

附录：计算晶胞参数

In[1]:= (*定义四舍五入后的偏差函数*)

In[2]:= $f[x_] := \text{Abs}[x - \text{Round}[x]]$
[绝对值] [舍入]

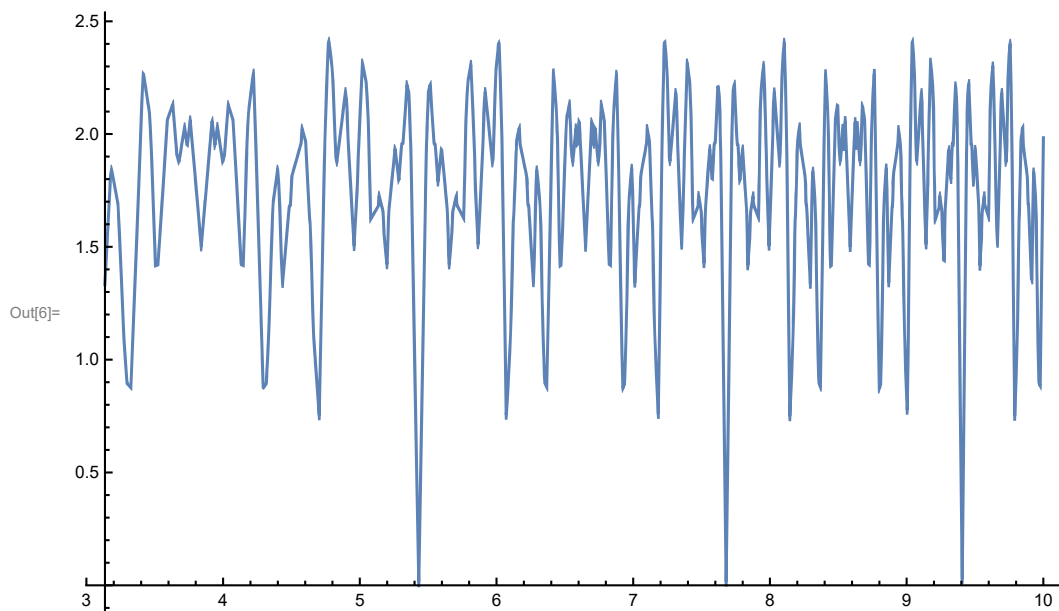
In[3]:= (*输入所有测量得到的晶面间距*)

In[4]:= $d = \{3.1352, 1.9199, 1.6373, 1.5676, 1.3576, 1.2458, 1.1085\}$

Out[4]:= $\{3.1352, 1.9199, 1.6373, 1.5676, 1.3576, 1.2458, 1.1085\}$

In[5]:= (*显然a不能小于测得的d中的最大值，也不能超出 $10^{(-10)}$ m的数量级*)
(*现在要找到a使得所有a/d的平方都近似为一个整数，绘制误差函数定性分析*)

In[6]:= $\text{Plot}[\text{Sum}[f[(a/d[[i]])^2], \{i, 1, 7\}], \{a, 3.1352, 10.0000\}]$
[绘图] [求和]



In[7]:= (*从图像中可看出要找的a在5~6之间，生成一个庞大的矩阵*)

In[8]:= $T = \text{Table}[\text{Sum}[f[(a/d[[i]])^2], \{i, 1, 7\}], \{a, 5, 6, 0.00001\}];$
[表格] [求和]

In[9]:= (*寻找最小值出现的位置*)

In[10]:= $\text{Position}[T, \text{Min}[T]]$
[位置] [最小值]

Out[10]:= $\{\{43034\}\}$

In[11]:= $a = 5 + 0.00001 * 43034$

Out[11]:= 5.43034

In[12]:= (*计算a/d比值*)

In[13]:= $(5.43034 / 3.1352)^2$

Out[13]:= 3.00002

In[14]:= (*由此得知测得数据中晶面指数最小的是111面，从而对晶胞参数a可以修正为*)

In[15]:= a = Sqrt[1^2 + 1^2 + 1^2] * 3.1352
|平方根

Out[15]= 5.43033

In[16]:= (*与软件拟合给出的5.43029相对误差仅为7E-4*)