

闪锌矿晶体小论文

王启骅 PB20020580

2023 年 1 月 2 日

1 结构

闪锌矿 ZnS 结构如图 1 所示, S 原子(绿色)位于 $000, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$, Zn 原子(紫色)坐标 $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$

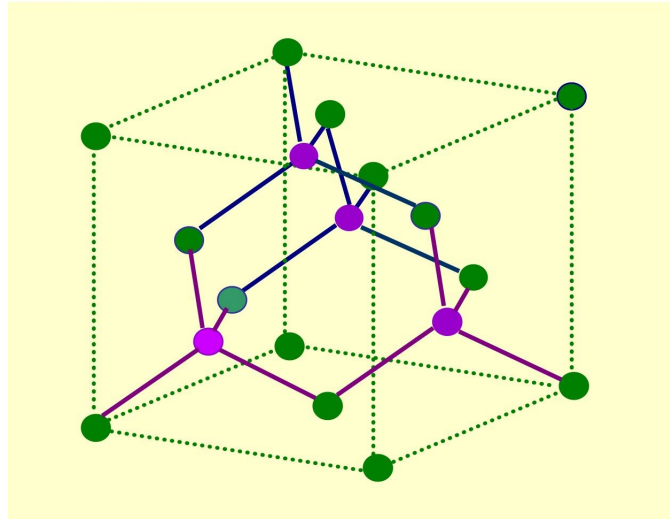


图 1: 闪锌矿结构

可以取如图 2 一个 S 原子连接四个 Zn 原子(由每个 Zn 与 4 个 S 相连, 各占有 $\frac{1}{4}$) 为一个基元, 则可以等效于面心立方点阵。

闪锌矿的原胞如图 3, 连接顶点 S 原子到两个邻近的面心得到原胞基矢。

$$\begin{cases} \vec{\alpha}_1 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} \\ \vec{\alpha}_2 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{z} \\ \vec{\alpha}_3 = \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{a}{2}\hat{z} \end{cases} \quad (1)$$

可见在一个原胞中, 内部包含了一个 Zn 原子, 其余的三个 Zn 原子在原胞外, 且原胞八个顶点的 S 原子各占有 $\frac{1}{8}$, 共有一个 Zn, 一个 S。对应闪锌矿的化学组成 ZnS 。其 Wigner-Seitz 原胞对应于体心立方的布里渊区, 即为正菱形十二面体。

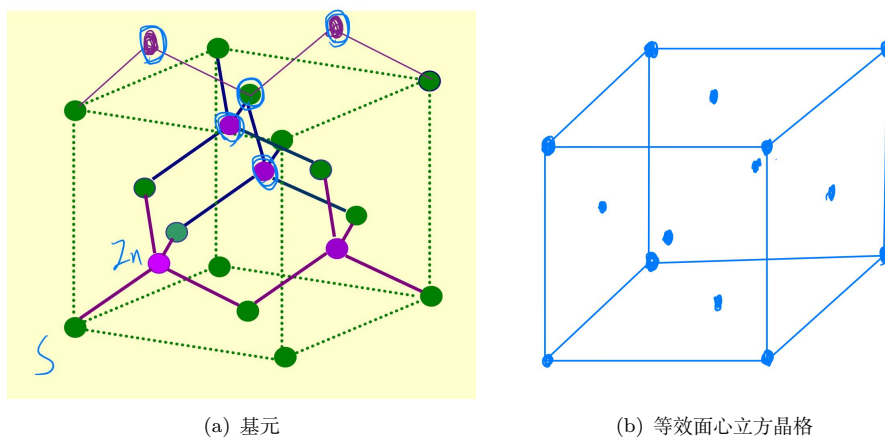


图 2: 基元选取

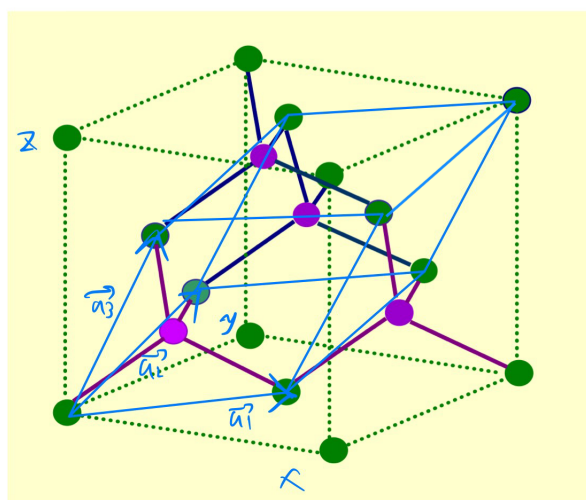


图 3: 原胞

2 对称性

首先对面面心的连线为二重旋转轴，同时也为四重旋转反演轴，共 3 条；体对角线为三重旋转轴，共 4 条。

同时晶格表面的面对角线，与该面面心与对面面心连线轴构成的平面均为反映面，共有 6 个反映面。闪锌矿由不同原子构成，其失去了金刚石原有的四度螺旋轴。

3 倒易点阵与布里渊区

由于基元组成的晶格为面心立方，其倒易点阵为边长为 $\frac{4\pi}{a}$ 的体心立方。倒格子基矢

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \end{cases} \quad (2)$$

对应的第一布里渊区为一个截角八面体如图 4

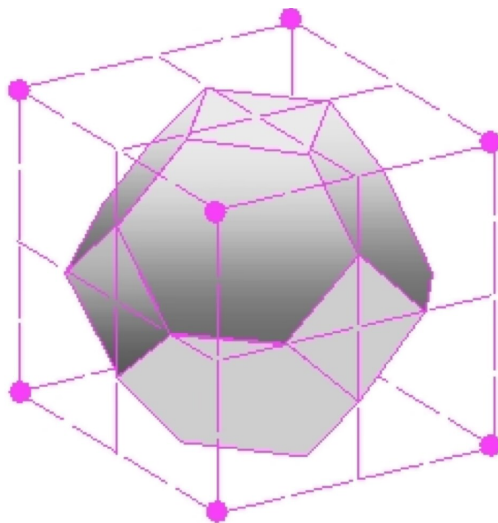


图 4: 第一布里渊区

如图 5 进一步可以推知第二布里渊区为该体心立方本身（次近邻点为紫色，为近邻晶格的体心），第三布里渊区仍为截角八面体（第三近邻点为绿色，为对角晶格的体心）。

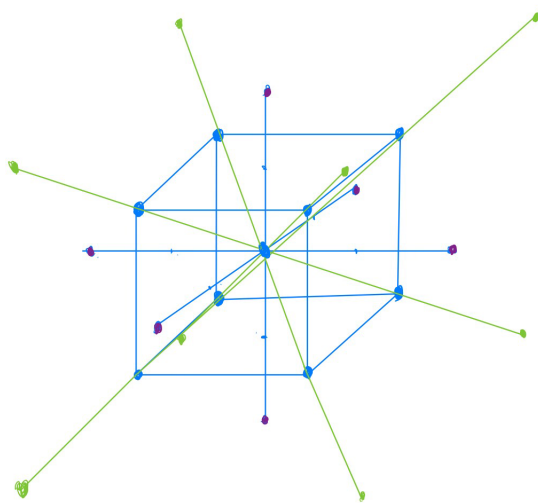


图 5: 第 2、3 布里渊区

4 总结

本文讨论了有关闪锌矿晶体的结构、原胞、对称性、倒易点阵、布里渊区等特点与性质。实际上闪锌矿结构与金刚石类似，主要是基元变为 ZnS ，导致对称性有一定降低。