

学院\_\_\_\_\_姓名\_\_\_\_\_学号\_\_\_\_\_任课老师\_\_\_\_\_考场教室\_\_\_\_\_选课号/座位号\_\_\_\_\_

.....密.....封.....线.....以.....内.....答.....题.....无.....效.....

电子科技大学 2012-2013 学年第 1 学期期 末 考试 B 卷

课程名称: 固体物理 考试形式: 闭卷 考试日期: 2013 年     月     日 考试时长:     分钟

课程成绩构成: 平时 40 %, 期中     %, 实验     %, 期末 60 %

本试卷试题由 3 部分构成, 共 5 页。

题号	一	二	三	四	五	六	七	八	九	十	合计
得分											

选择题、填空题等客观题模板如下: (正文请用宋体 5 号字)

得 分

一、填空题 (共 20 分, 共 10 题, 每题 2 分)

1. 对晶格常数为  $a$  的简单立方晶体, 与正格矢  $\vec{R} = a\vec{i} + 2a\vec{j} + 2a\vec{k}$  正交的倒格子晶面族的面指数为

(122), 其面间距为  $\frac{2\pi}{3a}$

倒格子面间距  $\frac{2\pi}{\sqrt{h^2+d^2+l^2}}$

2. 金刚石晶体的结合类型是典型的 共价结合 晶体, 它有 6 支格波

3. 原胞中有  $N$  个原子, 那么在晶体中有 3 支声学波和  $3N-3$  支光学波

4. 面心立方晶格常数为  $a$ , 其倒格子晶格常数为  $4\pi/a$

5. 两种不同金属接触后, 费米能级高的带 正 电, 对导电有贡献的是 费米面附近 的电子

6. 电子占据了一个能带中的所有状态, 称该能带为满带; 没有任何电子占据的能带, 称为空带; 导带以下的第一个满带或者最上面的一个满带称为价带; 最下面的一个空带称为导带; 两个能带之间, 不允许存在的能级宽度, 称为带隙

7. 能带顶部电子有效质量为负 (填正或负); 能带底部电子的有效质量为正 (填正或负)

8. 六角密积属 六角 晶系, 一个晶胞包含 两个 原子

9. 声子是 格波的能量量子, 其能量为  $\hbar\omega$ , 动量为  $\hbar q$

10. Si 晶体是 复式 格子, 由两个 面心立方结构 的子晶格沿 体对角线 位移  $1/4$  套构而成, 其固体物理学原胞包含 8 个原子

得分

二、简答题（共 20 分）

1. 晶体有哪几种结合类型？简述晶体结合的一般性质。

离子晶体，共价晶体，金属晶体，分子晶体及氢键晶体。（3 分）

晶体中两个粒子之间的相互作用力或相互作用势与两个粒子的距离之间遵从相同的定性规律。（2 分）

2. 晶体的结合能，晶体的内能，原子间的相互作用势能有何区别？

自由粒子结合成晶体过程中释放出的能量，或者把晶体拆散成一个个自由粒子所需要的能量称为晶体的结合能（2 分）

原子的动能与原子间的相互作用势能之和为晶体的内能（1 分）

在 0K 时，原子还存在零点振动能，但它与原子间的相互作用势能的绝对值相比小很多，所以，在 0K 时原子间的相互作用势能的绝对值近似等于晶体的结合能（2 分）

3. 共价结合，两原子电子云交迭产生吸引，而原子靠近时，电子云交迭会产生巨大的排斥力，如何解释？

共价结合，形成共价键的配对电子，它们的自旋方向相反。（2 分）这两个电子的电子云交迭使得体系的能量降低，结构稳定；（1 分）但当原子靠得很近时，原子内部满壳层电子的电子云交迭，量子态相同的电子产生巨大的排斥力，使得系统的能量急剧增大。（2 分）

4. 本征半导体的能带与绝缘体的能带有何异同？

在低温下，本征半导体的能带与绝缘体的能带结构相同。但本征半导体的禁带较窄，禁带宽度通常在 2 个电子伏特以下。（2 分）由于禁带窄，本征半导体禁带下满带顶的电子可以借助热激发，跃迁到禁带上面空带的底部，使得满带不满，空带不空，二者都对导电有贡献。（3 分）



得分

### 三、计算题（共 60 分）

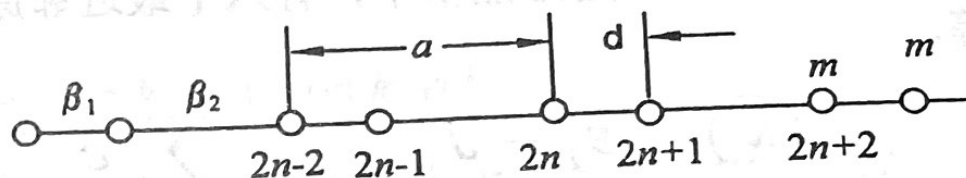
1. 设质量为  $m$  的同种原子组成的一维双原子分子链，分子内部的力系数为  $\beta_1$ ，分子间相邻原子的力系数为  $\beta_2$ ，分子的两原子的间距为  $d$ ，晶格常数为  $a$

(1)、列出原子运动方程及解的形式。

(2)、求出格波的振动谱  $\omega(q)$ 。

解：

(1)、如图



第  $2n$  个原子和第  $2n+1$  原子的运动方程为：

$$\begin{cases} m\ddot{\mu}_{2n} = -(\beta_1 + \beta_2)\mu_{2n} + \beta_1\mu_{2n+1} + \beta_2\mu_{2n-1} \\ m\ddot{\mu}_{2n+1} = -(\beta_1 + \beta_2)\mu_{2n+1} + \beta_2\mu_{2n+2} + \beta_1\mu_{2n} \end{cases} \dots\dots\dots 5 \text{ 分}$$

设运动方程的解为：

$$\begin{cases} \mu_{2n} = Ae^{i(\omega t - naq)} \\ \mu_{2n+1} = Be^{i(\omega t - naq - dq)} \end{cases} \dots\dots\dots 5 \text{ 分}$$

(2)、格波的振动谱

将解代入方程：

$$\begin{cases} (\beta_1 + \beta_2 - \omega^2 m)A - e^{-idq}(\beta_1 + \beta_2 e^{iaq})B = 0 \\ e^{idq}(\beta_1 + \beta_2 e^{-iaq})A - (\beta_1 + \beta_2 - \omega^2 m)B = 0 \end{cases} \dots\dots\dots 5 \text{ 分}$$

最后得到格波频率：

$$\omega_{\pm}^2(q) = \frac{1}{m} \{ (\beta_1 + \beta_2) \pm [\beta_1^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos qa]^{1/2} \} \dots\dots\dots 5 \text{ 分}$$

2. 设二维正三角形晶格中原子间距为  $a$ ，试根据紧束缚近似的结果，求出能量  $E(k)$  的表达式。

解：

若只计及最近邻的相互作用，有：

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_i - J_0 - \sum_{R_s = \text{近邻}} J(\vec{R}_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

在二维正三角形晶格中，有六个最近邻原子。考虑  $s$  态电子，各最近邻的交叠积分相等，

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_i - J_0 - J_1 \sum_{R_s = \text{近邻}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

$$= \varepsilon_i - J_0 - J_1 [e^{i2\pi a k_x} + e^{-i2\pi a k_x}$$

$$+ e^{i\pi a(k_x + \sqrt{3}k_y)} + e^{i\pi a(k_x - \sqrt{3}k_y)}$$

$$+ e^{-i\pi a(k_x + \sqrt{3}k_y)} + e^{-i\pi a(k_x - \sqrt{3}k_y)}] \dots\dots\dots 10 \text{ 分}$$

$$= \varepsilon_i - J_0 - 2J_1 (\cos 2\pi a k_x + 2 \cos \pi a k_x \cos \sqrt{3} \pi a k_y) \dots\dots\dots 10 \text{ 分}$$

3. 对于晶格常数为  $a$  的简单立方晶体

1) 以紧束缚近似求非简并  $s$  态电子的能带。

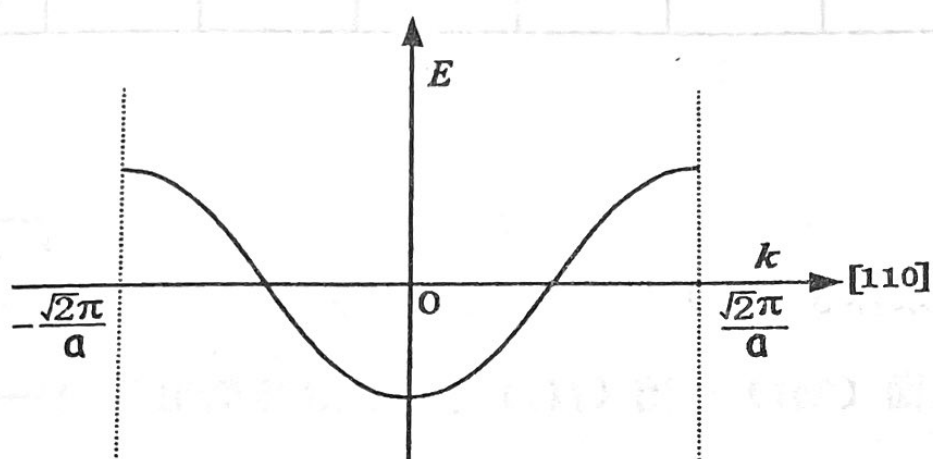
2) 画出第一布里渊区  $[110]$  方向的能带曲线, 求出带宽。

3) 当电子的波矢  $\vec{k} = \frac{\pi}{a}\vec{i} + \frac{\pi}{a}\vec{j}$  时, 求导致电子产生布拉格反射的晶面族的面指数。

解 (1) 紧束缚近似非简并  $s$  态电子的能带

$$E_s(k) = E_s^{at} - C_s - 2J_s(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \dots\dots\dots 5 \text{ 分}$$

(2) 第一布里渊区  $[110]$  方向的能带曲线.....5 分



带宽为  $8J_s$ .....5 分

(3) 将  $\vec{k} = \frac{\pi}{a}\vec{i} + \frac{\pi}{a}\vec{j}$  代入  $\vec{K}_n \cdot (\vec{k} + \frac{\vec{K}_n}{2}) = 0$ , 得到

$$\vec{K}_{n1} = -\frac{2\pi}{a}\vec{i}, \quad \vec{K}_{n2} = -\frac{2\pi}{a}\vec{j}, \quad \vec{K}_{n3} = -\frac{2\pi}{a}\vec{i} - \frac{2\pi}{a}\vec{j}$$

由此可知, 导致电子产生布拉格反射的晶面族的面指数分别为 (100), (010) 和 (110)。

.....5 分