

专业: 材料物理与化学考试科目: 固体物理

一、铜具有面心立方结构, 在室温下的密度为 $8.75\text{g/cm}^3$ , 它的原子量是63.55。试求铜的晶胞 (惯用单胞) 的边长 $a$ 以及最短的原子间距 $r_0$ 。 (15分)

二、一束波长为 $1.10\text{\AA}$ 的X-射线投射到面间距为 $2.50\text{\AA}$ 晶面族上。试问当入射角为多大时, 能观测到级次最高的衍射峰? (15分)

三、已知在面心立方结构惯用单胞 (晶胞) 所选用的直角坐标系中, 两个晶面族的面指数分别为 (100) 和 (001), 试求在由下列初基原胞基矢。

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})$$

构成的坐标系中这两个晶面族的面指数, 其中 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ 分别是直角坐标系XYZ的三根轴上的单位矢量。 (20分)

四、一个晶胞中刚性原子球占据的体积与晶胞体积的比值称为结构的致密度。用刚性原子球堆积模型 (设晶体是由刚性原子球堆积而成), 试证明以下两种结构的致密度分别为:

$$1. \text{ 简立方: } \frac{\pi}{6} \qquad 2. \text{ 体心立方: } \frac{\sqrt{3}}{6} \pi \qquad (20\text{分})$$

五、设一维原子链中原子间的相互作用能可表示为

$$u(r) = u_0 \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

其中 $r$ 为原子间距,  $u_0$ 和 $\sigma$ 为常数。试求平衡时的原子间距 $r_0$ 和相互作用能 $u(r_0)$

(20分)

六、考虑限制在边长为L的正方形中的二维自由电子费米气体，电子能量为

$$E(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)$$

试求能量在 $E \rightarrow E + dE$ 之间的电子状态数。 (15分)

七、考虑由N个原子组成的单原子晶体的晶格振动。已知它的一个频率为 $\omega_i$ 的振动模式在温度T下的平均能量为

$$\bar{E}_i = \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega_i/k_B T} - 1} \right) \hbar\omega_i$$

其中 $\hbar$ 是普朗克常数， $k_B$ 是玻耳兹曼常数。试求：

1. 这种单原子晶体的晶格有多少种振动模式？
2. 晶格振动的总能量是多少？
3. 若用爱因斯坦模型，晶格振动的总能量又是多少？ (15分)

八、已知一维晶格的中电子的能带可表示为

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left( \frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$$

式中 $a$ 是晶格常数， $m$ 是电子的质理。

1. 求出能带底（能量最小处）和能带顶（能量最大处）的能量以及能带的宽度；
2. 求出能带底电子的有效质量。 (20分)

九、用能带概念解释固体的下列光学性质：

1. 所有的金属对一切波长的光都是不透明的；
2. 半导体对远红外光透明，但对可见光不透明；
3. 大多数绝缘体对可见光是透明的。 (15分)