**电子科技大学二零零 六 至二零零 七 学年第 二 学期期 末 考试**

固体电子学 课程考试题 卷 （ 分钟） 考试形式： 考试日期 200 7 年 7 月 日

课程成绩组成：平常 20 分， 期中 10 分， 实验 0 分， 期末 70 分

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 一 | 二 | 三 | 四 | 五 | 六 | 七 | 八 | 九 | 十 | 合计 |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |

1. 填空（共30分，每空2分）
2. 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括8个原子，其固体物理学原胞基矢可表示，, 。假设其结晶学原胞的体积为a3，则其固体物理学原胞体积为。

2． 由完全相同的一种原子组成的格子，每一个格点周围环境相同称为布拉菲格子； 倒格子基矢与正格子基矢知足，由倒格子基矢（*l1*, *l2*, *l3*为整数）,组成的格子，是正格子的傅里叶变换，称为倒格子格子；由若干个布拉菲格子套构而成的格子称为复式格子。最多见的两种原胞是固体物理学原胞和结晶学原胞。

3．声子是格波的能量量子，其能量为ħω，动量为ħq。

二．问答题（共30分，每题6分）

1.晶体有哪几种结合类型？简述晶体结合的一样性质。

答：离子晶体，共价晶体，金属晶体，分子晶体及氢键晶体。

晶体中两个粒子之间的彼此作使劲或彼此作用势与两个粒子的距离之间遵从相同的定性规律。

2. 晶体的结合能, 晶体的内能, 原子间的彼此作用势能有何区别?

答：自由粒子结合成晶体进程中释放出的能量，或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；原子的动能与原子间的彼此作用势能之和为晶体的内能；在0K时，原子还存在零点振动能，但它与原子间的彼此作用势能的绝对值相较小很多，因此，在0K时原子间的彼此作用势能的绝对值近似等于晶体的结合能。

3.什么是热缺点？简述肖特基缺点和弗仑克尔缺点的特点。

答：在点缺点中，有一类点缺点，其产生和平稳浓度都与温度有关，这一类点缺点称为热缺点，热缺点老是在不断地产生和复合，在必然地温度下热缺点具有必然地平稳浓度。肖特基缺点是晶体内部格点上的原子（或离子）通过接力运动到表面格点的位置后在晶体内留下空位；弗仑克尔缺点是格点上的原子移到格点的间隙位置形成间隙原子，同时在原先的格点位置留下空位，二者成对显现。

4.简述空穴的概念及其性质.

答：关于状态K空着的近满带，其总电流就犹如一个具有正电荷e的粒子，以空状态K的电子速度所产生的，那个空的状态称为空穴；空穴具有正有效质量，位于满带顶周围，空穴是准粒子。

5.依照量子理论简述电子对照热的奉献，写出表达式，并说明什么缘故在高温时能够不考虑电子对照热的奉献在低温时必需考虑？

答：在量子理论中，大多数电子的能量远远低于费米能量EF ，由于受到泡利不相容原理的限制，不能参与热激发，只有在EF周围约~KBT范围内电子参与热激发，对金属的比热有奉献。CVe=γT

在高温时CVe相对CV*l* 来讲很小可忽略不计；在低温时，晶格振动的比热按温度三次方趋近于零，而电子的比热与温度一次方正比，随温度下降转变缓慢，现在电子的比热能够和晶格振动的比热相较较，不能忽略。

三.综合应用(共40分)

1.(10分)已知半导体InP具有闪锌矿结构,In,P两原子的距离为d=2Å,试求：（1）晶格常数；(2)原胞基矢及倒格子基矢；（3）密勒指数为（1，1，0）晶面的面间距，和In(1,1,0)晶面与P（1，1，1）晶面的距离。

解：（1）闪锌矿结构是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，因此对角线长*l=4d=8Å*

又

(2) 面心基矢：，,  倒格子基矢：



（3）晶胞倒格矢：

原胞倒格矢：比较原胞基矢和晶胞基矢，得



因为In和P的（111）晶面的法线方向即对角线方向，因此In和P在那个方向的面间距=，也能够说是 即；或=

2. (15分)设有某个一维简单格子，晶格常数为a,原子质量为M，在平稳位置周围两原子间的互作用势可表示为： 式中η和ξ都是常数，只考虑最近邻原子间的彼此作用，试求：（1）在简谐近似下，求出晶格振动的色散关系；（2）求出它的比热。（提示：

解：（1）

1. (15分)用紧束缚近似写出二维正方点阵最近临近似下的s电子能带的能量表达式，并计算能带宽度及带底电子和带顶空穴的有效质量。

**一、选择题（共30分，每题3分）**

目的:考核大体知识。

1、晶格常数为的面心立方晶格，原胞体积等于 D 。



A. B. C. D.



2、体心立方密集的致密度是 C 。

A. B. C. D.

3、描述晶体宏观对称性的大体对称元素有 A 。

A. 8个 B. 48个 个 个

4、晶格常数为的一维双原子链，倒格子基矢的大小为 D 。A. B. C. D.



五、晶格常数为的简立方晶格的(110)面间距为 A 。

A.  B.  C.  D. 

六、晶格振动的能量量子称为 C

A. 极化子 B. 激子 C. 声子 D. 光子

7、由N个原胞组成的简单晶体，不考虑能带交叠，则每一个s能带可容纳的电子数为 C 。 A. N/2 B. N C. 2N D. 4N

八、三维自由电子的能态密度，与能量的关系是正比于 C 。A. B. C. D.



九、某种晶体的费米能决定于

A. 晶体的体积 B. 晶体中的总电子数 C. 晶体中的电子浓度 D. 晶体的形状

10、电子有效质量的实验研究方式是 C 。A. X射线衍射 B. 中子非弹性散射 C. 回旋共振 D. 霍耳效应

**二、简答题（共20分，每小题5分）**

1、波矢空间与倒易空间有何关系? 什么缘故说波矢空间内的状态点是准持续的?

波矢空间与倒格空间处于统一空间, 倒格空间的基矢别离为, 而波矢空间的基矢别离为, N1、N2、N3别离是沿正格子基矢方向晶体的原胞数量.



倒格空间中一个倒格点对应的体积为

,



波矢空间中一个波矢点对应的体积为

,



即波矢空间中一个波矢点对应的体积, 是倒格空间中一个倒格点对应的体积的1/N. 由于N是晶体的原胞数量，数量庞大，因此一个波矢点对应的体积与一个倒格点对应的体积相较是极为微小的。 也确实是说，波矢点在倒格空间看是极为浓密的。因此, 在波矢空间内作求和处置时，可把波矢空间内的状态点看成是准持续的。

2、简述处置固体比热的德拜模型的大体起点和要紧结论。

目的:考查对晶格热容量子理论的把握。

答案：德拜把晶格看成弹性介质来处置，晶格振动采取格波的形式，它们的频率值是不完全相同的而频率有一个散布。同时，他假设频率大于某一个频率的短波事实上是不存在的，是格波振动频率的上限。固体比热由德拜模型的结果，在高温时知足杜隆-珀替定律，在低温时知足于与成正比，这正是德拜定律。 （6分）

3、什么缘故说原胞中电子数量若为奇数，相应的晶体具有金属导电性

目的:考核电子在能带中的填充及固体的分类。

答案: 一条能带许诺有2倍原胞数量的电子占据，原胞中电子的数量为奇数必有未填满的能带，有被部份填充的能带结构的晶体具有导电性。

4、什么是回旋共振?它有什么用途？

目的:考核晶体中电子在磁场中运动规律的把握。

答案：在恒定外磁场的作用下，晶体中的电子（或空穴）将做螺旋运动，回旋频率。若在垂直磁场方向加上频率为的交变电场，当，交变电场的能量将被电子共振吸收，那个现象称成为回旋共振。用途：确信电子的有效质量；确信晶体的能带结构。 （6分）

**三、计算题（共20分，每小题10分）**

一、已知某晶体两相邻原子间的互作用能可表示成



求（1）晶体平稳时两原子间的距离；（2）平稳时的二原子间的结合能。

目的:考查对固体结合的把握。

解：(1)平稳时 

得   （6分）

(2)平稳时 把r0表示式代入u(r)

u(r0)=－=－ （4分）

二、平面正三角形晶格，相邻原子间距是*a。*试求正格子基矢和倒格子基矢，并画出第一布里渊区。

目的：考查对布里渊区的明白得。

解：正格子基矢

 （4分）

倒格子基矢

 （6分）

第一布里渊区由，-，，-，+ ，--的垂直平分面所夹的区域，平面图中由正六边形所围成。

**四、计算题（共30分，每小题15分）**

一、计算由N个质量为m，间距为a的相同原子组成的一维单原子链的色散关系，说明存在截止频率的意义。

原子的运动方程：

**** （5分）

****

****

因为 ****

因此，有一最高振动频率限制，又称截止频率**，**表示只有频率在0~之间的格波才能在晶体中传播，晶体仿佛一个低通滤波器。 （5分）

二、一维单原子链，原子间距*a*，总长度为*L*＝*Na*，（1）用紧束缚近似方式求出与原子s态能级相对应的能带函数；（2） 求出其能带密度函数*N*(*E*) 的表达式。

目的:考查对所学知识的综合运用。

能带函数：

只计入最近邻格点原子的彼此作历时，s态原子能级相对应的能带函数表示为



关于一维情形, 任意选取一个格点为原点, 有两个最近邻的格点，坐标为：a和－a，因此



--------（1） （8分）

能带密度函数的计算





关于一维格子，波矢为*+k*与-*k*具有相同的能量，另外考虑到电子自旋有2种取向，在dk区间的状态数



能带密度：

-------------（2） （7分）

**一、选择题（共30分，每题3分）**

目的:考核大体知识。

1、晶格常数为的体心立方晶格，原胞体积等于 C 。



A. B. C. D.



2、面心立方密集的致密度是 B 。

A. B. C. D.

3、表征晶格周期性的概念是 A 。

A. 原胞或布拉伐格子 B. 原胞或单胞 C. 单胞或布拉伐格子 D. 原胞和基元

4、晶格常数为的一维单原子链，倒格子基矢的大小为 D 。A. B. C. D.



五、晶格常数为的简立方晶格的(010)面间距为 A 。

A.  B.  C.  D. 

六、晶格振动的能量量子称为 C

A. 极化子 B. 激子 C. 声子 D. 光子

7、由N个原胞组成的简单晶体，不考虑能带交叠，则每一个s能带可容纳的电子数为 C 。 A. N/2 B. N C. 2N D. 4N

八、二维自由电子的能态密度，与能量的关系是正比于 B 。A. B. C. D.



九、某种晶体的费米能决定于 C 。

A. 晶体的体积 B. 晶体中的总电子数 C. 晶体中的电子浓度 D. 晶体的形状

10、晶体结构的实验研究方式是 A 。

A. X射线衍射 B. 中子非弹性散射 C. 回旋共振 D. 霍耳效应

**二、简答题（共20分，每小题5分）**

一、波矢空间与倒格空间（或倒易空间）有何关系? 什么缘故说波矢空间内的状态点是准持续的?

波矢空间与倒格空间处于统一空间, 倒格空间的基矢别离为, 而波矢空间的基矢别离为, N1、N2、N3别离是沿正格子基矢方向晶体的原胞数量.



倒格空间中一个倒格点对应的体积为

,



波矢空间中一个波矢点对应的体积为

,



即波矢空间中一个波矢点对应的体积, 是倒格空间中一个倒格点对应的体积的1/N. 由于N是晶体的原胞数量，数量庞大，因此一个波矢点对应的体积与一个倒格点对应的体积相较是极为微小的。 也确实是说，波矢点在倒格空间看是极为浓密的。因此, 在波矢空间内作求和处置时，可把波矢空间内的状态点看成是准持续的。

2、在甚低温下, 德拜模型什么缘故与实验相符?

在甚低温下, 不仅光学波得不到激发, 而且声子能量较大的短声学格波也未被激发, 取得激发的只是声子能量较小的长声学格波. 长声学格波即弹性波. 德拜模型只考虑弹性波对热容的奉献. 因此, 在甚低温下, 德拜模型与事实相符, 自然与实验相符.

3、说明导带、满带、价带和带隙

关于导体：电子的最高填充能带为不满带，称该被部份填充的最高能带为导带，在电场中具有被部份填充的能带结构的晶体具有导电性。

关于绝缘体、半导体：称电子占据了一个能带中所有状态的允带为满带；没有任何电子占据（填充）的能带，称为空带；最下面的一个空带称为导带；导带以下的第一个满带，或最上面的一个满带称为价带；两个能带之间，不许诺存在的能级宽度，称为带隙。

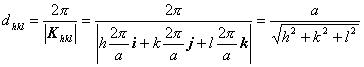
4、金属自由电子论与经典理论对金属热电子发射的功函数的微观说明有何不同，什么缘故？

经典理论以为，金属热电子发射时，需克服的势垒高度即功函数为 ，其中是真空势垒；金属自由电子论以为，金属热电子发射时，需克服的势垒高度即功函数为，是电子气的费米能级。其不同源于经典理论以为，电子是经典粒子，服从玻尔兹曼统计理论，在基态时，电子能够全数处于基态，因此热电子发射时，电子需克服的势垒高度是。而金属自由电子理论以为，电子是费米粒子，服从费米-狄拉克统计理论，在基态时，电子能够由基态能级填充至，因此热电子发射时，电子需克服的势垒高度是。某金刚石结构晶体，其立方单胞体积为Ω，试求其布里渊区体积。

**三、简答题（共20分，每小题10分）**

1、设晶格常数为a, 求立方晶系密勒指数为(hkl)的晶面族的面间距。

立方晶系密勒指数为(hkl)的晶面族的面间距



2、平面正三角形晶格，相邻原子间距是*a。*试求正格子基矢和倒格子基矢，并画出第一布里渊区。

目的：考查对布里渊区的明白得。

解：正格子基矢

 (4分)

倒格子基矢

 (6分)

第一布里渊区由，-，，-，+ ，--的垂直平分面所夹的区域，平面图中由正六边形所围成。

**四、简答题（共30分，每小题15分）**

1、考虑一双原子链的晶格振动，链上最近邻原子间力常数交织的等于和，令两种原子质量相同，且最近邻间距为，求在和处的。并粗略画超卓散关系。

目的:考查对晶格振动的把握. (12分)

答案:

a/2 C 10c

，



将代入上式有

 (10分)

是U，v的线性齐次方程组，存在非零解的条件为

 =0，解出



当K=0时， 当K=时

   (5分)

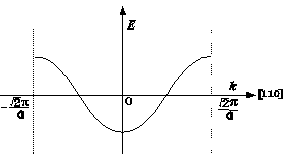
二、关于晶格常数为a的简立方晶体，（1）以紧束缚近似求非简并s态电子的能带；（2） 画出第一布里渊区[110]方向的能带曲线, 求出带宽。

目的:考查对能带理论的把握

答案：紧束缚近似非简并*s*态电子的能带（8分）



（2）第一布里渊区[*110*]方向的能带曲线



[110]方向的能带曲线，    带宽为8*J*s 。 （7分）

----**填空题 （共20分，每空2分）**

目的:考核大体知识。

一、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。

二、晶格常数为的体心立方晶格，原胞体积为  。

3、晶体的对称性可由 32 点群表征，晶体的排列可分为 14 种布喇菲格子，其中六角密积结构 不是 布喇菲格子。

4、两种不同金属接触后,费米能级高的带 正 电，对导电有奉献的是 费米面周围 的电子。

五、固体能带论的三个大体近似：绝热近似 、\_单电子近似\_、\_周期场近似\_。

1. **判定题 （共10分，每小题2分）**

目的:考核大体知识。

一、解理面是面指数高的晶面。 （×）

二、面心立方晶格的致密度为 （ ×）

3、二维自由电子气的能态密度 。 （×）

4、晶格振动的能量量子称为声子。 （ √）

五、 长声学波不能致使离子晶体的宏观极化。 （ √）

1. **简答题（共20分，每小题5分）**

一、波矢空间与倒格空间（或倒易空间）有何关系? 什么缘故说波矢空间内的状态点是准持续的?

波矢空间与倒格空间处于统一空间, 倒格空间的基矢别离为, 而波矢空间的基矢别离为, N1、N2、N3别离是沿正格子基矢方向晶体的原胞数量.



倒格空间中一个倒格点对应的体积为

,



波矢空间中一个波矢点对应的体积为

,



即波矢空间中一个波矢点对应的体积, 是倒格空间中一个倒格点对应的体积的1/N. 由于N是晶体的原胞数量，数量庞大，因此一个波矢点对应的体积与一个倒格点对应的体积相较是极为微小的。 也确实是说，波矢点在倒格空间看是极为浓密的。因此, 在波矢空间内作求和处置时，可把波矢空间内的状态点看成是准持续的。

2、在甚低温下, 德拜模型什么缘故与实验相符?

在甚低温下, 不仅光学波得不到激发, 而且声子能量较大的短声学格波也未被激发, 取得激发的只是声子能量较小的长声学格波. 长声学格波即弹性波. 德拜模型只考虑弹性波对热容的奉献. 因此, 在甚低温下, 德拜模型与事实相符, 自然与实验相符.

3、说明导带、满带、价带和带隙

关于导体：电子的最高填充能带为不满带，称该被部份填充的最高能带为导带，在电场中具有被部份填充的能带结构的晶体具有导电性。

关于绝缘体、半导体：称电子占据了一个能带中所有状态的允带为满带；没有任何电子占据（填充）的能带，称为空带；最下面的一个空带称为导带；导带以下的第一个满带，或最上面的一个满带称为价带；两个能带之间，不许诺存在的能级宽度，称为带隙。

4、金属自由电子论与经典理论对金属热电子发射的功函数的微观说明有何不同，什么缘故？

经典理论以为，金属热电子发射时，需克服的势垒高度即功函数为 ，其中是真空势垒；金属自由电子论以为，金属热电子发射时，需克服的势垒高度即功函数为，是电子气的费米能级。其不同源于经典理论以为，电子是经典粒子，服从玻尔兹曼统计理论，在基态时，电子能够全数处于基态，因此热电子发射时，电子需克服的势垒高度是。而金属自由电子理论以为，电子是费米粒子，服从费米-狄拉克统计理论，在基态时，电子能够由基态能级填充至，因此热电子发射时，电子需克服的势垒高度是。某金刚石结构晶体，其立方单胞体积为Ω，试求其布里渊区体积。

**三、计算题（共20分，每小题10分）**

一、已知某晶体两相邻原子间的互作用能可表示成



求（1）晶体平稳时两原子间的距离；（2）平稳时的二原子间的结合能。

目的:考查对固体结合的把握。

解：(1)平稳时 

得   （6分）

(2)平稳时 把r0表示式代入u(r)

u(r0)=－=－ （4分）

二、平面正三角形晶格，相邻原子间距是*a。*试求正格子基矢和倒格子基矢，并画出第一布里渊区。

目的：考查对布里渊区的明白得。

解：正格子基矢

 （4分）

倒格子基矢

 （6分）

第一布里渊区由，-，，-，+ ，--的垂直平分面所夹的区域，平面图中由正六边形所围成。

3、计算由N个质量为m，间距为a的相同原子组成的一维单原子链的色散关系，说明存在截止频率的意义。

原子的运动方程：

**** （5分）

****

****

因为 ****

因此，有一最高振动频率限制，又称截止频率**，**表示只有频率在0~之间的格波才能在晶体中传播，晶体仿佛一个低通滤波器。 （5分）