# 固体物理学作业

Charles Luo

2025 年 3 月 30 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.**

(a) 据题意，全奇加全偶应是两个布拉维格子的叠加。

若 $n_i\ (i=1,2,3)$ 全为偶数，可以提取公因子 2 得到 $\mathbf{R}_n = n_1'\,(2\mathbf{i}) + n_2'\,(2\mathbf{j}) + n_3'\,(2\mathbf{k})$，此时 $n_i'\ (i=1,2,3)$ 为整数，对应简单立方点阵，格矢长度为 2 个单位长度。

同理可得 $n_i\ (i=1,2,3)$ 全为奇数时也为简单立方点阵，可由全为偶数时点阵沿 $(1,1,1)$ 方向平移移一个单位长度得到。

二者的嵌套为体心立方点阵。

(b) 据题意，$n_1+n_2+n_3=2k,\ k\in\mathbb{N}$。

不妨取 $k=1$ 和 $k=2$ 来猜测，可以得到格点坐标为 $(1,1,0)\,,\cdots,(0,1,1)\,,(2,0,0)\,,\cdots,(0,0,2)$.

为面心立方点阵。

**习题 1 的注记.**

- (b) 可取 $k_1=k-n_1, k_2=k-n_2, k_3=k-n_1-n_2$，得到 $\mathbf{R}_n=(k_2+k_3)\,\mathbf{i}+(k_3+k_1)\,\mathbf{j}+(k_1+k_2)\,\mathbf{k}$.

**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 $\theta$ 相等，对 fcc 为 $60^\circ$ ，对 bcc 为 $109^\circ 27'$;

(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 $\theta$ 均为 $\arccos\left(-\dfrac{1}{3}\right)=109^\circ 27'$。

**解答.**

(a) fcc 三个基矢为 $\mathbf{a_1} = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a_2} = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a_3} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$.

故 $\cos\theta = \frac{\mathbf{a_1}\cdot\mathbf{a_2}}{|\mathbf{a_1}|\,|\mathbf{a_2}|} = \frac{\mathbf{a_2}\cdot\mathbf{a_3}}{|\mathbf{a_2}|\,|\mathbf{a_3}|} = \frac{\mathbf{a_3}\cdot\mathbf{a_1}}{|\mathbf{a_3}|\,|\mathbf{a_1}|} = \frac{1}{2}$，即 $\theta = 60°$.

bcc 三个基矢为 $\mathbf{a_1} = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a_2} = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a_3} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$.

故 $\cos\theta = \frac{\mathbf{a_1}\cdot\mathbf{a_2}}{|\mathbf{a_1}|\,|\mathbf{a_2}|} = \frac{\mathbf{a_2}\cdot\mathbf{a_3}}{|\mathbf{a_2}|\,|\mathbf{a_3}|} = \frac{\mathbf{a_3}\cdot\mathbf{a_1}}{|\mathbf{a_3}|\,|\mathbf{a_1}|} = -\frac{1}{3}$，即 $\theta = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109°27'$.

(b) 金刚石结构中坐标为 $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$ 的原子相邻的 4 个原子坐标分别为 $(0,0,0), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$, $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$. 邻边 $\mathbf{l_1} = \left(-\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}\right), \mathbf{l_2} = \left(-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \mathbf{l_3} = \left(\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \mathbf{l_4} = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}\right)$.

故 $\cos\theta = \frac{\mathbf{l_1}\cdot\mathbf{l_2}}{|\mathbf{l_1}|\,|\mathbf{l_2}|} = \frac{\mathbf{l_2}\cdot\mathbf{l_3}}{|\mathbf{l_2}|\,|\mathbf{l_3}|} = \frac{\mathbf{l_3}\cdot\mathbf{l_4}}{|\mathbf{l_3}|\,|\mathbf{l_4}|} = \frac{\mathbf{l_4}\cdot\mathbf{l_1}}{|\mathbf{l_4}|\,|\mathbf{l_1}|} = -\frac{1}{3}$，即 $\theta = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109°27'$.

**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.** 米勒指数以单胞的三条棱为坐标系.

正点阵的一族晶面 $(hkl)$ 垂直于倒格矢 $\mathbf{K_h} = h\mathbf{b_1} + k\mathbf{b_2} + l\mathbf{b_3}$，晶面间距 $\frac{2\pi}{|\mathbf{K_h}|}$.

在六角晶系中 $\mathbf{a} = (a,0,0), \mathbf{b} = \left(-\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a, 0\right), \mathbf{c} = (0,0,c)$.

求倒点阵基矢：

$$\mathbf{b_1} = 2\pi\frac{\mathbf{a_2}\times\mathbf{a_3}}{\mathbf{a_1}\cdot(\mathbf{a_2}\times\mathbf{a_3})} = \frac{2\pi}{a}\left(1, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0\right).$$

$$\mathbf{b_2} = 2\pi\frac{\mathbf{a_3}\times\mathbf{a_1}}{\mathbf{a_1}\cdot(\mathbf{a_2}\times\mathbf{a_3})} = \frac{2\pi}{a}\left(0, \frac{2\sqrt{3}}{3}, 0\right).$$

$\mathbf{b_3} = 2\pi \dfrac{\mathbf{a_1} \times \mathbf{a_2}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})} = \dfrac{2\pi}{c}\,(0,0,1).$

倒格矢 $\mathbf{K_h} = \left(\dfrac{2\pi}{a}h, \dfrac{2\sqrt{3}\pi}{3a}h + \dfrac{4\sqrt{3}\pi}{3a}k, \dfrac{2\pi}{c}l\right)$, 故 $d = \dfrac{2\pi}{|\mathbf{K_h}|} = \left[\dfrac{4}{3}\left(\dfrac{h^2+hk+k^2}{a^2} + \dfrac{l^2}{c^2}\right)\right]^{-\frac{1}{2}}$.

**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.** 底心正交阵基矢 $\mathbf{a_1} = (a,0,0)\,, \mathbf{a_2} = \left(\dfrac{a}{2}, \dfrac{b}{2}, 0\right), \mathbf{a_3} = (0,0,c).$

倒点阵基矢:

$\mathbf{b_1} = 2\pi \dfrac{\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})} = 2\pi\left(\dfrac{1}{a}, -\dfrac{1}{b}, 0\right).$

$\mathbf{b_2} = 2\pi \dfrac{\mathbf{a_3} \times \mathbf{a_1}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})} = 2\pi\left(0, \dfrac{2\pi}{b}, 0\right).$

$\mathbf{b_3} = 2\pi \dfrac{\mathbf{a_1} \times \mathbf{a_2}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})} = 2\pi\left(0, 0, \dfrac{1}{c}\right).$

倒点阵仍为底心正交阵，底面边长为 $\dfrac{4\pi}{a}$ 和 $\dfrac{4\pi}{b}$，高为 $\dfrac{2\pi}{c}$.

**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:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta} = \varepsilon_0 \delta_{\alpha\beta}.$$

**解答.** 根据电动力学有

$$\mathbf{D} = \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{E},\ \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}.$$

四面体对称性包括三个四重反演轴，绕 x,y,z 轴旋转的操作分别记为 $\mathbf{A}_x, \mathbf{A}_y, \mathbf{A}_z$，反演操作记为 $\mathbf{I}$.

$$\mathbf{A}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{I} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

由题意，应有 $(\mathbf{IA}_x)\,\boldsymbol{\varepsilon}\,(\mathbf{IA}_x)^T=\boldsymbol{\varepsilon}$. 即

$$\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_{11}&\varepsilon_{12}&\varepsilon_{13}\\\varepsilon_{21}&\varepsilon_{22}&\varepsilon_{23}\\\varepsilon_{31}&\varepsilon_{32}&\varepsilon_{33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varepsilon_{11}&\varepsilon_{12}&\varepsilon_{13}\\\varepsilon_{21}&\varepsilon_{22}&\varepsilon_{23}\\\varepsilon_{31}&\varepsilon_{32}&\varepsilon_{33}\end{pmatrix}$$

可得 $\varepsilon_{13}=\varepsilon_{12}=0,\varepsilon_{21}=-\varepsilon_{31},\varepsilon_{32}=-\varepsilon_{23},\varepsilon_{22}=\varepsilon_{33}$.

利用 $(\mathbf{IA}_y)\,\boldsymbol{\varepsilon}\,(\mathbf{IA}_y)^T=\boldsymbol{\varepsilon}$ 及 $(\mathbf{IA}_z)\,\boldsymbol{\varepsilon}\,(\mathbf{IA}_z)^T=\boldsymbol{\varepsilon}$ 可知 $\boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}=\varepsilon_0\delta_{\alpha\beta}$.

**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 $f_B(\mathbf{K}_{hkl})$.

(a) 求其几何结构因子 $F(\mathbf{K}_{hkl})=$?

(b) 找出 $(hkl)$ 衍射面的 X 射线衍射强度分别在什么情况下有

$$I\left(\mathbf{K}_{hkl}\right)\propto\begin{cases}\left|f_A(\mathbf{K}_{hkl})+3f_B(\mathbf{K}_{hkl})\right|^2\\\left|f_A(\mathbf{K}_{hkl})-f_B(\mathbf{K}_{hkl})\right|^2\end{cases}$$

(c) 设 $f_A(\mathbf{K}_{hkl})=f_B(\mathbf{K}_{hkl})$，问衍射面指数中哪些反射消失？试举出五种最简单的。

**解答.**

(a) 取原子坐标 A $(0,0,0)$ , B $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right),\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right),\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$.

$$F(hkl)=\sum_j f_j\mathrm{e}^{-2\pi i(hr_{j1}+kr_{j2}+lr_{j3})}=f_A+f_B\left(\mathrm{e}^{-\pi i(h+k)}+\mathrm{e}^{-\pi i(k+l)}+\mathrm{e}^{-\pi i(h+l)}\right).$$

(b) 当 $(h+k),(h+l),(k+l)$ 均为偶数时, $F(hkl)=f_A+3f_B$, $I\left(\mathbf{K}_{hkl}\right)\propto\left|f_A(\mathbf{K}_{hkl})+3f_B(\mathbf{K}_{hkl})\right|^2$.

当 $(h+k),(h+l),(k+l)$ 两奇一偶时，$F(hkl)=f_A-f_B$, $I\left(\mathbf{K}_{hkl}\right)\propto\left|f_A(\mathbf{K}_{hkl})-f_B(\mathbf{K}_{hkl})\right|^2$.

(c) 消光条件 $F(hkl)=0$，据此可得 $(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1),(1,1,0),(1,0,1)$.

**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 $\theta_i$ 有下列关系：

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

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

(a) 试确定对应于这些衍射角的晶面的衍射面指数；

(b) 问该立方晶体时简单立方、面心立方还是体心立方?

**解答.**

(a) 晶面间距 $d_{hkl} = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$，布拉格反射定律 $2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$，

可得 $\sin\theta \propto \sqrt{(nh)^2+(nk)^2+(nl)^2}$.

故衍射面指数 $(1,1,1),(2,0,0),(2,2,0),(1,1,3),(2,2,2),(4,0,0),(3,3,1),(4,2,1)$.

(b) 简单立方允许所有 $(hkl)$ 值，没有消光.

体心立方要求 $(h+k+l)$ 为偶数.

面心立方则要求 $h,k,l$ 全奇或全偶.

故该立方晶体是面心立方。

**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

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

(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 $\Delta_i$，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 $I = c^2N^2\delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k},\mathbf{K}_h}$.

**解答.**

(a) 对散射振幅分析，$u_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'} = c\sum\limits_{l_i=0}^{N_i-1} \mathrm{e}^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\sum\limits_{i=1}^{3} l_i\mathbf{a}_i} = c\sum\limits_{l_i=0}^{N_i-1} \mathrm{e}^{-il_1(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1)}\cdot\mathrm{e}^{-il_2(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2)}\cdot\mathrm{e}^{-il_3(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3)}$.

写成连乘形式 $u_{\mathbf{k}\to\mathbf{k}'} = c\prod\limits_{i=1}^{3}\sum\limits_{l_i=0}^{N_i-1}\mathrm{e}^{-il_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}$.

$$\sum_{l_i=0}^{N_i-1}\mathrm{e}^{-il_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)} = \frac{1-\mathrm{e}^{-iN_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}}{1-\mathrm{e}^{-i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}} = \frac{\mathrm{e}^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}\left(\mathrm{e}^{i\frac{1}{2}N_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}-\mathrm{e}^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}\right)}{\mathrm{e}^{-i\frac{1}{2}(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}\left(\mathrm{e}^{i\frac{1}{2}(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}-\mathrm{e}^{-i\frac{1}{2}(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}\right)}.$$

由欧拉公式可化简为 $\sum\limits_{l_i=0}^{N_i-1}\mathrm{e}^{-il_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)} = \dfrac{\mathrm{e}^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}\sin\frac{1}{2}N_i\left(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i\right)}{\mathrm{e}^{-i\frac{1}{2}(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i)}\sin\frac{1}{2}\left(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i\right)}$.

故 $I = |u|^2 = u^*u = c^2\prod\limits_{i=1}^{3}\dfrac{\sin^2\dfrac{1}{2}N_i\left(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i\right)}{\sin^2\dfrac{1}{2}\left(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i\right)}$，$\Delta k = k' - k$.

(b) 函数 $\sin^2\dfrac{1}{2}N_i\left(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i\right)$ 的第一个零点出现在：$\dfrac{1}{2}N_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i) = \pi \implies \Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i = \dfrac{2\pi}{N_i}$.

即 $\Delta_i = \dfrac{2\pi}{N_i}$.

(c) 当 $N_i\to\infty$ 时，每个求和式 $\sum\limits_{l_i=0}^{N_i-1}\mathrm{e}^{(-il_i(\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i))}$ 转换为 $\delta$ 函数。因此，散射强度 $I$ 表现为 $\delta$ 函数的形式：

$$I = c^2N^2\delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k},\mathbf{K}_h}$$

其中 $\mathbf{K}_h$ 是倒格矢，满足布拉格条件。

**习题 8 的注记.**

- (c) 不是很理解。

# 2　第二章习题

**习题** 9. 导出 NaCl 型离子晶体中排斥势指数的下列关系式：

$$n=1+\frac{4\pi\varepsilon_0\times 18Br_0^4}{\alpha \mathrm{e}^2}\,(\text{SI 单位})$$

其中 $r_0$ 为近邻离子间距，$\alpha$ 为以 $r_0$ 为单位的马德隆常数，$B$ 为体积弹性模量。已知 NaCl 晶体的 $B=2.4\times10^{10}\mathrm{N/m^2}$, $r_0=2.81\mathring{A}$，求 NaCl 的 $n=?$

**解答.**

**习题** 10.