

# 中国科学技术大学

## 2012 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

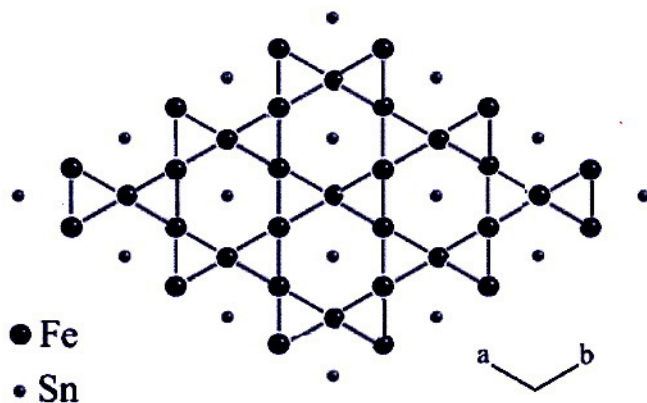
需使用计算器

不使用计算器

一、(20 分) 简单回答或解释下列问题

1. 金属晶格比热和电子比热的差别，以及导致这个差别的物理原因。
2. 准动量守恒及其物理原因。
3. 试以能带论解释金属和绝缘体。
4. 说明并解释金属温度在低温区和室温区随温度的变化规律。

二、(30 分) 一个由 Fe 原子和 Sn 原子排列的二维晶体如下图所示。(1) 请画出其原胞，一个原胞中有多少个 Fe 原子和 Sn 原子？(2) 画出其倒易点阵以及第一布里渊区。(3) 写出此晶体的宏观对称元素；(4) 假设原子既能在平面内振动也能垂直平面振动，请问一共有多少支格波？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 ( $k_B T \gg \hbar \omega$ )？



三、(共 40 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 无序掺杂(0 到 100%)变化的定性示意图并做解释。(5) 采用自由电子模型求出加入多少原子数比例的 Zn 后 (假设无序掺杂), 合金的费米球才会与第一布里渊区边界相接触?

四、(20 分) 某理想晶体电子周期场的势能函数为:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 [b^2 - (x-na)^2], & na-b \leq x \leq na+b \\ 0, & (n-1)a+b \leq x \leq na-b \end{cases}$$

其中  $a=4b$ ,  $\omega$  是常数

- (1) 试画出此势能曲线, 并求其平均值;
- (2) 用近自由电子近似模型, 求出第一和第二禁带的宽度;
- (3) 如果每个原胞中有 4 个价电子, 解释该晶体是金属还是非金属。

五、(40 分) 设面心立方晶体的晶格常数为  $2a$ , 试按照紧束缚近似考虑 s 电子形成的能带, 解答下列问题:

- (1) 给出面心立方结构元素晶体 s 态电子的能带表达式。
- (2) 计算沿  $\Delta$  轴的  $E \sim k$  关系 ( $\Delta$  轴也称  $\Gamma$ -X 轴,  $\Gamma$  点  $[0\ 0\ 0]$ , X 点  $[\pi/a\ 0\ 0]$ )。
- (3) 指出带底和带顶, 并求出带底和带顶处电子的有效质量, 并说明造成两者差别的原因。
- (4) 写出  $\Gamma$  点电子波函数和沿  $\Delta$  轴电子波函数。