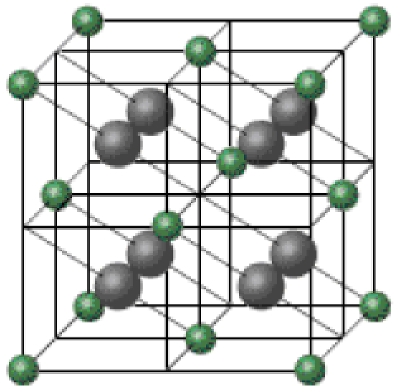
固体物理习题参考答案

12. 求如图的 CaF_2 的几何结构因子，如果 $f_{\mathrm{Ca}}=f_{\mathrm{F}}$，哪些衍射面的斑点会消失？



解答：CaF_2 属于面心立方结构。取晶胞基矢 $\mathbf{a}=a\hat{i},\mathbf{b}=a\hat{j},\mathbf{c}=a\hat{k}$，于是 12 个原子位矢分别表示成：

（1） $\boldsymbol{\tau}_{\mathrm{ca}}:(0,0,0);(0.5,0.5,0);(0.5,0,0.5);(0,0.5,0.5).$

（2） $\boldsymbol{\tau}_{\mathrm{F}}:(0.25,0.25,0.25);(0.75,0.25,0.25);(0.75,0.75,0.25);(0.25,0.75,0.25);$
$(0.25,0.25,0.75);(0.75,0.25,0.75);(0.75,0.75,0.75);(0.25,0.75,0.75).$

其中 $\boldsymbol{\tau}_j=x_j\mathbf{a}+y_j\mathbf{b}+z_j\mathbf{c}$.

于是 $\mathbf{K}_h\bullet\boldsymbol{\tau}_j=2\pi(hx_j+ky_j+lz_j)$.

几何结构因子：

$$
\begin{aligned}
s_{\mathbf{K}_h}&=\sum_j f_j e^{-i\mathbf{K}_h\bullet\boldsymbol{\tau}_j}\\
&=f_{\mathrm{Ca}}[1+e^{-i\pi(h+k)}+e^{-i\pi(h+l)}+e^{-i\pi(k+l)}]+f_{\mathrm{F}}[e^{-i\pi(h+k+l)/2}+e^{-i\pi(3h+k+l)/2}+e^{-i\pi(3h+3k+l)/2}\\
&\quad+e^{-i\pi(h+3k+l)/2}+e^{-i\pi(h+k+3l)/2}+e^{-i\pi(3h+k+3l)/2}+e^{-i\pi(3h+3k+3l)/2}+e^{-i\pi(h+3k+3l)/2}]\\
&=f[1+e^{-i\pi(h+k)}+e^{-i\pi(h+l)}+e^{-i\pi(k+l)}+e^{-i\pi(h+k+l)/2}+e^{-i\pi(3h+k+l)/2}+e^{-i\pi(3h+3k+l)/2}\\
&\quad+e^{-i\pi(h+3k+l)/2}+e^{-i\pi(h+k+3l)/2}+e^{-i\pi(3h+k+3l)/2}+e^{-i\pi(3h+3k+3l)/2}+e^{-i\pi(h+3k+3l)/2}]\\
&=f[1+e^{-i\pi(h+k)}+e^{-i\pi(h+l)}+e^{-i\pi(k+l)}][1+e^{-i\pi(h+k+l)/2}+e^{i\pi(h+k+l)/2}]\\
&=f\left[1+e^{-i\pi(h+k)}+e^{-i\pi(h+l)}+e^{-i\pi(k+l)}\right]\left[1+2\cos\frac{(h+k+l)\pi}{2}\right]
\end{aligned}
$$

所以，当且仅当 h,k,l 全为奇数或偶数时，$s_{\mathbf{K}_h}\neq 0$。

13．面心立方结构与简单立方一样，同属立方晶胞，晶胞内共有 4 个原子。

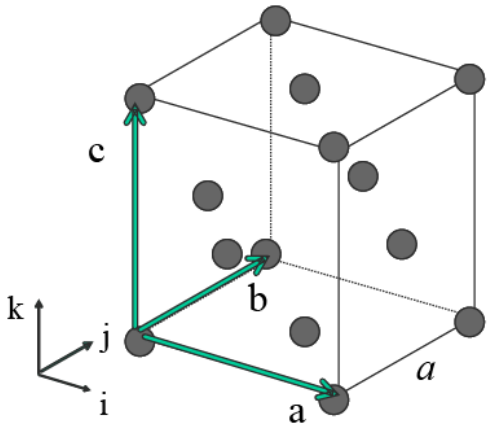
（1）证明面心立方结构对应的所有倒格点中，与简单立方对应的倒格点的结构因子或者是 4，或者是 0；

（2）证明如果去除所有结构因子等于 0 的倒格点，剩余的倒格点形成一体心立方结构，这个体心立方倒格子的边长为 4π/a。

（3）这说明什么？

解答：

（1）



$$\boldsymbol{\tau}_j : (0,0,0);(0.5,0.5,0);(0.5,0,0.5);(0,0.5,0.5).$$

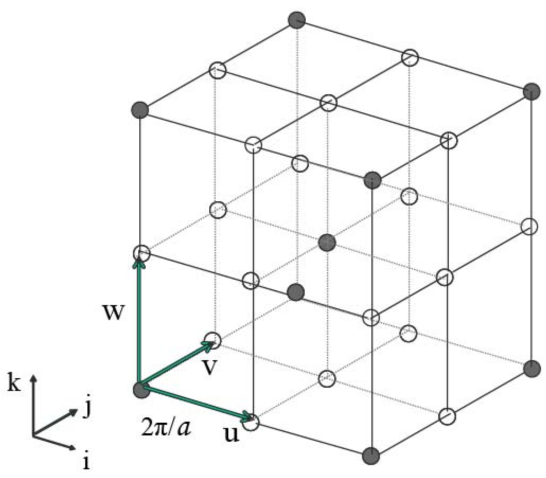
$$\boldsymbol{\tau}_j = x_j\mathbf{a} + y_j\mathbf{b} + z_j\mathbf{c}$$

$$\mathbf{K}_h \cdot \boldsymbol{\tau}_j = 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$$

$$s_{\mathbf{K}_h} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{K}_h \cdot \boldsymbol{\tau}_j}$$
$$= f\left[1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)}\right]$$

当 h,k,l 全为奇数或偶数时，$s_{\mathbf{K}_h} = 4f$；否则 $s_{\mathbf{K}_h} = 0.$

（2）简单立方对应的倒格点结构如下：



$$\mathbf{K}_h = h\mathbf{u} + k\mathbf{v} + l\mathbf{w}$$

当 h,k,l 全为奇数或偶数时，$s_{\mathbf{K}_h} = 4f$，对应着左图中的实心格点；

否则 $s_{\mathbf{K}_h} = 0$，对应着左图中的空心格点。

由图可见，实心格点形成体心立方格子，边长为 4π/a。

（3） 晶胞可以包含一个以上的格点。 如果把晶胞看作基本结构，也可用一个点来代表，我们把它叫做结点，以区分格点。那么，结点也满足平移对称性。在正空间，结点数等于或小于格点数；但是，在倒空间，倒结点就大于等于倒格点数。本题中的消光，就是消除所有不是格点的结点。