一、填空

根据是否具有长程有序和周期性特征，固体可分为晶体和非晶体两类，晶体的结构特征是___原子排列具有长程有序和周期性特征___，非晶体的结构特征是___原子排列不具有长程有序特征，只具有短程有序特征，更不具有周期性___；NaCl属于__立方__晶系的__面心立方__晶胞，NaCl的结晶学原胞包含__4__个Na离子和__4__个Cl离子，NaCl的固体物理学原胞包含__1__个Na离子和__1__个Cl离子；CsCl属于__立方__晶系的__简单立方__晶胞，CsCl的结晶学原胞包含__1__个Cs离子和__1__个Cl离子，CsCl的固体物理学原胞包含__1__个Cs离子和__1__个Cl离子；金刚石属于__立方__晶系的__面心立方__晶胞，金刚石的结晶学原胞包含__8__个C原子，金刚石的固体物理学原胞包含__2__个C原子；硅属于__立方__晶系的__面心立方__晶胞，硅的结晶学原胞包含__8__个Si原子，

硅的固体物理学原胞包含___2___个 Si 原子；立方 ZnS 晶体为闪锌矿结构，它属于___立方___晶系的___面心立方___晶胞，立方 ZnS 的结晶学原胞包含___4___个 Zn 原子和___4___个 S 原子，立方 ZnS 的固体物理学原胞包含___1___个 Zn 原子和___1___个 S 原子；GaAs 属于___立方___晶系的___面心立方___晶胞，GaAs 的结晶学原胞包含___4___个 Ga 原子和___4___个 As 原子，GaAs 的固体物理学原胞包含___1___个 Ga 原子和___1___个 As 原子；钛酸钡属于___立方___晶系的___简单立方___晶胞，钛酸钡的结晶学原胞包含___1___个 Ba 原子、___1___个 Ti 原子和___3___个氧原子，钛酸钡的固体物理学原胞包含___1___个 Ba 原子、___1___个 Ti 原子和___3___个氧原子；晶体宏观对称操作中包含___C1___、___C2___、___C3___、___C4___、___C6___、___i___、___m___、___$\bar{4}$___共 8 种独立基本对称操作元素；若某晶体的某一个轴为四度旋转对称轴，则意味着晶体绕该轴转动___$\frac{\pi}{2}$___能自身重合；若某晶体

的某一个轴为三度旋转对称轴，则意味着晶体绕该轴转动 $\underline{\ 2\pi/3\ }$ 能自身重合；若某晶体某一个轴为六度旋转对称轴，则意味着晶体绕该轴转动 $\underline{2\pi/6\ }$ 能自身重合；若某晶面在三个基矢上的截距分别为 3,2,-1，则该晶面的晶面指数为 $\underline{(23\bar{6})}$，晶向 $\vec{R}=2\vec{a}_1-3\vec{a}_2+\vec{a}_3$ 的晶向指数为 $\underline{[2\bar{3}1]}$；已知倒格子原胞基矢为 $\vec{b}_1,\vec{b}_2,\vec{b}_3$,则 (100) 晶面的法线方程为 $\underline{\vec{b}_1}$，(110) 晶面的法线方程为 $\underline{\vec{b}_1+\vec{b}_2}$，$(111)$ 晶面的法线方程为 $\underline{\vec{b}_1+\vec{b}_2+\vec{b}_3}$，$(100)$ 晶面的面间距为 $\underline{\dfrac{2\pi}{\left|\vec{b}_1\right|}}$，$(110)$ 晶面的面间距为 $\underline{\dfrac{2\pi}{\left|\vec{b}_1+\vec{b}_2\right|}}$，$(111)$ 晶面的面间距为 $\underline{\dfrac{2\pi}{\left|\vec{b}_1+\vec{b}_2+\vec{b}_3\right|}}$；

根据缺陷的尺度和几何构形特征，缺陷可分为 点缺陷 、 线缺陷 、 面缺陷 、 体缺陷 共四种类型；根据对称性由低到高的顺序，七大晶系为：三斜晶系 ， 单斜晶系 ， 正交晶系 ， 三方晶系 ， 四方晶系 ， 六方晶系 ， 立方晶系 。立方晶系有 体心立方 ， 面心立方 ， 简单立方 等特征 Bravaise 晶胞；单斜晶系有 简单三斜 ， 底心三斜 等特征 Bravaise 晶胞；正交晶系有 体心正交，面心正交 ， 底心正交，简单正交 等特征 Bravaise 晶胞；四角晶系有 简单四角， 体心四角 等特征 Bravaise 晶胞；

二、简述:

1、基元的概念

答: 晶体中完全相同的重复的基本组成单元;

2、结点的概念

答: 将晶体中的基元抽象成一个点，这个点称为结点, 从而晶体结构由一系列的点子代表，这些点子的总体被称为布喇菲空间点阵，这个空间点阵中的点被称为结点。

3、空间点阵的概念

答: 晶体的内部结构可以认为有许多相同点子在空间做无限的周期性的分布, 这些电子代表晶体的基本结构单元---基元; 这些点子在空间排布的总体称为空间点阵;

4、晶格的概念

答：将晶体的空间点阵的结点用直线连接起来所形成的空间网格称为晶格；

5、Bravaise 空间点阵学说的基本内容

答：晶体的内部结构可以认为有许多相同点子在空间做无限的周期性的分布，这些电子代表晶体的基本结构单元---基元；这些点子在空间排布的总体称为空间点阵，晶体结构=空间点阵+基元；

6、选取固体物理学原胞和结晶学原胞各遵循什么法则？

答：固体学原胞：(1).晶体中体积最小重复单元(2).每个原胞平均包含一个结点(3).原胞选取方式有多种（形状），但体积都相等.

结晶学原胞：(1).晶胞选取要反映晶体的对称性(2).晶胞体积为固体学原胞的数倍(3).每个晶胞中平均包含一个及以上结点)

7、四角晶系中，为何没有底心四角晶胞和面心四角晶胞?

答：在四角晶系中底心四角与简单四角等价，面心四角与体心四角是等价的；（具体画图示意见课件）

8、试说明为什么可以用一组互质的整数来表示晶面？

答：见课件

9、在实际操作中，为什么可以将截距的倒数之比化成互质的整数之比并用它来表示晶面？

答：见课件

10、固体缺陷的种类及特点；

答：见教材及课件

三、综合

1、画出立方晶系中下列晶向和晶面(Miller 指数):

$$[\bar{1}01]、[1\bar{1}0]、[112]、(11\bar{1})、(211)、(1\bar{1}2);$$

见教材作业及相关讲解

2、画出面心立方 Bravaise 格子(简单格子)(100)、(110)、(111)面的原子排列情况，并求出它们的面密度和晶面间距;

见教材作业及相关讲解

3、已知 **GaAs** 中 **Ga** 和 **As** 两原子的最近距离为 a，试求：**(1)**、晶格常数； **(2)**、固体物理学原胞基矢和倒格子原胞基矢；**(3)**、晶面指数为**(325)**的晶面族法线和面间距；**(4)**、晶面指数为**(112)**和**(101)**晶面之间的夹角。**(5)**、密勒指数为**(325)**晶面族的法线和面间距；**(6)**、密勒指数为**(112)**和**(101)**晶面之间的夹角。

(1)、晶格常数

设晶格常数为 d，则：空间对角线长为 $\sqrt{3}d$，则：

$$\sqrt{3}d = 4a \Rightarrow d = \frac{4\sqrt{3}a}{3},$$

(2)、固体物理学原胞基矢和倒格子原胞基矢

设与晶轴 a,b,c 平行的单位矢量分别为 $\vec{i},\vec{j},\vec{k}$，则面心立方正格子原胞基矢可取为：

$$\vec{a}_1=\frac{d}{2}(\vec{j}+\vec{k})=\frac{2\sqrt{3}a}{3}(\vec{j}+\vec{k}),$$

$$\vec{a}_2=\frac{d}{2}(\vec{k}+\vec{j})=\frac{2\sqrt{3}a}{3}(\vec{k}+\vec{j}),$$

$$\vec{a}_3=\frac{d}{2}(\vec{i}+\vec{j})=\frac{2\sqrt{3}a}{3}(\vec{i}+\vec{j}).$$

由倒格矢公式可得其倒格矢为:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{d}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) = \frac{\sqrt{3}\pi}{2a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}),$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{d}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) = \frac{\sqrt{3}\pi}{2a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{d}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) = \frac{\sqrt{3}\pi}{2a}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

(3)、晶面指数为(325)的晶面族法线和面间距

$$\vec{K}_{325}=3\vec{b}_1+2\vec{b}_2+5\vec{b}_3$$

$$=\frac{\sqrt{3}\pi}{a}\left(2\vec{i}+3\vec{j}\right)$$ ——晶面指数为(325)晶面的法线

$$d_{325}=\frac{2\pi}{\sqrt{\vec{K}_{325}}}=\frac{\sqrt{30}}{15}a$$ ——晶面指数(325)晶面的面间距

(4)、晶面指数为(112)和(101)晶面之间的夹角。

晶面指数为(112)和(101)晶面之间的夹角就等于晶面法线的夹角。

$$\vec{K}_{112}=1\vec{b}_1+1\vec{b}_2+2\vec{b}_3=\frac{\sqrt{3}\pi}{a}\left(\vec{i}+\vec{j}\right)$$

$$\vec{K}_{101}=1\vec{b}_1+0\vec{b}_2+1\vec{b}_3=\frac{\sqrt{3}\pi}{a}\vec{j}$$

$$\vec{K}_{112}\bullet\vec{K}_{101}=\left|\vec{K}_{112}\right|\left|\vec{K}_{101}\right|\cos(\theta)$$

夹角 θ 由下式求出:

$$\cos(\theta)=\frac{\vec{K}_{112}\bullet\vec{K}_{101}}{\left|\vec{K}_{112}\right|\left|\vec{K}_{101}\right|}=\frac{1}{2}$$

$$\theta=60^{o}$$

(5)、密勒指数为(325)晶面族的法线和面间距

密勒指数是结晶学原胞基矢下的晶面指数，设沿立方晶系轴 a,b,c 的单位矢量分别为 $\vec{i},\vec{j},\vec{k}$,则正格子基矢为

$$\vec{a}=d\vec{i},\vec{b}=d\vec{j},\vec{c}=d\vec{k},$$

倒格子晶矢为

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{d}\vec{i}, \vec{b}^* = \frac{2\pi}{d}\vec{j}, \vec{c}^* = \frac{2\pi}{d}\vec{k}.$$

与晶面族(hkl)正交的倒格为

$$\vec{K}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*.$$

(325)晶面族的法线方向:

$$\vec{K}_{325} = 3\vec{a}^* + 2\vec{b}^* + 5\vec{c}^* = \frac{2\pi}{d}(3\vec{i} + 2\vec{j} + 5\vec{k})$$

法线方程: $2x = 3y, 5x = 3z$

(325)是密勒指数，则其对应的原胞晶面指数为(785)，面间距

$$d_{785} = \frac{d}{\sqrt{152}} = \frac{d}{2\sqrt{38}} = \frac{2\sqrt{114}}{57}a$$

(6)、密勒指数为(112)和(101)晶面之间的夹角

(112)和(101)晶面法向为:

$$\vec{K}_{112}=1\vec{a}^*+1\vec{b}^*+2\vec{c}^*=\frac{2\pi}{d}(\vec{i}+\vec{j}+2\vec{k})$$

$$\vec{K}_{101}=1\vec{a}^*+0\vec{b}^*+1\vec{c}^*=\frac{2\pi}{d}(\vec{i}+\vec{k})$$

夹角:
$$\cos\theta=\frac{\vec{K}_{112}\bullet\vec{K}_{101}}{\left|\vec{K}_{112}\right|\left|\vec{K}_{101}\right|}=\frac{3}{\sqrt{12}}=\frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\theta=\frac{\pi}{6}$$

4、设二维正三角形晶格相邻原子间距为 a，求：正格子基矢和倒格子基矢；并画出第一布里渊区；

三角的基矢：

$$a=\frac{\sqrt{3}}{2}ai+\frac{a}{2}j,$$
$$b=-\frac{\sqrt{3}}{2}ai+\frac{a}{2}j,$$

晶胞面积：

$$\mathbf{s}=\left|a\times b\right|=\frac{\sqrt{3}}{2}a^2,$$

倒格矢：

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

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

第一布里渊区为以一个倒格点为中心的正六边形