＊说明：全部答题包括填空、选择题必须答在考点下发的答题纸上，否则，一律无效。

试题名称： 固体物理

一、 简要解释下列问题（共25分）

(1) 第一布里渊区(First Brillouin Zone) （4分）

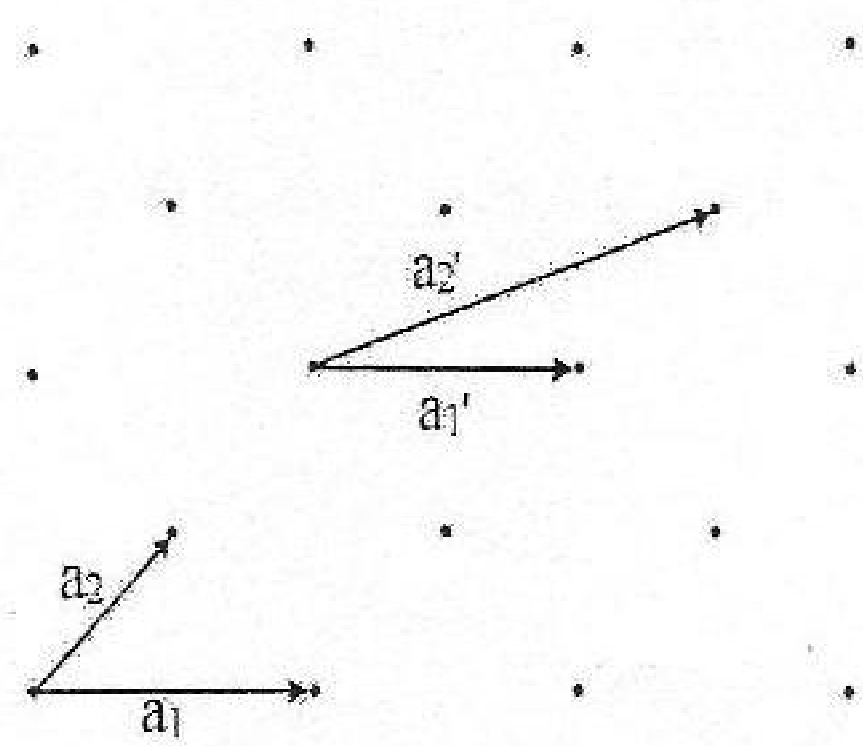
(2) 布洛赫定理(Bloch theorem)（4分）

(3) 德•哈斯—范•阿尔芬效应(De Hass—Van Alphen effect) （5分）

(4) 作为能带论基础的三个基本近似：绝热近似、单电子近似和周期场近似。（6分）

(5) 费米面、费米能、费米速度。（6分）

二、 （25 分）布拉菲格子原胞和基矢的选择不是唯一的，如下图所示的正方格子中画出了两种基矢选取方法。



（1） 说明用这两种基矢为棱边所构成的是否为该布拉菲格子的原胞。

（2） 求出这两种基矢所对应的倒格子基矢，并说明由这两种倒格子基矢为棱边是否分别构成相应倒格子的原胞。

（3） 画出图中所示正方格子相应的倒格子点阵。

三、（30分）设两原子间的相互作用能可表示为：

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r^2} + \frac{\beta}{r^{10}}$$

其中 r 是两原子间距离，α、β是两个待定系数。当两原子构成一稳定分子时，其核间距为 3×10^{-10}m。离解能为 4eV。试计算：

(1) α、β的数值。

(2) 计算使该分子分裂所必须的力和当分裂发生时原子核间的临界间距。

四、（30 分）设有 N 个相同原子组成的一维原子链，原子间距为 a，质量为 m，链长 L=Na。

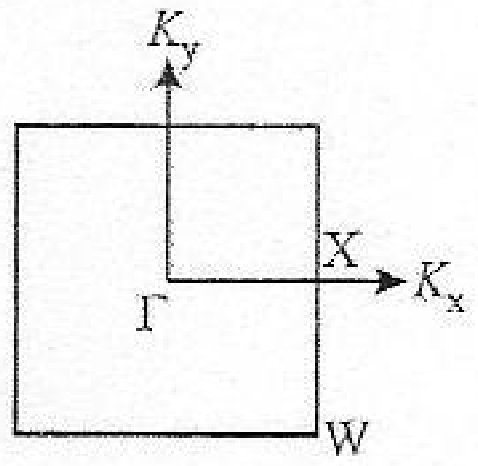
（1） 在只考虑最近邻相互作用（待定力常数为β）和简谐近似下，试证明其晶格振动波的色散关系为：

$$\omega = \left(\frac{4\beta}{m}\right)^{1/2} \left|\sin\frac{qa}{2}\right|$$

（2） 推出其态密度的表达式并绘图表示。
（3） 从该简化模型出发，试说明晶格振动波和介质弹性波的差异。
（4） 何谓声子？并说明它与真实粒子间的异同点。

五、（40 分）二维简单正方晶格，晶格常数为 a，每个原胞有一个原子，每个原子只有一个 s 态价电子，使用紧束缚近似，只计入近邻相互作用：

（1） 求出 s 电子组成的 s 能带的 E(k)函数。
（2） 求出 s 能带带顶和带底的位置和能量值。
（3） 求出电子在能带底部和顶部的有效质量。
（4） 求出电子在波矢 **k**（k_x, k_y）状态的速度。
（5） 在 k_x、k_y 平面，划出几条有代表性的等能曲线，并画出费米面的近似形状。
（6） 画出沿 *W-X* 的 E(k)曲线。（*W* 和 *X* 的位置如下图所示）



科目名称:	固体物理

一.

1. 第一布里渊区为倒格子中的 Wigner-Seitz 原胞,或用近邻格点作垂直平分面所构成最小封闭区间

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

在周期势中, $\vec{R}_n$ 为晶格矢量

3. 低温强磁场下材料(特别是金属材料)磁化率等物性随磁场倒数的倒数周期性变化. 这一振荡同强磁场下 Landau 能级上电子的填充有关……

4. 绝热近似. 电子与原子实巨大的质量差使两套系统的处理可以分开. 即没有能量的交换

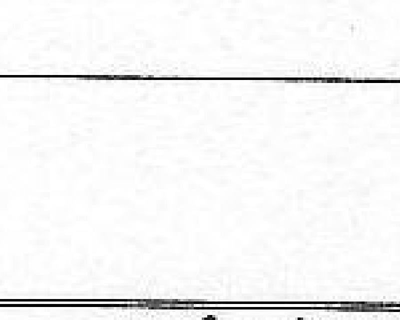
单电子近似. 固体中其余电子的相互作用可以用一个平均场来代替, 使解多个电子的波动方程问题可以简化为解单个电子的波动方程

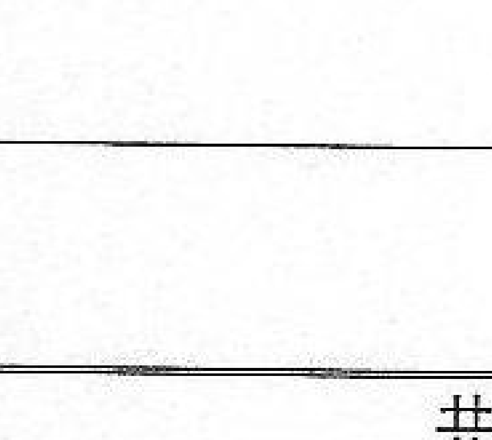
周期场近似. 无论单个电子在晶体中所受离子的相互作用和其余电子的相互作用形式如何, 都假定单个电子在晶体中所受的势场为周期场

5. 费米面为电子填充非填充的界面, 费米能为费米面上电子能量, 费米速度为费米面上电子所对应的速度

二.

1. 两种基矢均构成都构成布拉菲原胞……

2. 



注意倒格矢基矢
量长度

二. 3. 倒格子点阵同正格子点阵相似，晶格常数为 $2\pi/a_i$

三. 解答 ① 当两原子构成一稳定分子时，其相互作用势能取极小值，于是：

$$\left.\frac{du(r)}{dr}\right|_{r\to r_0} = \frac{2\alpha}{r_0^3} - \frac{8\beta}{r_0^9} = 0$$

∴ 由此得出平衡时两原子间距离

$$r_0 = \left(\frac{4\beta}{\alpha}\right)^{\frac{1}{6}} = 3\times10^{-10}\ m \qquad (3\times10^{-10})^6 m^6 = \frac{4\beta}{\alpha}$$

两原子平衡时和能量

$$u(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0^2} + \frac{\beta}{r_0^8} = -\frac{3\alpha}{4r_0^2}$$

题意给出 $4\times1.6\times10^{-19}J = \frac{3\alpha}{4r_0^2}$ $\qquad \alpha = \frac{4^2\times1.6\times9}{3}\cdot10^{-39}J\cdot m^2$

∴ $\alpha = 7.68\times10^{-38}\ J\cdot m^2$

$\beta = 1.4\times10^{-95}\ J\cdot m^8$

② $\left.\frac{d^2u(r)}{dr^2}\right|_{r=r_m} = 0$ 给出原子间引力最大值距离 r_m

即 $\frac{d^2u(r)}{dr^2} = -\frac{6\alpha}{r_m^4} + \frac{72\beta}{r_m^{10}} = 0$

∴ $r_m = \left(\frac{72\beta}{6\alpha}\right)^{\frac{1}{6}} = 3.6\times10^{-10}\ m$

力 $F = -\left.\frac{\partial u(r)}{\partial r}\right|_{r=r_m} = -\frac{2\alpha}{r_m^3} + \frac{8\beta}{r_m^9} = \frac{2\times7.68\times10^{-38}J\cdot m^2}{(3.6\times10^{-10})^3\ m^3} + \frac{8\times1.4\times10^{-95}J\cdot m^8}{(3.6\times10^{-10})^9\cdot m^9}$

$= 0.33\times10^{-8}J\cdot m^{-1} + 0.11\times10^{-8}J\cdot m^{-1}$

$= 0.44\times10^{-8}\ J\cdot m^{-1}$

$= 0.44\times10^{-8}\ N$

$\left[\begin{array}{l}\text{即力 } 1\,kgf \doteq 9.8\,N \\ 1\,kgf\cdot m \doteq 9.8\,J\end{array} \quad \therefore 1J = N\cdot m\right]$

四、解答① 根据题设条件 该原子链上原子的运动方程可表示为

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

$$\text{或}=-\beta(2u_n-u_{n+1}-u_{n-1})$$

其中 u_n 为第n个原子偏离平衡位置的位移

这组联立的线性齐次方程的通解为：

$$u_{nq}=Ae^{i(\omega t-naq)}$$

它具有波的形式，A为振幅 ω是角频率 q为波数。通解代入运动方程中可知：

$$m(i\omega)^2Ae^{i(\omega t-naq)}=\beta[Ae^{i[\omega t-(n+1)aq]}+Ae^{i[\omega t-(n-1)aq]}-2Ae^{i(\omega t-naq)}]$$

$$-m\omega^2=\beta[e^{-iaq}+e^{iaq}-2]$$

$$=2\beta(\cos aq-1)=-2\beta(1-\cos aq)$$

$$\therefore\ \omega=\left(\frac{4\beta}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\left|\sin\frac{aq}{2}\right|\quad\text{得证.}\quad\left[\because\sin^2\alpha=\frac{1}{2}(1-\cos 2\alpha)\right]$$

② 上述解是在无限大介质中得到的，有限介质必须考虑边界条件，一般采用周期性边界条件（即Born-Von Karman条件）即假定 $u(0)=u(L)$

$$e^{-iq0}=e^{-iqL}=1\quad\therefore\ qL=n2\pi\quad n=0,\pm1,\pm2\ \text{正负整数}$$

$$q=n\cdot\frac{2\pi}{L}$$

所以在固体中被允许传播的晶格振动波数不是连续变化的而是一些分立的值，这是与介质弹性波的区别之一。

从物理上看 有意义的q值 取值是有范围的，这是原子周期排列的结果。

$$-\frac{\pi}{a}<q\leq\frac{\pi}{a}$$

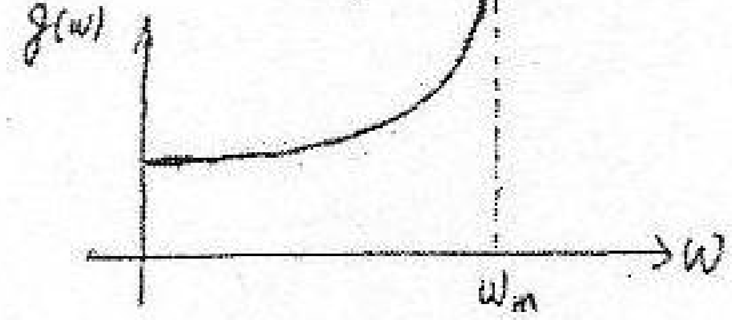
这是和弹性波的区别之二。

综合以上两点 来可说一维晶格振动的波数q在第一Brillouin区内只有N个分立的数值。

③ 考虑±q的波，一维情况下的态密度函数

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

$$\because\ \frac{d\omega}{dq}=\left(\frac{4\beta}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot\cos\frac{aq}{2}\cdot\frac{a}{2}=\frac{a}{2}\cdot\omega_m\left(1-\sin^2\frac{aq}{2}\right)^{\frac{1}{2}}=\frac{a}{2}(\omega_m^2-\omega^2)^{\frac{1}{2}}$$



五. 1. $E(k) = E_s^0 - J_s^0 - 2J_s^1 (\cos k_x \cdot a + \cos k_y \cdot a)$

2. 带底为 $E(0,0) = E_s^0 - J_s^0 - 4J_s^1$

带顶为 $E(-\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}) = E(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) = E_s^0 - J_s^0 + 4J_s^1$

3. 有效质量

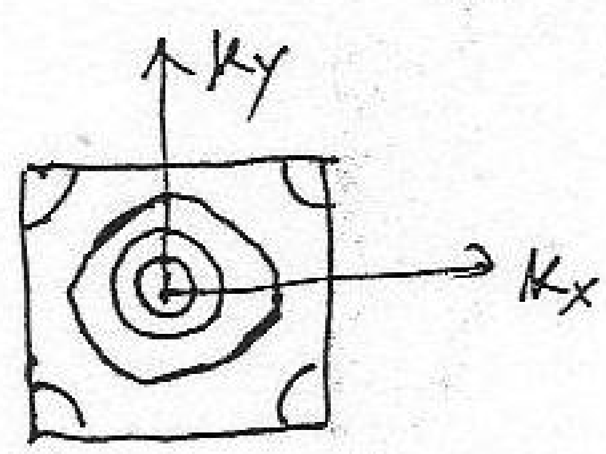
$$m_\alpha^* = \hbar^2 \Big/ \frac{\partial E}{\partial k_\alpha^2}$$

带底. $m_x^* = m_y^* = \hbar^2 / 2a^2 J_s^1$

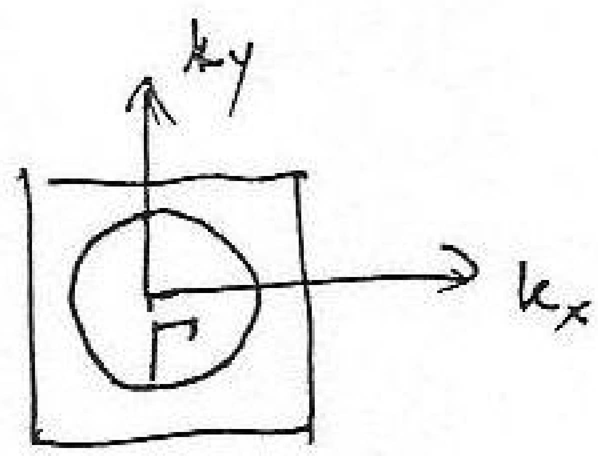
带顶 $m_x^* = m_y^* = -\hbar^2 / 2a^2 J_s^1$

4. $v(k_\alpha) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_\alpha}{\partial k_\alpha} = \frac{2J_s^1 a}{\hbar}(\sin k_x \cdot a + \sin k_y \cdot a)$

5.



等能曲线



Fermi 面.

6