第一章 课后书面作业讲评

1、以刚性原子球堆积模型，计算以下结构的致密度分别为：

(1) 简单立方，$\dfrac{\pi}{6}$ **；**

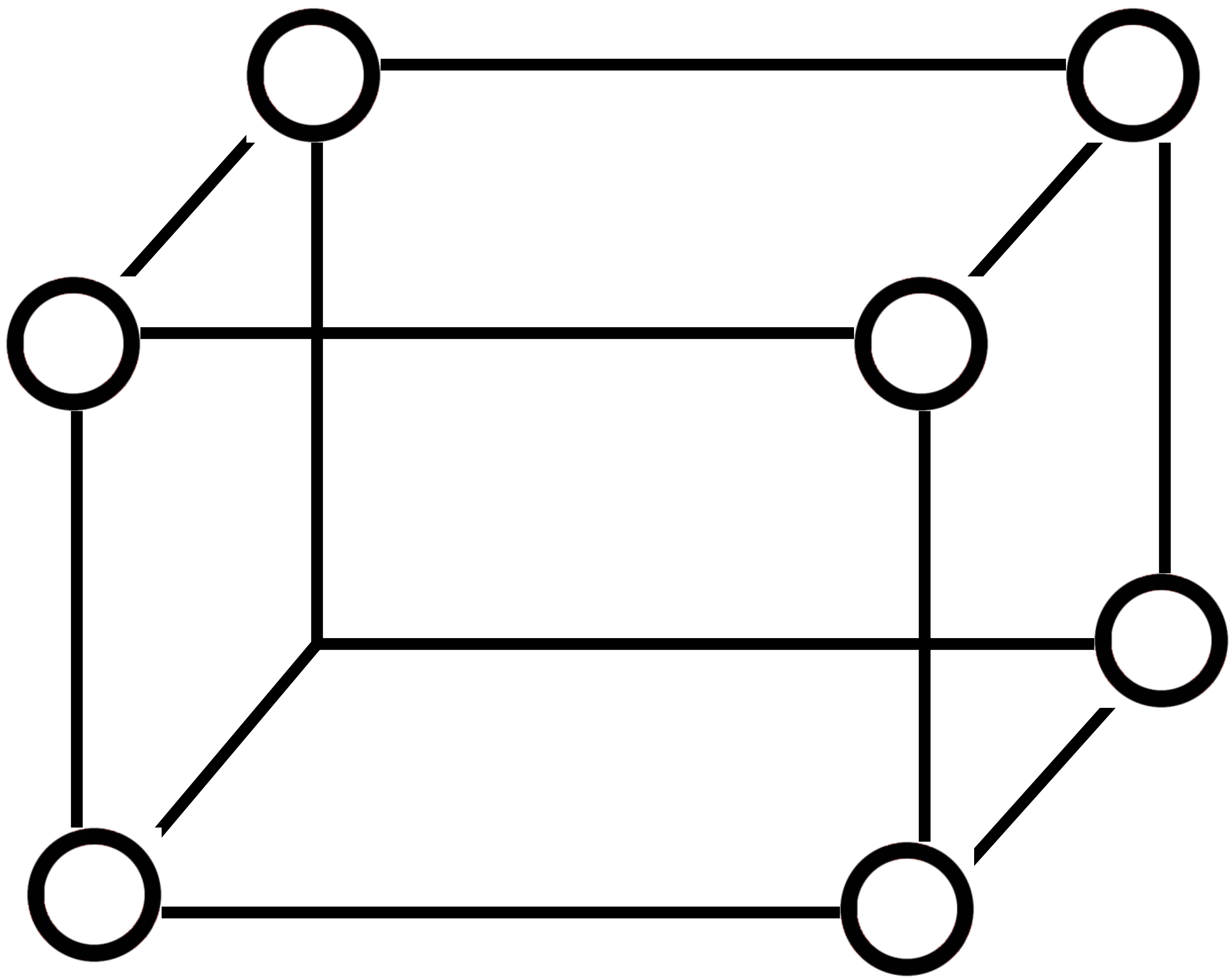
(2)体心立方，$\dfrac{\sqrt{3}\pi}{8}$ **；**

(3) 面心立方，$\dfrac{\sqrt{2}\pi}{6}$ **；**

(4)六角密堆，$\dfrac{\sqrt{2}\pi}{6}$ **；**

(5)金刚石结构，$\dfrac{\sqrt{3}\pi}{16}$

(1)、简单立方



对于简单立方结构，立方体的边长 a = 2r

（a为晶格常数，r为刚性小球的半径）

所以，

$$r = \frac{a}{2}$$

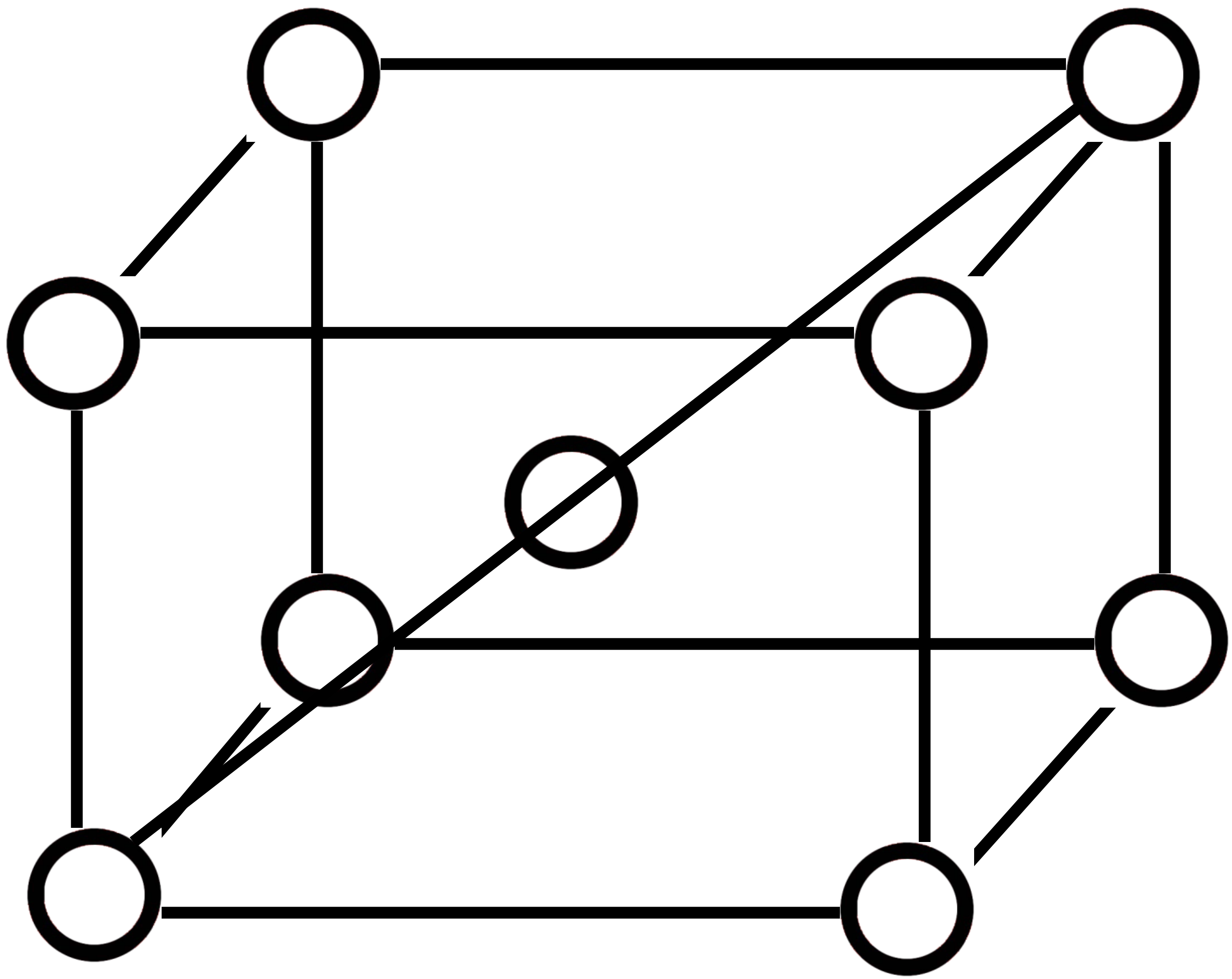
在1个立方体内包含1个小球，这1个小球的体积

$$V_{ball} = \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4}{3}\pi \times \frac{1}{8}a^3 = \frac{1}{6}\pi a^3$$

这个立方体的体积： $V_{cubic} = a^3$

致密度： $\eta = \frac{V_{ball}}{V_{cubic}} = \frac{1}{6}\pi$

(2)、体心立方



空间对角线 = **4r**

空间对角线 $=\sqrt{3}a$

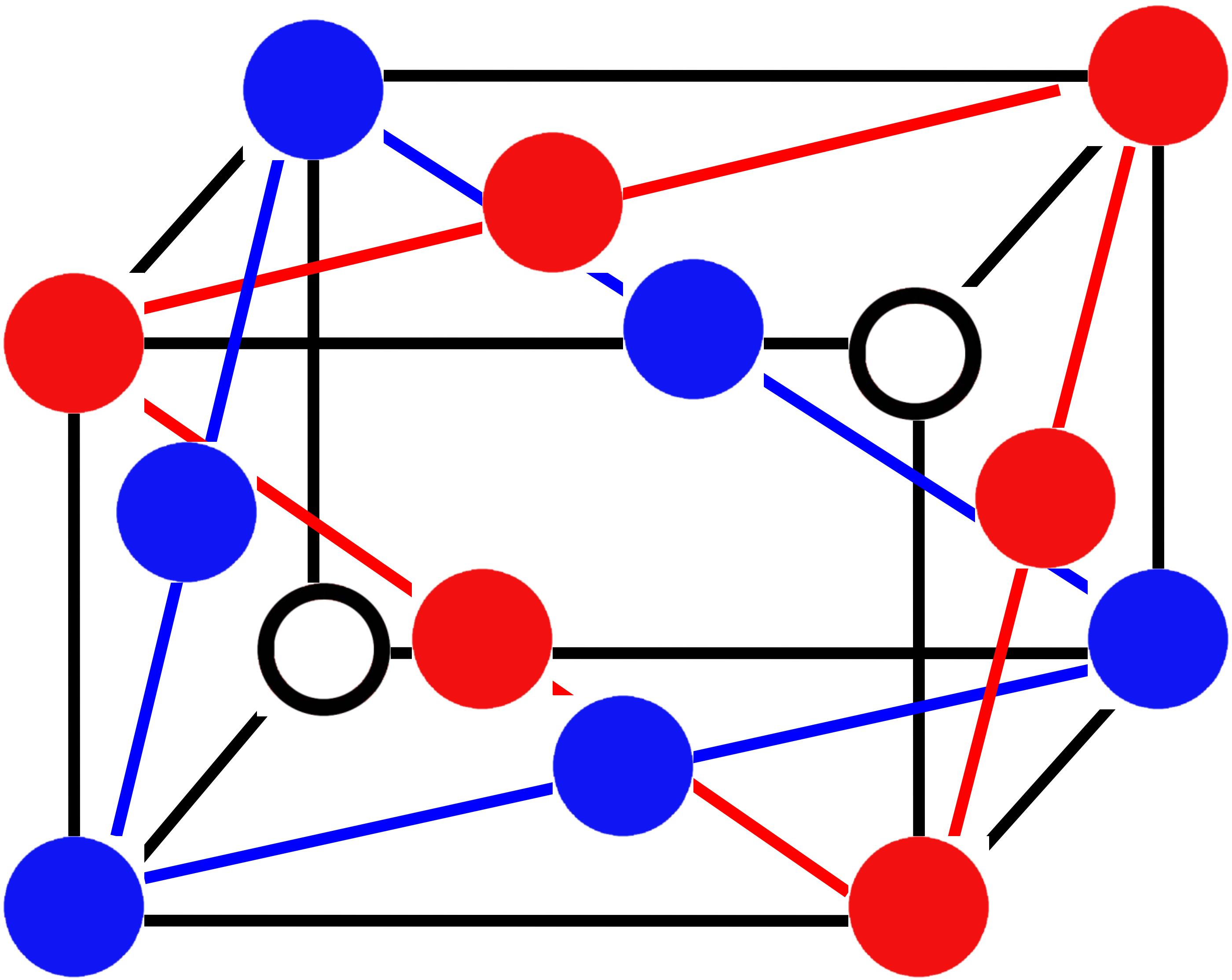
所以， $$r=\frac{\sqrt{3}}{4}a$$

在 a^3 的体积内包含2个小球，这2个小球的体积：

$$\frac{8}{3}\pi r^3 = \frac{8}{3}\pi \times \frac{3\sqrt{3}}{64}a^3 = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi a^3$$

致密度：$\eta = \dfrac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0.68$

(3)、面心立方



面内对角线 = 4r

面内对角线 $= \sqrt{2}a$

$$r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$$

在 a^3 的体积内包含**4**个小球的体积为**:**

$$\frac{16}{3}\pi r^3 = \frac{16}{3}\pi \times \frac{2\sqrt{2}}{64}a^3 = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi a^3$$

致密度：$\eta = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi = 0.74$

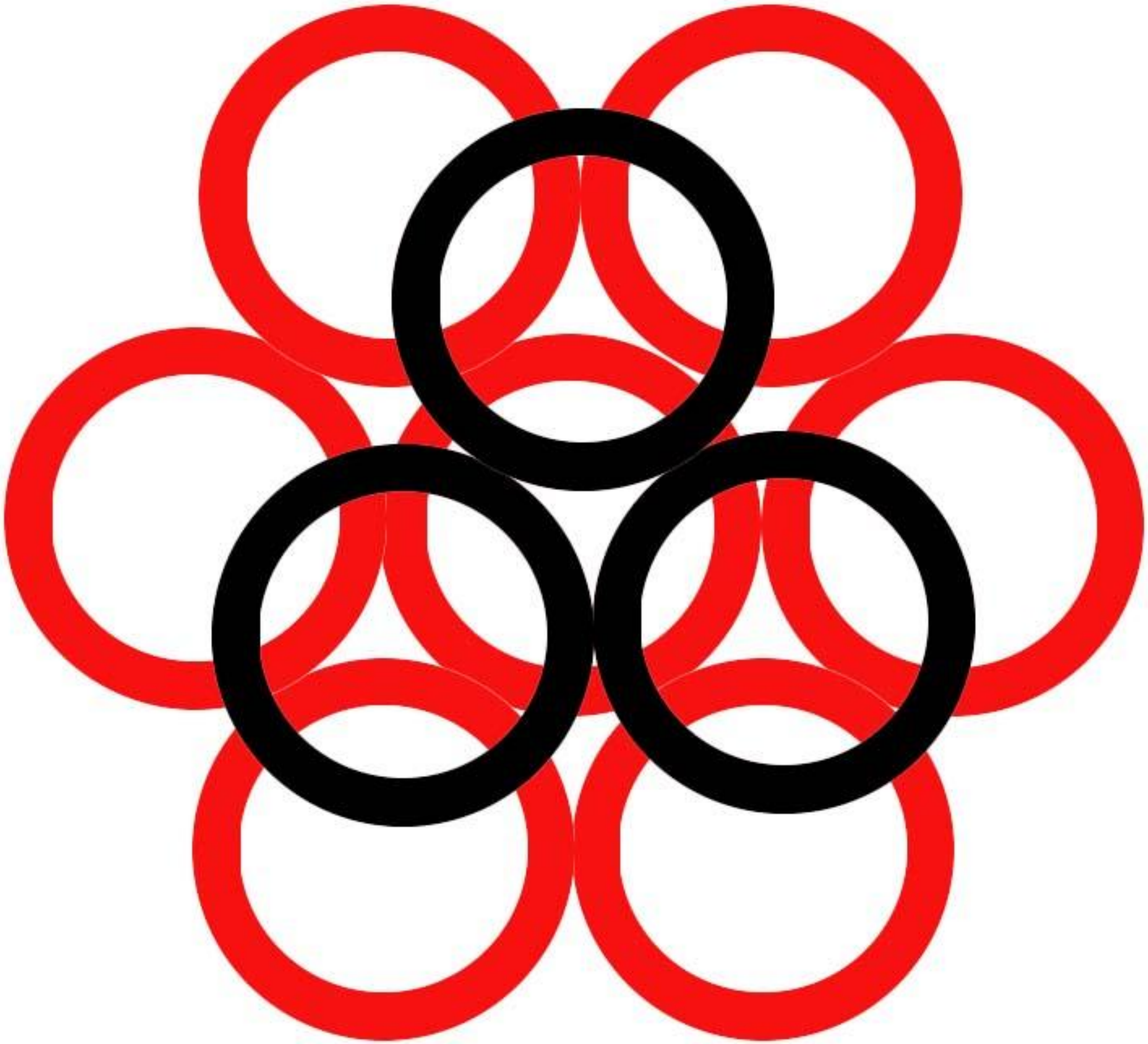
(4)、六方密堆

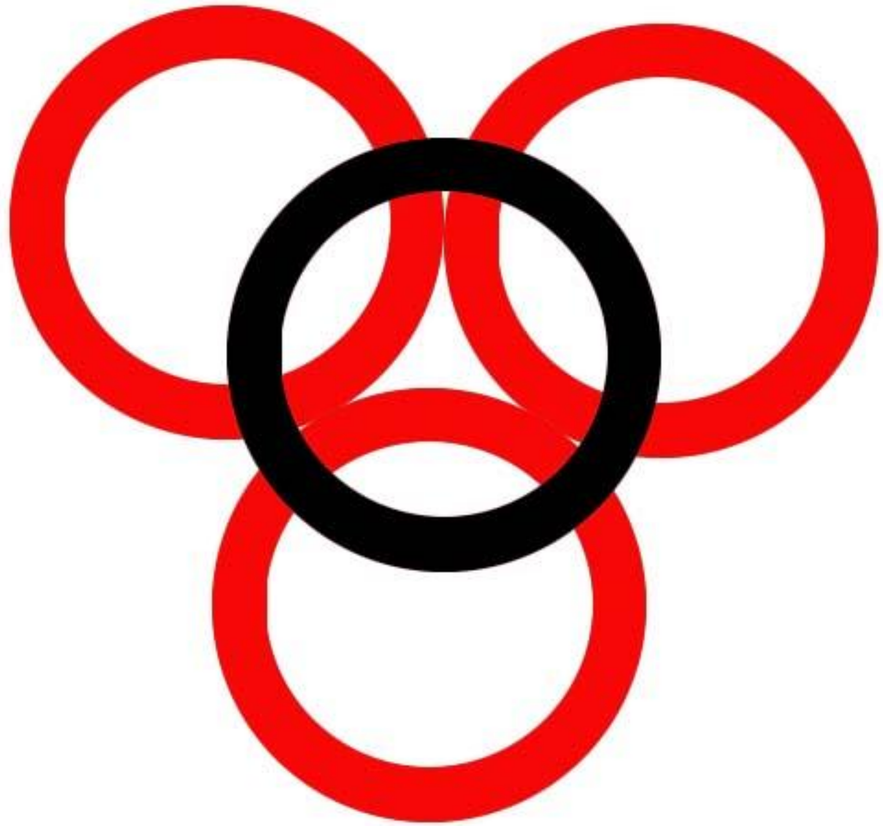
底面为正六边形，其惯用基矢选取原则是：

2r = a　　r = a/2

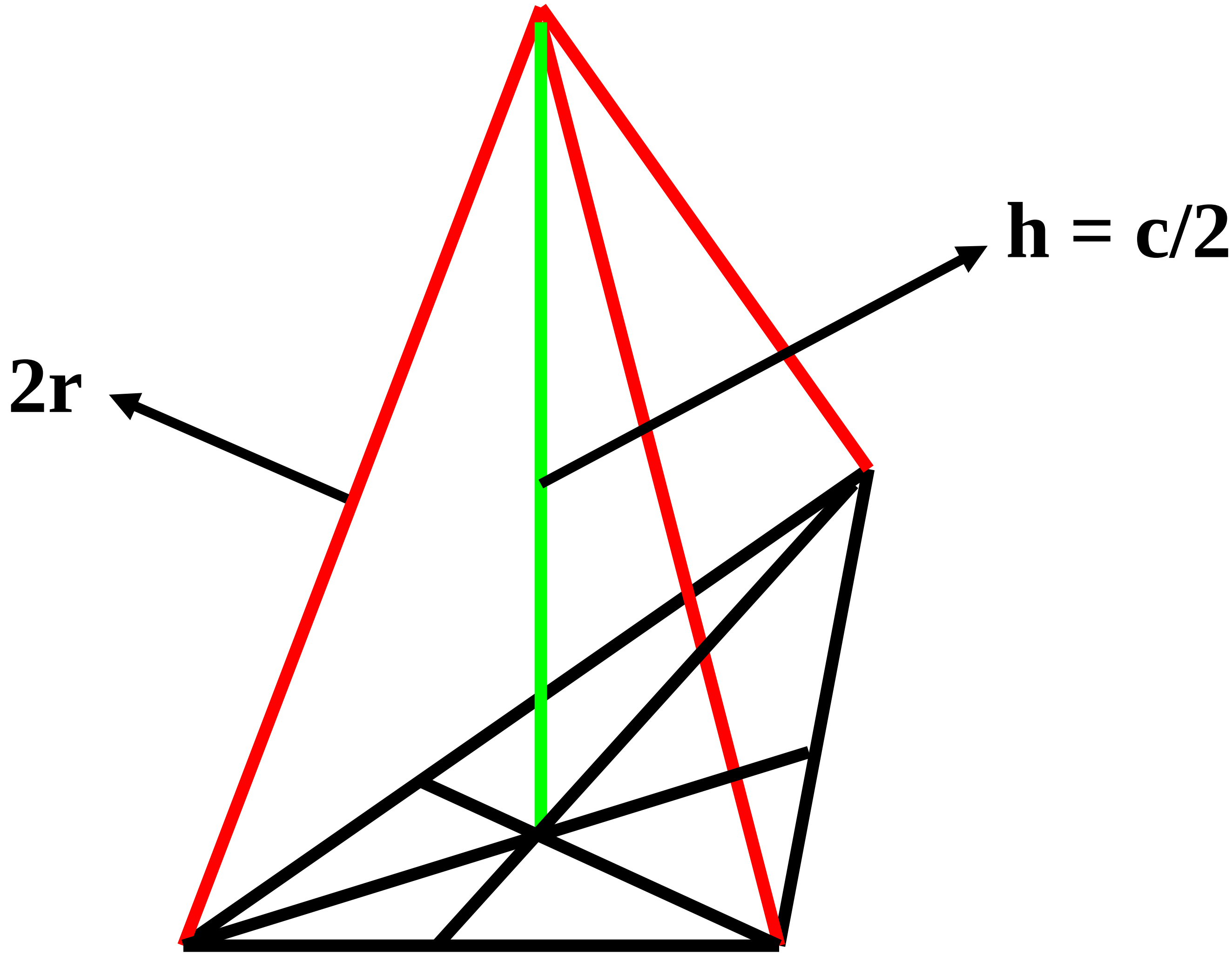
可以证明：对于六角密堆积结构

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$$

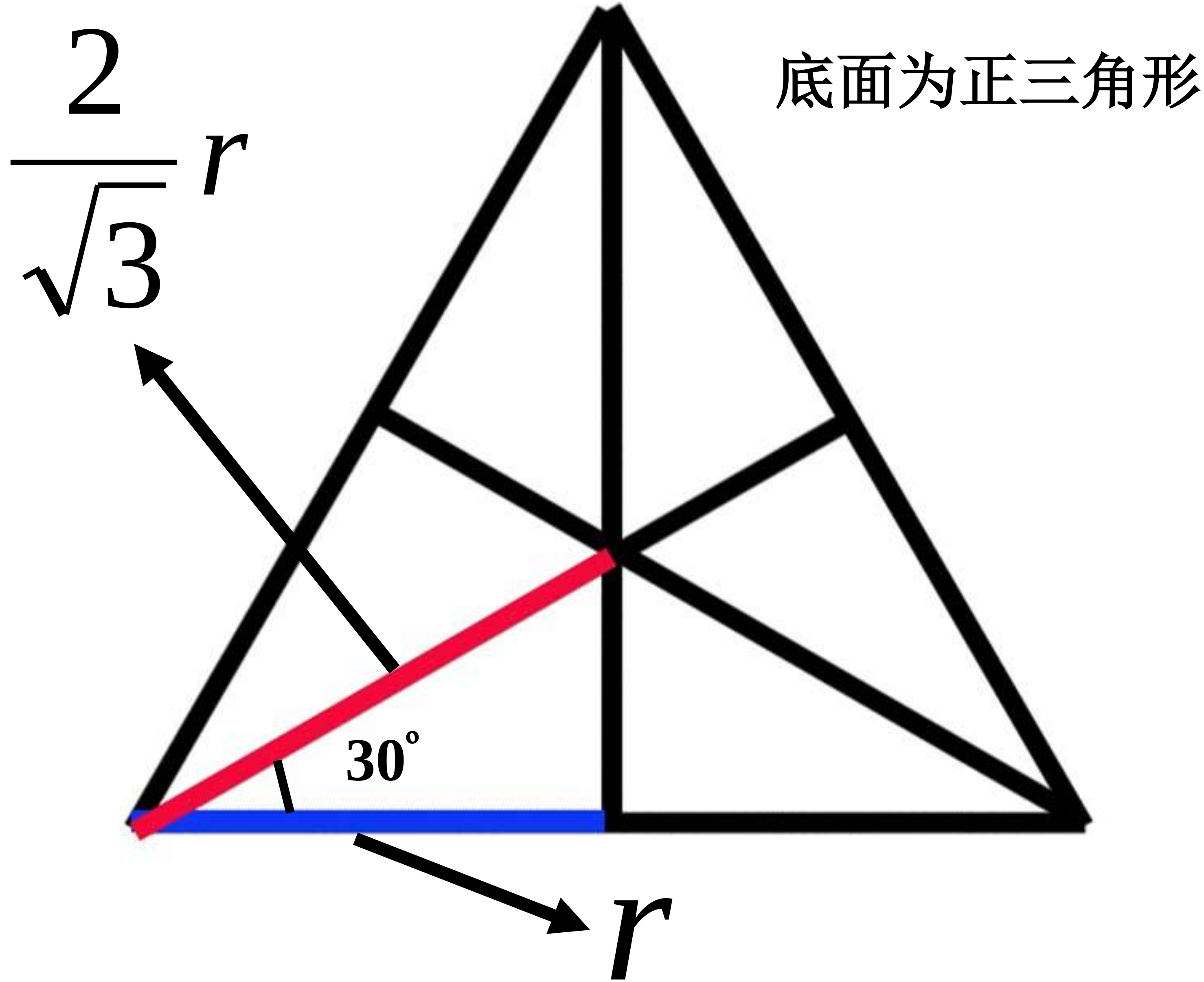




四个球组成了一个正四面体，设原子半径为 r，则 a=2r，正四面体的高等于 c/2，



h = c/2
2r



$\frac{2}{\sqrt{3}}r$
底面为正三角形
30°
r

$$\frac{c}{2} = \sqrt{(2r)^2 - (\frac{2}{\sqrt{3}} r)^2}$$

$$= \sqrt{4r^2 - \frac{4}{3} r^2} = \sqrt{\frac{8}{3}} r = \sqrt{\frac{8}{3}} \frac{a}{2}$$

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$$

正六边形的底面积：

$$S = 3a^2 \left| \sin^{120} \right| = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2$$

正六棱柱的体积：　　$V = S \times C$

$$= \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 \times \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{3}} a = 3\sqrt{2} a^3$$

正六棱柱中包含6个小球，这6个小球的体积：

$$=6\times\frac{4}{3}\pi r^{3}=8\pi\left(\frac{a}{2}\right)^{2}=\pi a^{3}$$

致密度： $\eta=\dfrac{\pi a^{3}}{3\sqrt{2}a^{3}}=\dfrac{\sqrt{2}\pi}{6}$

(5)、金刚石

金刚石是面心立方复式晶格，在金刚石中，最重要的结构特点是：第二个C原子位于空间对角线1/4处，这是两个距离最近的C原子。

2r = 空间对角线/4

r =空间对角线/8

$$空间对角线 = \sqrt{3}a$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{8}a$$

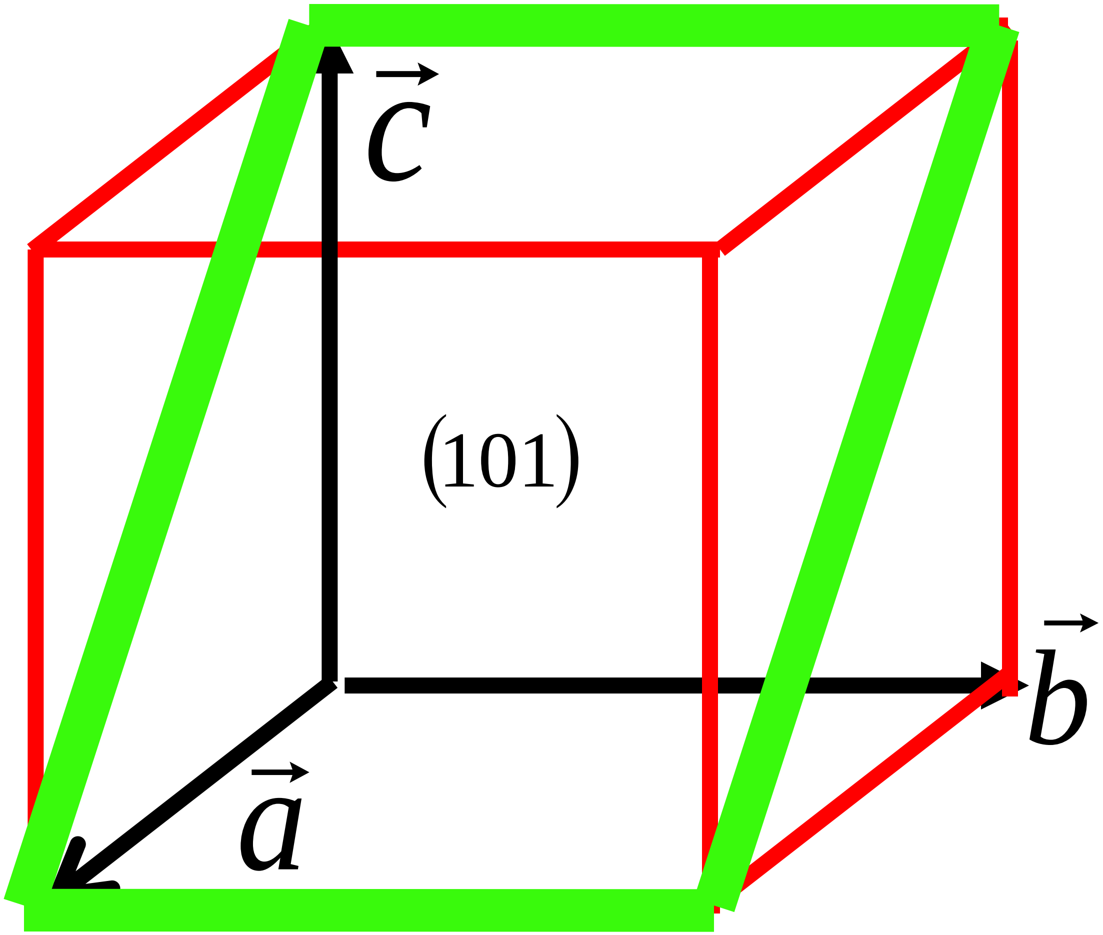
在 a^3 的体积内包含**8**个小球，**8**个小球的体积**:**

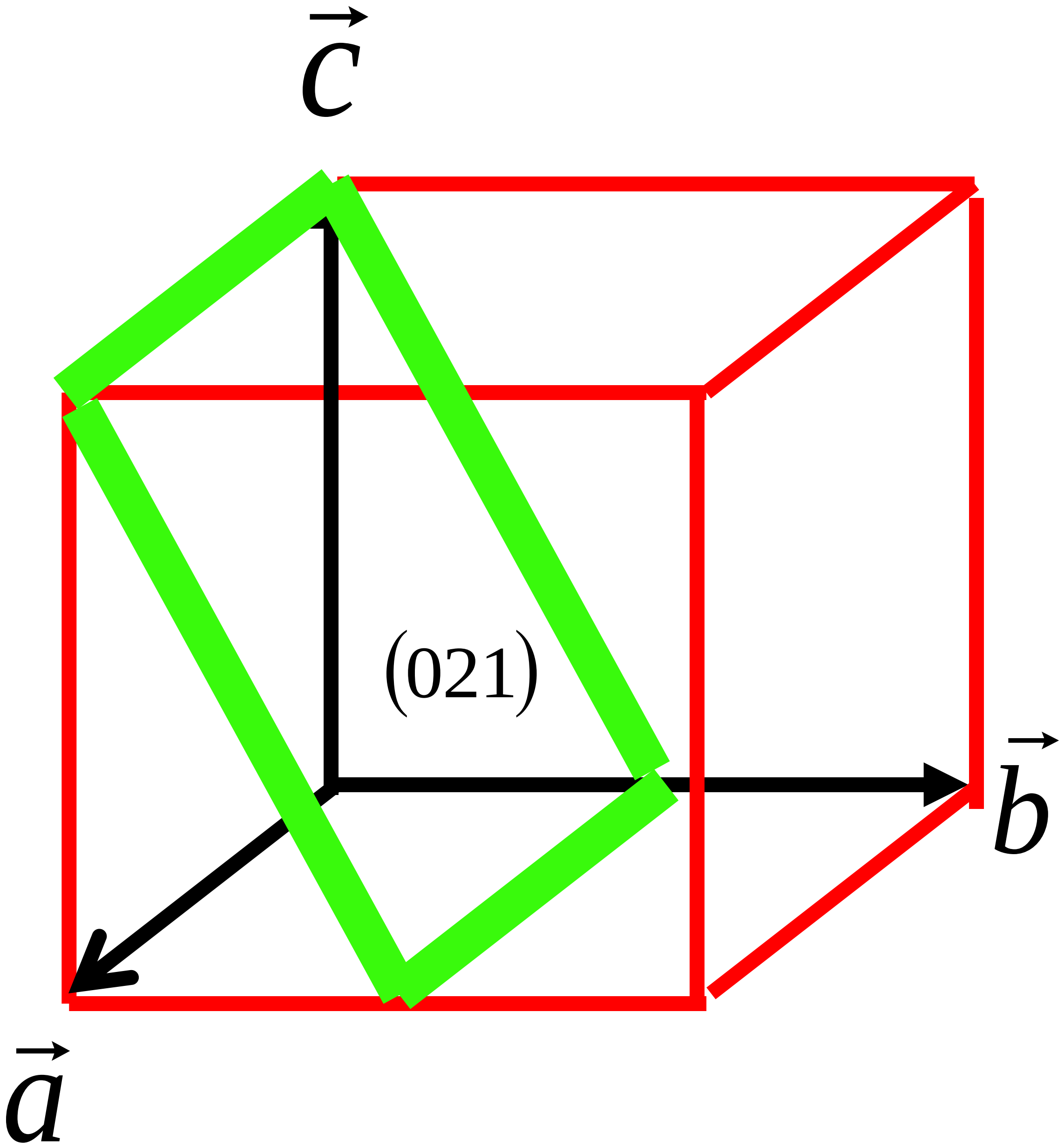
$$\frac{32}{3}\pi r^3=\frac{32}{3}\pi\times\frac{3\sqrt{3}}{512}a^3=\frac{\sqrt{3}}{16}\pi a^3$$

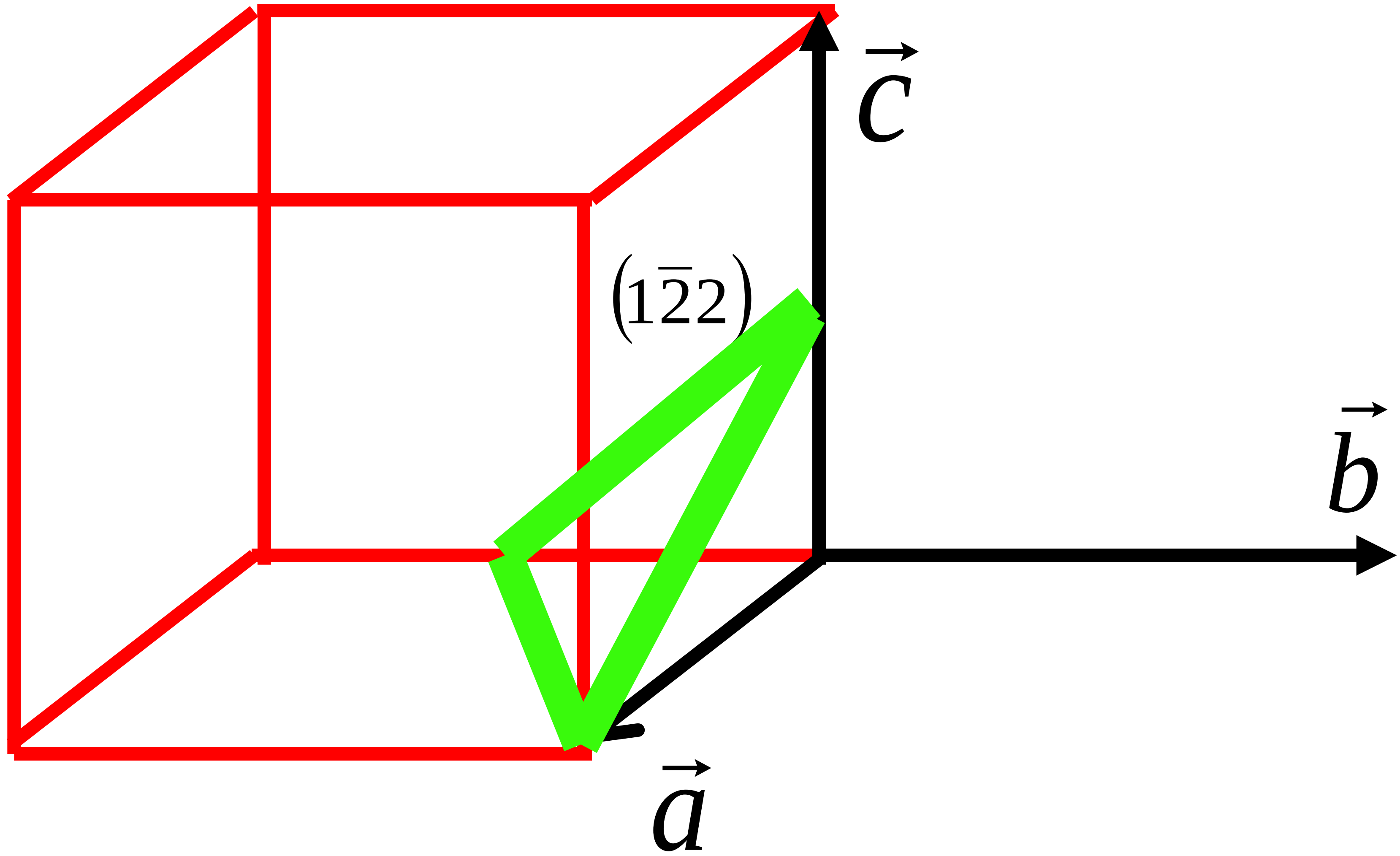
致密度**:**

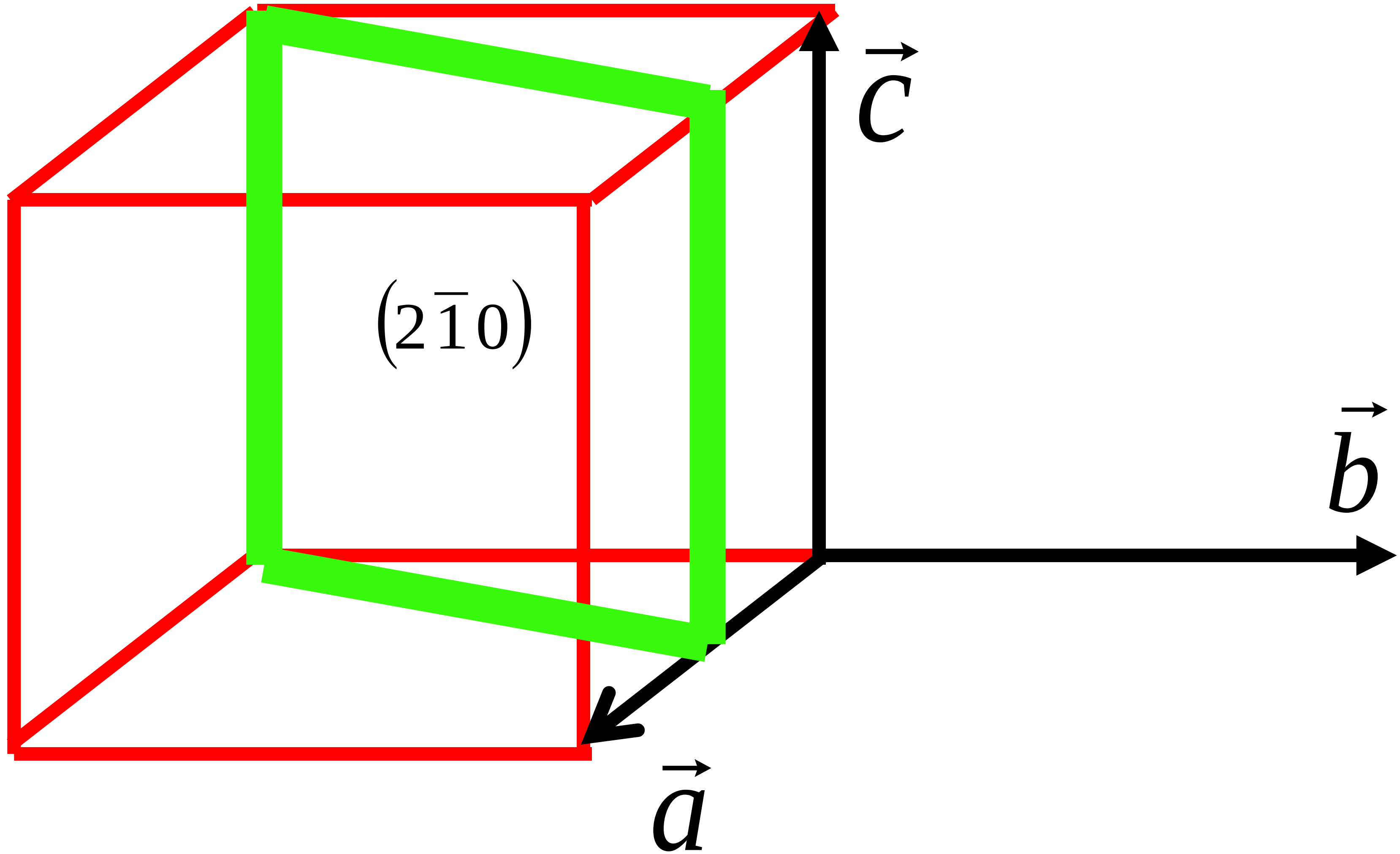
$$\eta=\frac{\sqrt{3}}{16}\pi$$

2、在立方晶胞中，画出(101)、(021)、$(1\bar{2}2)$和$(2\bar{1}0)$晶面。




$\vec{c}$
(021)
$\vec{b}$
$\vec{a}$


$\left(1\bar{2}2\right)$
$\vec{c}$
$\vec{b}$
$\vec{a}$


$\left(2\bar{1}0\right)$
$\vec{c}$
$\vec{b}$
$\vec{a}$

8、六角晶胞的基矢

$$\vec{a} = \frac{\sqrt{3}}{2} a\vec{i} + \frac{a}{2}\vec{j} \qquad \vec{b} = -\frac{\sqrt{3}}{2} a\vec{i} + \frac{a}{2}\vec{j}$$

$$\vec{c} = c\vec{k}$$

求其倒格子基矢

$$\Omega = \left(\vec{a} \times \vec{b}\right) \cdot \vec{c}$$

$$\vec{a} \times \overline{b} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a\vec{i} + \frac{a}{2} \vec{j} \right) \times \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} a\vec{i} + \frac{a}{2} \vec{j} \right)$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \vec{k}$$

$$\Omega = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \vec{k} \cdot c\vec{k} = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi(\vec{b}\times\vec{c})}{\Omega} = \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}\vec{i} + \frac{2\pi}{a}\vec{j}$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi(\vec{c}\times\vec{a})}{\Omega} = -\frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}\vec{i} + \frac{2\pi}{a}\vec{j}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi(\vec{a}\times\vec{b})}{\Omega} = \frac{2\pi}{c}\vec{k}$$

10、求晶格常数为 a 的面心立方和体心立方晶面族 $(h_1h_2h_3)$ 的面间距

对于面心立方，正格子原胞基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(\vec{j} + \vec{k}\right) \qquad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{k}\right) \qquad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j}\right)$$

相应的倒格子原胞基矢 $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\right)$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}\right) \qquad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}\right)$$

晶面族 ($\mathbf{h_1h_2h_3}$) 对应的倒格矢

$$\vec{K}_{h_1h_2h_3} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[\left(-h_1 + h_2 + h_3\right)\vec{i} + \left(h_1 - h_2 + h_3\right)\vec{j} + \left(h_1 + h_2 - h_3\right)\vec{k}\right]$$

晶面族 ($\mathbf{h_1h_2h_3}$) 的面间距

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{2\pi}{\left|\vec{K}_{h_1h_2h_3}\right|}$$

$$= \frac{a}{\sqrt{\left(-h_1 + h_2 + h_3\right)^2 + \left(h_1 - h_2 + h_3\right)^2 + \left(h_1 + h_2 - h_3\right)^2}}$$

对于体心立方，正格子原胞基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\right)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}\right) \qquad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}\right)$$

相应的倒格子原胞基矢

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{j} + \vec{k}\right) \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{k}\right) \qquad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{j}\right)$$

晶面族 $(\mathbf{h_1h_2h_3})$ 对应的倒格矢

$$\vec{K}_{h_1h_2h_3} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[\left(h_2 + h_3\right)\vec{i} + \left(h_1 + h_3\right)\vec{j} + \left(h_1 + h_2\right)\vec{k}\right]$$

晶面族 $(\mathbf{h_1h_2h_3})$ 的面间距

$$d_{h_1h_2h_3} = \frac{2\pi}{\left|\vec{K}_{h_1h_2h_3}\right|} = \frac{a}{\sqrt{\left(h_2 + h_3\right)^2 + \left(h_1 + h_3\right)^2 + \left(h_1 + h_2\right)^2}}$$

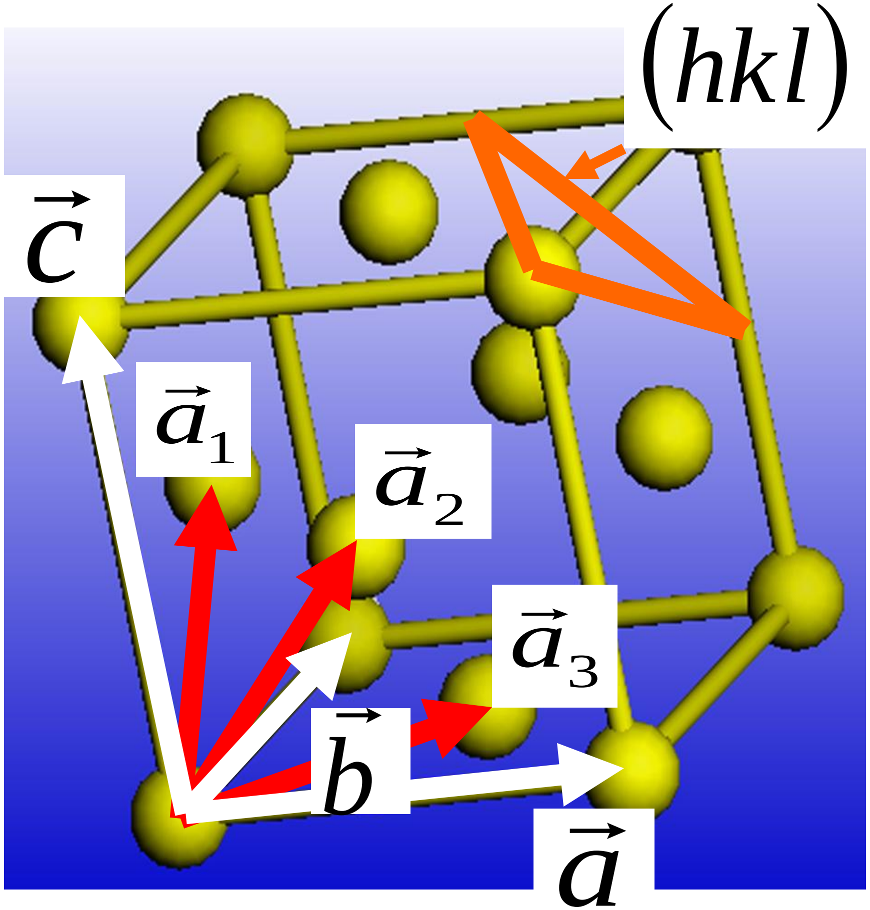
15、对于面心立方晶体，已知晶面族的密勒指数为 (hkl)，求对应的原胞坐标系中的面指数 $(h_1h_2h_3)$。若已知 $(h_1h_2h_3)$，求对应的密勒指数 (hkl)

将面心立方的Miller指数(hkl)化成晶面指数($h_1h_2h_3$)

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$$



设Miller指数为(hkl)的晶面与x,y,z 轴的截距为:

$$\frac{a}{h}, \frac{a}{k}, \frac{a}{l}$$

(hkl)晶面的面方程为:

$$\frac{hx}{a} + \frac{ky}{a} + \frac{lz}{a} = 1$$

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$$ 的线方程为:

$$x = 0$$

$$y = z$$

$\vec{a}_1$ 与晶面(hkl) 的交点为:

$$\left(0, \frac{a}{k+l}, \frac{a}{k+l}\right)$$

交点到坐标原点的绝对距离为: $$\frac{\sqrt{2}a}{k+l}$$

以 $\left|\vec{a}_1\right| = \dfrac{\sqrt{2}a}{2}$ 为单位长度，交点到坐标原点的相对距离为:

$$\frac{2}{k+l}$$

$\vec{a}_2, \vec{a}_3$ **与晶面 (hkl) 的交点分别为:**

$$\left(\frac{a}{h+l},0,\frac{a}{k+l}\right)\text{及}\left(\frac{a}{h+k},\frac{a}{h+k},0\right)$$

$\vec{a}_2, \vec{a}_3$ 与晶面(hkl) 的交点到原点的绝对距离分别为:

$$\frac{\sqrt{2}a}{h+l} \text{及} \frac{\sqrt{2}a}{h+k}$$

以 $\left|\vec{a}_2\right| = \dfrac{\sqrt{2}a}{2}$ 及 $\left|\vec{a}_3\right| = \dfrac{\sqrt{2}a}{2}$

为单位长度，交点到原点相对距离为：

$$\frac{2}{h+l} \quad \text{及} \quad \frac{2}{h+k}$$

晶面(hkl)在 $\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$ 上的截距分别为:

$$\frac{2}{k+l}\text{、}\frac{2}{h+l}\text{及}\frac{2}{h+k}$$

$$h_1 : h_2 : h_3 =$$

$$(k+l):(h+l):(h+k)$$

若已知 **($h_1h_2h_3$)**，求对应的密勒指数 **(hkl)**

$$h_1 : h_2 : h_3 = (k+l):(h+l):(h+k)$$

设上表达式的最大公约数为**m**，则：

$$\left.\begin{aligned} mh_1 &= k+l \\ mh_2 &= h+l \\ mh_3 &= h+k \end{aligned}\right\} \rightarrow \left\{\begin{aligned} h &= \frac{m}{2}(-h_1+h_2+h_3) \\ k &= \frac{m}{2}(h_1-h_2+h_3) \\ l &= \frac{m}{2}(h_1+h_2-h_3) \end{aligned}\right.$$

$$mh_1 = k + l$$

$$mh_2 = h + l$$

$$mh_3 = h + k$$

$$h = \frac{m}{2}(-h_1 + h_2 + h_3)$$

$$k = \frac{m}{2}(h_1 - h_2 + h_3)$$

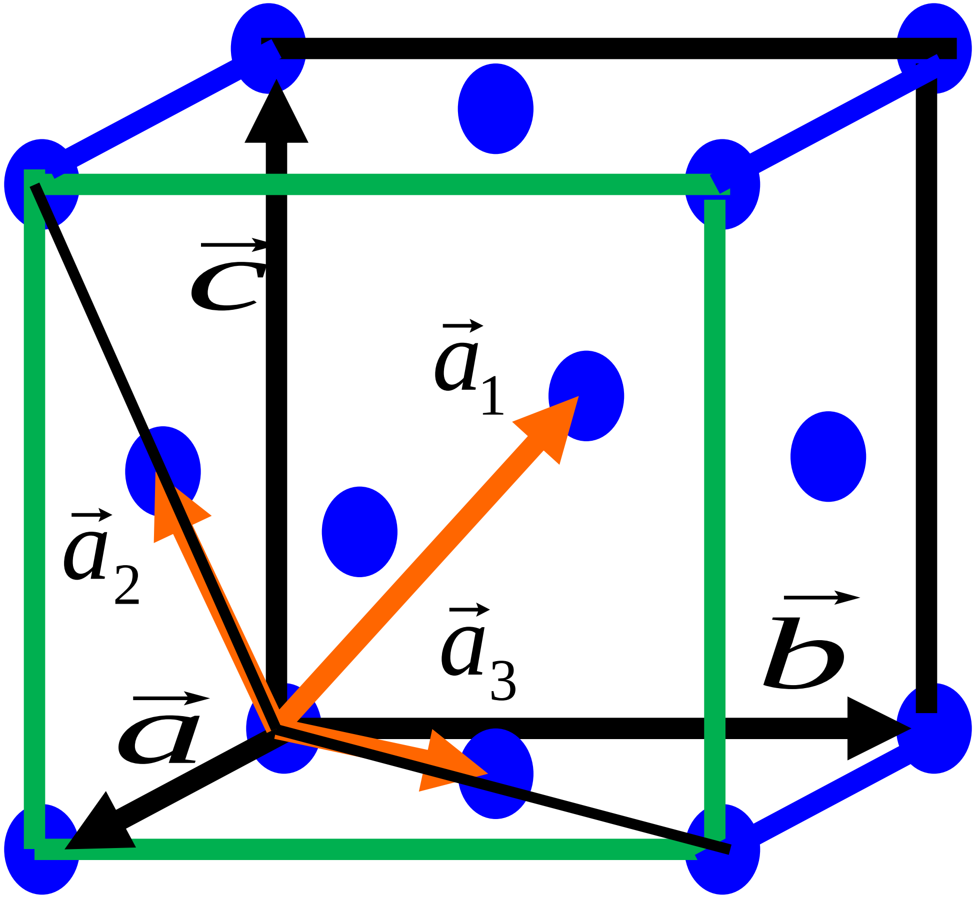
$$l = \frac{m}{2}(h_1 + h_2 - h_3)$$

$$h : k : l =$$

$$(-h_1 + h_2 + h_3) : (h_1 - h_2 + h_3) : (h_1 + h_2 - h_3)$$

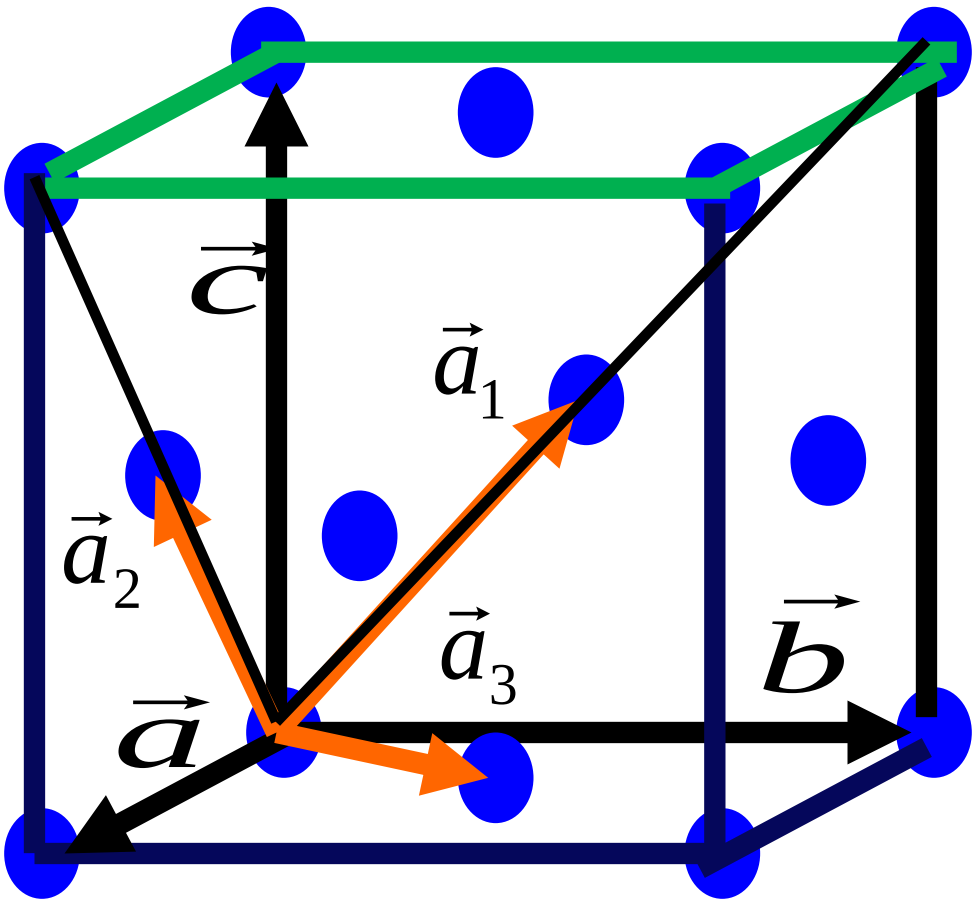
(hkl)	$(h_1 h_2 h_3)$
(100)	(011)
(110)	(112)
(111)	(111)
(211)	(233)
$(\bar{1}31)$	(201)
(234)	(765)

Miller指数(100)面所对应的晶面指数为(011)



Miller指数(100)在 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ **上的截距: ∞ , 2, 2**

Miller指数(001)面所对应的晶面指数为(110)



Miller指数(100)在 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ **上的截距 : 2, 2,** ∞