中山大学本科生期末考试

考试科目：《固体物理》（B 卷）

学年学期：2018 学年第 1 学期　　　　姓　　名：________
学 院/系：物理学院　　　　学　　号：________
考试方式：闭卷　　　　年级专业：15 级　光电信息科学*
考试时长：120 分钟　　　　班　　别：________
任课老师：朱海

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（共 5 小题，每小题 6 分，共 30 分）

1、 基元、晶胞、格点；

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。

晶胞：晶格既包括周期性又包括对称性的最小单元。

格点：在基元中任选一点（如重心），并在其他各基元选出相同点，把最近邻点相连接，抽象出三维几何网络，则此网络就叫格点

2、 费米球、费米面、费米温度；

当自由电子系统处于基态（绝对零度）时，被电子占据的轨道可以表示为 k 空间中一个球内的点，这个球被称作**费米球，**球面为**费米面，**它是被电子占据与未被占据状态的分界面。**费米温度**定义为 E_F/k_B ,其中 E_F 为费米能，它并不是一个真实的温度。

3、 声子的 Raman 散射和 Brillouin 散射；

声子的 Brillouin 散射：当光与声子的声学波相互作用，散射光的频率移动很小，称为声子 Brillouin 散射。

声子的 Raman 散射：当光与声子的光学波相互作用，散射光的频率移动很大，称为声子 Raman 散射。

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。

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、满带、空穴、朗道能级。

满带：能带中所有的能态均已被电子所填满。

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：根据量子理论，在垂直于磁场平面内的电子做匀速圆周运动对应于一种简谐振动，其能量是量子化的，我们将这些量子化的能级称为朗道能级。

二、判断题（共 18 小题，每小题 1 分，共 18 分）

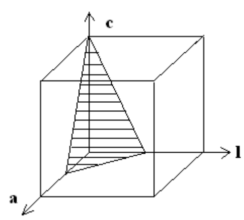
1. NaCl 晶体具有一些金刚石没有的衍射斑点。（√）
2. 面心立方的致密度与六角密堆相同，但小于体心立方的致密度。（×）
3. 布拉格反射发生在晶体的边界上。（×）
4. 对于一维双原子问题，声学波原胞中两种原子振动相位基本相同，无相对振动。（√）
5. 最基本的点对称操作只有 8 个，分别是 E，C_2，C_3，C_5，C_6，i，m，S_4。（×）
6. 每个布里渊区的体积均相等，都等于倒格子原胞的体积。（√）
7. 正规过程即为 U 过程，不产生热阻。（×）
8. 声子服从费米－狄拉克统计。（×）
9. 黄昆方程的第二方程为极化方程。（√）
10. 德·哈斯－范·阿尔芬效应是确定载流子有效质量的用力工具。（×）
11. 格波的色散关系只能在第一布里渊区表示才有物理意义。（√）
12. 采用半经典理论分析电子在外场的运动，是用电子的波包速度代替电子的速度。（√）
13. 布里渊区的边界面一定是能量的不连续面。（×）
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. 一般情况下，晶体中电子的有效质量是各向同性的。（×）
17. 热膨胀是由于非简谐效应所致。（√）
18. 高温下，晶格的比热随温度不变，而低温下，晶格的比热随温度的变化规律是正比于 T^3。（√）

三、选择题（共 3 小题，每小题 2 分，共 6 分）

1. 金刚石结构属于（D）
   A．简单立方； B. 体心立方； C. 钙钛矿结构； D. 面心立方； E. 六角密堆积

2. 晶格振动格波的总数等于（A）
   A．晶体的自由度数 B. 晶体的振动波矢总数 C. 晶体的原胞数 D. 晶体的晶胞数

3. 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. $\frac{1}{3}a$

四、简答题（共 4 小题，每小题 4 分，共 16 分）

1. （3 分）试以能带论的观点来划分导体，半导体和绝缘体。

答：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。

2. （3 分）在绝对零度时还有格波存在吗？若存在，格波间还有能量交换吗？

答：频率为 ω_i 的格波的振动能为

$$\varepsilon_i = (n_i + \frac{1}{2})\hbar\omega_i$$

其中 $n_i\hbar\omega_i$ 是由 n_i 个声子携带的热振动能，$\frac{1}{2}\hbar\omega_i$ 是零点振动能，声子数

$$n_i = \frac{1}{e^{\hbar\omega_i/k_BT} - 1}$$

绝对零度时，$n_i = 0$。频率为 ω_i 的格波的振动能只剩下零点振动能

格波间交换能量是靠声子的碰撞实现的。绝对零度时，声子消失，格波间不再交换能量。

3. （3 分）近自由电子气理论做了哪些前提近似假设？

Born－Oppenheimer 绝热近似：所有离子实都周期性地静止排列在其格点位置上，因而忽略了电子与声子的碰撞。（多粒子问题简化成多电子问题）

Hatree－Fock 平均场近似：忽略电子与电子间的相互作用，用平均场代替电子与电子间的相互作用。（多电子问题计划称单电子问题）

周期势场近似：所有离子实势场和其它电子的平均场是周期性势场，电子在固体中将受到周期性势场的作用。

4. （3 分）简述什么是 Bloch 定理。

答：

在周期场中，描述电子运动的Schrödinger方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

$U(\vec{r})=U(\vec{r}+\vec{R}_\ell)$为周期性势 $\vec{R}_\ell=\ell_1\vec{a}_1+\ell_2\vec{a}_2+\ell_3\vec{a}_3$ 为格矢

波函数有如下性质：

$\psi(\vec{r}+\vec{R}_\ell)=e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_\ell}\psi(\vec{r})$ 或 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{\vec{k}}(\vec{r})$

这里，$u_k(r) = u_k(r+R_l)$ 是以格矢R_l为周期的周期函数。

布洛赫定理说明了一个在周期场中运动的电子波函数为：一个自由电子波函数 $u_k(\vec{r})$ 与一个具有晶体结构周期性的函数 $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ 的乘积。

五、计算题（共 3 小题，每小题 10 分，共 30 分）

1. 已知 Na 具有体心立方结构，点阵常数 a_{Na}=0.4282 nm，试求其绝对零度时的费米能、费米速度、费米温度、单位体积的电子气平均能。

$\hbar=1.055\times10^{-34}J\cdot s$ $m^*=m_0=9.11\times10^{-31}kg$

$k_B=1.38\times10^{-23}J/K$ $N=6.022\times10^{23}mol^{-1}$

Na具有体心立方结构，每个晶胞有2个原子，每个Al原子有1个自由电子，故

$$\text{自由电子密度}n=\frac{N}{V}=\frac{2\times1}{(4.282\times10^{-10})^3}\approx2.55\times10^{28}(m^{-3})$$

$$\text{绝对零度下的费米能}E_F^0=\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2n)^{2/3}\approx3.16(eV)$$

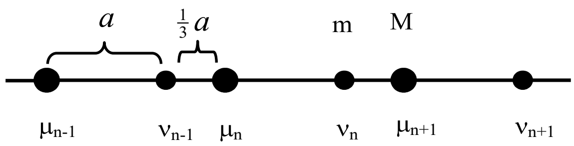
$$\frac{1}{2}mv_F^2=E_F^0\Rightarrow\text{费米速度}v_F^0=1.05\times10^6(m.s^{-1})$$

$$\text{费米温度}T_F^0=\frac{E_F^0}{k_B}\approx3.6\times10^4(K)$$

$$\text{每个电子的平均能}\overline{E}_0=\frac{3}{5}E_F^0$$

$$\Rightarrow\text{单位体积电子气平均能}\overline{E}=\frac{3}{5}nE_F^0\approx1.896(eV.m^{-3})$$

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：

$$M\ddot{u}_n = \beta(v_n + v_{n-1} - 2u_n)$$

$$m\ddot{v}_n = \beta(u_n + u_{n+1} - 2v_n)$$

取格波方程式为

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

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

整理 $\Rightarrow (2\beta - M\omega^2)A - \beta\left[\exp(iqa) + \exp(-\frac{1}{3}iqa)\right]B = 0$

$$-\beta\left[\exp(-iqa) + \exp(\tfrac{1}{3}iqa)\right]A + (2\beta - m\omega^2)B = 0$$

$A\cdot B \neq 0 \Rightarrow$ 行列式为0

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

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

3.用紧束缚发处理面心立方晶格 s 态电子，试导出其能带关系，并求出能带底的有效质量。

答：（1）紧束缚近似处理是能带可以表示为：

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

面心立方晶格只取最近邻格点坐标有 12 个：

$$\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},0\right),\left(\frac{a}{2},0,\frac{a}{2}\right),\left(0,\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right),\left(-\frac{a}{2},\frac{a}{2},0\right),\left(-\frac{a}{2},-\frac{a}{2},0\right),\left(-\frac{a}{2},0,-\frac{a}{2}\right),$$

$$\left(0,-\frac{a}{2},-\frac{a}{2}\right),\left(\frac{a}{2},-\frac{a}{2},0\right),\left(-\frac{a}{2},0,\frac{a}{2}\right),\left(0,-\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right),\left(\frac{a}{2},0,-\frac{a}{2}\right),\left(-\frac{a}{2},0,-\frac{a}{2}\right),$$

代入上式可以求的得：

$$E_s = E_s^{at} - C_s - 2J_s[\cos\frac{a}{2}(k_x+k_y)+\cos\frac{a}{2}(k_x+k_z)+\cos\frac{a}{2}(k_z+k_y)+\cos\frac{a}{2}(k_x-k_y)$$

$$\cos\frac{a}{2}(k_y-k_z)+\cos\frac{a}{2}(k_x-k_z)]$$

$$= E_s^{at} - C_s - 4J_s[\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2}+\cos\frac{k_z a}{2}\cos\frac{k_y a}{2}+\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_z a}{2}]$$

（2）当 E_s 最小时为能带底，此时 x,y,z 均为 0

$$m_{xx}^* = \left(\frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E_s}{\partial k_x^2}}\right)_{k_x=0} = \frac{\hbar^2}{-4J_s(-\frac{a^2}{4}-\frac{a^2}{4})} = \frac{\hbar^2}{2J_s a^2}$$

$$m_{yy}^* = \left(\frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E_s}{\partial k_y^2}}\right)_{k_y=0} = \frac{\hbar^2}{-4J_s(-\frac{a^2}{4}-\frac{a^2}{4})} = \frac{\hbar^2}{2J_s a^2}$$

$$m_{zz}^* = \left(\frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E_s}{\partial k_z^2}}\right)_{k_z=0} = \frac{\hbar^2}{-4J_s(-\frac{a^2}{4}-\frac{a^2}{4})} = \frac{\hbar^2}{2J_s a^2}$$

同时计算发现：$\frac{\partial^2 E_s}{\partial k_i k_j} = 0, i \neq j$，

因此有效质量就可以等于 $\frac{\hbar^2}{2J_s a^2}$