固物 2013 期中

Deschain

2022 年 4 月 27 日

一、填空

1.GaAs 的晶体结构是闪锌矿结构，其原胞中包含____个原子。

2.Si 的晶体结构是________，其布拉菲格子是____________格子，与之对应的倒格子是 ____________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是__________。

3. 对于全同原子组成的简单立方晶格、体心立方晶格和面心立方晶格而言，一个原子周围最近邻的原子个数分别是 ____，____和____。上述三种晶格中，堆积最紧密的是____________晶格，其原子排列最致密的等效晶面的密勒指数为__________。

4. 使用波长为 λ 的 X 射线对一晶体进行衍射，发现某一个一级衍射峰对应的衍射角为 2θ，则与之对应的一组平行晶面的面间距可以表示为______________。这组晶面对应倒格子空间的一个格点，因此该倒格点的格矢长度可以表示为 __________________。

5. 晶体中的缺陷按照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。

6. 原子的结合中，吸引作用主要来自于异性电荷之间的____________作用，而排斥作用主要来自于同性电荷之间的 ____________作用以及______________原理引起的排斥。当原子之间的距离大于平衡距离时，系统的能量会随距离减小而______；小于平衡距离时，系统的能量会随距离减小而 ______。

7. 金刚石材料中 C-C 键结合的方式是典型的____________，其电离度为____。

8. 在索末菲自由电子模型中，自由电子在 k 空间的等能面为球面。假设金属晶体的总体积为 V，则 k 空间 k 的状态密度为 __________，电子的状态密度为__________。能量标度下自由电子的能态密度会随着能量的增大而______。

9. 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。在近自由电子近似中，是以______电子的本征值和本征函数作为基态，将____________________看作微扰来求解薛定谔方程的。

10. 在能带底部，电子的平均速度______，电子的有效质量______；在能带顶部，电子的平均速度______，电子的有效质量______（均选填“=0”，“>0”或“<0”。）

二、简答

1. 倒格子空间的物理意义。

2. 有效质量的物理意义。

3. 晶体、非晶体和准晶体。

三、计算

1. 如图所示，是一个体心立方晶格的单胞，其晶格常数为 a。

a. 写出 OAB 晶面的密勒指数。

b. 求 OAB 晶面的面间距。

2. 相距为 r 的两原子，相互作用势能可以表示为 $u(r)=u_0[(\frac{\sigma}{r})^12-\frac{\sigma}{r})^6]$，分别求出势能最小和吸引力最强时的距离。

3. 假设一个晶格常数为 a 的一维晶格中，电子能量 $E(k)=E_0-2E_1cos(ka)$。a. 分别求能带底和能带顶处的简约波矢和能量。

b. 分别求能带底和能带顶处电子的有效质量。

4. 电子在一个晶格常数为 a 的一维晶体中运动。

a. 求布里渊区边界 $\frac{2\pi}{a}$ 处自由电子的能量。

b. 假设单个电子感受到的周期性势场 $V(x)=-V_0cos(\frac{4\pi x}{a})cos(\frac{2\pi x}{a})$，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。

一、填空题答案

1.　2

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

3.①6　　②8　　③12　　④面心立方　　⑤$\{111\}$

4.①$\frac{\lambda}{2sin(\theta)}$　　②$\frac{4\pi sin(\theta)}{\lambda}$　　5.①点　　②线　　③面　　④线

6.①库仑（库仑吸引）　　②库仑（库仑排斥）　　③泡利不相容　　④减小　　⑤增大

7.①共价键（共价结合）　　②0

8.①$\frac{V}{8\pi^3}$　　②$\frac{V}{4\pi^3}$　　③增大

9.①周期性势场　　②自由　　③周期性势场起伏（或周期性势场，或 $\Delta V = V - V_0$）

10.①$= 0$　　②> 0　　③$= 0$　　④< 0

二、简答题答案

1. 倒格子空间是正格子空间的傅里叶变换，倒格子空间是波矢空间（动量空间）。
正倒格子基矢之间的关系为：$\vec{a_i} \cdot \vec{b_j} = 2\pi\delta_{ij}$。2. 有效质量是考虑了晶格周期性势场（晶格势场和其他电子的平均场）对电子作用后，电子在外场作用下表现出的等效质量。其关系式为：$\frac{1}{m^*_{\alpha\beta}} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}$。

3.①晶体：原子排列具有空间周期性。

②非晶体：原子排列不具有空间周期性。

③准晶体：原子排列不具有长程平移序，但具有长程取向序。

三、计算题答案

1.a.$(11\bar{1})$

b.$\frac{\sqrt{3}}{6}a$

2. 设势能最小的距离为 r_0，吸引力最大的距离为 r_1，则

$$\frac{dU(r)}{dr} = 6\sigma^6 u_0(-\frac{2\sigma^6}{r^{13}} + \frac{1}{r^7})$$
$$\left.\frac{dU(r)}{dr}\right|_{r=r_0} = 0, \quad r_0 = \sqrt[6]{2}\sigma$$
$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} = 6\sigma^6 u_0(\frac{26\sigma^6}{r^{14}} - \frac{7}{r^8})$$
$$\left.\frac{d^2U(r)}{dr^2}\right|_{r=r_1} = 0, \quad r_1 = \sqrt[6]{\frac{26}{7}}\sigma$$

3.a. 能带底：$k = 0, E(0) = E_0 - 2E_1$

能带顶：$k = \frac{\pi}{a}, E(\frac{\pi}{a}) = E_0 + 2E_1$

b.$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}} = \frac{1}{2a^2E_1cos(ka)}$

能带底：$m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2E_1}$

能带顶：$m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2E_1}$

4.a.

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{2\hbar^2\pi^2}{ma^2}$$

b.

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

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

$\frac{\pi}{a}$ 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 $\frac{V_0}{2}$。