固物 2019 期中 (A 卷)

Deschain

2022 年 4 月 25 日

1. 填空题（每题 1 分，共 40 分）

(1) 设金属中价电子（自由电子）密度为 n，电子质量为 m，则 $0K$ 时费米球半径为____________，费米能量为________________。温度高于绝对零度时，费米能量________（略低、等于、略高）于绝对零度时的费米能量。

(2) 室温下，金属材料的费米能级位于________（导带、价带、禁带）中。绝对零度条件下，金属导带中电子填充情况为____________，半导体导带中电子填充情况为____________。

(3) 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；没有电子的能带 ______（能/不能）导电。

(4) 布拉菲点阵中，能够完全平移覆盖的最小单元称为______。

(5) 晶体中的缺陷按其几何特征可以分为____ 缺陷、____ 缺陷和 ____ 缺陷。其中位错是一种典型的____缺陷，可以分为 ______ 位错和______ 位错。

(6) Cu、Au、Ag、Al 等金属的晶格属于____________ 晶格，其原子排列最致密的等效晶面的密勒指数是 ________。

(7) 假设 $GaAs$ 晶体的晶格常数为 a，则最近邻 Ga 和 As 原子的间距为______；两个最近邻 As 原子的间距为____________。

(8) 金刚石中 $C-C$ 键结合的方式是典型的____________；除了这种结合方式外，固体的结合方式还有____________、____________、__________________。

(9) 元素周期表中，越往上或越往右，元素的负电性______（填越小或越大），说明原子在形成化学键时对成键电子的吸引力______（填越小或越大）。

(10)Si 的晶体结构是________,其布拉菲格子是____________ 格子,与之对应的倒格子则是____________格子。假设 Si 的晶格常数为 a，则其布拉菲格子原胞的体积为 ______，而其倒格子的晶格常数为______，第一布里渊区的体积为 ______

(11) 一般用 X 射线衍射实验来研究晶体的微观结构，这是由于______________ 与晶格常数相当，能够发生晶体衍射现象。

(12)在能带理论中,将周期性势场看做弱晶格近似势近似求解薛定谔方程的方法称为____________________，在该条件下，可以使用______ 理论来逐级求解电子波函数和能量本征值。其中，零极哈密顿量与________________________ 中的一致。

(13) 自由电子的 $E-k$ 关系图为______ 线型，但是在晶格的周期势场中，电子的能量会在 k 的取值为______________________________________ 时产生劈裂，从而在 $E-k$ 关系图中出现______。

(14) 晶体中原子排列的空间频率用________ 来表述。在晶体衍射实验中，得到的衍射图样实际上就是晶体的________ 的映像。

2. 简答题（每题 5 分，共 20 分）

（1）波矢空间与倒格空间有什么联系？这两个空间中的格点分布有什么区别？

（2）请简述原胞、单胞（惯用原胞）的的区别。

（3）请简述在晶体结合中结合能的概念，结合能与内能的关系以及结合能与原子间相互作用力的关系。

（4）请利用近自由电子模型简述晶体中电子的带隙产生的原因。为什么不同的晶体其带隙大小不同？

3. 原图缺失

4.（10 分）如将晶格常数为 a 的立方晶系布拉非格子的格矢量 R 在互相正交的单位矢量 $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ 组成的直角坐标系中表示为 $R=\frac{a}{2}(n_1\boldsymbol{i}+n_2\boldsymbol{j}+n_3\boldsymbol{k})$，其中 n_1,n_2 和 n_3 为整数。求：

（1）若为体心立方格子，系数 n_1,n_2 和 n_3 需要满足什么条件？

（2）若为面心立方格子，系数 n_1,n_2 和 n_3 需要满足什么条件？

5.（8 分）电子在一维周期势场中运动，晶格常数为 a

（1）周期势场的表达式为 $V(x)=2+cos(\frac{2\pi}{a}x)cos(\frac{4\pi}{a}x)+\frac{1}{2}sin(\frac{2\pi}{a}x)sin(\frac{6\pi}{a}x)$，请求出 $V(x)$ 的各级傅里叶展开系数。

（2）在简约布里渊区图景中画出对应于该周期势场的电子的 $E-k$ 关系示意图，并标注带隙大小。

6. 原图缺失

7.$U(r)=4\varepsilon[(\frac{\sigma}{r})^{12}-(\frac{\sigma}{r})^{6}]$，其中 ε,σ 为雷纳德-琼斯参数，它们均大于 0 且分别与 U,r 具有相同量纲。

（1）求出该惰性气体原子的平衡间距。

（2）说明雷纳德-琼斯参数 ε,σ 的物理意义。

1. 填空题答案

(1) ①$(3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$ ②$\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}$ ③略低

(2) ①导带 ②部分填充 ③空带（没有电子填充）

(3) ①不能 ②不能

(4) ①原胞

(5) ①点 ②线 ③面 ④线 ⑤刃形 ⑥螺形

(6) ①面心立方 ②$\{111\}$

(7) ①$\frac{\sqrt{2}}{4}a$ ②$\frac{\sqrt{2}}{2}a$

(8) ①共价结合 ②离子结合 ③金属性结合 ④范德瓦尔斯结合

(9) ①越大 ②越大

(10) ①金刚石 ②面心立方 ③体心立方 ④$\frac{a^3}{4}$ ⑤$\frac{4\pi}{a}$ ⑥$32(\frac{\pi}{a})^3$

(11) X 射线波长

(12) ①近自由电子近似 ②微扰 ③索末菲自由电子近似

(13) ①抛物 ②布里渊区边界 ③带隙

(14) ①倒格矢 ②倒格子

2. 简答题答案

(1) ①波矢空间和倒格空间处于同一空间。

②倒格空间的基矢分别为 $\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \boldsymbol{b_3}$，而波矢空间的基矢分别为 $\frac{\vec{b_1}}{N_1}, \frac{bmb_2}{N_2}, \frac{\boldsymbol{b_3}}{N_3}$，$N_1, N_2, N_3$ 分别为沿正格子基矢方向晶体的原胞数目。波矢空间每个格点占有的体积是倒格空间每个格点体积的 $\frac{1}{N}$，$N = N_1 \times N_2 \times N_3$。简而言之，波矢空间比倒格空间格点排列更密。

(2) ①原胞是体积最小的晶胞，只含有一个格点，是可以完全平移覆盖点阵结构的最小单元，原胞的边矢量称为晶格基矢。

②单胞可以包含多个格点，是点阵中可以完全平移覆盖、并能体现旋转对称性的常用单元。单胞的边矢量长度为晶格常数。

(3) ①分散的自由原子结合成为晶体的过程中释放出来的能量称为结合能。

②以无穷远处分散的原子状态为能量零点，定义晶体结合后稳定时内能最小值 $U(r_0) = -W$ 即结合能为 $W = -U(r_0)$。

③$r = r_0$ 时，原子间相互作用力为从吸引力转为排斥力的拐点。

(4) ①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。

②不同晶体原子的空间排列方式不同，形成的周期性势场也是不同的，所以带隙大小是不同的。

4. 解答

布拉菲格子的晶格平移矢量可表示为

$$R_{lmn} = l\boldsymbol{a_1} + m\boldsymbol{a_2} + n\boldsymbol{a_3} \tag{1}$$

的形式，其中 $\boldsymbol{a_1}, \boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{a_3}$ 是布拉菲格子的基矢，l, m, n 是整数。

(1) 将体心立方格子的基矢 $\boldsymbol{a_1} = \frac{a}{2}(-\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \boldsymbol{a_2} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}), \boldsymbol{a_3} = \frac{a}{2}(\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} - \boldsymbol{k})$ 代入式 (1) 中，得

$$R_{lmn} = \frac{a}{2}[(-l+m+n)\boldsymbol{i} + (l-m+n)\boldsymbol{j} + (l+m-n)\boldsymbol{k}] = \frac{a}{2}(n_1\boldsymbol{i} + n_2\boldsymbol{j} + n_3\boldsymbol{k})$$

由于 l,m,n 都是整数，n_1,n_2,n_3 之间两两的差值为偶数，因此 n_1,n_2,n_3 只能全部是奇数或偶数。

（2）类似地，面心立方格子的晶格平移矢量可表示为

$$R_{lmn}=\frac{a}{2}[(m+n)\boldsymbol{i}+(l+n)\boldsymbol{j}+(l+m)\boldsymbol{k}]=\frac{a}{2}(n_1\boldsymbol{i}+n_2\boldsymbol{j}+n_3\boldsymbol{k})$$

则

$$n_1=m+n,n_2=n+l,n_3=l+m$$

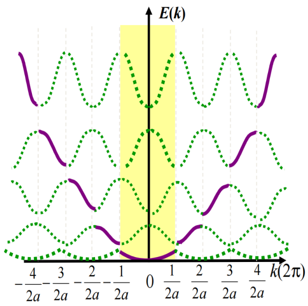
因此 $n_1+n_2+n_3=2(l+m+n)$ 的和为偶数。

5. 解答

（1）

$$V(x)=2+\frac{1}{4}e^{i\frac{2\pi}{a}x}+\frac{1}{4}e^{-i\frac{2\pi}{a}x}-\frac{1}{8}e^{i\frac{4\pi}{a}x}-\frac{1}{8}e^{-i\frac{4\pi}{a}x}+\frac{1}{4}e^{i\frac{6\pi}{a}x}+\frac{1}{4}e^{-i\frac{2\pi}{a}x}+\frac{1}{8}e^{i\frac{8\pi}{a}x}+\frac{1}{8}e^{-i\frac{8\pi}{a}x}$$
$$V_0=2,V_{\pm1}=\frac{1}{4},V_{\pm2}=-\frac{1}{8},V_{\pm3}=\frac{1}{4},V_{\pm4}=\frac{1}{8}$$

（2）



7. 解答

（1）设平衡间距为 r_0

$$\frac{dU(r)}{dr}=24\varepsilon\sigma^6(-\frac{2\sigma^6}{r^{13}}+\frac{1}{r^7})$$
$$\frac{dU(r_0)}{dr}=0,r_0=2^{\frac{1}{6}}\sigma$$

（2）$U(r_0)=-\varepsilon,\varepsilon$ 是原子的结合能。

$U(\sigma)=0,\sigma$ 是相互作用能为 0 时的原子间距。