固体物理学作业

Charles Luo

2025 年 3 月 15 日

目录

1　第一章习题

习题 1. 在正交直角坐标系中, 若矢量 $\mathbf{R}_n = n_1\,\mathbf{i} + n_2\,\mathbf{j} + n_3\,\mathbf{k}$, 其中 $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ 为单位矢量, $n_i\ (i = 1, 2, 3)$ 为整数。问下列情况属于什么点阵?

(a) 当 n_i 为全奇加全偶时;

(b) 当 n_i 之和为偶数时。

解答.

习题 2. 分别证明:

(a) 面心立方（fcc）和体心立方（bcc）点阵的惯用初基元胞三基矢间夹角 θ 相等，对 fcc 为 $60°$ ，对 bcc 为 $109°27'$;

(b) 在金刚石结构中，作任一原子与其四个最近邻原子的连线。证明任意两条线之间夹角 θ 均为 $\arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109°27'$。

解答.

习题 3. 证明在六角晶系中米勒指数为 (hkl) 的晶面族间距为

$$d = \left[\frac{4}{3}\left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)\right]^{-\frac{1}{2}}.$$

解答.

习题 4. 证明底心正交点阵的倒点阵仍为底心正交点阵。

解答.

习题 5. 试证明具有四面体对称性的晶体，其介电常量为一标量介电常量：

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_0 \delta_{\alpha\beta}.$$

解答.

习题 6. 若 AB_3 的立方结构如图所示，设 A 原子的散射因子为 $f_A(\mathbf{K}_{hkl})$，B 原子的散射因子 $f_B(\mathbf{K}_{hkl})$.

解答.

习题 7. 在某立方晶系的铜 $\mathbf{K}_\alpha X$ 射线粉末相中，观察到的衍射角 θ_i 有下列关系：

$$\sin\theta_1 : \sin\theta_2 : \sin\theta_3 : \sin\theta_4 : \sin\theta_5 : \sin\theta_6 : \sin\theta_7 : \sin\theta_8$$

$$= \sqrt{3} : \sqrt{4} : \sqrt{8} : \sqrt{11} : \sqrt{12} : \sqrt{16} : \sqrt{19} : \sqrt{20}.$$

解答.

习题 8. X 射线衍射的线宽。
假定一个有限大小的晶体，点阵节点由 $R_l = \sum_{i=1}^{3} l_i \mathbf{a}_i$ 确定，其中 l_i 取整数 $0, 1, 2, \cdots, N_i - 1$，每个结点处有全同的点散射中心。散射振幅可写为

$$u_{k\to k'} = c \sum_{l_i=0}^{N_i-1} \mathrm{e}^{-i(k'-k)\cdot \sum_{i=1}^{3} l_i \mathbf{a}_i}.$$

(a) 证明散射强度 $I = |u|^2 = u^* u = c^2 \prod_{i=1}^{3} \dfrac{\sin^2 \frac{1}{2} N_i (\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}{\sin^2 \frac{1}{2}(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}$，$\Delta k = k' - k$;

(b) 当 $\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i = 2\pi h_i$（$h_i$ 为整数）时，出现衍射极大值，函数 $\sin^2 \frac{1}{2} N_i (\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)$ 的第一个零点定义了 X 射线衍射的线宽 Δ_i，证明 $\Delta_i = \dfrac{2\pi}{N_i}$;

(c) 对于一个无限大的晶体，$N_i \to \infty$，证明 $I = c^2 N^2 \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k},\mathbf{K}_h}$.

解答.

2 第二章习题