

安徽大学 2011—2012 学年第 二 学期

《 固体物理 》(A 卷) 考试试题参考答案及评分标准

一、填空题 (每空 2 分, 共 30 分)

- 1、以下对称素 $1, 2, 3, 4, 6, i, m, \sigma, \bar{6}$ 中无需独立存在的是 3 和  $\bar{6}$ 。
- 2、3C-SiC 具有类金刚石结构, 则在其体现晶体对称性的一个单胞中包含 4 个 C 原子, 4 个 Si 原子。其晶格振动谱有 6 支色散关系曲线, 其中声学支色散关系曲线数目为 3, 光学支色散关系曲线数目为 3。
- 3、晶体的低温热容量有两部分主要贡献, 即晶格和电子。低温时, 电子热容量正比于温度一次方, 这是因为贡献主要来自于某一特定能量附近的电子, 该特定能量为 费米能。
- 4、固体的四种基本结合类型分别为离子性结合、共价性结合、金属性结合、范德瓦尔斯结合。
- 5、能带论的三个基本近似为 绝热近似、单电子近似、周期场近似。

二、简答题 (每小题 5 分, 共 20 分)

1、x 射线发射谱比较直接地反映了价电子能带的能态密度状况, 简要给出金属 Na, 具有能带交叠的金属 Mg 和非金属金刚石的 x 射线发射谱之间的主要区别。

答: 由于金属和非金属电子填充能级的区别, x 射线发射谱的高能量一端, 金属 Na 和 Mg 的谱是陡然下降的 (2 分), 非金属金刚石的谱是逐渐下降的 (2 分)。由于存在能带交叠, 金属 Mg 的谱存在两个明显的峰 (1 分)。

2、晶格热容的量子理论中, 德拜模型和爱因斯坦模型的基本假设分别是什么? 为什么温度越低, 德拜模型结果越准确?

答: 爱因斯坦模型假设晶体中所有的原子都以相同的频率 $\omega_0$ 振动; (1 分) 德拜模型提出以连续介质的弹性波来代表格波, 将布拉伐晶格看作是各向同性的连续介质, 并存在一个最大频率 $\omega_m$ 。(2 分)

在极低温度下, 晶体中只有长声学波能够被激发, 能够用弹性波来近似, 温度越低, 近似越准确, 因此温度越低, 德拜模型结果越准确。(2 分)

3、紧束缚模型下, 内层电子的能带与外层电子的能带相比较, 哪一个宽? 为什么?

答: 外层电子的能带较宽。(2 分) 根据紧束缚模型, 能带宽度决定于最近邻格点位置上电子波函数的重叠积分, 显然外层电子的波函数重叠更大, 因此其能带越宽。(3 分)

4、什么是布里渊散射和喇曼散射? 在两个声子碰撞产生另一个声子的三声子过程当中, 什么是正规过程和翻转过程?

答: 1、声学波对光子的非弹性散射称为布里渊散射, 光学波对光子的非弹性散射称为喇曼散射。(2 分)

2、在碰撞前后, 声子准动量满足动量守恒的过程称为正规过程, 而声子波矢必须加一个不为零的倒格子矢量才能满足动量守恒的过程称为翻转过程。(3 分)

### 三、证明题（每小题 5 分，共 10 分）

1、证明布拉格反射条件  $2d \sin \theta = \lambda$  与衍射条件  $G^2 = 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}$  等价。

证明：因为  $d = 2\pi/G$ （2 分）， $k = 2\pi/\lambda$ （1 分），且  $\mathbf{k}$  与晶面的夹角  $\theta$  和  $\mathbf{k}$  与  $\mathbf{G}$  的夹角  $\alpha$  互为余角，即  $\sin \theta = \cos \alpha$ （1 分），

所以：

$$G^2 = 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = 2kG \cos \alpha = 2kG \sin \theta \Rightarrow \frac{2\pi}{d} = 2\frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta \Rightarrow 2d \sin \theta = \lambda \quad (1 \text{ 分})。$$

2、证明  $T = 0K$  时，能量越低，一维自由电子气的能态密度越大，且每个电子的平均能量为  $E_F/3$ 。

证明：

$$N(E) = 2 \cdot \frac{L}{2\pi} \cdot \frac{2}{dE/dk} = \frac{2L}{\pi} \cdot \frac{m}{\hbar^2 k} = \frac{\sqrt{2mL}}{\pi \hbar} \frac{1}{\sqrt{E}}, \text{ 可见，能量越低，能态密度越大（3 分）。}$$

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{E_F} N(E) E dE}{\int_0^{E_F} N(E) dE} = \frac{\int_0^{E_F} E^{1/2} dE}{\int_0^{E_F} E^{-1/2} dE} = \frac{E_F}{3} \quad (2 \text{ 分})。$$

### 四、计算题（每问 5 分，共 40 分）

1、有一三维各向同性的晶体，采用德拜模型计算

1) 该晶体的德拜温度  $\Theta_D$ ；

2) 每个简正振动的零点振动能为  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ，计算晶体总的零点振动能。

解：1) 根据德拜模型  $\omega = \bar{C}q$ ，其中  $\bar{C}$  为三支格波的平均声速（2 分），因此晶格振动模式密度为

$$g(\omega) = 3 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 \frac{1}{d\omega/dq} = \frac{3V}{2\pi^2 \bar{C}^3} \omega^2, \text{ 其中考虑到了三支格波的贡献（1 分）。由}$$

$$\int_0^{\omega_m} g(\omega) d\omega = 3N \text{ 得 } \omega_m = \bar{C} [6\pi^2 (N/V)]^{1/3}, \text{（1 分）而德拜温度}$$

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_m}{k_B} = \frac{\hbar\bar{C} [6\pi^2 (N/V)]^{1/3}}{k_B} \quad (1 \text{ 分})$$

2)

$$\bar{E}_0 = \int_0^{\omega_m} \frac{1}{2} \hbar \omega g(\omega) d\omega \quad (3 \text{ 分})$$

$$= \int_0^{\omega_m} \frac{3V}{4\pi^2 \bar{C}^3} \hbar \omega^3 d\omega = \frac{3V\hbar}{16\pi^2 \bar{C}^3} \omega_m^4 = \frac{9}{8} N \hbar \omega_m \quad (2 \text{ 分})$$

2、钠是单价金属，具有体心立方晶格结构，立方边长为  $a$ 。

1) 指出钠的正格子原胞体积大小、倒格子的晶格结构、第一布里渊区的体积；

2) 用紧束缚近似计算钠的  $s$  态原子能级相对应的能带  $E(\vec{k})$  函数；

3) 求出电子运动速度的表达式；

4) 采用自由电子模型计算其费米波矢，并讨论费米面是否与布里渊区边界相交。

解：1) 钠的单胞体积为  $a^3$ ，其正格子原胞体积为  $a^3/2$ （1 分），倒格子的晶格结构为面心立方（2 分），第一布里渊区的体积等于倒格子原胞的体积，为  $16\pi^3/a^3$ （2 分）。

$$2) E^S(\vec{k}) = \epsilon_s - J_0 - \sum_{R_s = \text{Nearest}} J(R_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s} \quad (3 \text{ 分})$$

体心立方具有 8 个最近邻，分别为：\$(\pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2})\$ (1 分)

$$\text{代入得 } E^S(\vec{k}) = \epsilon_s - J_0 - 8J_1 \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2) \quad (1 \text{ 分})$$

$$3) \quad \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) \quad (3 \text{ 分})$$

$$\vec{v} = \frac{4aJ_1}{\hbar} [\sin(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2) \vec{e}_x + \cos(k_x a/2) \sin(k_y a/2) \cos(k_z a/2) \vec{e}_y + \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \sin(k_z a/2) \vec{e}_z] \quad (2 \text{ 分})$$

4)

$$\frac{4}{3} \pi k_F^3 \cdot \frac{2V}{(2\pi)^3} = N \quad (2 \text{ 分})$$

$$k_F = 2\pi \left( \frac{3}{8\pi} \right)^{1/3} \left( \frac{N}{V} \right)^{1/3},$$

$$N/V = 2/a^3$$

$$k_F = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \left( \frac{2\pi}{a} \right) \quad (1 \text{ 分})$$

体心立方晶格的布里渊区中，中心至边界面的最短距离为

$$\left( \frac{1}{2} \right)^{1/2} \left( \frac{2\pi}{a} \right) > k_F, \text{ 因此费米面与布里渊区边界不相交。} \quad (2 \text{ 分})$$

3、对于各向同性的金属，

1) 由自由电子的经典理论推导出电导率公式 \$\sigma = ne^2\tau/m\$;

2) 自由电子的量子理论也能给出类似的结果，但个别参数含义不同，请指出其不同，并据此解释金属中电子具有长的平均自由程。

解：1)

$$\vec{a} = \frac{-e\vec{E}}{m} \quad (1 \text{ 分})$$

$$\vec{v} = \vec{a}\tau = \frac{-e\tau\vec{E}}{m} \quad (1 \text{ 分})$$

$$\vec{j} = -ne\vec{v} = \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E} \quad (1 \text{ 分})$$

与欧姆定律 \$\vec{j} = \sigma \vec{E}\$ (1 分) 比较可得

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (1 \text{ 分})$$

2) 不同之处在于 \$\tau\$ 为费米面处电子的弛豫时间 (1 分)，\$m\$ 为金属中电子的有效质量 (2 分)。可见金属电导率决定于费米能处电子，因此电子的平均自由程为 \$l = v\_F \tau(E\_F)\$，其中 \$v\_F\$ 为费米能处电子的费米速度，它具有较大的值，因此电子的平均自由程较长 (2 分)。