

中山大学本科生期末考试

考试科目：《固体物理》（A 卷）

学年学期：2015 学年第 2 学期
 学院/系：理工学院
 考试方式：闭卷
 考试时长：120 分钟
 任课老师：王雪华/喻颖

姓名：_____
 学号：_____
 年级专业：13 级 光电信息科学*
 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 5 道大题，总分 100 分，考生请在答题纸上作答-----

一、名词解释题（共 5 小题，每小题 6 分，共 30 分）

1、基元、原胞、布拉格反射；

基元：晶体结构的最小重复单元，具有物理内涵，可以是原子或原子团。

原胞：晶格最小周期性的最小单元。

布拉格反射：连接原点和某一倒格点的倒格矢 G_h 的垂直平分面称为布拉格平面。由于满足相长干涉的劳厄条件 $\vec{k} \cdot \vec{G}_h = \frac{1}{2} G_h$ ，或 $G_h = 2k \sin \theta$ ，所以，相干散射可看作正格子中与倒格矢 G_h 垂直的一组晶面对 X 射线的反射，即布拉格反射。

2、晶格振动的 Einstein 模型、Debye 模型；

Einstein 模型：假定晶体中所有简正模式都具有相同的频率

Debye 模型：把晶体是各向同性的连续弹性介质，格波可以看成连续介质的弹性波。

3、声子、声学声子、光学声子；

声子：是一种准粒子，是晶体原子集体运动形成的格波的能量激发单元。

声学声子：晶格中波数 $q=0$ 时振动频率也等于零的格波所对应的能量量子。

光学声子：复式晶格中波数 $q=0$ 时振动频率不等于零的格波所对应的能量量子。

4、布洛赫波、简约布里渊区；

布洛赫波：晶体中电子的波函数是按晶格周期调幅的平面波，称为布洛赫波。

电子有效质量：按照准经典模型，对外电场、磁场采用经典的处理方式，对晶格周期场沿用能带论量子力学的处理方式，则布洛赫电子的运动方程为 $\therefore \vec{F} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$ ，加速度为 $\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \nabla_{\vec{k}} \nabla_{\vec{k}} E$

该式与 $\vec{v} = \frac{1}{m} \vec{F}$ 形式类似，只是现在一个二阶张量代替了 $1/m$ ，令则 m^* 称为电子的有效质量，它是一个张量。

$$\left[\frac{1}{m^*} \right] = \frac{1}{\hbar^2} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{bmatrix}$$

可见，有效质量不是电子的真实质量，而是在能量周期场中电子受外力作用时，在外力与加速度的关系上相当于牛顿力学中的惯性质量。电子的有效质量 m^* 本身已概括了周期场对电子的作用。有效质量不仅可以取正，也可以取负。这都取决于晶格力的大小与方向，即周期场对电子运动的影响。这种影响主要通过布里渊区边界附近发生 Bragg 反射，而在电子与晶格之间交换动量这种形式反映出来的。

简约布里渊区：在倒格子空间中以任意一个倒格点为原点，做原点和其他所有倒格点连线的中垂面(或中垂线)，这些中垂面(或中垂线)将倒格子空间分割成许多区域，这些区域称为布里渊区。把倒格子空间中的 WS 原胞称为第 1 布里渊区，或简约布里渊区，亦即在倒格子空间中，从 $K=0$ 的原点出发，不经过任何布拉格平面所能到达的所有点的集合。

5、导带、空穴、朗道能级。

导带：能带中只有部分能态填有电子，而其余的能态为没有电子填充的空态。

空穴：在外加电场或磁场下，一个几乎填满的能带中的电流可以看作是由一个假象的带正电的粒子所携带，这些粒子填充了能带中那些未被电子占据的所有状态，这种假象粒子称为空穴。

朗道能级：电子在恒定磁场中运动，根据量子理论，在垂直磁场平面内电子的匀速运动中运动对应于一种简谐振动，其能量量子化的，我们将这些量子化的能级成为朗道能级。

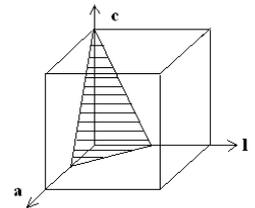
二、判断题（共 20 小题，每小题 1 分，共 20 分）

1. 晶胞是描述晶体结构的最小体积重复单元。(×)
2. 对于一定的布喇菲晶格，基矢的选择是不唯一的，但是对应的倒格子空间是唯一的。(√)
3. 布拉格反射发生在晶体的边界上。(×)
4. 二维蜂房结构分别有声学支格波和光学支格波各 2 支。(√)
5. 即使在绝对零度，价电子与晶格仍有能量交换。(×)
6. 声子的作用过程遵从能量守恒和准动量守恒，但声子数不守恒。(√)
7. 电阻是周期性势场对电子的散射引起的。(×)
8. 电子 Pauli 顺磁有贡献的只是在费米面附近的一小部分电子。(√)
9. 通过研究德·哈斯-范·阿尔芬效应通常用来测量金属的有效质量。(×)
10. 非常低的温度下，短波声子才会被热激发。(×)
11. 最基本的点对称操作只有 8 个，分别是 $E, C_2, C_3, C_5, C_6, i, m, S_4$ 。(×)
12. 在恒定电场中，电子在 K 空间做匀速圆周运动，在实空间做周期性振荡运动。(×)

13. 能带中电子运动的半经典模型描述没有碰撞时布洛赫电子在外加电场或磁场下的运动。(√)
14. 对于能带顶部的电子, 其有效质量 m^* 小于零。(√)
15. 原子间距越小, 电子波函数的重叠就越多, 所形成的能带就越宽。(√)
16. 声子服从费米-狄拉克统计。(×)
17. 热膨胀是由于非简谐效应所致。(√)
18. 当光与光学波相互作用时, 称为布里渊散射; 当光与声学波相互作用时, 称为拉曼散射。(×)

三、选择题 (共 3 小题, 每小题 2 分, 共 6 分)

1. 一立方晶系的晶格常数为 a , 如图所示的三角形平面的晶面指数为 (C)
 A. (112); B. (122); C. (221); D. (211); E. (110)
 此晶面的晶面间距为 (E)



- A. $\frac{\sqrt{6}}{6}a$ B. $3a$ C. $\frac{\sqrt{2}}{2}a$ D. $\sqrt{6}a$ E. $\frac{1}{3}a$

2. 晶格振动格波的总数等于 (A)

- A. 自由度数 B. 振动波矢总数 C. 原胞数 D. 晶胞数 E. 晶体的简并度

3. 黄昆方程是 (C)

- A. $\vec{W} = b_{11}\vec{W} + b_{12}\vec{E}$; B. $\vec{W} = b_{11}\vec{W} + b_{12}\vec{E}$; C. $\vec{W} = b_{11}\vec{W} + b_{12}\vec{E}$;
 $\vec{P} = b_{21}\vec{W} + b_{22}\vec{E}$ $\vec{P} = b_{21}\vec{W} + b_{22}\vec{E}$ $\vec{P} = b_{21}\vec{W} + b_{22}\vec{E}$;
 D. $\vec{W} = b_{11}\vec{W} + b_{12}\vec{E}$; E. $\vec{W} = b_{11}\vec{W} + b_{12}\vec{E}$
 $\vec{P} = b_{21}\vec{W} + b_{22}\vec{E}$ $\vec{P} = b_{21}\vec{W} + b_{22}\vec{E}$

四、简答题 (共 4 小题, 每小题 3.5 分, 共 14 分)

1. 简单解释为何在 $T=0K$ 时仍有较大的平均动能。

按照经典统计理论, 在绝对零度时平均能量($=3k_B T/2$)等于零。按照索末菲模型, 电子必须满足泡利不相容原理, 每个状态只许可容纳两个自旋方向相反的电子, 故在绝对零度时, 不可能所有的电子都填在最低能量状态, 使平均能量仍有较大值。

2. 简述离子晶体中声学波和光学波的振动物理图象。

设三维无限大的离子晶体, 每个原胞(含一个格点)中有 s 个原子(s 大于 2), 当波矢 q 趋于 0 时, 振动频率 $\omega_i = v_i \cdot q$ ($i=1,2,3$), 这 3 支格波称为声学支格波, 描述原胞的整体振动, 与弹性波一致; 其余的($3s-3$)支格波称之为光学支格波, 它们在长波近似下, 描写 s 个子晶格的相对振动, 且原胞的质心保持不动。

在离子晶体中, 长波极限下, 与 ω_+ 对应的两种原子的振动方向相反, 出现极化现象, 所以, 这种振动类似于振荡电偶极矩, 可以和同频率的电磁波相互作用, 引起共振吸收。在实际的离子晶体中, 会导致强烈的远红外吸收。这是由于极化场增加了纵向振动的恢复力, 长光学纵波的频率 ω_{LO} 恒大于长光学横波的频率 ω_{TO} (LST 关系), 使得长光学支的简并被破坏, 出现了一个频率的禁区。

3. 简述晶体中电子的布洛赫振荡现象以及实验观测该现象的条件。

如果晶体处在恒定的电场中，在电场力的作用下，状态不断发生变化，对应在 k 空间作匀速直线运动，从简约布里渊区来看，相当于电子在 k 空间作循环运动。它将穿越各种能量的等能面，能量梯度的大小和方向都不断变化，即电子在 r 空间的速度和位置将不断变化。由于一个电子载有的电流比例于它的速度，意味着直流的外加电场将产生交变的电流，这种效应称为布洛赫振荡(Bloch oscillation)。

❖ 由于电子在运动过程中不断受到声子、杂质和缺陷的散射，上述的振荡现象实际上很难观察到。若相邻两次散射（碰撞）间的平均时间间隔 τ 很小，电子还来不及完成一次振荡过程就已被散射。

$$\text{电子振荡周期: } T = \frac{\text{简约区的宽度}}{\text{电子在 } k \text{ 空间的速度}} = \frac{2\pi/a}{e\varepsilon/\hbar} = \frac{2\pi\hbar}{e\varepsilon a}$$

为了观察到电子振荡的全过程，要求 $\tau \geq T$

在晶体中: $\tau \sim 10^{-12} - 10^{-13} \text{ s}$, $a \approx 3 \times 10^{-10} \text{ m}$

→ 满足要求所需加的电场 ε : $10^4 \sim 10^5 \text{ V/cm}$

4. 以能带理论简单解释绝缘体、半导体、金属以及 Wilson 转变。

能带论指出，能带中满带中电子不能导电，不满带中的电子才导电。导体（金属）的能带中一定有不满的带；绝缘体的能带中不是满带就是空带；半导体中有杂质原子存在时，导致满带缺少一些电子，原空带中也有少数电子，无杂质的半导体的满带与空带之间的禁带一般比绝缘体的小，少数电子会由满带热激发到空带底，可以导电。

Wilson 转变：在紧束缚近似情况下，能带的宽度取决于近邻原子间电子波函数的重叠积分，原子间距越小，电子波函数的重叠就越多，所形成的能带就越宽。在高压下，原子间距变小，就有可能出现能带的重叠，从而实现绝缘体向金属的转变。

五、计算题（共 3 小题，每小题 10 分，共 30 分）

1. 用紧束缚法处理简单立方晶格 s 态电子（每个原子含有一个电子），试导出其能带关系，并求出能带底的有效质量及电子运动的速度。

答：（1）紧束缚近似处理是能带可以表示为：

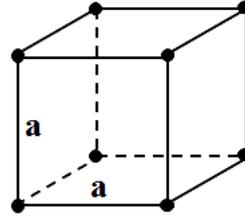
$$E_s(\vec{k}) = E_s^{at} - J_0 - J_s \sum_n e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_n}$$

由于s态的原子波函数是球对称的，有

$$J(\vec{R}_s) = J_1 \quad R_s = \text{近邻格矢}$$

对于简单立方：

$$R_s = (\pm a, 0, 0), (0, \pm a, 0), (0, 0, \pm a)$$



$$\begin{aligned} \therefore E(\vec{k}) &= \varepsilon_s - J_0 - J_1 (e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a}) \\ &= \varepsilon_s - J_0 - 2J_1 (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \end{aligned}$$

(3) 在简约布里渊区中心 $k_x = k_y = k_z = 0$ 处，能量有最小值， $(\varepsilon_s)_{\min} = \varepsilon_s^{\text{at}} - \alpha - 6\beta$ ，称为能带底。

在简约布里渊区边界 $k_x, k_y, k_z = \pm \frac{\pi}{a}$ 处，能量有最大值： $(\varepsilon_s)_{\max} = \varepsilon_s^{\text{at}} - \alpha + 6\beta$

称为能带顶。(4) 有效质量分量满足： $\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$

$$\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i^2} = 2\beta a^2 \cos ak_i, \quad i = x, y, z, \text{其它二阶导数为零}$$

能带底 $k_x = k_y = k_z = 0$ 处的有效质量： $m_{xx}^* = m_{yy}^* = m_{zz}^* = m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 J_1}$

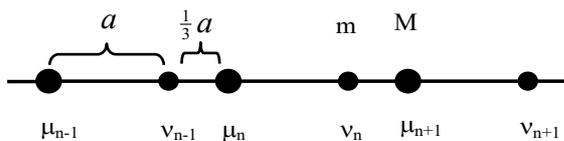
能带顶 $(\pm \frac{\pi}{a}, 0, 0), (0, \pm \frac{\pi}{a}, 0), (0, 0, \pm \frac{\pi}{a})$ 处， $m_{xx}^* = m_{yy}^* = m_{zz}^* = m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 J_1}$

(5) 电子运动的速度： $\vec{v} = v_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k})$

$$\varepsilon_s(k) = \varepsilon_s^{\text{at}} - \alpha - 2\beta(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

$$\vec{v} = v_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon_n(\vec{k}) = \frac{2\beta a}{\hbar} (\sin k_x a \hat{k}_x + \sin k_y a \hat{k}_y + \sin k_z a \hat{k}_z)$$

2. 质量分别为 M 和 m (设 $M > m$) 的两种原子以 a 和 $a/3$ 相间排成如图所示的一维晶体链, 若只考虑近邻原子间的弹性相互作用, 设相邻原子间的恢复力系数同为 β ,



- (1) 写出每种原子的动力学方程式;
- (2) 写出格波方程式;
- (3) 导出色散关系式。

答: 若只考虑近邻原子间的弹性相互作用, 第 n 对大小原子的运动方程为:

$$M\ddot{u}_n = \beta(\dot{v}_n + \dot{v}_{n-1} - 2\dot{u}_n)$$

$$m\ddot{v}_n = \beta(\dot{u}_n + \dot{u}_{n+1} - 2\dot{v}_n)$$

设格波方程式为

$$u_n = A \exp\left[i\left(qn\frac{4}{3}a - \omega t\right)\right] \quad v_n = B \exp\left[i\left(qn\frac{4}{3}a + qa - \omega t\right)\right]$$

代入 \Rightarrow

$$\begin{cases} -M\omega^2 A = \beta [B \exp(iqa) + B \exp(iqa - \frac{4}{3}iqa) - 2A] \\ -m\omega^2 B = \beta [A \exp(-iqa) + A \exp(\frac{4}{3}iqa - iqa) - 2B] \end{cases}$$

整理 \Rightarrow

$$\begin{aligned} (2\beta - M\omega^2)A - \beta [\exp(iqa) + \exp(-\frac{1}{3}iqa)]B &= 0 \\ -\beta [\exp(-iqa) + \exp(\frac{1}{3}iqa)]A + (2\beta - m\omega^2)B &= 0 \end{aligned}$$

$A, B \neq 0 \Rightarrow$ 行列式为 0

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} 2\beta - M\omega^2 & -\beta [\exp(iqa) + \exp(-\frac{1}{3}iqa)] \\ -\beta [\exp(-iqa) + \exp(\frac{1}{3}iqa)] & 2\beta - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{\beta}{mm} \left\{ (M+m) \pm \sqrt{(M+m)^2 - 4mM \sin^2 \frac{2}{3}qa} \right\}$$

3. 求一维、二维和三维情形下，自由电子的能态密度。分别示意画出一维，二维，三维自由电子气的能态密度曲线。

附加（5分）：从统计物理的角度出发，低能激发态被热运动激发的概率比高能激发态大得多。如果低能激发态的能态密度大，体系的热涨落就强，相应的有序度降低或消失，不易出现有序相。由上述结果说明对于一维、二维、三维系统是否具有长程序，为什么？

答：

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

三维：能量为 E 的球内，波矢 k 总数

$$Z(\vec{k}) = \rho(\vec{k}) \frac{4}{3} \pi k^3 = \frac{V}{8\pi^3} \frac{4}{3} \pi k^3$$

$$\text{该球中电子态总数 } Z(E) = 2 \frac{V}{8\pi^3} \frac{4}{3} \pi k^3 = \frac{(2m)^{3/2} V}{3\pi^2 \hbar^3} (E)^{3/2}$$

$$\Rightarrow \text{能态密度 } N(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{(2m)^{3/2} V}{3\pi^2 \hbar^3} \frac{3}{2} (E)^{1/2} = \frac{(2m)^{3/2} V}{2\pi^2 \hbar^3} (E)^{1/2}$$

二维：能量为 E 的面内，波矢 k 总数

$$Z(\vec{k}) = \rho(\vec{k}) \pi k^2 = \frac{S}{4\pi^2} \pi k^2$$

$$\text{该球中电子态总数 } Z(E) = 2 \frac{S}{4\pi^2} \pi k^2 = \frac{mS}{\pi \hbar^2} E$$

$$\Rightarrow \text{能态密度 } N(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{mS}{\pi \hbar^2}$$

一维：能量为 E 的线内，波矢 k 总数

$$Z(\vec{k}) = \rho(\vec{k}) 2k = \frac{L}{2\pi} 2k = \frac{L}{\pi} k$$

$$\text{该球中电子态总数 } Z(E) = 2 \frac{L}{\pi} k = 2 \frac{(2m)^{1/2} L}{\pi \hbar} E^{1/2}$$

$$\Rightarrow \text{能态密度 } N(E) = \frac{dZ}{dE} = 2 \frac{(2m)^{1/2} L}{\pi \hbar} \frac{1}{2} E^{-1/2} = \frac{(2m)^{1/2} L}{\pi \hbar} E^{-1/2}$$

加入磁场B, 使x-y方向能量量子化, z方向仍然连续

$$\text{则 } E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + (n+1)\hbar\omega_0$$

考虑x-y平面 $\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0$ $\omega_0 = \frac{eB}{m^*}$

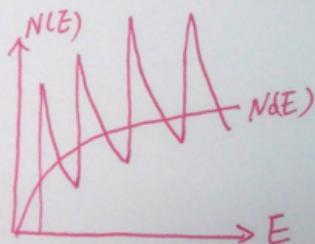
$$\text{则 } 2\pi k_{xy} dk_{xy} = \pi dk_{xy}^2 = \pi d\left(\frac{2m^*}{\hbar^2} (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0\right)$$

$$= \pi \frac{2m^*}{\hbar} \omega_0 dn$$

$$= \pi \frac{2eB}{\hbar} dn$$

$$dn=1$$

\therefore x-y平面的简并度 $D_{xy} = 2\pi \frac{L^2}{4\pi} \times 2\pi k_{xy} dk_{xy}$ $\frac{L^2}{4\pi}$ 为电子数密度



$$= 2\pi \frac{L^2}{4\pi^2} \times \pi \cdot \frac{2eB}{\hbar}$$

$$= \frac{eB}{\pi\hbar} L^2$$

L^2 写成 $L_x L_y$ 也可以

考虑 dk_z 范围 k_z 有 $\frac{L}{2\pi} dk_z$, 则状态数为

$$z(n, k_z) dk_z = D_{xy} \frac{L}{2\pi} dk_z = \frac{eB}{2\pi\hbar} L^3 dk_z = \frac{eB}{2\pi\hbar} V_c dk_z$$

$$\therefore k_z = \sqrt{\frac{2m^* [E - (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega_0]}{\hbar^2}}$$

$$\therefore dk_z = \frac{m^*}{\hbar^2} \frac{\hbar^2}{2m^*} [E - (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0]^{-\frac{1}{2}} dE$$

$$\therefore z(n, E) dE = \frac{eB}{2\pi\hbar} V_c \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} [E - (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0]^{-\frac{1}{2}} dE$$

$$\underline{N(E) dE} = \sum_{n=0}^L z(E, n) dE = \underline{\sum_{n=0}^L \frac{eB}{2\pi\hbar} V_c \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} [E - (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0]^{-\frac{1}{2}} dE}$$