

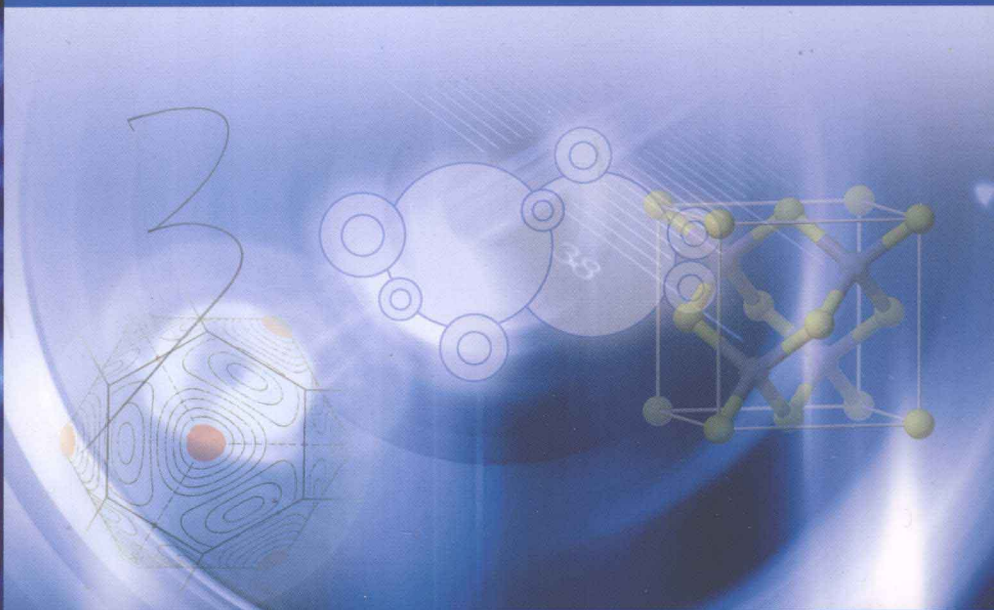


高等学校理工类课程学习辅导丛书

黄 昆 原著

固体物理学 习题解答

李延龄 吕华平



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS



高等学校理工类课程学习辅导丛书

黄 昆 原著

固体物理学 习题解答

Guti Wulixue Xiti Jieda

李延龄 吕华平



高等教育出版社·北京
HIGHER EDUCATION PRESS BEIJING

内容提要

本书依照黄昆原著、韩汝琦改编的《固体物理学》教材的主要章节的知识体系编写而成,包括晶体结构、固体的结合、晶格振动与晶体的热学性质、能带理论、晶体中电子在电磁场中的运动、金属电子论和半导体电子论等内容。在每一章中,从学习目标、内容概述和习题解答等方面进行介绍。在习题解答部分,作为必要补充,增加了部分习题并给予解答。本书对学生把握教材,灵活运用理论知识解题,具有一定的指导意义。

本书可供普通高等学校物理学和材料学专业学生或相关专业的本科生、研究生学习之用,也可作为教师的参考教材。

图书在版编目(CIP)数据

固体物理学习题解答 / 李延龄, 吕华平主编. -- 北京: 高等教育出版社, 2012. 1

ISBN 978-7-04-034118-8

I. ①固… II. ①李… ②吕… III. ①固体物理学—高等学校—题解 IV. ①O48-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 273730 号

策划编辑	忻 蓓	责任编辑	张海雁	封面设计	张 志	版式设计	马敬茹
插图绘制	尹 莉	责任校对	窦丽娜	责任印制	张福涛		

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街4号
邮政编码 100120
印 刷 北京七色印务有限公司
开 本 787mm×960mm 1/16
印 张 8
字 数 140 千字
购书热线 010-58581118

咨询电话 400-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>
网上订购 <http://www.landraco.com>
<http://www.landraco.com.cn>
版 次 2012 年 1 月第 1 版
印 次 2012 年 1 月第 1 次印刷
定 价 13.30 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题, 请到所购图书销售部门联系调换
版权所有 侵权必究
物 料 号 34118-00

前 言

凝聚态物理学是从微观角度出发,研究由大量粒子组成的凝聚相的结构、缺陷、动力学过程及其与宏观物理性质之间的联系的一门学科。凝聚态物理学的研究对象不但包括晶体、非晶体与准晶体等固态物质,还包括从稠密气体、液体以及介于固体和液体之间的中间态,如液晶、玻璃态、等离子体及低温下的特殊量子态(如超流)等。凝聚态物理学通过研究构成体系的粒子与粒子间的相互作用来认识凝聚态物质世界。

固体物理学是凝聚态物理学的一个重要分支,是从事凝聚态物理学和相关学科科学研究的基础。目前,各高校以及研究所的物理专业、化学的有关专业、生物物理专业、电子专业和材料学等专业都已经开设固体物理课程。固体物理学是在量子力学和统计力学的基础上发展起来的,考虑到量子力学和统计力学本身对于大多数学生来说并不容易学习,因此学好固体物理学具有一定的难度。

目前,国内有十余种固体物理方面的教材。其中,黄昆原著、韩汝琦改编的《固体物理学》教材,是国内固体物理方面的经典教材,1990年获全国优秀教材特等奖,1996年获国家级科学技术进步二等奖,颇受欢迎。目前,凝聚态物理发展迅速,各高校很多专业将固体物理作为研究生入学考试科目,指定黄昆原著的《固体物理学》作为主要参考书。考虑到学生在学习过程中,普遍反映部分课后习题较难,应高等教育出版社邀请,我们编写《固体物理学习题解答》一书。本书在编写过程中,注重对于基本理论和概念的阐述,在内容概述部分简要阐述了章节内容的主要知识点,并总结了一些重要结论,相信这样做可以帮助学生更好地掌握固体物理的基本概念和基本理论。在习题解答部分,根据教材知识体系的需要,我们增加了部分习题并给予解答,增加的题目用*号标示。

本书是在长期的固体物理教学实践中完成的。编写固体物理方面的辅导书的想法,可追溯到9年前。2002年,编者获得学校资助,主持徐州师范大学第六批重点课程“固体物理”课程的建设。按照课程建设的要求,在2003年我们编写《固体物理学学习指导》辅助教材,并在内部使用。本习题解答是在此辅助教材的基础上改编而成的。

作者感谢徐州师范大学课程建设和教材建设基金的资助,感谢徐州师范大学物理与电子工程学院徐庆强博士在本书编写过程中提出的有价值的建议。我

们在编写中,参考了部分学习指导书和习题解答,在这里向这些书的作者表示感谢。

由于作者水平有限,书中难免有错误和不妥之处,恳请大家批评、指正。

编 者

2011 年 4 月

目 录

第一章 晶体结构	1
一、学习目标	1
二、内容概述	1
三、习题解答	5
第二章 固体的结合	16
一、学习目标	16
二、内容概述	16
三、习题解答	19
第三章 晶格振动与晶体的热学性质	27
一、学习目标	27
二、内容概述	27
三、习题解答	36
第四章 能带理论	54
一、学习目标	54
二、内容概述	54
三、习题解答	64
第五章 晶体中电子在电场和磁场中的运动	86
一、学习目标	86
二、内容概述	86
三、习题解答	91
第六章 金属电子论	100
一、学习目标	100
二、内容概述	100
三、习题解答	104

第七章 半导体电子论	114
一、学习目标	114
二、内容概述	114
三、习题解答	117
主要参考书目	121

第一章 晶体结构

一、学习目标

1. 了解晶体的基本结构, 掌握晶体学单胞和原胞的概念;
2. 掌握 W-S 原胞的概念, 会画出简单的 W-S 原胞;
3. 理解并掌握晶面的表示方法, 掌握面间距的有关计算;
4. 掌握倒格子的概念, 明确倒格子和正格子的关系;
5. 了解晶体学中的 14 种布拉伐格子及其特征。

二、内容概述

1. 布拉伐格子 (Bravais lattice) 和基矢

晶体结构的特点: 原子排列的周期性。

布拉伐格子是矢量 $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ 全部端点的集合, 其中 n_1, n_2, n_3 均为整数, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 是三个不共面的矢量, 称为布拉伐格子的基矢 (primitive vector), $\mathbf{R}_n$ 称为布拉伐格子的格矢, 其端点为格点 (lattice site)。所有格点周围均相同, 在几何上等价。

基矢所构成的平行六面体是布拉伐格子的最小重复单元。对于一个给定的格子, 基矢的选择不唯一。

2. 原胞 (primitive cell)

原胞是布拉伐格子中体积最小的周期性重复单元。当平移布拉伐格子所有可能的格矢 $\mathbf{R}_n$, 将精确地填满整个空间, 常取为以基矢为棱边的平行六面体, 体积为 $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ 。

原胞有多种取法, 但是无论如何选取, 原胞均有相同的体积。每个原胞只包含一个格点。对有限大的晶体, 所含原胞数和格点数相等。

3. 单胞 (unit cell)

单胞是为了反映格子的对称性而选用的晶胞。晶体学中, 习惯用晶系基矢 a, b, c 构成的平行六面体作为周期性重复排列的最小单元, 这称为单胞。单胞可以含有一个或多个格点, 体积是原胞的一倍或多倍。单胞的边长称为晶格常量 (lattice constant)。

例如, 简单立方 (sc)、体心立方 (bcc)、和面心立方 (fcc) 单胞均为立方体, 包含的格点数分别为 1、2、4, 其单胞体积为原胞体积的 1、2、4 倍。

4. 维格纳 - 塞茨 (Wigner-Seitz) 原胞——W-S 原胞

以布拉伐格子中某一格点为中心, 作其与近邻格点连线的垂直平分面, 这些平面所围成的以该点为中心的最小体积是属于该点的 W-S 原胞。

5. 配位数 (coordination number)

在布拉伐格子中, 离某一格点最近的格点, 称为该格点的最近邻 (nearest neighbor)。由于布拉伐格子中格点相互等价, 每一格点有相同的最近邻数, 这称为该格子的配位数, 用符号 Z 表示。

6. 晶体结构

为区别实际晶体与布拉伐格子, 通常彩用晶体结构的概念。

理想的晶体结构是由相同的物理单元放置在布拉伐格子的格点上构成的。这些物理单元称为基元, 它可以是原子、分子或分子团。将基元平移布拉伐格子的所有格矢, 就得到晶体结构 (晶格), 或等价地表示为

$$\text{基元} + \text{格子} = \text{晶体结构}$$

晶体中原子排列的具体形式, 称为晶格。晶格分为简单晶格和复式晶格。在简单晶格中, 每个原胞有一个原子; 在复式晶格中, 每一个原胞包含两个或更多的原子 (只要是几何环境不等价, 就可视为不同原子, 如金刚石结构中有两类不等价的碳原子)。

7. 简单晶体结构

简单立方 (sc)、体心立方 (bcc) 和面心立方 (fcc) 结构的特征如表 1.1 所示。

此外, 简单晶体结构还有: 金刚石结构、六角密堆积结构 (hcp)、氯化钠结构、氯化铯结构和闪锌矿结构等。

表 1.1 sc、bcc 和 fcc 结构的特征

	sc	bcc	fcc
惯用晶胞 (单胞) 体积	a^3	a^3	a^3
每单胞包含的格点数	1	2	4
初基晶胞 (原胞) 体积	a^3	$\frac{1}{2}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$
阵点密度	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
最近邻数	6	8	12
最近邻间距	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{1}{\sqrt{2}}a$
次近邻数	12	6	6
次近邻距离	$\sqrt{2}a$	a	a
堆积比率	$\frac{\pi}{6} = 0.524$	$\frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0.680$	$\frac{\sqrt{2}\pi}{6} = 0.740$
倒格子类型	sc	fcc	bcc

8. 晶向指数和晶面指数

晶向指数: 同一个格子可以形成不同的晶列, 每个晶列定义了一个方向, 称为晶向。如果从一个原子到最近的原子的位移矢量为 $l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$, 则晶向就用 l_1, l_2, l_3 来表示, 记作 $[l_1l_2l_3]$, 标志晶向的这组数称为晶向指数。如果涉及负的指数, 按惯例用头上加一横线来表示。

晶面指数 (密勒指数): 找出该晶面在晶轴上的以晶轴长度 a_1, a_2, a_3 量度的截距; 取这些截距的倒数, 化为具有相同比例的三个整数。通常要消去公因子, 化为三个最小整数, 括在圆括号里 ($h_1h_2h_3$)。密勒指数用来标志晶面系。

晶面指数和晶向指数依赖于晶轴的选取。

说明:

对于一定的晶体, 原子的体密度 ρ 是一定的, 设面间距为 d , 根据

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{N}{Sd} = \frac{\sigma}{d}$$

可得: 晶面的原子面密度 σ 等于原子体密度 ρ 乘以面间距 d , 因此面间距大的晶面系其原子面密度大, 面间距小的晶面系其原子面密度小。

9. 倒格子及其性质

(1) 倒格子

和一种晶体结构相联系的有两种晶格: 正格子和倒格子。前者是由真实空间中的格点构成的, 具有长度的量纲, 后者是与真实空间相联系的傅里叶空间中的格子, 具有长度⁻¹的量纲。

一个具有晶格周期的周期函数 $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$ 展成傅里叶级数后, 其傅里叶级数中的波矢在傅里叶空间中表现为一系列规则排列的点, 这些点排列的规律性只决定于函数 $V(\mathbf{r})$ 的周期性而与函数的具体形式无关。我们把在傅里叶空间中规则排列的点构成的格子称为倒格子。倒格子是晶体结构周期性在傅里叶空间中的数学抽象。若把正格子本身看作一个周期函数, 我们可以说, 倒格子是正格子的傅里叶变换。反之亦然。

倒格子的基矢定义为

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \end{aligned} \right\} \quad (1.1)$$

其中 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 为正格子的基矢。倒格子中每个格点的位置为

$$\mathbf{G}_{n_1 n_2 n_3} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3 \quad (1.2)$$

称为倒格矢。

(2) 倒格子的性质

(a) 正格子和倒格子基矢关系:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1.3)$$

(b) 正格子原胞体积 Ω 和倒格子原胞体积 Ω^* 满足

$$\Omega \cdot \Omega^* = (2\pi)^3 \quad (1.4)$$

(c) 正格子中一簇晶面 $(h_1 h_2 h_3)$ 和倒格矢 $\mathbf{G}_{h_1 h_2 h_3} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3$ 正交。

(d) 倒格矢 $\mathbf{G}_{h_1 h_2 h_3}$ 的长度正比于晶面簇 $(h_1 h_2 h_3)$ 面间距 d 的倒数:

$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{h_1 h_2 h_3}|} \quad (1.5)$$

(e) 倒格子中的 W-S 原胞称为第一布里渊区 (first Brillouin zone)。

10. 晶体的宏观对称性、点群

原子的周期性排列, 在宏观上表现为晶体具有对称性。考察晶体的宏观对称性, 即为研究晶体在正交变换下的不变性。若一个物体在一正交变换下不变, 则称该正交变换为物体的一个对称操作。对称操作可分成两类: 平移对称操作和点对称操作。相应的对称性为: 平移对称性 (或称为周期性) 和点对称性。

对称操作在数学中可构成一个群。平移对称操作构成的群称为平移群; 点对称操作构成的群称为点群, 二者合起来构成空间群。在空间群中, 不仅包括平移对称操作及点对称操作, 而且还包括作点对称操作后再作平移的对称操作。

晶体的周期性对晶体的对称操作进行限制。由于晶体同时具有周期性和点对称性, 晶体只可能有 1、2、3、4 和 6 度旋转对称轴, 否则将破坏晶体的周期性。晶体可能的点对称操作有: 1、2、3、4 和 6 度旋转对称操作和在前者基础上再作中心反演对称操作。

点对称性反过来限制晶体的周期性。考虑到晶体可能有的所有点对称性, 布拉伐格子共有 7 类, 称为 7 大晶系: 三斜晶系; 单斜晶系; 正交晶系; 三角晶系; 四方晶系; 六角晶系; 立方晶系。由于单斜、正交、四方和立方晶系可以在单胞中增加体心、面心或底心格点, 使得 7 个晶系共有 14 种布拉伐格子。

晶体中, 共有 32 个点群, 230 种空间群。对应于每种空间群, 原子可能的排列均有标准的空间群表可以查询, 如网址 <http://www.cryst.ehu.es/>。

11. 晶体表面的几何结构

晶体表面可用二维的布拉伐格子表征。晶体表面物理量具有二维周期性, 可用二维倒格子空间表示。定义 $\mathbf{a}_3$ 为垂直于表面的单位矢量, 则倒格子基矢为

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

三、习题解答

1.1 如果将等体积球分别排成下列结构, 设 x 表示刚球所占体积与总体积之比, 证明

结构	x
简单立方	$\pi/6 \approx 0.52$
体心立方	$\sqrt{3}\pi/8 \approx 0.68$

面心立方	$\sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$
六方密排	$\sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$
金刚石	$\sqrt{3}\pi/16 \approx 0.34$

证明:

设想晶体由刚性原子球堆积而成, n 为一个晶胞中的刚性原子球数, r 表示刚性原子球半径, V 表示晶胞体积, 则 $x = \frac{n}{V} \frac{4}{3}\pi r^3$ 。

(1) 简单立方

对简单立方晶体, 任一个原子有 6 个最近邻, 如图 1.1(a) 所示, 中心在 1、2、3 和 4 处的原子球将依次相切。

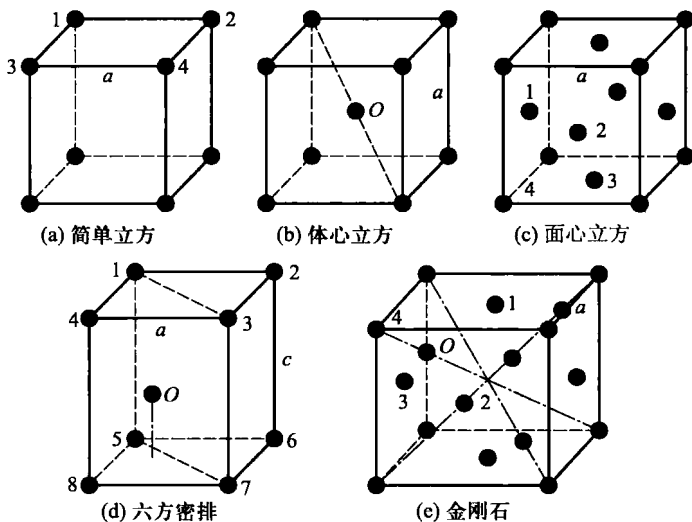


图 1.1 5 种晶格结构示意图

因为 $a = 2r$, $V = a^3 = 8r^3$, 1 个晶胞内包括 1 个原子, 所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{1}{8r^3} \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{\pi}{6} \approx 0.52$$

(2) 体心立方

对体心立方晶体, 任一个原子有 8 个最近邻, 如图 1.1(b) 所示。体心位置 O 的原子球与处在 8 个角顶位置的原子球相切, 因此晶胞空间对角线的长度为

$\sqrt{3}a = 4r$, $V = a^3$, 1 个晶胞内包含 2 个原子, 所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{2}{a^3} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4} a \right)^3 = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.68$$

(3) 面心立方

对面心立方晶体, 任一个原子有 12 个最近邻, 如图 1.1(c) 所示。中心位于晶胞立方体顶点的原子球 (图中 4) 与近邻的面心原子球 (图中 1、2、3) 相切, 因此 $\sqrt{2}a = 4r$, 1 个晶胞内包含 4 个原子, 所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4}{a^3} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4} a \right)^3 = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$$

(4) 六方密排

对六方密排结构, 任一个原子有 12 个最近邻 (面内 6 个, 上下各 3 个), 如图 1.1(d) 所示。中心在 O 的原子球与中心在 1、3、4、5、7 和 8 处的原子球相切, 即 O 点处原子与 5、7 和 8 处的原子分布在正四面体的四个顶点上。

由于正四面体的高为

$$h = \sqrt{\frac{2}{3}} a = 2\sqrt{\frac{2}{3}} r = \frac{c}{2}$$

晶胞体积为

$$V = ca^2 \sin 60^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} ca^2$$

1 个晶胞内包含 2 个原子, 所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{1}{2} a \right)^3}{\frac{\sqrt{3}}{2} ca^2} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$$

(5) 金刚石

对金刚石结构, 任一个原子有 4 个最近邻, 如图 1.1(e) 所示。中心在空间对角线 $\frac{1}{4}$ 处 O 点的原子球与中心在 1、2、3 和 4 处的面心处原子球相切, 因此 $\sqrt{3}a = 8r$, $V = a^3$ 。

1 个晶胞内包含 8 个原子, 所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{8}{a^3} \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{8} a \right)^3 = \frac{\sqrt{3}\pi}{16} \approx 0.34$$

1.2 试证六方密排堆积结构中 $\frac{c}{a} = \left(\frac{8}{3}\right)^{1/2} \approx 1.633$ 。

证明:

如图 1.1(d) 所示, O 点处原子与 5、7 和 8 处原子组成一正四面体。正四面体的高为

$$h = \sqrt{\frac{2}{3}}a = 2\sqrt{\frac{2}{3}}r = \frac{c}{2}$$

所以

$$\frac{c}{a} = \left(\frac{8}{3}\right)^{1/2} \approx 1.633$$

1.3 证明: 体心立方晶格的倒格子是面心立方; 面心立方晶格的倒格子是体心立方。

证明:

设与晶轴平行的单位矢量分别为 i, j, k , 体心立方正格子的原胞基矢可取为

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-i + j + k), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(i - j + k), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(i + j - k)$$

由倒格子公式 $\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{v_c}$, $\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{v_c}$, $\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{v_c}$ 可得其倒格矢为

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(j + k), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(k + i), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(i + j) \quad (1)$$

而面心立方正格子原胞基矢可取为

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(j + k), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(i + k), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(i + j) \quad (2)$$

(1) 和 (2) 两式只相差一常数公因子, 这表明体心立方的倒格子是面心立方。

同理可证: 面心立方的倒格子是体心立方。

1.4 证明: 倒格子原胞的体积为 $(2\pi)^3/v_c$, 其中 v_c 为正格子原胞的体积。

证明: (充分利用矢量计算公式可方便得证)

设 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 为正格子原胞的基矢, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ 为倒格子原胞的基矢, 它们之间满足

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{v_c}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{v_c}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{v_c}$$

所以倒格子的体积 v^* 为

$$v^* = \mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{v_c^3} (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot [(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \times (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)]$$

运用矢量计算公式 $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})\mathbf{B} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\mathbf{C}$ 可得

$$(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \times (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) = [(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{a}_2]\mathbf{a}_1 - [(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{a}_1]\mathbf{a}_2 = v_c \mathbf{a}_1$$

所以有

$$v^* = \frac{(2\pi)^3}{v_c^3} (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot \mathbf{a}_1 v_c = \frac{(2\pi)^3}{v_c}$$

1.5 证明: 倒格子矢量 $\mathbf{G} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3$ 垂直于密勒指数为 $(h_1 h_2 h_3)$ 的晶面系。

证明: (充分利用晶面系的特点: 等间距平行排列来证)

如图所示, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 为正格子基矢, 晶面系 $(h_1 h_2 h_3)$ 中最靠近坐标原点的晶面 ABC 在基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 上的截距为 $\mathbf{a}_1/h_1, \mathbf{a}_2/h_2, \mathbf{a}_3/h_3$, 倒格子矢量 $\mathbf{G} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3$ 垂直于该晶面。

图中, $\overrightarrow{CA} = \overrightarrow{OA} - \overrightarrow{OC} = \frac{\mathbf{a}_1}{h_1} - \frac{\mathbf{a}_3}{h_3}$, $\overrightarrow{CB} = \overrightarrow{OB} - \overrightarrow{OC} = \frac{\mathbf{a}_2}{h_2} - \frac{\mathbf{a}_3}{h_3}$, 利用 $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ 可得

$$\mathbf{G} \cdot \overrightarrow{CA} = (h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3) \cdot \left(\frac{\mathbf{a}_1}{h_1} - \frac{\mathbf{a}_3}{h_3} \right) = 0$$

$$\mathbf{G} \cdot \overrightarrow{CB} = (h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3) \cdot \left(\frac{\mathbf{a}_2}{h_2} - \frac{\mathbf{a}_3}{h_3} \right) = 0$$

故有倒格子矢量 $\mathbf{G} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3$ 与晶面系 $(h_1 h_2 h_3)$ 垂直。

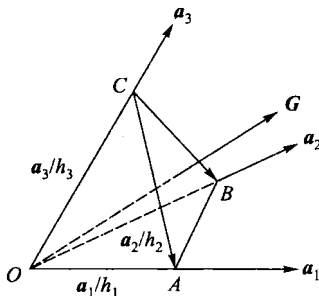


图 1.2 倒格子矢量和晶面关系示意图

1.6 对于简单立方晶格, 证明密勒指数为 (hkl) 的晶面系, 面间距 d 满足:

$$d^2 = a^2 / (h^2 + k^2 + l^2)$$

其中 a 为立方边长。

证明:

设沿立方晶系晶轴 a_1, a_2, a_3 的单位矢量为 i, j, k , 则正格子基矢为

$$a_1 = ai, \quad a_2 = aj, \quad a_3 = ak$$

相应的倒格子基矢为

$$b_1 = \frac{2\pi}{a}i, \quad b_2 = \frac{2\pi}{a}j, \quad b_3 = \frac{2\pi}{a}k$$

与晶面簇 (hkl) 正交的倒格矢为

$$G_{hkl} = hb_1 + kb_2 + lb_3$$

由晶面间距 d_{hkl} 与倒格矢 G_{hkl} 的关系式

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|G_{hkl}|}$$

可得

$$d^2 = \frac{4\pi^2}{(hb_1)^2 + (kb_2)^2 + (lb_3)^2} = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

1.7 写出体心立方和面心立方晶格结构的金属中, 最近邻和次近邻的原子数。若边长为 a , 写出单胞体积、原胞体积、最近邻和次近邻的原子间距。

解答:

晶格	最近邻数	次近邻数	单胞体积	原胞体积	最近邻距离	次近邻距离
体心立方	8	6	a^3	$a^3/2$	$\sqrt{3}a/2$	a
面心立方	12	6	a^3	$a^3/4$	$\sqrt{2}a/2$	a

1.8 画出体心立方和面心立方晶格结构的金属在 (100) , (110) , (111) 面上的原子排布。

解答:

(1) 体心立方

(100) 面: 图 1.3 中 3、4、8 和 7 号原子所在的面, 原子排布如图 1.3(b) 所示;

(110) 面: 图 1.3 中 2、4、8 和 6 号原子所在的面, 原子排布如图 1.3(c) 所示;

(111) 面: 图 1.3 中 2、4 和 5 号原子所在的面, 原子排布如图 1.3(d) 所示。

(2) 面心立方

(100) 面: 图 1.4 中 3、4、8、7 和 13 号原子所在的面, 原子排布如图 1.4(b) 所示;