

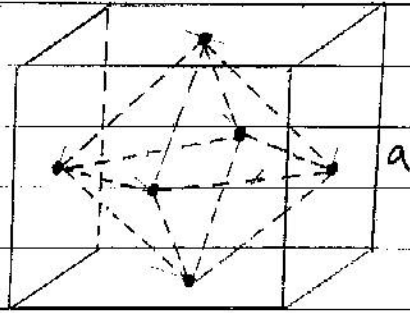
1.

a. fcc ( $\gamma$ -Fe)晶格常数为  $a$ , 八面体边长为  $\frac{\sqrt{2}a}{2}$ 铁原子半径  $r = \frac{1}{2} \times \frac{\sqrt{2}a}{2} = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ 

八面体间隙半径

$$r_o = \frac{a}{2} - \frac{\sqrt{2}}{4}a = 0.53 \text{ \AA}$$

$$V = 0.202 \text{ \AA}^3$$



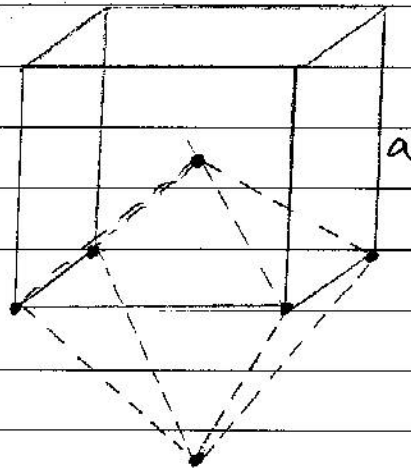
fcc

bcc ( $\alpha$ -Fe)八面体边长为  $\frac{\sqrt{2}a}{2}$ 铁原子半径  $r = \frac{1}{2} \times \frac{\sqrt{2}a}{2} = \frac{\sqrt{2}}{4}a$ 

八面体间隙半径

$$r_o = \left(\frac{a}{2}\right) - \frac{\sqrt{2}}{4}a = 0.19 \text{ \AA}$$

$$V = 0.156 \text{ \AA}^3$$

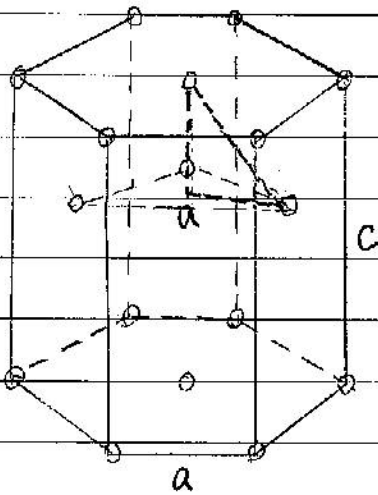


bcc

$\therefore$  fcc 可容纳更多的碳原子。

b. 由熔融状态冷却, 以  $\alpha$ -Fe 存在 (bcc). 但 bcc 可溶碳原子量少, 所以有另外的  $\text{Fe}_3\text{C}$  存在。

## 2. 六角密堆积结构



$$a^2 - \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\right)^2 = \left(\frac{c}{2}\right)^2$$

$$\therefore \frac{c}{a} = \frac{2\sqrt{2}}{3} = 1.63$$

He 原子结构简单，外层由两个  $1s$  电子组成。电子被原子核紧密束缚，电子层被填满，可被视为硬球模型。

Mg  $[\text{Ne}]3s^2$ ， $3s$  电子受到束缚较弱。原子间的相互作用力不对称， $p$  轨道的空间构型会产生影响。

Ti, Zn 为  $[\text{Ar}]3d^24s^2$ ， $[\text{Ar}]3d^{10}4s^2$ 。不对称性更明显。金属的外层电子会对结构产生影响。

3.

a. fcc中原胞内不同原子为:  $(0,0,0)$   $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$   
 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$   $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$

$$S = \sum f_a \exp(-i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_a)$$

$$= f_a \{ 1 + \exp[-i\pi(k+h)] + \exp[-i\pi(k+l)] + \exp[-i\pi(h+l)] \}$$

$$= \begin{cases} 4f & h, k, l \text{ 全为奇或偶} \rightarrow \text{增强} \\ 0 & \text{其他情况} \rightarrow \text{消光} \end{cases}$$

b. (001)方向 fcc结构的晶面间距为  $d$   
 sc结构的晶面间距为  $d/2$   
 $\therefore$  fcc相对减弱

(111)方向 fcc与sc的晶面间距相同, 但fcc原子数更多, 故相对增强.

4.

a. 当使用阈值以上X光吸收时, 由于散射波被邻近原子散射, 反射回的球面波与初始的散射波叠加干涉. 当散射波波矢  $k$  和最近邻原子间距  $d$  满足共振条件, 会使X光的吸收系数增大. 随X光能量增高, 散射波波矢  $k^2 k' = 2m(\hbar\omega - E)$  增大, 会出现吸收系数的振荡行为.

b. 一般EXAFS的光子能量为200-2500 eV. 从材料某元素的吸收边开始扫描, 连续调节能量. 所以一般在同步辐射进行实验.

被激发的光电子波长取决于入射光子能量, 散射的电子波相位和幅度取决于最近邻原子的种类及其与中心原子间的距离, 因此可以以此来探测周围环境. C的序数小的原子, 对X光的散射以第一步居数, EXAFS的振荡振幅小, 不易观察.

5.

a. 对于无序体系, 结构因子可写为

$$S_k = \sum_{i=1}^N f_i(k) e^{-ikr_i}$$

如散射振幅  $f$  相同, 则:

$$\begin{aligned} I(k) &\propto f^2 \left( \sum_{i=1}^N e^{-ikr_i} \cdot \sum_{j=1}^N e^{ikr_j} \right) \\ &= f^2 \left[ N + \sum_{i \neq j} e^{-ik(r_i - r_j)} \right] \end{aligned}$$

b. 均-系系统中

$$\begin{aligned} I(k) &\propto f^2 \left[ N + \iint e^{-ik(r_i - r_j)} \cdot n^2 \cdot g(r_i - r_j) dr_i dr_j \right] \\ &= f^2 N + f^2 n^2 \int dr_i \int g(r) e^{-ikr} dr \\ &= f^2 N + f^2 N n \int g(r) e^{-ikr} dr \\ &= f^2 N \left[ 1 + n \int g(r) e^{-ikr} dr \right] \end{aligned}$$

c.  $I(k) \propto S(k)$ 

通过  $I(k)$  的测量得到  $S(k)$ , 经傅立叶变换得到  $g(r)$ , 也就  
能得到  $h(r)$ .