

# 固体物理学作业

Charles Luo

2025 年 4 月 6 日

## 目录

1	第一章习题	3
2	第二章习题	9

## 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  $\theta$  相等, 对 fcc 为  $60^\circ$ , 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  $\theta$  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  $\theta_i$  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  $\Delta_i$ , 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  $\delta$  函数。因此, 散射强度  $I$  表现为  $\delta$  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,  $\alpha$  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。

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

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

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

**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  $^4\text{He}$  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  $U(L) = 1.6L^{-6}10^{-79}J$ , 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

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