

北京化工大学 2007—2008 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	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 30 分）

1. 写出体心立方结构的基矢并证明其倒格子为面心立方。

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

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

$$\text{同理} \quad b_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{k})$$

$$b_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$$

所以面心立方结构的倒格子为体心立方

2. 具有面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 (111) (200) (220)，面指数为 (111) (100) (110)

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. 作为能带论基础的三个假设：绝热近似、平均场近似（单电子近似）和周期场近似。

绝热近似：在考虑晶体中电子的运动时，可以认为原子实（原子核）是固定不动的，使一个多粒子问题简化为多电子问题。平均场近似：用一种平均场来代替价电子之间的相互作用，即假定每个电子的势能均相同，而使多电子问题简化为单电子问题。周期场近似：单电子薛定谔方程中的势能项具有晶格周期性，因此电子是在一个周期性势场中运动。

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. 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、(12 分) 一维双原子链，晶格常数为 $2a$ ，原子质量分别为 M 和 m ，线性恢复力系数为 β ，求该一维双原子链的色散关系。

$$m \frac{d^2 x_{2n+1}}{dt^2} = \beta(x_{2n+2} + x_{2n} - 2x_{2n+1}) \quad (1)$$

$$M \frac{d^2 x_{2n}}{dt^2} = \beta(x_{2n+1} + x_{2n-1} - 2x_{2n}) \quad (2)$$

$$\text{将 } x_{2n} = A e^{i(2nqa - \omega t)}$$

$$x_{2n+1} = A e^{i[(2n+1)qa - \omega t]}$$

代入 (1) 和 (2) 式得

$$(m\omega^2 - 2\beta)A + 2\beta \cos aq B = 0$$

$$2\beta \cos aq A + (M\omega^2 - 2\beta)B = 0$$

A, B 有解的条件为

$$\begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\beta & 2\beta \cos aq \\ 2\beta \cos aq & M\omega^2 - 2\beta \end{vmatrix} = 0$$

解之得：

$$\omega^2 = \beta \frac{m+M}{mM} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2(aq) \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

三、(16 分) 二维正方格子，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

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

代入上式得

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

(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 $\vec{k} = (0,0)$

$$E^\Gamma = E_s - J_0 - 4J_1 \quad \text{为带底}$$

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

$$E = E_s - J_0 + 4J_1 \quad \text{对应带顶}$$

能带宽度为 $8J_1$

(3) 有效质量为

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

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

四、(12分)已知钠晶体是体心立方结构, 晶格常数 $a=0.43\text{nm}$ 若其电阻率为 $4.3\times 10^{-6}\Omega\cdot\text{cm}$, 钠晶体的电子又可看作自由电子, 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 $h = 6.626\times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}$)

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

$$\tau = \frac{m}{ne^2\rho} = \frac{9.1\times 10^{-31}}{2.5\times 10^{28} \times (1.6\times 10^{-19})^2 \times 4.3\times 10^{-8}} = 3.3\times 10^{-14}\text{s}$$

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

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

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