

1. 低于 910°C 时,铁以 bcc 结构存在 ($\alpha\text{-Fe}$ $a=2.87\text{\AA}$);继续加热到 $910^{\circ}\text{C} - 1390^{\circ}\text{C}$,铁转化为 fcc 结构 ($\gamma\text{-Fe}$ $a=3.64\text{\AA}$),请确定在两种状态下,八面体间隙位的形状和大小,画出简单的示意图,求解哪种相可以容纳更多的碳原子(提示:碳的共价键半径为 0.77\AA)。包含少量碳 ($<1\%$) 的铁,从熔融状态冷却将分成两个相:一个相是 $\alpha\text{-Fe}$,少量碳原子处于间隙位(铁酸盐);另一个是铁的碳化物 (Fe_3C)。说明产生原因。为什么碳的渗入可以强化材质,预防形变(提示: Fe_3C 和许多碳化物类似,质地硬而脆)?
2. 求解六角密堆结构中,晶格常数 c 和 a 的比值。和下面 hcp 结构元素的结果进行比较: He($c/a=1.633$), Mg(1.623), Ti(1.586), Zn(1.861)。解释其偏离理论值的原因。
3.

 - a) 计算 fcc 结构常数 $S_{hkl} = \sum_a f_a \exp(-i\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_a)$
指出衍射光束的消光方向 (hkl)。
 - b) fcc 结构可看成由 4 个简单立方晶格 (sc) 相互重叠组成,它们具有与 fcc 结构相同的晶格常数。考虑 sc 和 fcc 结构中相应晶体平面的 Bragg 反射,解释 a) 结论中 (001) 衍射束的情况 (与 sc 相比减弱), (111) 束的情况 (与 sc 相比增强)。
4. 考虑一个原子的 X 光吸收矩阵元 $\langle i|x|f\rangle$, $|i\rangle$ 是原子上电子的初始局域态, $|f\rangle$ 是末态 s-wave e^{ikr}/r 满足 $\hbar^2 k^2 / 2m = \hbar\omega - E_1$ (E_1 是电离化的阈值能量)。假设原子被最近邻原子环绕,则由于最近邻原子散射,终态为原始出射球面波和被最近邻原子散射的球面波的叠加。请描述阈值以上的 X 光吸收时,所发生的物理现象。利用高于临界能量 X 光吸收系数的震荡,可以确定无定型材料

中，最近邻原子间的距离，请详细说明这种方法 (Extended X-ray Absorption Fine Structure :EXAFS) .例如：光源的选择，为什么需要观察阈值之上的震荡的行为，为什么实验上观察无定型碳的周边环境非常困难。

5. 考虑 N 个原子组成的一个无序体系的散射 (scattering amplitudes 为 f)。

a) 证明其散射强度 $I(K)$ 可以表示为：

$$I(K) \propto f^2 \left[N + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} e^{-ik \cdot (r_i - r_j)} \right]$$

b) 假设 $dP = n^2 g(1,2) dr_1 dr_2$, n 为原子密度, 代表在 dr_2 找到原子 2, 同时在 dr_1 找到原子 1 的可能性。求证, 在一个均一系统中, 散射强度为

$$I(K) \propto f^2 N \left[1 + n \int g(r) e^{-ik \cdot r} dr \right]$$

当距离 r_i 比较大时, $g(r_i)$ 等于 1, $g(r_i) = 1$ 表示一个完全均匀的材料, 此时第二项变成 K 的 δ 函数, 可以定义 “liquid structure factor”

$$\begin{aligned} S(K) &= 1 + n \int g(r) e^{-iK \cdot r} dr - \delta(K) \\ &= 1 + n \int h(r) e^{-iK \cdot r} dr \end{aligned}$$

其中 $h(r) = g(r) - 1$, 代表偏离均匀分布的程度。

c) 如何通过对散射强度 $I(K)$ 的测量得到 $h(r)$, 其最大值的意识是什么?