

所有试题答案写在答题纸上，答案写在试卷上无效

2007

1. (20 分，每小题 5 分)

铜、银、铝等很多元素晶体具有面心立方结构，试：

- (1) 写出其晶胞中的原子位置或绘出其晶胞结构，指出其最近邻和次近邻的原子数目和最密排面的米勒指数。
- (2) 指出面心立方点阵的倒易点阵类型第一布里渊区的形状。
- (3) 指出这些晶体可能具有的所有宏观对称元素。
- (4) Al 单晶的 X 射线 ($\lambda=1.54 \times 10^{-10} \text{ m}$) 衍射结果中，第一个衍射峰与 X 射线入射方向的夹角为 38.47° ，试求其晶胞长度。

2. (20 分，每小题 5 分)

已知某晶体中相邻原子之间的相互作用势可以表示为

$$U = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n} \quad \text{其中 } m, n, \alpha, \beta \text{ 都是} > 0 \text{ 的常数。}$$

- (1) 说明右式两项代表的物理意义并求出处于平衡状态时的原子间距 r_0
- (2) 证明此系统可以处于稳定平衡态的条件是 $n > m$
- (3) 只考虑最近邻相互作用，写出由 N 个相同原子组成的该晶体的总相互作用能 U_0 表达式。
- (4) 证明其体积弹性模量 $K = \left| U_0 \right| \frac{mn}{V_0} (U_0, V_0 \text{ 分别是晶体处于热平衡时的能量和体积})$

3. (30 分，每小题 10 分)

N 个质量为 m 间距为 a 相同原子组成的单维原子链，近邻原子间的力常数为 β 。(本题要求写出具体推导过程)

- (1) 试在简谐近似下求出晶格振动频率关系并作图表示。
- (2) 周期性边界条件给出的格波频率和描述在连续介质中传播的波的波矢有何不同？
- (3) 求出其态密度函数的表达式，并作图表示。

4. (30 分，每小题 10 分)

已知紧束缚近似给出的能带结构表达式如下：

$$E(k) = \epsilon_i - J_0 - \sum J(R_S) \exp(-ik \cdot R_S) \quad (\text{求和只对近邻})$$

- (1) 给出体心立方结构元素晶体 s 态电子的能带表达式。
- (2) 求出第一布里渊区 [100] 方向的能带曲线并画图表示，标出数值，指出带宽。
- (3) 求出带底和带顶处电子的有效质量，并说明引入有效质量的物理意义。