

北京化工大学 2009—2010 学年第二学期

《固体物理学》期末考试试卷

课程代码	P	H	Y	3	4	4	0	0	T
------	---	---	---	---	---	---	---	---	---

班级：_____ 姓名：_____ 学号：_____ 分数：_____

题号	一	二	三	四	总分
得分					

一、简答题（每小题 5 分，共 40 分）

1. 写出面心立方结构的基矢并证明其倒格子为体心立方。

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k}), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{\Omega} = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

所以面心立方结构的倒格子为体心立方

2. 具有体心立方结构的某元素晶体，给出其多晶样品的 X 射线衍射谱中衍射角最小的三个衍射峰相应的面指数。

衍射面指数为 (110) (200) (211)，面指数为 (110) (100) (211)

3. 晶体的结合类型有哪些？

离子性结合，共价结合，金属性结合，范德瓦耳斯结合，氢键结合

4. 何为声子？其特点如何？

声子是格波的能量量子，并不是真实的粒子。当晶格与其他粒子发生相互作用时，可以吸收或发射一个声子。

5. 晶体中位错有几种类型？各有什么特点。

刃型位错，螺型位错。刃型位错的位错线同滑移方向垂直，螺型位错的位错线同滑移方向平行。

6. 若晶体中有 N 个原胞，每个能带可以填充的电子数是多少？并说明理由。

每个能带可以填充的电子数是 2N 个。每个 k 占据波矢空间的体积为

$$\frac{1}{N_1} \vec{b}_1 \cdot \left(\frac{1}{N_2} \vec{b}_2 \times \frac{1}{N_3} \vec{b}_3 \right) = \frac{1}{N} \Omega^* = \frac{(2\pi)^3}{N\Omega} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

该空间一个原胞内的状态为 $\Omega^* \frac{V}{(2\pi)^3} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \frac{V}{(2\pi)^3} = N$
考虑自旋后为 2N。

7. 说明爱因斯坦模型和德拜模型在处理晶格热容问题上的差异。

爱因斯坦模型假定晶格中原子的振动是相互独立的， $3N$ 个振子的频率都是相同的。德拜模型则考虑了振动频率的分布，并采用宏观弹性力学的处理方法，给出了频率与波数的关系。

8. 说明德哈斯-范阿尔芬效应的物理机制。

处于外磁场中的自由电子其在与磁场垂直的平面内原来连续的能级转变为分离的朗道能级，而且朗道能级的简并度随磁感应强度而变化，致使电子气在磁场中的能量随外磁场的强度而变化。

二、(8 分) 一维单原子链，晶格常数为 a ，原子质量为 m ，线性恢复力系数为 β ，求该一维单原子链的色散关系。

$$\begin{aligned}
 m \frac{d^2 x_n}{dt^2} &= \beta(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) \\
 x_n &= A e^{i(qna - \omega t)} \\
 -m\omega^2 A e^{i(qna - \omega t)} &= \beta A \{e^{i[q(n+1)a - \omega t]} + e^{i[q(n-1)a - \omega t]} - 2e^{i(qna - \omega t)}\} \\
 -m\omega^2 &= \beta(e^{iqa} + e^{-iqa} - 2) \\
 m\omega^2 &= \beta(2 - 2\cos qa) \\
 \omega^2 &= \frac{2\beta}{m}(1 - \cos qa) = \frac{2\beta}{m}(2\sin^2 \frac{qa}{2}) \\
 \omega &= 2 \left(\frac{\beta}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|
 \end{aligned}$$

三、(12 分) 三维简单立方晶格，晶格常数为 a

- (1) 用紧束缚近似，只考虑近邻原子的相互作用，计算其 S 态形成的能带；
- (2) 给出能带宽度；
- (3) 求出电子的有效质量。

解：

$$(1) \text{ 由 } E(\vec{k}) = E_s - J_0 - \sum_{\vec{R}_s} J(\vec{R}_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

只考虑近邻格点，坐标为

$$(a, 0, 0) \quad (-a, 0, 0) \quad (0, a, 0) \quad (0, -a, 0) \quad (0, 0, a) \quad (0, 0, -a)$$

代入上式得

$$E(\vec{k}) = E_s - J_0 - 2J_1(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

(2) 简立方结构的倒易点阵仍为简立方，第一布里渊区立方体，

在第一布里渊区中心 Γ 点 $\vec{k} = (0, 0, 0)$

$$E^\Gamma = E_s - J_0 - 6J_1 \quad \text{为带底}$$

在第一布里渊区顶点 $\vec{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$

$$E = E_s - J_0 + 6J_1 \quad \text{对应带顶}$$

能带宽度为 $12J_1$

(3)有效质量为

$$m^*_x = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_x a}$$

$$m^*_y = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_y a}$$

$$m^*_z = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1 \cos k_z a}$$

四、(10 分) 已知钠晶体是体心立方结构，晶格常数 $a=0.428\text{nm}$ 若其电阻率为 $4.28 \times 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$ ，钠晶体的电子可看作自由电子，试计算钠晶体电子的驰豫时间以及费米面上电子的平均自由程。

(电子质量 $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{kg}$, 普朗克常数 $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$)

$$n = \frac{2}{a^3} = 2.5 \times 10^{28} / \text{m}^3$$

$$\tau = \frac{m}{ne^2 \rho} = \frac{9.1 \times 10^{-31}}{2.5 \times 10^{28} \times (1.6 \times 10^{-19})^2 \times 4.28 \times 10^{-8}} = 3.3 \times 10^{-14} \text{s}$$

$$\text{由 } n = \frac{k_0^3}{3\pi^2} \text{ 得}$$

$$v_F = 1.05 \times 10^6 \text{ m/s}$$

$$\lambda = v_F \tau = 34 \text{ nm}$$