

第三章 晶体学基础

1. 什么是晶体点阵？晶格点阵与晶体结构有什么关系？

答：晶体中环境（几何环境和物理环境）相同的点构成的排列阵式为晶体点阵。

晶体结构是晶体中某一结构单元（原子、离子或分子）的构型。

晶体点阵描述的是晶体结构的重复规律，本身并不具有物质内容。

2. 什么是原胞，它的基本参量是什么？什么是原胞？什么是复胞？

答：原胞是晶体点阵中原点构成的基本单元，它向空间扩散可充满整个点阵。

基本参量为 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ 。

只含有一个结点的原胞为原胞，含有多个结点的原胞为复胞。

3. 金刚石：fcc. Cu_2O : BCC CaTiO_3 : BCC

4. β -黄铜、无序时：简单立方。有序时：BCC。

第四章 晶体的衍射

1. 写出结构因数的表达式，并指明式中各个符号的物理意义。

解：结构因数 $F(\mathbf{s}) = \sum_{j=1}^N f_j e^{i2\pi \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j}$

式中 N 为晶胞内所含原子数， f_j 为第 j 个原子的散射因数。

\mathbf{s} 为散射矢量 $\mathbf{s} = s_1 \mathbf{a}^* + s_2 \mathbf{b}^* + s_3 \mathbf{c}^*$ ， \mathbf{r}_j 为第 j 个原子的位置矢量。

2. 写出干涉函数的表达式，并指明式中各个符号的物理意义。

解：干涉函数 $L(\mathbf{s}) = \left| \sum_{mnp} e^{i2\pi \mathbf{s} \cdot \mathbf{R}_{mnp}} \right|^2 = \frac{\sin^2 \pi N a s_1}{\sin^2 \pi s_1} \cdot \frac{\sin^2 \pi N b s_2}{\sin^2 \pi s_2} \cdot \frac{\sin^2 \pi N c s_3}{\sin^2 \pi s_3}$

式中 $N = N_a N_b N_c$ 为小晶体所包含的晶胞数， N_a, N_b, N_c 为小晶体沿

$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ 三基矢方向的晶胞数， $\mathbf{s} = s_1 \mathbf{a}^* + s_2 \mathbf{b}^* + s_3 \mathbf{c}^*$ 为散射矢量

$\mathbf{R}_{mnp} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ 为散射中心的位置矢量。

3. 什么是干涉函数的主峰区，它与哪些因素有关？

解：干涉函数 $L(\mathbf{s}_0) = L(\mathbf{s}_1) \cdot L(\mathbf{s}_2) \cdot L(\mathbf{s}_3)$ [其中 $L(\mathbf{s}_1) = \frac{\sin^2 \pi N a s_1}{\sin^2 \pi s_1}$ ，当 s_1 为 0 时， $L(\mathbf{s}_1)$ 有极大值，为 $L(\mathbf{s}_1) = N_a^2$] 在 s_1, s_2, s_3 都为整数处取极大值 $N_a^2 \cdot N_b^2 \cdot N_c^2$ ， $L(\mathbf{s})$ 取极大值的主峰为主峰。