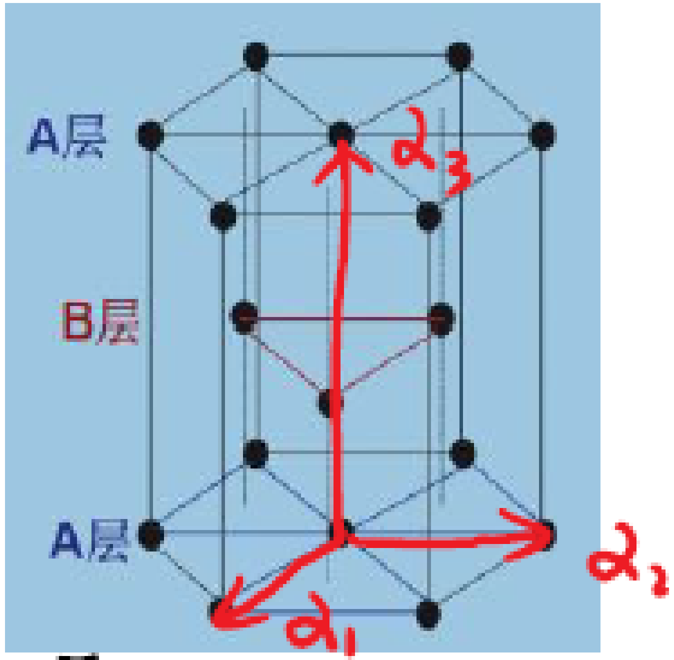
倒格子：计算面心立方和六角密排晶格的倒格子点阵。

提示：通过晶格结构正格子空间的基矢得到倒格子空间的基矢。

解： 面心立方见上

六角密排： 取A层原子构成的点阵为其布拉菲格子



3基矢可取为 $(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{1}{2}a, 0)$、$(0, a, 0)$、$(0, 0, \frac{2\sqrt{6}}{3}a)$

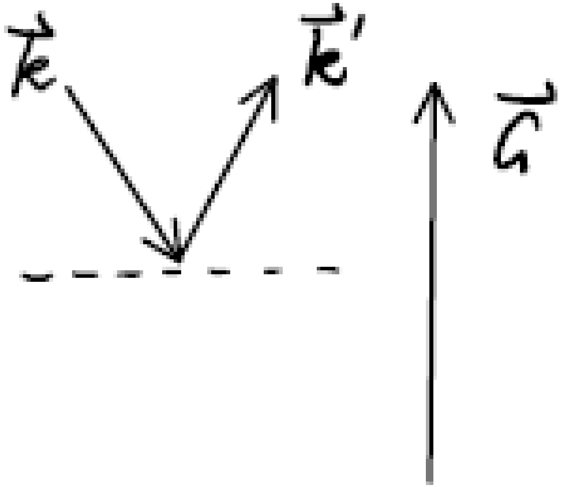
则3个倒格矢为 $(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}, 0, 0)$、$(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a}, 0)$、$(0, 0, \frac{\sqrt{6}\pi}{2a})$ …

衍射加强条件：证明布拉格条件与劳厄的衍射加强条件是等价的。

(仅考虑弹性散射)

解：

$$\vec{k}'-\vec{k}=\vec{G} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda}\cdot 2\sin\theta = n\frac{2\pi}{d} \Leftrightarrow 2d\sin\theta = n\lambda$$



结构因子：计算下列立方晶体的结构因子，并说明其消光条件：

（1） 单原子的面心立方结构；

（2） 金刚石结构；

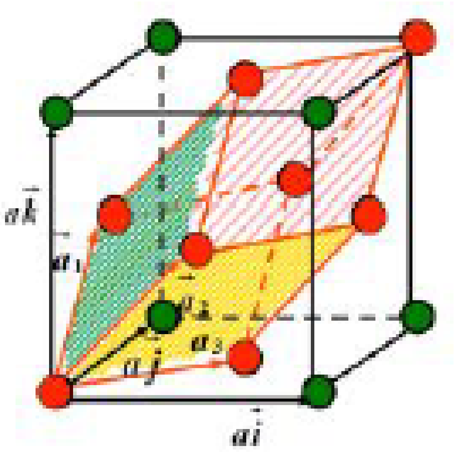
（3） 闪锌矿结构。

解：

(1) 用惯用晶胞计算　　4原子：$(0,0,0)$、$(\frac{a}{2},\frac{a}{2},0)$

倒格矢 $\vec{G}_h = \frac{2\pi}{a}(h,k,l)$　　$(\frac{a}{2},0,\frac{a}{2})$、$(0,\frac{a}{2},\frac{a}{2})$

则 $F(hkl) = f(1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)})$



$$|F|^2 = f^2\{[\underbrace{1+\cos\pi(h+k)+\cos\pi(h+l)+\cos(k+l)}_{①}]^2 + [\underbrace{\sin\pi(h+k)+\sin\pi(h+l)+\sin\pi(k+l)}_{②}]^2\}$$

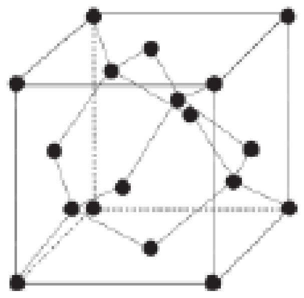
①=②=0时，$|F|^2$才为0，消光

hkl为整数，故②≡0；①中cos项只能为±1，则一项+1，两项-1

则 h+k、h+l、k+l 中一个为偶，两个为奇，只要hkl奇偶混杂

(2)

等效两面心立方错位 $(\frac{a}{4},\frac{a}{4},\frac{a}{4})$



故 $F=[f(1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)})]$ *(1+e^(h+k+l) π /2)

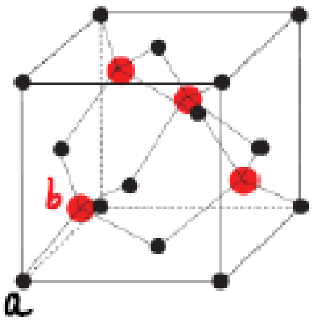
∴消光条件为 hkl奇偶混杂 或 $\frac{h+k+l}{2}$ 为奇

可记：hkl全奇时，$|F|^2 = 32f^2$

均偶且 h+k+l为4n时，$|F|^2 = 64f^2$

其余消光

(3)



$$F = (1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)})(f_a+f_b e^{\frac{i\pi}{2}(h+k+l)})$$

$f_a=f_b$时同(2)，$f_a\neq f_b$时同(1)

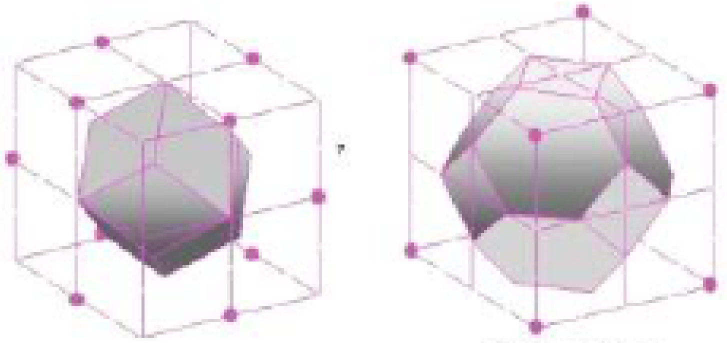
金刚石结构：

(1) 画出布拉菲格子，给出基矢、原胞，并给出倒格矢，画出倒格矢点阵及第一布里渊区；

(2) 证明第一布里渊区的体积为$\frac{(2\pi)^3}{\Omega}$，Ω为正格子原胞的体积；

(3) 单晶 Si 是金刚石结构，晶格常数$a = 5.43\text{Å}$，用铜靶K_α线 $\lambda = 0.154\,nm$ 的 X 射线做衍射实验，请问该结构的(100),(200),(400),(110),(111)的晶面衍射能否出现？为什么？如果出现请给出衍射角度。

解：(1)



Wigner-Seitz Cell for Face Centered Cubic Lattice

Brillouin Zone = Wigner-Seitz Cell for Reciprocal Lattice

其余略

(2) $\vec{b}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}$，$\vec{b}_2=\cdots$，$\vec{b}_3=\cdots$

即证 $(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)\cdot[(\vec{a}_3\times\vec{a}_1)\times(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)]=[\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)]^2$

$[\cdots]=[\vec{a}_3\cdot(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)]\vec{a}_1-\cancel{[\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)]\vec{a}_3}$ 0

故左边 $=[(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)\cdot\vec{a}_1][(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)\cdot\vec{a}_3]=$ 右边 ✓

(3) 由4(2)，(100)、(200)、(110) 消光　$\vec{k}'-\vec{k}=\vec{G}$　$\frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta=|\vec{G}|$

(111)：$\frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta=n\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$，$\sin\theta=n\frac{\sqrt{3}\lambda}{2a}=0.2456n$，$\theta=14.21^\circ, 29.42^\circ, 47.46^\circ, 79.25^\circ$

(400)：$\frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta=n\frac{2\pi}{a}4$，$\sin\theta=n\frac{2\lambda}{a}=0.5672n$，$\theta=34.56^\circ$

150 eV 的电子束射到一个镍粉末样品上，试求发生反射的二个最小的布拉格角。已知镍面心立方格子，其立方边长为3.25Å。

$$E=\frac{p^2}{2m},\ \lambda=\frac{h}{p}\ \Rightarrow\ k=\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

解：

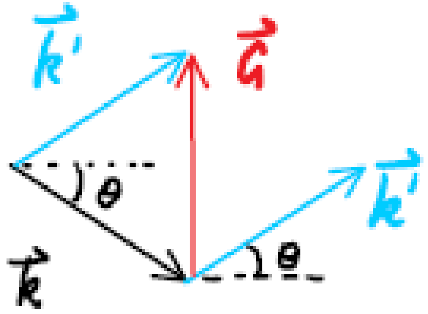
此题我用两种方法，望诸君体会原胞与惯用晶胞之异

原胞：

原胞中可取3基矢如 $\frac{a}{2}(0,1,1)$、$\frac{a}{2}(1,0,1)$、$\frac{a}{2}(1,1,0)$ 为 $\vec{a}_1$、$\vec{a}_2$、$\vec{a}_3$

则3倒格矢为 $\frac{2\pi}{a}(-1,1,1)$、$\frac{2\pi}{a}(1,-1,1)$、$\frac{2\pi}{a}(1,1,-1)$ 为 $\vec{b}_1$、$\vec{b}_2$、$\vec{b}_3$

原胞中只有一个原子，故无需考虑消光



此题中 $k=\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{2\pi}{h/p}$ 一定，θ小即 $|\vec{G}|$ 小，而 $\vec{G}=h\vec{b}_1+k\vec{b}_2+l\vec{b}_3$

$|\vec{G}|=\frac{2\pi}{a}\left[(h+k-l)^2+(h+l-k)^2+(k+l-h)^2\right]^{\frac{1}{2}}$ 最小二值为 $\frac{2\sqrt{3}\pi}{a}$、$\frac{4\pi}{a}$ $\frac{4\sqrt{2}\pi}{a}$

作业3第1题已得此结论

故 $\sin\theta_1 = \frac{\sqrt{3}\pi}{ak}$，$\sin\theta_2 = \frac{2\pi}{ak}$ $\sin\theta_3 = \frac{2\sqrt{2}\pi}{ak}$

$\theta_1 \approx 15.5^\circ$，$\theta_2 \approx 18.0^\circ$ $\theta_3 \approx 25.9^\circ$

惯用晶胞： （与5(3)类似）

考虑不能消光!!! 由4⑴，必须全奇/全偶

3倒格矢为 $\frac{2\pi}{a}(0,0,1)$、$\frac{2\pi}{a}(0,1,0)$、$\frac{2\pi}{a}(1,0,0)$

同上，$|\vec{G}|$在满足hkl全奇/全偶的条件下尽量小

① $\{111\}$ $|\vec{G}| = \frac{2\sqrt{3}\pi}{a}$ 所以最小不是$\{100\}$和$\{110\}$

② $\{200\}$ $|\vec{G}| = \frac{4\pi}{a}$ 之后过程同理 …

③ $\{220\}$ $|\vec{G}| = \frac{4\sqrt{2}\pi}{a}$

这正是在惯用晶胞中对应的晶面指数！

3种对应晶面指数（原胞）为 $\{100\}$或$\{111\}$
$\{110\}$
$\{211\}$