# 三、惰性气体晶体（70分）

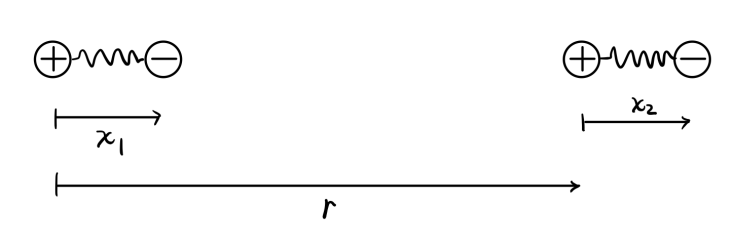
## 1.范德瓦尔斯作用（30分）

惰性气体原子的电子壳层已达饱和，这导致惰性气体间的结合不像离子晶体有点电荷间的静电力，因此需讨论偶极子层面的静电作用。

将两个惰性原子简化为1维的两个偶极子，单个原子正负电荷的作用用弹性势能表示，为第个原子中负电荷相对正电荷的位移。已知正电荷固定，负电荷质量为，两正电荷相距。

(i)试求系统的相互作用能；

(ii)假设，将电势能保留至最低阶非零项，并给出系统总能量；

(iii)求系统的所有本征圆频率。（提示：把总能量化为的形式，其中为的线性组合）并给出展开至的非零第二阶的形式，说明时本征频率的渐进行为及其物理意义。

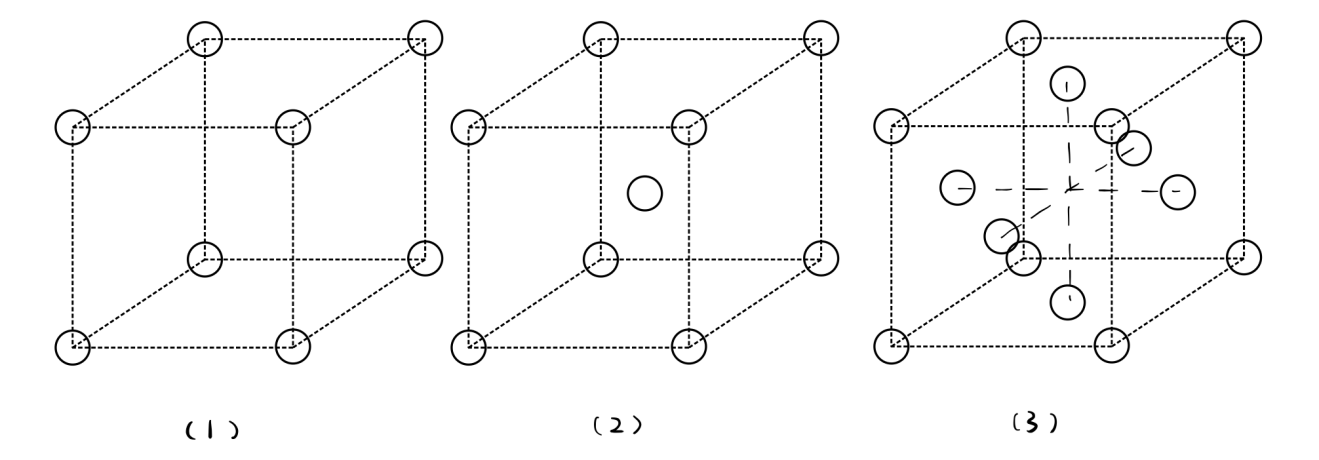
(iv)在量子力学中，一种本征振动模式对应一个振动自由度，一个振动自由度对应的基态能为。试证明相距为的孤立原子的相互作用能在时有的形式，并给出的值。

## 2.惰性气体晶体内聚能（40分）

上一节中给出的两惰性原子相互作用能是一种吸引相互作用，为保证平衡，在两原子相距较近时应显现更强烈的排斥效应，这种二原子相互作用能可写为

这种相互作用被称为势。其中均为正的常数，为特征晶格常数，在本题第一部分中给出，由实验观测取经验数值。

(i)请给出2个惰性气体原子的平衡间距；

(ii)惰性气体中不止含有2个原子，假设惰性气体晶体为立方体的堆砌，最近邻原子间距为，现有若干可能的分布：

(1)惰性气体原子分布在这些立方体的顶点上；

(2)惰性气体原子分布在立方体的顶点和中心；

(3)惰性气体原子分布在立方体的顶点和侧面的中心上；

试给出在以上三种情况下，一个原子在此惰性气体原子点阵（可视为无限大）中的势能，并将其化为类似的幂律形式，说明这种求和相当于改变系数、。结果可包含对全空间原子求和的求和号，本题暂不必给出求和的具体形式。

(iii)已知对(ii)中的三种情况，等效的系数变化分别为：

(1)

(2)

(3)

试求平衡时最近邻原子间距，并比较哪一种晶体最为稳定。

(iv)试给出最稳定晶体形成模式中求和的具体形式，即不遗漏的遍历空间中除自身外的所有原子的求和方式。

(v)实验发现，对于越重的惰性气体原子，上述结论更准确，而对于最轻的惰性元素，甚至只能在超高压的状态下观察到晶体的形成。部分理论学家认为，由于量子力学中的位置-动量不确定性，使得原子最低能量并非0，且这种量子基态能量越高，越偏离上述结果。试从这个角度解释实验相对理论的偏离与元素质量的关系。

# 三、惰性气体晶体（70分）

## 1.范德瓦尔斯作用（30分）

惰性气体原子的电子壳层已达饱和，这导致惰性气体间的结合不像离子晶体有点电荷间的静电力，因此需讨论偶极子层面的静电作用。

将两个惰性原子简化为1维的两个偶极子，单个原子正负电荷的作用用弹性势能表示，为第个原子中负电荷相对正电荷的位移。已知正电荷固定，负电荷质量为，两正电荷相距。

(i)试求系统的相互作用能；**（4分）**

解：

(ii)假设，将电势能保留至最低阶非零项，并给出系统总能量；**（8分）**

解： 利用小量近似，**（2分）**

从而有**（2分）**

则总能量**（4分）**

(iii)求系统的所有本征圆频率。（提示：把总能量化为的形式，其中为的线性组合）并给出展开至的非零第二阶的形式，说明时本征频率的渐进行为及其物理意义。**（10分）**

解： 引入线性变换**（4分）**

则总能量可写为**（2分）**

可以看出，经过线性变换后，总能量包含两个相互独立的，不含交叉项的两个谐振子，本征频率分别为**（2分）**

当时，，即相当于趋近于两个完全独立的谐振子。**（2分）**

(iv)在量子力学中，一种本征振动模式对应一个振动自由度，一个振动自由度对应的基态能为。试证明相距为的孤立原子的相互作用能在时有的形式，并给出的值。**（8分）**

解： 与完全孤立的状态相比，相距为的两个上述偶极子，基态能变化**（2分）**

利用小量近似公式**（2分）**

将展开**（2分）**

从而**（1分）**

从而题目命题得证，同时**（1分）**

## 2.惰性气体晶体内聚能（40分）

上一节中给出的两惰性原子相互作用能是一种吸引相互作用，为保证平衡，在两原子相距较近时应显现更强烈的排斥效应，这种二原子相互作用能可写为

这种相互作用被称为势。其中均为正的常数，为特征晶格常数，在本题第一部分中给出，由实验观测取经验数值。

(i)请给出2个惰性气体原子的平衡间距；**（4分）**

解： 对二体相互作用势求导为0的点为平衡点。**（2分）**

从而有**（2分）**

(ii)惰性气体中不止含有2个原子，假设惰性气体晶体为立方体的堆砌，最近邻原子间距为，现有若干可能的分布：

(1)惰性气体原子分布在这些立方体的顶点上；

(2)惰性气体原子分布在立方体的顶点和中心；

(3)惰性气体原子分布在立方体的顶点和侧面的中心上；

试给出在以上三种情况下，一个原子在此惰性气体原子点阵（可视为无限大）中的势能，并将其化为类似的幂律形式，说明这种求和相当于改变系数、。结果可包含对全空间原子求和的求和号，本题暂不必给出求和的具体形式。**（10分）**

解： 令为最近邻原子间距为时，按照第种晶体结构分布，、原子之间的间距，由于将晶体视为规则的立方体堆砌，则应该为仅与结构有关的常数。 则**（4分）**

从而**（4分）**

式中，表示对所有除i原子外的原子的积分。从上式可以看出，从二体相互作用到整个晶体内的相互作用，幂律不变而常数（强度）与晶体结构有关**（2分）**

(iii)已知对(ii)中的三种情况，等效的系数变化分别为：

(1)

(2)

(3)

试求平衡时最近邻原子间距，并比较哪一种晶体最为稳定。**（12分）**

解： 由（2.i）部分，有平衡时的近邻原子间距为**（2分）**

代入得**（2分）**

式中代表变化比例，将三种结构的数据代入得**（6分）**

比较得，同样对于一个原子，第三种结构（面心立方）结构的能量更低，则更稳定。**（2分）**

(iv)试给出最稳定晶体形成模式中求和的具体形式，即不遗漏的遍历空间中除自身外的所有原子的求和方式。**（8分）**

解： 对于面心立方，取**（4分）**

以某一个原子为原点，按照正方体构建坐标轴，则任意原子的位置总可以表示为**（2分）**

从而**（2分）**

(v)实验发现，对于越重的惰性气体原子，上述结论更准确，而对于最轻的惰性元素，甚至只能在超高压的状态下观察到晶体的形成。部分理论学家认为，由于量子力学中的位置-动量不确定性，使得原子最低能量并非0，且这种量子基态能量越高，越偏离上述结果。试从这个角度解释实验相对理论的偏离与元素质量的关系。**（6分）**

解： 在原子间距相同的情况下，原子的位置不确定度大致相当于近邻原子距离。

从而由不确定性关系**（2分）**

同时由于平衡状态下动量应为0，原子的动量可近似视为其不确定度**（1分）**

则在原子间距相同的情况下，动量相同。 动能**（1分）**

则原子质量越小，动能越大，越容易偏离上述平衡的基态，特别是当这种能量比此模型中的结合能（平衡位置能量的相反数）更大时，则无法平衡，也就无法形成晶体。这边解释更轻的元素比起其他惰性元素更难以形成晶体这一现象。**（12分）**