试题答案

一、 名词解释

1、 在以晶体学原胞的基矢为坐标轴的坐标系中，表征晶面取向的互质整数称为密勒指数。

2、 晶体有五种结合类型：离子晶体、原子晶体、金属晶体、分子晶体、氢键晶体。

3 、 如果把晶体点阵本身看作一个周期函数，则其付氏级数中的波矢在付氏空间中表现为一系列周期性规则排列的点。则这些点所构成的格子称为倒格子。

4、 晶格振动的简正模式是具有一定频率和波矢的平面波，这样的平面波称为格波。

5、晶体中的粒子，由于热振动脱离正常格点进入间隙位置，而形成填隙原子，于是晶体中出现成对的空位和填隙原子，这种缺陷称为夫仑克尔缺陷。

6、满带中的电子容易受热激发跑到空带中去，这样原来的满带变成了近满带，近满带相对于满带缺少了电子，就形成了空状态，这种空状态称为空穴。

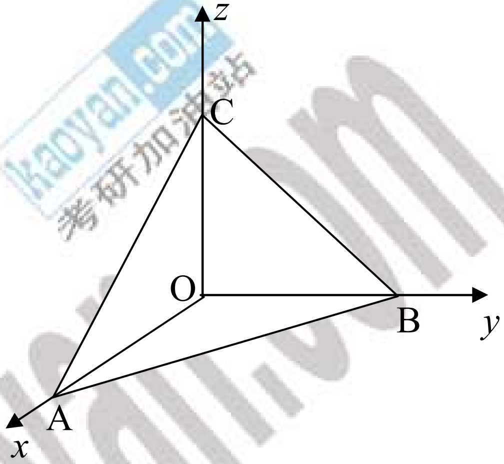
二、 简述下列问题

1、 电子波在晶体中传播时会受到原子（晶面）的反射，当入射波矢处在布里渊区边界时，满足全反射条件，各反射波位相相同，产生相干迭加，迭加后的反射波与入射波迭加形成两种不同类型的格波。这两种格波相应的概率密度不同，因而电子的能量不同。这两种不同能量之差称为能隙。

2、 钠原子有 11 个电子（$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$）每个 3s 态可容纳 2 个电子
所以，当 N 个钠原子组成晶体时，3s 能级过度为 3s 能带，能带中有 2N 个状态，可容纳 2N 个电子，但钠只有 N 个 3s 电子，所以能带是半满的，在电场的作用下可以产生电流，因而钠原子组成的晶体是金属导体。

三、 计算题

1、解：离坐标原点最近的晶面在三个坐标轴的截距为 $\frac{a}{h}$，$\frac{a}{k}$，$\frac{a}{l}$，a 为晶格常数，法线方向的单位向量为



$\vec{n}=\cos\alpha\vec{i}+\cos\beta\vec{i}+\cos\gamma\vec{k}$，

由图可知 $\cos\alpha=\dfrac{d}{a/h}=\dfrac{hd}{a}$，

$\cos\beta=\dfrac{kd}{a}$，　$\cos\gamma=\dfrac{ld}{a}$，

则 $\vec{n}=\dfrac{d}{a}\left(h\vec{i}+k\vec{j}+l\vec{k}\right)$，d 为晶面 ABC 离原点的距离，由晶向指数的定义，$[hkl]$ 方向的方向矢量为

$\vec{R}=h\vec{a}_1+k\vec{a}_2+l\vec{a}_3=a(h\vec{i}+k\vec{j}+l\vec{k})$，比较 $\vec{n}$ 和 $\vec{R}$ 可知，$\vec{n}//\vec{R}$，由此可知晶向 $[hkl]$ 垂直于晶面（hkl）。

2、解：每个波矢 q 占据的线度为 $2\pi/L$，单位线度内波矢 q 的数目为 $L/2\pi$，dq 间隔内 q 的数目为 $L/\pi\, dq$。

在德拜模型下 $\omega=vq$，其中 $v=a\sqrt{\beta/m}$ 为波速。

则模式密度为 $g(\omega)=\dfrac{L}{\pi v}$，

晶体的内能 $E=\int_0^{\omega_D} g(\omega)\left(\dfrac{1}{2}+\dfrac{1}{e^{\eta\omega/kT}-1}\right)\eta\omega d\omega$

晶体的热容量 $C_V=\dfrac{Nk}{\omega_D}\int_0^{\omega_D}\dfrac{e^{\hbar\omega/kT}\left(\dfrac{\hbar\omega}{kT}\right)^2}{\left(e^{\hbar\omega/kT}-1\right)^2}d\omega$

其中 $\omega_D=N\pi v$ 为德拜截止频率。k 为玻耳兹曼常数.

3、解：设 $\vec{E}=\vec{E}_0e^{-i\omega t}$ ，$\vec{v}=\vec{v}_0e^{-i\omega t}$

代入方程 $m\left(\dfrac{d\vec{v}}{dt}+\dfrac{\bar{v}}{\tau}\right)=-e\vec{E}$

可得：$\vec{v}=-\dfrac{e\vec{E}}{m\left(1/\tau-i\omega\right)}$

电流密度 $\vec{J}=-ne\vec{v}=\dfrac{ne^2}{m\left(1/\tau-i\omega\right)}=\sigma\vec{E}$

则 $\sigma=\dfrac{ne^2\tau}{m}\dfrac{1}{1-i\omega\tau}=\dfrac{\sigma(0)}{1-i\omega\tau}$ ，其中，$\sigma(0)=\dfrac{ne^2\tau}{m}$

4、解：（1） $k_F=\dfrac{\sqrt{2\pi\eta}}{a}$

当 $\eta=1$ 时， $k_F=\dfrac{\sqrt{2\pi}}{a}<\dfrac{\pi}{a}$

当 $\eta=2$ 时 $k_F=\dfrac{\sqrt{4\pi}}{a}$ $\dfrac{\pi}{a}<\dfrac{\sqrt{2\pi}}{a}<\dfrac{\sqrt{2\pi}}{a}$

（1）（2），（3）图略

5、解：设某一格点为坐标原点，则该格点最近邻格点的坐标为（a，0，0），（－a，0，0），（0，a，0），（0，－a，0），（0，0，a），（0，0，－a）代入 $E_s(k)$ 中，则可求得 S 态电子的能带为 $E_s(k)=E_s-C_s-2J(\cos k_xa+\cos k_ya+\cos k_za)$

能带底部，$k_x=k_y=k_z=0$，

则 $E = E_s + C_s - 6J + Jk^2 a^2 = E_{\min} + \frac{\eta^2 k^2}{2m^*_{底}}$

由此可得 $m^*_{底} = \frac{\eta^2}{2Ja^2}$

能带顶部， 令，$k_x = \frac{\pi}{a} + \delta k_x$ $k_y = \frac{\pi}{a} + \delta k_y$ ， $k_z = \frac{\pi}{a} + \delta k_z$

$$E = E_s + C_s - Ja^2(\delta k_x{}^2 + \delta k_y{}^2 + \delta k_z{}^2 = E_{\max} + \frac{\eta^2 \delta k^2}{2m^*_{底}}$$

则 $m^*_{底} = -\frac{\eta^2}{2Ja^2}$