

中山大学本科生期末考试

考试科目：《固体物理与结构物性》（B卷）

学年学期：2014 学年第 2 学期 姓 名： _____
学 院/系：理工学院 学 号： _____
考试方式：半开卷 年级专业： _____
考试时长：120 分钟 班 别： _____

警示 《中山大学授予学士学位工作细则》第八条：“考试作弊者，不授予学士学位。”

-----以下为试题区域，共五道大题，总分 100 分，考生请在答题纸上作答-----

一、名词解释题（选5题，每小题4分，共20分）

1. 晶胞：反映晶体对称性的，包括平移和点群对称操作的最小体积重复单元。
2. 晶面指数：用于表征（一族相互平行晶面）晶面族的取向的、基于原胞定义的一组互质整数数字 $(h_1h_2h_3)$ ，使得其中一晶面与晶轴载距为 $(1/h_1, 1/h_2, 1/h_3)$ 。
3. 能态密度：单位体积中动量空间中能 (E) 面附近 (dE) 的状态数目 (dN) 。
4. 费米面：绝对零度下， k 空间中区分电子占据与未占据的等能面。
5. 第一布里渊区：倒格子空间中，选取某一倒格点做为原点，做其与最近邻格点连线的垂直平分面，这一系列垂直平分面围成的封闭空间，即第一布里渊区。
6. 螺旋位错：晶体内由于原子局部不规则排列所造成的微观线缺陷，其布氏矢量与位错线相平行。（布氏矢量：从实际晶体中任意一个原子M出发，环绕位错作一闭合回路MNOPQ（布氏回路），回路的每一步都连接相邻的原子；按同样的方法在完整晶体中作相同的回路，这时它的终点Q和起点M不能重合，故需自终点Q到起点M引一矢量QM使两者重合，这矢量就是此位错的布氏矢量。）

二、判断改错题（共10小题，每小题3分，共30分，如知错不改或不说明理由，只能得2分）

1. 以六方密堆积结构的格点为基元形成的格子是布喇菲格子：（错，以相邻两个格点

为基元形成的格子是布喇菲格子)。

2. X射线衍射的斑点来源于晶体中满足布拉格条件的某个晶面上所有原子对入射X射线的衍射波叠加：(错，由满足布拉格条件的某一族晶面上的所有原子的贡献)。
3. 金刚石晶体的声子频率普遍比金属铅的高。：(对。这里考虑到原题里面氯化钾和硫的声子谱不容易查到，在考试时判断两者热容的差别有困难，所以换成相对容易判断的题：碳原子的质量较小，而且金刚石通过sp³共价键合，作用比金属键强，所以对于声学支声子频率普遍较高；金属铅没有光学支，金刚石的声学支更应该比金属铅的声学支高。)
4. 电子在晶体中的空间机率分布具有与晶格一致的平移对称性：(对)。
5. 热导好的材料电导一定好：(错，对于绝缘体和半导体来说，其导热机制主要为格波导热，此时虽然其热导率可以很高，但是由于缺少参与导电的载流子，其电导率很低。如金刚石)。
6. 空位是真实空间的一种点缺陷，而空穴则是k空间的一种状态空缺的表现：(对)。
7. 声子谱可通过中子散射实验观测到：(对)。
8. 电阻是晶体内周期性势场对电子的散射引起的。(错，周期性核势场对电子不会产生散射，但振动着的原子核(声子)或缺陷会对电子造成散射而导致电阻)。
9. 理想晶体应该是无色透明的。(错，看带隙，如果带隙落在可见光波段，则晶体会对光产生吸收，表现出一定的颜色)。
10. T=0K时，半导体的能带的填充情况和绝缘体相同，其能带的主要差别在于禁带宽度。(对)。

三、简答题(共3小题，每小题8分，共24分)

1. 写出你对周期性边界条件的理解。(提示：什么是周期性边界条件？为什么要引入周期性边界条件？在哪里用过周期性边界条件？应用周期性边界条件后有什么重要结果？周期性边界条件是否总是对的？)(8分)

参考答案：

周期性边界条件：(以一维晶体为例)，对含N个原子的晶体，设第N个原子平移一晶格常数处有一虚拟的第N+1个原子(或通过把含N个原子的一维晶体首尾相接来说明)，其原子或电子的运动状态与第1个原子的完全相同，[或 $u(1) = u(N+1)$]称为周期性边界条件。(3分) 有关引入周期性边界条件的看法：首先，我们把晶格看作无穷大，即晶格

具有平移对称性，但是，实际晶体平移对称性在边界受到破坏；其次，在具有平移对称性的晶格中，波具有行波的性质。而周期性边界条件可以使有限晶体既保持晶格的平移对称性，又保证方程有行波解，所以，有了周期性边界条件，就可以处理有限尺寸的晶体问题，这给计算带来极大的简化。（2分）在固体物理学中，我们用周期性边界条件处理过格波问题（及连续介质中的波），索末菲模型中的自由电子问题，和周期性势场中的布洛赫电子问题。（1分）应用周期性边界条件后，这些波（格波，自由电子的行波和布洛赫波）的运动状态并非连续变化的，而是分立的，（其可能状态数为晶体的自由度数）（1分）。在有限大晶格情形，当组成晶格的原子足够多时，边界效应可以忽略不计，此时，周期性边界条件是对的；但当原子数少时，大部分的原子不再具有平移对称性，边界效应变得显著，则周期性边界条件不再适用。所以，周期性边界条件只是一种近似，且在原子数足够多时是一种很好的近似。（1分）

2. **错误!未找到引用源。**对于晶格常数为 a 的简单立方格子，已知其某一条能带为 $E(k) = E_0 - 2J_0(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$ ，其中 E_0 和 J_0 是常数，请画出第一布里渊区中沿 $[110]$ 方向该能带曲线，并请指出当电子的波矢为 $\vec{k} = \frac{\pi}{a}\vec{i} + \frac{\pi}{a}\vec{j}$ 时导致电子产生布拉格反射的晶面有哪些（提示：电子产生布拉格反射的条件与X射线产生布拉格反射的条件类似）。

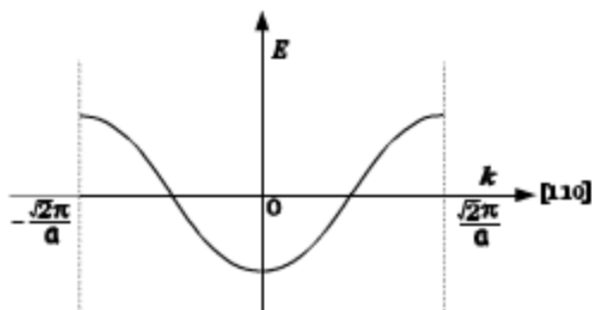
参考答案要点：

$[110]$ 方向 $k_x = k_y$, $k_z = 0$ ，于是电子的能带为

$$E(k) = E_0 - 2J_0(\cos k_x a + \cos k_x a + 1) = E_0 - 2J_0 - 4J_0 \cos k_x a = E_0 - 2J_0 - 4J_0 \cos \frac{k}{\sqrt{2}} a$$

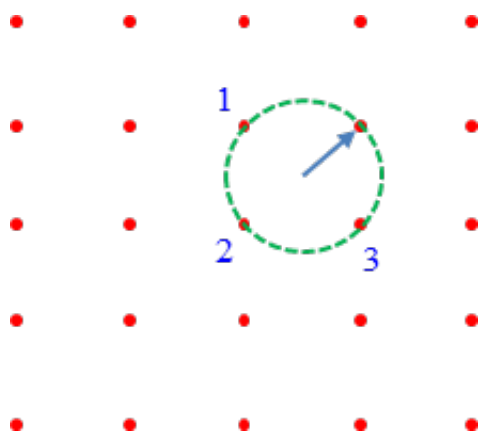
$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \sqrt{2k_x^2} = \sqrt{2}k_x$$

为余弦函数形式，如下图所示



带宽为 $8J_0$ 。

采用爱华德球，电子能够产生布拉格反射的条件为下图所示的 3 个方向



沿这三个方向电子的波矢差所对应的倒格矢为 $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}0]$, 因此能够对电子产生布拉格反射的晶面族为 (100) , (010) 和 (110) , 其中 (100) 和 (010) 晶面族实际上是等价的。

3. 请描述在能带论中是如何把多粒子问题简化为单电子问题的?

参考答案要点:

第一步是把原子核与核外内层电子考虑成一个整体—离子实, 使原子中的多体问题简化为离子实与外层电子的问题; 第二步是绝热近似 (海森堡近似), 考虑到离子实的质量比较大, 离子运动速度相对慢, 位移相对小, 在讨论电子问题时, 可以认为离子是固定在瞬时的位置上, 同时这些原子实产生了一个周期势场, 这样, 多种粒子的问题就简化成多电子问题; 第三步, 忽略电子之间的相互作用 (理想电子气), 利用哈特里—福克自洽场方法, 多电子问题简化为单电子问题, 每个电子是在固定的离子势场和其他电子的平均场中运动; 并且这个平均场是周期性势场。

四、计算题 (共1小题, 每小题16分, 共16分)

图-2 示出二维 NaCl 结构的晶格, 最近邻原子间距为 a ,

- 1) 画出此结构的布啦菲格子 (2 分)
- 2) 用图示出其基元 (2 分)
- 3) 画出惯用固体物理学原胞, 并给出惯用原胞的正格矢基矢 (2 分)
- 4) 请给出惯用原胞的倒格矢基矢 (2 分)
- 5) 画出倒格子和第一布里渊区 (2 分)
- 6) 有几支格波? 声学支、光学支分别有几支? (2 分)
- 7) 当入射 X 射波长大于 $2a$ 时, 能否产生 X 射线衍射? (2 分)

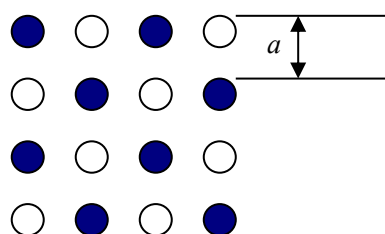


图 1

8) 对沿 $\langle 110 \rangle$ 方向入射的 X 射线, 请给出 $a < \lambda < 2a$ 情况下可能产生衍射的方向 (2 分)

参考答案

- 1) 画出此结构的布啦菲格子: 实心圆点抽象出来的点阵, 见图-a) (2 分)
- 2) 用图示出其基元: 见图-a)虚线方框部分 (2 分)
- 3) 画出惯用固体物理学原胞: 见图-b)绿框部分; 并给出惯用原胞的正格矢基矢:
 $\vec{a}_1 = a(\vec{i} - \vec{j}); \vec{a}_2 = a(\vec{i} + \vec{j})$; 见图-b)绿色箭头及文字 (2 分)
- 4) 请给出惯用原胞的倒格矢基矢: $\vec{b}_1 = \frac{\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j}); \vec{b}_2 = \frac{\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$; 见图-c)红色箭头及文字(2 分)
- 5) 画出倒格子和第一布里渊区: 取倒格矢基矢中垂线所围成的正方形区域, 见图-c)灰色方框区域 (2 分)

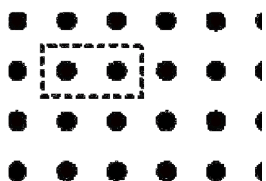


图-a)

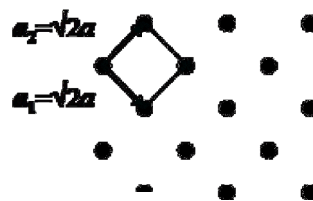


图-b)

6) 有几支格波? 声学支、光学支分别有几支? (2 分)
 对由两种元素组成的二维复式格子, 共 4 支格波, 声学支、光学支各 2 支。

7) 当入射 X 射波长大于 a 时, 能否产生 X 射线衍射? 为什么? (2 分)

从布啦格方程: $2d\sin\theta = n\lambda$, 因为 $\sin\theta < 1$, 对最大“晶面”间距 $\sqrt{2}a$ 或次大间距 a , 及 $\lambda = 2a$, 考虑一级衍射, 总可使布啦格方程成立, 故能产生 X 射线衍射。

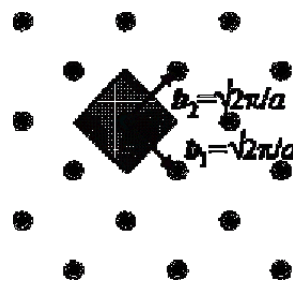


图-c)

8) 因为 $k = 2\pi/a > \sqrt{2}\pi/a$, 作爱华尔德球可知, 除反射外, 还有垂直于入射方向的两个衍射方向

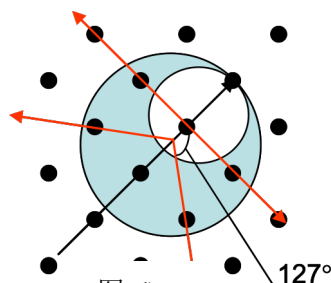


图-d)

以及与入射方向成 $180^\circ - 2\arctg(1/2) = 127^\circ$ 方向的另外两个衍射。(见图-d) 红色箭头方向)

五、综合题 (共1小题, 每小题10分, 共10分)

请谈谈你对固体中的波的认识。

参考答案:

主要涉及到格波和布洛赫波 (各2分):

格波: 晶格 (周期性排列的原子/广义的, 具有平衡对称性的相互作用质点) 振动在晶体中的传播, 其色散关系在偏离长波极限后是非线性的。(存在最小波长, 为晶格常数的2倍)。

布洛赫波: 电子在晶格中的传播所形成的振幅周期性调制的平面波, 其调制周期与晶体周期一致。

谈及格波和布洛赫波与其量子化粒子 (声子和有效质量电子及空穴) 的关系 (各1分):

声子: 格波的量子即是声子, 是描述组成晶格的原子的集体运动状态的元激发。具有色散关系, 其色散关系在偏离长波极限后是非线性的。一种声子与某一模式的格波一一对应, 声子是玻色子, 在一定温度下服从玻色-爱因斯坦分布。

有效质量电子: 电子在晶格中传播由布洛赫波描述, 考虑了晶场作用之后, 布洛赫波可以等效成一个带负电的、具有一定有效质量的电子, 其有效质量与电子所处的能带有关, 由能带色散关系对波矢的二阶导数的倒数决定。

空穴: (在倒空间) 价带中 (靠近价带顶) 出现某一电子空缺的近满带的电子运动等效于一个带正电荷、正质量的准粒子的运动, 称此准粒子为空穴。

谈及周期性“势”对波的作用: 衍射和反射与布里渊区边界 (3分):

固体物理中经常会涉及各种波在周期性势场中的传播, 以及周期性势场对波的散射和衍射。包括X射线的衍射、格波的布拉格反射和布洛赫波的布拉格反射等。其中当入射波矢到达布里渊区边界的时候, 散射或衍射最显著。此时, 入射波会受到晶格所有原子的强烈散射, 使得散射波与入射波达到同相叠加, 或者散射波之间形成同相叠加, 形成驻波。

谈及带隙这一现象的起因: 驻波 (2分)。

当入射波矢到达布里渊区边界的时候, 散射或衍射最显著。此时, 入射波会受到晶格所有原子的强烈散射, 使得散射波与入射波达到同相叠加, 或者散射波之间形成同相叠加,

形成驻波。对于布洛赫波，不同的驻波态对应于电子密度分布的不同，导致电子感受到的势能不一样，此即能隙的起因。

扩展到其他波（加1至2分）：如X射线、自旋波、极化子波、电荷密度波等。