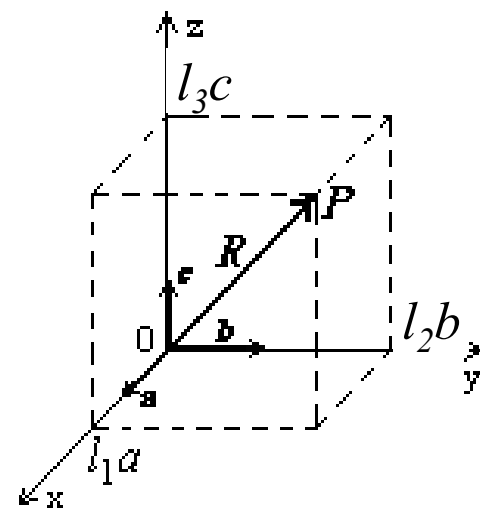
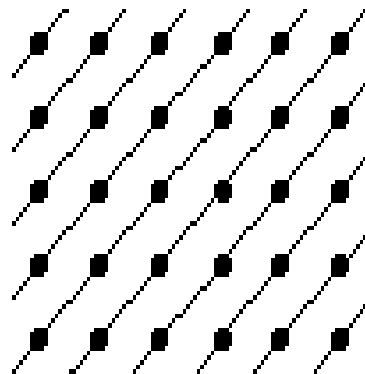
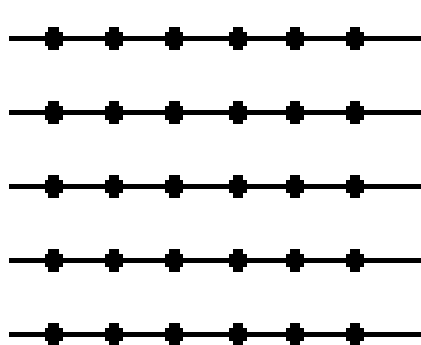


2.1 晶体结构¹⁹

2.1.4 晶面指数系统

• 晶列、晶向、晶面

- 晶列：点阵中的所有阵点全部位于一系列相互平行的直线上，这些直线系称为晶列。



- 晶向：表示晶列的方向

从一个阵点O沿某个晶列到另一阵点P作位移矢量

$$\vec{R} = l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c}$$

$$l_1 : l_2 : l_3 = m : n : p$$

2.1 晶体结构₂₀

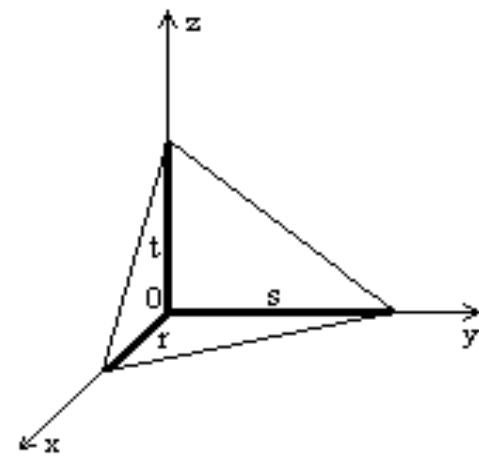
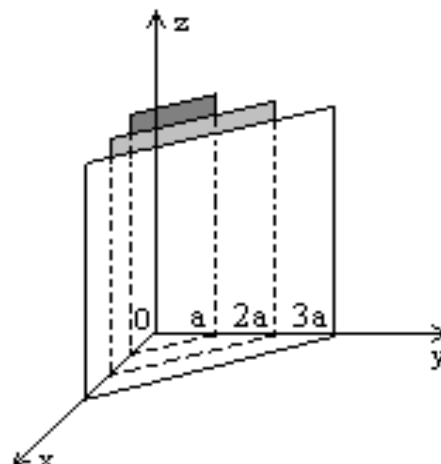
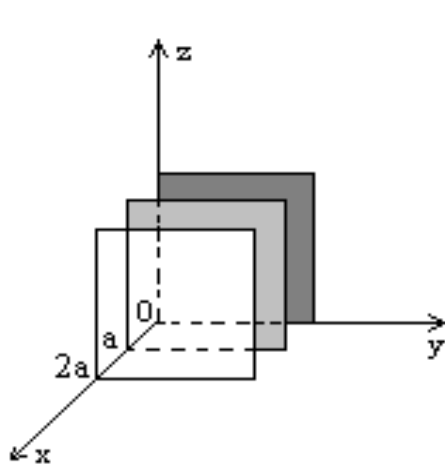
– 晶向指数 $[mnp]$: 晶向矢量在三晶轴上投影的互质整数

同类晶向记为 $\langle mnp \rangle$

$\langle 100 \rangle$ 代表了 $[100]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[010]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[001]$ 、 $[00\bar{1}]$

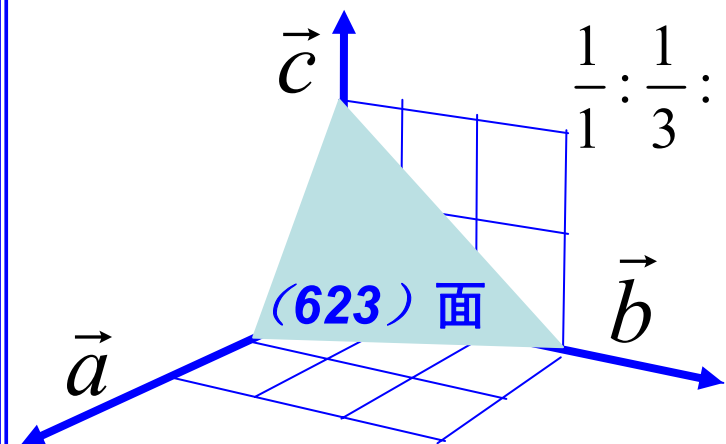
$\langle 111 \rangle$ 对角线的8个晶向； $\langle 110 \rangle$ 代表12个面对角线的晶向

– 晶面：点阵中的所有阵点全部位于一系列相互平行等距的平面上，这样的平面系称为晶面。

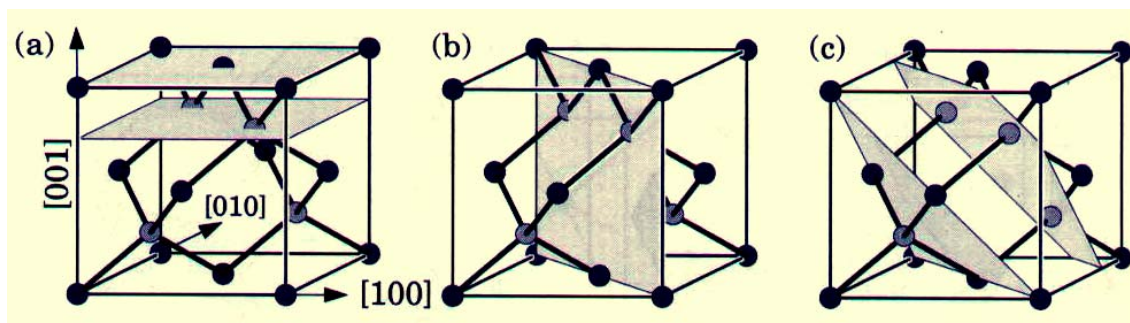


2.1 晶体结构₂₁

- 晶面指数(hkl): h、k、l是晶面与三晶轴的截距r、s、t的倒数的互质整数，也称为密勒指数。



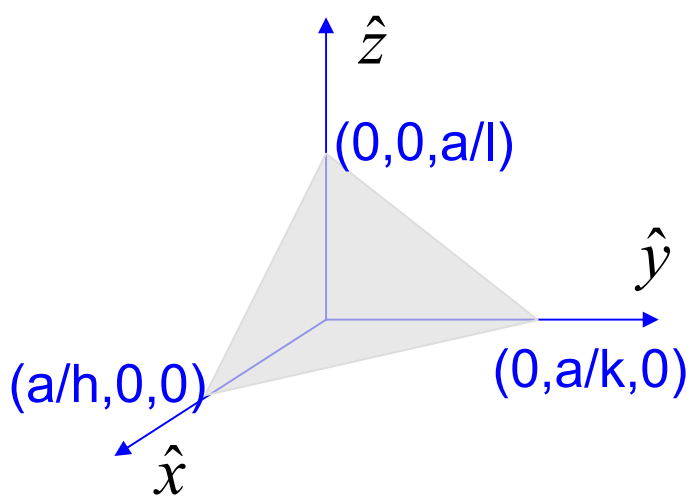
$$\frac{1}{1} : \frac{1}{3} : \frac{1}{2} = 6 : 2 : 3$$



- 1、找出在轴a, b, c上，以点阵常数量度的截距。这些轴可以是初基的也可以是非初基的；
- 2、取这些截距地倒数，然后化成与之具有同样比率的三个互质整数，将结果写在括号里 (hkl) ；
- 3、截距为无限大，相应的指数就是零；
- 4、若一个晶面截晶轴与原点的负侧，则相应的指数就是负的，在其上方放置负号作为标记，例如 $(h\bar{k}l)$

2.1 晶体结构₂₂

- 练习：证明在立方晶体中， $[hkl]$ 晶向垂直于 (hkl) 晶面



平面方程

$$\frac{x}{a/h} + \frac{y}{a/k} + \frac{z}{a/l} = 1$$

$$hx + ky + lz - a = 0$$

$$\vec{n} = h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z}$$

$$\vec{R} = ha\hat{x} + ka\hat{y} + la\hat{z}$$

平面法矢量

$$\vec{R} \times \vec{n} = 0$$

晶向矢量

$$\vec{R} \parallel \vec{n}$$

2.1 晶体结构₂₃

• 练习题提示

3° 平面及其方程

已知平面 π 过点 $M_0 (x_0, y_0, z_0)$, $\bar{n} = \{A, B, C\}$ 为 π 的法矢量。

1> 点法式: $A(x-x_0) + B(y-y_0) + C(z-z_0) = 0$

2> 一般式: $Ax + By + Cz + D = 0$, A, B, C 不全为零。

3> 截距式: $\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1$, a, b, c 分别为平面在 x 轴、 y 轴、 z 轴上的截距。

$$\pi_1 \perp \pi_2 \quad \Leftrightarrow \quad \bar{n}_1 \perp \bar{n}_2$$

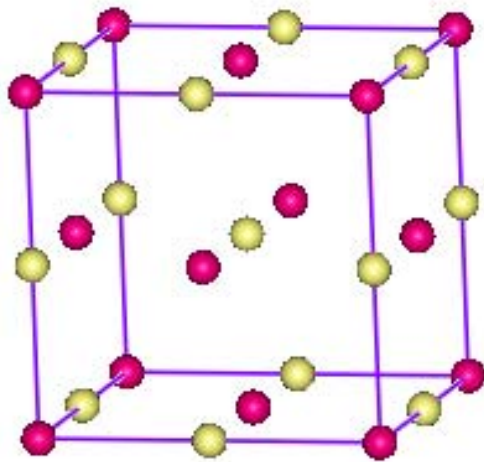
$$\pi_1 // \pi_2 \quad \Leftrightarrow \quad \bar{n}_1 // \bar{n}_2$$

点 $M_0(x_0, y_0, z_0)$ 到平面 $Ax + By + Cz + D = 0$ 的距离为

$$d = \frac{|Ax_0 + By_0 + Cz_0 + D|}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}}$$

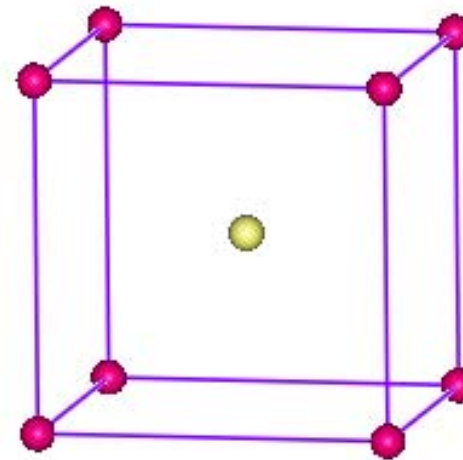
2.1 晶体结构₂₄

2.1.5 常见晶体结构范例



NaCl 结构

面心立方 + NaCl

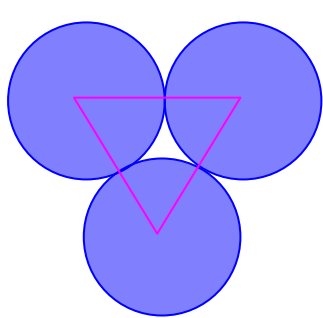
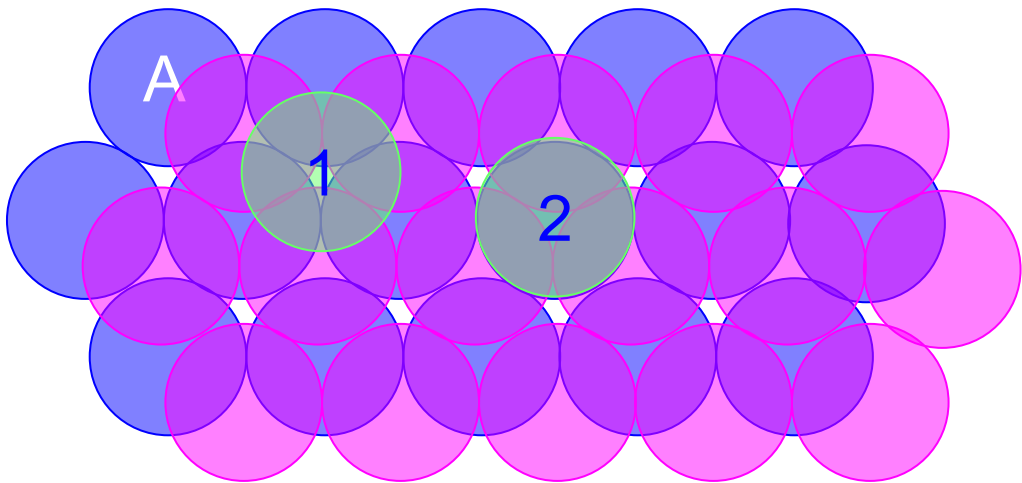


CsCl 结构

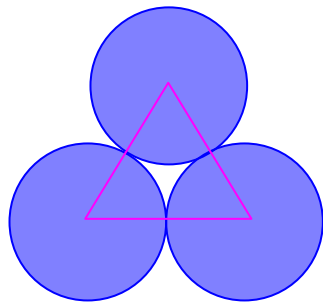
简单立方 + CsCl

2.1 晶体结构₂₅

2.1.5 常见晶体结构范例



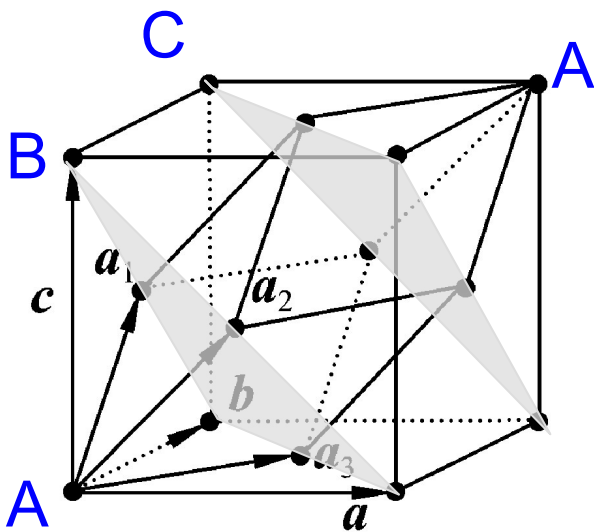
位置B



位置C

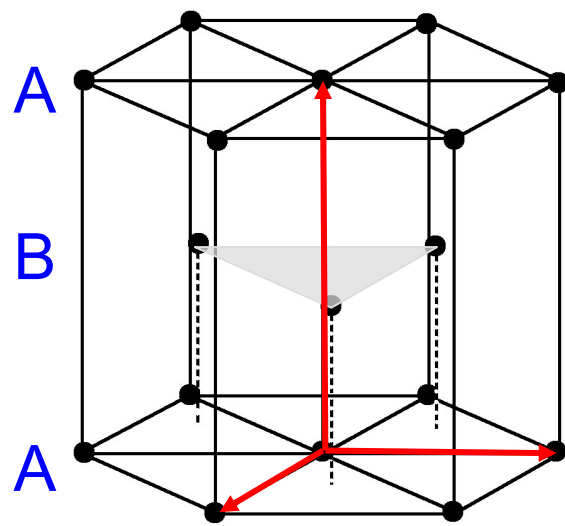
$$c/a = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$

1



面心立方

2



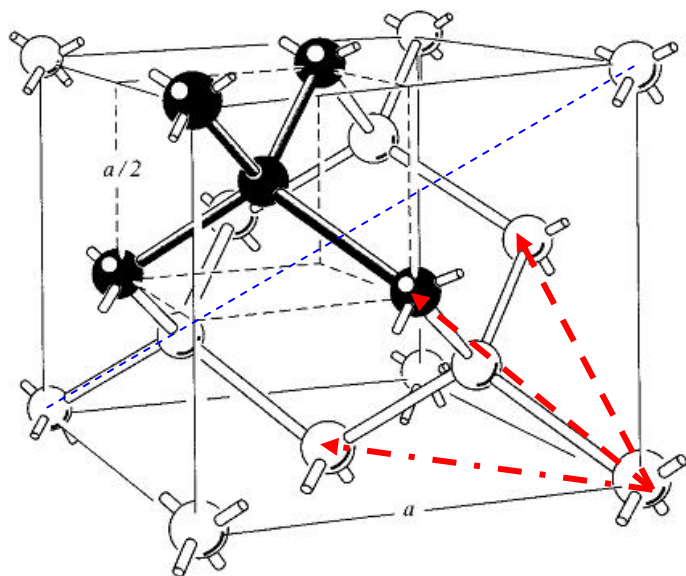
六角密堆积结构 (He晶体)

2.1 晶体结构₂₆

2.1.5 常见晶体结构范例

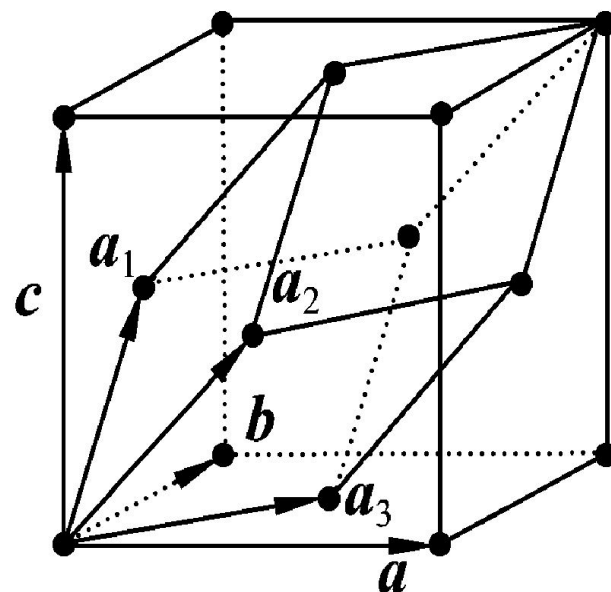
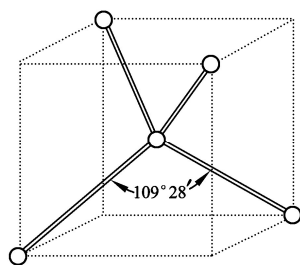
简单点阵：基元只有一个原子

复式点阵：基元有一个以上原子



Si金刚石结构

面心立方+2Si原子

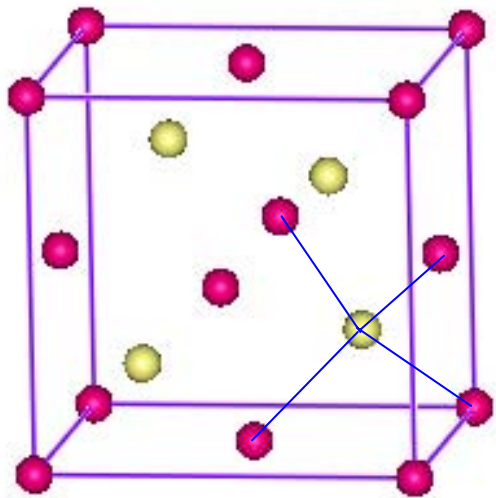


面心立方

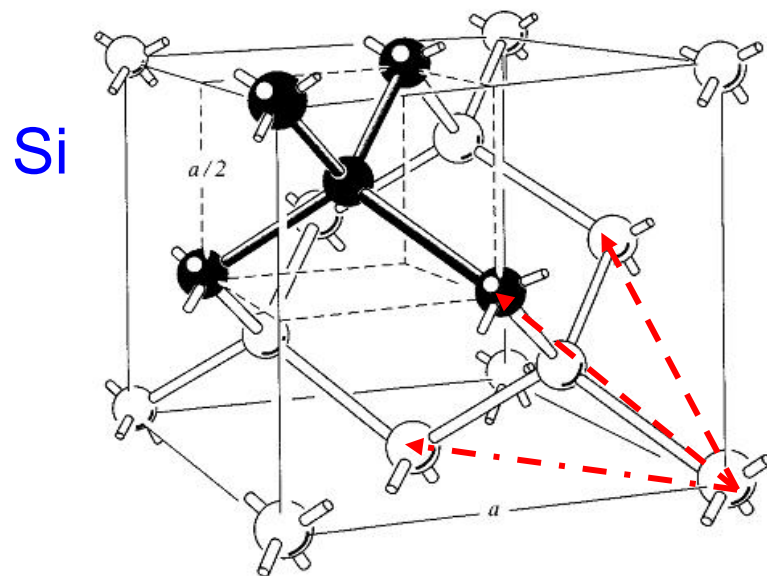
Si:两套面心立方点阵沿对角线平移1/4套构而成;

2.1 晶体结构₂₇

2.1.5 常见晶体结构范例



闪锌矿结 (**ZnS**) :
GaAs,



Si:两套面心立方点阵沿对角线平移1/4套构而成;将其中一套点阵换成Zn, 另一套换成S, 即为闪锌矿结构

第二章 固体物理导论

2.1 晶体结构

2.2 晶体衍射和倒易点阵

2.3 自由电子费米气体

2.4 能带

2.5 半导体晶体

2.2 晶体衍射和倒易点阵¹

我们首先问一个晶体：“原子位于何处？”这一章所叙述的方法告诉我们怎样描绘原子分布和围绕原子的电子分布。

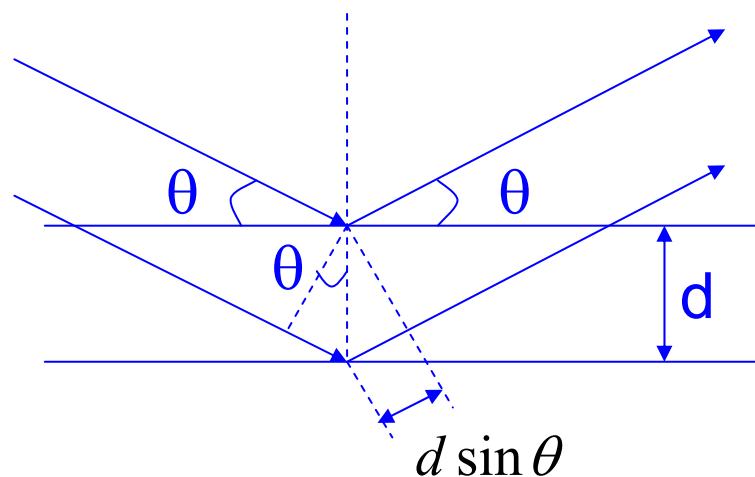
2.2 晶体衍射和倒易点阵₂

2.2.1 布喇格定律

— 假设入射波从晶体中的平行原子平面作镜面式反射，每个平面只反射很少一部分辐射，象一个微微镀银的镜子一样；

— 当来自这些平行原子平面的反射发生相长干涉时，就会得出衍射束。

— 假设为弹性散射，反射后X射线的能量不改变



$$2d \sin \theta = n\lambda$$

— 只对某些 θ 值，才会产生强反射束

— 点阵**周期性**导致布喇格定律

2.2 晶体衍射和倒易点阵₃

2.2.2 倒易点阵

— 晶体性质的周期性

$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

- 在晶体平移操作 \mathbf{T} 作用下，晶体的任何物理性质都不变
- 电荷浓度、电子数密度、质量密度和磁矩密度在 \mathbf{T} 作用下不变
- 电子数密度 $n(\mathbf{r})$ 是 \mathbf{r} 的周期性函数，存在 $n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$

2.2 晶体衍射和倒易点阵⁴

2.2.2.1 傅立叶分析

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$$

- 晶体的大部分性质都可以同电子密度的傅立叶分量联系起来
- 以周期为 a 的一维周期函数 $n(x)$ 的处理为例
- 将 $n(x)$ 展开为含有余弦和正弦的傅立叶级数

$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi p x / a) + S_p \sin(2\pi p x / a)]$$

- p 是正整数； C_p 、 S_p 是实常数，称为展开式的傅立叶系数
- 幅角中的 $2\pi/a$ 保证 $n(x)$ 具有周期 a ，即 $n(x+a)=n(x)$
- $2\pi p/a$ 被称为晶体的倒易点阵中或傅立叶空间中的一个点

2.2 晶体衍射和倒易点阵⁵

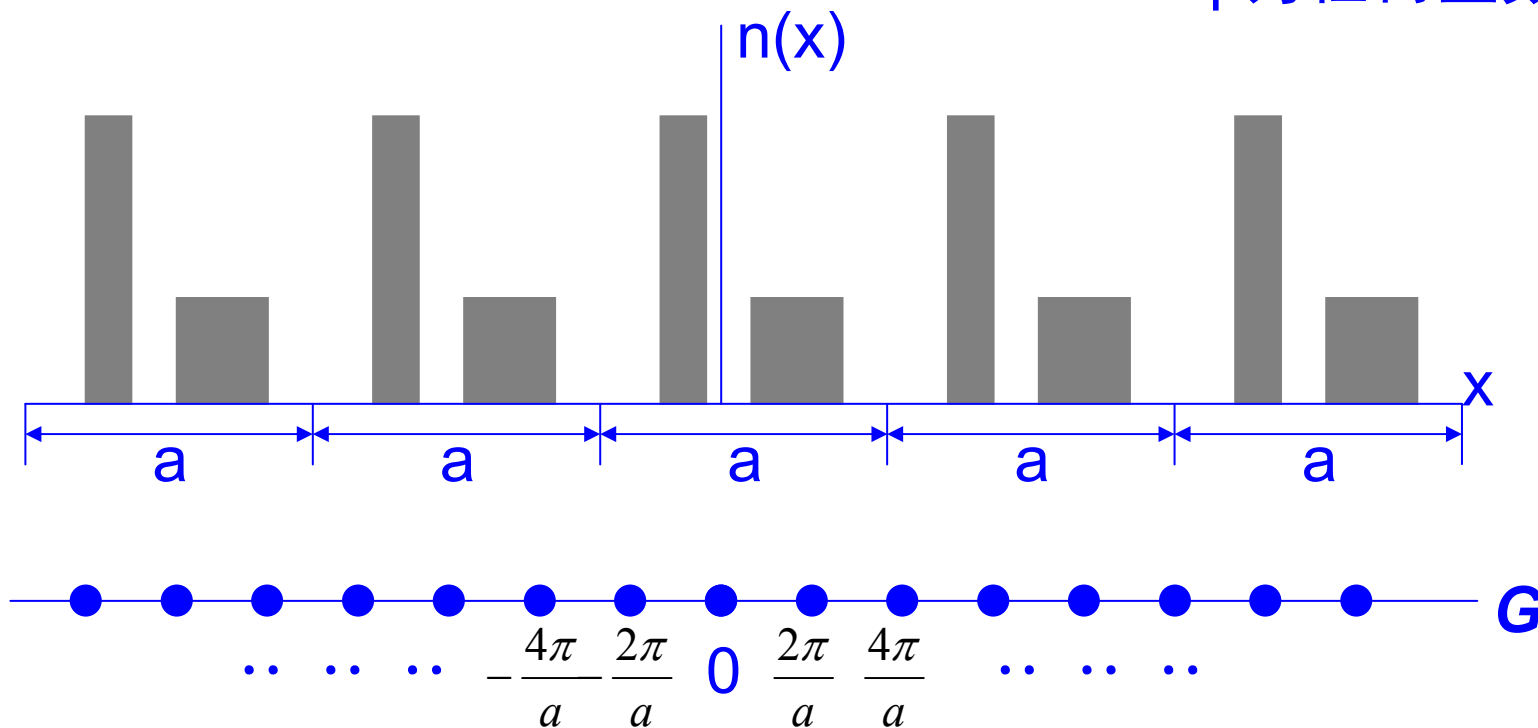
2.2.2.1 傅立叶分析

$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos(2\pi p x / a) + S_p \sin(2\pi p x / a)] \longrightarrow n(x) = \sum_p n_p e^{i2\pi p x / a}$$

— 对所有整数 p 求和（正、负和零）

— n_p 是复数，且 $n_{-p}^* = n_p$

$\frac{2\pi p}{a}$ 倒易点阵中的阵点
(p 为任何整数)



2.2 晶体衍射和倒易点阵₆

2.2.2.1 傅立叶分析

$$\boxed{n(x) = \sum_p n_p e^{i2\pi p x / a}} \xrightarrow{\text{1D拓展为3D}} \boxed{n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}}$$

— 寻求一组矢量 \vec{G} ，满足 $n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$

2.2 晶体衍射和倒易点阵₇

2.2.2.2 倒易点阵矢量

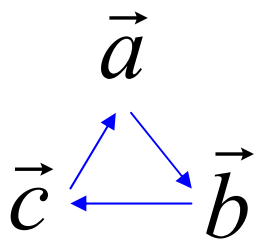
— 寻求一组矢量 \mathbf{G} , 满足 $n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$

定义倒易点阵的轴矢

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$



— 若 \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} 为初基的, 则 \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} 就是倒易点阵的初基矢量

— $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ 每个矢量与晶体点阵的两个轴矢正交

— 对于一个给定晶体点阵的一组任意设定的初基矢量 \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , 都能导出同样的一组倒易点阵

— 每个晶体结构都有两个点阵同它联系着, 一个是晶体点阵, 一个是对应的倒易点阵

— 晶体的衍射图样是晶体的倒易点阵的映象

— 晶体点阵中的矢量具有[长度]的量纲, 倒易点阵中的矢量具有[长度]⁻¹的量纲

2.2 晶体衍射和倒易点阵⁸

2.2.2.2 倒易点阵矢量

定义倒易点阵矢量

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \quad (h, k, l \text{ 是整数})$$

$$n(x) = \sum_p n_p e^{i2\pi p x / a}$$

↓ 1D拓展为3D

$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

$$\vec{G} \cdot \vec{T} = 2\pi(hu + kv + lw)$$

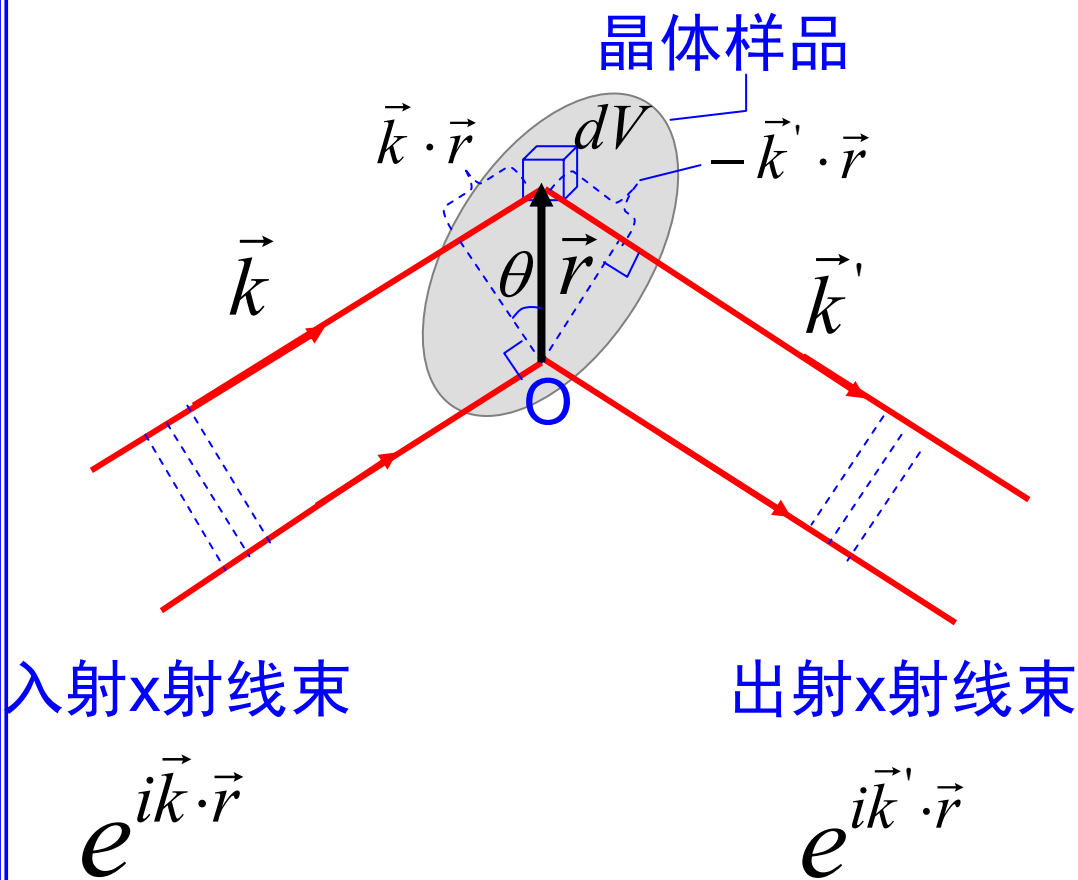
$$n(\vec{r} + \vec{T}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{T}}$$

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$$

—找到了一组矢量 **G**, 满足 $n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$

2.2 晶体衍射和倒易点阵⁹

2.2.2.3 衍射条件



— 相距为 r 的体积元 dV 散射的射线束之间的位相差因子是

$$\exp[i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}]$$

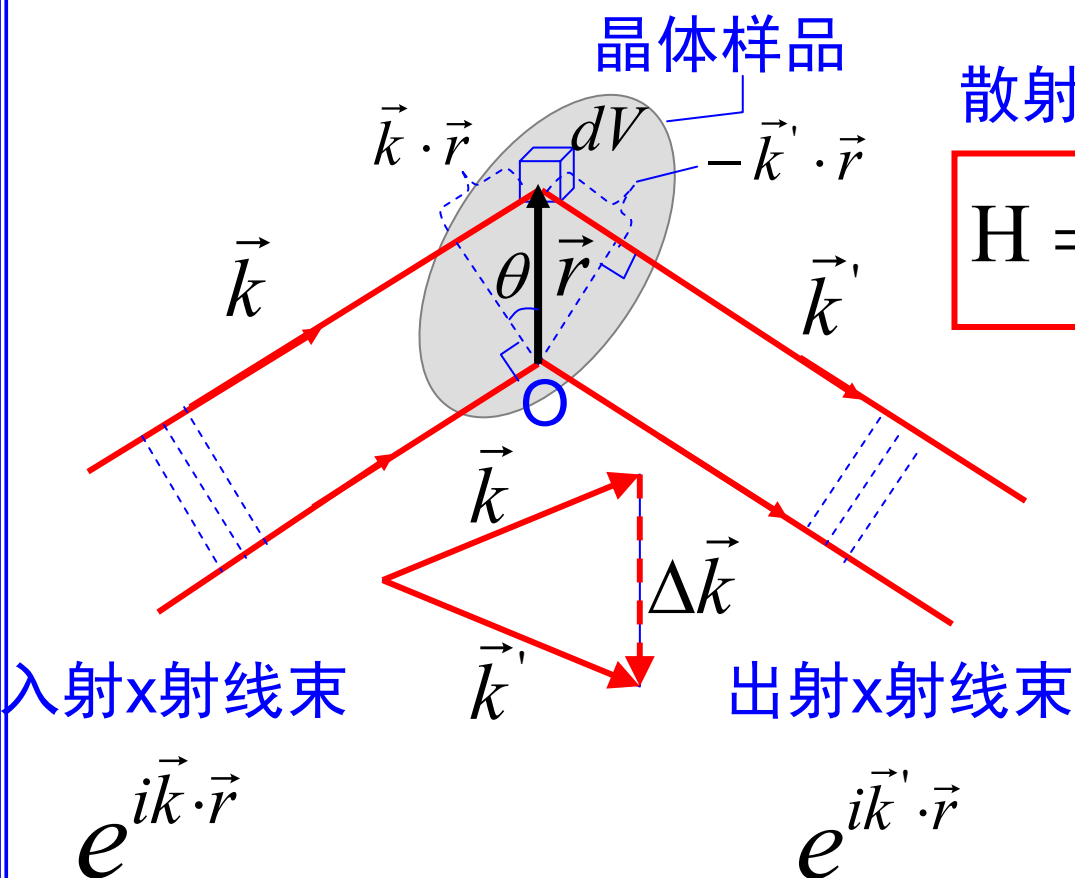
— 从一个体积元散射的波的振幅正比于该处的电子浓度

— 在 \vec{k}' 方向上散射波的总振幅正比于 $n(\vec{r})dV$ 与位相因子 $\exp[i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}]$ 的乘积在整体晶体体积内的积分

2.2 晶体衍射和倒易点阵¹⁰

2.2.2.3 衍射条件

$$\exp[i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}] \xrightarrow{\boxed{\vec{k} + \Delta k = \vec{k}'}} \exp[-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}] \quad -\Delta\vec{k} \text{ 称为散射矢量}$$



散射振幅的积分式为

$$H = \int dV n(\vec{r}) \exp(-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r})$$

2.2 晶体衍射和倒易点阵¹¹

2.2.2.3 衍射条件

散射振幅的积分式为

$$H = \int dV n(\vec{r}) \exp(-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad \leftarrow \quad n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$$H = \sum_{\vec{G}} \int dV n_{\vec{G}} \exp[i(\vec{G} - \Delta\vec{k}) \cdot \vec{r}]$$

$$\Delta\vec{k} = \vec{G}$$

— 当散射波矢等于一个倒易点阵矢量 **G** 时，散射振幅达到最大