

固物 2014 期中 A 卷

Deschain

2022 年 4 月 27 日

物理常数

$$k_B = 1.381 \times 10^{-23} J \cdot K^{-1} \quad \hbar = 1.054 \times 10^{-34} J \cdot s \quad q = 1.602 \times 10^{-19} C \quad m = 9.109 \times 10^{-31} kg$$
$$N_A = 6.022 \times 10^{23}$$

1. 填空题 (每空 1 分, 共 30 分)

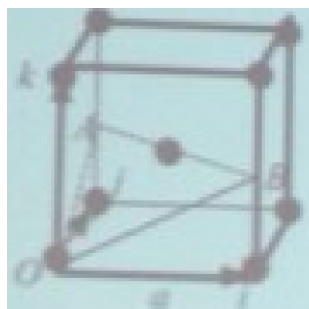
- (1) GaAs 的晶体结构是_____结构, 其布拉菲格子是_____格子。
 - (2) 碱金属晶体是体心立方晶格, 其倒格子为_____格子。若倒格子基矢为 $\vec{\beta}_1, \vec{\beta}_2, \vec{\beta}_3$, 则碱金属晶体晶面指数为 (231) 的晶面族的面间距可表示为_____。假设碱金属的晶格常数为 a , 则其电子浓度为_____。
 - (3) 假设 Si 的晶格常数为 a , 则其布拉菲格子原胞的体积为_____, 第一布里渊区的体积为_____。
 - (4) 晶体中的缺陷按其几何类型可以分为_____缺陷、线缺陷和_____缺陷。其中线缺陷又分为_____位错和_____位错。
 - (5) 原子的结合中, 吸引作用主要来自于异性电荷之间的_____作用, 而排斥作用来自于同性电荷之间的_____作用以及_____原理引起的排斥。一般固体的结合可以概括为四种基本形式, 除了离子性结合之外, 还包括_____结合、_____结合和_____结合。金刚石材料中 C-C 键结合的方式是典型的_____结合, 其电离度为_____。
 - (6) 假设金属晶体的总体积为 V , 则 k 空间的点阵密度为_____。能量标度下电子的能态密度会随着能量的增大而_____。
 - (7) 两块同种原子组成的金属晶体, 体积分别为 V_1 和 V_2 , 且 $V_1 > V_2$, 则自由电子的数目 N_1 _____ N_2 , 费米能级 E_{F1} _____ E_{F2} 。(填 $>, <, =$)
 - (8) 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。
- (原图缺失)

2. 简答题 (每题 5 分, 共 20 分)

- (1) 请简述晶体、非晶体和准晶体之间的区别。
- (2) 请说明空穴的物理意义。
- (3) 请描述周期性边界 (波恩-卡曼) 条件并说明其在什么条件下适用。
- (4) 请用能带理论简述导体、绝缘体和半导体的区别。

3. (8 分) 如图所示, 是一个体心立方晶格的单胞, 其晶格常数为 a , A 和 B 都是各自边矢量的中点。

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



4. (6 分) 相距为 r 的两原子，相互作用势能可以表示为 $u(r) = u_0[(\frac{\sigma}{r})^m - (\frac{\sigma}{r})^n]$ ，分别求出势能最小值和吸引力最强时的距离。(原题不是 m 和 n ，但图片看不清)

5. (8 分) 假设一个晶格常数为 a 的一维晶格中，电子能量 $E(k) = E_0 - 2E_1 \cos(ka)$ ，其中 $E_1 > 0$

(1) 分别求能带底和能带顶处的简约波矢和能量。

(2) 分别求能带底和能带顶处电子的有效质量。

6. (8 分) 电子在一个晶格常数为 a 的一维晶体中运动。

(1) 求布里渊区边界 $\frac{2\pi}{a}$ 处自由电子的能量。

(2) 假设单个电子感受到的周期性势场 $V(x) = -V_0 \cos(\frac{4\pi x}{a}) \cos(\frac{2\pi x}{a})$ ，其中 $V_0 > 0$ 。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。

7. (20 分) 已知一种由同种原子组成的金属晶体。(原图缺失)

1. 填空题答案

- (1) ①闪锌矿 ②面心立方
(2) ①面心立方 ② $\frac{2\pi}{\|\beta_1+\beta_2+\beta_3\|}$ ③ $\frac{2}{a^3}$
(3) ① $\frac{a^3}{4}$ ② $\frac{32\pi^3}{a^3}$
(4) ①点 ②面 ③刃形 ④螺形
(5) ①吸引 ②排斥 ③泡利不相容 ④共价 ⑤金属性 ⑥范德瓦耳斯力 ⑦共价
⑧0
(6) ① $\frac{V}{8\pi^3}$ ②增大
(7) ①> ②=
(8) ①周期性势场

2. 简答题答案

- (1) ①晶体：内部原子的排列具有空间周期性。
②非晶体：内部原子的排列不具有周期性。
③准晶体：内部原子的排列具有旋转对称性，没有平移对称性（或具有长程取向序，无长程平移序）。
(2) 空穴是满带缺少电子的状态，实际上描述的是满带中其他电子的运动。
(3) ① $\psi(x) = \psi(x + Na)$
②是忽略边界影响时的边界条件。
(4) ①导体：价带完全填充，导带部分填充，导电性良好。
②绝缘体：价带完全填充，导带是空带，并且带隙较大，不易发生跃迁，因此几乎不导电。
③半导体：绝对零度时，价带完全填充，导带是空带，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) $(11\bar{2})$
(2) $\frac{\sqrt{6}}{3}a$

4. 解答

设势能最小的位置为 r_1 ，吸引力最强的位置为 r_2 ，则

$$\frac{dU}{dr} = u_0 \left(-\frac{m\sigma^m}{r^{m+1}} + \frac{n\sigma^n}{r^{n+1}} \right) = 0, \quad r_1 = \left(\frac{n}{m} \right)^{\frac{1}{n-m}} \sigma$$
$$\frac{d^2U}{dr^2} = u_0 \left(\frac{m(m+1)\sigma^m}{r^{m+2}} - \frac{n(n+1)\sigma^n}{r^{n+2}} \right) = 0, \quad r_2 = \left(\frac{n(n+1)}{m(m+1)} \right)^{\frac{1}{n-m}} \sigma$$

5. 解答

- (1) 能带底 $k=0$ ，能量 $E(0) = E_0 - 2E_1$
能带顶 $k = \frac{\pi}{a}$ ，能量 $E(\frac{\pi}{a}) = E_0 + 2E_1$
(2) $m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} = \frac{\hbar^2}{2a^2 E_1 \cos(ka)}$
能带底 $m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 E_1}$ ，能带顶 $m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 E_1}$

6. 解答

- (1)
- $$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$

(2)

$$V(x) = -\frac{V_0}{4}(e^{i\frac{6\pi}{a}x} + e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{6\pi}{a}x})$$

$$V_{\pm 1} = -\frac{V_0}{4}, \quad V_{\pm 3} = -\frac{V_0}{4}$$

$\frac{\pi}{a}$ 处能隙为 $\frac{V_0}{2}$, $\frac{2\pi}{a}$ 处能隙为 0, $\frac{3\pi}{a}$ 处能隙为 $\frac{V_0}{2}$ 。