

结构谱学 3 教学知识点梳理和要求

一、晶体结构和射线衍射

1. 掌握晶体的定义、晶体结构、晶体点阵、结构基元等概念。
2. 了解 7 大晶系和 14 种布拉菲点阵特征。掌握立方晶系的阵点排列规律、坐标位置、对称性等，会判断常见的立方晶系物质的单位晶胞中的原子位置。
3. 掌握并会判断晶面的米勒指数，晶体中晶向和晶面的标记方法。
5. 掌握倒易格矢及其性质，理解倒易晶格失所构成的倒易晶格和倒易空间。
6. 理解晶体衍射现象的本质，掌握 X 射线衍射研究晶体结构。
7. 理解劳厄方程对衍射方向判断，掌握布拉格反射定律描述晶格衍射的问题、衍射极限条件、多级衍射等概念，会根据布拉格定律计算晶面间距，理解晶体衍射花样与晶体结构的关系。
8. 掌握衍射矢量方程及 Ewald diagram 图解。理解单晶衍射方法、粉末多晶衍射方法的原理。
9. 了解单个电子对 X 射线的散射和偏振因子，理解原子散射因子。理解并掌握结构因子的概念和立方晶系结构因子的计算过程，理解点阵消光和结构消光。会判断立方晶系的消光条件和产生衍射的条件，会解释一些简单的衍射结果（峰位、峰强、峰型），会根据衍射峰特点反推简单的晶体结构类型。
10. 理解或了解小晶体对 X 射线的散射，理解尺寸效应和谢乐公式。

二、电子能带论和固体光谱

1. 理解布洛赫定理描述晶体中电子运动的一般规律，理解简约波矢。
2. 理解固体中电子运动的两种近似模型（近自由电子近似和紧束缚近似）处理晶体中电子运动规律（波函数和能量本征值）的过程及能带论的基本结论，会计算和理解简单立方晶系 s 态能带的 $E(k)$ 关系等。了解绝缘体、半导体和导体的能带占据，了解晶体的能带结构、带隙、对称性等。理解能态密度和费米面的基本概念。
3. 了解固体中发生的光吸收过程，理解带间吸收的量子力学处理，了解吸收光谱与晶体结构、能带结构之间的微观联系。了解 X 射线吸收光谱和激子光谱。

三、光电子能谱

1. 掌握 X 射线光电子能谱、紫外光电子能谱、俄歇能谱产生的基本物理过程。
2. 掌握 XPS 谱图中结合能、化学位移、初态效应和终态效应等概念，理解影响 XPS 化学位移的几种常见的因素，会根据化学环境不同判断简单的结合能大小，会解释一些简单的 XPS 谱图说明的化学信息。
3. 掌握紫外光电子能谱的基本原理。理解电离能概念及 UPS 在研究气相分子结构、固体价带结构和表面化学中的应用。
4. 了解 XPS、UPS、AES 的谱峰的特征，了解几种光电子能谱的应用。