固体物理概念题和习题指导

3. 先计算出晶体的原胞体积

$$\Omega = a_1\cdot(a_2\times a_3) = \frac{a^3}{2}$$

由原胞的体积推断，晶体结构为体心立方.

构造新的矢量

$$u = a_3 - a_1 = \frac{a}{2}(-i+j+k)$$
$$v = a_3 - a_2 = \frac{a}{2}(i-j+k)$$
$$w = a_1 + a_2 - a_3 = \frac{a}{2}(i+j-k)$$

u, w, v 对应体心立方结构. u, v, w 满足选作基矢的充分条件

可见基矢为 $a_1 = ai$，$a_2 = aj$，$a_3 = \frac{a}{2}(i+j-k)$ 的晶体为体心立方结构.

若 $a_3 = \frac{a}{2}(j+k) + \frac{3a}{2}i$

$$\Rightarrow \Omega = a_1\cdot(a_2\times a_3) = \frac{a^3}{2}$$

该晶体仍为体心立方结构

4. 若 $R_{l_1l_2l_3}$ 与 R_{hkl} 平行，R_{hkl} 一定是 $R_{l_1l_2l_3}$ 的整数倍. 对体心立方结构，由

$$a_1 = \frac{1}{2}(-a+b+c),\quad a_2 = \frac{1}{2}(a-b+c),\quad a_3 = \frac{1}{2}(a+b-c)$$

推导有 $a = a_2 + a_3$，$b = a_3 + a_1$，$c = a_1 + a_2$

$$R_{hkl} = ha + kb + lc = (k+l)a_1 + (l+h)a_2 + (h+k)a_3 = pR_{l_1l_2l_3}$$
$$= p(l_1a_1 + l_2a_2 + l_3a_3)$$

其中 p 是 $(k+l)$、$(l+h)$ 和 $(h+k)$ 的公约（整）数

对于面心立方结构，由面心立方原胞的选取方式之一

$$a_1 = \frac{1}{2}(b+c),\ a_2 = \frac{1}{2}(c+a),\ a_3 = \frac{1}{2}(a+b)$$

可知 $a = -a_1 + a_2 + a_3$，$b = a_1 - a_2 + a_3$，$c = a_1 + a_2 - a_3$，

$$R_{hkl} = ha + kb + lc$$
$$= (-h+k+l)a_1 + (h-k+l)a_2 + (h+k-l)a_3$$
$$= p'R_{l_1l_2l_3}$$
$$= p'(l_1a_1 + l_2a_2 + l_3a_3)$$

其中 p' 是 $(-h+k+l)$，$(h-k+l)$ 和 $(h+k-l)$ 的公约（整）数.

5. 晶面族 (123) 截 a_1, a_2, a_3 分别为 1, 2, 3 等分，ABC 面是离原点 O 最近的晶面，OA 的长度等于 a_1 的长度，OB 的长度等于 a_2 的长度的 $\frac{1}{2}$，OC 长度等于 a_3 长度的 $\frac{1}{3}$，所以只有 A 点是格点. 若 ABC 面的指数为 (234) 的晶面族，则 A、B 和 C 都不是格点.

6. 如果 3 者属于一个晶带，则由它们构成的行列式的值必定为 0，可以验证

$$\begin{vmatrix} \bar{2} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{vmatrix} = 0$$

说明 $(\bar{2}10)$、$(\bar{1}11)$ 和 (012) 属于同一晶带.

晶带中任两晶面交线的方向即是带轴的方向

$$l_1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 1,\quad l_2 = \begin{vmatrix} 0 & \bar{2} \\ 1 & \bar{1} \end{vmatrix} = 2,\quad l_3 = \begin{vmatrix} \bar{2} & 1 \\ \bar{1} & 1 \end{vmatrix} = -1$$

所以，带轴方向晶列 $[l_1l_2l_3]$ 的取值为 $[1, 2, -1]$

7. 带轴为 [001] 的晶带各晶面平行于 [001] 方向，即各晶面平行于晶胞坐标系的 c 轴或原胞坐标系的 a_3 轴，各晶面的面指数形为 (hk0) 或 (h_1h_20)，即第三个数字一定为 0

8. 正格子与倒格子互为倒格子

正格子晶面 $(h_1h_2h_3)$ 与倒格式 $K_h = h_1b_1 + h_2b_2 + h_3b_3$ 垂直，则倒格晶面 $(l_1l_2l_3)$ 与正格矢 $R_l = l_1a_1 + l_2a_2 + l_3a_3$ 正交.

即晶列 $[l_1l_2l_3]$ 与倒格面 $(l_1l_2l_3)$ 垂直.

9. 在结晶学中，晶胞选取既要考虑晶体结构的周期性又要考虑晶体的宏观对称性.

10. (1) 六角晶系　中间层的原子不等同，虽然为同种原子，但不是几何等价原子

(2) 复式格子　受力方位不同的原子几何结构不等价

11. 结晶学晶胞，基矢为 a, b, c，只考虑由格矢 $R = ha + kb + lc$ 构成的格点. 因此，体心立方元素晶体 [111] 方向上的结晶学周期为 $\sqrt{3}a$，实际周期为 $\sqrt{3}a/2$.

12. 面心立方元素晶体中最小的晶列周期为多大？该晶列在哪些晶面内？

周期小的晶列一定在原子面密度最大的晶面内. 若以密堆积模型，则原子面密度最大的晶面就是密排面

密勒指数 (111) 是一个密排面晶面族，最小的晶列周期为 $\frac{\sqrt{2}a}{2}$.

根据同族晶面族的性质，周期最小的晶列处于 {111} 面内.

13. 原子间距的数量级为 $10^{-10}m$，要使原子晶格成为光波的衍射光栅，光波的波长应小于 $10^{-10}m$，但可见光波长为 $7.6\sim4.0\times10^{-7}m$，是晶体中原子间距的 1000 倍. 因此，在晶体衍射中，不能用可见光.

14. 对于同级衍射，高指数的晶面族衍射光弱，低指数的晶面族衍射光强. 低指数的晶面族间距大，晶面上的原子密度大，这样的晶面对射线的反射衍射强. 相反，高指数的晶面族面间距小，晶面上的原子密度小，这样的晶面对射线的反射（衍射）作用弱. 另外，由布拉格反射公式

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$$

可知，面间距 d_{hkl} 大的晶面，对应一个小的光的掠射角 θ.

面间距 d_{hkl} 小的晶面，对应一个大的光的掠射角 θ.

θ 越大，光的透射能力越强，反射能力就越弱.

15. 温度升高，热膨胀，面间距 d_{hkl} 逐渐变大，由布拉格反射公式

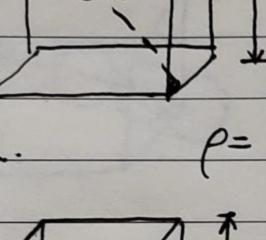
$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$$

可知：对应同一级衍射，当 X 光波长不变时，面间距 d_{hkl} 逐渐变大，衍射角 θ 逐渐变小. 所以温度升高，衍射角变小.

当温度不变，X 光波长变大时，对于同一晶面族，衍射角 θ 随之变大

习题 1.

(1).



简立方晶胞

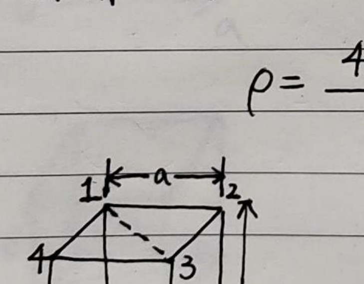
设 n 为一个晶胞中的刚性原子球数，r 表示刚性原子球半径，V 表示晶胞体积，则致密度

$$\rho = \frac{n\frac{4}{3}\pi r^3}{V}$$

对简立方晶体，一个原子有 6 个最近邻.

$a = 2r$，$V = a^3$ $\Rightarrow$ $$\rho = \frac{1\times\frac{4}{3}\pi\times r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{8r^3} = \frac{\pi}{6}$$

(2)

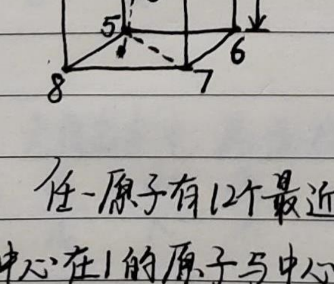


空间对角线长度为 $\sqrt{3}a = 4r$

$V = a^3$，包含 2 个原子.

所以. $$\rho = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8}$$

(3).

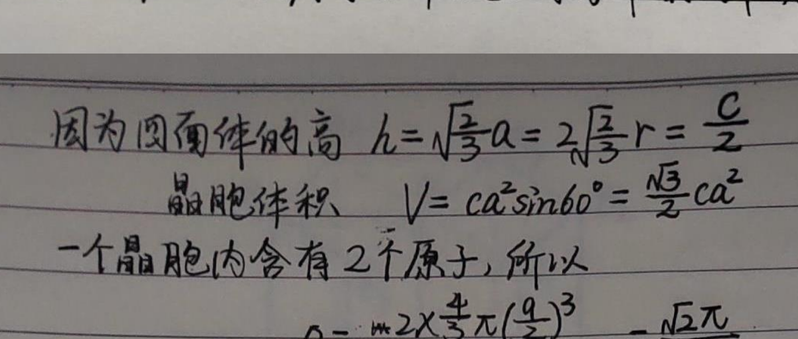


中心位于角顶的原子 0 与相邻的 3 个面心 1, 2, 3 原子球相切.

因为 $\sqrt{2}a = 4r$，$V = a^3$，1 个晶胞内包含 4 个原子，所以

$$\rho = \frac{4\times\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{2}a}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6}$$

(4)



任一原子有 12 个最近邻，若原子以刚性球堆积，如图所示.

中心在 1 的原子与中心在 2, 3, 4 的原子相切，中心在 5 的原子与中心在 6, 7, 8 的原子相切，晶胞内原子 O 点与中心在 1, 3, 4, 5, 7, 8 处的原子相切，即 O 点与中心在 5, 7, 8 处的原子分布在正四面体的四个顶上.

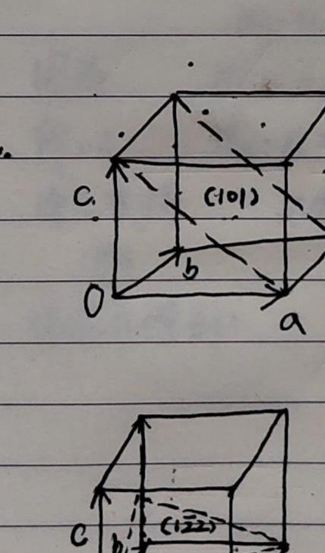
因为四面体的高 $h = \sqrt{\frac{2}{3}}a = 2\sqrt{\frac{2}{3}}r = \frac{c}{2}$

晶胞体积 $V = ca^2\sin60° = \frac{\sqrt{3}}{2}ca^2$

一个晶胞内含有 2 个原子，所以

$$\rho = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3}{\frac{\sqrt{3}}{2}ca^2} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6}$$

(5)

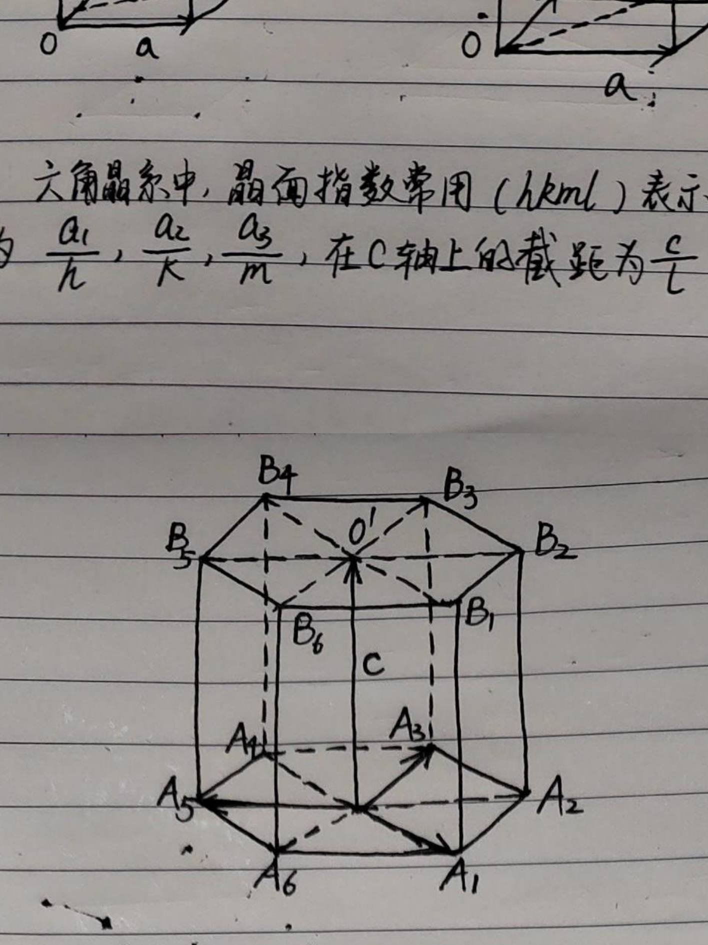


中心在空间对角线四分之一处的 O 原子与中心在 1, 2, 3 处的面心原子及 4 处的角顶原子相切. 因为

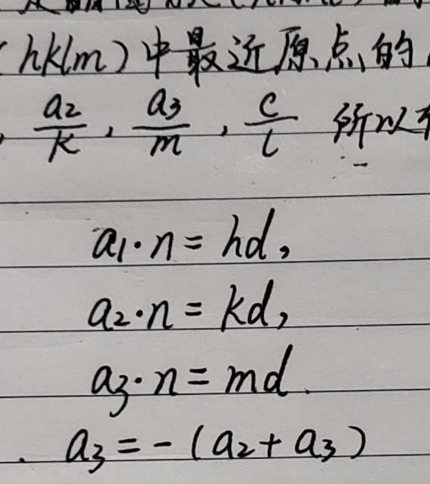
$\sqrt{3}a = 8r$，$V = a^3$

$$\rho = \frac{8\times\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}a}{8}\right)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{16}$$

2.



3. 六角晶系中，晶面指数常用 (hkml) 表示，代表一个晶面在基矢的截距分别为 $\frac{a_1}{h}$，$\frac{a_2}{k}$，$\frac{a_3}{m}$，在 C 轴上的截距为 $\frac{c}{l}$



设 d 是晶面族 (hkml) 的面间距，n 是晶面族的单位法矢量. 晶面族 (hklm) 中最近原点的晶面在 a_1, a_2, a_3、C 轴上的截距分别为 $\frac{a_1}{h}$，$\frac{a_2}{k}$，$\frac{a_3}{m}$，$\frac{c}{l}$ 所以有

$$a_1\cdot n = hd,$$
$$a_2\cdot n = kd,$$
$$a_3\cdot n = md.$$

因为 $a_3 = -(a_2 + a_3)$

所以 $a_3\cdot n = -(a_2 + a_3)\cdot n$

由上式得 $md = -(hd + kd)$

即 $m = -(h+k)$

由图可得到：$O'A_1A_3$ 晶面的面指数为 $(11\bar{2}1)$

$A_1A_3B_3B_1$ 晶面的面指数为 $(11\bar{2}0)$

$A_2B_2B_5A_5$ 晶面的面指数为 $(1\bar{1}00)$

$A_1A_3A_5$ 晶面的面指数为 (0001)