

# 中国科学技术大学

## 2011 年硕士学位研究生入学考试试题

(固体物理)

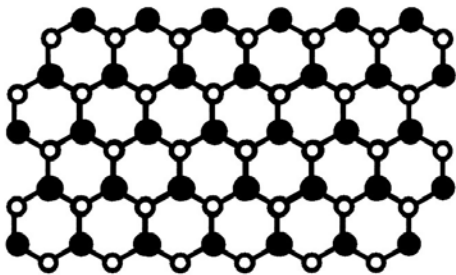
所有试题答案写在答题纸上，答案写在试卷上无效

需使用计算器

不使用计算器

一、(30 分) 向 Cu (价层电子构型为  $3d^{10}4s^1$ ) 面心立方晶体中掺杂 Zn (价层电子构型为  $3d^{10}4s^2$ ) 原子。假设掺杂前后晶体结构和晶格常数都不发生变化。(1) 对于未掺杂的 Cu 多晶样品, 请问 (111)、(100) 以及 (110) 中, 哪些晶面能够在 X 射线衍射中观察到衍射峰? 为什么? 其对应的布拉格角  $\theta$  是多少? (Cu 晶体中最近邻原子间距为  $2.56 \text{ \AA}$ , X 射线波长为  $1.54 \text{ \AA}$ ) (2) 假设 Zn 掺杂 50% 并且无序分布, 请问上述晶面衍射峰哪些能够被观察到? 为什么? (3) 如果 Zn 掺杂 50% 并且有序分布 (Cu 和 Zn 原子分别占据顶点和面心位置), 上述晶面衍射峰哪些能够被观察到? 为什么? (4) 画出低温下晶格热导率随 Zn 掺杂(0 到 100%)变化的定性示意图并做解释。

二、(40 分) 一个二维晶体如下图所示。(1) 假设实心圆和空心圆分别代表 B 原子和 N 原子, 请画出其原胞, 画出其倒易点阵以及第一布里渊区, 写出此晶体的宏观对称元素; (2) 假设原子既能在平面内也能在平面外振动, 一共有多少支格波? 其中多少支声学支? 多少支光学支? 高温下频率为  $\omega$  的格波声子数目与温度 T 是什么关系 ( $k_B T \gg \hbar\omega$ )? (3) 如果实心圆和空心圆都是碳原子, 这就是获得今年诺贝尔物理学奖的材料, 即石墨烯 (graphene), 请写出其宏观对称元素; (4) Graphene 在第一布里渊区边界拐点的能量-波矢色散关系具有如下形式:  $E_{\pm}(\vec{k}) = E_f \pm \hbar v |\vec{k}|$ , 其中  $E_f$  为费米能,  $v$  为正值, 根据电子运动的半经典模型求出电子速度  $v(\vec{k})$  以及电子能态密度  $N(E)$ ; (5) 请定性比较它们与二维自由电子模型得到的电子速度和电子能态密度的区别。



三、（30分）假设Ca单原子链的周期是 $a$ ，原子总数 $N \gg 1$ （见下图）。（1）请根据近自由电子近似下在第一布里渊区中画出其价电子形成的能带图，判断其为金属还是绝缘体并解释；如果无序掺杂10%（原子数比例）的Na，请问掺杂后是金属还是绝缘体？为什么？（2）对Ca单原子链掺杂50%的O（原子数比例）；假设Ca和O间隔排列且最近邻原子间距仍为 $a$ ，请计算此体系的马德隆常数 $\alpha$ ，并由此写出体系的总静电能 $U$ ；（计算可能用到的公式： $\ln(1+x) = x - x^2/2 + x^3/3 \dots$ ）（3）在（2）的假设基础上，请定性画出掺杂前后的晶格振动色散关系（假设振动只能沿原子链方向）。



四、（20分）由离子组成的一维周期性结构，晶格常数为 $a$ ，周期势场是由一系列以离子为中心的方势阱组成，阱深为 $U_0$ ，阱宽为 $a/5$ （其余部分势能为零）。在弱周期场近似（近自由电子近似）下（1）试求前两个禁带的宽度；（2）假定 $U_0 = 5\text{eV}$ ， $a = 0.4\text{nm}$ ，试求前两个禁带宽度的数值。

五、（30分）当导体样品的尺寸较小时，电子可以感受到来自样品边界的散射，这导致电子输运性质的尺度效应。在自由电子近似下考虑一种金属样品，电子密度为 $n$ ，体平均自由程为 $\lambda$ ，样品长度为 $L$ ，截面是边长为 $d$ 的正方形（ $d \ll L$ ）。试在 $d \ll \lambda$ 到 $d \gg \lambda$ 范围内计算和示意画出下列物理量与 $d$ 的关系：（1）样品中电子的平均自由程 $\bar{l}(d)$ ；（2）样品的电阻率 $\rho(d)$ 和样品的电阻 $R(d)$ 。