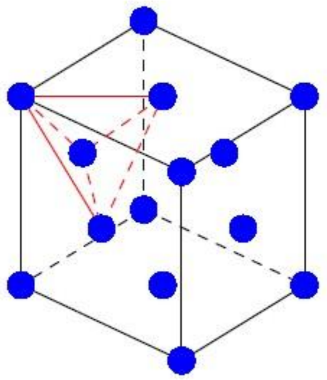
7. 解：图中红色多面体表示掺杂原子填入的正四面体或正八面体

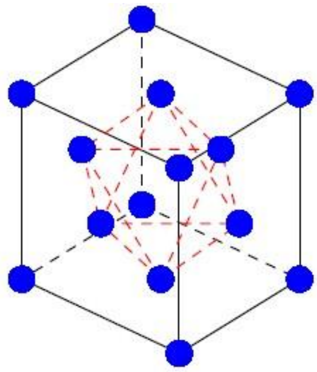
(a) 如图所示，面心立方晶胞的每一个顶点对应一个正四面体，所以共有 8 个正四面体空位。



掺杂原子位置坐标(以晶胞基矢为单位) 为

$$(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}),(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}),(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}),(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}),(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}),(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}),(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}),(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}).$$

(b) 如图所示，面心立方晶胞的中心有一个正八面体空位，每个棱心的正八面体空位被四个晶胞共有，所以共有 4 个正八面体空位。



掺杂原子位置坐标(以晶胞基矢为单位)为

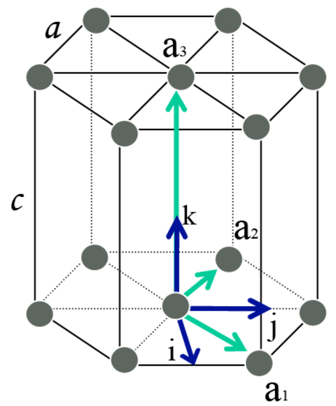
$$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}),(\frac{1}{2},0,0),(0,\frac{1}{2},0),(0,0,\frac{1}{2}).$$

固体物理习题参考答案

8．试求六角晶系中密勒指数为（hkl）的晶面族的面间距。

解答： 对于六角晶系，密勒指数为（hkl）的晶面族的面间距 d 和倒格矢 $\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ 有如下关系：

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{K}|} \tag{1}$$



如图建立直角坐标系，有

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \dfrac{a}{2}(\sqrt{3}\hat{i} + \hat{j}) \\ \vec{a}_2 = \dfrac{a}{2}(-\sqrt{3}\hat{i} + \hat{j}) \\ \vec{a}_3 = c\hat{k} \end{cases} \tag{2}$$

于是倒空间的基矢为：

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \dfrac{2\pi}{\sqrt{3}a}(\hat{i} + \sqrt{3}\hat{j}) \\ \vec{b}_2 = \dfrac{2\pi}{\sqrt{3}a}(-\hat{i} + \sqrt{3}\hat{j}) \\ \vec{b}_3 = \dfrac{2\pi}{c}\hat{k} \end{cases} \tag{3}$$

因此，

$$\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(h-k)\hat{i} + \frac{2\pi}{a}(h+k)\hat{j} + \frac{2\pi}{c}l\hat{k} \tag{4}$$

代入（1）式，就得到

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{K}|} = \left[\frac{4}{3a^2}\left(h^2 + k^2 + hk\right) + \frac{l^2}{c^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \tag{5}$$