2008 年硕士学位研究生入学考试试题参考答案

（固体物理）

评分细则

一、简答题（每小题 5 分，共 30 分）

1. 晶格平移对称性和点对称性

晶体平移对称性也就是晶格周期性，是指理想晶格可以通过一个最小单元在空间平移填满整个晶格空间。点对称性是晶格的宏观对称性，它是指至少保持晶格一点不动的对称性，如选转轴、反演等。

2. 声子

晶格振动的能量是量子化的，这种能量量子就是声子。

3. 在解释晶格热容时爱因斯坦的基本假定

假定所有振动模（声子）彼此独立，并具有相同的频率。

4. 电子的能量态密度

单位能量间隔内电子态的数目。

5. 费米面

在动量空间，金属中电子占据和非占据态的分界面。

6. 有效质量

晶体中的电子（或空穴）除了收到外场力外，还要收到晶体中离子和其它电子形成的内场力。在讨论电子受外场力作用下运动时，有效质量即是把内场力等价电子质量部分的结果。

二、(30 分) 元素晶体 Si,Ge 具有金刚石结构，设其晶胞参数为 a.

a. 写出其一个晶胞内的原子坐标，给出其原子的最近邻距离。

b. 写出其点阵类型和倒易点阵类型以及第一布里渊区的形状。

c. 举出它所具有的宏观对称元素。指出其结构的基本特点。

d. 试给出下列以密勒指数表征的晶面族的面间距。[100],[110],[111]

解：a. $000,\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4},+\mathrm{fcc}\left(000,0\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}\frac{1}{2}0,\frac{1}{2}0\frac{1}{2}\right)$（4 分）　$\frac{\sqrt{3}}{4}a$（4 分）

b. 晶体点阵是 fcc,倒易点阵是 bcc, （3 分）第一布里渊区是截角 8 面体，或说 14 面体（3 分）。

c. 具有立方晶系的对称性：有 3 个相互垂直的 4 重轴，6 个 2 重轴，4 个 3 重轴。(5 分)

金刚石虽只有一种原子，但有两种位置，都处在四面体中心，这两种四面体的取向不同。所以它们拥有四面体型成键特征，是共价键结合的典型结构。

它们的每个原子有 4 个最近邻和 12 个次近邻；

金刚石结构是比较空的，在总体积中，已被硬球填充的最大比率只有 0.34，远低于密堆积结构的填充率 0.74。（5 分）

d. （6 分）立方晶系的晶面间距公式：$d=\dfrac{a}{\sqrt{H^2+K^2+L^2}}$，所以：

$$d_{100}=a,\quad d_{110}=\frac{a}{\sqrt{2}},\quad d_{111}=\frac{a}{\sqrt{3}}$$

三、(30 分)假定晶体由 N 个原子组成，

a. 试求出德拜模型下晶格振动的态密度和德拜频率的表达式，并说明德拜频率的物理意义。

b. 证明在甚低温度下，0～ω_D 范围内的声子总数目与温度 T^3 成正比，

c. 说明为什么德拜模型在解释低温热容温度关系上会比较成功。

（参考公式 $\int_0^\infty \dfrac{x^2e^{-nx}}{1-e^{-x}}\mathrm{d}x=2\sum\limits_{k=n}^{\infty}\dfrac{1}{k^3}$）

解：

$$\omega=v_S q$$

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

令：晶格振动的最高频率，即德拜频率为：ω_D

则有：$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\mathrm{d}\omega=3N,\qquad \omega_D=\left(\dfrac{6\pi^2N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}v_S$

0～ω_D 之间的平均声子数目：

$$\bar{n}=\int_0^{\omega_D}\frac{g(\omega)}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1}\mathrm{d}\omega=\frac{3V}{2\pi^2v_S^2}\left(\frac{k_BT}{\hbar}\right)^3\int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{k_BT}}\frac{\frac{\hbar\omega_D}{k_BT}}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_D}{k_BT}\right)-1}\mathrm{d}\left(\frac{\hbar\omega_D}{k_BT}\right)$$

$$=cT^3\int_0^{\frac{\Theta_D}{T}}\frac{x^2}{e^x-1}\mathrm{d}x=cT^3\int_0^\infty\frac{x^2e^{-x}}{1-e^{-x}}\mathrm{d}x$$

$$\because \int_0^{\infty} \frac{x^2 e^{-nx}}{1-e^{-x}} \mathrm{d}x = 2\sum_{k=n}^{\infty} \frac{1}{k^3}$$

$$\therefore \overline{n} = CT^3$$

C 是和温度无关的常数。

德拜模型是弹性波近似，而低温下的格波只有能量低的长波被激发，所以很符合德拜模型的要求，故德拜模型可以很好地解释晶体低温热容温度关系。

四、(25 分)设有一维晶体的电子能带可以写成

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8}\cos 2ka\right)$$

其中 a 是晶格常数。试求：

a. 能带宽度

b. 电子在波矢 k 状态的速度

c. 电子在能带底部和顶部的有效质量

d. 若晶格常数 $a=2.5\times10^{-10}$m, 当外加 10^2V/m 电场时，试估计电子自带底运动到带顶所需时间。($e = 1.6\times10^{-19}$ C)

解：a.

$$\frac{dE(k)}{dk} = 0$$

只有：$\sin ka = 0, \quad k = 0, \quad \frac{\pi}{a}$

带底：$E_{\min} = E(0) = 0$

带顶 $E_{\max} = E\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{7}{8} + 1 + \frac{1}{8}\right) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

带宽：$\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

b. 电子平均速度：

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k} = \frac{\hbar}{ma}\left(\sin ka - \frac{1}{4}\sin 2ka\right)$$

c. 根据定义：

$$m^* = \hbar^2\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)^{-1}$$

带底有效质量： $m^* = 2m \quad (k = 0)$

带顶有效质量 $m^* = -\frac{2}{3}m \quad (k = \frac{\pi}{a})$

d. 带底到带顶的距离为 π/a

$$\because \hbar\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t}=e\varepsilon \qquad \therefore \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t}=\frac{e\varepsilon}{\hbar}$$

$$\mathrm{t}=\frac{\frac{\pi}{\mathrm{a}}}{\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t}}=\frac{\pi\hbar}{ae\varepsilon}=8.32\times10^{-8}\mathrm{s}$$

五、(25 分)现有一价金属形成的二维简单长方晶格，晶胞参数：

$$a=2\times10^{-10}\mathrm{m},\quad b=4\times10^{-10}\mathrm{m},\quad \gamma=90^{0},$$

a. 试给出倒易格矢并绘出其第一、二布里渊区。
b. 给出自由电子费米波矢的表达式并计算出其具体数值
c. 按近自由电子模型绘出其费米面形状。(可按自由电子模型绘出，然后说明按照近自由电子模型需要修正的地方。

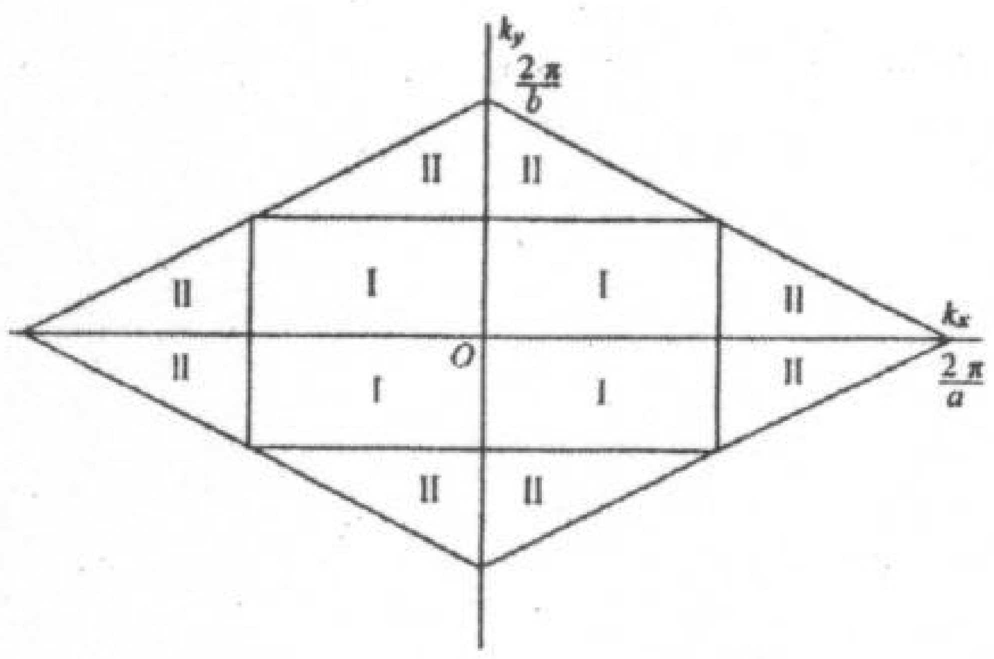
解：

a.（8 分）

$$\because \vec{a_1}=a\vec{i},\quad \vec{a_2}=2a\vec{j}$$

$$\therefore \vec{b_1}=\frac{2\pi}{a}\vec{i},\quad \vec{b_2}=\frac{\pi}{a}\vec{j}$$

根据定义绘出头 2 个布里渊区图。



b. （8 分）

按自由电子模型，二维自由电子的费米面是一个圆，其费米波矢：

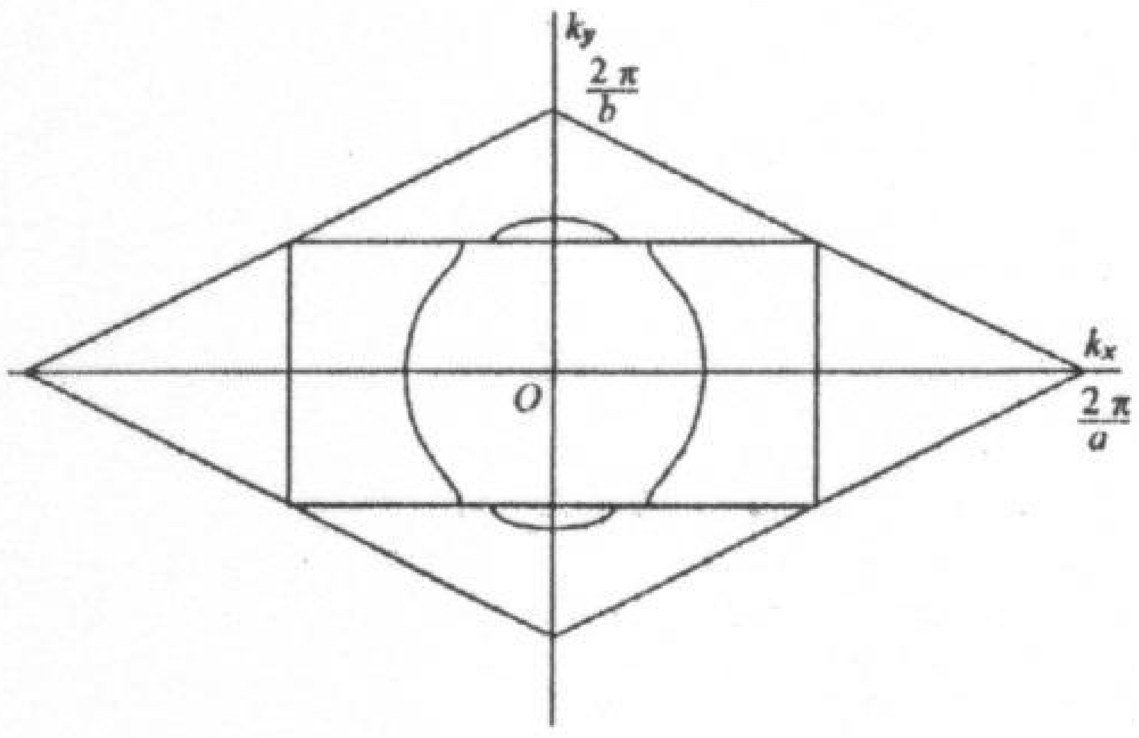
$$k_F=(2\pi n)^{\frac{1}{2}}=\left(2\pi\frac{1}{\Omega}\right)^{\frac{1}{2}}=0.564\frac{\pi}{a} \qquad \Omega\text{是原胞面积 }2a^2,$$

c. （9 分）

按上述值为半径绘出的费米面在 b_2 方向已经越过第一布里渊区边界，因此按照近自由电子模型应做如下修正：

费米面垂直于布里渊区边界；在边界处产生能隙。

修正后的费米面见下图：



六、(10 分)一个二维正方晶体，其晶体势场为：

$$V(x,y)=-2V_0\left(\cos\frac{2\pi}{a}x+\cos\frac{2\pi}{a}y\right)$$

其中 V_0 为常数，a 为晶格常数。近似求解第一布里渊区边界中点的能隙。

解：

势能函数变化为：

$$V(x,y)=-2V_0(\cos\frac{2\pi}{a}x+\cos\frac{2\pi}{a}y)$$

$$=-V_0(e^{i\frac{2\pi}{a}x}+e^{-i\frac{2\pi}{a}x}+e^{i\frac{2\pi}{a}y}+e^{-i\frac{2\pi}{a}y})$$

在第一布里渊区边界中点处对应倒格矢

$$\vec{G}=\frac{2\pi}{a}\vec{b}_1$$

相应得傅里叶系数为 $-V_0$，所以能隙为：

$$\Delta=2|V_0|$$

2008 年硕士学位研究生入学考试试题

（固体物理）

所有试题答案写在答题纸上，答案写在试卷上无效

一、简要解释下述概念或名词（每小题 5 分，共 30 分）

1. 晶格平移对称性和点对称性
2. 声子
3. 在解释晶格热容时爱因斯坦的基本假定
4. 电子的能量态密度
5. 费米面
6. 有效质量

二、(30 分) 元素晶体 Si,Ge 具有金刚石结构，设其晶胞参数为 a.

a. 写出其一个晶胞内的原子坐标，给出其原子的最近邻距离。

b. 写出其点阵类型和倒易点阵类型以及第一布里渊区的形状。

c. 举出它所具有的宏观对称元素，并指出其结构的基本特点。

d. 试给出下列以密勒指数表征的晶面族的面间距。[100],[110],[111]

三、(30 分)假定晶体由 N 个原子组成，

a. 试求出德拜模型下晶格振动的态密度和德拜频率的表达式，并说明德拜频率的物理意义。

b. 证明在甚低温度下，$0 \sim \omega_D$ 范围内的声子总数目与温度 T^3 成正比，

c. 说明为什么德拜模型在解释低温热容温度关系上会比较成功。

（参考公式 $\int_0^\infty \frac{x^2 e^{-nx}}{1-e^{-x}}dx = 2\sum_{k=n}^{\infty}\frac{1}{k^3}$ ）

四、(25 分)设有一维晶体的电子能带可以写成

$$E(k)=\frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{7}{8}-\cos ka+\frac{1}{8}\cos 2ka\right)$$

其中 a 是晶格常数。试求：

a. 能带宽度

b. 电子在波矢 k 状态的速度

c. 电子在能带底部和顶部的有效质量

d. 若晶格常数 $a=2.5\times10^{-10}$m, 当外加 10^2V/m 电场时，试估计电子自带底运动到带顶所需时间。($e = 1.6\times10^{-19}$ C)

五、(25 分)现有一价金属形成的二维简单长方晶格，晶胞参数：

$$a=2\times10^{-10}\text{m},\quad b=4\times10^{-10}\text{m},\quad \gamma=90^{0},$$

a. 试给出倒易格矢并绘出其第一、二布里渊区。
b. 给出自由电子费米波矢的表达式并计算出其具体数值
c. 按近自由电子模型绘出其费米面形状。(可按自由电子模型绘出，然后说明按照近自由电子模型需要修正的地方。

六、(10 分)一个二维正方晶体，其晶体势场为：

$$V(x,y)=-2V_0\left(\cos\frac{2\pi}{a}x+\cos\frac{2\pi}{a}y\right)$$

其中 V_0 为常数，a 为晶格常数。近似求解第一布里渊区边界中点的能隙。