

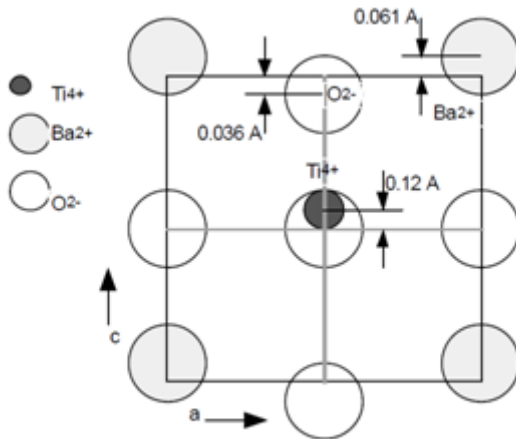
作业 1

1. (1) 画出 O^{2-} 作立方密堆时, 一个晶胞中的八面体空隙和四面体空隙所在位置。
 (2) 一个晶胞中有多少氧原子? 多少个八面体和四面体空隙?
 (3) 请确定在下列情况下需要填入阳离子的价态以及氧离子的配位数。
 (a) 所有的四面体空隙被填满
 (b) 所有的八面体空隙被填满
 (c) 一半的四面体空隙被填满
 (d) 一半的八面体空隙被填满

2. 已知下面的 NaCl 结构的晶体的点阵常数为: MgO, 4.21 Å; MnO, 4.44 Å; CaO, 4.80 Å; MgS, 5.19 Å; MnS, 5.21 Å; CaS, 5.68 Å, 请计算 NaCl 结构中 Ca^{2+} 和 O^{2-} 的 Goldschmidt 半径。

3. $BaTiO_3$ 具有钙钛矿结构, 室温下是一种铁电材料, 具有四方结构。与高温立方相的钙钛矿结构比, 室温下 $BaTiO_3$ 的阴阳离子产生一定位移 (如下图所示, 为一个晶胞沿 a 轴或者 b 轴的投影), 从而产生自发极化。请计算 $BaTiO_3$ 自发极化强度的大小。晶胞参数: $c=4.036 \text{ \AA}$, $a=b=3.992 \text{ \AA}$ 。(提示: 根据大学物理的知识, 极化强度的大小定义为单位体积内偶极矩的和)。

自发极化强度 = 单胞偶极矩 / 单胞体积



Ionic displacements in $BaTiO_3$.

4. 请用硬球密堆来描述岩盐、闪锌矿和反萤石结构的结构特征, 它们的结构的异同点是什么? 对于纤锌矿结构和 NiAs 结构, 它们的异同点又是什么?

5. 我们在讨论布拉菲格子时, 这些格子可看作由原始格子以及原始格子加面心或体心组合而成, 但一些由上述方法简单组合而成的格子不存在。主要原因是一些格子不符合对称性要求或者可简化为另外一种格子。请大家回答下面三个问题:
 (a) 为什么没有立方底心格子? (b) 为什么没有四方面心格子? (c) 为什么没有四方底心格子?

6. 临界半径比的定义是：紧密堆积的阴离子恰好互相接触，并与中心的阳离子也恰好接触的条件下，阳离子半径与阴离子半径之比。即每种配位体的阳、阴离子半径比的下限。计算下列配位的临界半径比：(a) 立方体配位；(b) 八面体配位；(c) 四面体配位；(d) 三角形配位。