

2002年 中国科学院 固体物理

一、(20 分) 某元素晶体具有面心立方结构，其晶胞参数为 a ，

1. 在直角坐标系中写出其相应布拉伐 (Bravais) 格子一组形式较对称的基矢，由此求出其倒格子的基矢，并指出倒格子是什么类型的布拉伐格子。

2. 对该晶体的粉末样品，用波长为 λ 的单色 X 射线照射时，观察到一系列衍射峰。分别对下面两种情况，求散射角最小的二个衍射峰的布拉格角 θ (用 λ 和 a 的公式表示)？

1) 该晶体每个基元只含一个原子

2) 该晶体具有金刚石结构。

3. 什么叫能带论？说明晶体大小的差别并不影响能带的基本情况。

4. 为什么说晶体原胞中电子数目若为奇数，相应的晶体具有金属导电性？

5. 当磁场方向沿 $[1, 1, 1]$ 方向时，银的 de Hass-Van-van Alphen 效应中磁化率振荡出现两个周期，其原因是什么？

<http://shop59350285.taobao.com> QQ985673089

二、(20 分) 对惰性元素晶体，原子间的相互作用常采用勒纳—琼斯势

$$u(r) = 3\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$