固物 2012 期中

Deschain

2022 年 4 月 27 日

一、填空（共 20 分，每空 1 分）

1. 金刚石晶体是______格子，由两个____________结构的子晶格沿空间对角线方向位移 $\frac{1}{4}$ 的长度套构而成。

2. 体心立方结构的单胞边长为 a，那么原胞的体积为______, 对应的第一布里渊区体积为 ________。

3. 对于固体的能带,简约波矢 $\boldsymbol{k}$ 的取值范围要求在__________________区域内,其取值总数等于 ______的总数。

4. 一般固体的结合可以概括为____________、____________、______________ 和____________________四种基本形式。

5. 空穴是一种虚拟粒子，实际代表了________________________电子的总体运动。

6. 如果一些能量区域中, 波动方程不存在具有布洛赫函数形式的解, 这些能量区域称为______；写出至少两种根据近自由电子近似理论的能带图景：________________________和________________________。7. 电子在三维周期性晶格中波函数方程的解具有________________________的形式，式中________ 在晶格平移下保持不变(具有平移对称),其物理意义是：____。

8. 能带顶部电子的有效质量为____（填写“正”或“负”)；能带底部电子的有效质量为 ____（填写“正”或“负”)。

9. 电子波包的准动量 $\boldsymbol{k}$ 与原胞边长 a 满足____________________的条件下，电子可以视为经典粒子。

二、简答题（共 20 分）

1.（8 分）波矢空间与倒格空间有何关系？为什么说波矢空间内的状态点是准连续的？

2.（6 分）解释什么是有效质量？

3.（6 分）解释什么是费米面、费米能、费米动量？

三、计算题（共 60 分）

1.（15 分）对面心立方布拉菲格子：

a. 根据格点密度的大小，对 {100}、{111}、{110} 三个晶面按从大到小顺序进行排列。

b. 画出这些格点在平面上格点的排布。

c. 设惯用晶胞的边长为 a，分别求出这三个晶面系相邻晶面的间距。

2.（15 分）设两原子的相互作用能可表示为 $U(r) = -\frac{\alpha}{r^2} + \frac{\beta}{r^8}$，其中 r 是两原子间距离，α，β 是两个待定系数。当两原子构成一稳定分子时，其核间距为 $3 \times 10^{-10}m$，离解能为 $4eV$，试计算：

a. 求 α，β 的数值。b. 计算使该分子分裂所必须的力。(即该力不能小于合力表现为引力的最大值）3. 设一维晶体的电子能带可以写成 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2}(\frac{9}{10} - cos(ka) + \frac{1}{10}cos(2ka))$，式中 a 为晶格常数。试计算：

a. 能带的宽度。

b. 电子在波矢 k 状态时速度。

c. 能带底部和能带顶部电子的有效质量。

4.（15 分）具有简单立方晶格的二维金属，晶格常数为 a，共有 N 个原胞，每个原子贡献一个价电子。

a. 请按照自由电子气模型计算二维电子气能量标度下的态密度。

b. 计算该金属在绝对零度下的费米半径。

一、填空题答案

1.①复式　　②面心立方

2.①$\frac{a^3}{2}$　　②$\frac{16\pi^3}{a^3}$

3.①第一布里渊区　　②原胞

4.①共价结合　　②离子结合　　③金属性结合　　④范德瓦尔斯结合

5. 价带中其他所有的

6.①禁带（带隙）　　②简约布里渊区图景　　③周期布里渊区图景　　④扩展布里渊区图景

7.①$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_n)=e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}u_{\vec{k}}(\vec{r})$　　②$u_{\vec{k}}(\vec{r})$　　③Bloch 电子波函数是受晶格周期调制的平面波

8.①负　　②正

9.$\Delta k << \frac{2\pi}{a}$

二、简答题答案

1.①波矢空间和倒格空间处于同一空间。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 $\frac{\boldsymbol{b_1}}{\boldsymbol{N_1}},\frac{\boldsymbol{b_2}}{\boldsymbol{N_2}},\frac{\boldsymbol{b_3}}{\boldsymbol{N_3}}$，$\boldsymbol{N_1}$、$\boldsymbol{N_2}$、$\boldsymbol{N_3}$ 分别为沿正格子基矢方向晶体的原胞数目。(或波矢空间比倒格空间更密）
②倒格空间中一个倒格点对应的体积为 $\boldsymbol{b_1}\cdot(\boldsymbol{b_2}\times\boldsymbol{b_3})=\Omega^*$，波矢空间中一个波矢点对应的体积为 $\frac{\boldsymbol{b_1}}{\boldsymbol{N_1}}\cdot(\frac{\boldsymbol{b_2}}{\boldsymbol{N_2}}\times\frac{\boldsymbol{b_3}}{\boldsymbol{N_3}})=\boldsymbol{\Omega^*}$。即波矢空间中一个波矢点对应的体积，是倒格空间中一个倒格点对应的体积的 $\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{N}}$。由于 $\boldsymbol{N}$ 是晶体的原胞数目，数目巨大，所以一个波矢点对应的体积与一个倒格点对应的体积相比是极其微小的。也就是说，波矢点在倒格空间看是极其稠密的。因此，在波矢空间内作求和处理时，可把波矢空间内的状态点看成是准连续的。

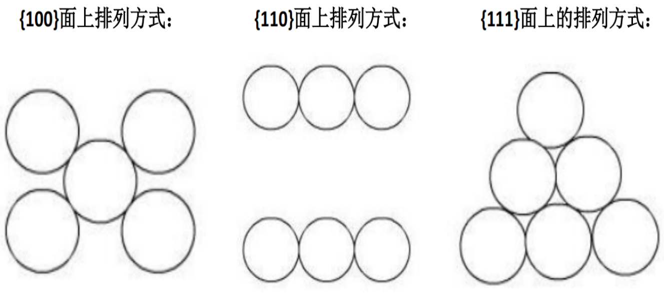
2. 晶体中的电子（或空穴）除了受到外场作用外，还要受到晶体中原子的周期势场和其他电子的平均势场的作用。在讨论电子受外场力作用下运动时，有效质量即是把内场力等价电子部分质量的结果，其表达式为 $\frac{1}{m_\alpha^*}=\frac{1}{\hbar^2}\cdot\frac{\partial^2 E}{\partial {k_\alpha}^2}$。

3. 费米面是 $\boldsymbol{k}$ 空间占有电子和不占有电子区域的分界面；费米面的能量是费米能；费米速度为费米面上电子所对应的速度。

三、计算题答案

1.a.$\{111\},\{100\},\{111\}$

b.



c.$\{111\}:\frac{\sqrt{3}}{3}a,\{100\}:\frac{1}{2}a,\{111\}:\frac{\sqrt{2}}{4}$

2.a.

$$\left.\frac{dU(r)}{dr}\right|_{r=r_0} = \frac{2\alpha}{r_0^3} - \frac{8\beta}{r_0^9} = 0, \quad r_0 = (\frac{4\beta}{\alpha})^{\frac{1}{6}} = 3 \times 10^{-10}m$$

$$U(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0^2} + \frac{\beta}{r_0^8} = -\frac{3\alpha}{4r_0^2} = 4eV$$

$$\alpha = 7.68 \times 10^{-38} J \cdot m^{-2}, \quad \beta = 1.4 \times 10^{-95} J \cdot m^{-8}$$

b.

$$\left.\frac{d^2U(r)}{dr^2}\right|_{r=r_m} = -\frac{6\alpha}{r_0^4} + \frac{72\beta}{r_0^10} = 0, \quad r_m = (\frac{12\beta}{\alpha})^{\frac{1}{6}} = 3.6 \times 10^{-10}$$

$$F = -\left.\frac{\partial U(r)}{\partial r}\right|_{r=r_m} = -\frac{2\alpha}{r_m^3} + \frac{8\beta}{r_m^9} = 0.22 \times 10^{-8}$$

3. a. 能带底部 $k=0, E(0)=0$；能带顶部 $k=\frac{\pi}{a}, E(\frac{\pi}{a}) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$，能带宽度 $\Delta E = E(\frac{\pi}{a}) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

b.

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE(k)}{dk} = \frac{\hbar}{ma}(sin(ka) - \frac{1}{5}sin(2ka))$$

c.

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} = \frac{m}{cos(ka) - \frac{2}{5}cos(2ka)}$$

$$m^*(0) = \frac{5m}{3}, \quad m^*(\frac{\pi}{a}) = \frac{-5}{7}m$$

4. a.

$$Z = 2 \cdot \frac{S}{4\pi^2} \cdot k^2 = 2 \cdot \frac{Na^2}{4\pi^2} \cdot \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{mNa^2}{\pi\hbar^2}E$$

$$g(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{mNa^2}{\pi\hbar^2}$$

b.

$$N = \int_0^{E_F} g(E)dE, \quad E_F = \frac{\pi^2\hbar^2}{a^2m}$$

$$k_F = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2\pi}{a^2}} = \frac{2.51}{a}$$