试题名称： 固体物理

一.（30分）

NaCl 和 CsCl 是两种典型的离子晶体，但具有不同的晶体结构。

1. 描述或画出两种晶体的原子空间排列情况，分别指出它们每个离子的最紧邻数目和次紧邻数目。
2. 它们同属立方晶系，试指出它们相同的特征对称元素。
3. 分别指出它们的点阵类型，倒易点阵类型和第一布里渊区的形状。
4. 写出离子晶体结合能的一般表达式，求出平衡态时的离子间距。
5. 它们的晶格振动色散曲线各有几支？离子晶体的长光学波有何特点？对它们的红外光学性质有何影响？

二.（20分）

1. 试给出德拜模型下晶格振动色散关系的表达式,说明德拜模型在解释晶格比热温度关系上有哪些成功和不足并说明其原因。
2. 试给出导体、半导体和绝缘体的能带论解释。

三.（25分）

对如下问题试给出简单解释

1. 布洛赫定理（Bloch theorem）
2. 布里渊区和第一布里渊区（Brillourin Zone, First Brillourin Zone）
3. 有效质量（Effective mass）
4. 费米面（Fermi surface）
5. 朗道能级（Landau level）

四.（25分）

在自由电子气模型中，假定传导电子可以近似地看作是自由电子气，其中最重要的参数是电子数密度 n 及两次碰撞之间的时间τ（驰豫时间）。

1. 试导出金属电导率的表达式：

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

e 为电子所带电荷，m 为电子质量。

2. 试估计铜（Cu）中电子的驰豫时间τ（已知铜的电阻率为$\rho=1.7\times10^{-6}\Omega\bullet\text{cm}$，铜的原子密度为 $8.5\times10^{22}\text{cm}^{-3}$）。

五.（50分）

现有N个质量为m间距为a的相同原子组成的一维原子链

1. 当原子偏离平衡位置δ时，只考虑最近邻原子之间存在弹性恢复力（$F=-\beta\delta$），求证简谐近似下，其晶格振动色散关系

$$\omega=\omega_m\left|\sin\frac{aq}{2}\right|=\sqrt{\frac{4\beta}{m}}\left|\sin\frac{aq}{2}\right|$$

2. 试证明声子态密度函数为

$$g(\omega)=\frac{2N}{\pi}\left(\omega_m^2-\omega^2\right)^{-\frac{1}{2}}$$

并作图表示出它和频率的关系

3. 每个原子只有一个价电子，使用紧束缚近似，只计入近邻相互作用，写出原子s态相对应的晶体波函数。
4. 在（3）的假设下，求出s态组成的s能带的E(k)函数
5. 在（3）的假设下，求出s能带电子的能量态密度的表达式

固物

中国科学院 & 中国科学技术大学
2004 年硕士学位研究生入学考试试题参考答案

试题名称： 固体物理

一、 每小题6分.

1. NaCl是fcc点阵. Na和Cl离子各组成一个fcc格子,沿立方轴方向移$\frac{1}{2}$交叉而成.
   最近邻有6个异性离子. 次近邻有12个同性离子
   CsCl是s.c点阵. Cs和Cl离子各组成一个s.c.格子 沿体对角线方向移$\frac{1}{2}$交叉而成
   最近邻有8个异性离子. 次近邻有6个同性离子

2. 特征对称元素是 4个 3 次轴.

3. NaCl: fcc. 倒易点阵为 bcc. 第一布里渊区为 截角8面体(14面体).
   CsCl: s.c. 倒易点阵为 sc. 第一布里渊区 为 立方体 形.

4. $$U=\frac{N}{2}\sum_{j\neq 1}^{N}\left(\mp\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}}+\frac{b}{r_{ij}^n}\right)=-\frac{N}{2}\left(\frac{\mathcal{M}e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}-\frac{B}{R^n}\right)$$
   其中$\mathcal{M}$. B是和晶体结构有关的常数. R为离子间最近距离.
   $$\frac{\partial U}{\partial R}=0 \quad\Rightarrow\quad R_0=\left(\frac{4\pi\varepsilon_0 nB}{\mathcal{M}e^2}\right)^{\frac{1}{n-1}}$$

5. 它们的原胞都含有2个离子. 因此各有6支色散关系. 3支光学支. 3支声学支。
   离子晶体的长光学波 $\omega_l>\omega_t$. 对红外光有强烈的反射和吸收
   不同频率

二、 1. 德拜模型采用弹性波近似. $\omega=v_s q$. (v_s为声速)
   成功地解释了极低温下晶格比热温度关系(T^3定律). 极低温下
   只有长波声子被激发 所以符合弹性波近似条件。
   因此在解释较高温度下的晶格比热温度关系并不够严格.

二 (2)

A. 满带电子不导电.

能带中每个电子对电流的贡献为 $-e\vec{v}(\vec{k})$。由于能带 $\varepsilon(\vec{k})$ 具有的对称性 $\varepsilon(\vec{k})=\varepsilon(-\vec{k})$，及 $\vec{v}(\vec{k})=-\vec{v}(-\vec{k})$，处于 $\vec{k}$ 态的电子和 $-\vec{k}$ 态的电子对电流的贡献恰好抵消。外加电场时，由 $\vec{k}$ 和 $\vec{k}+\vec{G}_n$ （$\vec{G}_n$ 为倒格矢矢量）等价，满带状况并不改变，故满带电子不导电.

B. 部分填充能带与满带不同，尽管在无外场时，由于 $\vec{k}$，$-\vec{k}$ 对称，总电流为零，但在外场作用下，电子分布沿 $\vec{k}$ 轴向一方偏移，电子产生的电流只部分相互抵消，从而产生电流

导体：至少有一条能带是部分填充的，因而导电

非导体：电子恰好填满一系列低能带，再高的能带是空的，根据满带电子不导电，尽管存在很多电子，材料仍是不导电的。绝缘体对应这种情况

半导体：具有类似非导体（绝缘体）能带结构，但导带和价带间隔较小，可以通过热激发使价电子跃迁到导带形成导电能力，或通过掺杂使导带填充少量电子或使价带缺少少量电子形成导电能力

（注：如能回答半金属情况则更完满）

三 (1) 布洛赫定理（Bloch Theorem）

当势场具有晶格周期性时

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r}+\vec{R}_n) \quad , \vec{R}_n \text{ 为晶格矢量}$$

波动方程的解具有如下~~形式~~性质

$$\psi(\vec{r}+\vec{R}_n) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\psi(\vec{r})$$

其中 $\vec{k}$ 为一矢量，即当平移一晶格矢量 $\vec{R}_n$ 时，波函数只增加一位相因子 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}$

根据 Bloch Theorem，波函数可表示为

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r}), \quad u(\vec{r}+\vec{R}_n) = u(\vec{r})$$

(2) 布里渊区，第一布里渊区（Brillouin Zone, First Brillouin Zone）

在倒格子空间，以一格点为原点，此格点与其余格点连线的垂直平分面所围成的区域称为布里渊区。其中包含原点在内的最小封闭区域（WS 原胞）为第一布里渊区，与第一布里渊区连通的区域（三维时面连通，二维时线连通）为第二布里渊区。

三 (3) 有效质量 (Effective Mass)

在晶体中电子输运半经典模型中引入有效质量张量

$$\left[\frac{1}{m^*}\right]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial \varepsilon_n(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

表达在外场力作用下，与牛顿方程类比，电子运动所具有的相应质量

(4) 费米面 (Fermi Surface)

绝对零度下 ~~[illegible]~~ (T=0K)，晶体中电子在k空间中占据态与未占据态的分界面。在非零温度下指电子占据几率为1/2的状态所构成的面

(5) 朗道能级 (Landau level)

在垂直于恒定磁场的平面内，电子的圆周运动对应于一种简谐运动，其能量是量子化的

$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_0 \qquad (n=1,2,3\cdots)$$

$$\omega_0 = \frac{eB}{m}$$

这些量子化的能级称为朗道能级。

四. 假定在 t 时刻电子的平均动量为 $\vec{p}(t)$，经过 dt 时间，电子没有受到碰撞的几率为 $1-dt/\tau$，这部分电子对平均动量的贡献为

$$\vec{p}(t+dt) = \left(1-\frac{dt}{\tau}\right)\left[\vec{p}(t)+\vec{F}(t)dt\right]$$

其中 $\vec{F}(t)$ 为外场力

在一级近似下，得

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = \vec{F}(t) - \frac{\vec{p}(t)}{\tau}$$

外场下电子的平均漂移速度 $\vec{V}_d(t) = \vec{p}(t)/m$

$$m\frac{d\vec{V}_d(t)}{dt} = \vec{F}(t) - m\cdot\frac{\vec{V}_d(t)}{\tau}$$

恒定电场下 $\frac{d\vec{V}_d}{dt}=0$. $\vec{F}=-e\vec{E}$

$$\vec{V}_d = -\frac{e\tau\vec{E}}{m}$$

相应地电流密度为

$$\vec{J} = -ne\vec{V}_d = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E} = \sigma\vec{E}$$

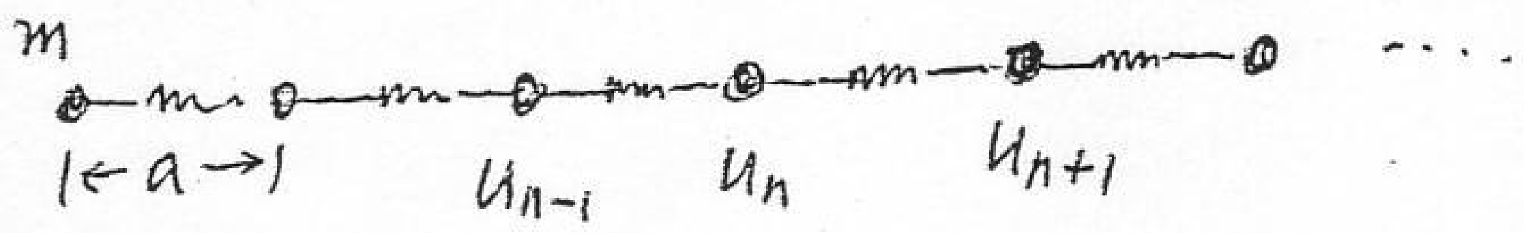
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

铜中电子弛豫时间 τ

$$\tau = \frac{m\sigma}{ne^2} = \frac{m}{ne^2\cdot\rho} = 2.46\times10^{-14}\,\mathrm{s}$$

五、

1、按题意给出模型。



只考虑最近邻作用，其运动方程可写作：

$$m\frac{d^2u_n}{dt^2} = -\beta(2u_n - u_{n+1} - u_{n+1})$$

其通解形式为 $u_{nq} = Ae^{i(\omega t - naq)}$

代入方程后给出 $\omega = \sqrt{\frac{4\beta}{m}}\left|\sin\frac{aq}{2}\right| = \omega_m\left|\sin\frac{aq}{2}\right|$

2、根据态密度定义可以给出

$$g(\omega)\,d\omega = \frac{L}{2\pi}dq \qquad (这里\ L = Na)$$

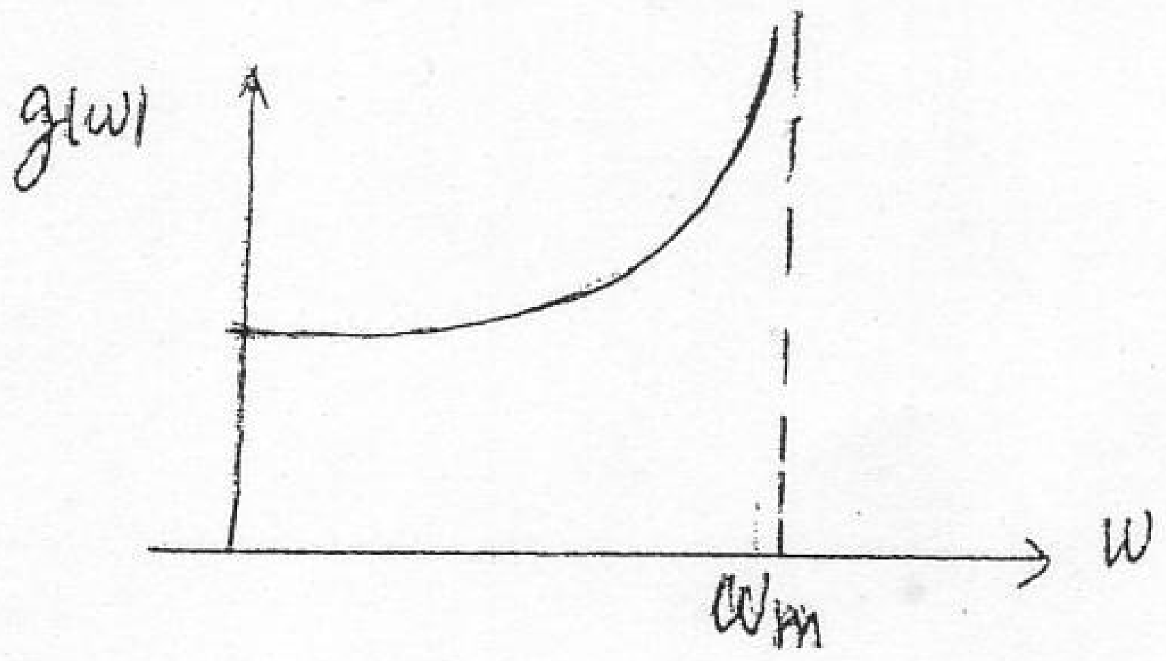
一维原子链应考虑正负两支

$$\therefore g(\omega) = 2\times\frac{L}{2\pi}\Big/\frac{d\omega}{dq} = \frac{L}{\pi}\Big/\frac{d\omega}{dq}$$

将上式 $\omega = \omega_m\left|\sin\frac{aq}{2}\right|$ 结果代入，

$$\frac{d\omega}{dq} = \omega_m\frac{a}{2}\cos\frac{aq}{2} = \frac{a}{2}(\omega_m^2-\omega^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore g(\omega) = \frac{2L}{a\pi}(\omega_m^2-\omega^2)^{-\frac{1}{2}} = \frac{2N}{\pi}(\omega_m^2-\omega^2)^{-\frac{1}{2}}$$



五 (3) 紧束缚近似下，以晶体中电子的原子轨道波函数的布洛赫和为晶体波函数。设s态波函数为 $\varphi_s(\vec{r})$，则晶体波函数为

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_l} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_l} \varphi(\vec{r}-\vec{R}_l)$$

$\vec{R}_l$ 为晶格格矢

(4) 紧束缚近似下能带为

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_s - J_0 - 2J_1 \cos ka$$

其中，ε_s 为s态原子能级

$$-J_0 = \int \varphi_s^*(\vec{r}) \hat{H} \varphi_s(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$-J_1 = \int \varphi_s^*(\vec{r}) \hat{H} \varphi_s(\vec{r}-\vec{a}) d\vec{r}$$

(5) 能态密度

$$g(\varepsilon) = \int_s \frac{1}{|\nabla_k \varepsilon(\vec{k})|} \frac{ds}{4\pi^3} \quad \text{(包括自旋自由度)}$$

一维情况 $g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{\left|\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}\right|}$

故 $$g(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi a J_1 \sin ka} = \frac{1}{2\pi a J_1}\left\{1-\left[\frac{1}{2J_1}(\varepsilon_s - J_0 - \varepsilon(k))\right]^2\right\}^{-1/2}$$