

第二章 晶体结合 作业

一、 书后习题

2.1, 2.3, 2.6, 2.7

二、 补充习题

1、两原子间相互作用势为 $u(r) = -\frac{\alpha}{r^2} + \frac{\beta}{r^8}$, 当两原子构成稳定分子时, 核间距为 3\AA , 解离能为 4eV , 求 α 和 β 。

2、设离子晶体中离子总的相互作用势能是 $U(r) = -N \left[\frac{\mu q^2}{2\pi\epsilon_0 r} - Z\lambda e^{-r/\rho} \right]$, λ , ρ 为常数, Z 为配位数, 求晶体的压缩系数。

3、某离子晶体, 离子间的相互作用势为 $u(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{R} + \frac{b}{R^m}, & \text{最近邻} \\ \pm \frac{e^2}{r}, & \text{最近邻以外} \end{cases}$,

(1) 求平衡时 晶总的相互作用势能 $U(R_0)$;

(2) 试证明 $U(R_0) = -\infty \left(\frac{\mu^m}{Z} \right)^{\frac{1}{m-1}}$ 。

4、Lenard-Jones 势为 $u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$, 证明: $r=1.12\sigma$ 时, 势能最小,

且 $u(r)=-\epsilon$; 当 $r=\sigma$ 时, $u(r)=0$; 说明 ϵ 和 σ 的物理意义。

5、简答下列问题:

(1) 原子结合成晶体时, 原子的价电子产生重新分布, 从而产生不同的结合力, 分析离子性、共价性、金属性和范德瓦尔斯性结合力的特点。

(2) 晶体有哪些结合方式? 结合力的本质是什么?

(3) GaAs 晶体的结合方式是什么? 为什么?

(4) 晶体的结合能, 晶体的内能, 原子间的相互作用势能有何区别?

(5) 何为杂化轨道?

(6) 原子在结合成晶体过程中, 排斥作用和吸引作用有什么关系? 在什么范围排斥起主导作用? 在什么范围吸引起主导作用?

(7) 解释金属多为密堆积结构的原因。

(8) 共价结合的特征。