

# 中国科学技术大学

## 2011 年硕士学位研究生入学考试试题参考答案 (固体物理)

### 一、评分细则

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。

解：

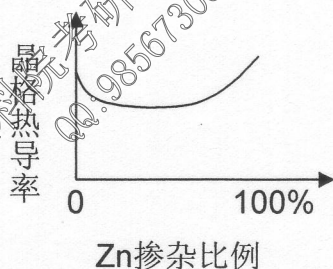
(1) (15 分) 不掺杂的 Cu 晶体是 fcc 结构，晶面指数 (h,k,l) 必须满足 h,k,l 为全奇或全偶时才会显现衍射峰；因此只有 (111) 能够观察到。由

$2d \sin \theta = \lambda$ ，并把  $d = a/\sqrt{3} = 2.56 * \sqrt{2}/\sqrt{3} = 2.09 \text{ \AA}$  和  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$  代入，得到  $\theta = 21.6^\circ$

(2) (5 分) Zn 掺杂 50% 并且无序分布，此时晶体仍为 fcc 结构，因此还是只有 (111) 能够观察到。

(3) (5 分) Zn 掺杂 50% 并且有序分布后，此时晶体变为 sc 结构，因此 (111)、(100) 以及 (110) 都能够观察到。

(4) (5 分)



杂质对声子的散射会减小声子平均自由程，从而降低晶格热导率。

二、(40 分) 一个二维晶体如下图所示。(b) 假设实心圆和空心圆分

考试科目：固体物理

第 1 页 共 5 页