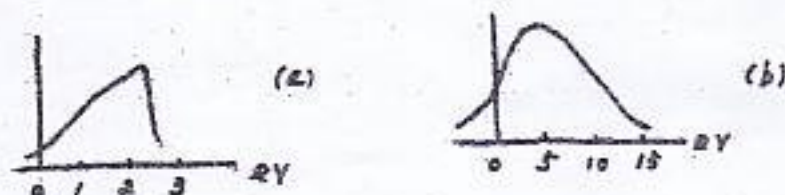




试题名称: 固体物理学

一. (每小题 5 分, 共 50 分) 简要回答以下问题:

1. 晶态, 非晶态, 准晶态在原子排列上各有什么特点?
2. 晶体中可以独立存在的对称元素有哪些?
3. 可以测定晶格振动色散关系的实验方法有哪些 (至少回答 3 种)?
4. 晶体中的位错线有几种类型? 各有什么特点?
5. 为什么 NaCl 晶体对红外光的反射率与波长关系曲线中会出现一个平缓的峰值区?
6. 晶体中原子结合力的类型有哪些?
7. 由 N 个原子组成的半导体材料硅晶体, 试问该晶体中一个能带最多可填充多少个电子?
8. 比较宽度不同的两个能带说明宽能带中的电子共有化运动程度高.
9. 晶体中电子遭受散射的物理实质是什么? 如何说明晶体电子具有相当长 (大约几百埃) 的自由程?
10. 软 X 射线发射谱是获得晶体电子能态密度信息的重要实验, 有如图(a)和(b)所示的实验结果, 试指出那一个代表非导体的能态密度, 为什么?



二. (25 分) 已知铝(Al), 铜(Cu)等金属晶体具有面心立方结构

1. 试绘出其晶胞形状, 指出其原子排列的最密排面
2. 说明它的倒易点阵类型和第一布里渊区的形状
3. 使用波长等于 1.54 \AA 的 X 射线照射铜晶体 (晶胞参数 $a=3.61 \text{ \AA}$), 说明其 X 射线衍射图中为什么不出现 (100), (110), (422) 和 (511) 衍射线的理由
4. 绘出其晶格振动色散关系的大致形状, 指出其有何特点?

三. (25 分) 有 N 个原子组成的体积为 V 的晶体, 在德拜 (Debye) 近似下, 设其声速为 v , 试求出:

1. 晶格振动态密度函数 $g(\omega)$, 并绘出 $g(\omega)$ 和 q 的关系曲线
2. 德拜频率和德拜温度, 并简述其意义.

四. (25 分) 设晶格常数为 a 的一维晶体

1. 写出其 s 态晶体电子状态波函数 Bloch 和
2. 在最近邻作用近似下, 由紧束缚法求出晶体 s 态电子能量
3. 指出带底和带顶的位置, 并画出其第一布里渊区晶体能带图
4. 求出能带宽度并示于能带图上
5. 求出晶体能态密度表达式
6. 导出带底电子的有效质量
7. 若带顶出现空穴, 试求其有效质量及公有化运动速度
8. 为什么说空穴总出现在能带顶附近?

五. (25 分) 已知钠晶体是体心立方结构, 晶格常数 $a = 4.3 \text{ \AA}$, 若其电阻率为

$4.3 \times 10^{-6} \Omega \text{ cm}$, 钠晶体的电子又可看做自由电子, 试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 $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $W \cdot s^2 / cm^2$,

电子电荷 $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ A} \cdot s$,

普朗克常数 $h = 1.05 \times 10^{-34} \text{ W} \cdot s^2$).

1. 晶体: 原子做周期排列, 长程有序.
非晶体: 原子排列短程有序, 长程无序.
准晶体: 原子排列位置有序, 但无周期性.
2. 对称元素: $1, 2, 3, 4, 6, i, m, \bar{4}$.
3. 非弹性X射线散射, 中子非弹性散射, 喇曼散射, 布里渊散射, 超声散射, 等.
4. 有两种类型, 刃型位错和螺型位错. 前者位错线垂直于滑移方向, 后者则平行于滑移方向.
5. 晶体中, 当光子能量 $\hbar\omega$ 接近声子能量 $\hbar\omega_0$ 时, 光子吸收截面 σ 增大. 当 $\hbar\omega \rightarrow \hbar\omega_0$ 时, $\sigma \rightarrow \infty$, 所以晶体对光的反射率会随光子能量中出现一个平缓的峰状区.
6. 离子键, 共价键, 金属键, 及范德瓦耳斯键结合.

二: 1.



晶体最密面为(111)面

2. 倒易点阵为体心立方, 第一布里渊区为截角四面体(14面体)
3. 面心结构的条件不允许出现奇偶混序的面指数, 所以(100)(110)衍射线不出现. 又因为衍射条件要求 $\lambda \leq 2d$, 所以
 $d(422) = 0.74 \text{ \AA}$, $d(511) = 0.69 \text{ \AA}$ 不符合衍射条件, 不出现其峰.



只有声学支, 没有光学支.
 $[100][111]$ 方向两支声学支是简并的.
 $q \rightarrow 0$ 时是线性的.

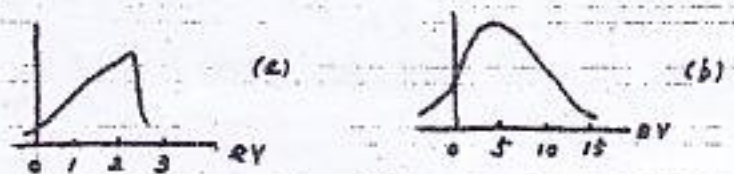
参考答案

7. 一个能带的状态数目等于该晶体原胞数目, 由 N 个原子组成的晶体原胞数目为 $(\frac{N}{2})$, 而一个状态由自旋向上与向下两个电子占据. 故一个能带最多可以填充 $2 \times \frac{N}{2} = N$ 个电子.

8. $v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E}{\Delta k}$, 同样大小变化量 Δk , 窄能带 ΔE 变化量大, 故其公有化程度高.

9. 晶体电子遭受散射的物理实质是晶格周期势场遭受破坏. 但实际上由于原子振动或其他原因, 杂质缺陷所引起的破坏不过是个微扰, 晶体电子的平动自由度可以有几度恢复.

10.



图(a)与图(b)在低能端都是(逐渐上升的), 反映了从带底随电子能量增加, 能态密度逐渐增大, 但是在高能端图(a)的谱是逐渐下降的, 图(b)则是(逐渐下降). 这说明, 图(b)的谱逐渐下降还是反映了电子填充到能带顶部, 能态密度逐渐下降为0. 能带是被电子填满的, 所以图(b)是非导体的能态密度.

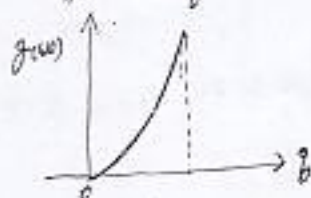
三. 1. 半径为 ρ 的球体内, 模式数目: $\frac{4\pi}{3} \rho^3 / (\frac{2\pi}{L})^3 = \frac{V}{6\pi^2} \rho^3$

$\rho \rightarrow \rho + d\rho$ 之间的模式数目: $\frac{V}{2\pi^2} \rho^2 d\rho$ ($V=L^3$)

$\omega \rightarrow \omega + d\omega$ 之间的 $g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \rho^2 / \frac{d\omega}{d\rho}$

德拜模型: $\omega = v_s \rho$

$\therefore g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3}$



2. 德拜模型是 Debye 模型中晶格振动的最高频率 $\omega_D = \omega_{max}$

$$\therefore \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N. \Rightarrow \omega_D = \left(\frac{6\pi^2 v_s^3 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$\theta_D (\text{德拜温度}) = \frac{\hbar \omega_D}{k_B} \quad (k_B \text{ 是玻尔兹曼常数})$$

是一个温度标度, 反映了经典统计和量子统计适用

的温度界限, 低于德拜温度, 必须使用量子统计。

$$\text{III. (1) } \psi_s(x) = c \sum_n e^{i k x_n} \varphi_s(x - x_n)$$

$$\begin{aligned} (2) E(k) &= E_s - J_0 - J_1 (e^{-i k a} + e^{i k a}) \\ &= E_s - J_0 - 2 J_1 \cos k a \\ &= E_0 - 2 J_1 \cos k a \end{aligned}$$

式中 $J_1 > 0$,

$$(3) \frac{dE(k)}{dk} = 2 J_1 \sin k a = 0$$

$$k=0, E(0) = E_0 - 2 J_1, \text{ 带底}$$

$$k=\frac{\pi}{a}, E(\frac{\pi}{a}) = E_0 + 2 J_1, \text{ 带顶}$$

$$(4) \text{ 能带宽度 } E(\frac{\pi}{a}) - E(0) = 4 J_1$$

$$(5) 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)} dk = g(E) dE$$

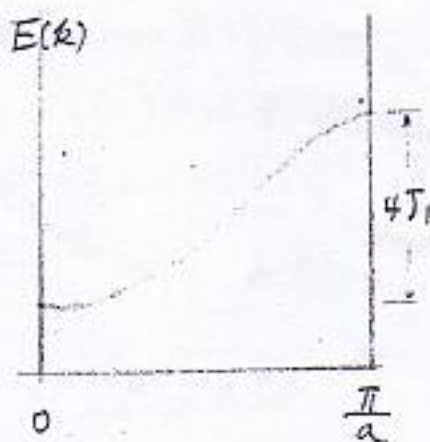
$$g(E) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{dE}{dk} \right)^{-1} = \frac{1}{2\pi a J_1} \sin^{-1} k a = \frac{1}{\pi a} \cdot \sqrt{4 J_1^2 - [E(k) - E_0]^2}$$

$$(6) \frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{2 J_1 a^2}{\hbar^2} \cos k a, \text{ 带底 } m^* = \frac{\hbar^2}{2 J_1 a} > 0$$

$$(7) \text{ 带顶电子有效质量 } m_e^* = -\frac{\hbar^2}{2\pi a}, \text{ 空穴有效质量 } m_h^* = -m_e^* = \frac{\hbar^2}{2\pi a},$$

$$\text{带顶电子速度 } v_e = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = 0, \text{ 空穴有效速度 (即反速度) } v_h = 0,$$

$$(8) \text{ 带顶电子能量高, 为激发态电子, 留下空位, 即空穴.}$$



$$12. n = \frac{2}{a^3} = 2.5 \times 10^{22} / \text{cm}^3$$

$$\tau = \frac{m}{n e^2 \rho} = \frac{9.1 \times 10^{-31}}{2.5 \times 10^{22} \times (1.6 \times 10^{-19})^2 \times 4.3 \times 10^{-6}} = 3 \times 10^{-14} \text{ s}$$

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} \cdot 2\pi \cdot \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{1}{3}}$$

$$= \frac{1.05 \times 10^{-34}}{9.1 \times 10^{-31}} \times 2 \times 3.14 \times \left(\frac{3}{8 \times 3.14} \right)^{\frac{1}{3}} \times (2.5 \times 10^{22})^{\frac{1}{3}}$$

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

$$\lambda = v_F \tau = 1.05 \times 10^6 \times 3 \times 10^{-14} = 340 \text{ \AA}$$