

张永德/主编

物理学大题典

固体物理及 物理量测量

A Grand Dictionary
of Physics
Problems And Solutions

林鸿生 章世玲/编著

7



科学出版社

www.sciencep.com

中国科学技术大学出版社

物理学大题典⑦/张永德主编

固体物理及物理量测量

林鸿生 章世玲 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全部本科物理学内容：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》卷包括固体物理、半导体物理、物质的电磁性质、光学性质、超导电性以及物理量的估算、测量和数学处理等内容。

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,章世玲编著. —北京:科学出版社;
合肥:中国科学技术大学出版社,2005

(物理学大题典⑦/张永德主编)

ISBN 7-03-015678-1

I . 固… II . ①林…②章… III . 固体物理学-解题 IV . O48-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 061640 号

策划编辑:胡升华 / 文案编辑:张邦固 / 责任校对:朱光光

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:张 放

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

中 国 科 学 院 印 刷 厂 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

2005 年 10 月第一次印刷 印张:21 1/4

印数:1—5 000

字数:500 000

定 价:34.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换(科印))

《物理学大题典》编委会

主编 张永德

编委 (按姓氏拼音字母为序)

白贵儒 陈银华 程稼夫 范洪义 范扬眉 宫竹芳 顾恩普
郭光灿 胡友秋 金怀诚 李泽华 林鸿生 刘金英 刘乃乐
柳盛典 强元荣 王韶舜 吴 强 轩植华 杨保忠 杨德田
尤峻汉 张家铝 张鹏飞 张永德 章世玲 赵叔平 郑久仁
周又元 周子舫 朱株培 朱俊杰

前　　言

物理学,由于它在自然科学中所具有的主导作用,在人类文明史中,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,物理学正在以空前的活力,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。

但是,发展到目前的物理学宽广深厚,累积的知识浩瀚无垠。教授和学习物理学都是一个相当艰苦而漫长的过程。在这个漫长过程的许多环节中,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。习题对于教师和学生双方都是重要的。

然而,和习题有关的事都是很不起眼的事。在有些人眼中,求解和编纂练习题是全部教学活动中相当次要的环节。习题集也确实是所有著作中“最低层”的,大约只有“傻子”们才肯做的事。“聪明人”常会找诸如习题集不应当出之类的原因,光明正大地规避掉。

但是,在教授和学习过程中,只要是需要的,都是合理的,也总得有人去做才行。于是我们编委会的这些人,本着甘为孺子牛的精神,平时在科研和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。大家觉得,这件事终究是教与学双方共同需要的,也就是有益的。正如一个城市建设中,不能都去做地面上的摩天大楼和纪念碑等“抢眼球”的事,也还需要做诸如修建马路、下水道等基础设施的事。

这套《物理学大题典》的前身是中国科学技术大学出版社出版的《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,虽历经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》。

现在这套《物理学大题典》丛书的内容,除继续涵盖力、热、光、电、近代物理到四大力学全部基础物理学内容之外,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等内容。就是说,追踪不断发展的科学轨迹,现在这套丛书仍旧大体涵盖了综合性大学全部本科物理课程的内容。

这次重新编审中,大部分教师仍为原来的,但也增加了一些新的成员。这次出版经大家着力重订和大量扩充,又耗时近两年而成。总计起来,这套丛书前后历时近20年,耗费了30余位富有科研和教学经验的教授、近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。丛书确实是大家长期共同劳动的结晶。

《物理学大题典》中包括了大量的美国物理试题。一般说来，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；方法和结论简单而实用，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。纵观这些，我们深切感到，这些题目的集合在一定程度上体现了美国科学文化的个性及思维方式的特色。惟鉴于此，我们不惮繁重，集众多人力而不怯，耗漫长岁月而不辍，还是值得的。

至于这次扩充修订所增添的大量题目，也是本着这种精神，摘自大家各自的科研工作成果，或是来自各人的教学心得，实是点滴聚成。

这里要强调指出，对于学生，确实有一个如何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，也容易挫伤学习积极性，不利于培养学习兴趣；也有的同学，逮到合适解答提笔就抄，这样做是浮躁的、不踏实的。这两种学习方法都不可取。我们认为，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；如果认真想了一些时间还想不出来，就不要老想了，不妨翻开习题集找答案，看懂之后，合上书自己把题目做出来；最后一步，要是参考习题集做出来的，就用一两分钟时间分析解剖一下，找找自己存在的不足，今后注意。如此“三步曲”下来，就既有效率又踏实了。本来，效率和踏实是一对矛盾，在这类“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”工具。

丛书这次重订扩充工作是在科学出版社胡升华博士的倡议和支持下进行的。没有他的推动，这套丛书面世是不可能的。同时，在这次重订扩充工作里，我们得到了中国科学技术大学的部分教学资助，以及编委会中郭光灿和周又元两位院士和刘万东教授的支持。对于这些宝贵的支持，谨表示深切感谢。

丛书《固体物理及物理量测量》卷是在张家铝、周又元、章世玲编审的《相对论、固体物理及其他》（简称“原书”）一书基础上扩充而成的。原书第一篇“相对论”规划归入本丛书《原子亚原子和相对论物理学》卷。原书第二篇“固体物理”第一节“晶体结构及有关性质”和第二节“电子论、能带论与半导体”习题与试题分类编入本卷第一篇的第一章“固体物理”和第二章“半导体物理”。原书第二篇第三节“物质的电磁性质、光学性质及超导性”和第四节“杂题”，分别编入本卷第一篇第三章“物质的电磁性质、光学性质和超导电性”和第四章“杂题”。本卷第一篇固体物理题目总数由原书第二篇固体物理原 82 道增扩为 196 道；原书第二篇“其他”，第一节“综合问答”、第二节“估算和测量”和第三节“数学处理”，编入本卷第二篇“物理量测量与分析”，共 57 道习题。所以本卷总共 253 道习题。题目来源是一些国际著名大学（包括哥伦比亚大学、加州大学伯克利分校、麻省理工学院、威斯康星大学、芝加哥大学、普林斯顿大学、纽约州立大学布法罗分校）的试题和习题，以及 CUSPEA 考试、丁肇中考试的试题和习题，一些固体物理学习题集（作者分别是徐至中、俞文海、高政祥、王矜奉、范希会、张承据以及 Zhang Shu-zhen 等），还有部分固体物理学教材（作者分别是黄昆、韩汝琪、方俊鑫、陆栋、陈金富、阎守胜、Nei W. Ashcroft、N. David Mermin 等）和半导体物理学教材（作者分别是叶良修、刘恩科、朱秉升、陈志全、P. S. Kireev 等），另有一些是我们自拟的。

前近 20 年中,参加本卷解题的人有林鸿生、章世玲、朱冰、王勇、周东方、王善祥、斯其苗、卢建新、宁铂、邱岫、王安民、孙翼、景益鹏、刘渝珍、刘方新、庄珍泉等。为了丛书行文简洁,书中不再另行指出他们姓名。另外研究生杨帅承当本卷大部分计算机录入工作。本卷第一篇第一章“固体物理”和第二章“半导体物理”试题和习题的解答由林鸿生负责审核,其余内容则保留了原来风貌。由于最后编写工作是在比较匆忙的情况下完成的,更由于我们学识有限,书中恐会有疏漏、错误和不妥之处,切望得到有关方面专家和读者的批评、指教。

编审者谨识

2005 年 5 月

目 录

前言

第一篇 固体物理

第一章 固体物理	3
第一节 晶体结构.....	3
第二节 固体的结合能	32
第三节 晶格振动与晶体的热力学性质	55
第四节 晶体缺陷及其运动	95
第五节 固体能带理论.....	113
第六节 固体电子在电场和磁场中的运动.....	139
第七节 自由电子论和固体电子输运性质.....	161
第二章 半导体物理	187
第一节 半导体中的电子状态.....	187
第二节 电子和空穴的统计分布.....	198
第三节 输运现象.....	213
第四节 过剩载流子和 pn 结	226
第三章 物质的电磁性质、光学性质及超导电性	241
第四章 杂题	268

第二篇 物理量测量与分析

第一章 估算和测量	275
第二章 数学处理	297
第三章 综合问答	309
附 重要物理常数	328

第一篇 固体物理

第一章 固体物理

第一节 晶体结构

1.1.1 如图 1.1.1 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?

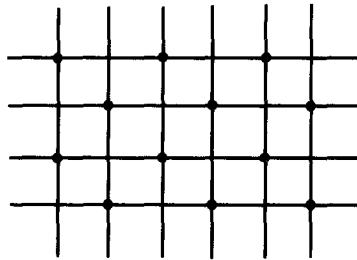


图 1.1.1

解

(1) 原胞如图 1.1.2 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

$$\mathbf{a}_1 = a(i - j)$$

$$\mathbf{a}_2 = a(i + j)$$

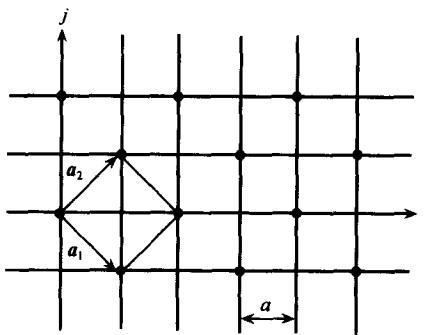


图 1.1.2

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

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

所确定的 $\mathbf{b}_i (i=1,2)$ 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 \mathbf{k} 与入射波矢 \mathbf{k}_0 相差一个或几个倒格矢 $n\mathbf{G}_h$ ，即

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

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

$$\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{k}) = (ai - aj) \cdot (ai + aj) = 2a^2$$

根据倒格子基矢定义

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

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

显然这将构成二维正方倒格子点阵，图 1.1.3 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。

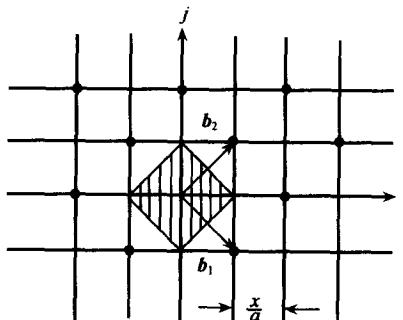


图 1.1.3

(4) 在点阵周期势场中运动的电子波函数是布洛赫波即

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

式中函数 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 具有晶格平移对称性

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

其中 \mathbf{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。

1.1.2 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 1.1.4 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 1.1.5.

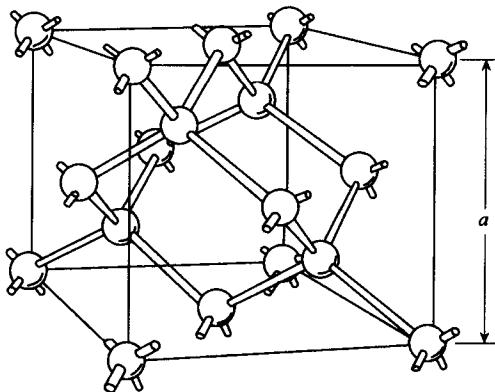


图 1.1.4 锗硅金刚石结构

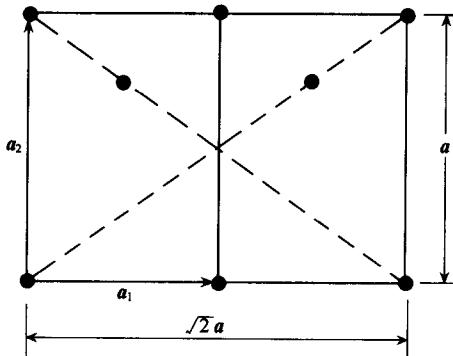


图 1.1.5

原胞基矢为

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

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

原胞体积

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

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

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

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

(2) 倒格子矢量 G_h

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

布里渊区边界方程

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

此处 \mathbf{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

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

即

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

于是

$$n_1 = \pm 1, n_2 = 0 \text{ 时}, \quad k_x = \pm \frac{\sqrt{2}\pi}{a} \quad (1)$$

$$n_1 = 0, n_2 = \pm 1 \text{ 时}, \quad k_y = \pm \frac{\pi}{a} \quad (2)$$

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

$$n_1 = \pm 2, n_2 = 0 \text{ 时}, \quad k_x = \pm \frac{2\sqrt{2}\pi}{a} \quad (4)$$

$$n_1 = 0, n_2 = \pm 2 \text{ 时}, \quad k_y = \pm \frac{2\pi}{a} \quad (5)$$

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 1.1.6 所示

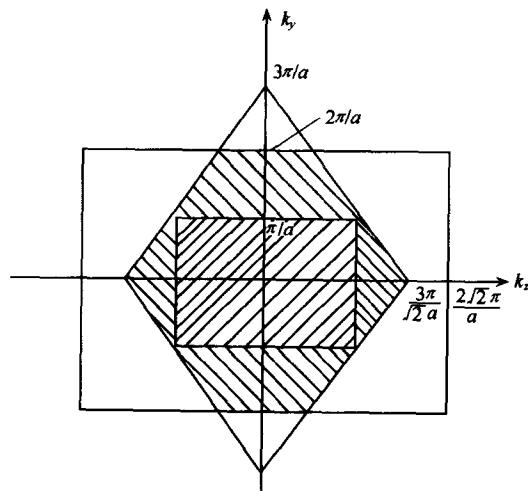


图 1.1.6

1.1.3 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 1.1.7 所示,有三种可能的基矢选取方法.

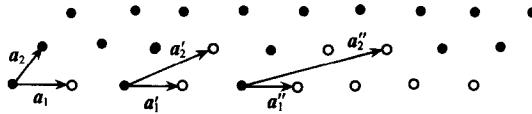


图 1.1.7

- (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 1.1.7 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

$$\mathbf{a}_1$$

$$\mathbf{a}_2$$

第二种基矢选择

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

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

第三种基矢选择

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

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

显然表示二维布拉维格子固体物理学原胞的三组基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2; \mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2; \mathbf{a}''_1, \mathbf{a}''_2$ 可互相线性表示(系数全是整数),不是独立的. 选取 $\mathbf{a}_3 = \mathbf{a}'_3 = \mathbf{a}''_3 = \mathbf{k}$, \mathbf{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

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

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

同样

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

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

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

第二种正格子相应的倒格子基矢

$$\begin{aligned} \mathbf{b}'_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}'_2 \times \mathbf{k}}{\Omega} = 2\pi \frac{(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \times \mathbf{k}}{\Omega} \\ &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{k}}{\Omega} + 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{k}}{\Omega} = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}'_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{a}'_1}{\Omega} = 2\pi \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{a}_1}{\Omega} = \mathbf{b}_2 \end{aligned}$$

第三种正格子相应的倒格子基矢

$$\begin{aligned} \mathbf{b}''_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}''_2 \times \mathbf{k}}{\Omega} = 2\pi \frac{(2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \times \mathbf{k}}{\Omega} = \mathbf{b}_1 - 2\mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}''_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{a}''_1}{\Omega} = 2\pi \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{a}_1}{\Omega} = \mathbf{b}_2 \end{aligned}$$

同样,这三组倒格子基矢 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2; \mathbf{b}'_1, \mathbf{b}'_2; \mathbf{b}''_1, \mathbf{b}''_2$ 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 $\mathbf{b}_1^{(l)}, \mathbf{b}_2^{(l)}, \mathbf{b}_3^{(l)}$ 为基的倒格子空间中的一个倒格矢量 $\mathbf{G}_h^{(l)}$,也是基矢 $\mathbf{b}_1^{(l)}, \mathbf{b}_2^{(l)}, \mathbf{b}_3^{(l)}$ 线性转换而来的基矢 $\mathbf{b}_1^{(m)}, \mathbf{b}_2^{(m)}, \mathbf{b}_3^{(m)}$ 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,但倒易格子却是由布拉维正格子所唯一确定的.

1.1.4 (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 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ (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 1.1.8 所示,某一晶面 MN 与六角形平面基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 轴上的截距

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

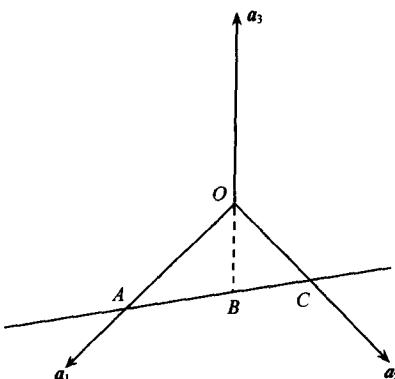


图 1.1.8

且

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

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

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{a}{h} \cdot n \cdot \left(-\frac{a}{k} \right) \cdot n \cdot \sin 60^\circ + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{l} \right) \cdot n \cdot \left(-\frac{a}{k} \right) \cdot n \cdot \sin 60^\circ \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{a}{h} \right) \cdot n \left(\frac{a}{l} \right) \cdot n \cdot \sin 120^\circ \\ &= -\frac{1}{hk} - \frac{1}{lk} = \frac{1}{hl} \end{aligned}$$

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 1.1.9 是六角晶系一个原胞, 即晶胞, $|a|=|b|=a$,

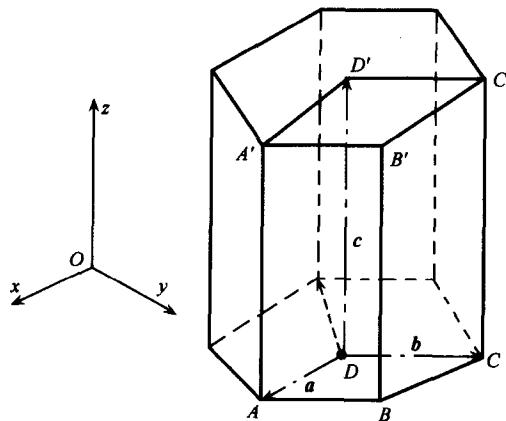


图 1.1.9

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

$$a = ai$$

$$b = -\frac{1}{2}ai + \frac{\sqrt{3}}{2}aj$$

$$c = ck$$

式中 i, j, 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