

中国科学院—中国科学技术大学

2004 年招收攻读硕士学位研究生入学考试试题

试题名称： 固体物理

一 NaCl 和 CsCl 是两种典型的离子晶体，但具有不同的晶体结构。

1 NaCl 是面心立方点阵，Na 和 Cl 离子各组成一个面心立方格子沿立方轴方向移动二分之一交叉而成。最近邻各 6 个异性离子，次近邻各 12 个同性离子。

CsCl 是简单立方点阵，Cs 和 Cl 离子各组成一个简单立方格子，沿体对角线方向移动二分之一交叉而成。最近邻为 8 个异性离子，次近邻为 6 个同性离子。

2 它们同属立方晶系，它们相同的特征对称元素是 4 个 3 次轴。

3 NaCl：面心立方，倒易点阵为体心立方，第一布里渊区为截角八面体

CsCl：简单立方，倒易点阵为简单立方，第一布里渊区为简立方体。

$$4 \quad \bar{U} = \frac{N}{2} \sum_{j=2}^N \left(\mp \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^n} \right) = -\frac{N}{2} \left(\frac{\mu e^2}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{B}{R^n} \right)$$

其中 μ ， B 是和晶体结构有关的常数， R 为离子间最短距离

$$\frac{\partial \sigma}{\partial R} = 0 \Rightarrow R_0 = \left(\frac{4\pi\epsilon_0 n B}{\mu e^2} \right)^{\frac{1}{n-1}}$$

5 它们的原胞都含有 2 个离子，因此各有 6 支色散关系，3 支光学波，3 支声学波。离子晶体的长光学波 $\omega_l > \omega_t$ 。对红外光不同频率有强烈的反射和吸收。

二 1 德拜模型采用弹性波近似。 $\omega = v_s q$ (v_s 为声速)

成功地解释了极低温下晶格比热温度关系 (T^3 定律)，极低温下只有长波声子被激发，所以符合弹性波近似条件。因此在解释较高温度下的晶格比热温度关系不够严格。