**第三周 作业**

1. **用图示及文字说明为何四方面心可以转为四方体心(PPT上25页习题)。**



书P32图1.5.10 右图

1. **已知晶体中原子的电子密度函数为：**

**求该原子的原子散射因子。**

解：

使朝着极轴的方向，用球坐标积分

上述利用欧拉公式可以简化积分运算复杂度，或也可表示为

1. **考虑由A，B原子形成的原子列ABAB…AB，A-B键的键长为a/2。A、B原子的原子散射因子分别为和。X射线沿着垂直于原子列的方向传播。**
	1. **绘制倒空间的示意图，证明衍射极大条件为：**
	2. **计算该晶格的几何结构因子，并解释当时发生消光的原因。**

证明：

该原子列的倒空间为一组等间距的平面，平面间距为



且有

即

1. 计算该晶格的几何结构因子，并解释当时发生消光的原因

解：

一个晶胞内有两个原子: (0, 0, 0) 和 (1/2, 0, 0)

h为奇数时，；h为偶数时，

如果，则可以等效地认为晶格常数变为了a/2，倒空间基矢长度变为了原来的两倍，即倒空间平面的数量减少了一半，原本应该出现的这些衍射极大值因此消失（出现消光）

1. **讨论金刚石结构晶体的消光法则。**

金刚石结构中一个单胞中有8个碳原子，坐标为

(0, 0, 0), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2), (1/4, 1/4, 1/4), (3/4, 3/4, 3/4), (3/4, 3/4, 1/4), (3/4, 1/4, 3/4), (1/4, 3/4, 3/4)

代入几何结构因子

整理后得到

分别讨论上面两个乘积项的消光条件：

1. 全为偶数，且为偶数时，
2. 全为偶数，且为奇数时，
3. 全为奇数，
4. 部分为偶数，部分为奇数时，

能答出或者的两个条件即可。

1. **讨论六角密积结构的消光条件。**

解：

晶胞中包含2个原子，位置矢量分别是：

对密积结构，设。

代入得：

得

分析可知，当

时出现衍射消光。

所以：消光条件为：

n=奇数

l=奇数

2h+k=3/n\*整数

1. **金属铁在20℃时，可以得到最小的三个衍射角，分别为当升温到1000℃时，最小的三个衍射角变为。已知在上述温度范围内，铁金属为立方结构。试分析在20℃和1000℃下，铁各属于何种立方结构。**

解：

1. 对于立方晶体：晶面族（hkl）的面间距

布拉格公式：

相应化为：

可见与成正比

对于体心立方元素晶体，衍射面指数和n(h+k+l)为奇数时，衍射消光；衍射面指数和为偶数时，衍射极大。因此，对应最小的三个衍射角的衍射面指数依次为（110），（200），（211）。这三个衍射角的衍射面指数平方和的平方根之比为：1：1.414：1.732.

铁在20℃时，最小的三个衍射角的正弦值之比。可见，铁在20℃时最小的三个衍射角的正弦值之比与体心立方元素晶体最小的三个衍射角的衍射面指数平方和的平方根之比最接近，因此铁在20℃时为体心立方结构。

1. 对于面心立方，衍射面指数全为奇数或偶数时，衍射极大，对应最小的三个衍射角的衍射面指数依次为（111），（200），（220）。这三个衍射角的衍射面指数平方和的平方根之比为1：1.154：1.632.铁在1000℃时，最小的三个衍射角的正弦值之比。同理，铁在1000℃时为面心立方结构。