

固体物理学作业

Charles Luo

2025 年 5 月 11 日

目录

1	第一章习题	3
2	第二章习题	9
3	第三章习题	12

1 第一章习题

习题 1. 在正交直角坐标系中, 若矢量 $\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{i} + n_2 \mathbf{j} + n_3 \mathbf{k}$, 其中 $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ 为单位矢量, $n_i (i = 1, 2, 3)$ 为整数。问下列情况属于什么点阵?

- (a) 当 n_i 为全奇加全偶时;
- (b) 当 n_i 之和为偶数时。

解答.

- (a) 据题意, 全奇加全偶应是两个布拉维格子的叠加。

若 $n_i (i = 1, 2, 3)$ 全为偶数, 可以提取公因子 2 得到 $\mathbf{R}_n = n'_1 (2\mathbf{i}) + n'_2 (2\mathbf{j}) + n'_3 (2\mathbf{k})$, 此时 $n'_i (i = 1, 2, 3)$ 为整数, 对应简单立方点阵, 格矢长度为 2 个单位长度。

同理可得 $n_i (i = 1, 2, 3)$ 全为奇数时也为简单立方点阵, 可由全为偶数时点阵沿 $(1, 1, 1)$ 方向平移一个单位长度得到。

二者的嵌套为体心立方点阵。

- (b) 据题意, $n_1 + n_2 + n_3 = 2k, k \in \mathbb{N}$ 。

不妨取 $k = 1$ 和 $k = 2$ 来猜测, 可以得到格点坐标为 $(1, 1, 0), \dots, (0, 1, 1), (2, 0, 0), \dots, (0, 0, 2)$. 为面心立方点阵。

习题 1 的注记.

- (b) 可取 $k_1 = k - n_1, k_2 = k - n_2, k_3 = k - n_1 - n_2$, 得到 $\mathbf{R}_n = (k_2 + k_3) \mathbf{i} + (k_3 + k_1) \mathbf{j} + (k_1 + k_2) \mathbf{k}$.

习题 2. 分别证明:

- (a) 面心立方 (fcc) 和体心立方 (bcc) 点阵的惯用初基元胞三基矢间夹角 θ 相等, 对 fcc 为 60° , 对 bcc 为 $109^\circ 27'$;
- (b) 在金刚石结构中, 作任一原子与其四个最近邻原子的连线。证明任意两条线之间夹角 θ 均为

$$\arccos \left(-\frac{1}{3} \right) = 109^\circ 27'.$$

解答.

(a) fcc 三个基矢为 $\mathbf{a}_1 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a}_2 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a}_3 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$.

$$\text{故 } \cos \theta = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1| |\mathbf{a}_2|} = \frac{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3}{|\mathbf{a}_2| |\mathbf{a}_3|} = \frac{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1}{|\mathbf{a}_3| |\mathbf{a}_1|} = \frac{1}{2}, \text{ 即 } \theta = 60^\circ.$$

bcc 三个基矢为 $\mathbf{a}_1 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a}_2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a}_3 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$.

$$\text{故 } \cos \theta = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1| |\mathbf{a}_2|} = \frac{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3}{|\mathbf{a}_2| |\mathbf{a}_3|} = \frac{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1}{|\mathbf{a}_3| |\mathbf{a}_1|} = -\frac{1}{3}, \text{ 即 } \theta = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109^\circ 27'.$$

(b) 金刚石结构中坐标为 $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$ 的原子相邻的 4 个原子坐标分别为 $(0, 0, 0), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right),$

$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$. 邻边 $\mathbf{l}_1 = \left(-\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}\right), \mathbf{l}_2 = \left(-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \mathbf{l}_3 = \left(\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \mathbf{l}_4 = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}\right)$.

$$\text{故 } \cos \theta = \frac{\mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{l}_2}{|\mathbf{l}_1| |\mathbf{l}_2|} = \frac{\mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{l}_3}{|\mathbf{l}_2| |\mathbf{l}_3|} = \frac{\mathbf{l}_3 \cdot \mathbf{l}_4}{|\mathbf{l}_3| |\mathbf{l}_4|} = \frac{\mathbf{l}_4 \cdot \mathbf{l}_1}{|\mathbf{l}_4| |\mathbf{l}_1|} = -\frac{1}{3}, \text{ 即 } \theta = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109^\circ 27'.$$

习题 3. 证明在六角晶系中米勒指数为 (hkl) 的晶面族间距为

$$d = \left[\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

解答. 米勒指数以单胞的三条棱为坐标系.

正点阵的一族晶面 (hkl) 垂直于倒格矢 $\mathbf{K}_h = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$, 晶面间距 $\frac{2\pi}{|\mathbf{K}_h|}$.

在六角晶系中 $\mathbf{a} = (a, 0, 0), \mathbf{b} = \left(-\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a, 0\right), \mathbf{c} = (0, 0, c)$.

求倒点阵基矢:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0\right).$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2\sqrt{3}}{3}, 0\right).$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{c} (0, 0, 1).$$

$$\text{倒格矢 } \mathbf{K}_h = \left(\frac{2\pi}{a}h, \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}h + \frac{4\sqrt{3}\pi}{3a}k, \frac{2\pi}{c}l \right), \text{ 故 } d = \frac{2\pi}{|\mathbf{K}_h|} = \left[\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

习题 4. 证明底心正交点阵的倒点阵仍为底心正交点阵。

解答. 底心正交阵基矢 $\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, 0 \right)$, $\mathbf{a}_3 = (0, 0, c)$.

倒点阵基矢:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \left(\frac{1}{a}, -\frac{1}{b}, 0 \right).$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \left(0, \frac{2\pi}{b}, 0 \right).$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \left(0, 0, \frac{1}{c} \right).$$

倒点阵仍为底心正交阵, 底面边长为 $\frac{4\pi}{a}$ 和 $\frac{4\pi}{b}$, 高为 $\frac{2\pi}{c}$.

习题 5. 试证明具有四面体对称性的晶体, 其介电常量为标量介电常量:

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon_0 \delta_{\alpha\beta}.$$

解答. 根据电动力学有

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{pmatrix}.$$

四面体对称性包括三个四重反演轴, 绕 x,y,z 轴旋转的操作分别记为 $\mathbf{A}_x, \mathbf{A}_y, \mathbf{A}_z$, 反演操作记为 \mathbf{I} .

$$\mathbf{A}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{I} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

由题意，应有 $(\mathbf{IA}_x)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{IA}_x)^T = \boldsymbol{\varepsilon}$. 即

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

可得 $\varepsilon_{13} = \varepsilon_{12} = 0, \varepsilon_{21} = -\varepsilon_{31}, \varepsilon_{32} = -\varepsilon_{23}, \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33}$.

利用 $(\mathbf{IA}_y)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{IA}_y)^T = \boldsymbol{\varepsilon}$ 及 $(\mathbf{IA}_z)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{IA}_z)^T = \boldsymbol{\varepsilon}$ 可知 $\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_0\delta_{\alpha\beta}$.

习题 6. 若 AB_3 的立方结构如图所示，设 A 原子的散射因子为 $f_A(\mathbf{K}_{hkl})$, B 原子的散射因子 $f_B(\mathbf{K}_{hkl})$.

(a) 求其几何结构因子 $F(\mathbf{K}_{hkl}) = ?$

(b) 找出 (hkl) 衍射面的 X 射线衍射强度分别在什么情况下有

$$I(\mathbf{K}_{hkl}) \propto \begin{cases} |f_A(\mathbf{K}_{hkl}) + 3f_B(\mathbf{K}_{hkl})|^2 \\ |f_A(\mathbf{K}_{hkl}) - f_B(\mathbf{K}_{hkl})|^2 \end{cases}$$

(c) 设 $f_A(\mathbf{K}_{hkl}) = f_B(\mathbf{K}_{hkl})$, 问衍射面指数中哪些反射消失? 试举出五种最简单的。

解答.

(a) 取原子坐标 $A(0,0,0)$, $B\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$.

$$F(hkl) = \sum_j f_j e^{-2\pi i(hr_{j1} + kr_{j2} + lr_{j3})} = f_A + f_B \left(e^{-\pi i(h+k)} + e^{-\pi i(k+l)} + e^{-\pi i(h+l)} \right).$$

(b) 当 $(h+k), (h+l), (k+l)$ 均为偶数时, $F(hkl) = f_A + 3f_B, I(\mathbf{K}_{hkl}) \propto |f_A(\mathbf{K}_{hkl}) + 3f_B(\mathbf{K}_{hkl})|^2$.

当 $(h+k), (h+l), (k+l)$ 两奇一偶时, $F(hkl) = f_A - f_B, I(\mathbf{K}_{hkl}) \propto |f_A(\mathbf{K}_{hkl}) - f_B(\mathbf{K}_{hkl})|^2$.

(c) 消光条件 $F(hkl) = 0$, 据此可得 $(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1), (1,1,0), (1,0,1)$.

习题 7. 在某立方晶系的铜 $\mathbf{K}_\alpha X$ 射线粉末相中，观察到的衍射角 θ_i 有下列关系：

$$\sin \theta_1 : \sin \theta_2 : \sin \theta_3 : \sin \theta_4 : \sin \theta_5 : \sin \theta_6 : \sin \theta_7 : \sin \theta_8$$

$$= \sqrt{3} : \sqrt{4} : \sqrt{8} : \sqrt{11} : \sqrt{12} : \sqrt{16} : \sqrt{19} : \sqrt{20}.$$

- (a) 试确定对应于这些衍射角的晶面的衍射面指数；
 (b) 问该立方晶体时简单立方、面心立方还是体心立方？

解答.

(a) 晶面间距 $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$, 布拉格反射定律 $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$,

可得 $\sin \theta \propto \sqrt{(nh)^2 + (nk)^2 + (nl)^2}$.

故衍射面指数 $(1, 1, 1), (2, 0, 0), (2, 2, 0), (1, 1, 3), (2, 2, 2), (4, 0, 0), (3, 3, 1), (4, 2, 1)$.

- (b) 简单立方允许所有 (hkl) 值, 没有消光.

体心立方要求 $(h + k + l)$ 为偶数.

面心立方则要求 h, k, l 全奇或全偶.

故该立方晶体是面心立方。

习题 8. X 射线衍射的线宽。

假定一个有限大小的晶体, 点阵节点由 $R_l = \sum_{i=1}^3 l_i \mathbf{a}_i$ 确定, 其中 l_i 取整数 $0, 1, 2, \dots, N_i - 1$, 每个结点处有全同的点散射中心。散射振幅可写为

$$u_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = c \sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \sum_{i=1}^3 l_i \mathbf{a}_i}.$$

(a) 证明散射强度 $I = |u|^2 = u^* u = c^2 \prod_{i=1}^3 \frac{\sin^2 \frac{1}{2} N_i (\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}{\sin^2 \frac{1}{2} (\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}$, $\Delta k = k' - k$;

(b) 当 $\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi h_i$ (h_i 为整数) 时, 出现衍射极大值, 函数 $\sin^2 \frac{1}{2} N_i (\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)$ 的第一个零点定义了 X 射线衍射的线宽 Δ_i , 证明 $\Delta_i = \frac{2\pi}{N_i}$;

(c) 对于一个无限大的晶体, $N_i \rightarrow \infty$, 证明 $I = c^2 N^2 \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{K}_h}$.

解答.

(a) 对散射振幅分析, $u_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = c \sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \sum_{i=1}^3 l_i \mathbf{a}_i} = c \sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-il_1(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1)} \cdot e^{-il_2(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)} \cdot e^{-il_3(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)}.$

写成连乘形式 $u_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = c \prod_{i=1}^3 \sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-il_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}.$

$$\sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-il_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} = \frac{1 - e^{-iN_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}}{1 - e^{-i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}} = \frac{e^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \left(e^{i\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} - e^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \right)}{e^{-i\frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \left(e^{i\frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} - e^{-i\frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \right)}.$$

由欧拉公式可化简为 $\sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-il_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} = \frac{e^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \sin \frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}{e^{-i\frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \sin \frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}.$

故 $I = |u|^2 = u^* u = c^2 \prod_{i=1}^3 \frac{\sin^2 \frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}{\sin^2 \frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}, \Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}.$

(b) 函数 $\sin^2 \frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)$ 的第一个零点出现在: $\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) = \pi \implies \Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = \frac{2\pi}{N_i}.$

即 $\Delta_i = \frac{2\pi}{N_i}.$

(c) 当 $N_i \rightarrow \infty$ 时, 每个求和式 $\sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{(-il_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i))}$ 转换为 δ 函数。因此, 散射强度 I 表现为 δ 函数的形式:

$$I = c^2 N^2 \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{K}_h}$$

其中 \mathbf{K}_h 是倒格矢, 满足布拉格条件。

习题 8 的注记.

- (c) 不是很理解。

2 第二章习题

习题 9. 导出 NaCl 型离子晶体中排斥势指数的下列关系式：

$$n = 1 + \frac{4\pi\epsilon_0 \times 18Br_0^4}{\alpha e^2} \text{ (SI 单位)}$$

其中 r_0 为近邻离子间距, α 为以 r_0 为单位的马德隆常数, B 为体积弹性模量。已知 NaCl 晶体的 $B = 2.4 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$, $r_0 = 2.81 \text{ \AA}$, 求 NaCl 的 $n = ?$

解答. $\alpha = 1.747558$, $\epsilon = 8.854 \times 10^{-12}$. 代入公式有

$$n = 1 + \frac{4\pi\epsilon_0 \times 18Br_0^4}{\alpha e^2} = 1 + \frac{4\pi \times 8.854 \times 10^{-12} \times 18 \times 2.4 \times 10^{10} \times (2.81 \times 10^{-10})^4}{1.747588 \times (1.60219 \times 10^{-19})} = 7.78$$

习题 9 的注记. 见书 P63,P64.

设晶体有 N 个元胞, 晶体内能 $U = N \left(-\frac{A_1}{r} + \frac{A_n}{r} \right)$, $A_1 = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0}$, $A_n = 6b$, $V = 2Nr^3$.

由平衡位置能量极小有 $\frac{dU(r)}{dr} = N \left(\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{6nb}{r^{n+1}} \right) = 0$, 即 $6b = \frac{\alpha e^2 r_0^{n-1}}{4n\pi\epsilon_0}$.

代回内能公式有 $U = N \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r} + \frac{r_0^{n-1}}{nr^n} \right)$.

体积弹性模量 $B = V \frac{d^2 U}{dV^2} \Big|_{r_0} = \frac{1}{18Nr_0} \frac{d^2}{dr^2} \Big|_{r_0} = \frac{(n-1)\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 \times 18r_0^4}$.

晶体结合能 $W = -U(r_0) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{N\alpha e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$.

习题 10. 带 $\pm e$ 电荷的两种离子相间排成一维晶格, 设 N 为元胞数, $\frac{A_n}{r_0^n}$ 为排斥势, r_0 为正负离子间距。求证, 当 N 很大时有:

(a) 马德隆常数 $\alpha = 2 \ln 2$;

(b) 结合能 $W = \frac{Ne^2 2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$;

(c) 当压缩晶格时 $r \rightarrow r_0 (1 - \delta)$, 且 $\delta \ll 1$, 则需做功 $\frac{1}{2} (2Nr_0) B \delta^2$, 其中线弹模

$$B = \frac{(n-1) N 2 \ln 2}{8\pi\epsilon_0 r_0^2} e^2$$

解答.

(a) 取一个电子分析, 其静电势能 $u = 2 \times \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-)^i}{ir_0} \right)$.

而 $\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^{n-1}}{n} x$, 取 $x=1$ 得 $\alpha = 2 \ln 2$.

(b) 内能还需考虑排斥势能, 在单电子分析上乘元胞数 N 。

同习题 9 注记, 此时 $\alpha = 2 \ln 2$, 可得 $W = \frac{Ne^2 2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$.

(c) 将内能函数展开, 一次项由于平衡位置能量极小为零, 故在 $\delta \rightarrow 0$ 时仅需考虑二次项变化。

$$U(r) \approx U(r_0) + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2 U}{dr^2} \Big|_{r=r_0} (r - r_0)^2 = \frac{\alpha Ne^2 (n-1)}{8\pi\epsilon_0 r_0^3} (r - r_0)^2.$$

做功等于内能增量 $W = U(r_0(1-\delta)) - U(r_0) = \frac{\alpha Ne^2 (n-1)}{8\pi\epsilon_0 r_0^3} r_0^2 \delta^2 = \frac{1}{2} (2Nr_0) B \delta^2$.

故 $B = \frac{(n-1) N 2 \ln 2}{8\pi\epsilon_0 r_0^2} e^2$.

习题 11. 量子固体。

在量子固体中, 起主导作用的排斥能是原子的零点振动能, 考虑晶态 ^4He 的一个粗略一维模型, 即每个氦原子局限在一段长为 L 的线段上, 每段内的基态波函数取为半波长为 L 的自由粒子波函数。

(a) 试求每个粒子的零点振动能;

(b) 推导维持该线段不发生膨胀所需力的表达式;

(c) 在平衡时, 动能所引起的膨胀倾向被范德瓦耳斯相互作用所平衡, 假定最近邻间的范德瓦耳斯能为 $U(L) = 1.6L^{-6} 10^{-79} \text{J}$, 其中 L 以 m 为单位, 求 L 的平衡值。

解答.

(a) 波长 $\lambda = 2L$, 有 $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L}$, $T = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}$.

(b) 记 $U(L)$ 为吸引势，总能量 $E(L) = U(L) + T(L) = U(L) + \frac{h^2}{8mL^2}$ 。

$$\text{平衡位置有 } \frac{dE(L)}{dL} = \frac{dU(L)}{dL} - \frac{h^2}{4mL^3} = 0.$$

$$\text{故不发生膨胀所需力为 } F(L) = -\frac{dU(L)}{dL} = -\frac{h^2}{4mL^3}.$$

(c) 平衡位置有 $\frac{dE(L)}{dL} = \frac{dU(L)}{dL} - \frac{h^2}{4mL^3} = 0$ ，代入 $U(L) = 1.6L^{-6}10^{-79}J$ 得

$$L = \left(\frac{4m \times 9.6 \times 10^{-79}}{h^2} \right)^{\frac{1}{4}} = \left(\frac{4 \times 1.67 \times 10^{-27} \times 9.6 \times 10^{-79}}{6.626 \times 10^{-34}} \right)^{\frac{1}{4}} = 4.918 \times 10^{-10} \text{m} = 4.918 \text{\AA}.$$

习题 11 的注记.

- (a) 基态波函数满足一维无限深势阱条件： $\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ ，动能算符 $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ 。

零点振动能能为动能期望值

$$E_T = \langle \Psi_0 | \hat{T} | \Psi_0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \left| \frac{d\Psi_0}{dx} \right|^2 dx = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot \frac{1}{L} \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{\hbar^2 \pi^2}{4mL^2}.$$

3 第三章习题

习题 12. 在单原子组成的一维点阵中，假设每个原子所受的作用力左右不同，其力常数如图所示相间变化，且 $\beta_1 > \beta_2$ 。试证明在这样的系统中，格波仍存在着声频支和光频支，其格波色散关系为

$$\omega^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{m} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4\beta_1\beta_2 \sin^2 \frac{qa}{2}}{(\beta_1 + \beta_2)} \right]^{\frac{1}{2}} \right\}.$$

解答. 和一维双原子链振动类似，一个周期内有两个不同原子，A 原子左侧力常数为 β_1 ，右侧力常数为 β_2 ，B 原子左侧力常数为 β_2 ，右侧力常数为 β_1 。

不妨记第 n 个 A 原子的位移为 u_n ，第 n 个 B 原子位移为 v_n ，写出 A、B 原子的动力学（运动）方程：

$$m\ddot{u}_n = \beta_1(v_{n-1} - u_n) + \beta_2(v_n - u_n)$$

$$m\ddot{v}_n = \beta_1(u_{n+1} - v_n) + \beta_2(u_n - v_n)$$

将格波试探解 $u_n = Ae^{i(qna - \omega t)}$ ， $v_n = Be^{i(qna - \omega t)}$ 代入运动方程有

$$-m\omega^2 A = \beta_1(Be^{-iqa} - A) + \beta_2(B - A)$$

$$-m\omega^2 B = \beta_1(Ae^{iqa} - B) + \beta_2(A - B)$$

写成矩阵形式，有

$$\begin{bmatrix} m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2 & \beta_1 e^{-iqa} + \beta_2 \\ \beta_1 e^{iqa} + \beta_2 & m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

有解的条件为系数矩阵行列式为零，即

$$\begin{vmatrix} m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2 & \beta_1 e^{-iqa} + \beta_2 \\ \beta_1 e^{iqa} + \beta_2 & m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2 \end{vmatrix} = 0$$

化简得到

$$[m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]^2 - (\beta_1^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos qa + \beta_2^2) = 0$$

即

$$[m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]^2 = (\beta_1 + \beta_2)^2 - 4\beta_1\beta_2 \sin^2 \frac{qa}{2}$$

故可得到格波色散关系为

$$\omega^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{m} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4\beta_1\beta_2 \sin^2 \frac{qa}{2}}{(\beta_1 + \beta_2)} \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

其中光学支取 + 号，声学支取 - 号。

习题 12 的注记. 得到运动方程前的分析:

$$V(u_n) = \frac{1}{2}(u_n - v_{n-1})^2 + \frac{1}{2}(v_n - u_n)^2$$

$$f(u_n) = -\frac{\partial V(u_n)}{\partial u_n} = \beta_1(v_{n-1} - u_n) + \beta_2(v_n - u_n)$$

声学支、光学支的分析:

- 长波极限 $qa = \pi$ 时，光学支声子的色散关系近似为

$$\omega_+(q) = \sqrt{\frac{2(\beta_1 + \beta_2)}{m}} \left[1 - \frac{1}{8} \frac{\beta_1\beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)^2} q^2 a^2 \right]$$

- 长波极限 $qa = \pi$ 时，声学支声子的色散关系退化为连续介质下的声波

$$\omega_-(q) = \sqrt{\frac{\beta_1\beta_2/(\beta_1 + \beta_2)}{2m}} a q = c_s q$$

声速为

$$c_s = \sqrt{\frac{[\beta_1\beta_2/(\beta_1 + \beta_2)]a}{2m/a}} = \sqrt{\frac{B}{\rho}}$$

由此得到线弹性模量 $B = \frac{\beta_1\beta_2}{\beta_1 + \beta_2} a$ ，质量密度为 $\rho = \frac{2m}{a}$ 。

习题 13. 具有二维正方点阵的某简单晶格，设原子质量为 m ，晶格常量为 a ，最近邻原子间相互作用的恢复力常数为 β ，假定原子垂直于点阵平面作横振动，试证明此二维系统的格波色散关系为 $m\omega^2 = 2\beta[2 - \cos(q_x a) - \cos(q_y a)]$ 。

解答. 取原点处原子 (u) 分析，受到周围四个原子 ($u_{10}, u_{01}, u_{-10}, u_{0-1}$) 的作用，其运动方程为

$$m\ddot{u} = \beta(u_{10} + u_{01} + u_{-10} + u_{0-1} - u)$$

将格波试探解 $u_{mn} = Ae^{iq_x ma + iq_y na - i\omega t}$ 代入运动方程有

$$-m\omega^2 A = \beta(e^{q_x a} + e^{q_y a} + e^{-q_x a} + e^{-q_y a} - 4)A$$

化简得到

$$m\omega^2 = 2\beta [2 - \cos(q_x a) - \cos(q_y a)]$$

习题 14. 求：

- (a) 一维单原子链振动的声子态密度 $\rho(\omega)$ ，并作图；
- (b) 一维双原子链振动的声子态密度 $\rho(\omega)$ ，并作图；

解答.

- (a) 对于一维单原子链振动，由书 P72 可知色散关系为 $\omega(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin\left(\frac{1}{2}qa\right) \right|$.

代入约化声子态密度表达式

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_q \delta[\omega - \omega(q)] = \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dq \delta[\omega - \omega(q)]$$

记 $\omega_m = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ 有

$$\rho(\omega) = \frac{a}{\pi} \left| \frac{dq}{d\omega(q)} \right|_{\omega} = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}$$

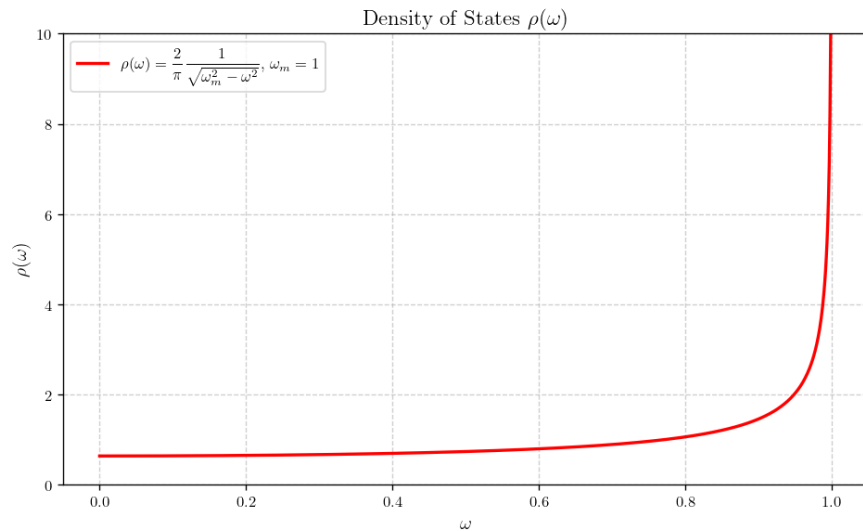


图 1: 一维单原子链振动的声子态密度

(b) 对于一维双原子链振动，由书 P78-79 可知色散关系为

$$\omega_{\pm}^2(q) = \beta \frac{m_2 + m_1}{m_2 m_1} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4m_2 m_1}{(m_2 + m_1)^2} \sin^2 \frac{1}{2} qa \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

为得到声子态密度 $\rho(\omega) = \frac{a}{\pi} \left| \frac{dq}{d\omega(q)} \right|_{\omega}$ ，不妨记 $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ ，对色散关系两边求导有

$$2\omega d\omega = \frac{\frac{\beta^2 a}{m_1 m_2} \sin q a dq}{\frac{\beta}{\mu} - \omega^2}$$

得到

$$\frac{dq}{d\omega} = \frac{\frac{2m_1 m_2}{\beta^2 a} \omega \left(\frac{\beta}{\mu} - \omega^2 \right)}{\sin qa}$$

由于 $\rho(\omega)$ 是 ω 的函数，应反解色散关系将 $q(\omega)$ 代入上式，

$$\sin qa = \frac{m_1 m_2 \omega}{2\beta^2} \sqrt{\left(\frac{2\beta}{m_1} - \omega^2 \right) \left(\frac{2\beta}{m_2} - \omega^2 \right) \left(\frac{2\beta}{\mu} - \omega^2 \right)}$$

$$\rho(\omega) = \frac{4}{\pi} \frac{\left| \frac{\beta}{\mu} - \omega^2 \right|}{\sqrt{\left(\frac{2\beta}{m_1} - \omega^2 \right) \left(\frac{2\beta}{m_2} - \omega^2 \right) \left(\frac{2\beta}{\mu} - \omega^2 \right)}}$$

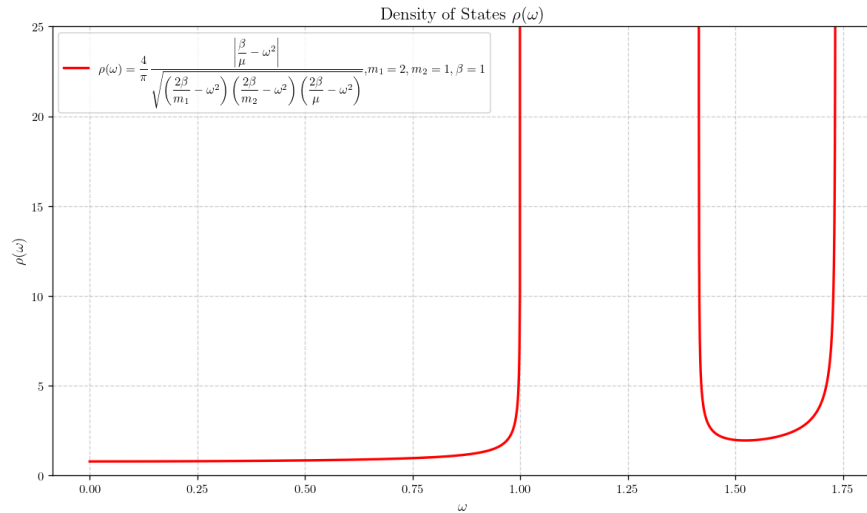


图 2: 一维双原子链振动的声子态密度

习题 15. 设某三维晶体光频支声子的某支色散关系为 $\omega(q) = \omega_0 - Aq^2$ ，试证明其声子态密度为

$$\rho(\omega) = \begin{cases} \frac{V}{4\pi^2 A^{\frac{3}{2}}} (\omega_0 - \omega)^{\frac{1}{2}}, & \omega_{min} < \omega < \omega_0 \\ 0, & \omega > \omega_0 \\ 0, & \omega < \omega_{min} \end{cases}$$

式中 $\omega_{min} = \omega_0 - A \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$ ， N 为晶体的元胞数。

解答. 根据三维声子态密度

$$\rho(\omega) = \sum_q \delta[\omega - \omega(q)] = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q \delta[\omega - \omega(q)] = \frac{V}{(2\pi)^3} \iint \frac{dS_\omega}{|\nabla\omega(q)|}$$

而 $\omega(q) = \omega_0 - Aq^2$ ，等频率面为球面， $\iint dS_\omega = 4\pi q^2$ ， $\nabla\omega(q) = \frac{d\omega(q)}{dq} = -2Aq$ 。

$$\rho(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} q^2 \frac{1}{2Aq} = \frac{V}{4\pi^2 A} q = \frac{V}{4\pi^2 A^{\frac{3}{2}}} (\omega_0 - \omega)^{\frac{1}{2}}$$

由声子态密度守恒，

$$N = \int_{\omega_{min}}^{\omega_0} \rho(\omega) d\omega = \frac{V}{4\pi^2 A^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2}{3} \right) (\omega_0 - \omega_{min})^{\frac{3}{2}}$$

解得

$$\omega_{min} = \omega_0 - A \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$$

习题 16. 设 d 维简单晶格中，声子色散关系 $\omega(q)$ 与 q^μ 成正比，试证明

(a) 声子态密度 $\rho = B\omega^{\frac{d}{\mu}-1}$;

(b) 比热容 $C_V = CT^{\frac{d}{\mu}}$ 。 B 、 C 为常量。

解答.

(a) 设 $\omega(q) = Aq^\mu$ ，由约化声子态密度定义式有

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_q \delta[\omega - \omega(q)] = \frac{\Omega}{(2\pi)^d} \int d^d q \delta[\omega - \omega(q)] \propto q^{d-1} \left| \frac{dq}{d\omega(q)} \right|$$

故有

$$\rho(\omega) \propto \frac{q^{d-1}}{q^{\mu-1}} \propto q^{d-\mu} \propto \omega^{\frac{d}{\mu}-1}$$

即

$$\rho = B\omega^{\frac{d}{\mu}-1}$$

(b) 内能为

$$U = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1} B\omega^{\frac{d}{\mu}-1} d\omega = \frac{B(k_B T)^{\frac{d}{\mu}+1}}{\hbar^{\frac{d}{\mu}}} \int_0^{\omega_D} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^{\frac{d}{\mu}} d\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$$

令 $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$, 故当 $T \rightarrow 0$ 时, $x \rightarrow \infty$, 此时积分项近似为常数, 故有

$$U \propto T^{\frac{d}{\mu}+1} \Rightarrow C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = CT^{\frac{d}{\mu}}$$

习题 17. 求在一维单原子链中, $\omega > \omega_m$ (截止频率) 声子模式的阻尼系数 α 与 ω 的关系。

解答.

习题 18. 格林艾森常数。

(a) 证明频率为 ω 的声子模式的自由能为 $k_B T \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \right]$;

(b) 如果 Δ 是体积的相对变化量, 则晶体的自由能密度可以写为

$$F(\Delta, T) = \frac{1}{2} B \Delta^2 + k_B T \sum_{\mathbf{q}} \ln \left\{ 2 \sinh \left[\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right] \right\}$$

其中 B 为体积弹性模量。假定 $\omega(\mathbf{q})$ 与体积关系为 $\frac{d\omega(\mathbf{q})}{\omega(\mathbf{q})} = -\gamma\Delta$, γ 为格林艾森常数, 且与模

\mathbf{q} 无关。证明当 $B\Delta = \gamma \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} \hbar\omega(\mathbf{q}) \coth \left[\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right]$ 时, F 对 Δ 为极小。利用内能密度的定义,

证明 Δ 可近似表达为 $\Delta = \frac{\gamma U(T)}{B}$ 。

(c) 根据德拜模型证明 $\gamma = -\frac{\partial \ln \theta_D}{\partial \ln V}$, 其中 $\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$ 。