上一节中我们主要介绍了固物中的基本概念，这一节我们即将讨论晶体中极为重要的一节：晶体衍射。

# 晶体衍射

固体是什么？里面的原子是如何排列的？对于第一批研究固体性质的科学家来说，这是一个致命的问题。一块已知原子组分的固体，测得它的质量和体积，就可以估算出原子之间的距离量级：$\mathring{A}$，这一消息对苦苦寻找X射线光栅材料的von Laue如天降之喜，得到硫酸铜的衍射斑点后，他成功地给出了理论解释，从此揭开了晶体分析的序幕。

假设一束平面波以$\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$入射，与晶体发生相互作用后以$\exp(i\vec{k}'\cdot\vec{r})$出射，现在以晶体中的一个结点为参考，则与之相距$\overrightarrow{R_l}$的结点在此次散射中，较参考结点相位相差$(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\overrightarrow{R_l}=\vec{s}\cdot\overrightarrow{R_l}$，那么，出射光的振幅为

$$A=e^{-i\omega t}\sum_{\overrightarrow{R_l}}\exp(i\vec{s}\cdot\overrightarrow{R_l})=e^{-i\omega t}N\sum_{\overrightarrow{K_h}}\delta(\vec{s}-\overrightarrow{K_h})$$

这个公式说明，入射光只会被散射到与入射方向相差一个倒格矢的方向，在这里我们采用了光学中的相位分析，在量子力学我们也有相应的处理方式：计算散射矩阵元

视晶体中的散射势场为微扰，则从$\vec{k}$散射到$\vec{k}'$的几率为：

$$\langle\overrightarrow{k'}|\hat{V}|\vec{k}\rangle=\frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3r\,V(\vec{r})e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}$$

由上节所知，展开势能：

$$\begin{cases} V(\vec{r})=\sum\limits_{\overrightarrow{K_h}}V(\overrightarrow{K_h})e^{i\overrightarrow{K_h}\cdot\vec{r}} \\ V(\overrightarrow{K_h})=\frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3r V(\vec{r})e^{-i\overrightarrow{K_h}\cdot\vec{r}} \end{cases}$$

那么：

$$\langle\overrightarrow{k'}|\hat{V}|\vec{k}\rangle=\frac{1}{V}\sum_{\overrightarrow{K_h}}V(\overrightarrow{K_h})\int_V \mathrm{d}^3r\,e^{i(\overrightarrow{K_h}+\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}=\sum_{\overrightarrow{K_h}}V(\overrightarrow{K_h})\delta(\vec{k}-\overrightarrow{k'}-\overrightarrow{K_h})$$

量子力学计算也表明，入射光方向只会与出射光相差倒格矢，这说明正格点的空间周期性反映了能提供给入射光的动量，即对入射光的调制能力。

接下来我们再来谈谈$V_{\overrightarrow{K_h}}$。由于光与电子相互作用而散射，我们假定势能正比于某处的电子密度$\rho$。每个原子周围都有属于自己的电子密度分布，考虑复式晶格（每个结点内有n个原子），则总的电子密度应是各密度函数的叠加（注意由晶格的周期性，$\rho$的独立形式只有n个）

$$\rho = \sum_{l=1}^{N}\sum_{i=1}^{n}\rho_i(\vec{r} - \overrightarrow{R_l} - \overrightarrow{r_i})$$

它显然是正点阵的周期函数，那么它的傅里叶分量可轻易求得：

$$\rho(\overrightarrow{K_h}) = \frac{1}{\Omega}\sum_{l=1}^{N}\sum_{i=1}^{n}\int_{\Omega}\mathrm{d}^3r\rho_i(\vec{r} - \overrightarrow{R_l} - \overrightarrow{r_i})e^{i\overrightarrow{K_h}\cdot\vec{r}} = \frac{N}{\Omega}\sum_{i=1}^{n}\int_{\Omega}\mathrm{d}^3r\rho_i(\vec{r} - \overrightarrow{r_i})e^{i\overrightarrow{K_h}\cdot\vec{r}} = N\sum_{i=1}^{n}f(\overrightarrow{K_h}) = NF(\overrightarrow{K_h})$$

其中$f(\overrightarrow{K_h})$是某一个原子电子分布的傅里叶分量，称为**原子散射因子**，$F(\overrightarrow{K_h})$是考虑所有原子的结果，称为**几何结构因子。**

$$\langle\overrightarrow{k'}|\hat{V}|\vec{k}\rangle = cN\sum_{\overrightarrow{K_h}}F(\overrightarrow{K_h})\delta(\vec{k} - \overrightarrow{k'} - \overrightarrow{K_h})$$