

呼吸

第 1 页 共 3 页

11. 一维周期势场中电子的波函数应当满足布洛赫定理。如果晶格常数为  $a$ , 电子的波函数为

$$\psi_k(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} (-i)^m f(x - ma), \text{ 那么电子处该态的波矢 } k = \underline{\hspace{2cm}}。$$

12. 图中所示 A、B 两直线分别是两晶面在  $Y-Z$  平面上的投影, 请写出它们的晶面指数。

A 面:                     ,

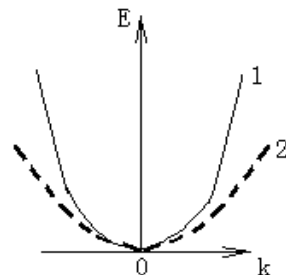
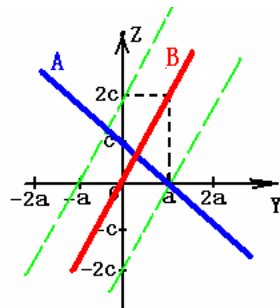
B 面:                     。

13. 准自由电子模型将    作为零级近似,

$$\text{作为微扰, 其结果是 } \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + \sum_{k'} \frac{V_n^* \delta_{k, k' - \frac{2\pi n}{a}}}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik'x},$$

式中第一项代表的意义是   ; 第二项代表的意义是   。禁带产生的条件是  $k$                      , 禁带宽度  $E_g = \underline{\hspace{2cm}}$ 。

14. 有两种晶体, 其电子的能量和波矢的关系如图所示, 相应的有效质量为  $m_1^*(k)$  和  $m_2^*(k)$ 。那么,  $m_1^*(k)$              $m_2^*(k)$  (填“<”、“>”或“=”)。



## 二. 解释下列物理概念(16 分)

1. 晶向: 晶体的一个基本特点是具有方向性, 沿晶格的不同方向晶体性质不同。布拉维点阵的格点可以看成排列在一系列相互平行的直线系上, 这些直线系称为晶列。同一个格点可以形成方向不同的晶列, 每一个晶列定义了一个方向, 称为晶向。

2. 隧道效应: 隧道效应由微观粒子波动性所确定的量子效应, 又称势垒贯穿。考虑粒子运动遇到一个高于粒子能量的势垒, 按照经典力学, 粒子是不可能越过势垒的; 按照量子力学可以解出除了在势垒处的反射外, 还有透过势垒的波函数, 这表明在势垒的另一边, 粒子具有一定的概率贯穿势垒。

3. 简谐近似: 当原子在平衡位置附近微小振动, 将其看作是线性回复力作用下的简谐运动。

4. 紧束缚近似方法: 将在一个原子附近的电子看作受该原子势场的作用为主, 其他原子势场的作用看作微扰, 从而得到电子的原子能级和晶体中能带之间的相互关系的方法。

## 三. 简答题(18 分)

1. 简述长声学波与长光学波本质上有何差别。

答: 长光学支格波的特征是每个原胞内的不同原子做相对振动, 振动频率较高, 它包含了晶格振动频率最高的振动模式。长声学支格波的特征是原胞内的不同原子没有相对位移, 原胞做整体运动, 振动频率较低, 它包含了晶格振动频率最低的振动模式, 波速是一常数。任何晶体都存在声学支格波, 但简单晶格(非复式格子)晶体不存在光学支格波。

2. 解理面是晶面指数低的晶面还是晶面指数高的晶面? 给出理由。

答: 晶体容易沿解理面劈裂, 说明平行于解理面的原子层之间的结合力弱, 即平行解理面的原子层的间距大。因为面间距大的晶面族的指数低, 所以解理面是面指数低的晶面。

3. 对于晶格热容曲线 ( $C_v-T$ ), 当温度降到很低时, 爱因斯坦近似与实际情况偏差较大, 而

德拜近似却吻合的较好。试解释其原因。

答:按照爱因斯坦温度的定义,爱因斯坦模型的格波的频率大约为  $10^{13}\text{Hz}$ , 属于光学支频率。但光学格波在低温时对热容的贡献非常小, 低温下对热容贡献大的主要是长声学格波。也就是说爱因斯坦没考虑声学波对热容的贡献是爱因斯坦模型在低温下与实验存在偏差的根源。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, 得到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贡献。因此, 在甚低温下, 德拜模型与事实相符, 自然与实验相符。

## 20 试用能带论解释导体、半导体、和绝缘体的区别。

解: 晶体电子的状态由分立的原子能级分裂为能带, 电子填充能带的情况分为满带、不满带和空带, 对于半导体和绝缘体, 只存在满带和空带, 最高满带称价带, 最低满带称导带, 导带与价带之间的间隔称带隙, 一般绝缘体带隙较大, 半导体带隙较小。

对于导体, 出满带和空带外, 还存在不满带, 即导带。满带电子不导电, 而不满带中的电子参与导电。半导体的带隙较小, 价带电子受到激发后可以跃迁至导带参与导电, 绝缘体的带隙较大, 价电子须获得很大的能量才能激发, 故一般情况下, 不易产生跃迁现象。

## 2. 为什么说绝对零度和常温下电子平均动能十分相近?

解: 自由电子论只考虑电子的动能。在绝对零度时, 金属中的自由(价)电子, 分布在费密能级及其以下的能级上, 即分布在一个费密球内。在常温下, 费密球内部离费密面远的状态全被电子占据, 这些电子从格波获取的能量不足以使其跃迁到费密面附近或以外的空状态上, 能够发生能态跃迁的仅是费密面附近的少数电子, 而绝大多数电子的能态不会改变。也就是说, 常温下电子的平均动能与绝对零度时的平均动能一定十分相近。

## 四. 计算题 (25 分)

(10 分)1. 一束动能为  $1\text{keV}$  的电子通过一多晶金属箔产生衍射, 这种金属具有立方晶体结构, 原子间距为  $1\text{\AA}$ , 求:

- (1) 电子的德布罗意波长;
- (2) 第一级衍射极大的布喇格衍射角。

(15 分)2. 已知某简立方晶体的晶格常数为  $a$ , 其价电子的能带为

$$E(k) = A \cos k_x a \cos k_y a \cos k_z a + B, \text{ 式中 } A < 0.$$

- (1) 已测得带顶电子的有效质量  $m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2}$ , 试求参数  $A$ ;
- (2) 求能带宽度;
- (3) 求出  $k = (\frac{\pi}{2a}, 0, 0)$  时电子的速度。