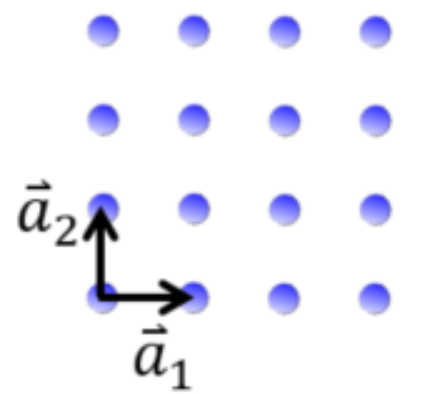
**4月7日习题答案**

一、判断题

声子是晶体中声波振动变换的能量单元。（×）

二、简答题

1、图中为一个二维晶格，晶格的原基矢量为，，讨论当两个原基矢量的大小比例和夹角α发生变化时，二维晶格的原胞和单胞怎样变化，单胞中格点数怎样变化?



答：（1）=，α=90°时：原胞与单胞相同，都为简单正方，包含1个格点。

（2）=，α=60°或者120°时：原胞为有一个角为60°的菱形，包含1个格点。单胞为正六角形，包含3个格点。

（3）=，α≠90°，60°，120°时：原胞为菱形，包含1个格点。单胞为中心长方形，包含2个格点。

（4）≠，α=90°时：原胞与单胞相同，都为长方形，包含1个格点。

（5）≠，α≠90°时：原胞与单胞相同，都平行四边形，包含1个格点。

2、一个晶体的原基矢量是: 。求原胞的体积，倒基矢量和倒原胞体积。

答： Ω=（×）·=

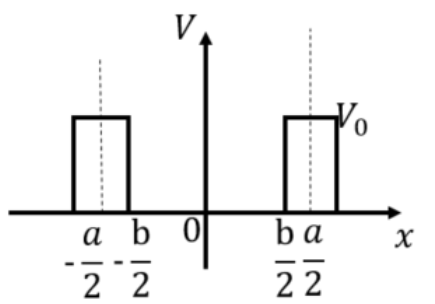
=

=

==π

==4.

3、一维单原子链晶体，原子间距为a，其电势分布具有晶格的周期性，如图所示：V(x)=0,＜x＜；V(x)=V0 ,＜x＜,＜x＜;根据周期性函数傅里叶变换：V(x)=；求:n=0，n=1，n=2，时的求和系数。



答：根据题意得V(x)=，记A=。

题目为一位单原子链，倒格子基矢为==

所以倒格子为=n。

题中的V(x)=→V(x)=(k为常数)

在一个周期内积分=

=

=

从而时，G==

=()

①n=0时：，G

②n=1时：=，G

③n=2时：=，G.

4、指出Si、GaN、InP、SiC、CdS的晶体结构和对应的布拉伐格子。

答：Si，金刚石结构，面心立方格子

GaN，纤锌矿结构，六角格子（当前做器件）；闪锌矿结构，面心立方格子

InP，闪锌矿结构，面心立方格子

SiC，同质多相变体（200多种），常见的有3C-SiC（b-SiC ），闪锌矿结构，面心立方格子

2H-SiC（ a-SiC(70余种变体)），纤锌矿结构，六角格子

4H-SiC；6H-SiC，六角结构

CdS,闪锌矿结构，面心立方格子；纤锌矿结构，六角格子。

5、有一块纤锌矿结构的三维晶体，原子个数为4e20；这个晶体中包含多少原胞，一个原胞中有多少原子，一个原胞中原子的总自由度是多少。此晶体中格波支数是多少，有多少声学波，声学波中有多少横波，多少纵波？有多少光学波，光学波中有多少横波，多少纵波？

答：晶体包含原胞数个，

一个原胞中有4个原子，

一个原胞中原子的总自由度是12。

格波支数是12，

3支声学波，声学波中有1支纵波，2支横波；

9支光学波，光学波中有有3支纵波，6支横波。

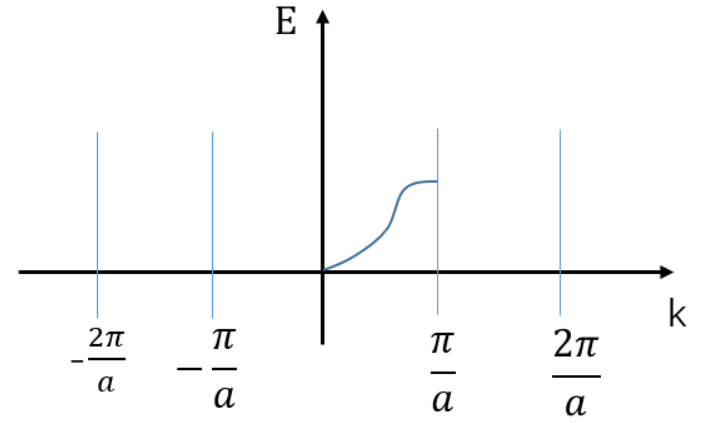
6、在掺有P原子和B原子的Si晶体中，P原子和B原子在Si中是替位式存在的，指出晶体中可能存在点缺陷。

答：Si原子间隙，Si原子空位，P原子杂质，B原子杂质。

7、在一块GaN晶体中指出有可能存在的线缺陷。

答：刃位错（棱位错）、螺位错、混合位错。

8、有一维晶体，晶格常数为a。在某个能带中，在0~范围的E~k关系如图所示，请画出~范围内其他范围的E~k曲线。



答：注意曲线的光滑和对称性。

