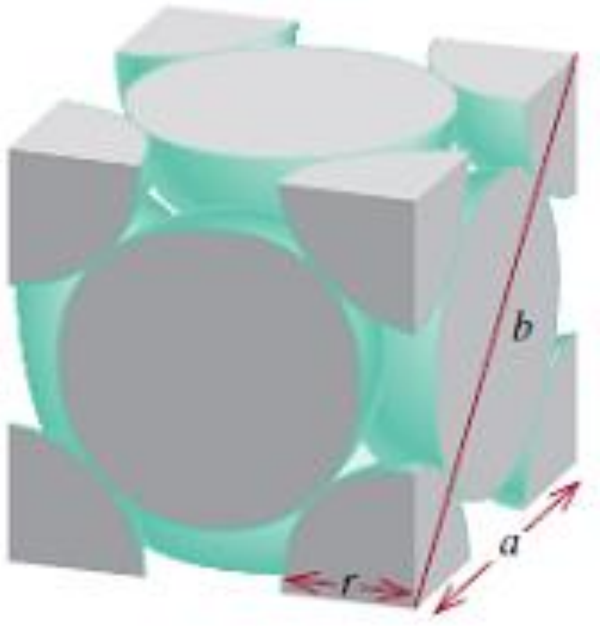
晶胞体积: $V = a^3$

钢球体积: $v = \frac{4}{3}\pi r^3$

钢球半径: $r = \frac{b}{4} = \frac{\sqrt{2}}{4}a$

每个晶胞包含$n = 4$个钢球

体积比: $\frac{nv}{V} = \frac{4\times\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$



如果将等体积球分别排列成下列结构，计算出钢球所占体积与总体积之比:

5) 六角密堆

晶胞体积: $V = ca^2 \sin(\pi/3) = \frac{\sqrt{3}}{2}ca^2$

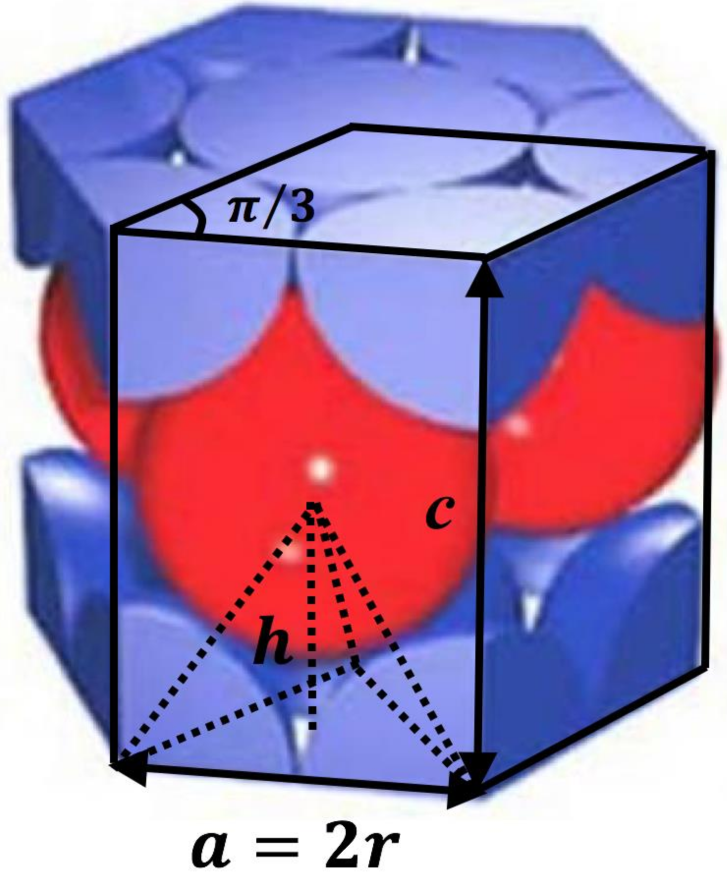
晶胞高度: $c = 2h = \frac{4\sqrt{6}}{3}r$

钢球体积: $v = \frac{4}{3}\pi r^3$

钢球半径: $r = \frac{a}{2}$

每个晶胞包含$n = 2$个钢球

体积比: $\frac{nv}{V} = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{\sqrt{3}}{2}ca^2} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$



如果将等体积球分别排列成下列结构，计算出钢球所占体积与总体积之比:

6) 金刚石结构

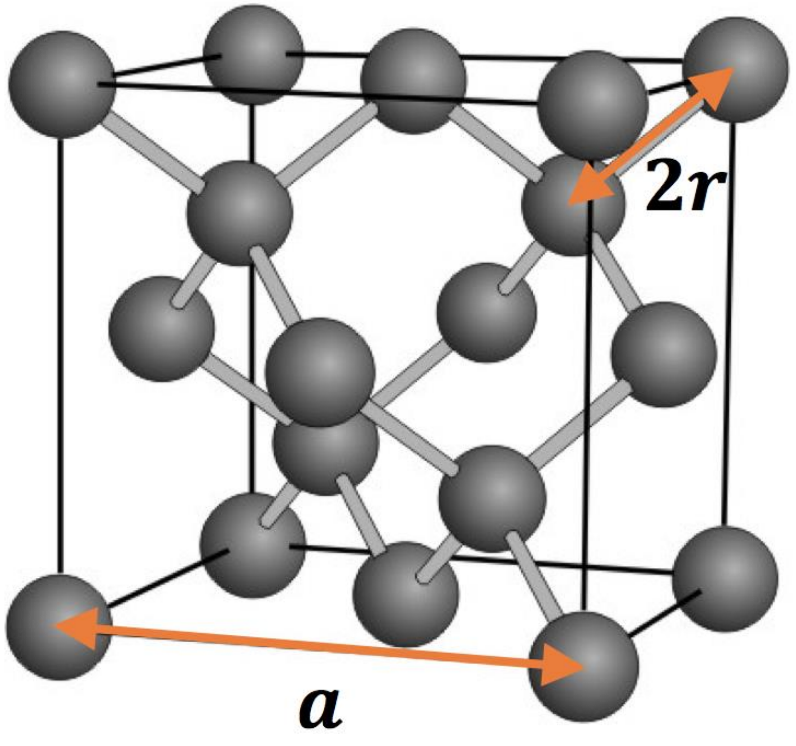
晶胞体积: $V = a^3$

钢球体积: $v = \frac{4}{3}\pi r^3$

钢球半径: $2r = \frac{\sqrt{3}a}{4}$

每个晶胞包含$n = 8$个钢球

体积比: $\frac{nv}{V} = \frac{8\times\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{16} \approx 0.34$



Chapter 1.4: 课后作业

试证明:

倒格子矢量 $G = h_1 b_1 + h_2 b_2 + h_3 b_3$ 垂直于密勒指数为$(h_1 h_2 h_3)$的晶面系。

提交时间： **3月3日之前**

提交方式：手写（写明姓名学号）后拍照，通过本班课代表统一提交电子版

证明:

正格子基矢a_1, a_2, a_3满足 $a_i \cdot b_j = 2\pi\delta_{ij}$

晶面$(h_1 h_2 h_3)$在基矢上的截距为$a_1/h_1, a_2/h_2, a_3/h_3$.

$$\overrightarrow{CA} = \overrightarrow{OA} - \overrightarrow{OC} = \frac{a_1}{h_1} - \frac{a_3}{h_3} \qquad \overrightarrow{CB} = \overrightarrow{OB} - \overrightarrow{OC} = \frac{a_2}{h_2} - \frac{a_3}{h_3}$$

$$G \cdot \overrightarrow{CA} = (h_1 b_1 + h_2 b_2 + h_3 b_3) \cdot \left(\frac{a_1}{h_1} - \frac{a_3}{h_3}\right) = 0$$

$$G \cdot \overrightarrow{CB} = (h_1 b_1 + h_2 b_2 + h_3 b_3) \cdot \left(\frac{a_2}{h_2} - \frac{a_3}{h_3}\right) = 0$$

故倒格矢G与晶面系$(h_1 h_2 h_3)$垂直

晶面间距: $d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{2\pi}{|G|}$

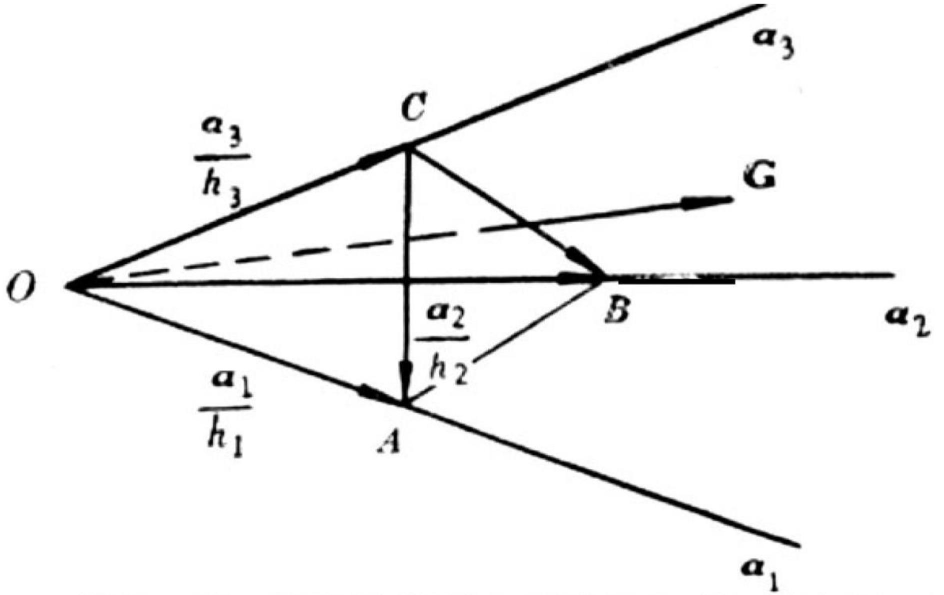


图1-18 晶面与倒易点阵位矢关系示意图

Chapter 1: 课堂练习-1

证明倒格子原胞体积为$\Omega^* = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$, 其中$\Omega$为正格子原胞体积.

证明:

$$\vec{b}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} = 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\Omega}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} = 2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\Omega}$$

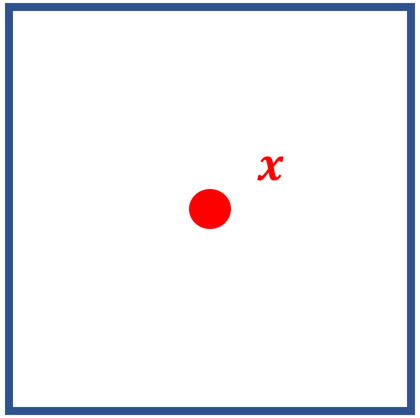
$$\vec{b}_3 = 2\pi\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} = 2\pi\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\Omega}$$

$$\Omega^* = \vec{b}_1\cdot(\vec{b}_2\times\vec{b}_3) = \left(\frac{2\pi}{\Omega}\right)^3(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)\cdot[(\vec{a}_3\times\vec{a}_1)\times(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)] = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

利用$\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C}) = (\vec{A}\cdot\vec{C})\vec{B}$-$(\vec{A}\cdot\vec{B})\vec{C}$

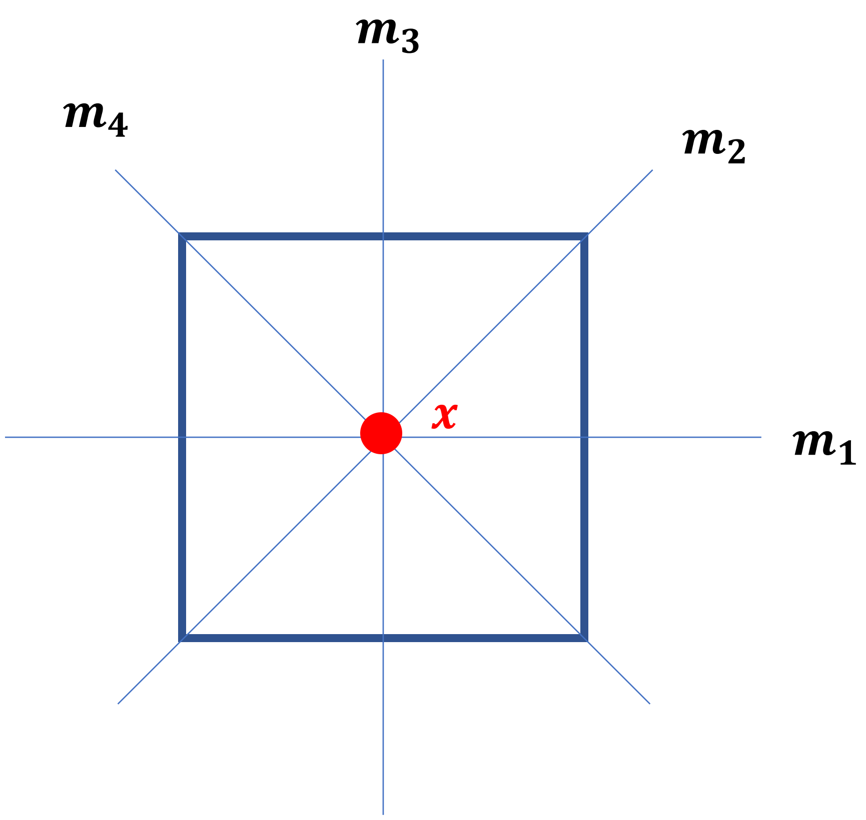
Chapter 1: 课堂练习-2

找出立方体中保持x轴不变的所有对称操作，并指出它们中任意两个操作乘积的结果



4重转轴-旋转操作: $\mathrm{E}, \mathrm{C}_4^1, \mathrm{C}_4^2, \mathrm{C}_4^3$

反映面-反映操作: m_1, m_2, m_3, m_4



Chapter 1: 课堂练习-2-答案

	E	C_4^1	C_4^2	C_4^3	m_1	m_2	m_3	m_4
E	E	C_4^1	C_4^2	C_4^3	m_1	m_2	m_3	m_4
C_4^1	C_4^1	C_4^2	C_4^3	E	m_2	m_3	m_4	m_1
C_4^2	C_4^2	C_4^3	E	C_4^1	m_3	m_4	m_1	m_2
C_4^3	C_4^3	E	C_4^1	C_4^2	m_4	m_1	m_2	m_3
m_1	m_1	m_4	m_3	m_2	E	C_4^3	C_4^2	C_4^1
m_2	m_2	m_1	m_4	m_3	C_4^1	E	C_4^3	C_4^2
m_3	m_3	m_2	m_1	m_4	C_4^2	C_4^1	E	C_4^3
m_4	m_4	m_3	m_2	m_1	C_4^3	C_4^2	C_4^1	E