

固物 2015 期中 A 卷

Deschain

2022 年 4 月 26 日

1. 填空题 (每空 1 分, 共 34 分)

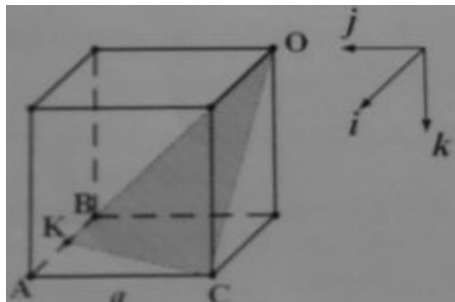
- (1) 布拉菲点阵中, 能够完全平移覆盖的最小单元称为____, 每个单元含有 ____ 个格点。
- (2) Li、Na、K 等碱金属的晶格属于____晶格, 其中格点的面密度最大的晶面系的密勒指数为____。设晶格常数为 a , 则该晶面系相邻晶面之间的面间距为____。
- (3) 晶体中面间距为 d 的一组晶面对应倒格子空间中的一个____, 这组晶面对应的倒格矢长度为____; 若使用波长为 λ 的 X 射线对这一晶体进行衍射, 则与这组平行晶面对应的一级衍射峰的衍射角为____。
- (4) 晶体中, 空位与间隙原子都是典型的____缺陷。除此之外, 晶体中的缺陷按其几何特征还可以分为____缺陷和____缺陷。
- (5) 金刚石材料中 C-C 键结合的方式是典型的____, 其电离度为____; 除了这种结合方式外, 固体的结合方式还有____, _____, _____。
- (6) 在索末菲自由电子模型中, 对于一种二维材料, 其总面积为 S , 则其对应的 k 空间的点阵密度为____, 能量标度下自由电子的能态密度为____。
- (7) 布洛赫能带理论相比索末菲自由电子模型, 主要是考虑了晶体中的____对电子运动的影响。若电子简约波矢为 \vec{k} , 则电子的波函数具有性质: _____。在近自由电子近似中, 是以____电子的本征值和本征函数作为零级解, 将____看作微扰来求解薛定谔方程的。
- (8) 布洛赫电子波函数的每个布里渊区内部的能级是____的, 能级会在布里渊区的____发生突变。在拓展布里渊区图景下, 属于同一个布里渊区的能级构成一个____, 两个能带之间不允许存在的能级宽度称为____。
- (9) 若电子占据了一个能带中所有的状态, 则该能带____(能/不能) 导电; 没有任何电子占据的能带____(能/不能) 导电。
- (10) 能带顶部的电子有效质量为____(正/负), 加速度为____(正/负); 能带底部的电子有效质量为____(正/负), 加速度为____(正/负)。(11) 在第一布里渊区中, 电子的一个简约波矢对应了____(一个/多个) 能量值。对于一维周期势场中的布洛赫电子, 其波函数为 $\psi_k(x) = -i \sin(\frac{2x}{a}\pi)$, 其中 a 为晶格常数, 则电子的简约波矢为____。

2. 简答题 (每题 4 分, 共 16 分)

- (1) 简述晶体中电子有效质量的物理意义。
- (2) 使用能带理论解释晶体中电子的能带和带隙是如何形成的。
- (3) 简述晶体、非晶体和准晶体之间的区别。
- (4) 用能带理论简述导体、绝缘体和半导体的区别。

3. (10 分) 如图所示, 一个简单立方晶格的单胞, 其晶格常数为 a , K 为 AB 中点。

- (1) 写出 OKC 晶面的密勒指数;
- (2) 求 OKC 晶面的面间距。



4. (10 分) 已知相距为 r 的两原子, 相互作用势能可以表示为 $U(r) = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}$, 其中 α, β, m, n 均为大于 0 的常数。

- (1) 求出该系统的平衡位置和结合能。
- (2) 证明该系统可以处于稳定平衡态的条件是 $n > m$ 。

5. (15 分) 设一维晶体的电子能带可以写成 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2}(\frac{7}{8} - \cos(ka) + \frac{1}{8}\cos(2ka))$, 式中 a 为晶格常数, 计算

- (1) 能带的宽度;
- (2) 能带底部和能带顶部电子的有效质量。
- (3) 电子位于波矢 k 状态时的速度。

6. (15 分)

- (1) 假设金属钠单原子链的周期是 a , 单个原子感受到的周期性势场为

$$V(x) = V_0 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right), V_0 > 0$$

采用近自由电子近似, 分别求出布里渊区边界 $\frac{\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}, \frac{3\pi}{a}$ 处的能隙, 在下页图中画出扩展布里渊区能带图, 并判断其导电性。

- (2) 假设金属钠单原子链在低温下两两配对, 晶格常数变为 $2a$, 此时若周期性势场的各级傅里叶展开系数均不为 0, 在下页图中大致画出此时的扩展布里渊区能带结构示意图 (至少画出三个布里渊区)。在不考虑能带交叠的情况下, 此时系统导电性如何?

1. 填空题

- (1) ①原胞 ②1
(2) ①体心立方 ②(100) 或 (101) 或 (011) ③ $\frac{\sqrt{2}}{2}a$
(3) ①点/格点/格矢 ② $\frac{2\pi}{d}$ ③ $2\arcsin(\frac{\lambda}{2d})$
(4) ①点 ②线 ③面
(5) ①共价键 (共价结合) ②0 ③离子键 (离子结合) ④金属键 (金属性结合) ⑤范德瓦耳斯力 (范德瓦尔斯结合)
(6) ① $\frac{S}{4\pi^2}$ ② $\frac{mS}{\pi\hbar^2}$
(7) ①周期性势场 ② $\psi(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \cdot \psi(\vec{r})$ ③自由 ④周期性势场/周期性势场起伏/ $\Delta V = V - V_0$
(8) ①准连续/分立 ②边界 ③能带 ④带隙/禁带
(9) ①不能 ②不能
(10) ①负 ②负 ③正 ④正 (11) ①多个 ②0

2. 简答题答案

- (1) 晶体中的电子 (或空穴) 除了受到外场作用外, 还要受到晶体中原子的周期性势场和其他电子的平均势场的作用。在讨论电子受外场力作用下运动时, 有效质量即是把内场力等价为电子的一部分质量后得到的结果。有效质量的表达式为 $\frac{1}{m_{\alpha}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k_{\alpha}^2}$
(2) ①能带: 由于周期性边界条件, \mathbf{k} 的取值是分立的。当原子数趋于无穷时, 能级变得准连续, 形成能带。
②带隙: 在近自由电子近似模型中, 晶格的周期性势场被看做微扰。在布里渊区的边界, 波函数是简并的。根据简并微扰模型, 会发生能级劈裂, 也就形成了带隙。
(3) ①晶体: 内部原子排布具有周期性。
②非晶体: 内部原子排布没有周期性。
③准晶体: 内部原子排布具有旋转对称性, 没有平移对称性。(或具有长程取向序, 无长程平移序)
(4) ①导体: 价带完全填充, 导带部分填充。
②绝缘体: 价带完全填充, 导带全空, 并且带隙较大, 不易发生跃迁。
③半导体: 绝对零度时, 价带、导带的填充情况与绝缘体相同。但是带隙较小, 室温下, 一部分电子可以从价带上被热激发到导带上。导带和价带都变成部分填充, 可以导电。

3. 解答

- (1) $(2, 1, \bar{2})$
(2) $\frac{a}{3}$

4. 解答

- (1) 设平衡位置为 r_0 , 结合能为 W 。

$$\begin{aligned}\frac{dU(r)}{dr} &= \frac{m\alpha}{r^{m+1}} - \frac{n\beta}{r^{n+1}} \\ \frac{dU(r_0)}{dr} &= 0, r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha}\right)^{\frac{1}{m-n}} \\ W = -U(r_0) &= \alpha\left(\frac{m\alpha}{n\beta}\right)^{\frac{m}{n-m}} - \beta\left(\frac{m\alpha}{n\beta}\right)^{\frac{n}{n-m}}\end{aligned}$$

(2)

$$\frac{d^2 U}{dr^2} \Big|_{r=r_0} > 0 \iff n > m$$

5. 解答

(1)

$$\Delta E = E\left(\frac{\pi}{a}\right) - E(0) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$$

(2)

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} = \frac{m}{\cos(ka) - \frac{1}{2}\cos(2ka)}$$
$$m^*(0) = 2m, m^*\left(\frac{\pi}{a}\right) = -\frac{2}{3}m$$

(3)

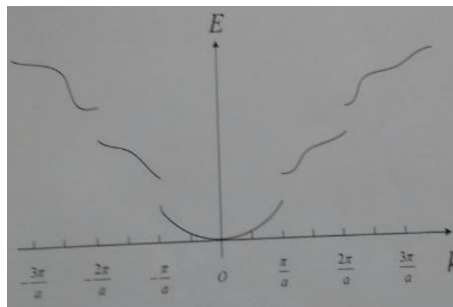
$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar}{ma} (\sin(ka) - \frac{1}{4}\sin(2ka))$$

6. 解答

(1)

$$V(x) = \frac{V_0}{4} (e^{i\frac{4\pi}{a}x} + e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{4\pi}{a}x})$$
$$V_{\pm 1} = V_{\pm 2} = \frac{V_0}{4}$$

常温下，第一能带部分填充，导电性良好。



(2) 晶格常数改变，造成倒格矢的大小改变，一个能带内能够容纳的状态数减半，因此原本半满的能带变成了满带，不导电。

常温下，第一能带部分填充，导电性良好。

