掌心博阅电子书重点名校考研专业课精品资料系列

【复试】2024年暨南大学070201理论物理《加试:固体物理》考研复试核心80题(填空+综合题)

主编：掌心博阅电子书

青岛掌心博阅电子书 出品

特别说明

本书严格按照该科目考研复试笔试最新题型、试题数量和复试考试难度出题，结合考研历年复试经验，整理编写了五套复试仿真模拟试题并给出了答案解析。涵盖了这一复试科目常考试题及重点试题，针对性强，是复试报考本校笔试复习的首选资料。

版权声明

青岛掌心博阅电子书依法对本书享有专有著作权，同时我们尊重知识产权，对本电子书部分内容参考和引用的市面上已出版或发行图书及来自互联网等资料的文字、图片、表格数据等资料，均要求注明作者和来源。但由于各种原因，如资料引用时未能联系上作者或者无法确认内容来源等，因而有部分未注明作者或来源，在此对原作者或权利人表示感谢。若使用过程中对本书有任何异议请直接联系我们，我们会在第一时间与您沟通处理。

因编撰此电子书属于首次，加之作者水平和时间所限，书中错漏之处在所难免，恳切希望广大考生读者批评指正。

特别说明

说明：本书按照复试要求、大纲真题、指定参考书等公开信息潜心整理编写，由学长严格审核校对，仅供考研备考使用，与目标学校及研究生院官方无关，如有侵权请联系我们立即处理。

一、填空题

1. **基本对称操作包括_____，_____，_____三种操作。**

【答案】平移；旋转；反演

2. **固体能带论的三个基本假设是：_____、_____、_____。**

【答案】绝热近似；单电子近似；周期场近似

3. **电子在三维周期性晶格中波函数方程的解具有_____形式，式中_____在晶格平移下保持不变。**

【答案】$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{\vec{k}}(\vec{r})$；$u_{\vec{k}}(\vec{r})$

4. **在晶体中，各原子都围绕其平衡位置做简谐振动，具有相同的位相和频率，是一种最简单的振动称为_____。**

【答案】简正振动

5. **费米能量与_____和_____因素有关。**

【答案】电子密度；温度

6. **原胞是_____的晶格重复单元。对于布拉伐格子，原胞只包含_____个原子。**

【答案】最小；1

7. **电子占据了一个能带中的所有的状态，称该能带为_____；没有任何电子占据的能带，称为_____；导带以下的第一满带，或者最上面的一个满带称为_____；最下面的一个空带称为_____；两个能带之间，不允许存在的能级宽度，称为_____。**

【答案】满带；空带；价带；导带；带隙

8. **按结构划分，晶体可分为_____大晶系，共_____布喇菲格子。**

【答案】7；14

9. **晶体中的电子基本上围绕原子核运动，主要受到该原子场的作用，其他原子场的作用可当作_____处理。这是晶体中描述电子状态的_____模型。**

【答案】微扰；紧束缚

10. **固体可分为_____，_____，_____。**

【答案】晶体；非晶体；准晶体

11．**如果一些能量区域中，波动方程不存在具有布洛赫函数形式的解，这些能量区域称为_____；能带的表示有_____、_____、_____三种图式。**

【答案】禁带（带隙）；扩展能区图式法；简约布里渊区图式法；周期性能区图式法

12．**两种不同金属接触后，费米能级高的带_____电，对导电有贡献的是_____的电子。**

【答案】正；费米面附近

13．**固体物理学原胞原子都在_____，而结晶学原胞原子可以在顶点也可以在_____即存在于_____。**

【答案】顶点；面心、体心；

14．**包含一个 n 重转轴和 n 个垂直的二重轴的点群叫_____。**

【答案】双面群

15．**在自由电子模型中，由于周期势场的微扰，能量函数将在 K=_____处断开，能量的突变为_____。**

【答案】K=$\frac{\pi}{a}n$；$2|V_n|$

二、综合题

16．**简述 Bloch 定理，解释简约波矢 k 的物理意义，并阐述其取值原则。**

【答案】在晶体周期性势场中运动的电子的波函数是按晶格周期调幅的平面波,即电子的波函数具有如下形式

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\mu_k(\vec{r})$$

$$\mu_k(\vec{r}) = \mu_k(\vec{r}+\vec{R_n})$$

其中 k 为电子的波矢,Rn 为格矢，上述理论称为布洛赫定理。

平移算符和能量算符是对易算符，具有相同的本征态，为了使平移算符在波矢 k 的某个范围内，一个本征值对应于一个波函数，我们把波矢限制在$\left(-\frac{k}{2},\frac{k}{2}\right)$范围内，这一区域称为简约布里渊区。在此范围内的波矢，我们称为简约波矢。

17．**$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$为简单正交格子的基矢，试证明晶面族（hkl）的晶面间距为 $d_{hkl}=[(h/a)^2+(k/b)^2+(l/c)^2]^{-1/2}$**

【答案】$\vec{a}=a\vec{i},\vec{b}=b\vec{j},\vec{c}=c\vec{k},\ \Gamma=\vec{a}\bullet(\vec{b}\times\vec{c})=abc$

由 $p_{19}(2.2.7)$ 知

$$\vec{a^*}=2\pi(\vec{b}\times\vec{c})/\Gamma$$

$$\vec{b^*}=2\pi(\vec{c}\times\vec{a})/\Gamma$$

$$\vec{c^*}=2\pi(\vec{a}\times\vec{b})/\Gamma$$

可得：

$$\vec{a^*}=\frac{2\pi}{a}\vec{i}$$

$$\vec{b^*}=\frac{2\pi}{b}\vec{j}$$

$$\vec{c^*}=\frac{2\pi}{c}\vec{k}$$

$$\therefore \vec{k_h}=h\vec{a^*}+k\vec{b^*}+l\vec{c^*}=\frac{2\pi}{a}h\vec{i}+\frac{2\pi}{b}k\vec{j}+\frac{2\pi}{c}l\vec{k}$$

再由 p_{22} 中 $\vec{k_h}$ 和 d_{hkl} 的关系：$\left|\vec{k_h}\right|=2\pi/d_{hkl}$ 可得：

$$d_{hkl}=\frac{2\pi}{\left|\vec{k_h}\right|}=\frac{2\pi}{\sqrt{(\frac{h}{a})^2+(\frac{k}{b})^2+(\frac{l}{c})^2}}=\left[(\frac{h}{a})^2+(\frac{k}{b})^2+(\frac{l}{c})^2\right]$$ 得证。

18．**原子间的排斥作用取决于什么原因?**

【答案】两部分原因：带正电荷的原子核之间的库仑排斥力；原子或正负离子的闭合电子壳层相互交叠时，由泡利不相容原理而产生的排斥力。

19．**He^3 是费米子，液体 He^3 在绝对零度附近的密度为 0.081g / cm³。计算它的费米能 E_F 和费米温度 T_F。**

【答案】He^3 的数密度：

$$n=\frac{N}{V}=\frac{N}{M}\cdot\frac{M}{V}=\rho\cdot\frac{N}{M}=\frac{\rho}{m}$$

其中 m 是单个 He^3 粒子的质量。

$$k_F=\left(3\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}}=\left(\frac{3\pi^2\rho}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$$

可得：

$$E_F=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2\rho}{m}\right)^{\frac{2}{3}}$$

代入数据，可以算得：$E_F=6.8577\times10^{-23}\text{J}=4.28\times10^{-4}\text{eV}.$

则：$T_F=\frac{E_F}{k}=4.97\text{K}.$

20．**导出一维和二维自由电子气的能态密度。**

【答案】一维情形

由电子的 Schrödinger 方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}=E\varphi$$

得自由电子波函数得 $\mathrm{d}z=2\cdot\frac{L}{2\pi}\mathrm{d}k=\frac{L}{\pi}\mathrm{d}k=\frac{L}{\pi}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{2\sqrt{\mathrm{E}}}$

且有：$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

由周期性边界条件：$\varphi(x+L)=\varphi(x)$ 得：

$k=\frac{2\pi}{L}n$

在 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$ 到 $k+\mathrm{d}k$ 区间：

$$\mathrm{d}Z=2\cdot\frac{L}{2\pi}\mathrm{d}k=\frac{L}{\pi}dk=\frac{L}{\pi}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{dE}{2\sqrt{E}}$$

那么：$\mathrm{d}Z=Lg_1(E)\mathrm{d}E$，其中：$g_1(E)=\frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar}E^{-\frac{1}{2}}$

二维情形

同上，由电子的 Schrödinger 方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi=E\varphi$$

得自由电子波函数 $\varphi(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{S}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$，$S=L^2$

且：$E(\mathbf{k})=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2)$

由周期性边界条件：

$$\begin{cases}\varphi(x+L,y)=\varphi(x,y)\\ \varphi(x,y+L)=\varphi(x,y)\end{cases}$$

得：$k_x=\frac{2\pi}{\mathrm{L}}n_x$，$k_y=\frac{2\pi}{\mathrm{L}}n_y$

在 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$ 到 $k+\mathrm{d}k$ 区间：

$$\mathrm{d}Z=2\cdot\frac{S}{(2\pi)^2}\mathrm{d}\mathbf{k}=\frac{L^2}{2\pi^2}\cdot2\pi kdk=\frac{mL^2}{\pi\hbar^2}dE$$

那么：$\mathrm{d}Z=Sg_2(E)\mathrm{d}E$

其中：$g_2(E)=\frac{m}{\pi\hbar}$

21．**利用紧束缚方法处理体心立方晶体中 S 态电子的能带，求出：**

(1)S 态电子的能带 $E(k)$

(2)求出能带顶和能带底处的电子的有效质量。

【答案】(1)根据紧束缚模型，S 带的能量：

$E_s(k)=\varepsilon_s-A-J_s\sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}$ R_n 为最近邻格点

对体心立方，最近邻的原子有 8 个，即 $\left(\pm\frac{a}{2},\pm\frac{a}{2},\pm\frac{a}{2}\right)$

代入上式，有：

$$E_s(k)=\varepsilon_s-A-J_s[\ e^{i\left(\frac{k_s}{2}a+\frac{k_y}{2}a+\frac{k_z}{2}a\right)}+e^{-i\left(\frac{k_x}{2}a+\frac{k_y}{2}a+\frac{k_z}{2}a\right)}+e^{i\left(-\frac{k_x}{2}a+\frac{k_y}{2}a+\frac{k_z}{2}a\right)}+$$

$$e^{-i\left(-\frac{k_x}{2}a+\frac{k_y}{2}a+\frac{k_z}{2}a\right)}+e^{i\left(-\frac{k_x}{2}a-\frac{k_y}{2}a+\frac{k_z}{2}a\right)}+e^{-i\left(-\frac{k_x}{2}a-\frac{k_y}{2}a+\frac{k_z}{2}a\right)}+e^{i\left(-\frac{k_x}{2}a+\frac{k_y}{2}a-\frac{k_z}{2}a\right)}+e^{-i\left(-\frac{k_x}{2}a+\frac{k_y}{2}a-\frac{k_z}{2}a\right)}\ ]$$

$$=\varepsilon_s-A-2J_s\left[\cos\frac{1}{2}\left(k_xa+k_ya+k_za\right)+\cos\frac{1}{2}\left(-k_xa+k_ya+k_za\right)\right.$$

$$\left.+\cos\frac{1}{2}\left(-k_xa-k_ya+k_za\right)+\cos\frac{1}{2}\left(-k_xa+k_ya-k_za\right)\ \right]$$

$$=\varepsilon_s-A-2J_s\left[2\cos\frac{1}{2}\left(k_ya+k_za\right)\cdot\cos\frac{1}{2}k_xa+2\cos\frac{1}{2}k_xa\cos\frac{1}{2}\left(k_ya+k_za\right)\right]$$

$$=\varepsilon_s-A-8J_S\cos\left(\frac{1}{2}k_xa\right)\cos\left(\frac{1}{2}k_ya\right)\cos\left(\frac{1}{2}k_za\right)$$

(2)根据$E_s(k)=\varepsilon_s-A-8J_S\cos\left(\frac{1}{2}k_xa\right)\cos\left(\frac{1}{2}k_ya\right)\cos\left(\frac{1}{2}k_za\right)$

在$k_x=k_y=k_z=0$即$\Gamma(0,0,0)$处，$E_s(k)$最小

为能带底$E_s^{\min}=\varepsilon_s-A-8J_S$

在$H\left(\frac{2\pi}{a},0,0\right)$处，$E_s(k)$最大

为能带顶$E_s^{\max}=\varepsilon_s-A+8J_S$

$$\frac{\partial E(k)}{\partial k_x}=4J_sa\sin\left(\frac{k_xa}{2}\right)\cos\left(\frac{k_ya}{2}\right)\cos\left(\frac{k_za}{2}\right)$$

$$\frac{\partial^2E(k)}{\partial k_x^2}=2J_sa^2\cos\left(\frac{k_xa}{2}\right)\cos\left(\frac{k_ya}{2}\right)\cos\left(\frac{k_za}{2}\right)$$

$$\frac{\partial^2E(k)}{\partial k_x\partial k_y}=-4J_sa^2\sin\left(\frac{k_xa}{2}\right)\sin\left(\frac{k_ya}{2}\right)\cos\left(\frac{k_za}{2}\right)$$

在带底$\Gamma(0,0,0)$处，有

$$m_{xx}^*=\frac{\hbar^2}{\partial^2E/\partial k_x^2}=\frac{\hbar^2}{2J_sa^2}$$

$$m_{xy}^*=\frac{\hbar^2}{\partial^2E/\partial k_x\partial k_y}=\infty$$

$$m_{yy}^*=m_{zz}^*=m_{xx}^*=\frac{\hbar^2}{2J_sa^2}$$

$$m_{yz}^*=m_{xz}^*=\infty$$

在带顶$H\left(\frac{2\pi}{a},0,0\right)$处，有

$$m_{xx}^*=\frac{\hbar^2}{\partial^2E/\partial k_x^2}=-\frac{\hbar^2}{2J_sa^2}$$

$$m_{xy}^*=\frac{\hbar^2}{\partial^2E/\partial k_x\partial k_y}=\infty$$

$$m_{yy}^*=m_{zz}^*=m_{xx}^*=-\frac{\hbar^2}{2J_sa^2}$$

$m_{yz}^{*}=m_{xz}^{*}=\infty$

22．**在一维复式格子中，如果** $m=5\times1.67\times10^{-27}kg$，$\frac{M}{m}=4$，$\beta=15N/m$，**计算：**

(1)光学波频率的最大值 $\omega_{\max}^{o}$ 和最小值 $\omega_{\min}^{o}$，声学波频率的最大值 $\omega_{\max}^{A}$；

(2)相应声子的能量 $E_{\max}^{o}$、$E_{\min}^{o}$ 和 $E_{\max}^{A}$；

(3)如果用电磁波激发光学波，要激发 $\omega_{\max}^{o}$ 的声子所用的电磁波波长在什么波段？

【答案】(1)声学波的最大频率：

$\omega_{\max}^{A}=\sqrt{\frac{2\beta}{M}}$，$\omega_{\max}^{A}=3\times10^{14}\ rad/s$

光学波的最大频率：$\omega_{\max}^{O}=\sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}$，$\mu=\frac{mM}{m+M}=0.2M$

$\omega_{\max}^{O}=\sqrt{5}\sqrt{\frac{2\beta}{M}}=6.7\times10^{14}\ rad/s$

光学波的最小频率：$\omega_{\min}^{O}=\sqrt{\frac{2\beta}{m}}=6\times10^{14}\ rad/s$

(2)相应声子的能量

$\omega_{\max}^{A}=\sqrt{\frac{2\beta}{M}}$，$E_{\max}^{A}=\hbar\omega_{\max}^{A}$，$E_{\max}^{A}=0.198eV$

$\omega_{\max}^{O}=\sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}$，$E_{\max}^{O}=\hbar\omega_{\max}^{O}$，$E_{\max}^{O}=0.442eV$

$\omega_{\min}^{O}=\sqrt{\frac{2\beta}{m}}$，$E_{\min}^{O}=\hbar\omega_{\min}^{O}$，$E_{\min}^{O}=0.396eV$

(3)因为 $E_{\max}^{O}=0.442eV$，对应电磁波的波长为 $\lambda=2.8\mu m$

要激发 $\omega_{\max}^{O}$ 的声子所用的电磁波波长在近红外线波段

23．**试求金刚石型结构的几何结构因子，设原子散射因子为** f **。**

【答案】几何结构因子

$F(\vec{k})=\sum_j f_j e^{i\vec{k}\bullet\vec{r}_j}$ 其中 $\vec{r}_j=u_j\vec{a}+v_j\vec{b}+w_j\vec{c}$

$\vec{K}=\vec{k}-\vec{k}_0=\vec{K}_{h'k'l'}=m\vec{K}_{hkl}=m(h\vec{a^*}+k\vec{b^*}+l\vec{c^*})$

$\vec{a^*}=2\pi(\vec{b}\times\vec{c})/\Gamma,\vec{b^*}=2\pi(\vec{c}\times\vec{a})/\Gamma,\vec{c^*}=2\pi(\vec{a}\times\vec{b})/\Gamma,$

$\Gamma=\vec{a}\bullet(\vec{b}\times\vec{c})$ 为晶胞的体积。

$\vec{r_j}=u_j\vec{a}+v_j\vec{b}+w_j\vec{c}$。

金刚石型结构的晶胞内八个原子的位矢为（000），（1/21/21/2），（1/201/2），（01/21/2），(1/41/41/4)，（3/43/41/4），（3/41/43/4），（1/43/43/4）且八个原子为同种原子，

∴ 金刚石型结构的几何结构因子为：

$$F(\vec{K}) = f + fe^{i\pi m(h+k)} + fe^{i\pi m(h+l)} + fe^{i\pi m(l+k)} + fe^{i\pi m(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l)}$$
$$+ fe^{i\pi m(\frac{3}{2}h+\frac{3}{2}k+\frac{1}{2}l)} + fe^{i\pi m(\frac{3}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{3}{2}l)} + fe^{i\pi m(\frac{1}{2}h+\frac{3}{2}k+\frac{3}{2}l)}$$

24．**在室温下金属铍的霍尔系数为 $2.44\times10^{-10}\mathrm{m^3\cdot C^{-1}}$，求铍中空穴密度。**

【答案】由霍尔系数定义 $R_H = \frac{1}{pe}$ 得：

$$p = \frac{1}{e\cdot R_H} = 2.56\times10^{28}\mathrm{m^{-3}}$$

25．**金属钾在低温下的摩尔电子比热的实验值为：$c_e = 2.08T\mathrm{mJ/mol\cdot K}$，试用自由电子气模型求它的费米能 E_F 及状态密度 $g(E_F)$。**

【答案】考虑费米球模型，在费米面以内的粒子吸收能量跃出费米面的数目期望是：

$$\overline{N} = c\int_{E_F-\frac{3}{2}kT}^{\infty} E^{1/2}\mathrm{d}E = \frac{9}{4}N\frac{kT}{E_F}$$

这些粒子共吸收能量：

$$\overline{E} = \frac{\overline{N}\cdot\frac{3}{2}kT}{N} = \frac{27}{4}\cdot\frac{k_B^2T^2}{E_F}$$

则相应的热容量为：

$$C_{ve} = \frac{\partial\overline{E}}{\partial T} = \frac{27}{4}\cdot\frac{k_B^2T}{E_F} = \lambda T$$

其中：$\lambda = \frac{27}{4}\cdot\frac{k_B^2}{E_F}$

由题设数据，代入上式，可求出 E_F 及 $g(E_F)$：

$$E_F = \frac{27k_B^2N_A}{4} = 2.235\times10^{-3}\mathrm{eV}$$

$$g(E_F) = \frac{3nV_N}{2E_F} = \frac{3N_A}{2E_F} = 2.425\times10^{45}$$

26．**什么是晶体振动光学支和声学支格波？它们有什么本质上的区别？**

【答案】在一维双原子的简单复式晶格中，求解原子的运动方程。对应于每一个 q 值，都有频率 ω_- 和 ω_+ 的两类振动，且 $\omega_+ > \omega_-$，对应于 ω_+ 的格波称为光学分支的格波。对应于 ω_- 的格波称为声学分支的格波。

对于光学分支的格波，相邻两不同原子的振动方向相反。而对于声学分支的格波，相邻两原子的振动方向相一致，且在长波情况下，声学分支的格波与弹性波相一致。

27．**如 X 射线沿简立方原胞的 Oz 负方向入射，求证当 $\lambda/a = 2l/(k^2+l^2)$ 和 $\cos\beta = (l^2-k^2)/(l^2+k^2)$ 时，衍射光线在 yz 平面上，β 为衍射线和 Oz 轴的夹角。**

【答案】简立方的原胞的正格子基矢为：

$\vec{a_1} = a\vec{i}$

$\vec{a_2} = a\vec{j}$

$\vec{a_3} = a\vec{k}$

$\Omega = a^3$

其倒格矢为：

$\vec{b_1} = \frac{2\pi}{a}\vec{i}$

$\vec{b_2} = \frac{2\pi}{a}\vec{j}$

$\vec{b_3} = \frac{2\pi}{a}\vec{k},$

$\therefore \vec{k_h} = \frac{2\pi}{a}h\vec{i} + \frac{2\pi}{a}k\vec{j} + \frac{2\pi}{a}l\vec{k}$

由图可知：

$\sin\theta = \cos\frac{\beta}{2} = \sqrt{\frac{1+\cos\beta}{2}} = \sqrt{\frac{l^2}{l^2+k^2}}$

将$\frac{\lambda}{a} = \frac{2l}{k^2+l^2}, \sin\theta = \sqrt{\frac{l^2}{l^2+k^2}}$代入

$m\left|\vec{k_h}\right| = 2\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta$得：

$\frac{2\pi}{a}m(h^2+k^2+l^2)^{1/2} = 2\frac{2\pi}{\lambda}\frac{l}{(l^2+k^2)^{1/2}}$

$m(h^2+k^2+l^2)^{1/2} = (k^2+l^2)^{1/2}$

当 m=1，h^2=0 时，上式可以成立

当 h=0 时，$\vec{k_h}$ 只有$\vec{k},\vec{j}$分量，即$\vec{k_0}$只有$\vec{k}$分量，而$\vec{k}-\vec{k_0} = \vec{k}_h, \vec{k}$亦只有 y，z 分量，即衍射光线在 yz 平面上。

28．**对二维简单格子，按德拜模型，求出晶格热容，并讨论高、低温极限。**

【答案】德拜模型格波为弹性波，色散关系为$\omega = vq$，在二维波矢空间内，格波等频线是一个个圆周，在$q \to q+dq$区间内波矢数为：

$dZ = \frac{S}{(2\pi)^2}2\pi q dq = \frac{S\omega}{2\pi v^2}d\omega$

模式密度：$dg(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{S\omega}{2\pi v^2}$

二维介质由两支格波，总模式密度：$g(\omega) = \frac{S\omega}{\pi v^2}$

格波振动能： $E=\int_0^{\omega_m}\frac{S\omega}{\pi v^2}\frac{\hbar\omega}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)}d\omega$

晶格热容： $C_v=\frac{S}{\pi v^2}\int_0^{\omega_m}K(\frac{\hbar\omega}{KT})^2\frac{e^{\hbar\omega/kT}\omega}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)^2}d\omega$

其中： $\int_0^{\omega_m}g(\omega)d\omega=\int_0^{\omega_m}\frac{S\omega}{\pi v^2}d\omega=2N$

令 $x=\frac{\hbar\omega}{kT},C_v=\frac{Sk}{\pi v^2}k(\frac{kT}{\hbar})^2\int_0^{\Theta_d}\frac{e^x x^3}{(e^x-1)^2}dx$

其中 $\Theta_D=\frac{\hbar\omega_m}{k}$

高温极限： $e^x\approx 1+x$ $C_v\approx 2Nk$，与经典理论一致。

低温极限： $\Theta_D/T\to\infty,$ $\int_0^{\infty}\frac{e^x x^3}{(e^x-1)^2}dx=6\xi(3)$ （常数）

$C_v=AT^2$

29．**试计算 Cs 在 $T=1000K$ 时热电子发射的电流密度。**

【答案】电子热发射的电流密度函数为：

$j=4\pi e\left(m(kT)^2/\hbar^3\right)e^{-\frac{\phi}{kT}}$

由教材表 6-3 可查得 Cs 的功函数为 1.81eV。代入数据到上式中可以算得：

$j=9.2\times10^2 A\cdot m^{-2}$

30．**试证明面心立方与体心立方互为正倒格子。**

【答案】面心立方：

$\boldsymbol{a}_1=\frac{a}{2}(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k})$

$\boldsymbol{a}_2=\frac{a}{2}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{i})$ (1)

$\boldsymbol{a}_3=\frac{a}{2}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j})$

由正格子和倒格子的转换关系

$\vec{b_1}=2\pi(\vec{a_2}\times\vec{a_3})/\Omega$

$\vec{b_2}=2\pi(\vec{a_3}\times\vec{a_1})/\Omega$ (2)

$\vec{b_3}=2\pi(\vec{a_1}\times\vec{a_2})/\Omega$

其中： $\Omega=\vec{a_1}\bullet(\vec{a_2}\times\vec{a_3})$ 得：

$$\vec{b_1}=\frac{2\pi}{a}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})$$

$$\vec{b_2}=\frac{2\pi}{a}(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}) \quad (3)$$

$$\vec{b_3}=\frac{2\pi}{a}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k})$$

在体心立方中

$$\vec{a_1}=\frac{a}{2}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})$$

$$\vec{a_2}=\frac{a}{2}(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}) \quad (4)$$

$$\vec{b_3}=\frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k})$$

由(2)式可得

$$\vec{b_1}=\frac{2\pi}{a}(\vec{j}+\vec{k})$$

$$\vec{a_2}=\frac{2\pi}{a}(\vec{k}+\vec{i}) \quad (5)$$

$$\vec{a_3}=\frac{2\pi}{a}(\vec{i}+\vec{j})$$

比较(1)与(5)，(3)与(4)便可得面心立方与体心立方互为正，倒格子。

31．**Al 等离子体能量 $\hbar\omega_p$ 的实验值为 15.3eV，按照自由电子气模型的电子密度为 $n=18.06\times10^{22}m^{-3}$，求 $\hbar\omega_p$ 的理论值。**

【答案】由等离子体振荡频率关系式：

$$\omega_p^2=\frac{ne^2}{\varepsilon_0 m}$$

故：

$$\hbar\omega_p=\hbar e\sqrt{\frac{n}{\varepsilon_0 m}}=15.7\text{eV}.$$

32．**一根直径为 $3mm$ 的人造蓝宝石晶体的热导率，在 $30K$ 的温度达到一个锐的极大值，试估计此极大值。(蓝宝石在 $T\ll\Theta_D=1000K$ 时，$c_v=10^{-1}T^3J\cdot m^{-3}\cdot K^{-1}$)**

【答案】在低温情况下，热导率的表达式为

$$\kappa=\frac{1}{3}c_v v l$$

其中，$c_v=10^{-1}T^3J\cdot m^{-3}\cdot K^{-1}$，而且由于直径很小，自由程 $l\approx d=3mm$，所以

$\kappa=2.7v$

而声速 v 由德拜模型求取，在德拜模型中，$(N\text{为原胞个数})$

$$\omega_D=\left(\frac{30\pi^2N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}V_s=\left(\frac{30\pi^2N\cdot M_{Al_2O_3}}{V\cdot M_{Al_2O_3}}\right)^{\frac{1}{3}}V_s=\left(\frac{30\pi^2\rho}{M_{Al_2O_3}}\right)^{\frac{1}{3}}V_s,\quad \omega_D=\frac{\Theta_D k_B}{\hbar}$$

故，

$$V_s=\frac{\Theta_D k_B}{\hbar}\left(\frac{30\pi^2\rho}{M_{Al_2O_3}}\right)^{-\frac{1}{3}}\approx 6.84\times10^3 m\cdot s^{-1},(\text{其中}\rho=4\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$$

$\nu=V_s\approx 6.84\times10^3 m\cdot s^{-1}$，代入$\kappa=2.7\nu$中，得

$\kappa=1.85\times10^4 W\cdot m^{-1}\cdot K^{-1}$

33．**一维单原子晶格，在简谐近似下，考虑每一原子与其余所有原子都有作用，求格波的色散关系。**

【答案】设第n个原子的势能函数为

$$U=\frac{1}{2}\sum_{\substack{m=-\infty\\(m\neq0)}}^{\infty}\beta_m\left(x_n-x_{n+m}\right)^2$$

其中，β_m为与第n个原子的相距ma的原子间的恢复力常数，a为晶格常数。则，第n个原子的受力为

$$F_n=\frac{\partial U}{\partial x_n}$$

$$=\sum_{\substack{m=-\infty\\(m\neq0)}}^{\infty}\beta_m(x_{n+m}-x_n)$$

$$=\sum_{m=1}^{\infty}\left[\beta_m(x_{n+m}-x_n)+\beta_{-m}(x_{n-m}-x_n)\right]$$

$$=\sum_{m=1}^{\infty}\beta_m(x_{n+m}+x_{n-m}-2x_n)$$

其中，利用了$\beta_m=\beta_{-m}$。第n个原子的运动方程为

$$M\ddot{x}_n=F_n$$

$$=\sum_{m=1}^{\infty}\beta_m(x_{n+m}+x_{n-m}-2x_n)$$

令其试解为

$$x_n=Ae^{i[qna-\omega t]}$$

代入运动方程得

$$-M\omega^2=\sum_{m=1}^{\infty}\beta_m\left(e^{iqma}+e^{-iqma}-2\right)$$

$$=\sum_{m=1}^{\infty}2\beta_m\left[\cos(qma)-1\right]$$

$$=-\sum_{m=1}^{\infty}4\beta_m\sin^2(\frac{qma}{2})$$

故，

$$\omega^2=\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{\infty}4\beta_m\sin^2(\frac{qma}{2})$$

34．**铜靶发射 $\lambda=0.154nm$ 的 X 射线入射铝单晶，如铝（111）面一级布拉格反射角 $\theta=19.2^{\circ}$，试据此计算铝（111）面族的间距 d 与铝的晶格常数。**

【答案】 $\vec{a^*}=\frac{2\pi}{a}\vec{i},\vec{b^*}=\frac{2\pi}{a}\vec{j},\vec{c^*}=\frac{2\pi}{a}\vec{k}$

$h=k=l=1,\ m=1$

$\vec{k_h}=\frac{2\pi}{a}\vec{i}+\frac{2\pi}{a}\vec{j}+\frac{2\pi}{a}\vec{k},\left|\vec{k_h}\right|=\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$

$2d_{hkl}\sin\theta=\lambda$

$d_{hkl}=\frac{\lambda}{2\sin 19.2^0}\approx 0.234nm$

$\left|\vec{k_h}\right|=\frac{2\pi}{d_{hkl}}$

$\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}=\frac{2\pi}{d_{hkl}}$

$a=\sqrt{3}d_{hkl}=0.405nm$

35．**什么是“空穴”？简述空穴的属性。**

【答案】空穴：空缺一个状态的能带的电流犹如由一个带正电荷 e，具有空缺态电子的速度的“粒子”对电流的贡献。这一粒子称为“空穴”

空穴的属性:带正电荷 e

速度为缺失状态电子的速度，

有效质量为正，数值等于该电子有效质量的绝对值。

36．**用近自由电子模型处理上题，并求此晶体的第一个以及第二个禁带宽度。**

【答案】

$V(x)=\sum_n V_n e^{in\frac{2\pi}{a}x}=V_0+\sum_n{}' V_n e^{in\frac{2\pi}{a}x}$

为简单计算，令 $V_0=0$

$V_1=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}V(x)e^{-i\frac{2\pi}{a}x}dx$

$=\frac{m\omega^2a^2}{4\pi^3}$

$V_2=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}V(x)e^{-i\frac{4\pi}{a}x}dx$

$=\frac{m\omega^2a^2}{32\pi^2}$

$\therefore$ 第一个禁带宽度为:$2|V_1|=\frac{m\omega^2a^2}{2\pi^3}$

第一个禁带宽度为:$2|V_2|=\frac{m\omega^2a^2}{16\pi^2}$

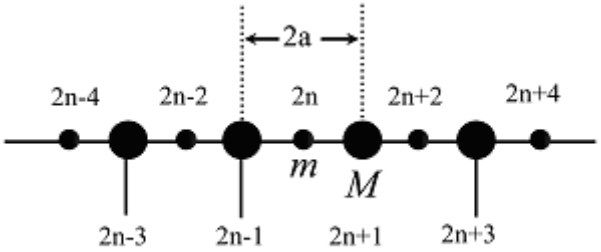
37．**共价结合中为什么有”饱和性”和”方向性”？**

【答案】设 N 为一个原子的价电子数目，对于ⅣA, Ⅴ A,ⅥA,ⅦA 族元素，价电子壳层一共有 8 个量子态，最多能接纳(8-N)个电子，形成（8-N）个共价键。这就是共价结合的“饱和性”。共价键的形成只能在特定的方向上，这些方向是配对电子波函数的对称轴方向，在这个方向上交迭的电子云密度最大。这就是共价结合的“方向性”。

38．**推导一维双原子链的色散关系**

【答案】质量为 M 的原子位于 2n-1，2n+1，2n+3.....。

质量为 m 的原子位于 2n，2n+2，2n+4.....。



运动方程为：$M\ddot{\mu}_{2n+1}=-\beta(2\mu_{2n+1}-\mu_{2n+2}-\mu_{2n})$；

$M\ddot{\mu}_{2n}=-\beta(2\mu_{2n}-\mu_{2n+1}-\mu_{2n-1})$

设方程解的形式：$\mu_{2n}=Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$和$\mu_{2n+1}=Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$

因为$M>m$，复式格子中不同原子振动的振幅一般来说是不同的。将

$\mu_{2n}=Ae^{i[\omega t-(2na)q]}$

$\mu_{2n+1}=Be^{i[\omega t-(2n+1)aq]}$

带回到运动方程得到：

$$\left.\begin{aligned}-m\omega^2A=\beta(e^{iaq}+e^{-iaq})B-2\beta A=(2\beta-m\omega^2)A-(2\beta\cos aq)B=0\\-M\omega^2B=\beta(e^{iaq}+e^{-iaq})A-2\beta B=-(2\beta\cos aq)A+(2\beta-M\omega^2)B=0\end{aligned}\right\}$$

若 A、B 有非零的解，系数行列式满足：

$$\begin{vmatrix}2\beta-m\omega^2 & -2\beta\cos aq\\-2\beta\cos aq & 2\beta-M\omega^2\end{vmatrix}=0$$

$$\omega^2=\beta\frac{(m+M)}{mM}\{1\pm[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq]^{1/2}\}$$

$$\omega_+^2=\beta\frac{(m+M)}{mM}\{1+[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq]^{1/2}\}\quad\omega_-^2=\beta\frac{(m+M)}{mM}\{1-[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2 aq]^{1/2}\}$$

39．**电子在周期场中的势能**

$$V(X)=\begin{cases}\frac{1}{2}m\omega^2\left[b^2-(x-na)^2\right],\text{当}na-b\le x\le na+b\\0,\text{当}(n-1)a+b\le x\le na-b\end{cases}$$

且 a=4b, ω 是常数。试画出此势能曲线，并求此势能的平均值。

【答案】势能曲线为：

$$\overline{V}=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}V(x)dx=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{4}}^{\frac{a}{4}}\frac{1}{2}m\omega^2\left[b^2-(x-na)^2\right]dx$$

$$=\frac{m\omega^2a^2}{96}$$

40．**试说明晶体结合的基本类型及其特点?**

【答案】晶体中的原子之所以能够结合成具有一定几何结构的稳定晶体，是由于原子之间存在着结合力，而这种结合力与原子的结构有关，不同类型的原子之间具有不同性质的结合力，由于结合力的性质不同，晶体会具有不同类型的结合。一般晶体的结合可以概括为离子性结合、共价结合、金属性结合和范德瓦尔斯结合四种基本形式。离子晶体的典型晶格中，正、负离子相间排列，作用力的总效果为库仑引力，具有结构很稳定、导电性能差、熔点高、硬度高、膨胀系数小的特点；共价结合的晶体是一对近邻原子相互靠近，波函数交叠，形成共价键，具有饱和性和方向性；金属性结合是共有化的价电子与离子实之间的价键结合，结构密排，具有熔点高、硬度高、导电、导热性能好、无饱和性和方向性等特点；范德瓦尔斯结合产生在原来稳定电子结构的原子或分子之间，结合后仍保持原来的电子结构，具有结合力小、熔点很低、硬度很小的特点。

41．**推导一维单原子链的色散关系**

【答案】只考虑临近原子相互作用，第 n 个原子所受的总作用力

$$f_n=-\frac{\partial\phi}{\partial u_n}=-\beta(2u_n-u_{n-1}-u_{n+1})$$

第 n 个原子的运动方程

$$M\frac{d^2}{dt^2}u_n=-\beta(2u_n-u_{n-1}-u_{n+1})$$

设解的形式为：

$$u_n=Ae^{i(qna-\omega t)}$$

运动方程

$$-M\omega^2=-\beta\left(2-e^{-iqa}-e^{iqa}\right)$$

$$\omega^2=2\frac{\beta}{M}(1-\cos(qa))=\frac{4\beta}{M}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\omega=\omega_m\left|\sin\frac{qa}{2}\right|\quad\omega_m=2\sqrt{\frac{\beta}{M}}$$

42．**已知半导体 GaAs 具有闪锌矿结构，Ga 和 As 两原子的最近距离 d = 2.45×10^{-10}m。试求：**

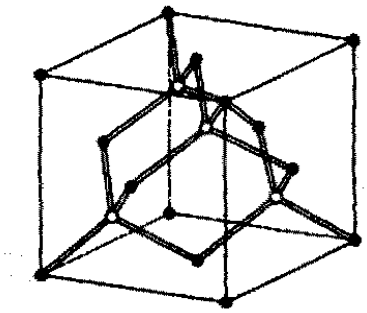
(1)晶格常数；

(2)固体物理学原胞基矢和倒格子基矢；

(3)密勒指数为(110)晶面族的面间距；

(4)密勒指数为(110)和(111)晶面法向方向间的夹角。

【答案】(1)由题意可知，GaAs 的晶格为复式面心立方晶格，其原胞包含一个 Ga 原子和一个 As 原子，其中 Ga 原子处于面心立方位置上，而 As 原子则处于立方单元体对角线上距离 Ga 原子 1/4 体对角线长的位置上，如下图所示：



● —Ga 原子　　○ —As 原子

由此可知：$d=\frac{\sqrt{3}}{4}a$

(2)由于 GaAs 的空间点阵为面心立方结构，故其固体物理学原胞基矢为：

$$\begin{cases}\mathbf{a}_1=\frac{a}{2}(\mathbf{j}+\mathbf{k})=2.795\times10^{-10}(\mathbf{j}+\mathbf{k})\\ \mathbf{a}_2=\frac{a}{2}(\mathbf{k}+\mathbf{i})=2.795\times10^{-10}(\mathbf{k}+\mathbf{i})\\ \mathbf{a}_3=\frac{a}{2}(\mathbf{i}+\mathbf{j})=2.795\times10^{-10}(\mathbf{i}+\mathbf{j})\end{cases}$$

其倒格子基矢为：

$$\begin{cases}\mathbf{b}_1=\frac{2\pi}{a}(-\mathbf{i}+\mathbf{j}+\mathbf{k})=1.124\times10^{10}(-\mathbf{i}+\mathbf{j}+\mathbf{k})\\ \mathbf{b}_2=\frac{2\pi}{a}(\mathbf{i}-\mathbf{j}+\mathbf{k})=1.124\times10^{-10}(\mathbf{i}-\mathbf{j}+\mathbf{k})\\ \mathbf{b}_3=\frac{2\pi}{a}(\mathbf{i}+\mathbf{j}-\mathbf{k})=1.124\times10^{-10}(\mathbf{i}+\mathbf{j}-\mathbf{k})\end{cases}$$

(3)密勒指数为(110)晶面族的面间距为：

$$d_{110}=\frac{2\pi}{|\mathbf{K}_{110}|}=\frac{2\pi}{|1\cdot\mathbf{b}_1+1\cdot\mathbf{b}_2+0\cdot\mathbf{b}_3|}=\frac{a}{2}=2.795\times10^{-10}m$$

(4)根据倒格子矢的性质可知，密勒指数为(110)和(111)晶面法向方向间的夹角即为倒格子矢 $\mathbf{K}_{110}$ 和 $\mathbf{K}_{1\bar{1}1}$ 之间的夹角，设为 α，则有：

$$\alpha=\arccos\frac{\mathbf{K}_{110}\cdot\mathbf{K}_{1\bar{1}1}}{|\mathbf{K}_{110}|\cdot|\mathbf{K}_{1\bar{1}1}|}=\frac{(1\cdot\mathbf{b}_1+1\cdot\mathbf{b}_2+0\cdot\mathbf{b}_3)\cdot(1\cdot\mathbf{b}_1-1\cdot\mathbf{b}_2+1\cdot\mathbf{b}_3)}{|1\cdot\mathbf{b}_1+1\cdot\mathbf{b}_2+0\cdot\mathbf{b}_3|\cdot|1\cdot\mathbf{b}_1-1\cdot\mathbf{b}_2+1\cdot\mathbf{b}_3|}$$

$$=\arccos(-0.3015)=107.55^\circ$$

43．由实验测得 NaCl 晶体的密度为 2.16g/cm³,它的弹性模量为 2.14×10^{10}N/m²，试求 NaCl 晶体的每对离子内聚能 $\frac{U_c}{N}$。（已知马德隆常数 M=1.7476,Na 和 Cl 的原子量分别为 23 和 35.45)

【答案】NaCl 晶体中 Na^+和 Cl^-的最近距离为 r_0

晶胞基矢长为 $2r_0$，一个晶胞中含有四对正负离子对

∴一个原胞（一个 NaCl 分子）的体积为：

$$v=2r_0^3=\frac{m}{\rho N}=\frac{(23+35.45)\times10^{-6}}{2.16\times6.02\times10^{23}}$$

∴NaCl 晶体中的正负离子的平衡间距为：

$r_0 = 2.82\times10^{-8} cm = 0.282nm$

由晶体体积弹性模量的公式：

$$B_m = \frac{(n-1)Me^2}{36\pi\varepsilon_0\beta r_0^4},$$

并且由于 NaCl 晶体为面心立方结构，参数 β=2，故由上式可得：

$$n = 1+\frac{36\pi\varepsilon_0\beta r_0^4}{Me^2}B_m$$

$$=1+\frac{36\times3.14\times8.85\times10^{12}\times2\times(0.282\times10^{-9})^4}{1.7476\times(1.6\times10^{-19})^2}\times2.41\times10^{10}$$

=7.82

由平衡时离子晶体的内聚能公式：

$$U_c = -\frac{NMe^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}(1-\frac{1}{n}),$$

将 n=7.82 代入得 NaCl 晶体的每对离子的内聚能为：

$$\frac{U_c}{N} = -\frac{Me^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}(1-\frac{1}{n})$$

$$=-\frac{1.7476\times(1.6\times10^{-19})^2}{4\times3.14\times8.85\times10^{-12}\times0.282\times10^{-19}}(1-\frac{1}{7.82})$$

$$=-1.24\times10^{-18}J$$

44. **金刚石 (碳原子量为 12) 的杨氏模量为 $10^{12}N\cdot m^2$，密度 $\rho = 3.5g\cdot cm^{-3}$。试估算它的德拜温度 Θ_D = ?**

【答案】德拜温度为

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$$

将 $\omega_D = \left(\frac{6\pi^2N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}V_s$，$V_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$，代入上式

$$\Theta_D = \frac{\hbar}{k_B}\sqrt{\frac{Y}{\rho}}\cdot\left(\frac{6\pi^2N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$$

$$=\frac{\hbar}{k_B}\sqrt{\frac{Y}{\rho}}\cdot\left(\frac{6\pi^2\rho}{N}\right)^{\frac{1}{3}}$$

$$=\frac{1.0546\times10^{-34}}{1.3807\times10^{-23}}\cdot\sqrt{\frac{10^{12}}{3.5\times10^3}}\left(\frac{6\times3.14^2\times3.5\times10^3}{12\times1.6605\times10^{-27}}\right)^{\frac{1}{3}}K$$

$$\approx 2817K$$

45. **根据结合力的不同，晶体可分为几种类型其各自的结合力分别是什么?**

【答案】晶体根据结合力不同分为五种晶体类型。

离子晶体（正负离子间静电库仑力）

分子晶体（范德瓦尔斯力）

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：https://d.book118.com/907046035122006122