1 原子的凝聚

1.1 原子结构

原子的能量和波函数

$$E_n = -\frac{\mu Z e^4}{2\hbar^2 \left(4\pi\varepsilon_0\right)^2} \frac{1}{n^2}$$

$$\psi\left(r,\theta,\varphi\right) = R_{nl}\left(r\right) Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right)$$

1.2 原子电负性

$$\chi = \frac{1}{6.3}\left(W_i + W_a\right)$$

电负性低容易失去电子

1.3 原子间相互作用

1.3.1 原子间相互作用势能

$$u\left(r\right) = -\frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}$$

固体中所有原子的势能为

$$U = \frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N} u\left(r_{ij}\right) = \frac{N}{2}\sum_{j} u\left(r_{ij}\right)$$

平衡时电子距离为

$$\left.\frac{\partial U\left(r\right)}{\partial r}\right|_{r=r_0} = 0 \Rightarrow r_0 = \left(\frac{Bn}{Am}\right)^{m-n}$$

结合能为

$$W = E_N - U\left(r_0\right)$$

通常令 $E_N = 0$

固体的体积为

$$V = N\beta r^3$$

平衡体积为

$$V_0 = N\beta r_0^3$$

弹性模量

$$K = \frac{1}{9N\beta r_0}\left.\left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}\right)\right|_{r=r_0}$$

1.3.2 离子键结合

一维离子链，正负离子交替排列，第 j 个离子和第 1 个离子间距离为 $r_{1j} = a_j r$

$$M = \sum_j \pm\frac{1}{a_j}$$

$$B = \sum_j \frac{b}{a_j^n}$$

$$U = -N\left[\frac{Me^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{B}{r^n}\right]$$

B，n，M 为常数，马德隆常数

$$M = 2\ln 2$$

1.3.3 范德瓦尔斯键

相互作用能

$$u\left(r\right) = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}} = 4\varepsilon\left[-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}\right]$$

整个固体的能量

$$U\left(r\right) = 2N\varepsilon\left[A_{12}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - A_6\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right]$$

2 晶体结构表述

2.1 正格子空间

2.1.1 原胞体积

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

2.1.2 格矢

$$\vec{R}_l = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$$

2.1.3 晶列指数

$$[m, n, p] \Rightarrow \vec{R} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + p\vec{a}_3$$

2.1.4 晶面指数

晶面与基矢截距为 $\frac{a_1}{h_1}$，$\frac{a_2}{h_2}$，$\frac{a_3}{h_3}$ 的晶面为

$$(h_1 h_2 h_3)$$

2.2 倒格子空间

2.2.1 倒格子定义

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \tag{1}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_1) \tag{2}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \tag{3}$$

2.2.2 倒格矢

$$\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3 \tag{4}$$

3 晶体的衍射

3.1 劳厄衍射方程

$$\vec{R}_l \cdot \left(\vec{k} - \vec{k}_0\right) = 2\pi n \tag{5}$$

3.2 布拉格衍射方程

$$2d \sin\theta = n\lambda \tag{6}$$

3.3 倒格子空间两种衍射方程的表述

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = n\vec{K}_h \tag{7}$$

3.4 布里渊表述

$\vec{G}$ 为倒格矢

$$\vec{G} \cdot \left(\vec{k} + \frac{\vec{G}}{2}\right) = 0 \tag{8}$$

所有的倒格矢 $\vec{G}$ 的垂直平分线构成布里渊区