

2014-2015 A 卷

1 闪锌矿 ZnS 晶体是离子晶体，离子间的排斥作用具有 b/r^n 的形式，只考虑近邻离子间的排斥作用，以 r 表示近邻离子间距：

- (1) 写出 1mol 闪锌矿 ZnS 晶体的吸引势能、排斥势能和内能表达式，并简要说明所用符号的物理意义；
- (2) 计算闪锌矿 ZnS 晶体最近邻原子间的平衡间距 r_0 ；
- (3) 计算 1mol 闪锌矿 ZnS 晶体的结合能

2 由量子理论可知，角频率为 ω 的简谐振子的零点振动能为 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ，

- (1) 用德拜模型求 1mol Pb 晶体的模式密度和零点振动能，
- (2) 讨论考虑零点振动能与否对绝对零度时晶体的总能量的计算是否有影响。(Pb 晶体具有面心立方结构，晶格常数为 a)

3 某二维金属晶体具有简单长方结构，晶格常数为 a , b ，且 $a > b$ 。在紧束缚近似条件下，只考虑近邻和次近邻原子间的相互作用，

- (1) 求该晶体 s 带的 $E(k)$ 函数；
- (2) 求该晶体 s 带带底的位置、能量和有效质量；
- (3) 描述该晶体 s 带带底附近等能线的形状，并说明理由。

4 某立方晶格的价电子填充的能带具有下列函数形式

$$E(\vec{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_1}$$

沿 z 方向加磁场 B ，

- (1) 采用准经典近似，写出电子在坐标空间的运动方程，并描述其运动轨迹；
- (2) 如何实现回旋共振？求回旋共振的频率（要求写出推导过程）；
- (3) 根据量子理论，写出加磁场后电子的能量。

5 某单价金属元素形成体心立方晶体，晶格常数为 a ，采用自由电子气近似，

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*},$$

- (1) 计算 $T=0K$ 时，1mol 该晶体中价电子的费米能 E_F^0 和总能量；

- (2) 在[100]方向上加恒定电场 E , 采用弛豫时间近似, 写出玻尔兹曼方程的标量形式, 假设该金属中温度是均匀的。

2014-2015 B 卷

1 1mol 某晶体的内能为

$$U(r) = -A/r^2 + B/r^8$$

其中 r 为最近邻原子间距离, 计算

- (1) 最近邻原子间的平衡间距 r_0 ;
- (2) 该晶体的结合能;
- (3) 该晶体具有最稳定结构时, 晶体内的吸引势和排斥势

2 某单价金属元素形成二维正方晶体, 晶格常数为 a , 晶体面积为 S , 价电子填充的能带具有下列函数形式

$$E(\vec{k}) = E_0 + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}$$

其中 m^* 是电子的有效质量。计算

- (1) 该能带的能态密度 $N(E)$;
- (2) 温度 $T=0K$ 时的费米能;
- (3) 温度 $T=0K$ 时该晶体中价电子的总能量。

3 由 N 个相同的原子构成一维简单晶格, 原子间距为 a , 分别利用爱因斯坦模型和德拜模型, 求晶体的晶格热容 $C_v(T)$, 并将两处模型的计算结果进行比较,

$$\text{已知 } \int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6}$$

4 在紧束缚近似条件下, 只考虑近邻原子间的相互作用, 求

- (1) 面心立方晶体 Cu 的 4s 带的 $E(k)$ 函数;
- (2) Cu 的 4s 带的带底带顶的位置和能量;
- (3) Cu 晶体处于恒电场 E 中, E 的方向平行于晶体的 [111] 晶向, Cu 的 4s 电子的布洛赫振荡周期

5 某单价金属元素形成二维简单长方晶体, 其晶胞基矢为 $a\mathbf{i}$ 和 $b\mathbf{j}$,

- (1) 求该晶体的倒易点阵基矢, 并在倒易空间画出第一布里渊区;
- (2) 求简约布里渊区的不可约面积;
- (3) 若 $a=2b$, 采用近自由电子近似, 在倒易空间画出 $T=0K$ 时电子填充的区域, 并对其形状进行描述。