张永德 主编

物理学大题典

A Grand Dictionary of
Physics Problems and Solutions

8

固体物理及物理量测量

Solid State Physics and Physical Measurement

第二版

林鸿生 章世玲 王冠中 翁明其 / 编著

科学出版社
中国科学技术大学出版社

物理学大题典⑧/张永德主编

固体物理及物理量测量

（第二版）

林鸿生　章世玲　王冠中　翁明其　编著

科学出版社

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

“物理学大题典”是一套大型工具性、综合性物理题解丛书．丛书内容涵盖综合性大学本科物理课程内容：从普通物理的力学、热学、光学、电学、近代物理到“四大力学”，以及原子核物理、粒子物理、凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、激光物理、量子光学、量子信息等．内容新颖、注重物理、注重学科交叉、注重与科研结合．

《固体物理及物理量测量（第二版）》卷包括固体物理、半导体物理、物质的电磁性质、光学性质及超导电性、非晶固体和物理学综合试题等内容．

本丛书可作为物理类本科生的学习辅导用书、研究生的入学考试参考书和各类高校物理教师的教学参考书．

图书在版编目（CIP）数据

固体物理及物理量测量/林鸿生等编著．—2版．—北京：科学出版社，2018.9
（物理学大题典/张永德主编；8）
ISBN 978-7-03-058372-7

Ⅰ.①固… Ⅱ.①林… Ⅲ.①固体物理学-高等学校-教学参考资料 ②物理量-测量-高等学校-教学参考资料 Ⅳ.①O48 ②O4-34

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2018）第 168327 号

责任编辑：昌 盛 陈曰德 / 责任校对：张凤琴
责任印制：师艳茹 / 封面设计：华路天然工作室

科学出版社出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com
中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路 96 号
邮政编码：230026
保定市中画美凯印刷有限公司印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2005 年 10 月第 一 版 开本：787×1092 1/16
2018 年 9 月第 二 版 印张：21
2018 年 10 月第五次印刷 字数：500 000

定价：59.00 元
（如有印装质量问题，我社负责调换）

祝贺《物理学大题典》
在中国科学技术大学
六十周年校庆之际
再次出版

李政道

二〇一八年五月

“物理学大题典”编委会

丛书序

这套“物理学大题典”源自20世纪80年代末期的“美国物理试题与解答”，而那套丛书则源自80年代的CUSPEA项目(China-United States Physical Examination and Application Program).这套丛书收录的题目主要源自美国各著名大学物理类研究生入学试题，经筛选后由中国科学技术大学近百位高年级学生和研究生解答，再经中科大数十位老师审定.所以这套丛书是中国改革开放初期中美文化交流的成果，是中美物理教学合作的结晶，是CUSPEA项目丰硕成果的一朵花絮.

贯穿整个80年代的CUSPEA项目是由李政道先生提出的.1979年李先生为了配合中国刚刚开始实施的改革开放方针，向中国领导建言，逐步实施美国著名大学在中国高校联合招收赴美攻读物理博士研究生计划.经李先生与我国各级领导和美国各著名大学反复多次磋商研究，1979年教育部和中国科学院联合发文《关于推荐学生参加赴美研究生考试的通知》，紧接着同年7月14日又联合发出补充通知《关于推荐学生参加赴美物理研究生考试的通知》，直到1980年5月13日，教育部和中国科学院再次联合发文《关于推荐学生参加赴美物理研究生考试的通知》，神州大地正式全面启动这一计划.

1979年最初实施的是Pre-CUSPEA，从李先生任教的哥伦比亚大学开始，通过考试选录了5名同学进入哥大.此后计划迅速扩大，包括了美国所有著名大学在内的53所大学，后期还包括了加拿大的大学，总数达到97所.10年CUSPEA共计录取915名中国各高校应届学生，进入所有美国著名大学.迄今项目过去30年，当年赴美的青年学子早已各有所成，展布全球，许多人回国报效，成绩斐然，可喜可慰.

李先生在他总结文章中回忆说①：“在CUSPEA实施的10年中，粗略估计每年都用去了我约三分之一的精力.虽然这对我是很重的负担，但我觉得以此回报给我创造成长和发展机会的祖国母校和老师是完全应该的.”文中李先生两次提及他已故夫人秦惠箬女士和助理Irene女士，为赴美中国年轻学子勤勤恳恳、默默无闻地做了大量细致的服务工作.编者读到此处，深为感动！这次丛书再版适逢中国科学技术大学60周年校庆，又承李先生题词祝贺，中科大、科学出版社以及丛书编者同仁都十分感谢！

苏轼《花影》诗：“重重叠叠上瑶台，几度呼童扫不开.刚被太阳收拾去，却教明月送将来.”聚中科大百多位师生之力，历二十余载，唯愿这套丛书对中美教育和文化交流起一点奠基作用，有助于后来学者踏着这些习题有形无迹的斑驳花影，攀登瑶台，观看无边深邃的美景.

张永德　谨识

2018年6月29日

---

① 李政道，《我和CUSPEA》，载于“知识分子”公众号，2016年11月30日.

前　言

物理学，由于它在自然科学中所具有的主导作用，在人类文明史，特别是在人类物质文明史中，占据着极其重要的地位.经典物理学的诞生和发展曾经直接推动了欧洲物质文明的长期飞跃.20 世纪初诞生并蓬勃发展起来的近代物理学，又造就了上个世纪物质文明的辉煌.自 20 世纪末到 21 世纪初的当前时代，物理学正以空前的活力，广阔深入地开创着向化学、生物学、生命科学、材料科学、信息科学和能源科学渗透和应用的新局面.在本世纪里，物理学再一次直接推动新一轮物质文明飞跃的伟大进程已经开始.

然而，经历长足发展至今的物理学，宽广深厚浩瀚无垠.教授和学习物理学都是相当艰苦而漫长的过程.在教授和学习过程许多环节中，做习题是其中必要而又重要的环节.做习题是巩固所学知识的必要手段，是深化拓展所学知识的重要练习，是锻炼科学思维的体操.

但是，和习题有关的事有时并不被看重，似乎求解和编纂练习题是全部教学活动中很次要的环节.但丛书编委会同仁们觉得，这件事是教学双方的共同需要，只要是需要的，就是合理的，有益的，应当有人去做.于是大家本着甘为孺子牛的精神，平时在科研教学中一道题一道题地积累，现在又一道题一道题地编审，花费了大量时间做着这种不起眼的事.正如一个城市的基础建设，不能只去建地面上摩天大楼和纪念碑等“抢眼球”的事，也同样需要去做修马路、建下水道等基础设施的事.

这套“物理学大题典”的前身是中国科技大学出版社出版的“美国物理试题与解答”丛书(7 卷).那套丛书于 20 世纪 80 年代后期由张永德发起并组织完成，内容包括普通物理的力、热、光、电、近代物理到四大力学的全部基础物理学.出版时他选择了“中国科学技术大学物理辅导班主编”的署名方式.自那套丛书出版之后，历经 10 余年，仍然有不断的需求，于是就有了现在的这套丛书——“物理学大题典”.

“题典”编审的大部分教师仍为原来的，只增加了少许新成员.经过大家着力重订和大量扩充，耗时近两年而成.现在这次再版，编审工作又增加了几位新成员，复历一年而再成.此次再版除在原来基础上适当修订审校之外，还有少量扩充，增加了第 6 卷《相对论物理学》，第 7 卷《量子力学》扩充为上、下两分册.丛书最终为 8 卷 10 分册.总计起来，丛书编审历时近 20 年，耗费近 40 位富有科研和教学经验的教授、约 150 位 20 世纪 80 年代和现在的研究生及高年级本科生的巨大辛劳.丛书确实是众人长期合作辛劳的结晶!

现在的再版，题目主要来源当然依旧是美国所有著名大学物理类研究生的入学试题，但也收录了部分编审老师的积累.内容除涵盖力、热、光、电、近代物理到四大力学全部基础物理学之外，还包括了原子核物理、粒子物理、凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、激光物理、量子光学和量子信息物理.于是，追踪不断发展的科学轨迹，现在这套丛书仍然大体涵盖了综合性大学全部本科物理课程内容.

这里应当强调指出两点：其一，一般地说，人们过去熟悉的苏联习题模式常常偏重

基础知识、偏于计算推导、偏向基本功训练；与此相比，美国物理试题涉及的数学并不繁难，但却或多或少具有以下特色：内容新颖，富于“当代感”，思路灵活，涉及面宽广，方法和结论简单实用，试题往往涉及新兴和边沿交叉学科，不少试题本身似乎显得粗糙但却抓住了物理本质，显得“物理味”很足！纵观比较，编审者深切感到，这些考题的集合在一定程度上体现着美国科学文化个性及思维方式特色！唯鉴于此，大家不惮繁重，集众多人力而不怯，耗漫长岁月而不辍，是值得的！另外，扩充修订中增添的题目，也是本着这种精神，摘自编审老师各自科研工作成果，或是来自各人教学心得，实是点滴聚成.

其二，对于学生，的确有一个正确使用习题集的问题. 有的同学，有习题集也不参考，咬牙硬顶，一个晚上自习时间只做了两道题. 这种精神诚应嘉勉，但效率不高，也容易挫伤积极性，不利于培养学习兴趣；另有些同学，逮到合适解答提笔就抄，这样做是浮躁不踏实的. 两种学习方法都不可取. 编审者认为，正确使用习题集是一个“三步曲”过程：遇到一道题，先自己想一想，想出来了自己做最好；如果认真想了些时间还想不出来，就不要老想了，不妨翻开习题集找寻答案，看懂之后，合上书自己把题目做出来；最后，要是参考习题集做出来的，花费一两分钟时间分析解剖一下自己，找找存在的不足，今后注意. 如此“三步曲”下来，就既踏实又有效率. 本来，效率和踏实是一对矛盾，在这一类“治学小道”之下，它俩就统一起来了. 总之，正确使用之下的习题集肯定能够成为学生们有用的“爬山”拐杖.

丛书第一版是在科学出版社胡升华博士倡议和支持下进行的，同时也获得刘万东教授、杜江峰教授的支持. 没有他们推动和支持，丛书面世是不可能的. 这次再版工作又承科学出版社昌盛先生全力支持，并再次获得中国科技大学物理学院和教务处的支持. 对于这些宝贵支持，编审同仁们表示深切谢意.

※　※　※　※　※　※　※　※

《固体物理及物理量测量》卷是在林鸿生、章世玲等编著版本基础上重新审校修订而成. 而原书则是在张家铝、周又元、章世玲编审的《相对论、固体物理及其他》一书基础上扩充而来. 原书自 2005 年成书以来，在固体物理教学中得到比较广泛使用，同时也有不少意见反馈. 此次重新修订，由王冠中和翁明其审校，对书中题目略作调整，删除其中和书名关系不大的数学类题目，对解题错漏和印刷错误进行更正. 但是由于审校工作比较匆忙，也由于我们学识有限，书中仍然会有不少错漏和不妥之处，希望读者继续给予批评和指教.

编审者谨识

2005 年 5 月

2018 年 8 月修改

目　　录

第一章　固体物理

第一节　晶体结构

1.1　如图 1.1 所示，这是由原子排列在正方格子上而构成的一假想的二维晶体.

(1) 标出一个原胞；

(2) 定义倒格子点阵并解释它同布拉格反射的关系；

(3) 画出倒格子点阵和第一布里渊区，该区与布拉格反射的关系如何；

(4) 叙述并解释布洛赫定理，即在点阵的势场中运动的电子具有行波波函数，该定理必须采用什么边界条件？

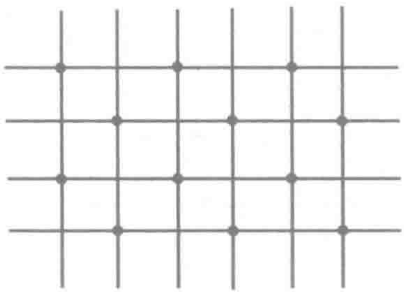

图 1.1

解　(1) 原胞如图 1.2 所示，四个角顶上都有原子占据，但属于原胞的仅有一个原子. 若设方格边长为 a，则原胞基矢为

$$\boldsymbol{a}_1 = a(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{j})$$
$$\boldsymbol{a}_2 = a(\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j})$$

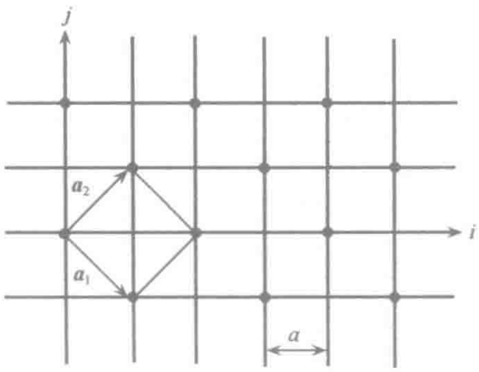

图 1.2

(2) 设 $\boldsymbol{a}_i(i=1,2)$为正格子基矢，则由关系式

$$\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_j=\begin{cases}2\pi, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases}$$

所确定的 $\boldsymbol{b}_i(i=1,2)$为基矢的点阵，称为正格子的倒格子.

在倒格子空间，布拉格反射条件为：反射波矢 $\boldsymbol{k}$ 与入射波矢 $\boldsymbol{k}_0$ 相差一个或几个倒格矢 $n\boldsymbol{G}_h$，即

$$\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0=n\boldsymbol{G}_h$$

(3) $\boldsymbol{i}$ 与 $\boldsymbol{j}$ 是相互垂直的单位矢量，取单位矢量 $\boldsymbol{k}$ 垂直于 $\boldsymbol{i}$ 和 $\boldsymbol{j}$，则 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2$ 和 $\boldsymbol{k}$ 构成的体积

$$\Omega=\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{k})=(a\boldsymbol{i}-a\boldsymbol{j})\cdot(a\boldsymbol{i}-a\boldsymbol{j})=2a^2$$

根据倒格子基矢定义

$$\boldsymbol{b}_1=\frac{2\pi(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{k})}{\Omega}=\frac{2\pi}{2a^2}\times(a\boldsymbol{i}-a\boldsymbol{j})=\frac{\pi}{a}(\boldsymbol{i}-\boldsymbol{j})$$

$$\boldsymbol{b}_2=\frac{2\pi(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{a}_1)}{\Omega}=\frac{2\pi}{2a^2}\times(a\boldsymbol{i}+a\boldsymbol{j})=\frac{\pi}{a}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j})$$

显然这将构成二维正方倒格子点阵，图 1.3 示出倒格子点阵和第一布里渊区，在布里渊区边界上将发生布拉格反射.

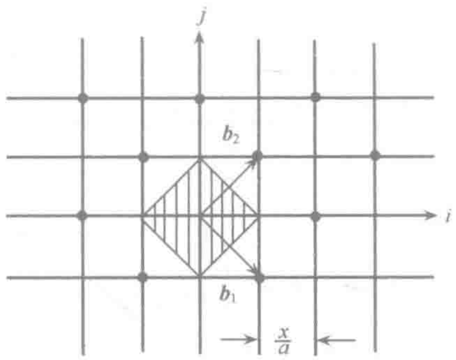

图 1.3

(4) 在点阵周期势场中运动的电子波函数是布洛赫波即

$$\psi_k(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_k(\boldsymbol{r})$$

式中函数 $u_k(\boldsymbol{r})$具有晶格平移对称性

$$u_k(\boldsymbol{r})=u_k(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})$$

其中 $\boldsymbol{R}$ 是晶格格矢. 这是受晶格周期势场调制的平面波，此即布洛赫定理. 布洛赫波的指数部分是平面波，描述了晶体中电子的共有化运动，而周期函数则描述了晶体中电子围绕原子核的运动，因而布洛赫波正是反映晶体中电子运动的特点.

布洛赫定理必须采用玻恩-冯卡门周期性边界条件.

1.2　锗硅半导体材料具有金刚石结构，设其晶格常数为 a.

(1) 画出(1,1,0)面二维格子的原胞，并给出它的基矢；

(2) 试画出二维格子的第一、二布里渊区.

解 (1) 参照图 1.4 锗硅晶体金刚石结构,画出其(1,1,0)面二维格子的固体物理学原胞如图 1.5.

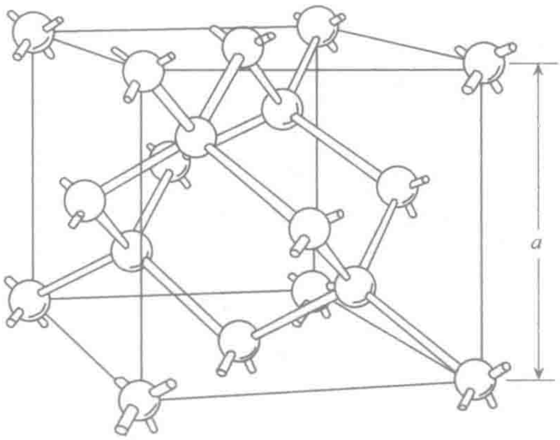

图 1.4 锗硅金刚石结构

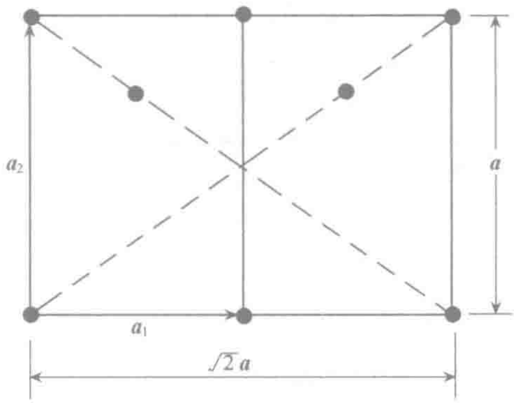

图 1.5

原胞基矢为

$$\boldsymbol{a}_1=\frac{\sqrt{2}}{2}a\boldsymbol{i}$$

$$\boldsymbol{a}_2=a\boldsymbol{j}$$

原胞体积

$$\Omega=\boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{a}_2=\frac{\sqrt{2}}{2}a^2$$

引入垂直于 $\boldsymbol{i}$ 和 $\boldsymbol{j}$ 单位矢量 $\boldsymbol{k}$,则金刚石结构(1,1,0)面二维格子的倒格子基矢

$$\boldsymbol{b}_1=\frac{2\pi(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{k})}{\Omega}=\frac{2\sqrt{2}\pi}{a^2}a\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{k}=\frac{2\sqrt{2}\pi}{a}\boldsymbol{i}$$

$$\boldsymbol{b}_2=\frac{2\pi(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{a}_1)}{\Omega}=\frac{2\sqrt{2}\pi}{a^2}\boldsymbol{k}\times\frac{\sqrt{2}}{2}a\boldsymbol{i}=\frac{2\pi}{a}\boldsymbol{j}$$

(2) 倒格子矢量 $\boldsymbol{G}_h$

$$\boldsymbol{G}_h = n_1\boldsymbol{b}_1 + n_2\boldsymbol{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\sqrt{2}n_1\boldsymbol{i} + n_2\boldsymbol{j})$$

布里渊区边界方程

$$\boldsymbol{G}_h \cdot \left(\boldsymbol{k} + \frac{1}{2}\boldsymbol{G}_h\right) = 0$$

此处 $\boldsymbol{k}$ (k_x, k_y)表示二维矩形晶格中电子状态，上述方程可写成

$$\frac{4\pi^2}{a^2}(2n_1^2 + n_2^2) = \frac{4\pi}{a}(\sqrt{2}n_1k_x + n_2k_y)$$

即

$$\sqrt{2}n_1k_x + n_2k_y = \frac{\pi}{a}(2n_1^2 + n_2^2)$$

于是

$$n_1 = \pm 1, n_2 = 0 \text{ 时}, \qquad k_x = \pm\frac{\sqrt{2}\pi}{a} \tag{1}$$

$$n_1 = 0, \ n_2 = \pm 1 \text{ 时}, \qquad k_y = \pm\frac{\pi}{a} \tag{2}$$

$$n_1 = \pm 1, n_2 = \pm 1 \text{ 时}, \qquad \pm\sqrt{2}k_x + k_y = \frac{3\pi}{a} \tag{3}$$

$$n_1 = \pm 2, n_2 = 0 \text{ 时}, \qquad k_x = \pm\frac{2\sqrt{2}\pi}{a} \tag{4}$$

$$n_1 = 0, \ n_2 = \pm 2 \text{ 时}, \qquad k_y = \pm\frac{2\pi}{a} \tag{5}$$

这样由(1),(2)两式围成的是第一布里渊区，而(1)～(5)式围成的是第二布里渊区，如图 1.6 所示.

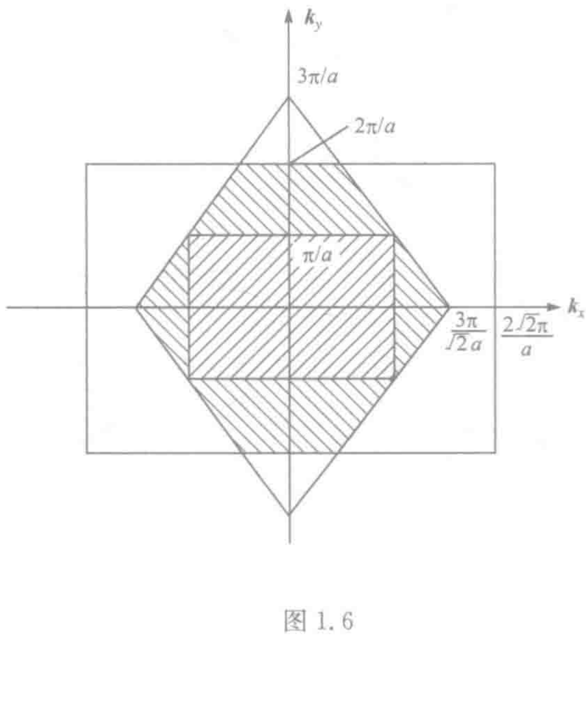

图 1.6

1.3 布拉维格子的基矢选择不是唯一的,例如由原子排列在正方格子上而构成的一个二维晶体,如图 1.7 所示,有三种可能的基矢选取方法.

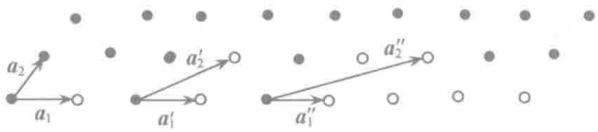

图 1.7

(1) 说明这三种选取的都是二维布拉维格子的固体物理学原胞;

(2) 求这三种基矢所对应的倒格子基矢;

(3) 这三种倒格子基矢所对应的倒格子是否唯一的,何故?

解 (1) 从图 1.7 看出,这三种选取的基矢所对应的原胞的 4 个格点分别只有 1/4 原子是属于该原胞的,一个原胞都只有一个原子,还可以证明这三种原胞的体积大小也都一样,所以它们都是二维布拉维格子的固体物理学原胞,它们的基矢分别表示如下:

第一种基矢选择

$$\boldsymbol{a}_1$$

$$\boldsymbol{a}_2$$

第二种基矢选择

$$\boldsymbol{a}_1' = \boldsymbol{a}_1$$

$$\boldsymbol{a}_2' = \boldsymbol{a}_1' + \boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2$$

第三种基矢选择

$$\boldsymbol{a}_1'' = \boldsymbol{a}_1$$

$$\boldsymbol{a}_2'' = 2\boldsymbol{a}_1'' + \boldsymbol{a}_2 = 2\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2$$

显然表示二维布拉维格子固体物理学原胞的三组基矢 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2; \boldsymbol{a}_1', \boldsymbol{a}_2'; \boldsymbol{a}_1'', \boldsymbol{a}_2''$ 可互相线性表示(系数全是整数),不是独立的. 选取 $\boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{a}_3' = \boldsymbol{a}_3'' = \boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}$ 是垂直于二维格子平面的单位矢量,则它们的体积分别是

$$\Omega_1 = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{k})$$

$$\begin{aligned}\Omega_2 &= \boldsymbol{a}_1' \cdot (\boldsymbol{a}_2' \times \boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a}_1 \cdot [(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2) \times \boldsymbol{k}] \\ &= \boldsymbol{a}_1 \cdot [(\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{k}) + (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{k})] = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{k})\end{aligned}$$

同样

$$\Omega_3 = \boldsymbol{a}_1'' \cdot (\boldsymbol{a}_2'' \times \boldsymbol{k}) = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{k})$$

所以

$$\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega_3 = \Omega$$

三种原胞的体积相等,得证.

(2) 依照倒格子基矢定义.

第一种正格子相应的倒格子基矢

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{k}}{\Omega}, \quad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi \frac{\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{a}_1}{\Omega}$$

第二种正格子相应的倒格子基矢

$$b_1' = 2\pi \frac{a_2' \times k}{\Omega} = 2\pi \frac{(a_1 + a_2) \times k}{\Omega}$$

$$= 2\pi \frac{a_1 \times k}{\Omega} + 2\pi \frac{a_2 \times k}{\Omega} = b_1 - b_2$$

$$b_2' = 2\pi \frac{k \times a_1'}{\Omega} = 2\pi \frac{k \times a_1}{\Omega} = b_2$$

第三种正格子相应的倒格子基矢

$$b_1'' = 2\pi \frac{a_2'' \times k}{\Omega} = 2\pi \frac{(2a_1 + a_2) \times k}{\Omega} = b_1 - 2b_2$$

$$b_2'' = 2\pi \frac{k \times a_1''}{\Omega} = 2\pi \frac{k \times a_1}{\Omega} = b_2$$

同样,这三组倒格子基矢 $b_1, b_2; b_1', b_2'; b_1'', b_2''$ 也可互相线性转换,转换系数全是整数.

(3) 这三组倒格子基矢不是互相独立而是可以相互线性转换的,反映了它们都只是表示同一倒格子点阵. 因此,倒格子空间平移对称性使得,在以 $b_1^{(l)}, b_2^{(l)}, b_3^{(l)}$ 为基的倒格子空间中的一个倒格矢量 $G_h^{(l)}$,也是基矢 $b_1^{(l)}, b_2^{(l)}, b_3^{(l)}$ 线性转换而来的基矢 $b_1^{(m)}, b_2^{(m)}, b_3^{(m)}$ 为基的倒格子空间中的一个倒格矢量. 这表明虽然一个布拉维格子的基矢选择有任意性,相应的倒格子基矢也有任意性,但倒格子却是由布拉维正格子所唯一确定的.

1.4 (1) 在六角晶系中,晶面常用四个指数(h,k,l,m)表示,它们代表一个晶面在六角形平面基矢 a_1, a_2, a_3(三基矢长度相等,等于 a,且两两交角为 120°)轴上的截距为$\frac{a_1}{h}$, $\frac{a_2}{k}$, $\frac{a_3}{l}$的整倍数,在六次轴上的截距为$\frac{c}{m}$的整倍数,试证

$$h + k + l = 0$$

(2) 求米勒指数$(1,1,\bar{2},0)$与$(1,\bar{1},0,1)$晶面的法线方向间的夹角

解 (1) 如图 1.8 所示,某一晶面 MN 与六角形平面基矢 a_1, a_2, a_3 轴上的截距

$$\overline{OA} = \frac{a}{h} n, \quad \overline{OB} = -\frac{a}{k} n, \quad \overline{OC} = \frac{a}{l} n$$

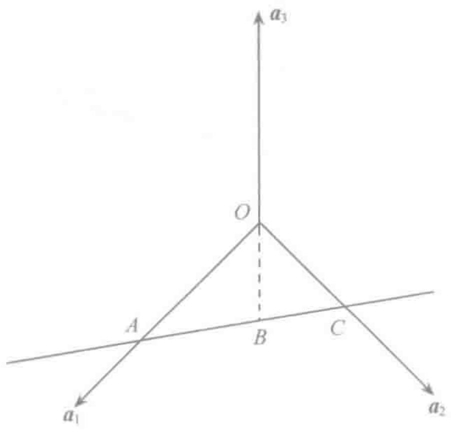

图 1.8

且

$$\angle AOB = \angle COB = 60^\circ,\quad \angle AOC = 120^\circ$$

有

$$\triangle AOB(\text{面积}) + \triangle COB(\text{面积}) = \triangle AOC(\text{面积})$$

即

$$\frac{1}{2}\,\overline{OA}\cdot\overline{OB}\sin\angle AOB + \frac{1}{2}\,\overline{OC}\cdot\overline{OB}\sin\angle COB = \frac{1}{2}\,\overline{OA}\cdot\overline{OC}\sin\angle AOC$$

代入$\overline{OA}$,$\overline{OC}$,$\overline{OB}$和$\angle AOB$,$\angle COB$,$\angle AOC$值,有

$$\frac{1}{2}\,\frac{a}{h}\cdot n\cdot\left(-\frac{a}{k}\right)\cdot n\cdot\sin 60^\circ + \frac{1}{2}\left(\frac{a}{l}\right)\cdot n\cdot\left(-\frac{a}{k}\right)\cdot n\cdot\sin 60^\circ$$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{a}{h}\right)\cdot n\left(\frac{a}{l}\right)\cdot n\cdot\sin 120^\circ$$

$$-\frac{1}{hk}-\frac{1}{lk}=\frac{1}{hl}$$

方程两边乘以(hkl),移项得

$$h+k+l=0$$

得证.

(2) $h+k+l=0$ 表明,h,k,l 不是独立的,$l=-h-k$,可以用(h,k,m)来表示六角晶系的面指数,所以晶面$(1,1,\bar{2},0)$即晶面$(1,1,0)$,晶面$(1,\bar{1},0,1)$即晶面$(1,\bar{1},1)$. 图 1.9 是六角晶系一个原胞,即晶胞,$|\boldsymbol{a}|=|\boldsymbol{b}|=a$,

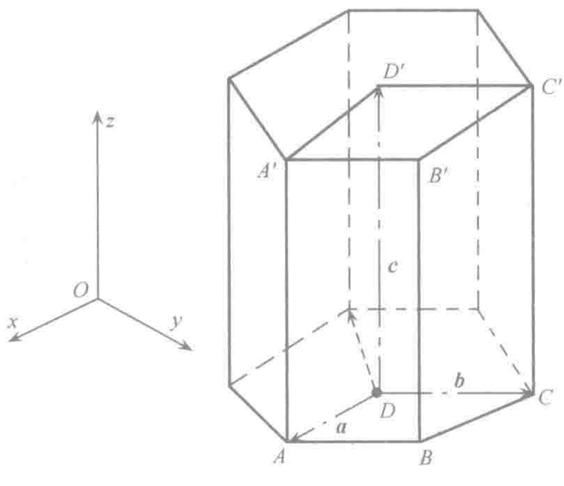

图 1.9

引进直角坐标系 $Oxyz$,使 x 与 z 轴分别与基矢 $\boldsymbol{a}$,$\boldsymbol{c}$ 重合,基矢 $\boldsymbol{a}$,$\boldsymbol{b}$,$\boldsymbol{c}$ 表示为

$$\boldsymbol{a} = a\boldsymbol{i}$$

$$\boldsymbol{b} = -\frac{1}{2}a\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\boldsymbol{j}$$

$$\boldsymbol{c} = c\boldsymbol{k}$$

式中,$\boldsymbol{i}$,$\boldsymbol{j}$,$\boldsymbol{k}$ 分别是 x,y,z 轴方向的单位矢量,该原胞的倒格子基矢是

$$a^* = \frac{2\pi}{\Omega}(b\times c) = \frac{2\pi}{\Omega}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ac\boldsymbol{i} + \frac{1}{2}ac\boldsymbol{j}\right)$$

$$b^* = \frac{2\pi}{\Omega}(c\times a) = \frac{2\pi}{\Omega}ac\boldsymbol{j}$$

$$c^* = \frac{2\pi}{\Omega}(a\times b) = \frac{2\pi}{\Omega}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a^2\boldsymbol{k}\right)$$

式中，Ω 是晶胞体积

$$\Omega = |\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})| = |\boldsymbol{b}\cdot(\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a})| = \left|\left(-\frac{1}{2}a\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\boldsymbol{j}\right)\cdot(ac\boldsymbol{j})\right| = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$$

故六角晶系的晶胞倒格子基矢

$$a^* = \frac{2\pi}{a}\left(\boldsymbol{i} + \frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j}\right)$$

$$b^* = \frac{2\pi}{a}\frac{2}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j}$$

$$c^* = \frac{2\pi}{c}\boldsymbol{k}$$

根据上面的讨论，六角晶系中$(1,1,\bar{2},0)$晶面也即$(1,1,0)$晶面，则其法线矢量 $\boldsymbol{G}_{(110)}$ 为

$$\boldsymbol{G}_{(110)} = \frac{2\pi}{a}\left(\boldsymbol{i} + \frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j}\right) + \frac{2\pi}{a}\frac{2}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j} = \frac{2\pi}{a}(\boldsymbol{i} + \sqrt{3}\boldsymbol{j})$$

同样，六角晶系中$(1,\bar{1},0,1)$晶面也即$(1,\bar{1},1)$晶面，其法线矢量 $\boldsymbol{G}_{(1\bar{1}1)}$ 为

$$\boldsymbol{G}_{(1\bar{1}1)} = \frac{2\pi}{a}\left(\boldsymbol{i} + \frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j}\right) - \frac{2\pi}{a}\frac{2}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j} + \frac{2\pi}{c}\boldsymbol{k}$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left(\boldsymbol{i} - \frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j}\right) + \frac{2\pi}{c}\boldsymbol{k}$$

设 $\boldsymbol{G}_{(110)}$ 与 $\boldsymbol{G}_{(1\bar{1}1)}$ 的夹角为 α，有

$$\cos\alpha = \frac{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\left(1\times1 + \sqrt{3}\times\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + 0\times0\right)}{|\boldsymbol{G}_{(110)}|\cdot|\boldsymbol{G}_{(1\bar{1}1)}|} = \frac{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2(1-1)}{|\boldsymbol{G}_{(110)}|\cdot|\boldsymbol{G}_{(1\bar{1}1)}|} = 0$$

所以，六角晶系中$(1,1,\bar{2},0)$与$(1,\bar{1},0,1)$两晶面的法线方向相互垂直.

1.5　试证明在立方晶系中：

(1) 晶面族(h,k,l)的法线的晶列指数为$[h,k,l]$；

(2) 晶向$[u_1,v_1,w_1]$与晶向$[u_2,v_2,w_2]$的交角满足

$$\cos\alpha = \frac{u_1u_2 + v_1v_2 + w_1w_2}{\sqrt{u_1^2+v_1^2+w_1^2}\cdot\sqrt{u_2^2+v_2^2+w_2^2}}$$

(3) 晶列$[u,v,w]$与晶面族(hkl)的法线的交角为

$$\cos\beta = \frac{uh + vk + wl}{\sqrt{u^2+v^2+w^2}\cdot\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

(4) 晶面(h_1,k_1,l_1)与晶面(h_2,k_2,l_2)的法线之间夹角为