

# 北京化工大学 2008—2009 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 35 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. 说明能带理论的基本三个近似？

作为能带论基础的三个假设为：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。

4. 对惰性气体元素晶体，原子间的相互作用常采用勒纳德-琼斯势，

$u(r) = 4\epsilon[(\frac{\sigma}{r})^{12} - (\frac{\sigma}{r})^6]$ ，其中  $\epsilon$  和  $\sigma$  为待定常数， $r$  为两原子间的距离，说明式中两项的物理意义及物理来源。

第一项为原子之间的相互排斥力，起源于泡利不相容原理；第二项表示原子之间的相互吸引力，起源于原子的瞬时偶极矩的吸引作用。

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。

7. 试用能带论简述导体、绝缘体和半导体中电子在能带中填充的特点。

导体中电子最高填充的能带不是满带，因而可以导电；绝缘体中电子最高填充的能带是满带，而更高的能带是空的，而且二者之间隔着较宽的禁带；半导体最高填充的能带是满带，而更高的能带是空的，二者之间隔着禁带，但禁带宽度较小。

二、（9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  $\beta$ ，求该一维单原子链的色散关系。

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

将

$$x_n = A e^{i(qna - \omega t)}$$

$$-m\omega^2 A e^{i(qna - \omega t)} = \beta A \{e^{i[q(n+1)a - \omega t]} + e^{i[q(n-1)a - \omega t]} - 2e^{i(qna - \omega t)}\}$$

$$-m\omega^2 = \beta(e^{iqa} + e^{-iqa} - 2)$$

$$m\omega^2 = \beta(2 - 2\cos qa)$$

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m}(1 - \cos qa) = \frac{2\beta}{m}(2\sin^2 \frac{qa}{2})$$

$$\omega = 2 \left( \frac{\beta}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

三、（13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  $\Gamma$  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、(13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。

(1) 试推导  $T=0\text{K}$  时自由电子气费米能表达式。

(2) 计算钠晶体电子的弛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  $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$ )

(1)

$$N(E) = 2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \times 2\pi \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} = 4\pi V \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}$$

$$N = \int_0^{E_F} N(E) dE = \int_0^{E_F} 4\pi V \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE = \frac{8\pi V}{3} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E_F^{\frac{3}{2}}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}}$$

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

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

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

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

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