试 题 参 考 答 案

一、解：正格子基矢为$\begin{cases}\vec{a}_1 = 4\vec{i} \\ \vec{a}_2 = \frac{3}{2}\vec{i} + \frac{3\sqrt{3}}{2}\vec{j}\end{cases}$

设例格子基矢为$\begin{cases}\vec{b}_1 = b_{1x}\vec{i} + b_{1y}\vec{j} \\ \vec{b}_2 = b_{2x}\vec{i} + b_{2y}\vec{j}\end{cases}$

由$\vec{a}_i \bullet \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$可得

$$\begin{cases}4\vec{i}\bullet(b_{1x}\vec{i} + b_{1y}\vec{j}) = 2\pi \\ (\frac{3}{2}\vec{i} + \frac{3}{2}\sqrt{3}\vec{j})\bullet(b_{1x}\vec{i} + b_{2y}\vec{j}) = 0 \\ 4\vec{i}\bullet(b_{2x}\vec{i} + b_{2y}\vec{j}) = 0 \\ (\frac{3}{2}\vec{i} + \frac{3}{2}\sqrt{3}\vec{j})\bullet(b_{2x}\vec{i} + b_{2y}\vec{j}) = 2\pi\end{cases}$$

解方程组可得$\begin{cases}\vec{b}_1 = \frac{\pi}{2}\vec{i} - \frac{\pi}{2\sqrt{3}}\vec{j} \\ \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}}\vec{j}\end{cases}$

二、解（1）由 N 个氪原子组成的惰性气体晶体总的势能为 $U = 2N\varepsilon\left[A_{12}(\frac{\sigma}{r})^{12} - A_6(\frac{\sigma}{r})^6\right]$，r 为原子间距，平均每个原子势能为 $u = 2\varepsilon\left[A_{12}(\frac{\sigma}{r})^{12} - A_6(\frac{\sigma}{r})^6\right]$，平衡时$\left.\frac{du}{dr}\right|_{r=r_0} = 0$。

$$\left.\frac{du}{dr}\right|_{r=r_0} = 2\varepsilon\left[A_{12}\sigma^{12}\frac{(-12)}{r^{13}} - A_6\sigma_6\frac{(-6)}{r^7}\right]_{r=r_0} = 0$$

可得$r_0 = \left(\frac{2A_{12}}{A_6}\right)^{\frac{1}{6}}\sigma = 1.07\sigma = 3.90A^{\circ}$

对体心立方结构点陈常数$a = \frac{2}{\sqrt{3}}r_0 = 4.50A^{\circ}$

（2）每个原子的平均结合能为

$$u(r_0)=2\varepsilon\left[A_{12}\left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^{12}-A_6\left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^{6}\right]=-\varepsilon\frac{A_6^{\ 2}}{2A_{12}}$$

即 $u(r_0)=-8.24\varepsilon=-0.115(eV)$

三、解：（1）色散关系为 $\omega=2\left(\frac{\beta}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|$

（2）群速度 $V_g=\frac{d\omega}{dq}=qa\left(\frac{\beta}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\frac{1}{2}qa$

（3）长波极限下（q 很小）

$$\sin\frac{1}{2}qa\approx\frac{1}{2}qa$$

则色散关系为：$\omega=\left(\frac{\beta}{m}\right)^{\frac{1}{2}}qa$

四、解：晶体的零点振动能为 $E=\int_0^{\omega_{\max}}\frac{1}{2}h\nu\rho(\omega)d\omega$

由德拜模型处在 ω 则 $\omega+d\omega$ 区间内的振动模式数为

$$\frac{L^2}{(2\pi)^2}\frac{2\pi}{v_p^2}d\omega=\frac{L^2\omega d\omega}{2\pi v_p^2}$$

其中 v_p 为相速，L 为二维晶格的边长

代入振动能公式 $E=\int_0^{\omega_{\max}}\frac{1}{2}\eta\omega\rho(\omega)d\omega$

则有 $\int_0^{\omega_{\max}}\frac{1}{2}\eta\omega\cdot\frac{\omega L^2}{2\pi}\frac{d\omega}{v_p^2}=\frac{\eta L^2\omega_{\max}^2}{12\pi v_p^2}$

而 $\int_0^{\omega_{\max}}\rho(\omega)d\omega=2N$

即 $\int_0^{\omega_{\max}}\frac{\omega L^2}{2\pi}\frac{d\omega}{v_p^2}=\frac{L^2}{4\pi v_p^2}\omega_{\max}^2=2N$

由上两式可得 $E=\frac{2}{3}Nk\theta_D$

$\theta_D=\frac{\eta\omega_{\max}}{k}$ 为德拜温度

五、解：（1）在 dk_xdk_y 内状态数为

$$\frac{L^2}{2\pi^2}dk_x dk_y \to \frac{L^2}{2\pi^2}2\pi k dk$$

由 $E=\frac{\eta^2 k^2}{2m}$ 可得 E 即 E+dE 间的状态数为

$$\frac{L^2}{\pi}\bullet\frac{m}{\eta^2}dE$$

（2）绝对零度下 $f(E)=\begin{cases}1 & E<E_F^0\\ 0 & E>E_F^0\end{cases}$

则 $\int_0^{E_F^{(0)}} f(E)\bullet\frac{L^2}{\pi}\frac{m}{\eta^2}dE=\int_o^{E_F^0}\frac{L^2}{\pi}\frac{m}{\eta^2}dE=N$

则 $E_F^0=\frac{\eta^2 N\pi}{mL^2}$

六、解：（1） $E_s=E_0-A-J\sum_{R_n}^{\text{近邻}}e^{i\vec{k}\bullet\vec{R}_n}$

最近邻原子的坐标为（0，a ）(0，-a)（a，0）（-a，0），将近邻原子坐标代入 上式则可得：

$$E_s=E_0-A-J\sum_{R_n}^{\text{近邻}}e^{i\vec{k}\bullet\vec{R}_n}$$
$$=E_0-A-2J\left(\frac{e^{ik_xa}+e^{-ik_xa}}{2}+\frac{e^{ik_ya}+e^{-ik_ya}}{2}\right)$$
$$=E_0-A-2J(\cos k_xa+\cos k_yy)$$

（2）当 ka<<1 时， $\cos x=1-\frac{1}{2}x^2$

将 E_s 展开为级数则可得

$$E_s=E_0-A-4J+Jk^2a$$

电子的有效质量为 $m^*=\eta^2\left(\frac{d^2E_s}{dk^2}\right)^{-1}=\frac{\eta^2}{2Ja^2}$