电子科技大学 2012-2013 学年第 1 学期期 末 考试 ____ 卷

课程名称：________ 考试形式：______ 考试日期：20__年__月__日 考试时长：____分钟

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

本试卷试题由_____部分构成，共_____页。

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

（试题题号按实际题量填写 ）

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. 边长为 a 的面心立方原胞体积为$\Omega=a^3/4$；其第一布里渊区体积为$\Omega^*=4(2\pi)^3/a^3$

2. 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

3. 正格子原胞基矢与倒格子原胞基矢之间的关系是$a_i\cdot b_j=2\pi\delta_{ij}=\begin{cases}2\pi, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases}$

4. 面心立方晶格常数为 a，其倒格子晶格常数为 $4\pi/a$

5. 质量分别为 m 和 M 的一维双原子链，在布里渊区中心和边界，声学波频率为 $\omega_1=\begin{cases}\sqrt{2\beta/M}, & q=\pm\pi/2a\\ 0, & q\to 0\end{cases}$，光学波频率为$\omega_2=\begin{cases}\sqrt{2\beta/m}, & q=\pm\pi/2a\\ \sqrt{2\beta/\mu},\ \mu=mM/(M+m), & q\to 0\end{cases}$

6. 若振动频率ω与波矢 q 之间的关系为$\omega=cq^2$，则在三维、二维、一维情况下晶格振动模式密度与频率ω的 1/2, 0, -1/2 次方成比例

7. 一维金属原子链的长度为 L，一维运动的自由电子波函数为$\psi=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$；能量为$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$；波矢分布密度为$\frac{L}{2\pi}$

8. k 空间中能带的表示方式有简约布里渊区、扩展布里渊区、周期布里渊区三种图示法。

9.三维晶体场中自由电子的能态密度为 $N(E)=CE^{1/2}$，平面尺寸为 L×L 的二维晶体长中电子的能态密度为 $N(E)=mL^2/\pi\hbar^2$

10. 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。

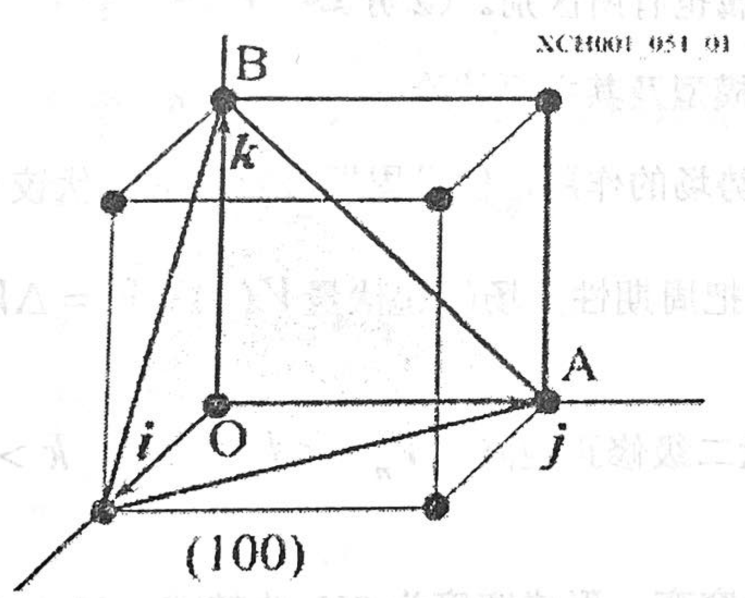
11. 能带顶部电子有效质量为负（填正或负）；能带底部电子的有效质量为正（填正或负）

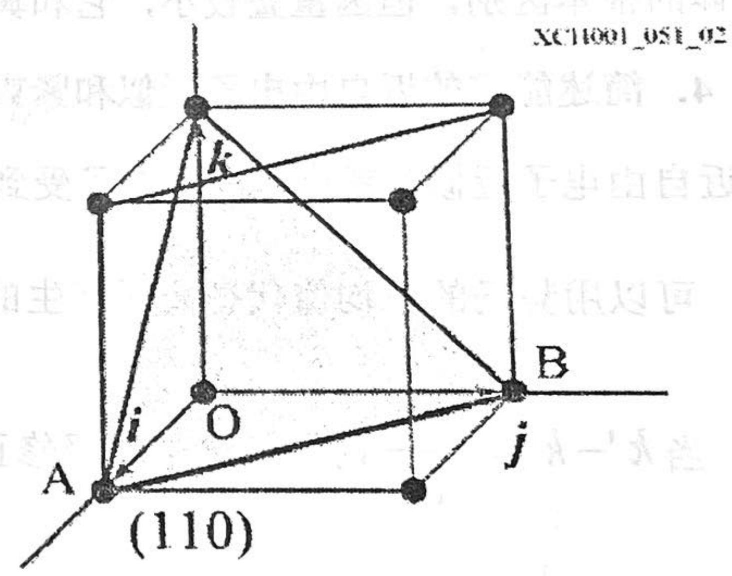
12. 自由电子气系统的费米能级为 E_F^0，k 空间费米半径为 $k_F=\sqrt{2mE_F^0}/\hbar$，电子的平均能量为 $E_k=\frac{3}{5}E_F^0$

得 分

二、简答题（ 共 20 分）

1. 指出简单立方晶格（111）面与（100）面，（111）面与（110）面交线的晶向





（1 分）

如左图所示，（111）面与（100）面的交线为 $\overrightarrow{AB}$，将 $\overrightarrow{AB}$ 进行平移，A 点到原点 O，B 点的位移矢量为 $\overrightarrow{R_B}=-a\vec{j}+a\vec{k}$。因此（111）面与（100）面交线的晶向 $\overrightarrow{AB}$ 为[0 -1 1]。（2 分）

同理，（111）面与（110）面交线的晶相为[-1 1 0]。若将 B 移到原点 O，则（111）面与（100）面交线 $\overrightarrow{BA}$ 晶向为[0 1 -1]，（111）面与（110）面交线 $\overrightarrow{BA}$ 的晶向为[1 -1 0]。（2 分）

2. 简述什么是固体比热的爱因斯坦模型和德拜模型及其意义

爱因斯坦模型对于有 N 个原子构成的晶体，晶体中所有原子以相同的频率 ω_0 振动，忽略了各格

波频率的差别。计算结果表明温度较高时，$C_V \approx 3NK_B$——与杜隆—珀替定律一致。当温度非常低时，$C_V = 3NK_B\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}}$——按温度的指数形式降低，与实验结果 $C_V=AT^3$ 不符。（2 分）

德拜模型考虑了各格波的频率差别，把晶格当作弹性介质，以连续介质的弹性波来代表格波。计算结果表明低温极限下，$C_V(T/\Theta_D) = \frac{12\pi^4}{15}R\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$——与温度的 3 次方成正比。温度越低，德拜近似越好，说明在温度很低时，只有长波格波的激发是主要的。（3 分）

3．根据能带理论，简述金属、半金属和绝缘体的导电性

导体：电子在能带中的占据形成半满带，具有很强的迁移能力。（1 分）

绝缘体：而价电子刚好填满许可的能带形成满带，即为价带；而更高的能带为空，即为导带。价带和导带之间存在一个很宽的禁带，在电场的作用下没有电流产生。（2 分）

半金属：导带与价带之间有一小部分重叠。不需要热激发，价带顶部的电子会流入能量较低的导带底部。因此在绝对零度时，导带中就已有一定的电子浓度，价带中也有相等的空穴浓度。这是半金属与半导体的根本区别。但因重叠较小，它和典型的金属也有所区别。（2 分）

4．简述能带的近自由电子近似和紧束缚近似模型及其主要结论

近自由电子近似：考虑金属中电子受到周期性势场的作用，假设周期性势场的起伏较小。作为零级近似，可以用势场的平均值代替离子产生的势场，把周期性势场的起伏量 $V(\vec{r})-\overline{V}=\Delta V$ 作为微扰来处理。当 $k'-k=\frac{2\pi n}{a}$ 时，波函数一级修正和能量二级修正矩阵元 $V_n = \langle k'|V(x)|k\rangle$ 不为零。但只有当 $E_k = E_{k'}$ 时，即在布里渊区边界处，能量发生突变，形成宽度为 $2V_n$ 的带隙。（2 分）

紧束缚近似：电子在一个原子（格点）附近时，主要受到该原子势场的作用，而将其他原子（格点）势场的作用视为微扰。将晶体中电子的波函数近似看作原子轨道波函数的线性组合，这样可以得到原子能级和晶体中能带之间的对应关系。（2 分）

一个原子能级εi 对应一个能带，不同原子能级对应不同的能带。当原子形成固体后，形成一系列的能带。能量较低的能级对应内层电子，其轨道较小，原子间内层电子波函数相互重叠较少，所以对应的能带较窄；能量较高的能级对应外层电子，其轨道较大，原子间外层电子波函数相互重叠较多，所以对应的能带较宽。（1 分）

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……

得 分

三、计算题（ 共 60 分）

1. （20 分）求解一维双原子链的晶格振动。假定两种原子 P 和 Q 沿一维交替排列，原子质量分别为 m 和 M，原子间距为 a。采用简谐近似，并假定只存在最近邻原子之间的作用力，力常数为 β 。

1）写出原子的运动方程，求出晶格振动色散关系并作图。

2）假定 P 和 Q 原子各有 N 个，在周期性边界条件下讨论格波波矢的取值。

3）讨论在第一布里渊区中心和边界处声学支格波和光学支格波所对应的原子运动的异同。

4）近似计算布里渊区中心附近声学支格波的态密度。

解：

1）运动方程及其解 （8分）

考虑一个由质量 m 和质量 M 两种原子（设 M > m）等距相间排列的一维双原子链，设晶格常数为 2a，平衡时相邻两原子的间距为 a，原子间的力常数为 β。在 t 时刻，两种原子的位移分别为： u_{2n}, u_{2n+1}

若只考虑近邻原子间的弹性相互作用，则运动方程为：

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

$$m\frac{d^2u_{2n+1}}{dt^2}=\beta\left(u_{2n}+u_{2n+2}-2u_{2n+1}\right)$$

试解：

$$u_{2n}=Ae^{i(\omega t-2naq)}$$

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

带入方程得：

$$\left(M\omega^2-2\beta\right)A+2\beta\cos\left(aq\right)B=0$$

$$2\beta\cos\left(aq\right)A+\left(m\omega^2-2\beta\right)B=0$$

有解条件是久期方程为零：

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

解得：

9

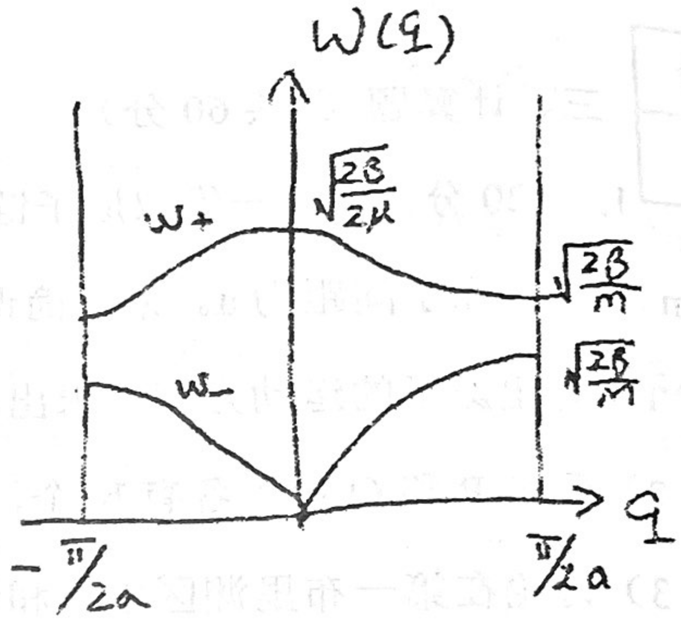
$$\omega_{\pm}^2=\frac{\beta}{Mm}\left[(M+m)\pm\sqrt{M^2+m^2-4Mm\sin^2 aq}\right]$$

$$=\frac{\beta(M+m)}{Mm}\left\{1\pm\sqrt{1-\frac{4Mm}{(M+m)^2}\sin^2 aq}\right\}$$

or

$$=\beta\left(\frac{1}{M}+\frac{1}{m}\right)\pm\beta\sqrt{\left(\left(\frac{1}{M}+\frac{1}{m}\right)^2-\frac{4\sin^2 qa}{mM}\right)}$$

$$=\frac{\beta}{mM}\left[(m+M)\pm\left(m^2+M^2+2mM\cos 2qa\right)^{\frac{1}{2}}\right]$$



2) (3分) 周期性边界条件下

$$u_{N+2n}=u_{2n}$$

$$\Rightarrow e^{-i2Naq}=1$$

$$q=\frac{\pi}{Na}\cdot n$$

n 为整数

3) (4分) 在布里渊区中心，光学支格波两种原子相对运动；声学支格波对应的两种原子原子同向运动。在布里渊区边界处，光学支格波重原子不动，轻原子相对运动；声学支格波对应的轻原子不动，重原子相对运动。

4) (5分) 在布里渊区中心，声学支格波近似为弹性波，

$$\omega=v_s q$$

对应的态密度为：

$$g(\omega)=\frac{L}{\pi}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\omega}$$

$$=\frac{1}{v_s}\cdot\frac{L}{\pi}$$

$$=\sqrt{\frac{(M+m)}{2\beta}}\frac{L}{a\pi}$$

$$=\sqrt{\frac{(M+m)}{2\beta}}\frac{2N}{\pi}$$

Vs 的值根据色散关系求出。

10

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……

2.（25 分）设面心立方晶体的晶格常数为 2a，试按照紧束缚近似考虑 s 电子形成的能带，解答下列问题：

1）写出面心立方晶体 s 态电子的能带表达式

2）计算沿 Δ 轴的 E~k 关系[Δ 轴也称 Γ-X 轴，Γ 点（000），X 点（π/a 0 0）]

3）把沿 Δ 轴能带画图表示，找出能带底和能带顶，计算能带宽度

4）求出能带底和能带顶电子的有效质量，并说明造成两者差别的原因

5）写出 Γ 点电子波函数和沿 Δ 轴电子波函数

解：

（1）（5分）面心立方原点原子的 12 个最近邻是：

(a, a, 0)，(a, -a, 0)，(-a, a, 0)，(-a, -a, 0)；

(a, 0, a)，(a, 0, -a)，(-a, 0, a)，(-a-a, 0,)；

(0, a, a)，(0, a, -a)，(0. -a, a)，(0, -a, -a)；

代入公式整理后可以给出 s 态电子的能带表达式：

$$E(k)=\varepsilon_j-J_0-4J_1(\cos k_xa\cos k_ya+\cos k_ya\cos k_za+\cos k_za\cos k_xa)$$

(2) (5 分)沿Δ轴 k_x: 0→π/a，$k_y=k_z=0$

$$E(k)=\varepsilon_j-J_0-4J_1(1+2\cos k_xa)$$

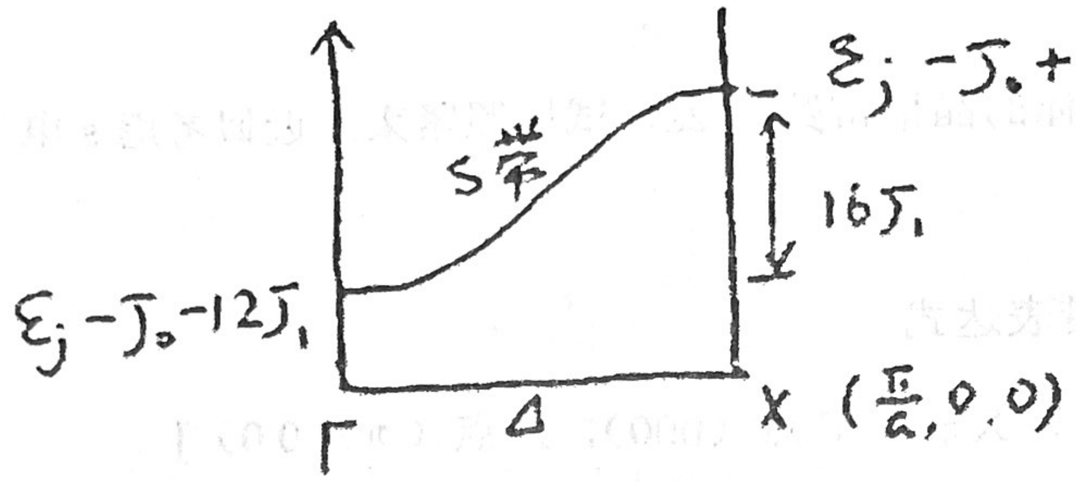
（3）（5分）如图所示，

带底为Γ点，$E(k)=\varepsilon_j-J_0-12J_1$

带顶为X点，$E(k)=\varepsilon_j-J_0+4J_1$

能带宽度为 $16J_1$

11



（4）（5分）有效质量为：$\dfrac{1}{m^*} = \dfrac{1}{\hbar^2}\dfrac{\partial^2 E}{\partial^2 k}$

带底处Γ点：$m^* = \dfrac{\hbar^2}{8J_1a^2}$；带顶处X点：$m^* = -\dfrac{\hbar^2}{8J_1a^2}$

有效质量表达的是电子所受晶体内场的相互作用，在带顶附近，电子所受晶体内场力大于电子所受外场力，并且和后者方向相反，在带底处有相反的效应。

（5）（5分）紧束缚近似下，晶体电子波函数为原子轨道波函数的线性组合——布洛赫和

$$\psi_s(\vec{k},\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n \exp(i\vec{k}\cdot\vec{R}_n)\varphi_s(\vec{r}-\vec{R}_n)$$

Γ点电子波函数为：

$$\psi_s(\vec{k},\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n \varphi_s(\vec{r}-\vec{R}_n)$$

沿Δ轴 $k_x=k_y=0$，$k_z: 0\to\pi/a$，故其电子波函数为：

$$\psi_s(\vec{k},\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n \exp(i\vec{k}_z\cdot\vec{R}_z)\varphi_s(\vec{r}-\vec{R}_n)$$

3.（15 分）设有一维晶体的电子能带可以写成：

$$E(k)=\frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{7}{8}-\cos ka+\frac{1}{8}\cos 2ka\right)$$

其中 a 是晶格常数。试求：

1）能带的宽度；

2）电子在波矢 k 状态的速度；

3）能带顶部和底部电子的有效质量。

解：

1）(5 分) 能带的宽度

能带底部：$E(0)=0$

能带顶部：$E(\frac{\pi}{a})=\frac{2\hbar^2}{ma^2}$

能带宽度：$\Delta E=E(\frac{\pi}{a})-E(0)=\frac{2\hbar^2}{ma^2}$

2）(5 分) 电子在 k 状态的速度

$$v(k)=\frac{1}{\hbar}\frac{dE(k)}{dk}=\frac{\hbar}{ma}\left(\sin ka-\frac{1}{4}\sin 2ka\right)$$

3）(5 分) 能带顶部和底部电子的有效质量

$$m^*(k)=\hbar^2/\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}=m/\left(\cos ka-\frac{1}{2}\cos 2ka\right)$$

$$m^*(0)=2m$$

$$m^*(\frac{\pi}{a})=-\frac{2}{3}m$$

13