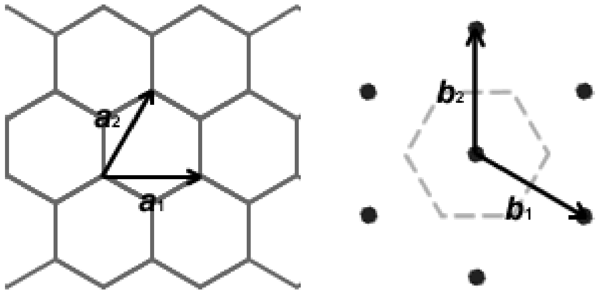
9．原子排列成二维蜂窝结构，交点是原子所在位置。试确定它的倒格子基矢，并作它的 Brillouin 区（即 Wigner-Seitz 原胞）。

解答：



原胞基矢：$\begin{cases} a_1 = \sqrt{3}a(1,0) \\ a_2 = \sqrt{3}a(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2}) \end{cases}$，原子位矢：$\begin{cases} \tau_1 = (0,0) \\ \tau_2 = a(0,1) \end{cases}$

倒格子基矢：$\begin{cases} b_1 = \frac{4\pi}{3a}(\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2}) \\ b_2 = \frac{4\pi}{3a}(0,1) \end{cases}$。

第一布里渊区由右上图虚线区域表示。

固体物理习题参考答案

10. 六角密堆积结构，试确定

(1) 晶胞、基矢、晶胞内原子位矢；

(2) 倒格子基矢；

(3) 几何结构因子；

(4) 讨论其消光条件。

解：(1) 六角密堆积结构是简单六角格子，其原胞基矢为：

$$\mathbf{a}_1 = a(1,0,0), \quad \mathbf{a}_2 = a\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \quad \mathbf{a}_3 = c(0,0,1).$$

原子位矢为（以原胞基矢为基）：

$$\tau_1 = (0,0,0), \quad \tau_2 = \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right).$$

(2) 原胞体积：

$$\Omega = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c,$$

倒格子基矢为：

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\sqrt{3}}{3}\frac{2\pi}{a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\sqrt{3}}{3}\frac{2\pi}{a}(0,1,0), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c}(0,0,1).$$

(3) 为方便起见，这里的倒格子坐标以基矢为基，即 $\mathbf{K} = \alpha\mathbf{b}_1 + \beta\mathbf{b}_2 + \gamma\mathbf{b}_3$，晶胞就是原胞。结构因子为：

$$S_k = \sum_i f_i \exp(i\mathbf{K}\cdot\tau_i) = f\left\{1 + \exp\left[i2\pi\left(\frac{2}{3}\alpha + \frac{1}{3}\beta + \frac{1}{2}\gamma\right)\right]\right\} = f\left[1 + e^{i\pi(\frac{4}{3}\alpha + \frac{2}{3}\beta + \gamma)}\right]$$

(4) 消光条件：

当 $S_k = 0$ 时，

$$\pi\left(\frac{4}{3}\alpha + \frac{2}{3}\beta + \gamma\right) = (2n+1)\pi, \quad n \in Z,$$

故 $4\alpha + 2\beta + 3\gamma = 6n + 3$ 为奇数，即 γ 为奇数；

当 $S_k = 2f$ 时，

$$\pi\left(\frac{4}{3}\alpha + \frac{2}{3}\beta + \gamma\right) = 2n\pi, \quad n \in Z,$$

故 $4\alpha + 2\beta + 3\gamma = 6n$ 为偶数，即 γ 为偶数。

所以，消光条件为“γ 为奇数”，与 α 和 β 无关。

11. 解：(1) 以晶胞基矢

$$\mathbf{a} = a(1,0,0), \quad \mathbf{b} = a(0,1,0), \quad \mathbf{c} = a(0,0,1)$$

为基。A 点坐标：$(1,1,0)$；C 点坐标：$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},1\right)$。$\overrightarrow{AC} = \left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},1\right)$，因此过 AC 格点的晶列指数为：$[11\bar{2}]$

(2) 同上，以晶胞基矢为基。$\overrightarrow{AC} = \left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},1\right)$，$\overrightarrow{AB} = \left(-1,-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$，所以垂直于平面 ABC 的向量可写成 $\overrightarrow{n} = \overrightarrow{AB} \times \overrightarrow{AC} = \left(-\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right)$。由于倒格矢 $\mathbf{G}_h = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ 垂直于密勒指数为 (hkl) 的晶面系，而此时的倒格子基矢为

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,0,0), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,1,0), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(0,0,1).$$

所以，$\overrightarrow{n} = \frac{a^2}{8\pi}(-1\mathbf{b}_1 + 3\mathbf{b}_2 + 1\mathbf{b}_3)$，于是过 ABC 格点的晶面指数为：$(\bar{1}31)$

(3) 以惯常原胞基矢

$$\mathbf{a}_1 = a\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right), \quad \mathbf{a}_2 = a\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right), \quad \mathbf{a}_3 = a\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$$

为基时，向量 $\overrightarrow{AC}$ 为

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix}.$$

以惯常原胞基矢为基时，过 AC 格点的晶列指数 $[m_1m_2m_3]$ 为：$[11\bar{2}]$。

下面求用物理学原胞基矢时过 ABC 格点的晶面指数：此时的倒格子基矢可写成

$$\mathbf{b}'_1 = \frac{2\pi}{a}(-1,1,1), \quad \mathbf{b}'_2 = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1), \quad \mathbf{b}'_3 = \frac{2\pi}{a}(1,1,-1).$$

垂直于 ABC 平面的向量 $\frac{8\pi}{a^2}\overrightarrow{n}$ 在基矢变换后仍然垂直于 ABC，只是分量不同，故：

$$\begin{pmatrix} -1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}'_1 \\ \mathbf{b}'_2 \\ \mathbf{b}'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \end{pmatrix}$$

所以以惯常原胞基矢为基时，过 ABC 格点的晶面指数 $(l_1l_2l_3)$ 为：(201)。

(4) 由上面知道，用晶胞基矢的密勒指数 (hkl) 和用物理学原胞基矢的晶面指数 $(l_1 l_2 l_3)$ 之间的关系为：

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h & k & l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$