所有试题答案写在答题纸上，答案写在试卷上无效

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（$\lambda=1.54\times10^{-10}$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

$$u=-\frac{\alpha}{r^m}+\frac{\beta}{r^n}$$ 其中 m, n, α, β 都是>0 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 $K=|U_0|\frac{mn}{V_0}$(U_0，V_0 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 相同原子组成的一维原子链，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的色散关系并作图表示。

(2) 周期性边界条件给出的格波波矢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：

$E(\mathrm{k})=\varepsilon_i-J_0-\sum J(R_S)\exp(-ik\cdot R_S)$ （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。

5.（30 分，每小题 10 分）

向 Cu 金属中加 Zn(二价)原子，一些 Cu 原子被 Zn 原子取代。

(1) 采用自由电子模型求出加入多少原子比例的 Zn 后，合金的费米球才会与第一布里渊区边界相接触？

(2) 采用自由电子模型作出费米面后，按近自由电子近似要求应对费米面图形做出那些修正？

(3) 简要说明如何从原子的价电子数目来判断元素晶体的导电性能？

6.（20 分，每小题 10 分）

(1) 根据自由电子模型计算钠的德哈斯-范阿尔芬效应的振荡周期(钠是体心立方结构，晶格常数为 a=5.22Å)。

(2) 对于 B=1T，在实空间中电子运动轨迹面积有多大？

附：

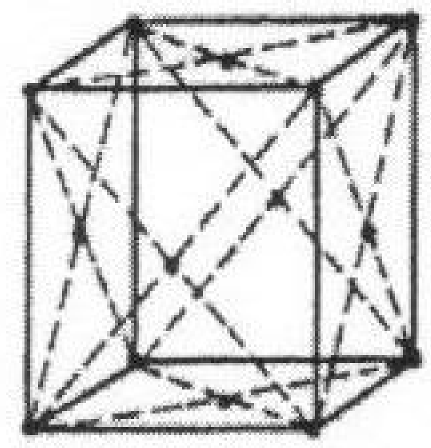
基本物理常数

普朗克常数　$\hbar = 1.0546\times10^{-34}$ J·s

电子电荷　$e=1.602\times10^{-19}$C

电子质量　$m_e=9.11\times10^{-31}$kg

1.（20 分，每小题 5 分）



（1）原子位置：$000,\frac{1}{2}\frac{1}{2}0,\frac{1}{2}0\frac{1}{2},0\frac{1}{2}\frac{1}{2},$

最近邻 12，次近邻 6，最密排面（111）

（2）面心立方点阵的倒易点阵是体心立方点阵，第一布里渊区为截角八面体（或说 14 面体）。

（3）4 个 3 次旋转轴，3 个 4 次轴，6 个 2 次轴，一个反演中心。

（4）布喇格定律：$\lambda = 2d\sin\theta$， 这里 θ =19.235 度，第一衍射峰应是（111）晶面，$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$

$$a = \frac{\sqrt{3}\lambda}{2\sin\theta} = 4.05\times10^{-10}\mathrm{m}$$

2.（20 分，每小题 5 分）

（1）第一项代表吸引势，第 2 项代表斥力势。 $\frac{\mathrm{d}u(r)}{\mathrm{d}r} = \frac{m\alpha}{r^{m+1}} + \frac{n\beta}{r^{n+1}} = 0$

给出平衡状态时的原子间距 $r_o = \left(\frac{n\beta}{m\alpha}\right)^{\frac{1}{n-m}}$

（2）满足稳定态的条件 $\frac{du}{dr} = 0$， $\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}^2r} = -\frac{m(m+1)\alpha}{r_0^{\,m+2}} + \frac{n(n+1)\beta}{r_0^{\,n+2}} = \frac{m\alpha}{r_0^{\,m+2}}(n-m) > 0$

所以 n>m。

（3） $U_0 = \frac{N}{2}u(r_0) = -\frac{N\alpha}{2r_0^{\,m}}\left(\frac{n-m}{n}\right)$

（4）体积弹性模量 $K = \left(\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}^2V}\right)_{V_0}\cdot V_0 = \left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}V}\right)^2_{V_0}\left(\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}^2r}\right)_{V_0}\cdot V_0$

晶体体积$V_0 = N \cdot Ar_0^3$，A 是和晶体结构有关的系数。 $\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}V}\right)_{V_0} = \frac{1}{3NAr_0^2}$

所以$K = \left(\frac{1}{3NAr_0^2}\right)^2 \left[-\frac{N}{2}\frac{m\alpha(m-n)}{r_0^{m+2}}\right] \cdot V_0 = \frac{mn}{9V_0}|U_0|$

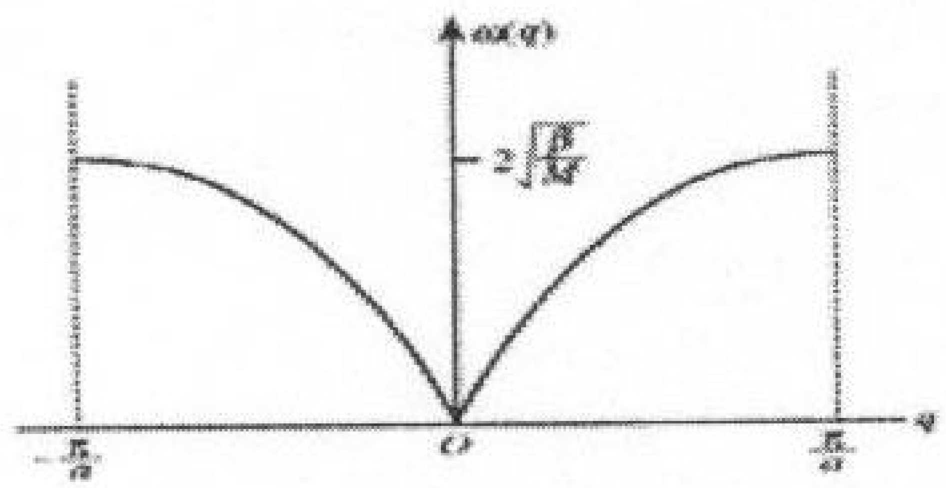
3.（30 分，每小题 10 分）

（1）设第 n 个原子对平衡位置的偏离为 u_n，则简谐近似下其原子运动方程可以写作：

$$m\frac{\mathrm{d}^2 u_n}{\mathrm{d}^2 t} = \beta(u_{n+1} + u_{n-1} - u_n)$$

将其通解 $u_{nq} = A\mathrm{e}^{i(\omega t - naq)}$

代入方程可得出色散关系：$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right|$

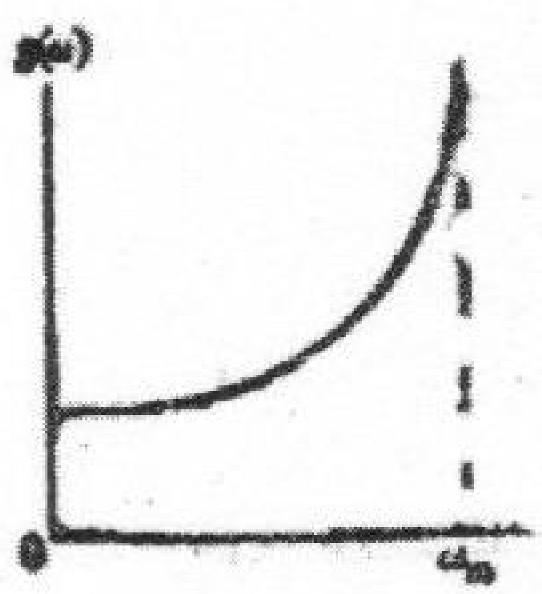


（2）周期性边界条件：$u(na) = u(na + Na)$ 要求 $e^{iqNa} = 1$，即 $q = \frac{l}{N}\frac{2\pi}{a}$ l 取整数。

所以 q 的取值是量子化的，且只能在第一布里渊区内取值，这与连续介质是不同的，后者取值是连续的。

（3）由于一维情况下，q 空间的态密度为$\frac{L}{2\pi}$，考虑到中心反演对称性，其态密度函数

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi}\frac{1}{\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}q}} = \frac{2N}{\pi}(\omega_m^2 - \omega^2)^{-\frac{1}{2}} \qquad \text{其中 } \omega_m = \sqrt{\frac{4\beta}{m}}$$



4.（30 分，每小题 10 分）

（1）体心立方原点原子的 8 个最近邻是：

$$\frac{a}{2}\frac{a}{2}\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\frac{-a}{2}\frac{a}{2}, \frac{-a}{2}\frac{a}{2}\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\frac{a}{2}\frac{-a}{2}, \frac{-a}{2}\frac{-a}{2}\frac{-a}{2}, \frac{a}{2}\frac{-a}{2}\frac{-a}{2}, \frac{-a}{2}\frac{-a}{2}\frac{a}{2}, \frac{-a}{2}\frac{a}{2}\frac{-a}{2},$$

代入公式整理后可以给出 s 态电子的能带表达式：

$$E(k)=\varepsilon_j-J_0-8J\cos\frac{k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}\cos\frac{k_za}{2}$$

（2）$[100]$方向$k_x=k_y=0$，因而其能带表达式为：

$$E(k)=\varepsilon_j-J_0-8J\cos\frac{k_xa}{2}$$

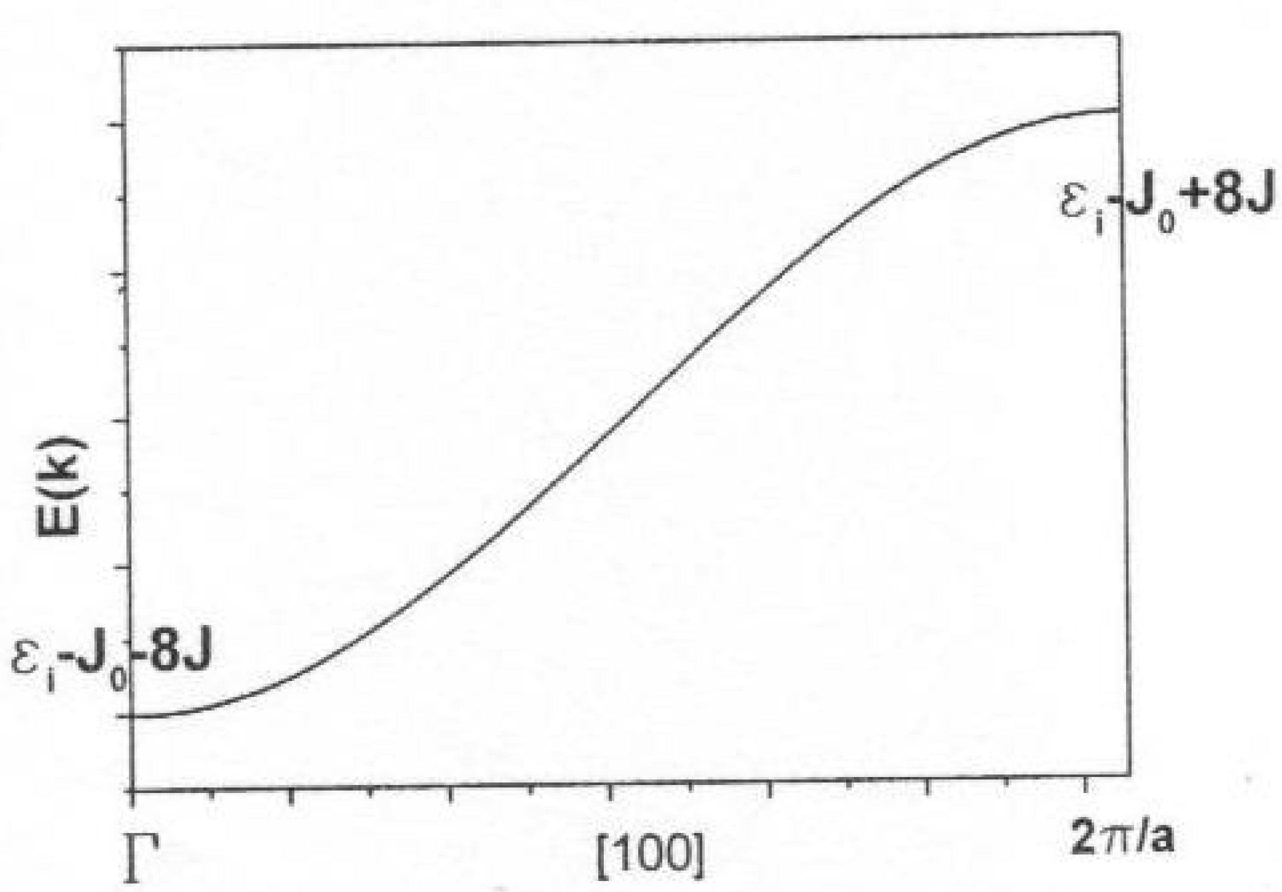
带宽为 16J.

（3） 根据定义 $m^*=\dfrac{\hbar^2}{\dfrac{\partial^2E(k)}{\partial^2k}}$ 把上式代入有：$m^*=\dfrac{\hbar^2}{2a^2J\cos\dfrac{k_xa}{2}}$

带顶 $k_x=\dfrac{2\pi}{a}$ 处 $m^*=-\dfrac{\hbar^2}{2a^2J}$

带底 $k_x=0$ 处，$m^*=\dfrac{\hbar^2}{2a^2J}$

晶体中的电子与自由电子不同，它在运动时不但受外场作用，还会受到晶体中原子的周期势场以及其它电子平均势场的作用，为概括周期势场和平均势场的作用，突出反映电子运动和外场的关系而引入的一个特殊质量来代替电子的真实质量，称作有效质量。



5.（30 分，每小题 10 分）

（1）Cu 的倒易点阵是体心立方，假定其正点阵常数为 a ，则倒易点阵常数为$\dfrac{2\pi}{a}$，$[111]$方向的边界距离为 $k_{min}=\dfrac{2\pi}{a}\sqrt{\left(\dfrac{1}{2}\right)^2+\left(\dfrac{1}{2}\right)^2+\left(\dfrac{1}{2}\right)^2}=\dfrac{\sqrt{3}\pi}{a}$，假定 z 是原子的平均电子数，有

$k=(3\pi^2\dfrac{4z}{a^3})^{\frac{1}{3}}=k_{min}$ 给出 z＝1.36。即当 Zn 含量达到 36％时，费米球与布里渊区边界相切。

（2）电子的能量只在接近布里渊边界处偏离自由电子能量，等能面形成向外的凸起；和边界接触处等能面与布里渊区边界垂直；周期势场会使费米面上的锐角圆滑化。

（3）每个原胞中价电子数是奇数的物质，必定是导体。
是偶数的物质一般是绝缘体或半导体，但少数价带和导带存在交迭的情况下，也可能是导体或半金属材料。

6.（20 分，每小题 10 分）

（1）

金属钠是体心立方结构，每个体心立方晶胞中含有两个电子，因此电子浓度为

$$n=\frac{N}{V}=\frac{2}{a^3}$$

费米波矢为：$k_F=(3n\pi^2)^{\frac{1}{3}}=\frac{(6\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{a}=\frac{(6\times3.14\times3.14)^{\frac{1}{3}}}{5.22\times10^{-10}}=7.46\times10^9(m^{-1})$

发生德哈斯-范阿尔芬振荡，电子在 k 空间运动轨迹为极值轨道，轨道面积就是金属钠费米球的最大横截面积。既：$S_F=\pi k_F^2$

德哈斯-范阿尔芬效应的振荡周期为：

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right)=\frac{2\pi e}{\hbar S_F}=\frac{2e}{\hbar k_F^2}=\frac{2\times1.6\times10^{-19}}{1.05\times10^{-34}\times(7.46\times10^9)^2}$$

$$=5.48\times10^{-5}\left(\frac{m^2}{V\cdot s}\right)=5.48\times10^{-5}(T)$$

（2）

由磁场作用下电子运动的准经典方程 $\hbar\frac{d\vec{k}}{dt}=-e\left(\vec{v}\times\vec{B}\right)=-e\left(\frac{d\vec{r}}{dt}\times\vec{B}\right)$

两边对时间 t 积分得：$\hbar\vec{k}=-e\vec{r}\times\vec{B}$

在垂直于磁场 B 的平面内，有关系为

$$\Delta\vec{r}=\left(\frac{\hbar}{eB}\right)\Delta\vec{k}$$

所以电子在实空间运动轨迹的面积 A 和 k 空间运动轨迹的面积的关系为：

$$A=\left(\frac{\hbar}{eB}\right)^2\cdot S_F$$

由电子在 k 空间运动轨迹的面积 $s_F=\pi k_F^2$ 既有：

$$A=\left(\frac{\hbar}{eB}\right)^2\cdot S_F=\left(\frac{\hbar}{eB}\right)^2\cdot\pi\cdot k_F^2=\left(\frac{1.05\times10^{-34}}{1.6\times10^{-19}\times1}\right)^2\times3.14\times\left(7.46\times10^9\right)^2$$

$$=7.5\times10^{-11}(m^2)$$