学院________ 姓名________ 学号________ 任课老师________ 选课号________

……密……封……线……以……内……答……题……无……效……

电子科技大学二零一 一 至二零一二 学年第 二 学期期____考试

固体物理 课程考试题 ___卷 （120 分钟） 考试形式： ____ 考试日期

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

一	二	三	四	五	六	七	八	九	十	合计

一、填空（每题 1 分，共 25 分）

1、半导体材料 Si 具有金刚石型晶体结构，晶格常数为 a，其配位数为 4 。一个惯用元胞（结晶学元胞）内的原子数 8 。属于 fcc 布喇菲格子。写出其初基元胞（固体物理学元胞）的基矢 $\vec{a}_1=\frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k})$，$\vec{a}_2=\frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{k})$，$\vec{a}_3=\frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j})$。晶格振动色散关系中 3 支声学波， 3 支光学波。

2、简立方结构如果晶格常数为 a，其倒格子元胞基矢为是 $\vec{b}_1=\frac{2\pi}{a}\vec{i}$，$\vec{b}_2=\frac{2\pi}{a}\vec{i}$，$\vec{b}_3=\frac{2\pi}{a}\vec{k}$ 。在倒格子空间中是 sc 结构，第一布里渊区的形状为 立方体 ，体积为 （2π）$^3/a^3$ 。

3、某元素晶体的结构为体心立方布喇菲格子，其格点面密度最大的晶面的密勒指数 （110） ，并求出该晶面系相邻晶面的面间距 $\sqrt{2}a/2$。（设其晶胞参数为 a）。

4、声子遵从 玻色 分布，温度为 T 频率为 ω 的平均声子数为 $\bar{n}=\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$。一个声子的能量为 $\hbar\omega$，动量为 $\hbar k$ ，当声子与其它粒子互作用时，遵从 能量 和 准动量 守恒。

5、根据三个基矢的大小和夹角的不同，十四种布喇菲格子可归属于 七 大晶系，其中当 $a=b=c$，$\alpha=\beta=\gamma=90^{\circ}$ 时称为 立方 晶系，该晶系的布喇菲格子有 sc bcc fcc 。

学院__________ 姓名__________ 学号__________ 任课老师__________ 选课号__________

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

二、简答（每题 5 分，共 25 分）

1、画出以下晶向或晶面：(211) $(1\bar{1}2)$ $(11\bar{1})$ $[\bar{1}01]$ $[112]$

略

2、温度一定时，一个光学波的声子数目多，还是声学波的声子数目多？

答：声子遵从玻色分布，一个格波的平均声子数 $\bar{n}=\dfrac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$ 。无论一维、二维和三维简式和复式晶体，其格波角频率而言，由于光学波的角频率 ω_o 大于声学波的角频率 ω_A，所以声学波的平均声子数比光学波多。

3、晶体热容理论中，爱因斯坦模型和德拜模型各采用了什么简化假设？得出的结果与实验是否符合？

答：爱因斯坦模型：假设晶体中每个原子以相同频率 ω 作独立的简谐振动。

德拜模型：假设晶体是各向同性的连续介质，其色散关系为 ；

格波存在截止频率 $0\sim\omega_D$；

晶体的初基元胞数 N，元胞内原子数 s =1 (布喇菲格子)。

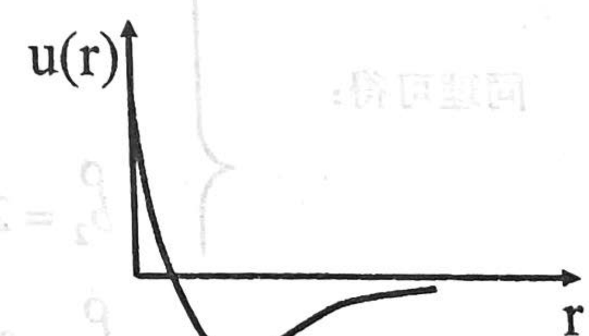
- 高温时爱因斯坦模型德拜模型与实验结果符合 $c_V=3N_0k$
- 低温时 爱因斯坦模型中比热 随温度的下降速度比实验数据 T^3 快。
- 德拜模型结果与实验曲线符合 $c_{VD}=cT^3$

4、写出晶体结合的互作用势和互作用力的一般表达式，画出二者随粒子间距 r 的变化规律图，并解释之。

晶体的结合由于粒子间吸引、排斥达到平衡

两粒子间的互作用势 $u(r)=-\dfrac{a}{r^m}+\dfrac{b}{r^n}$

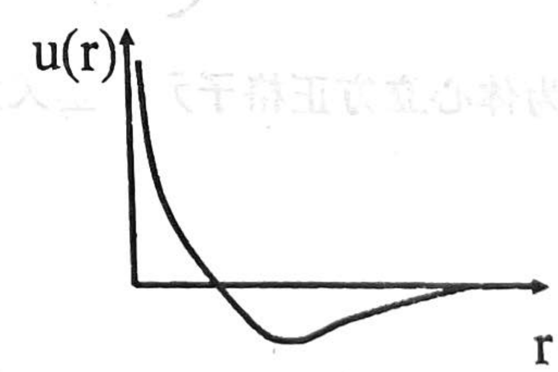
两粒子间的互作用力 $f(r)=-\dfrac{\partial u(r)}{\partial r}$



当 $r<r_0$ 斥力大于引力

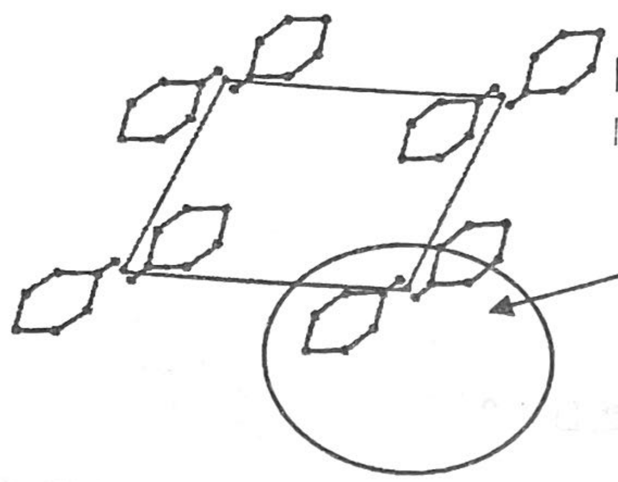
当 $r=r_0$ 平衡位置 斥力=引力

当 $r>r_0$ 斥力小于引力



15

5、简述空间点阵学说。按照空间点阵学说，指出如下的晶体结构的基元，画出所对应的空间点阵。



简述空间点阵学说晶体内部结构，用基元代表原子（离子）|，用格点代表基元，格点在空间作有规律的、周期性的无限分布。|点阵

晶体结构＝基元＋空间点阵

基元如图标识，空间点阵为斜方格子

三、综合应用（1 小题 15 分、2 小题 20 分，3 小题各 20 分，共 50 分）

1、面心立方的晶格常数为 a，（1）试证面心立方的倒格子为体心立方；（2）倒格子体心立方的晶格常数；（3）面心立方第一布里渊区的体积。

解：（1）　面心立方初基元胞基矢：$\vec{a}_1=\frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k})$

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

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

初基元胞体积：$\Omega=\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)=\frac{1}{4}a^3$

倒格子元胞基矢：

同理可得：
$$\begin{cases}\vec{b}_1=2\pi\dfrac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\Omega}=\dfrac{2\pi}{a^3/4}\begin{vmatrix}\vec{i} & \vec{j} & \vec{k}\\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2}\\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0\end{vmatrix}=\dfrac{2\pi}{a}\left(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}\right)\\ \vec{b}_2=2\pi\dfrac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\Omega}=\dfrac{2\pi}{a}(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k})\\ \vec{b}_3=2\pi\dfrac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\Omega}=\dfrac{2\pi}{a}\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right)\end{cases}\qquad(1)$$

因为体心立方正格子元胞基矢为：
$$\begin{cases}\vec{a}_1=\dfrac{a}{2}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})\\ \vec{a}_2=\dfrac{a}{2}(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k})\\ \vec{a}_3=\dfrac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k})\end{cases}$$

16

（2）

比较（1）与（2）式，两者只差一常数公因子，说明面心立方的倒格子为体心立方。

（2）倒格子为体心立方的晶格常数为倒格子元胞的边长等于 $\frac{4\pi}{a}$；

（3） 面心立方第一布里渊区体积 = 倒格子元胞体积 $\Omega^* = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} = \frac{(2\pi)^3}{a^3/4} = \frac{32\pi^3}{a^3}$

2、设有一长度为 L 的一价正负离子构成的一维晶格，正负离子间距为 a，正负离子的质量分别为 m_+ 和 m_-，最近两离子的互作用势为

$$u(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{b}{r^n}$$

（1）力常数 β；

（2）一维晶格色散关系为 $$\omega_{\pm}^2 = \frac{\beta}{m_+ m_-}\left\{(m_+ + m_-) \pm \left[(m_+ + m_-)^2 - 4m_+ m_- \sin^2 qa\right]^{\frac{1}{2}}\right\}$$

求 q=0 时光学波的频率 ω_0；

（3）长声学波的波速。

解：（1） $$\beta = \left[\frac{d^2 u(r)}{dr^2}\right]_{r=a}$$

（2） $$\omega_0 = \left[\frac{2\beta(m_+ + m_-)}{m_+ m_-}\right]^{\frac{1}{2}}$$

(3)

$$q \to 0 \qquad \sin qa \approx qa$$

$$\omega_- = 2a\sqrt{\frac{\beta}{2(m_+ + m_-)}}\, q$$

$$v_p = 2a\sqrt{\frac{\beta}{2(m_+ + m_-)}}$$

3、设一长度为 L 的一维布拉菲晶格，原子质量为 m，间距为 a，色散关系为 $\omega=\frac{2}{a}(\frac{A}{m})^{1/2}\left|\sin(\frac{qa}{2})\right|$，求：（1）格波的态密度；（2）晶格的热容 c_v（列出积分表达式）；（3）如果采用德拜模型，求极低温时的热容 c_{vD}（$\int_0^\infty \frac{e^x x^2}{\left(e^x-1\right)^2}dx=\frac{\pi^2}{3}$）。

解：（1）

$$g(\omega)d\omega=2\frac{L}{2\pi}dq \qquad g(\omega)=\frac{Na}{\pi}\frac{dq}{d\omega}$$

由 $\omega=\frac{2}{a}(\frac{A}{m})^{1/2}\left|\sin(\frac{qa}{2})\right|$，

$$d\omega=\frac{2}{a}(\frac{A}{m})^{1/2}\cos\frac{qa}{2}\cdot\frac{a}{2}dq=(\frac{A}{m})^{1/2}\left[1-\sin^2\frac{qa}{2}\right]^{1/2}dq$$

$$=(\frac{A}{m})^{1/2}\left[1-[\frac{\omega}{\frac{2}{a}(\frac{A}{m})^{1/2}}]^2\right]^{1/2}dq=\frac{a}{2}\left[(\frac{2}{a})^2(\frac{A}{m})-\omega^2\right]^{1/2}dq$$

$$g(\omega)=\frac{Na}{\pi}\frac{dq}{d\omega}=\frac{Na}{\pi}\cdot\frac{2}{a}\left[(\frac{2}{a})^2(\frac{A}{m})-\omega^2\right]^{-1/2}=\frac{2N}{\pi}\left[(\frac{2}{a})^2(\frac{A}{m})-\omega^2\right]^{-1/2}$$

（2）$$C_v=\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V=\int_0^{\omega_m}k_B\left(\frac{\eta\omega}{k_BT}\right)^2\frac{e^{\eta\omega/k_BT}}{\left(e^{\eta\omega/k_BT}-1\right)^2}\cdot\frac{2N}{\pi}\left[(\frac{2}{a})^2(\frac{A}{m})-\omega^2\right]^{-1/2}d\omega$$

（3）采用德拜模型

$$g(\omega)d\omega=2\frac{L}{2\pi}dq=\frac{L}{\pi}dq$$

$$\omega=v_pq \qquad \frac{dq}{d\omega}=\frac{1}{v_p}$$

$$g(\omega)=\frac{L}{\pi}\frac{dq}{d\omega}=\frac{L}{\pi v_p}$$

由公式得

18

$$C_v=\int_0^{\omega_m}k_B\left(\frac{\eta\omega}{k_BT}\right)^2\frac{e^{\eta\omega/k_BT}}{\left(e^{\eta\omega/k_BT}-1\right)^2}\frac{L}{\pi v_p}d\omega$$

$$=\frac{k_B^2L}{\pi v_p\eta}T\int_0^{\infty}x^2\frac{e^x}{\left(e^x-1\right)^2}dx$$

$$=\frac{k_B^2L}{\pi v_p\eta}T\frac{\pi^2}{3}=\frac{k_B^2L\pi}{3v_p\eta}T$$

令 $x=\dfrac{\eta\omega}{k_BT}$， $x_D=\dfrac{\eta\omega_D}{k_BT}=\dfrac{\theta_D}{T}$

低温 $T<<\theta_D, x_D\to\infty$

$$C_v=\int_0^{\omega_m}k_B\left(\frac{\eta\omega}{k_BT}\right)^2\frac{e^{\eta\omega/k_BT}}{\left(e^{\eta\omega/k_BT}-1\right)^2}\frac{L}{\pi v_p}d\omega$$

$$=\frac{k_B^2L}{\pi v_p\eta}T\int_0^{\infty}x^2\frac{e^x}{\left(e^x-1\right)^2}dx$$

$$=\frac{k_B^2L}{\pi v_p\eta}T\frac{\pi^2}{3}=\frac{k_B^2L\pi}{3v_p\eta}T$$