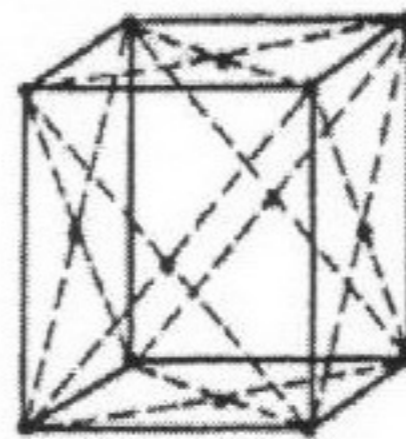


1. (20分, 每小题5分)



(1) 原子位置:  $000, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ ,

最近邻 12, 次近邻 6, 最密排面 (111)

(2) 面心立方点阵的倒易点阵是体心立方点阵, 第一布里渊区为截角八面体 (或说 14 面体)。

(3) 4 个 3 次旋转轴, 3 个 4 次轴, 6 个 2 次轴, 一个反演中心。

(4) 布喇格定律:  $\lambda = 2d \sin \theta$ , 这里  $\theta = 19.235$  度, 第一衍射峰应是 (111) 晶面,  $d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$

$$a = \frac{\sqrt{3}\lambda}{2 \sin \theta} = 4.05 \times 10^{-10} \text{ m}$$

2. (20分, 每小题5分)

(1) 第一项代表吸引势, 第 2 项代表斥力

$$\frac{du(r)}{dr} = \frac{m\alpha}{r^{m+1}} + \frac{n\beta}{r^{n+1}} = 0$$

给出平衡状态时的原子间距  $r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha}\right)^{\frac{1}{n-m}}$

(2) 满足稳定态的条件  $\frac{du}{dr} = 0$ ,  $\frac{d^2u(r)}{d^2r} = -\frac{m(m+1)\alpha}{r_0^{m+2}} + \frac{n(n+1)\beta}{r_0^{n+2}} = \frac{m\alpha}{r_0^{m+2}}(n-m) > 0$

所以  $n > m$

(3)  $U_0 = \frac{N}{2} u(r_0) = -\frac{N\alpha}{2r_0^m} \left(\frac{n-m}{n}\right)$

(4) 体积弹性模量  $K = \left(\frac{d^2U}{d^2V}\right)_{V_0} \cdot V_0 = \left(\frac{dr}{dV}\right)_{V_0}^2 \left(\frac{d^2U}{d^2r}\right)_{V_0} \cdot V_0$