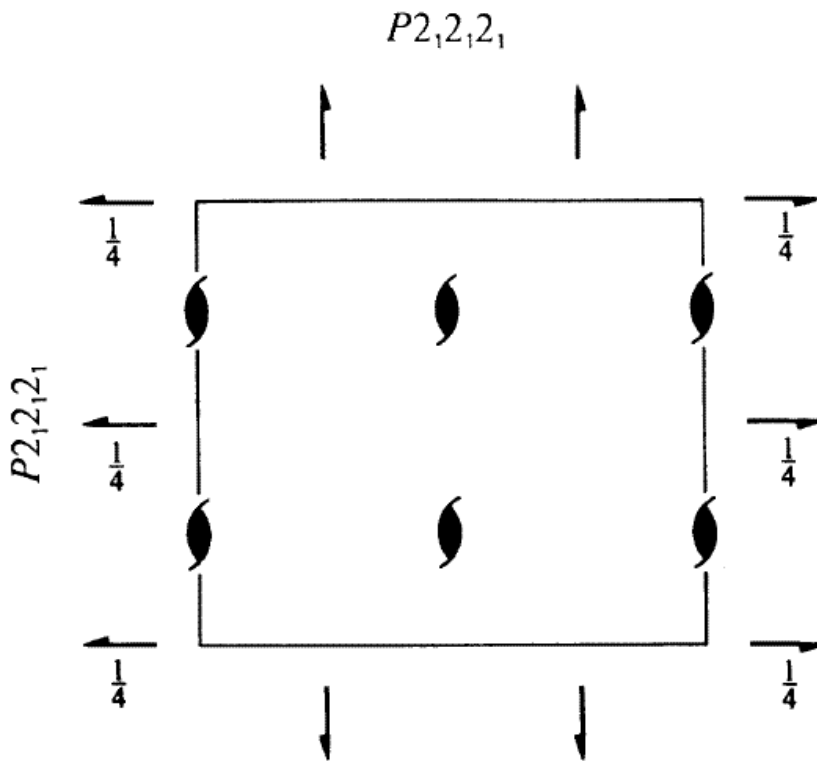
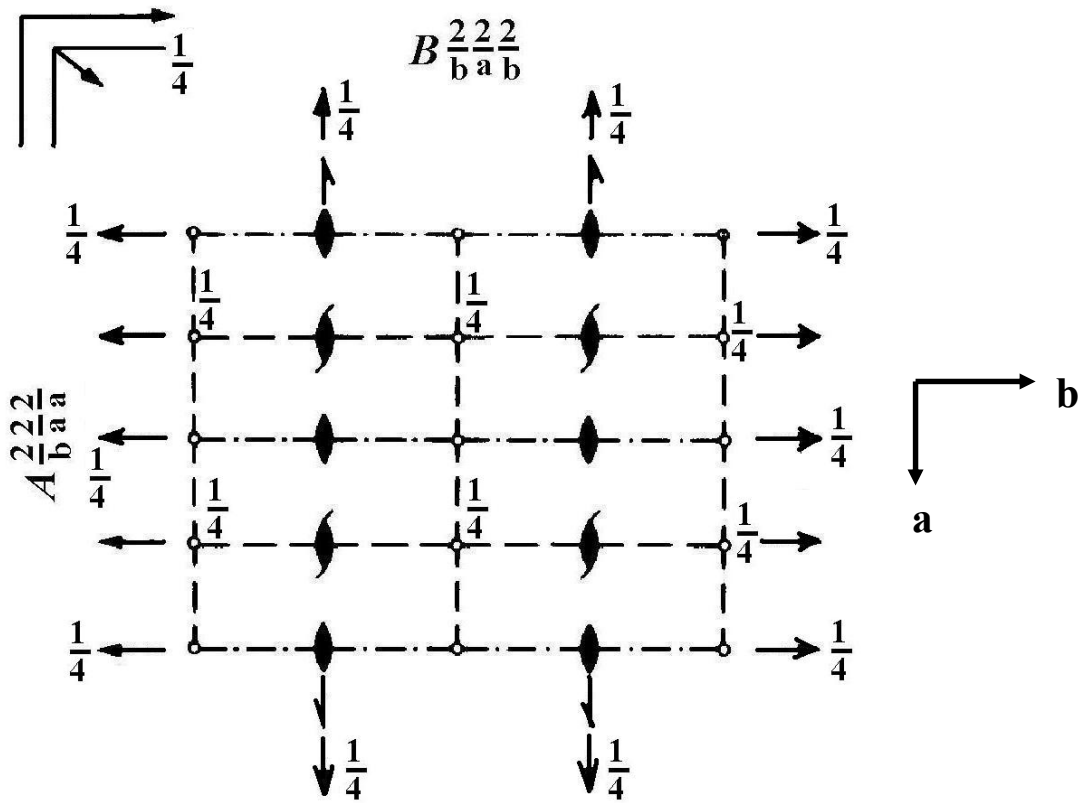
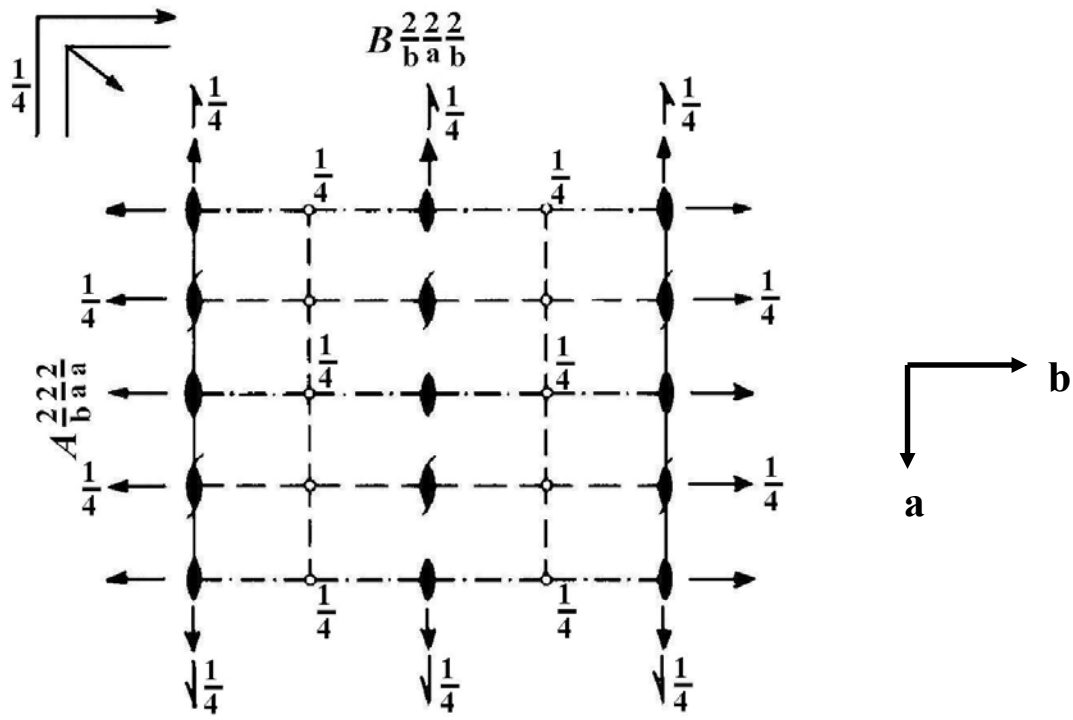


晶体学导论（第三次作业）(2009.12.12):

1、已知第 19 号空间群 $P2_12_12_1$ 的对称要素分布如下所示。如按下列方式推导 $2_{1//a} \cdot 2_{1//b} = 2_{//a} \cdot a/2 \cdot 2_{//b} \cdot b/2 = 2_{//c} \cdot (a+b)/2 = 2_{//c} \cdot (a+b)/4$ 可得在 $(a+b)/4$ 处有一 2 次旋转轴，而下图表明应为 2_1 螺旋轴？为什么？



2、根据下图的对称要素分布情况，分别推导出空间群 $Bbab$ (No.68) 的一般等效点系位置坐标。其中图一原点选在 222 [Origin at 222 at $2/n 2/n 2$, at $0, 1/4, 1/4$ from -1 .], 图二原点选在 -1 [Origin at -1 at $n c a$, at $0, -1/4, -1/4$ from 222 .], 请说明新《国际表》为什么要将 $Bbab$ 转换为 $Bbeb$?



3、已知 $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$ 的晶胞参数为 $a=6.3704$, $b=5.4359$, $c=5.0274$, 空间群为 $\text{Pmn}2_1$, 该空间群的一般等效点系位置为: 1. x, y, z ; 2. $-x+0.5, -y, z+0.5$; 3. $x+0.5, -y, z+0.5$; 4. $-x, y, z$ 。原子坐标如下表所示:

atoms	X	Y	Z
Mn1	0.0	0.16543	0.43950
Li1	0.24904	0.33102	0.94280
Si1	0.0	0.81908	0.95034
O1	0.21236	0.67786	0.83739
O2	0.0	0.11265	0.85559
O3	0.0	0.81078	0.27915

如该结构形成有序化排律, b 轴扩大一倍, 形成超晶胞。超晶胞的空间群为 $\text{Pmn}2_1$ 的子群 $\text{Pna}2_1$ 。新晶胞的晶胞参数为: $a=10.8718$, $b=6.3704$, $c=5.0274$, 空间群为 $\text{Pna}2_1$ (即原 b 轴扩大一倍并与 a 轴位置互换), 已知子群 $\text{Pna}2_1$ 的一般等效点系位置为: 1. x, y, z ; 2. $-x, -y, z+0.5$; 3. $x+0.5, -y+0.5, z$; 4. $-x+0.5, y+0.5, z+0.5$ 。求新晶胞可能的原子坐标位置?

晶体学导论（第二次作业）:

(2009.12.04,周五)

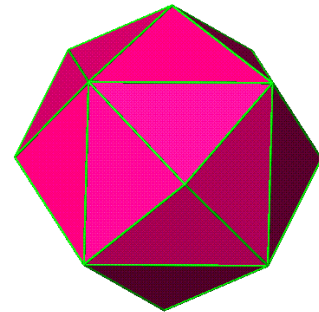
1、在 X 射线衍射中，晶体外形经常会导致晶体择优取向。如//c 轴的针状晶体的择优取向，我们只可以得到 $hk0$ 的系列衍射点。今有一立方晶系晶体，如晶体择优取向的方向为 $[1-10]$ 和 $[1-11]$ ，请问各可获得哪些可能的衍射点？(提示：即分别求与 $[1-10]$ 和 $[1-11]$ 垂直的方向，只写出衍射指数 ≤ 4 的衍射点)。

2、依据第三章第一节讲义的方式推导点群 23 的 7 种不同位置的单形？

3、填写完成下列表格中，单形的名称。并讨论下列每一种几何单形的角顶数、晶棱数、晶面数。同时讨论每一几何单形中，存在角顶的类型，并说明每种角顶周围存在多少个晶面和晶棱，并计算其晶面间的交角？

点群	{100}	{110}	{111}	{210}	{211}	{221}	{321}
23							
m3							
-43m							
432							
m-3m							

(说明：讨论角顶类型，是指同一单形中有多少种不同的角顶，如下图四六面体，共有两种角顶，一种是由四个面及四条棱形成的，它具有四次对称；另一种是由六个面及六条棱形成的，它具有三次对称)



4、上一次作业推导了 $4/mmm$ 和 $-6m2$ 的全部矩阵。如有 $\{110\}$ (或 $\{11-20\}$) 和 $\{211\}$ (或 $\{21-31\}$) 两种单形，请分别写出这些单形的名称，各有多少个晶面，这些晶面的符号分别是什么？是否可以套用上一次作业推导的矩阵写出这些晶面符号？为什么？用 shape 程序画出其聚形。

(用到的相关程序密码:

WINWULFF 1.1.0 注册码: jjdg_98812994

SHAPE.EXE 注册码: WVG-EYXZK)

晶体学导论 (第一次作业):

(2009.10.30,周五)

一、查找、阅读资料,综述晶体生长的主要方法有哪些?其特点(优、缺点)各为什么?下列化合物(或单质)NaCl、MgCO₃、Si、Al₂O₃、MgSiO₃、CaF₂、SiC、TiO₂、Ce₂(SO₄)₃等各适合于什么方法生长,为什么?(平时作业作为期末成绩的重要组成部分,请认真独立完成,同学间作业不得相互参考,严禁雷同!)

二、问:在课堂或讲稿中较详细地介绍并推导了旋转轴及对称面在 a、b、c 三个方向上的矩阵公式。你能否通过类似的图示法简单地推导出等轴晶系平行 [110](即 ab 夹角)方向的 2 旋转轴和垂直该二次轴对称面的矩阵? [111](体对角线方向)的三次旋转轴的矩阵?

三、请推导 S₃ 的乘法表。

S ₃	E	(12)	(23)	(13)	(123)	(132)
E						
(12)						
(23)						
(13)						
(123)						
(132)						

四、设 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ 是实对称矩阵,求正交矩阵 Q 使 Q⁻¹AQ 为对角

矩阵。

五、推导 -62m 和 -6m2 的全部矩阵,并比较两者之差异。

六、Briefly introduce the following scientists using your words in English, and answer the questions that who they are and what their major contributions are: Nicholas Steno, William Hyde Wollaston, Renè Just Haiÿ, Christian Samuel Weiss, William Hallows Miller, Auguste Bravais, Arthur Moritz Schöflies.