

固体物理期末考试题
2013年6月24号 8:30-11:30@5501

1. 铜的密度为 $8.9 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 电阻率为 $1.56 \times 10^{-6} \text{ } \Omega \text{ cm}$, 原子量为 63.5, 原子密度为 $8.4 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$, 电子质量为 $9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$, 电子电量为 $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$, 假设一个铜原子有一个价电子:

(1) 求绝对零度下铜自由电子气的费米能 E_f 。若外加 1.0 V/cm 直流电场, 求自由电子平均漂移速度, 弛豫时间和平均自由程;

(2) 分别导出一维、二维、三维铜金属中自由电子气的能态密度。

2. 碱金属 Na 是体心立方结构, 求:

(1) 配位数和堆积密度 (假设以等体积硬球堆积), 并写出其正格矢和倒格矢;

(2) 费米波矢, 并根据第一布里渊区形状和体积试描述 Na 费米面的形状;

(3) 利用紧束缚近似计算 s 态原子能级对应的能带 $E^s(k)$ 。

3. 考虑二维正方晶格:

(1) 在空晶格近似下, 画出沿 X 轴的前四个能带并指出每个能带的简并度;

(2) 假设晶体势场为

$$U(x, y) = -4U \cos(2\pi x/a) \cos(2\pi y/a)$$

其中 U 是常数, 用近自由电子近似的微扰论, 近似求出布里渊区顶角 $(\pi/a, \pi/a)$ 处的能隙。

4. 设有一维晶体的电子能带可写成 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$, 其中 a 是晶格常数。

试求:

(1) 能带的宽度; (2) 电子在波矢 k 的状态时的速度;

(3) 能带底部和顶部电子的有效质量;

(4) 若晶格常数 $a = 2.5 \text{ \AA}$, 当外加 10^2 V/m 和 10^7 V/m 电场时, 试分别估计电子自能带底运动到能带顶所需的时间。

5 考虑一维单原子链的晶格振动, 试推导出:

(1) 色散关系的表达式;

(2) 利用色散关系求出模式密度;

(3) 说明德拜近似下的模式密度和 (2) 中得到的模式密度有何不同。

6. 考虑一维晶格情形:

(1) 求一价正负离子等间距排列组成的一维晶格的马德隆常数;

(2) 利用扩散方程 $\partial n / \partial t = D \nabla^2 n$, 证明在给定时刻 t, 从原点出发的某粒子平均扩散距离和 $t^{1/2}$ 成正比。

1. 铜的密度为 $8.9 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 电阻率为 $1.56 \times 10^{-6} \ \Omega \text{ cm}$, 原子量为 63.5, 原子密度为 $8.4 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$, 电子质量为 $9.1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$, 电子电量为 $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$, 假设一个铜原子有一个价电子:

(1) 求绝对零度下铜自由电子气的费米能 E_F . 若外加 1.0 V/cm 直流电场, 求自由电子平均漂移速度, 弛豫时间和平均自由程;

(2) 分别导出一维、二维、三维铜金属中自由电子气的能态密度。

$$(1) \quad n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{N}{V} = \frac{ZN_A \rho_m}{A} \Rightarrow k_F = \left(3\pi^2 \frac{ZN_A \rho_m}{A}\right)^{\frac{1}{3}}$$

$$\text{费米能 } \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

由 $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ 可得, 弛豫时间 $\tau = \frac{m\sigma}{ne^2}$, 漂移速度 $v_d = \frac{e\tau E}{m} = \frac{\sigma E}{ne}$, 平均自由程 $l = v_F \tau$

(2)

一维:

$$Z(E) = 2\rho(k)2k = 2\frac{L}{2\pi}2k$$

$$\therefore E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\therefore k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{代入上式可以有}$$

$$Z(E) = \frac{L}{\pi} 2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2L(2m)^{\frac{1}{2}}}{\pi\hbar} E^{\frac{1}{2}}$$

$$\rho(E) = \frac{dZ(E)}{dE} = \frac{L(2m)^{\frac{1}{2}}}{\pi\hbar} E^{-\frac{1}{2}}$$

二维:

$$Z(E) = 2\rho(k)\pi k^2 = 2\frac{S}{4\pi^2}\pi k^2$$

$$\therefore E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\therefore k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{代入上式可以有}$$

$$Z(E) = \frac{S}{2\pi} \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{mS}{\pi\hbar^2} E$$

$$\rho(E) = \frac{dZ(E)}{dE} = \frac{mS}{\pi\hbar^2}$$

三维:

$$Z(E) = 2\rho(k)\frac{4}{3}\pi k^3 = 2\frac{V}{8\pi^3}\frac{4}{3}\pi k^3$$

$$\therefore E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\therefore k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{代入上式可以有}$$

$$Z(E) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)^3 = \frac{V(2m)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3} E^{\frac{3}{2}}$$

$$\rho(E) = \frac{dZ(E)}{dE} = \frac{V(2m)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} E^{\frac{1}{2}}$$

最终结果 $g(\varepsilon)$ 对应除以 L 、 S 、 V 即可。

2. 碱金属 Na 是体心立方结构, 求:

(1) 配位数和堆积密度 (假设以等体积硬球堆积), 并写出其正格矢和倒格矢;

(2) 费米波矢, 并根据第一布里渊区形状和体积试描述 Na 费米面的形状;

(3) 利用紧束缚近似计算 s 态原子能级对应的能带 $E^s(k)$ 。

$$= \frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}r\right)^3} \cdot 100\% = 68\%$$

(1) 配位数为 8, 堆积密度为

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})$$

正格矢

$$\begin{cases} \bar{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3) = \frac{2\pi}{a} (\hat{j} + \hat{k}) \\ \bar{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\bar{a}_3 \times \bar{a}_1) = \frac{2\pi}{a} (\hat{i} + \hat{k}) \\ \bar{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\bar{a}_1 \times \bar{a}_2) = \frac{2\pi}{a} (\hat{i} + \hat{j}) \end{cases}$$

倒格矢

(2) 费米波矢 $k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$

具有 bcc 结构的一价金属：如 Li, Na, K, Rb, Cs 等，

其布里渊区是一个正12面体，从布里渊区心到边界的最短距离在 [110] 方向上。

$$k_{\min} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + 0} = 1.414 \frac{\pi}{a}$$

又因为： $n = \frac{2}{a^3} \quad \therefore k_F = \left(3\pi^2 \frac{2}{a^3}\right)^{\frac{1}{3}} = \frac{\pi}{a} \left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} = 1.241 \frac{\pi}{a}$

$$k_F / k_{\min} = 0.877$$

碱金属原子仅有一个价电子，且受晶格势场作用较弱，它们的布里渊区边界与接近球形的费米面之间距离较大，计算和测量一致表明：Na 的费米面接近球形，Cs 的费米面偏离球形约10%

(3)

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_i - J(0) - \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} J(\mathbf{R}_m) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m},$$

式中 $\sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}$ 表示求和只涉及最近邻(nearest neighbours)项，

对于体心立方，最近邻的位置为 $(\pm a/2, \pm a/2, \pm a/2)$ 共 8 个点。

$$\begin{aligned} \epsilon &= \epsilon_s - J_0 - J_1 \left\{ \exp\left[i(k_x + k_y + k_z)a/2\right] + \exp\left[-i(k_x + k_y + k_z)a/2\right] \right. \\ &\quad + \exp\left[i(k_x + k_y - k_z)a/2\right] + \exp\left[-i(k_x + k_y - k_z)a/2\right] \\ &\quad + \exp\left[i(k_x - k_y + k_z)a/2\right] + \exp\left[-i(k_x - k_y + k_z)a/2\right] \\ &\quad \left. + \exp\left[i(k_x - k_y - k_z)a/2\right] + \exp\left[-i(k_x - k_y - k_z)a/2\right] \right\} \\ &= \epsilon_s - J_0 - 2J_1 \left\{ \cos\left[(k_x + k_y + k_z)a/2\right] + \cos\left[(k_x + k_y - k_z)a/2\right] \right. \\ &\quad \left. + \cos\left[(k_x - k_y + k_z)a/2\right] + \cos\left[(k_x - k_y - k_z)a/2\right] \right\} \\ &= \epsilon_s - J_0 - 4J_1 \left\{ \cos\left[(k_x + k_y)a/2\right] \cos(k_z a/2) + \cos\left[(k_x - k_y)a/2\right] \cos(k_z a/2) \right\} \\ &= \epsilon_s - J_0 - 8J_1 \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2) \end{aligned}$$

3. 考虑二维正方晶格:

(1) 在空晶格近似下, 画出沿 X 轴的前四个能带并指出每个能带的简并度;

(2) 假设晶体势场为 $U(x, y) = -4U \cos(2\pi x/a) \cos(2\pi y/a)$

其中 U 是常数, 用近自由电子近似的微扰论, 近似求出布里渊区顶角 $(\pi/a, \pi/a)$ 处的能隙。

(1) (4 张 ppt, 注意看的次序)

例: 二维正方晶格的简约区中沿 $\Gamma\Delta X$ (即 k_x) 轴作出 $E_n^{(0)}(k)$ 曲线。

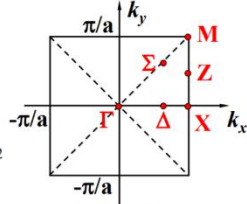
取 k_x, k_y 的单位: $\frac{\pi}{a}$

$E_n^{(0)}(k)$ 的单位: $\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$

$$E_n^{(0)}(\vec{k}) = (k_x + 2n_1)^2 + (k_y + 2n_2)^2$$

在 $\Gamma\Delta X$ 轴上, $k_y=0$ $0 \leq k_x \leq 1$

$$\therefore E_{n_1 n_2}^{(0)}(\Delta) = (k_x + 2n_1)^2 + 4n_2^2$$



只考虑 1/8 的 Brillouin 区

(不可约区)

和高对称的特殊点和方向

相应的波函数:

$$(n_1, n_2)_\Delta \equiv \psi_\Delta^{(0)}(n_1, n_2) = \exp\{i[(k_x + 2n_1)x + 2n_2y]\}$$

当 n_1 和 n_2 的绝对值最小时, 相应的能量最低。

$$(n_1, n_2) = (0, 0) \quad (\text{第一布里渊区})$$

$$E_{00}^{(0)}(\Delta) = k_x^2 \quad 0 \rightarrow 1 \quad (\text{单重, 无简并})$$

相应的波函数: $(0, 0)_\Delta = e^{ik_x x}$

第一近邻倒格点: $(n_1, n_2) = (\bar{1}0), (0\bar{1}), (01), (10)$

$$E_{10}^{(0)}(\Delta) = (k_x - 2)^2 \quad 4 \rightarrow 1 \quad (\text{单})$$

波函数: $(\bar{1}, 0)_\Delta = \exp[i(k_x - 2)x]$

$$E_{11}^{(0)}(\Delta) = E_{\bar{1}\bar{1}}^{(0)}(\Delta) = (k_x + 2)^2 + 4 \quad 8 \rightarrow 13 \quad (\text{双})$$

$$E_{01}^{(0)}(\Delta) = E_{0\bar{1}}^{(0)}(\Delta) = k_x^2 + 4 \quad 4 \rightarrow 5 \quad (\text{双重, 简并})$$

$$\text{波函数: } \begin{cases} (0, \bar{1})_\Delta = \exp[i(k_x x - 2y)] \\ (0, 1)_\Delta = \exp[i(k_x x + 2y)] \end{cases}$$

$$E_{10}^{(0)}(\Delta) = (k_x + 2)^2 \quad 4 \rightarrow 9 \quad (\text{单})$$

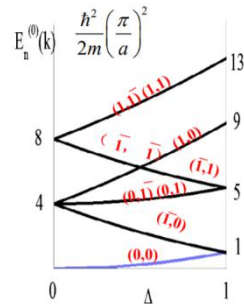
$$\text{波函数: } (1, 0)_\Delta = \exp[i(k_x + 2)x]$$

第二近邻倒格点: $(n_1, n_2) = (\bar{2}, \bar{1}), (\bar{1}, \bar{1}), (\bar{1}, 1), (1, 1)$

$$E_{\bar{2}\bar{1}}^{(0)}(\Delta) = E_{\bar{1}\bar{1}}^{(0)}(\Delta) = (k_x - 2)^2 + 4 \quad 8 \rightarrow 5 \quad (\text{双})$$

$$\text{相应的波函数: } \begin{cases} (\bar{1}, \bar{1})_\Delta = \exp[i[(k_x - 2)x - 2y]] \\ (\bar{2}, 1)_\Delta = \exp[i[(k_x - 2)x + 2y]] \end{cases}$$

$$\text{相应的波函数: } \begin{cases} (1, \bar{1})_\Delta = \exp[i[(k_x + 2)x - 2y]] \\ (1, 1)_\Delta = \exp[i[(k_x + 2)x + 2y]] \end{cases}$$



$\Gamma=0$ 处, 四重简并

(2)

$$\begin{aligned} V_1 &= \frac{1}{a^2} \int_0^a \int_0^a [-4U \cos(2\pi x/a) \cos(2\pi y/a)] \exp\left[-i2\pi \frac{1}{a}(x+y)\right] dx dy \\ &= -\frac{U}{a^2} \int_0^a \int_0^a \left(\exp\left[i\frac{2\pi x}{a}\right] + \exp\left[-i\frac{2\pi x}{a}\right] \right) \left(\exp\left[i\frac{2\pi y}{a}\right] + \exp\left[-i\frac{2\pi y}{a}\right] \right) \\ &\quad \exp\left[-i\frac{2\pi}{a}(x+y)\right] dx dy \\ &= -\frac{U}{a^2} \int_0^a \int_0^a (1 + \exp[-i4\pi x/a])(1 + \exp[-i4\pi y/a]) dx dy \\ &= -\frac{U}{a^2} \left(x + \frac{\exp[-i4\pi x/a]}{-i4\pi/a} \right) \Big|_0^a \left(y + \frac{\exp[-i4\pi y/a]}{-i4\pi/a} \right) \Big|_0^a \\ &= -\frac{U}{a^2} \left[a + \frac{1}{-i4\pi/a} (\cos 4\pi - 1) \right] \left[a + \frac{1}{-i4\pi/a} (\cos 4\pi - 1) \right] \\ &= -U \\ 2|V_1| &= 2U \end{aligned}$$

4. 设有一维晶体的电子能带可写成 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} (\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka)$, 其中 a 是晶格常数。

试求:

- (1) 能带的宽度;
- (2) 电子在波矢 k 的状态时的速度;
- (3) 能带底部和顶部电子的有效质量;
- (4) 若晶格常数 $a=2.5\text{\AA}$, 当外加 10^2V/m 和 10^7V/m 电场时, 试分别估计电子自能带底运动到能带顶所需的时间。

(1) 令 $\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar^2}{ma} (\sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka) = 0$, 得 $\sin ka - \frac{1}{2} \sin 2ka = 0$

所以, 在第一布里渊区, 极小值为 $E(0) = 0$, 极大值为 $E(\frac{\pi}{a}) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$, 能带宽度 $\Delta E = E(\frac{\pi}{a}) - E(0) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

(2) 电子的平均速度 $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar}{ma} (\sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka)$

(3)

$$m_{\text{底}}^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)_{\text{底}}} = m (\cos ka - \frac{1}{2} \cos 2ka)^{-1} \Big|_{k=0} = 2m$$

能带底的有效质量

$$m_{\text{顶}}^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)_{\text{顶}}} = m (\cos ka - \frac{1}{2} \cos 2ka)^{-1} \Big|_{k=\pm\frac{\pi}{a}} = -\frac{2}{3}m$$

能带顶的有效质量

(4)

$$\frac{d(\hbar k_h)}{dt} = eE$$

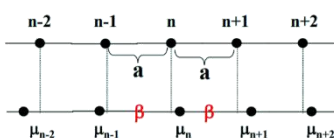
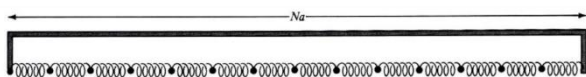
$$dt = \frac{\hbar}{eE} dk_h \Delta t = \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{\hbar}{eE} dk_h = \frac{\hbar}{eE} \frac{\pi}{a}$$

5 考虑一维单原子链的晶格振动, 试推导出:

- (1) 色散关系的表达式;
- (2) 利用色散关系求出模式密度;
- (3) 说明德拜近似下的模式密度和 (2) 中得到的模式密度有何不同。

(1)

只考虑最近邻原子间的相互作用:



第 n 个原子的运动方程:

$$m\ddot{\mu}_n = f_n = -\frac{\partial V}{\partial \mu_n}$$

β : 力常数

其中 μ_n 为以第 n 个格点为中心振动的原子对其平衡位置的偏离。

弹性势能 $V = \frac{1}{4} \sum_{n,n'} (\mu_n - \mu_{n'})^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2}$

$$= \frac{1}{2} \sum_n \beta (\mu_n - \mu_{n'})^2 \quad \beta = \frac{d^2 \phi}{dx^2}$$

$$= \frac{1}{2} \beta [(\mu_n - \mu_{n+1})^2 + (\mu_n - \mu_{n-1})^2]$$

对 μ_n 微分可得 弹性力

$$f_n = -\beta(\mu_n - \mu_{n+1}) - \beta(\mu_n - \mu_{n-1}) = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$$

第n个原子的运动方程: $m\ddot{\mu}_n = \beta(\mu_{n+1} + \mu_{n-1} - 2\mu_n)$

无质量弹簧链方程。解应具有波的形式，并具有晶体的平移不变性，满足布洛赫定理，每个解为由特定波矢q标记的波函数:

$$\mu_n = Ae^{i(\omega t - naq)} \quad \text{—— 格波方程, 波矢 } q = 2\pi/\lambda$$

$$-m\omega^2 Ae^{i(\omega t - naq)} = \beta \left\{ Ae^{i(\omega t - naq) - iaq} + Ae^{i(\omega t - naq) + iaq} - 2Ae^{i(\omega t - naq)} \right\}$$

$$-m\omega^2 = \beta(e^{-iaq} + e^{iaq} - 2) = 2\beta(\cos aq - 1)$$

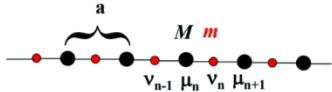
解得 $\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{1}{2} aq \right|$ —— 色散关系
 振动频率与波矢的关系
 一个q对应一个 ω ¹³

(附一维双原子链)

§ 5.2 一维双原子链的振动

考虑由P、Q两种原子等距相间排列的一维双原子链

一、运动方程及其解



只考虑近邻原子间的弹性相互作用

运动方程: $\begin{cases} M\ddot{\mu}_n = \beta(v_n + v_{n-1} - 2\mu_n) \\ m\ddot{v}_n = \beta(\mu_n + \mu_{n+1} - 2v_n) \end{cases}$ (设 $M > m$)

试解: $\begin{cases} \mu_n = Ae^{i(\omega t - naq)} \\ v_n = Be^{i[\omega t - (n+\frac{1}{2})aq]} \end{cases}$

代入方程: $\begin{cases} (2\beta - M\omega^2)A - 2\beta \cos(\frac{1}{2}aq)B = 0 \\ -2\beta \cos(\frac{1}{2}aq)A + (2\beta - m\omega^2)B = 0 \end{cases}$

久期方程: $\begin{vmatrix} 2\beta - M\omega^2 & -2\beta \cos(\frac{1}{2}aq) \\ -2\beta \cos(\frac{1}{2}aq) & 2\beta - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0$

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{\beta}{Mm} \left[(M+m) \pm \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos(aq)} \right]$$

$$= \frac{\beta(M+m)}{Mm} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4Mm}{(M+m)^2} \sin^2(\frac{1}{2}aq)} \right\}$$

将 ω_{\pm} 代入上述方程, 可得A/B值

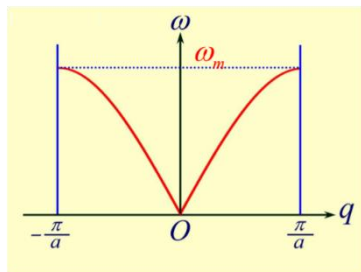
(2)

一维单原子链晶格振动的色散关系:

$$\omega = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \left| \sin \frac{1}{2} aq \right| = \omega_m \left| \sin \frac{1}{2} aq \right|$$

$$\omega_m = \sqrt{\frac{4\beta}{m}}$$

$$\sin^2(\frac{1}{2}aq) = \left(\frac{\omega}{\omega_m} \right)^2$$



$$\left| \frac{d\omega}{dq} \right| = \frac{1}{2} a \omega_m \cos(\frac{1}{2}aq) = \frac{1}{2} a \omega_m \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_m} \right)^2}$$

$$g(\omega) = 2 \cdot \frac{Na}{2\pi} \left| \frac{d\omega}{dq} \right| = \frac{Na}{\pi} \frac{1}{2a\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}$$

$$\therefore g(\omega) = \frac{2N}{\pi} [\omega_m^2 - \omega^2]^{-\frac{1}{2}}$$

$\omega \rightarrow 0$, 长波极限, 态密度常数
 $\omega \rightarrow \omega_m$, $g(\omega) \rightarrow \infty$, 态密度发散
 $\omega > \omega_m$, 态密度为0

(3)

德拜近似下, $\omega = cq$, $d\omega = cdq$

$d\omega$ 区间对应两个同样大小的波矢区间 dq , $2\pi/a$ 区间对应 L/a 个振动模式, 单位波矢区间对应 $L/(2\pi)$ 个模式。

$\omega \sim \omega + d\omega$ 区间内的晶格振动模式数为 $dz = 2dq \cdot L/(2\pi) = dq \cdot L/\pi = d\omega \cdot L/(c\pi)$

模式密度 $g(\omega) = dz/d\omega = L/(c\pi)$

6. 考虑一维晶格情形:

(1) 求一价正负离子等间距排列组成的一维晶格的马德隆常数;

(2) 利用扩散方程 $\partial n / \partial t = D \nabla^2 n$, 证明在给定时刻 t , 从原点出发的某粒子平均扩散距离和 $t^{1/2}$ 成正比。

(1) 1D.

$$\alpha = - \sum_j \left(\pm \frac{1}{P_j} \right)$$

离子间距为 $r_j = P_j R$

对于相邻离子间距为 R 的一维无限长离子链的马德隆常数的计算, 可直接由上式得到。如图所示。

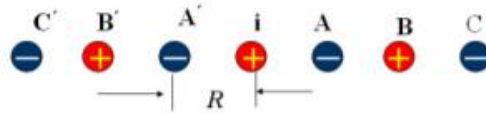


图 一维无限长离子链的马德隆常数计算示意图

选定某一正离子 i 为参考离子, 对于负离子取正号, 正离子取负号。则

$$\alpha = 2 \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right) = 2 \ln 2$$

2D.

Evjen中性组合法(每个大晶胞所含的正负离子数相同)

以二维情况为例: $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ 为 Evjen 晶胞边上和顶点处的贡献

4个正离子

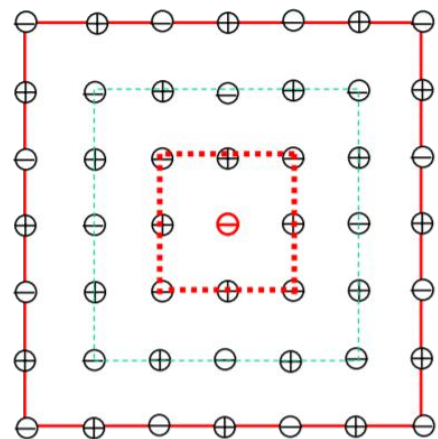
4个负离子

$$\alpha_1 = 4 \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1} - 4 \cdot \left(\frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right) \approx 1.293$$

$$\alpha_2 = 4 \cdot \left(1 \cdot 1 - 4 \cdot \left(1 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \right) - 4 \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \right) + 8 \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{5}} \right) - 4 \cdot \left(\frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2\sqrt{2}} \right) \right) \approx 1.607$$

$$\alpha_3 \approx 1.6105$$

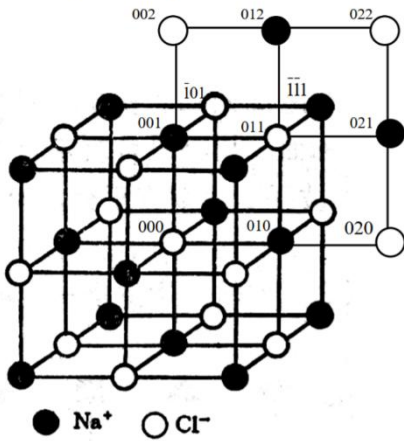
Evjen晶胞内贡献=1



3D.

NaCl结构Madelung常数的计算:

参考二维做法，一层一层计算，逐步扩大，收敛很快。



对于cubic crystal,
fraction:
面1/2, 边1/4, 角1/8

原子坐标	相同个数	距离	对势能的贡献
100	6	1	+6.00
110	12	$\sqrt{2}$	$-\frac{12}{\sqrt{2}} = -8.485$
111	8	$\sqrt{3}$	$\frac{8}{\sqrt{3}} = +4.600$
200	6	$\sqrt{4}$	$-\frac{6}{\sqrt{4}} = -3.000$
210	24	$\sqrt{5}$	$\frac{24}{\sqrt{5}} = +10.730$
211	24	$\sqrt{6}$	$-\frac{24}{\sqrt{6}} = -9.800$
220	12	$\sqrt{8}$	$-\frac{12}{\sqrt{8}} = -4.244$
221	24	$\sqrt{9}$	$\frac{24}{\sqrt{9}} = +8.000$
222	8	$\sqrt{12}$	$-\frac{8}{\sqrt{12}} = -2.310$

(2)

$$\partial n / \partial t = D \nabla^2 n$$

对于沿 x 方向单位截面的一维柱体. 假定 $t=0$ 时, 扩散物完全集中在 $x=0$ 的面上, 数量为 N_i , t 时刻扩散物的分布 $n(x, t)$ 可由加限制条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} n(x, t) dx = N_i, \quad (8.1.11)$$

求解方程(8.1.10)得到, 解的形式为

$$n(x, t) = \frac{N_i}{2 \sqrt{\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 D t}\right). \quad (8.1.12)$$

在有关扩散现象简单的微观图像中, 一般假定原子扩散的每一步都是无规的独立事件. 不考虑它和前一步以及和其他缺陷运动的关联. 原子做布朗运动(Brownian motion), 或无规行走(random walk), 每一步在各个方向有相等的概率. 设在 t 时刻, 在距其出发点 x 处找到该原子, x 的平方平均值可由 $n(x, t)$ 求出,

$$\bar{x}^2 = \frac{1}{N_i} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 n(x, t) dx = 2 D t. \quad (8.1.14)$$

故 $L = \sqrt{2 D t}$, 得证

(但不知道为什么作业题里是对 $0-\infty$ 积分, 而不是 $-\infty+\infty$, 而且书上的 (8.1.14) 式我算出来是 $4 D t$)

此题用到:

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt \quad \Gamma(z) = \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt$$

$$\Gamma(x+1) = x \Gamma(x) \quad \Gamma(n) = (n-1)! \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$