

第五章 晶体结构

一、填空题

- 1、属于立方晶系的晶体可抽象出的点阵类型有_____。
- 2、属于正交晶系的晶体可抽象出的点阵类型有_____。
- 3、属于四方晶系的晶体可抽象出的点阵类型有_____。
- 4、点阵是指_____。
- 5、晶体的衍射方向可用以测定晶体的_____数据。
- 6、将金属中的“自由电子”当作三维势箱中运动的电子，试写出它的 Schrodinger 方程。
- 7、在 A1 型堆积中，球数：正四面体空隙数：正八面体空隙数 =_____。
- 8、等径圆球六方最密堆积结构划分出来的六方晶胞的原子分数坐标为_____。
- 9 等径圆球六方最密堆积中密置层的堆积次序可表示为_____。
- 10、已知半径为 r_1 和 r_2 的两种圆球 ($r_1 \neq r_2$)，其最大堆积密度均为 74.05%，所以这两种球混合堆积时最大堆积密度为_____。
- 11、晶体按对称性分，共有_____个晶系。
- 12、NaCl 晶体的空间点阵型式为_____。
- 13、CsCl 晶体的空间点阵型式为_____。
- 14、CsCl 晶体中负离子的堆积型式为_____，正离子填入_____。

空隙中。

15、NaCl 晶体中负离子的堆积型式为_____，正离子填入_____空隙中。

二、选择题

1、有一 AB_4 型晶体，属立方晶系，每个晶胞中有 1 个A和 4 个B， 1 个A的坐标是 $(1/2, 1/2, 1/2)$ ， 4 个B的坐标分别是 $(0, 0, 0)$ ； $(1/2, 1/2, 0)$ ； $(1/2, 0, 1/2)$ ； $(0, 1/2, 1/2)$ ， 此晶体的点阵类型是

- (A) 立方 P (B) 立方 I
(C) 立方 F (D) 立方 C

2、A1 型密堆积的空间点有率为。

- (A) 34.01% (B) 68.02% (C) 71.05% (D) 100%

3、估计下列化合物的熔点和硬度的变化次序正确的为

- (A) $KCl < NaCl < MgS < MgO < SiC$
(B) $SiC < KCl < NaCl < MgO < MgS$
(C) $KCl < NaCl < SiC < MgO < MgS$
(D) $NaCl < KCl < MgO < MgS < SiC$

4、晶体的宏观对称元素（独立的）只有几种

- (A) 32 (B) 8 (C) 14 (D) 230

5、面心立方金属晶体的一个晶胞中，正四面体空隙数与正八面体空隙数分别为

- (A) 4, 1 (B) 8, 1 (C) 8, 4 (D) 4, 2

6、晶体不可能属于的点群是

- (A) D_{3h} (B) O_h (C) D_{5h} (D) T_d

三、简答题

- 1、晶胞两个要素的内容是什么？各用什么表示？
- 2、简述晶体结构和点阵这两者之间的关系。
- 3、写出晶体衍射的 Bragg 方程，说明各个符号的意义。
- 4、为什么有立方面心，而无四方面心点阵型式？
- 5、什么是结晶化学定律？
- 6、衍射指标和晶面指标有何区别与联系？

四、计算题

- 1、已知金属 Ni 为 A1 型结构，原子间最近接触距离为 249.2pm，试计算立方晶胞的边长以及金属 Ni 的密度。
- 2、试计算立方体心密堆积的空间占有率？
- 3、确定 A2 型堆积的消光规律。
- 4、试计算 A1 型堆积的空间占有率。