

13. 在近邻近似下，用紧束缚近似导出体心立方晶体 S 能带的  $E_s(\vec{k})$ ，试画出沿  $K_x$  方向 ( $K_y=K_z=0$ ) 的散射关系曲线，并计算能带宽度。

解：选体心原子为参考点，最近邻原子的位置  $\vec{R}_n = \pm \frac{a}{2} \vec{i} \pm \frac{a}{2} \vec{j} \pm \frac{a}{2} \vec{k}$  (共八个)

$$\text{则 } E_s(\vec{k}) = E_s^{at} - A - B \left[ e^{i\frac{a}{2}(k_x+k_y+k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(k_x+k_y-k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(k_x-k_y+k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(k_x-k_y-k_z)} \right. \\ \left. + e^{i\frac{a}{2}(-k_x+k_y+k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(-k_x+k_y-k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(-k_x-k_y+k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(-k_x-k_y-k_z)} \right] = E_s^{at} - A - 2B \times$$

$$\left[ e^{i\frac{a}{2}(k_x+k_y)} \cos \frac{a}{2} kz + e^{i\frac{a}{2}(k_x-k_z)} \cos \frac{a}{2} kz + e^{i\frac{a}{2}(-k_x+k_y)} \cos \frac{a}{2} kz + e^{i\frac{a}{2}(-k_x-k_y)} \cos \frac{a}{2} kz \right]$$

$$= E_s^{at} - A - 2B \times 2 \left[ e^{i\frac{a}{2}k_x} \cos \frac{a}{2} ky + e^{-i\frac{a}{2}k_x} \cos \frac{a}{2} ky \right] \cos \frac{a}{2} kz$$

$$= E_s^{at} - A - 4B \times 2 \left( \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right)$$

$$= E_s^{at} - A - 8B \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}$$

$$\text{当 } K_y=K_z=0 \text{ 时 } E_s(k_x) = E_s^{at} - A - 8B \cos \frac{k_x a}{2}$$

$$\text{同时 } K_x=0 \text{ 时 } E_{s\min} = E_s^{at} - A - 8B$$

$$\text{当 } K_x=K_y=K_z=2\pi/a \text{ 时 } E_{s\max} = E_s^{at} - A + 8B$$

$$\text{能带宽度} = E_{\max} - E_{\min} = 16B$$

## 第一部分 晶体结构和晶体缺陷

1. 原子的负电性的定义和物理意义是什么？
2. 共价键的定义和特点是什么？
3. 金刚石结构为什么要提出杂化轨道的概念？
4. V、VI、VII族元素仅靠共价键能否形成三维晶体？
5. 晶体结构，空间点阵，基元，B 格子、单式格子和复式格子之间的关系和区别。
6. W-S 元胞的主要优点，缺点各是什么？
7. 配位数的定义是什么？
8. 晶体中有哪几种密堆积，密堆积的配位数是多少？
9. 晶向指数，晶面指数是如何定义的？
10. 点对称操作的基本操作是哪几个？
11. 群的定义是什么？讨论晶体结构时引入群的目的是什么？
12. 晶体结构、B 格子、所属群之间的关系如何？
13. 七种晶系和十四种 B 格子是根据什么划分的？
14. 肖特基缺陷、费仑克尔缺陷、点缺陷、色心、F 心是如何定义的？
15. 棱(刃)位错和 螺位错分别与位错线的关系如何？
16. 位错线的定义和特征如何？
17. 影响晶体中杂质替位几率的主要因素有哪些？
18. 晶体中原子空位扩散系数  $D$  与哪些因素有关？
19. 解理面是面指数低的晶面还是面指数高的晶面？为什么？
20. 为什么要提出布拉菲格子的概念？
21. 对六角晶系的晶面指数和晶向指数使用四指标表示有什么利弊？

## 第二部分 倒格子

1. 倒格子基矢是如何定义的？
2. 正、倒格子之间有哪些关系？
3. 原子散射因子是如何表示的，它的物理意义如何？
4. 几何结构因子是如何表示的，它的物理意义如何？
5. 几何结构因子  $S_h$  与哪些元素有关？
6. 衍射极大的必要条件如何？
7. 什么叫消光条件？
8. 反射球是在哪个空间画的，反射球能起到什么作用，如何画反射球？
9. 常用的 X 光衍射方法有哪几种，各有什么基本特点？
10. 为什么要使用“倒空间”的概念？

### 第三部分 晶格振动

1. 讨论晶格振动时的物理框架是牛顿力学还是量子力学？
2. 讨论晶格振动时采用了哪些近似条件？
3. 什么是近邻近似和简谐近似？
4. 为什么可使用玻恩—卡曼周期边界条件？
5. 一维单原子链色散关系是怎样的？相速度 $v_p$ 等于什么？
6. 一维格波波矢  $q$  的取值范围是什么？ $q$  在第一 B、Z 内取值数是多少？
7. 一维格波波矢  $q$  有哪些特点？
8. 一维双原子链的色散关系是怎样的？
9. 在三维晶体中，格波独立的  $\vec{q}$  点数，声学波支数，光学波支数，格波总支数分别等于多少？
10. 定性地讲，声学波和光学波分别描述了晶体原子的什么振动状态？
11. 格波模式密度  $g(\omega)$  的定义是什么， $g(\omega)$  是如何表示的？
12. 在一般情况下，求解格波模式密度  $g(\omega)$  的困难是什么？
13. 晶格振动的色散曲线有哪些对称性？
14. 讨论晶格振动的系统能量时为什么要引入简正坐标  $Q_q(t)$ ？
15. 讨论晶格振动时，进行了量子力学修正，引入了量子谐振子的能量表示，在此过程中，把什么能量表示为谐振子的能量？
16. 什么叫声子？
17. 讨论晶格振动时的量子力学修正体现在什么地方？
18. 声子有哪些性质？
19. 什么是晶格振动的 Einstein 模型和 Debye 模型？
20. 解释二模型与实验结果比较的原因。（重点）
21. 有人定性地认为，德拜温度  $\theta_D$  是经典概念与量子概念解释比热的分界线，你的看法如何？
22. 热膨胀系数  $\alpha_v$  是如何表示的？
23. 热传导系数（热导率） $\lambda$  是如何表示的？
24. 什么叫 N 过程和 U 过程？
25. 为什么说光学支一般对热导贡献小？
26. 有人说，热容  $C_v$  是声子密度的度量，你的看法如何？
27. 为什么说“晶格振动”理论是半经典理论？
28. 简述晶格振动理论中简谐近似的成功之处和局限性。
29. 什么是声子的准动量？为什么称它们是“准”动量，而不直接称为动量？

## 第四部分 固体能带论

1. 固体能带论的两个基本假设是什么？
2. 固体能带论的基本思路是怎样的？
3. 固体中电子状态的主要特征有哪些？
4. 什么叫 Bloch 定理？
5. 由 Bloch 定理有哪些结论和推论？
6. 在第一 B、Z 内波矢  $\vec{K}$  的取值， $\vec{K}$  点数， $\vec{K}$  点密度。
7. 能态密度 D 是如何定义的？
8. 试计算自由电子的能态密度 D。
9. 特鲁多模型及其成功与不足之处有哪些？
10. 特鲁多模型的“自由电子气”与无限大真空中自由电子能量有何异同？
11. 索末菲的“自由电子费米气”模型与特鲁多模型的异同。
12. 费米分布函数的表示式和物理意义是什么？
13. 电子密度分布的意义是什么？
14. 什么叫费米面？
15. 简述无限大真空自由电子，晶体中特鲁多模型，索末菲模型，近自由电子模型的关系。
16. 按 N. F. E 模型，晶体中的能隙是如何解释的？
17. 接近自由电子模型能求解哪些问题，近自由电子近似的零级近似如何取？它主要能计算哪些物理量？
18. 按紧束缚模型能求解哪些问题，紧束缚近似的零级近似如何取？它主要能计算哪些物理量？
19. 什么叫接触电势差？
20. 产生接触电势差的原因是什么？
21. 两块同种金属的温度不同，接触后温度未达到相等前，是否存在电势差？为什么？
22. 什么是尼克龙克—潘纳模型？
23. 固体中电子状态的主要特征有哪些？

## 第五部分 晶体中的电子输运

1. 存在外电场  $\vec{E}$  时，讨论晶体中电子的输运的基本思路是怎样的？为什么未采用解薛定格方程的方法？
2. Bloch 电子的运动速度如何表示？电子的运动速度与波矢的方向是否总是相同？
3. 什么是 Bloch 电子的准动量，为什么称之为“准”动量？
4. 简述 Bloch 电子的有效质量的重要特征。
5. 什么是 Bloch 电子费米气？
6. 为什么满带不导电？
7. 对绝缘体费米能级  $E_F$  必处在导带、禁带、价带的哪一个？为什么？
8. 什么叫空穴？为什么要引入这个概念？
9. 半导体和半金属有何异同？
10. 晶体电阻的起因是什么？

## 第一部分 晶体结构和晶体缺陷

### 1. 原子的负电性：原子得失价电子能力的度量。

负电性 = 常数 (电离能 + 亲和能)

其中：亲和能：处于基态的中性气态原子获得一个电子所放出的能量。

电离能：使处于基态的中性气态原子失去一个电子需要得到的能量。

所以 负电性大的原子易于获得电子，

负电性小的原子易于失去电子。 另外：原子的负电性与价态有关。

### 2. 共价键的定义和特性

定义：能把两个原子结合在一起的、为两个原子所共有的、自旋相反配对的电子结构。

特点： 方向性、饱和性；

若价电子壳层未达到半满：可成价数 = 价电子数

若价电子壳层等于或超过半满：对重要的共价晶体，往往价电子为 S、P 态，满足  $8-N$  规则，其中 N 为价电子数。

### 3. 金刚石结构为什么要提出杂化轨道的概念？

实验事实：(1) 金刚石结构每个原子与周围的 4 个原子形成结合；

(2) 四个键呈四面体结构，具有等同性。

为解释以上实验事实，由饱和性，只得先设其电子组态为由  $s^2p^2 \rightarrow s^1p^3$ ，再杂化为每个价电子含有  $(1/4)s$  和  $(3/4)p$ 。

由此例可知，对同一种元素，孤立原子和组成晶体内的原子的最低能量状态可以不同。

### 4. V、VI、VII 族元素仅靠共价键能否形成三维晶体？

不能。

### 5. 晶体结构，空间点阵，基元，B 格子、单式格子和复式格子之间的关系和区别。

(1) 晶体结构 = 空间点阵 + 基元，空间点阵 = B 格子，晶体结构 = 带基元的 B 格子。

(2) 基元内所含的原子数 = 晶体中原子的种类数。(元素相同，由于周围环境不同，可以认为不同种类的原子，ex: 金刚石。)

(3) B 格子的基本特征：各格点情况完全相同。

(4) 单式格子：晶体由一种原子组成。

复式格子：晶体由几种原子组成，每种原子组成一个子格子，晶体由几个子格子套构而成。所以，复式格子 = 晶体结构，复式格子  $\neq$  B 格子。

### 6. W-S 元胞的主要优点，缺点各是什么？

优点：(1) 保持了 B 格子的对称性，所以又称为对称元胞。

(2) 此方法后面还要用到 (求第一 BZ 区)。

缺点：元胞的体积不便于计算。

### 7. 配位数的定义是什么？

一个原子最近邻的原子数，(并不要求近邻原子与中心原子为同种原子)。

### 8. 晶体中有哪几种密堆积，密堆积的配位数是多少？

密堆积是具有最大配位数(12)的排列方式，有 hcp: ABAB.....结构和 fcc: ABCABC....结构，共两种。

### 9. 晶向指数，晶面指数是如何定义的？(略)

### 10. 点对称操作的基本操作是哪几个？

点对称操作的基本操作共有八个，分别是  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$ 、 $C_6$ 、 $i$ 、 $\sigma$ 、 $\overline{C_4}$ 。

11. 群的定义是什么？讨论晶体结构时引入群的目的是什么？

定义：若有一个元素的集合  $G = (E, A, B, \dots)$  满足下列条件，则称这个集合  $G$  构成一个群：

- (1) 封闭性，若  $A, B$  是  $G$  中的任二个元素，则这二个元素的组合  $AB$  也是  $G$  中的一个元素， $AB \in G$ ；
- (2) 单位元， $G$  中有单位元  $E$ ，对  $G$  中任一元素  $A$ ，在  $G$  中有  $E$  满足  $AE = EA = A$ ；
- (3) 逆元素， $G$  中任一元素  $A$ ，在  $G$  中均可找到其逆元素  $B$ ，满足  $AB = BA = E$ ；
- (4) 结合律， $G$  中任三个元素  $A, B, C$ ，均有  $A(BC) = (AB)C$ 。

目的：对晶体结构的对称性进行分类和表征。

12. 晶体结构、B 格子、所属群之间的关系如何？

晶体结构不同，B 格子可以相同，例如，金刚石结构和 NaCl 结构的 B 格子均为 FCC；B 格子可比晶体结构有更多的对称操作数，或说具有更高的对称性；

不同的晶体结构，不同的 B 格子，可以属于相同的群，例如，B 格子分别为 fcc 和 bcc 均属于  $O_h$  群。

13. 七种晶系和十四种 B 格子是根据什么划分的？

七种晶系：B 格子的点对称性的种类数只有 7 种，称之为七种晶系。

十四种 B 格子：B 格子的空间对称性的种类数共有 14 种，称之为 14 种 B 格子。

	晶体结构	B 格子	
点群数	32	7	七种晶系
空间群数	230	14	十四种 B 格子

14. 肖特基缺陷、费仑克尔缺陷、点缺陷、色心、F 心是如何定义的？

- (1) 肖特基缺陷：体内格点原子扩散到表面，体内留下空位。
- (2) 费仑克尔缺陷：体内格点原子扩散到间隙位置，形成空位—填隙原子对。
- (3) 色心：能够吸收可见光的点缺陷。
- (4) F 心：离子晶体中一个负离子空位，束缚一个电子形成的点缺陷。
- (5) V 心：离子晶体中一个正离子空位，束缚一个空穴形成的点缺陷。

15. 棱(刃)位错和 螺位错分别与位错线的关系如何？

棱(刃)位错：滑移方向垂直位错线。

螺位错：滑移方向平行位错线。

16. 位错线的定义和特征如何？

位错线的定义：滑移区与未滑移的分界线；

位错线的特征：

- (1) 位错线附近原子排列失去周期性；
- (2) 位错线不是热运动的结果；
- (3) 位错线可在体内形成闭合线，可在表面露头，不可能在体内中断。

17. 影响晶体中杂质替位几率的主要因素有哪些？

晶体结构，固溶限，离子(原子)半径，负电性及配位数，以及环境条件（温度，氧空位等）。

18. 晶体中原子空位扩散系数  $D$  与哪些因素有关？

答：以一维为例

$$D = \frac{1}{2} v_{01} a^2 \exp [-(E_1 + U_1)/KT]$$

式中  $a$ ：原子间距；

$v_{01}$ ：原子振动频率(与  $T$  有关)；

$E_1$ : 原子向相邻空位迁移所需的能量;

$U_1$ : 空位形成能;

$E_1 + U_1$ : 实现一次空位迁移所需的总能量;

$K$ : 玻尔兹曼常数;

$T$ : 绝对温度。

19. 解理面是面指数低的晶面还是面指数高的晶面? 为什么?

答: 面指数低的晶面, 因为面指数低的晶面族的晶面间距大。

20. 为什么要提出布拉菲格子的概念?

答: 为了更突出晶体的周期性。

21. 对六角晶系的晶面指数和晶向指数使用四指标表示有什么利弊?

答: 优点: 使在晶体学和物理上等价的晶面、晶向具有相似的指数。

缺点: 没有三指标简单;

四指标中加了“前三个指标和为零”的限制条件, 否则指标可能出现不惟一性。



## 第二部分 倒格子

1. 倒格子基矢是如何定义的？

定义：  $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$

倒格子初基元胞“体积”  $\Omega^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$

2. 正、倒格子之间有哪些关系？

(1) 若  $h_1, h_2, h_3$  为互质整数，则  $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$  为该方向最短倒格矢；

(2) 正、倒格子互为倒格子；

(3)  $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$  垂直于晶面族  $(h_1, h_2, h_3)$

(4) 某方向最短倒格矢  $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$  之模和晶面族  $(h_1, h_2, h_3)$  的面间距  $d_h$  成反比

$$d_h = \frac{2\pi}{|\vec{G}_h|}$$

(5)  $\vec{G}_h \cdot \vec{R}_n = 2\pi m$  ( $m$  为整数)

(6)  $\Omega \cdot \Omega^* = (2\pi)^3$

3. 原子散射因子是如何表示的，它的物理意义如何？

$$f_\alpha = \int_{\text{原子}} \rho(\vec{r}_\alpha) e^{i\vec{s} \cdot \vec{r}_\alpha} d\tau_\alpha$$

意义：原子内所有电子散射波振幅的几何和与散射中心处一个电子散射波振幅之比。

4. 几何结构因子是如何表示的，它的物理意义如何？

$$S_h = \sum_{\alpha} e^{i\vec{s} \cdot \vec{R}_\alpha} f_\alpha \quad (\text{要求会具体计算})$$

意义：元胞内所有电子散射波振幅的几何和与散射中心处一个电子散射波振幅之比。

5. 几何结构因子  $S_h$  与哪些元素有关？

由  $S_h$  的表示式可知，它与：原子种类、原子排列、原子数目、散射方向有关，

分别体现在  $f_\alpha$   $\vec{R}_\alpha$   $Z$   $\vec{s}$ 。

6. 衍射极大的必要条件如何？

(1) 衍射三角形  $\vec{K} - \vec{K}_0 = \vec{G}_h$  (倒空间劳厄方程)

(2) 劳厄方程  $(\vec{K} - \vec{K}_0) \cdot \vec{R}_n = 2\pi\mu$

(3) 正空间 Blage 公式  $2d\sin\theta = n\lambda$

7. 什么叫消光条件? 使几何结构因子  $\vec{S}_h = 0$  的条件称之为消光条件。

8. 反射球是在哪个空间画的, 反射球能起到什么作用, 如何画反射球?

反射球是在  $\vec{K}$  空间画的。对确定的晶体, 相应的倒格子也是确定的, 对确定的入射条件, 利用反射球即可用几何作图的方法确定衍射光的方向。画反射球的具体方法可参见教材相应章节。

9. 常用的 X 光衍射方法有哪几种, 各有什么基本特点?

- |           |                 |                |
|-----------|-----------------|----------------|
| (1) 劳厄法   | $\lambda$ 连续光入射 | 样品为单晶;         |
| (2) 转动单晶法 | 单色光入射           | 样品为转动 (摆动) 单晶; |
| (3) 粉末法   | 单色光入射           | 样品为多晶的粉末。      |

10. 为什么要使用“倒空间”的概念?

波的最主要的指标是波矢  $\mathbf{K}$ , 波矢  $\mathbf{K}$  的方向就是波传播的方向, 波矢的模值与波长成反比, 波矢的量纲是  $1/m$ 。讨论晶体与波的相互作用是固体物理的基本问题之一。一般情况下晶体的周期性、对称性等均在正空间描述, 即在  $\mathbf{m}$  的量纲中描述。为了便于讨论晶体与波的相互作用, 必须把二者放到同一个空间, 同一坐标系中来。我们的选择是把晶体变换到量纲是  $1/m$  的空间即倒空间来, 即在倒空间找到正空间晶体的“映射”。

### 第三部分 晶格振动

1. 讨论晶格振动时的物理框架是牛顿力学还是量子力学？  
牛顿力学+量子力学修正，所以又可称为半经典理论。
2. 讨论晶格振动时采用了哪些近似条件？  
采用了近邻近似和简谐近似。
3. 什么是近邻近似和简谐近似？  
近邻近似：在晶格振动中，只考虑最近邻的原子间的相互作用；  
简谐近似：在原子的互作用势能展开式中，只取到二阶项。
4. 为什么可使用玻恩-卡曼周期边界条件？  
晶体的性质由晶体的绝大多数原子的状态所决定，体内原子数 $\gg$ 表面原子数，在近邻近似下，所以可以以方便为原则选择边界条件，可使用玻恩-卡曼周期边界条件，而且使用玻恩-卡曼周期边界条件给出了较多的信息，对后续的讨论带来方便。若采取零边界条件，原则上讲也是允许的，但不能给出有用的信息。
5. 一维单原子链色散关系是怎样的？相速度  $v_p$  等于什么？

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

6. 一维格波波矢  $q$  的取值范围是什么？ $q$  在第一 B、Z 内取值数是多少？

$q$  的取值范围：为保证唯一性， $q$  在第一 B.Z 内取值，即  $-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$

$q$  在第一 B.Z 内取值数为  $N$ （初基元胞数）。

7. 一维格波波矢  $q$  有哪些特点？

$q$  不连续（准连续）；均匀分布；密度  $\frac{Na}{2\pi} = \frac{L}{2\pi}$

8. 一维双原子链的色散关系是怎样的？

$$\omega^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{m} \pm \frac{1}{m} (\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos qa)^{1/2}$$

9. 在三维晶体中，格波独立的  $\vec{q}$  点数，声学波支数，光学波支数，格波总支数分别等于多少？

独立的  $\vec{q}$  点数 = 晶体的初基元胞数  $N$ ；

格波个数 = 晶体原子振动自由度数， $3NS$  个；

格波支数 =  $3S$ （初基元胞内原子振动的自由度数）其中 3 支声学波， $3(s-1)$  支光学波。

10. 定性地讲，声学波和光学波分别描述了晶体原子的什么振动状态？

定性地讲，声学波描述了元胞质心的运动，

光学波描述了元胞内原子的相对运动。

描述元胞内原子不同的运动状态是二支格波最重要的区别。

11. 格波模式密度  $g(\omega)$  的定义是什么， $g(\omega)$  是如何表示的？

模式密度  $g(\omega)$  的定义：单位频率间隔的格波数。

$$g = \sum_i g_i \quad i \text{ 为格波支号};$$

对每支格波

$$g_i = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{等}\omega\text{面}} \frac{ds_\omega}{\left| \nabla_{\vec{q}} \omega_i(\vec{q}) \right|}$$

12. 在一般情况下, 求解格波模式密度  $g(\omega)$  的困难是什么?

在一般情况下, 求解格波模式密度  $g(\omega)$  的困难往往是并不知道色散关系  $\omega_i(\vec{q})$ ,

所以无法求出  $\omega_i(\vec{q})$  的梯度, 另外若等  $\omega$  面的形状不规则, 它的积分也不好求出。

13. 晶格振动的色散曲线有哪些对称性?

$$(1) \quad \omega_i(\vec{q}) = \omega_i(\vec{q} + \vec{G}_n)$$

$$(2) \quad \omega_i(\vec{q}) = \omega_i(-\vec{q})$$

(3) 还具有与晶体结构相同的对称性。

14. 讨论晶格振动的系统能量时为什么要引入简正坐标  $Q_q(t)$ ?

为了消去交叉项, 便于数学处理和看出物理意义(简谐格波间相互独立)。

15. 讨论晶格振动时, 进行了量子力学修正, 引入了量子谐振子的能量表示, 在此过程中, 把什么能量表示为谐振子的能量?

把一个格波的能量表示为一个量子谐振子能量, 而不是把任一原子的振动能量表示为一个谐振子能量。

16. 什么叫声子? 声子是量子谐振子的能量量子

$$\eta\omega$$

17. 讨论晶格振动时的量子力学修正体现在什么地方?

体现在把谐振子能量用量子谐振子能量表示。并不是体现在引入格波, 格波用谐

振子等效,  $\vec{q}$  不连续等方面。

18. 声子有哪些性质?

(1) 声子是量子谐振子的能量量子;

(2)  $3NS$  格波与  $3NS$  个量子谐振子一一对应;

(3) 声子为玻色子;

(4) 平衡态时声子是非定域的;

(5) 声子是准粒子 遵循能量守恒  $\eta\omega_1 + \eta\omega_2 = \eta\omega_3$

$$\text{准动量选择定则 } \eta\vec{q}_1 + \eta\vec{q}_2 = \eta(\vec{q}_3 + \vec{G}_h)$$

(6) 非热平衡态, 声子扩散伴随着热量传导;

(7) 平均声子数

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

19. 什么是晶格振动的 Einstein 模型和 Debye 模型?

Einstein 模型: 设晶体中所有原子独立地以相同频率 $\omega_E$ 振动。

Debye 模型: 设晶体为各向同性连续弹性媒质, 晶体中只有 3 支声学波。

20. 解释二模型与实验结果比较的原因。(重点)

分别讨论在高温、低温条件下实验结果和两个模型计算结果的异同, 参见教材相应章节。

21. 有人定性地认为, 德拜温度 $\theta_D$ 是经典概念与量子概念解释比热的分界线, 你的看法如何?

德拜频率  $\omega_D$ ——  $g(\omega)$ 的最高频率;

爱因斯坦频率  $\omega_E$ —— $g(\omega)$ 中最可几频率;

德拜温度 $\theta_D$ 与德拜频率 $\omega_D$ 相对应。 $\theta_D$ 成为经典概念与量子概念解释比热的分界线, 是因为经典理论认为: 谐振子能量按自由度均分——即认为所有波格均激发, 而当  $T < \theta_D$  时, 出现格波冻结, 按经典理论处理造成较大的误差, 而当  $T > \theta_D$  时, 不出现格波冻结, 按经典理论处理造成的误差也就相对较小了。

22. 热膨胀系数 $\alpha_v$ 是如何表示的?

$$\alpha_v = \frac{\gamma}{KV} C_v \quad \text{式中 } \gamma: \text{格林爱森系数}; \quad K: \text{体弹性模量}; \\ V: \text{晶体体积}; \quad C_v: \text{晶体的热容}$$

23. 热传导系数(热导率) $\lambda$ 是如何表示的?

$$\lambda = \frac{1}{3} C_v \bar{v} L$$

式中:  $C_v$ : 单位体积热容;  $\bar{v}$ : 声子平均速率;  $L$ : 声子平均自由程。

24. 什么叫 N 过程和 U 过程?

以三声子过程为例:  $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_3 \quad \vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 + \vec{G}_h$

$\vec{G}_h = 0$ ——N 过程  $\vec{G}_h \neq 0$ ——U 过程

25. 为什么说光学支一般对热导贡献小?

因为: (1) 温度不太高时( $T < \theta_D$ )光学支先冻结, 对  $C_v$  贡献小

(2) 光学支 $\bar{v}$ 小,  $\bar{v}$ 的物理意义是声子运动的平均速率, 而声子的运动携带着能

量的传播, 因此 $\bar{v}$ 的意义应与能量传播的速度相对应, 能速  $v_g = \frac{d\omega}{dq}$ , 光学支色

散曲线 $\omega \sim q$ 平坦,  $v_g$ 较小, 即 $\bar{v}$ 较小。

(3) 光学支 $\omega$ 小的 $|q|$ 大, 易于发生 U 过程, 而 U 过程将造成热阻。

26. 有人说, 热容  $C_v$  是声子密度的度量, 你的看法如何?

由热膨胀系数 $\alpha_v$ 、热导率 $\lambda$ 的表示式可知  $\alpha_v \propto c_v$   $\lambda \propto c_v$ , 而由 $\alpha_v$ 、 $\lambda$ 的物理意义可知,  $\alpha_v$ 、 $\lambda$ 均应与声子密度相关, 考察 $\alpha_v$ 、 $\lambda$ 的表示式, 只有认为  $C_v$  表示声子的密度, 所以在相同温度下, 认为热容  $C_v$  是晶体中声子密度的度量是可以的。

27. 为什么说“晶格振动”理论是半经典理论?

首先只能求解牛顿方程, 并引入了格波, 而且每个格波的能量可用谐振子能量来表示。之后进行了量子力学修正, 量子力学修正体现在谐振子能量不用经典谐振子能量表示式, 而用量子谐振子能量表示式。

28. 简述晶格振动理论中简谐近似的成功之处和局限性。

答: 成功地得出格波(声学格波、光学格波)及其相应的色散曲线, 引入了声子, 并成功地解释了热容。其局限性主要表现为不能解释热膨胀、热传导等现象。

29. 什么是声子的准动量? 为什么称它们是“准”动量, 而不直接称为动量?

答: 声子是准粒子,  $\hbar q_1$  是声子的准动量。准动量  $\hbar q_1$  具有动量的量纲, 但声子间相互

作用满足准动量选择定则  $\hbar q_1 + \hbar q_2 = \hbar(q_3 + \overrightarrow{G_h})$  其中  $\mathbf{G}_h$  是晶体的任意倒格矢。

## 第四部分 固体能带论

1. 固体能带论的两个基本假设是什么？

答：(1) 绝热近似，原子实的影响用周期势场等效，把多体问题化为多电子问题。

(2) 单电子近似，把其余电子对某一电子作用也用等效的平均势场表示，把多电子问题简化为单电子问题。

2. 固体能带论的基本思路是怎样的？

答：用绝热近似和单电子近似，把原子实及其它电子的影响用等效的周期势场  $\vec{V}(\vec{r})$  来表示，进而求解 S-方程，并用量子力学的微扰论求出固体中电子的波函数和能量。关键是等效的周期势场  $\vec{V}(\vec{r})$  该如何表示。

3. 固体中电子状态的主要特征有哪些？

答：用周期势场  $\vec{V}(\vec{r})$  等效相互作用之后 (1) 由孤立原子的能级变成固体的能带；

(2) 出现电子的共有化；

(3) 由周期边界条件波矢  $\vec{K}$  取值不连续  $\vec{K} = \frac{l_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \vec{b}_3$  其

中  $l_1, l_2, l_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, N_1, N_2, N_3$  为  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  方向初基元胞数。

4. 什么叫 Bloch 定理？

答：晶体中的电子波函数是由晶格周期性调制的调幅平面波，

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

另一种表示：  $\psi(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \psi(\vec{k}, \vec{r})$

5. 由 Bloch 定理有哪些结论和推论？

答：(1) a.  $|\psi(\vec{k}, \vec{r})|^2$  代表电子出现的几率，具有正晶格周期性。

b. 但  $\psi(\vec{k}, \vec{r})$  本身不具有正晶格周期性。

c.  $\psi(\vec{k}, \vec{r})$  本身具有倒格子周期性  $\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \psi(\vec{k} + \vec{G}_n, \vec{r})$   $\vec{G}_n$ ：任意倒格矢

(2) a. 能量具有倒格子周期性 即  $E_n(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G}_n)$ 。

b. 因电子能量为物理的实在，也具有正晶格周期性。

c. 同一能带对  $\vec{k} = 0$  的点具有反对称性， $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$

d.  $E(\vec{k})$  具有与正晶格相同的对称性。

6. 在第一 B.Z 内波矢  $\vec{K}$  的取值， $\vec{K}$  点数， $\vec{K}$  点密度。

答：  $\vec{k} = \frac{l_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \vec{b}_3$ ，第一 B.Z 内独立的  $\vec{K}$  点数为 N (初基元胞数)，每个  $\vec{K}$

点在倒空间所占体积为  $(2\pi)^3/V$ ， $\vec{k}$  点密度为  $\frac{V}{(2\pi)^3}$

7. 能态密度  $D$  是如何定义的?

答: 对给体积的晶体, 单位能量间隔的电子状态数。

$$(1) \text{若能带不交叠: } E \rightarrow E+dE \text{ 二等能面间电子状态数 } dZ = 2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \int_E^{E+dE} d\tau_{\vec{k}}$$

$$dZ = D(E_n) dE, \quad D = \frac{dz}{dE} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{\text{等}E\text{面}} \frac{ds_E}{\left| \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) \right|}$$

$$(2) \text{若能带交叠} \quad D(E) = \sum_n D(E_n)$$

8. 试计算自由电子的能态密度  $D$ 。

$$\text{解: } E = \frac{\eta^2 k^2}{2m} \quad \text{等能面为球面} \quad \text{得 } D = \frac{dz}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\eta^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad \text{但并不能说 } E \uparrow \text{电子数} \downarrow$$

9. 特鲁多模型及其成功与不足之处有哪些?

假设: (1) 价电子构成“自由电子气”, 无规则热运动与原子实碰撞, 满足经典的玻尔兹曼分布;

(2) 两次碰撞间, 电子不受力的作用, 电子能量只有动能;

(3) 电子与原子实的碰撞过程用平均自由程  $l$  和平均自由时间  $\tau$  等自由气体热运动的术语表征。

成功之处: 较好地解释了金属的导电、热导现象。

不足: (1) 忽略了原子实周期势场和电子间的相互作用。

(2) 不能正确解释金属的比热。

10. 特鲁多模型的“自由电子气”与无限大真空中自由电子能量有何异同?

$$\text{答: 相同之处: 均设势场 } V(\vec{r}) = 0 \quad \text{则 } E = \frac{\eta^2 k^2}{2m}$$

不同之处: 特鲁多模型中的自由电子气, 除假设的与原子实碰撞外, 还要受到边界的反射, 由周期边界条件  $k$  不连续。

11. 索末菲的“自由电子费米气”模型与特鲁多模型的异同。

$$\text{答: 相同之处: } (1) V(\vec{r}) = \text{const} \quad (\text{可假设为零})$$

(2) 碰撞图象

(3) 在晶体边界均碰撞(散射)

(4) 满足周期边界条件。

不同之处: 索末菲模型 (1) 求解  $S$ -方程, 而不是牛顿方程;

(2) 满足费米-狄拉克分布, 而不是经典的玻氏分布;

(3) 满足泡利不相容原理。

12. 费米分布函数的表示式和物理意义是什么?

若能量为  $E$  的状态是电子可以占据的状态, 则在热平衡条件下, 电子占据该状态的几率:

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{(E-E_f)/k_B T} + 1} \quad \text{式中 } E_f \text{ 称为费米能级, } E=E_f \text{ 时, } f=\frac{1}{2} \text{ 所以 } E_f \text{ 是标志电子}$$



在能级上填充水平的重要参量。ex: 若  $E_f$  处在允许带中, 该晶体是导体还是绝缘体? 导体。

13. 电子密度分布的意义是什么?

温度  $T$  时, 能量  $E$  附近单位能量间隔的电子数。

$$\rho(E, T) = D(E) f(E, T) \quad \text{系统中电子总数} \quad N = \int_0^{\infty} D(E) f(E, T) dE$$

14. 什么叫费米面?

费米面: 在  $\vec{K}$  空间  $E = E_f$  的等能面。

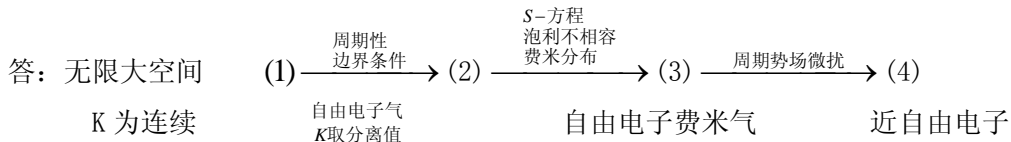
费米半径  $K_f$ : 在设  $V(\vec{r}) = \text{常数}$  的模型中  $E = \frac{\eta^2 k^2}{2m}$  等能面为球面 则  $E_f = \frac{\eta^2 k_f^2}{2m}$ ,  $K_f$

称费米波矢, 费米半径。

费米速度  $v_f$ : 若认为电子的费米能全为动能  $E_f = \frac{1}{2} m v_f^2$

费米温度  $T_f$ : 若设  $E_f = K_B T_f$   $T_f$  称为费米温度。

15. 简述无限大真空自由电子, 晶体中特鲁多模型, 索末菲模型, 近自由电子模型的关系。



16. 按 N. F. E 模型, 晶体中的能隙是如何解释的?

答: 能隙  $= 2|V_n|$   $V_n$  为  $V(\vec{r})$  的展开系数, 能隙为不同电荷分布的势能差。

$$\text{电子分布分别为: } \rho_- \propto \sin^2 \frac{\pi}{a} x$$

$$\rho_+ \propto \cos^2 \frac{\pi}{a} x$$

17. 按近自由电子模型能求解哪些问题, 近自由电子近似的零级近似如何取? 它主要能计算哪些物理量?

答: 零级近似为无限大真空中自由电子, 故它适用于金属中的价电子, 利用 N. F. E 模型主要可计算禁带宽度。

18. 按紧束缚模型能求解哪些问题, 紧束缚近似的零级近似如何取? 它主要能计算哪些物理量?

答: 为孤立原子中的电子状态的组合, 故它主要适用于绝缘体, 主要可计算 S 带的能带宽度。

19. 什么叫接触电势差?

答: 任意两种不同的物质 A. B 相接触可能产生电荷, 并分别产生电势  $V_A$ 、 $V_B$  这种电势称为接触电势, 其差称为接触电势差。

20. 产生接触电势差的原因是什么?

答: 二种不同材料的逸出功, 费米能级不同, 在紧密接触之后二种材料的费米能级将取齐, 导致接触势垒和接触电势差, 关键理解二种材料紧密接触后费米能级要取齐的原因。

ex:  $T=0$ , 各材料  $E_{f1}$ 、 $E_{f2}$  之下的能级均填满, 又是紧密接触, 若  $E_{f1} > E_{f2}$ . 则电子自

发地从“1”流相向“2”，直至电子填充取平，其物理意义即为  $E_{f1}=E_{f2}$ 。

21. 两块同种金属的温度不同，接触后温度未达到相等前，是否存在电势差？为什么？

答：两块同种金属，温度分别为  $T_1$  和  $T_2$ ，且  $T_1 > T_2$ 。在这种情况下，温度为  $T_1$  的金属中有较多的电子处于高于温度平衡时的费米能级  $E_f^0$  的状态。两块金属接触后，系统的能量要取最小值，温度为  $T_1$  的金属高于  $E_f^0$  的部分电子将流向温度为  $T_2$  的金属。温度未达到相等、二费米能级相等前，这种流动一直持续。期间，温度为  $T_1$  的金属失去电子，带正电；温度为  $T_2$  的金属得到电子，带负电，二者出现电势差。

22. 什么是尼克龙克—潘纳模型？

## 第五部分 晶体中的电子输运

1. 存在外电场  $\vec{E}$  时, 讨论晶体中电子的输运的基本思路是怎样的? 为什么未采用解薛定格方程的方法?

答: 目前量子力学擅长求解定态 S-方程, 即能量 E 为确定值。在有外场存在时, 晶体中电子受到外场作用, 能量 E 是变化的, 不是定态问题, 而非定态 S-方程不易求解。所以只得回到牛顿力学框架中来, 而牛顿方程  $\vec{F} = m\vec{a}$ , 特长就是求解有外力作用的问题, 但  $\vec{F}$  应为物体受到的合外力, 而晶体中电子受到的合外力  $\vec{F} = \vec{F}_{\text{外}} + \vec{F}_l$   $\vec{F}_l$  表示晶格场力, 但  $\vec{F}_l$  不易测量, 把  $\vec{F}_l$  的影响归入电子的有效质量张量  $\vec{m}$ , 引入  $\vec{m}$  后, Bloch 电子在外场作用下, 运动规律形式上遵守牛顿方程, 只是把 m 用  $\vec{m}$  代替。

$$\vec{v} = \vec{m}^{-1} \cdot \vec{F}_{\text{外}} \quad \text{在此基础, 求解晶体中的电流等问题。}$$

2. Bloch 电子的运动速度如何表示?

答:  $\vec{v}(\vec{K}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{K}} E(\vec{K})$  式中下标 n 为能带指数, 即 Bloch 电子的运动速度和  $\vec{K}$  空间能量梯度成正比, 方向在等能面法线方向。当等能面为球形时电子的运动速度与波矢的方向相同, 当等能面不是球形时电子的运动速度与波矢的方向一般不相同。

3. 什么是 Bloch 电子的准动量, 为什么称之为“准”动量?

答:  $\hbar\vec{K}$  称为 Bloch 电子的准动量, 因为  $\vec{F}_{\text{外}} = \hbar\vec{K}$ , 而  $\hbar\vec{K}$  为自由电子的动量, 又与牛顿定律  $\vec{F} = \dot{\vec{P}}$  比较, 形式类似,  $\hbar\vec{K}$  具有动量的量纲, 但牛顿定律  $\vec{F} = \dot{\vec{P}}$  中的  $\vec{F}$  为物体受到的合外力。而 Bloch 电子还受到晶格场力  $\vec{F}_l$  的作用并未反映在  $\hbar\vec{K}$  中, 所以,  $\hbar\vec{K}$  并未完全表示 Bloch 电子的动量。所以称  $\hbar\vec{K}$  为 Bloch 电子的准动量。

另外, 可证明,  $\hbar\vec{K}$  不是 Bloch 电子动量算符的本征值, 故它不是真实动量, 且  $[\hat{H}, \hat{P}] \neq 0$  (二算符不对易), 故 Bloch 电子没有确定的动量。

4. 简述 Bloch 电子的有效质量的重要特征。

答:  $\vec{m}$  为二阶张量, 矩阵表示有九个分量, 其值与波矢  $\vec{K}$ , 能带结构有关。

当等能面为球面时  $\vec{m}$  才为标量  $m^*$ 。  $m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$  与能带结构 K 有关。

引入有效质量  $\vec{m}$  后  $\vec{v} = \vec{m}^{-1} \cdot \vec{F}_{\text{外}}$  与牛顿定律  $\vec{F} m^{-1} = \dot{\vec{v}}$  形式上一致, 把不易

测量的  $\vec{F}_l$  并入  $\vec{m}^*$  中, 而  $\vec{m}^*$  又可由能带结构求出。一般情况下  $\vec{m}^*$  中的其中三个分量  $m_{xx}^* \neq m_{yy}^* \neq m_{zz}^*$ , 则使得 Bloch 电子的加速度与外力方向不一致。

5. 什么是 Bloch 电子费米气?

答: 把质量视为有效质量  $\vec{m}^*$ , 除碰撞外相互间无互作用, 遵守费米分布的 Bloch 电子的集合称为 Bloch 电子费米气。它与索末菲模型的自由电子费米气的区别在于把晶格场力的影响归入  $\vec{m}^*$ , 但又保留了碰撞模型。

6. 为什么满带不导电?

答:  $\vec{J} = -\frac{e}{4\pi^2} \int_{B.Z.} \vec{v}(\vec{k}) f d\tau_{\vec{k}}$  满带时, 如图 E~K 对称分布, 其意义向  $+\vec{k}$  方向运动

的电子与向  $-\vec{k}$  方向运动的电子相互抵消。而加外场并不能改变 E-K 的分布。积分域

仍为第一 B. Z.,  $\vec{v}$  为奇函数和 f 为偶函数的情况均为改变, 所以  $\vec{J}=0$

7. 对绝缘体费米能级  $E_f$  必处在导带、禁带、价带的哪一个? 为什么?

答: 必在禁带。因由  $E_f$  的物理意义, 若  $E_f$  处在导带或价带中, 则它不能是满带, 若有外场电场, 必产生电流, 它不可能为绝缘体。

8. 什么叫空穴? 为什么要引入这个概念?

答: 在近满带的情况下, 引入的带有正电荷 e、正有效质量  $m_h^*$ , 速度为  $\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$

的准粒子称为空穴。空穴的引入是对近满带大量电子的共同行为的等效描述。它使问题描述更简单明了。

9. 半导体和半金属有何异同?

答: 相同处:  $T \neq 0$  时, 从电导率上讲无差别, 不同处: 从能带结构上讲 半金属(ex: Bi)与金属类似,  $T=0$  时, 导带几乎全空, 价带几乎全满。半导体与绝缘体类似,  $T=0$  时, 导带全空, 价带全满, 仅为禁带  $E_g$  小些而已。

10. 晶体电阻的起因是什么?

答: 广义缺陷与 Bloch 电子的相互作用, 即声子、杂质、缺陷对载流子的散射。

## 第一章 晶体结构和倒格子

1. 画出下列晶体的惯用元胞和布拉菲格子, 写出它们的初基元胞基矢表达式, 指明各晶体的结构及两种元胞中的原子个数和配位数。

(1) 氯化钾            (2) 氯化钛            (3) 硅            (4) 砷化镓            (5) 碳化硅  
(6) 钽酸锂            (7) 铍            (8) 钨            (9) 铂

2. 对于六角密积结构, 初基元胞基矢为

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \sqrt{3}\vec{j}) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \sqrt{3}\vec{j})$$

求其倒格子基矢, 并判断倒格子也是六角的。

3. 用倒格矢的性质证明, 立方晶格的 (hcl) 晶向与晶面垂直。

4. 若轴矢  $\vec{a}$ 、 $\vec{b}$ 、 $\vec{c}$  构成简单正交系, 证明。晶面族 (h、k、l) 的面间距为

$$d_{hkl}^2 = \frac{1}{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}$$

5. 用X光衍射对Al作结构分析时, 测得从(111)面反射的波长为  $1.54\text{\AA}$  反射角为  $\theta=19.2^\circ$

求面间距  $d_{111}$ 。

6. 试说明: 1) 劳厄方程与布拉格公式是一致的;

2) 劳厄方程亦是布里渊区界面方程;

7. 在图 1-49 (b) 中, 写出反射球面 P、Q 两点的倒格矢表达式以及所对应的晶面指数和衍射面指数。

8. 求金刚石的几何结构因子, 并讨论衍射面指数与衍射强度的关系。

9. 说明几何结构因子  $S_h$  和坐标原点选取有关, 但衍射谱线强度和坐标选择无关。

10. 能量为  $150\text{eV}$  的电子束射到镍粉末上, 镍是面心立方晶格, 晶格常数为  $3.25 \times 10^{-10}\text{m}$ , 求最小的布拉格衍射角。

附:  $1\text{eV}=1.602 \times 10^{-19}\text{J}$ ,  $h=6.262 \times 10^{-34}\text{J} \cdot \text{s}$ ,  $c=2.9979 \times 10^8\text{m/s}$

## 第二章 晶体结合

1. 已知某晶体两相邻原子间的相互作用能可表示成

$$U(r) = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}$$

- (1) 求出晶体平衡时两原子间的距离;

- (2) 平衡时的二原子间的相互作用能;

- (3) 若取  $m=2, n=10$ , 两原子间的平衡距离为  $3\text{\AA}$ , 仅考虑二原子间相互作用则离解能为  $4\text{eV}$ , 计算 a 及 b 的值;

- (4) 若把相互作用势中排斥项  $b/r^n$  改用玻恩-梅叶表达式  $\lambda \exp(-r/p)$ , 并认为在平衡时对相互作用势能具有相同的贡献, 求 n 和 p 间的关系。

2. N 对离子组成的 NaCl 晶体相互作用势能为 
$$U(R) = N \left[ \frac{B}{R^n} - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right]$$

(1)证明平衡原子间距为 
$$R_0^{n-1} = \frac{4\pi\epsilon_0 B}{\alpha e^2} n$$

(2)证明平衡时的相互作用势能为 
$$U(R_0) = -\frac{\alpha Ne^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

(3)若试验测得NaCl晶体的结合能为 765kJ/mol,晶格常数为  $5.63 \times 10^{-10} \text{m}$ , 计算NaCl晶体的排斥能的幂指数n, 已知NaCl晶体的马德隆常数是 $\alpha=1.75$

3. 如果把晶体的体积写成  $V=N\beta R^3$ 式中N是晶体中的粒子数; R是最近邻粒子间距;  $\beta$ 是结构因子, 试求下列结构的 $\beta$ 值

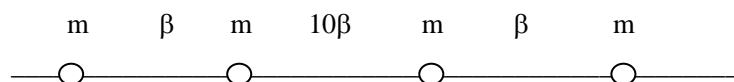
(1) fcc (2) bcc (3) NaCl (4) 金刚石

4. 证明: 由两种离子组成的, 间距为 $R_0$ 的一维晶格的马德隆常数  $\alpha = \ln 2$ .

### 第三章 晶格振动

1. 设有一双子链最近邻原子间的力常数为 $\beta$ 和  $10\beta$ , 两种原子质量相等, 且最近邻距离为  $a/2$ ,

求在  $q=0, q=\frac{\pi}{a}$  处的 $\omega(q)$ .并定性画出色散曲线。



2. 设三维晶格的光学格波在 $q=0$  的长波极限附近有  $\omega_i(q)=\omega_0-Aq^2$  ( $A>0$ ), 求证光学波频率

分布函数(格波密度函数)为: 
$$g(\omega) = \sum_{i=1}^{3(s-1)} \frac{V}{4\pi^2} \frac{(\omega_0 - \omega_i)^{1/2}}{A^{3/2}} \quad \omega_i \leq \omega_0$$

$$g(\omega)=0 \quad \omega_i > \omega_0$$

3. 求一维单原子链的格波密度函数; 若用德拜模型, 计算系统的零点能。

4. 试用平均声子数 $\bar{n} = (e^{\hbar\omega/KT} - 1)^{-1}$  证明: 对单式格子, 波长足够长的格波平均能量为KT;

当 $T \ll Q_D$ 时, 大约有多少模式被激发? 并证明此时晶体比热正比于 $(\frac{T}{Q_D})^3$ 。

5. 对于金刚石、Zns、单晶硅、金属 Cu、一维三原子晶格, 分别写出

- (1) 初基元胞内原子数; (2). 初基元胞内自由度
- (3).格波支数; (4). 声学波支数
- (5).光学波支数

6. 证明在极低温度下, 一维单式晶格的热容正比于 T.

7. NaCl 和 KCl 具有相同的晶体结构。其德拜温度分别为 320K 和 230K。KCl 在 5K 时的

定容热容量为  $3.8 \times 10^{-2} \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ , 试计算NaCl在 5K和KCl在 2K时的定容热容量。

8. 在一维无限长的简单晶格中, 设原子的质量均为M, 若在简谐近似下考虑原子间的长程作用力, 第n个原子与第n+m和第n-m个原子间的恢复力系数为 $\beta_m$ , 试求格波的色散关系。

## 第四章 晶体缺陷

1. 设 $U_f$ 为费仑克尔缺陷形成能证明在温度T时, 达到热平衡的晶体中费仑克尔缺陷的数目为:

$$n_f = \sqrt{NN'} e^{-u_f/2k_B T} \quad \text{式中} N \text{和} N' \text{分别为晶体的原子格点总数和间隙位置数。}$$

2. 已知某晶体肖特基缺陷的形成能是 1ev, 问温度从  $T=290\text{K}$  到  $T=1000\text{K}$  时, 肖特基缺陷增大多少倍?
3. 已知铜金属的密度为  $8.93\text{g}/\text{cm}^3$ , 原子量为 63.54, 它在 1000K及 700K时自扩散系数分别为  $1.65 \times 10^{-11}$  及  $3.43 \times 10^{-15} \text{cm}^2/\text{s}$ , 又知空位邻近的原子跳入空位必须克服的势垒高度为 0.8ev。  
试求 (1) 1000K 及 700K 的铜金属中的空位浓度, (设自扩散完全由空位机制所引起)。  
(2) 已知形成一个填隙原子所需要的能量约为 4ev, 结算接近熔点 1300K 时填隙原子的浓度及空位的浓度。
4. 求体心立方、面心立方 六角密集三种晶体的伯格矢量浓度和方向。
5. 已知余误差函数  $\text{erf}(Z)$  在  $Z$  很小时, ( $Z < 0.5$ ) 可以近似地写为  $\text{erf}(Z)$ , 现将一硅片置于  $1300^\circ\text{C}$  的铝蒸汽中, 使铝扩散进入硅片。如果要求硅片距表面的  $0.01\text{cm}$  深处的浓度是表面浓度的 35%, 问扩散需多长的时间? 铝在硅中的扩散系数由题图 4-1 给出。

## 第五章 金属自由电子论

1. 电子在每边长为  $L$  的方盒子中运动, 试用索末菲量子自由电子模型和周期性边界条件求出它的最低的四个能级的所有波函数, 绘出这四个能级的能量和简并度(每个能级所具有的电子态总数称为这个能级的简并度)。
2. 限制在边长为二维正方形势阱中的  $N$  个自由电子, 电子能量为 (与第六章 16 题相同)  
试求: (1) 能量从  $E$  到  $E+dE$  之间的状态数;  
(2)  $T=0$  时费米能量的表示式。
3. 试证元胞是正方形的二维晶格第一布里渊区顶角上的自由电子动能比区边中点处大一倍, 对于简立方晶体, 相应的倍数是多少?
4. 试估算在温度  $T$  时, 金属中被热激发到达高能态的电子数目所占全部电子数的比例,
5. 证明费米能级 $E_f$  处的电子态密度可以写为  $D(E) = 3N_0/2E_f$ , 其中 $N_0$ 为价电子数。
6. 已知银是单价金属, 费米面近似为球形, 银的密度  $\rho_m = 10.5 \times 10^3 \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$  原子量  $A = 107.87$ , 电阻率在  $295\text{K}$  时为  $1.61 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ , 在  $20\text{K}$  时为  $0.0038 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ , 试计算  
(1) 费米能, 费米温度和费米速度;  
(2) 费米球的半径和费米球的最大截面积;  
(3) 室温下和绝对零度附近电子平均自由时间和平均自由程。

7. 已知锂的密度为  $0.534 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , 德拜温度为 344K, 试求

- (1) 室温下电子比热
- (2) 在什么温度下电子比热和晶格比热有相同值?

8. 在低温下金属钾的摩尔比热的实验结果可写为

$$C_v = 2.08T + 2.57T^3 \quad \text{mJ/mol} \cdot \text{K}$$

若有一个摩尔钾有  $N_v = 6 \times 10^{23}$  个电子, 试求钾的费米温度和德拜温度  $\theta_D$

9. 试用里查逊公式证明: 两种金属的接触电势差  $V_1 - V_2 = 1/e (\Phi_I - \Phi_{II})$  其中  $\Phi_I$ 、 $\Phi_{II}$  分别为两种金属的功函数。

## 第六章 固体能带论

1. 近邻近似下, 按紧束缚近似, 针对简立方晶体 S 能带

- (1) 计算  $E_s \sim \vec{k}$  关系;
- (2) 求能带宽度;
- (3) 讨论在第一 B·Z 中心附近等能面的形状。

注:  $\cos X = 1 - X^2/(2!) + X^4/(4!) - \dots$

2. 邻近似下, 用紧束缚近似导出体心立方晶体 S 能带的  $E_s(\vec{k})$ , 试画出沿  $K_x$  方向 ( $K_y = K_z = 0$ ) 的散射关系曲线, 并计算能带宽度。

3. 利用一维 Bloch 电子模型证明: 在布里渊区边界上, 电子的能量取极值。

4. 利用布洛赫定理,  $\Psi_K(x+n\alpha) = \Psi_K(x)e^{ikna}$  的形式, 针对一维周期势场中的电子波函数。

$$(1) \quad \Psi_K(x) = \sin \frac{\pi}{a} x$$

$$(2) \quad \Psi_K(x) = i \cos \frac{8}{a} \pi x$$

$$(3) \quad \Psi_K(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x-la) \quad (f \text{ 为某一确定函数})$$

求电子在这些状态的波矢  $K$  ( $a$  为晶格常数)

5. 已知一维晶体的电子能带可写成  $E(k) = \frac{\eta^2}{ma^2} \left( \frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

其中  $a$  为晶格常数, 求 (1) 能带宽度;

(2) 电子在波矢  $K$  状态的速度;

(3) 带顶和带底的电子有效质量。

6. 证明面心立方晶体 S 电子能带  $E(K)$  函数沿着布里渊区几个主要对称方向上可化为:

(1) 沿  $\Gamma X$  ( $K_y = K_z = 0, K_x = 2\pi\delta/a, 0 \leq \delta \leq 1$ )



$$E=E_s^a-A-4B(1+2\cos\delta\pi)$$

(2) 沿  $\Gamma L$  ( $K_x=K_y=K_z=2\pi\delta/a$ ,  $0\leq\delta\leq 1/2$ )

$$E=E_s^a-A-12B\cos^2\delta\pi$$

(2) 沿  $\Gamma K$  ( $K_z=0$ ,  $K_x=K_y=2\pi\delta/a$ ,  $0\leq\delta\leq 3/4$ )

$$E=E_s^a-A-4B(\cos^2\delta\pi+2\cos\delta\pi)$$

(4) 沿  $\Gamma W$  ( $K_z=0$ ,  $K_x=2\pi\delta/a$ ,  $K_y=\pi\delta/a$ ,  $0\leq\delta\leq 1$ )

$$E=E_s^a-A-4B(\cos\delta\pi\times\cos\delta\pi/2-\cos\delta\pi-\cos\delta\pi/2)$$

7. 维晶格中波矢取值为  $n\cdot 2\pi/L$ , 证明单位长度的晶体中电子态密度为

$$D(E)=\frac{2}{\pi}\frac{dk}{dE}$$

8. 索末菲自由电子模型, 证明在  $\vec{k}$  空间费米球半径为:  $K_F=(3\pi^2n)^{1/3}$ , 其中  $n$  为电子浓度。

9. 据上题, 当电子浓度  $n$  增大时, 费米球膨胀。证明当电子浓度  $n$  与原子浓度  $n_a$  之比

$$\frac{n}{n_a}=1.36 \text{ 时, 费米球与 fcc 第一布里渊区的边界接触。}$$

10. 绝对温度  $T\neq 0$  时, 求含  $N$  个电子的自由电子费米气系统的动能。

11. 一个晶格常数为  $a$  的二维正方晶格, 求:

(1) 用紧束缚近似求  $S$  能带表示式, 能带顶及能带底的位置及能带宽度;

(2) 带底电子和带顶空穴的有效质量;

(3)  $S$  带电子的速度表示式。

12. Cu 的费米能  $E_F=7.0\text{eV}$ , 试求电子的费米速度  $V_F$ 。在  $273\text{K}$  时, Cu 的电阻率为  $P=1.56\times$

$10^{-8}\Omega\cdot\text{m}$ , 试求电阻的 0 平均自由时间  $\tau$  和平均自由程  $\lambda$ 。

13. 说明外电场  $\vec{\mathcal{E}}$  对费米分布函数  $f_0(E)$  的影响; 证明

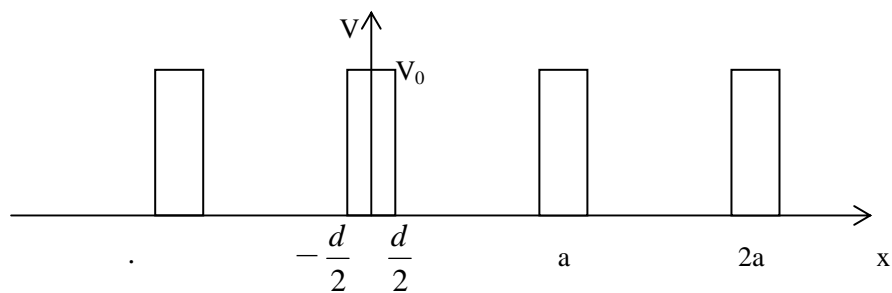
$$\frac{\partial f_0}{\partial T}=-\left[T\frac{d}{dt}\left(\frac{E_f}{T}\right)+\frac{E}{T}\right]\frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (\text{略去 } E \text{ 与 } T \text{ 的关系})$$

14. 属中传导电子的碰撞阻力可写成  $-\frac{\vec{p}}{\tau}$ , 其中  $\vec{p}$  是电子的动量, 试从运动方程出发

求金属在变电场  $\vec{\mathcal{E}}=\vec{\mathcal{E}}_0\cos\omega t$  中的电导率。

15. 若一维晶体的电子势能

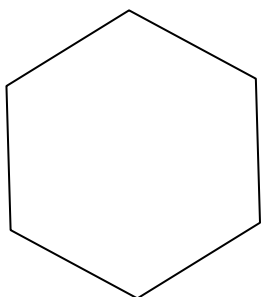
$$V(x) = \begin{cases} 0 & na + \frac{d}{2} \leq x \leq (n+1)a - \frac{d}{2} \\ V_0 & na - \frac{d}{2} \leq x \leq na + \frac{d}{2} \end{cases}$$



用近自由电子模型，求第一个带隙的宽度。

# 固体物理习题第一章

1. 题图 1-1 表示了一个由两种元素原子构成的二维晶体, 请分析并找出其基元, 画出其布拉菲格子, 初基元胞和  $W-S$  元胞, 写出元胞基矢表达式。



解: 基元为晶体中最小重复单元, 其图形具有一定任意性 (不唯一) 其中一个选择为该图的正六边形。

把一个基元用一个几何点代表, 例如用  $B$  种原子处的几何点代表 (格点) 所形成的格子 即为布拉菲格子。

初基元胞为一个晶体及其空间点阵中最小周期性重复单元, 其图形选择也不唯一。

其中一种选法如图所示。 $W-S$  也如图所示。  
左图中的正六边形为惯用元胞。

2. 画出下列晶体的惯用元胞和布拉菲格子, 写出它们的初基元胞基矢表达式, 指明各晶体的结构及两种元胞中的原子个数和配位数。

- (1) 氯化钾      (2) 氯化钛      (3) 硅      (4) 砷化镓      (5) 碳化硅  
(6) 钽酸锂      (7) 铍      (8) 钼      (9) 铂

解:

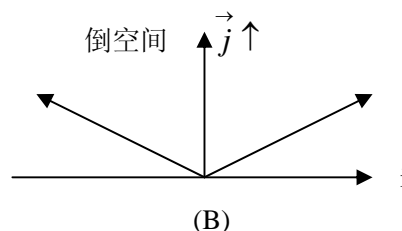
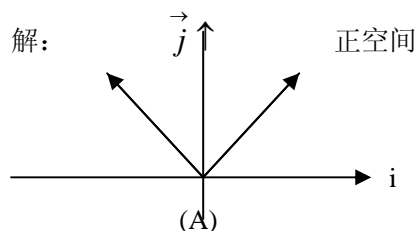
名称	分子式	结构	惯用元胞	布拉菲格子	初基元胞中原子数	惯用元胞中原子数	配位数
氯化钾	KCl	NaCl 结构	教材图 1-17 (b)	教材 fcc 图 1-12	2	8	6
氯化钛	TiCl	氯化铯结构	图 1-18	s.c	2	2	8
硅	Si	金刚石	图 1-19	f.c.c	2	8	4
砷化镓	GaAs	闪锌矿	图 1-20	f.c.c	2	8	4
碳化硅	SiC	闪锌矿	图 1-20	f.c.c	2	8	4
钽酸锂	LiTaO <sub>3</sub>	钙钛矿	图 1-21	s.c	5	5	2.6.12
铍	Be	hcp	图 1-24	简单六角	2	6	12
钼	Mo	bcc		b.c.c	1	2	8
铂	Pt	fcc		f.c.c	1	4	12

基矢表示式参见教材 (1-5)、(1-6)、(1-7) 式。

11. 对于六角密积结构, 初基元胞基矢为

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \sqrt{3}\vec{j}) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \sqrt{3}\vec{j})$$

求其倒格子基矢, 并判断倒格子也是六角的。



由倒格基矢的定义, 可计算得

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega} = \frac{2\pi}{a} \left( \vec{i} + \frac{1}{\sqrt{3}} \vec{j} \right)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi \vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega} = \frac{2\pi}{a} \left( -\vec{i} + \frac{1}{\sqrt{3}} \vec{j} \right)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi \vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega} = \frac{2\pi}{c} \vec{k}$$

正空间二维元胞（初基）如图（A）所示，倒空间初基元胞如图（B）所示

（1）由  $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$  组成的倒初基元胞构成倒空间点阵，具有  $C_6$  操作对称性，而  $C_6$  对称性是六角晶系的特征。

（2）由  $\vec{a}_1$ 、 $\vec{a}_2$  构成的二维正初基元胞，与由  $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$  构成的倒初基元胞为相似平行四边形，故正空间为六角结构，倒空间也必为六角结构。

12. 用倒格矢的性质证明，立方晶格的（hcl）晶向与晶面垂直。

证：由倒格矢的性质，倒格矢  $\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$  垂直于晶面（h、k、l）。由晶面向定义（h、k、l）晶向，可用矢量  $\vec{A}$  表示。  $\vec{A} = h\vec{a}_1 + k\vec{a}_2 + l\vec{a}_3$ ，

$$\text{倒格基矢的定义} \quad \vec{b}_1 = \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{\Omega}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}{\Omega} \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{\Omega}$$

在立方晶格中，可取  $\vec{a}_1$ 、 $\vec{a}_2$ 、 $\vec{a}_3$  相互垂直且  $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3|$ ，则可得知  $\vec{a}_1 \parallel \vec{b}_1$ ， $\vec{a}_2 \parallel \vec{b}_2$ ，

$$\vec{a}_3 \parallel \vec{b}_3, \quad \text{且} \quad |\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = |\vec{b}_3| \quad \text{设} \quad \frac{|\vec{b}_i|}{|\vec{a}_i|} = m \quad (\text{为常值，且有量纲，即不为纯数})$$

$$\text{则} \quad \vec{G}_{hkl} = m(h\vec{a}_1 + k\vec{a}_2 + l\vec{a}_3) = m\vec{A}$$

则  $\vec{G}_{hkl}$  与  $\vec{A}$  平行。

证毕

若以上正、倒基矢，换为正、倒轴矢，以上证明仍成立，则可用于 fcc 和 bcc 晶格。

13. 若轴矢  $\vec{a}$ 、 $\vec{b}$ 、 $\vec{c}$  构成简单正交系，证明。晶面族（h、k、l）的面间距为

$$d_{hkl}^2 = \frac{1}{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}$$

证 1: 把原点选在该面族中任意一晶面上任一点, 设相邻晶面分别与正交系  $\vec{a}$ 、 $\vec{b}$ 、 $\vec{c}$  交于  $\frac{a}{h}$ 、 $\frac{b}{k}$ 、 $\frac{c}{l}$  处, 同一晶面族中, 相邻晶面的面间距相同, 故只要求得原点与相邻晶面的距离即可。由平面的截距式方程, 可把该晶面方程写为;

$$\frac{x}{\frac{a}{h}} + \frac{y}{\frac{b}{k}} + \frac{z}{\frac{c}{l}} = 1$$

又由点面间距的公式, 可求得原点与该晶面的距离

$$d = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

由该式可知, 面指数 (h、k、l) 为小值的晶面族, 面间距 d 大, 面间距 d 大, 则相邻二个面上的原子间的作用力就小, 致使沿着该方向容易解理 (劈裂)。

证 2: 若正空间基矢为简单正交, 由倒格基矢的定义  $\vec{a}_j \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ , 则对应的倒格基矢  $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$ 、 $\vec{b}_3$  也构成正交系。

晶面族 (h k l) 对应的倒格矢  $\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$  因为  $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$ 、 $\vec{b}_3$  相互正交。

$$\text{所以 } |\vec{G}_{hkl}|^2 = (hb_1)^2 + (kb_2)^2 + (lb_3)^2 = (2\pi)^2 \left[ \left(\frac{h}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{k}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{l}{a_3}\right)^2 \right]$$

(注: 这里  $\vec{a}_1 = \vec{a}$        $\vec{a}_2 = \vec{b}$        $\vec{a}_3 = \vec{c}$ )

由倒格矢的性质

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{k}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{l}{a_3}\right)^2}} \quad \text{the end}$$

16、用 X 光衍射对 Al 作结构分析时, 测得从(111)面反射的波长为  $1.54\text{\AA}$  反射角为  $\theta=19.2^\circ$

求面间距  $d_{111}$ 。

解: 由布拉格反射模型, 认为入射角 = 反射角

$$\text{由布拉格公式 } 2d\sin\theta = \lambda \quad d = \frac{n\lambda}{2\sin\theta} \quad \text{对主极大 取 } n=1$$

$$d = \frac{1.54}{2 \times \sin 19.2^\circ} = 2.34(\text{\AA})$$

17. 试说明: 1) 劳厄方程与布拉格公式是一致的;

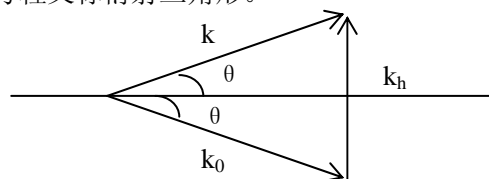
2) 劳厄方程亦是布里渊区界面方程;

$$\text{解: 1) 由坐标空间劳厄方程: } \vec{R}_l \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = 2\pi\mu$$

$$\text{与正倒格矢关系 } \vec{R}_l \cdot \vec{k}_h = 2\pi\mu \quad \text{比较可知: 若 } \vec{k}_h = \vec{k} - \vec{k}_0 \quad \text{成立}$$

即入射波矢  $\vec{k}_0$ , 衍射波矢  $\vec{k}$  之差为任意倒格矢  $\vec{k}_h$ , 则  $\vec{k}$  方向产生衍射光,  $\vec{k}_h = \vec{k} - \vec{k}_0$  式

称为倒空间劳厄方程又称衍射三角形。



现由倒空间劳厄方程出发，推导 Blagg 公式，弹性散射  $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$

由倒格子性质，倒格矢  $\vec{k}_h$  垂直于该晶面族。所以， $\vec{k}_h$  的垂直平分面必与该晶面族平行。

由图可得知： $|\vec{k}_h| = 2K \sin \theta = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$  (A)

又若  $|\vec{k}_h|$  为该方向的最短倒格矢，由倒格矢性质有： $|\vec{K}_h| = \frac{2\pi}{d}$

若  $\vec{k}_h$  不是该方向最短倒格矢，由倒格子周期性

$$|\vec{k}_h| = n |\vec{k}_h'| = \frac{2\pi}{d} \cdot n \quad (B)$$

比较 (A)、(B) 二式可得  $2d \sin \theta = n\lambda$  即为 Blagg 公式。

2)、倒空间劳厄方程

$$\vec{K} - \vec{K}_0 = \vec{K}_h \quad \text{又称衍射三角形，由上图可知}$$

因为是弹性散射  $|\vec{K}| = |\vec{K}_0|$  该衍射三角形为等腰三角形， $\vec{k}_h$  又为倒格矢，即  $\vec{k}_h$  二端均为倒格点。所以，入射波从任一倒格点出发，若指到任一倒格矢的中垂直面上时，才有可能满足衍射三角形，又由布里渊区边界的定义，可知，布里渊区边界即为倒格矢中垂直面，所以原命题成立。

18. 在图 1-49 (b) 中，写出反射球面 P、Q 两点的倒格矢表达式以及所对应的晶面指数和衍射面指数。

解：由图 1-49 (b) 所示， $\vec{b}_1, \vec{b}_2$

OP 倒格矢  $= -3\vec{b}_1 - \vec{b}_2$  对应的衍射晶面指数  $(-3, -1)$  化为  $(3, 1)$

OQ 倒格矢  $= -2\vec{b}_1$  对应衍射晶面指数  $(-2, 0)$  化为  $(1, 0)$

19. 求金刚石的几何结构因子，并讨论衍射面指数与衍射强度的关系。

解：每个惯用元胞中有八个同类原子，其坐标为

$$\begin{array}{cccc} 000, & \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, & \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, & 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}, & \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}, & \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}, & \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4} \end{array}$$

$$\begin{aligned} \text{结构因子} \quad S_{hkl} &= \sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{i2\pi(hU_{\alpha} + kV_{\alpha} + lW_{\alpha})} \\ &= f_{\alpha} \left[ 1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)} + e^{\frac{i\pi}{2}(h+k+l)} + e^{\frac{i\pi}{2}(3h+3k+l)} + e^{\frac{i\pi}{2}(3h+k+3l)} + e^{\frac{i\pi}{2}(h+3k+3l)} \right] \end{aligned}$$

前四项为 fcc 的结构因子，用  $F_f$  表示从后四项提出因子  $e^{\frac{i\pi}{2}(h+k+l)}$

$$\begin{aligned} S_{hkl} &= F_f + f_{\alpha} e^{\frac{i\pi}{2}(h+k+l)} \left[ 1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)} \right] \\ &= F_f + F_f e^{\frac{i\pi}{2}(h+k+l)} = F_f [1 + e^{\frac{i\pi}{2}(h+k+l)}] \end{aligned}$$

衍射强度  $I \propto S_{hkl}^2$

$$S_{hkl}^2 = F_f^2 \left[ 1 + e^{\frac{i\pi}{2}(h+k+l)} \right] \left[ 1 + e^{-\frac{i\pi}{2}(h+k+l)} \right] = F_f^2 \left[ 2 + e^{\frac{i\pi}{2}(h+k+l)} + e^{-\frac{i\pi}{2}(h+k+l)} \right]$$

$$\text{用尤拉公式 } S_{hkl}^2 = 2F_f^2 \left[ 1 + \cos \frac{\pi}{2}(h+k+l) \right]$$

讨论 1. 当  $h, k, l$  为奇异性数（奇偶混杂）时  $F_f=0$  所以  $S_{hkl}^2=0$

2. 当  $h, k, l$  为全奇数时

$$S_{h,k,l}^2 = 2F_f^2 = 2 \times (4f_{\alpha})^2 = 32f_{\alpha}^2$$

3. 当  $h, k, l$  全为偶数，且  $h+k+l=4n$  ( $n$  为任意整数)

$$S_{h,k,l}^2 = 2F_f^2(1+1) = 4 \times 16f_{\alpha}^2 = 64f_{\alpha}^2$$

当  $h,k,l$  全为偶数，但  $h+k+l \neq 4n$  则  $h+k+l=2(2n+1)$

$$S_{h,k,l}^2 = 2F_{\alpha}^2(1-1) = 0$$

补充 1. 说明几何结构因子  $S_h$  和坐标原点选取有关，但衍射谱线强度和坐标选择无关。

$$\text{解： 几何结构因子} \quad S_h = \sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{i \vec{s} \cdot \vec{R}_{\alpha}}$$

式中： $f_{\alpha}$  为元胞内第  $\alpha$  个原子的散射因子。 $\vec{R}_{\alpha}$  为元胞内第  $\alpha$  个原子的位矢

$$\text{若新坐标系相对原坐标系有一位移 } \Delta \vec{r} \text{ 则} \quad S'_h = \sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{i \vec{s} \cdot (\vec{R}_{\alpha} + \Delta \vec{r})} = S_h \cdot e^{i \vec{s} \cdot \Delta \vec{r}}$$

由于一般  $e^{i \vec{s} \cdot \Delta \vec{r}} \neq 1$  所以  $S'_h \neq S_h$  即几何结构因子与坐标原点选取有关。

而衍射谱线强度正比与几何结构因子模的平方

$$I \propto |S'_h|^2 = (S_h \cdot e^{i \vec{s} \cdot \Delta \vec{r}})(S_h^* e^{-i \vec{s} \cdot \Delta \vec{r}}) = S_h \cdot S_h^* = |S_h|^2$$

所以谱线强度与坐标原点选取无关。

## 固体物理第二章习题参考答案

1. 已知某晶体两相邻原子间的互作用能可表示成

$$U(r) = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}$$

- (1) 求出晶体平衡时两原子间的距离;
- (2) 平衡时的二原子间的结合能;
- (3) 若取  $m=2, n=10$ , 两原子间的平衡距离为  $3\text{\AA}$ , 仅考虑二原子间互作用则离解能为  $4\text{eV}$ , 计算  $a$  及  $b$  的值;
- (4) 若把互作用势中排斥项  $b/r^n$  改用玻恩-梅叶表达式  $\lambda \exp(-r/\rho)$ , 并认为在平衡时对互作用势能具有相同的贡献, 求  $n$  和  $\rho$  间的关系。

解: (1) 平衡时  $\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r_0} = amr_0^{-m-1} - bnr_0^{-n-1} = 0$

得  $r_0^{n-m} = \frac{bn}{am} \quad r_0 = \left(\frac{bn}{am}\right)^{\frac{1}{n-m}}$

(2) 平衡时 把  $r_0$  表示式代入  $u(r)$

$$u(r_0) = -\frac{a}{\left(\frac{bn}{am}\right)^{\frac{m}{n-m}}} + \frac{b}{\left(\frac{bn}{am}\right)^{\frac{n}{n-m}}} = -\left(\frac{m}{bn}\right)^{\frac{n-m}{m}} a^{\frac{n}{n-m}} + \left(\frac{n}{am}\right)^{\frac{n-m}{n}} b^{\frac{-m}{n-m}}$$

(3) 由  $r_0$  表示式得:  $3 \times 10^{-10} = \left(\frac{5b}{a}\right)^{\frac{1}{8}}$

若理解为互作用势能为二原子平衡时系统所具有的能量, 由能量最小原理, 平衡时系统能量具有极小值, 且为负值; 离解能和结合能是要把二原子拉开, 外力所作的功, 为正值, 所以, 离解能 = 结合能 = - 互作用势能, 由  $U(r)$  式的负值, 得

$$4 \times 1.6 \times 10^{-19} = +\frac{a}{(3 \times 10^{-10})^2} - \frac{b}{(3 \times 10^{-10})^{10}}$$

化简为  $6.4 \times 10 = +\frac{a}{9} - \frac{b}{3^{10}} \times 10^{-80}$  略去第二项

$$a = 5.76 \times 10^2$$

上式代入  $a$  值得  $b = 7.55 \times 10^{-75}$

(4) 由题意得  $\lambda \exp(-r_0/\rho) = br^{-n}$  \*

$$\ln \lambda - r_0/\rho = \ln b - n \ln r_0 \quad n \ln r_0 = r_0/\rho + \ln b/\lambda$$

$$n = \frac{r_0/\rho + \ln b/\lambda}{\ln r_0}$$

又解: \*式两边对  $r_0$  求导, 得:  $\lambda/\rho \times \exp(-r_0/\rho) = bnr^{-n+1}$ , 与\*式比较得:

$$n/r_0 = 1/\rho \quad \text{得: } r_0 = n\rho$$

2. N 对离子组成的 NaCl 晶体相互作用势能为

$$U(R) = N \left[ \frac{B}{R^n} - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right]$$



(1)证明平衡原子间距为 
$$R_0^{n-1} = \frac{4\pi\epsilon_0 B}{\alpha e^2} n$$

(2)证明平衡时的相互作用势能为 
$$U(R_0) = -\frac{\alpha Ne^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} (1 - \frac{1}{n})$$

(3)若试验测得 NaCl 晶体的结合能为 765kj/mol,晶格常数为  $5.63 \times 10^{-10} \text{m}$ , 计算 NaCl 晶体的排斥能的幂指数 n, 已知 NaCl 晶体的马德隆常数是  $\alpha=1.75$

证: (1) 
$$\frac{du}{dr} = N \left[ B(-n)e^{-n-1} - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} (-1)R^{-2} \right]$$

$$= N \left( \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} R^{-2} - \frac{Bn}{R^{n+1}} \right)$$

令  $\left. \frac{du}{dR} \right|_{R=R_0} = 0$  得  $R_0^{n-1} = \frac{4\pi\epsilon_0 Bn}{\alpha e^2}$  证毕

(2) 把以上结果代入 U(R)式, 并把 R 取为  $R_0$

$$U(R_0) = N \left[ \frac{B}{\frac{4\pi\epsilon_0 Bn}{\alpha e^2} \left( \frac{4\pi\epsilon_0 Bn}{\alpha e^2} \right)^{\frac{1}{n-1}}} - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 \left( \frac{4\pi\epsilon_0 Bn}{\alpha e^2} \right)^{\frac{1}{n-1}}} \right]$$

$$= -N \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

若认为结合能与相互作用能符号相反, 则上式乘 “-” 证毕

(3) 由 (2) 之结论 整理可得

$$n = \frac{N\alpha e^2}{N\alpha e^2 + 4\pi\epsilon_0 R_0 U(R_0)}$$

式中 阿氏常数  $N=6.0 \times 10^{23}$  电子电量  $e=1.6 \times 10^{-19}$  库仑  
真空介电常数  $\epsilon_0=8.85 \times 10^{-12}$  法/米

若题中  $R_0$  为异种原子的间距,  $R_0=0.5 \times 5.63 \times 10^{-10} \text{m}$   $U(R_0)=-765000 \text{j/mol}$  (平衡时相互作用势能取极小值, 且为负, 而结合能为正值) 马德隆常数  $\alpha=1.75$

$$n = \frac{1}{1 - \frac{4\pi\epsilon_0 R_0 U(R_0)}{N\alpha e^2}} = \frac{1}{1 - \frac{4 \times 3.14 \times 8.85 \times 10^{-12} \times 2.82 \times 10^{-10} \times 7.65 \times 10^5}{6.0 \times 10^{23} \times 1.75 \times 2.56 \times 10^{-38}}} \approx 8.8$$

3. 如果把晶体的体积写成  $V=N\beta R^3$  式中  $N$  是晶体中的粒子数； $R$  是最近邻粒子间距； $\beta$  是结构因子，试求下列结构的  $\beta$  值

(1) fcc (2) bcc (3) NaCl (4) 金刚石

解：取一个惯用元胞来考虑

结构	$V_0$	$N_0$	$R_0$	$\beta$
fcc	$a^3$	4	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$
bcc	$a^3$	2	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{4}{3^{3/2}}$
NaCl	$a^3$	8	$\frac{a}{2}$	1
金刚石	$a^3$	8	$\frac{\sqrt{3}}{4}a$	$\frac{8}{3^{3/2}}$

4. 证明：由两种离子组成的，间距为  $R_0$  的一维晶格的马德隆常数  $\alpha = \ln 2$  .

证：由马德隆常数的定义  $\mu = \sum_j \pm \frac{1}{a_j}$

其中 同号离子取 “-”，异号离子取 “+”。若以一正离子为参考点，则

$$\mu = 2 \left( 1 + \frac{1}{3} + \frac{1}{5} + \dots + \frac{1}{2n-1} + \dots \right) - 2 \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \dots + \frac{1}{2n} + \dots \right) \quad (\text{A})$$

又由幂级数的展开式

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots + (-1)^{n-1} \frac{x^n}{n} + \dots \quad (\text{B})$$

令  $x=1$  则 (B) 式即为 (A) 式括号中的式子

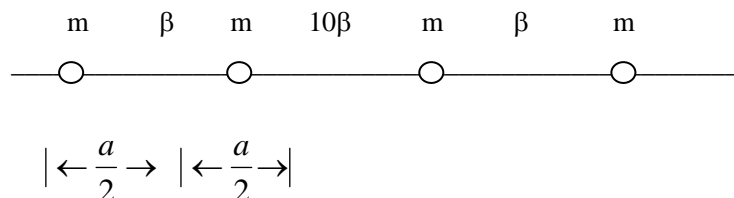
所以  $\mu = 2\ln(1+1) = 2\ln 2$

证毕

## 晶格振动部分习题参考解答

9. 设有一双子链最近邻原子间的力常数为 $\beta$ 和 $10\beta$ , 两种原子质量相等, 且最近邻距离为 $a/2$ ,

求在 $q=0, q=\frac{\pi}{a}$ 处的 $\omega(q)$ , 并定性画出色散曲线。



解: 已知 
$$\omega_A^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{m} - \frac{1}{m}(\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos qa)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$$\omega_0^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{m} - \frac{1}{m}(\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos a)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

由题意  $\beta_2 = 10\beta_1 = 10\beta$  代入 (1) 式

得 
$$\begin{aligned} \omega_A^2 &= \frac{11\beta}{m} - \frac{1}{m}(\beta^2 + 100\beta + 20\beta^2 \cos qa)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{11\beta}{m} - \frac{\beta}{m}(101 + 20\cos qa)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\beta}{m}[11 - (101 + 20\cos qa)^{\frac{1}{2}}] \end{aligned}$$

当  $q=0$  时 
$$\omega_A^2 \Big|_{q=0} = \frac{\beta}{m}(11 - 11) = 0$$

当  $q=\frac{\pi}{a}$  时 
$$\omega_A^2 \Big|_{q=\frac{\pi}{a}} = \frac{\beta}{m}(11 - 9) = \frac{2\beta}{m}$$

把  $\beta_2 = 10\beta_1 = 10\beta$  代入 (2) 式

得 
$$\omega_0^2 = \frac{\beta}{m}[11 + (101 + 20\cos qa)^{\frac{1}{2}}]$$

当  $q=0$  时 
$$\omega_0^2 \Big|_{q=0} = \frac{22\beta}{m} \quad q = \pm \frac{\pi}{a} \text{ 时 } \omega_0^2 \Big|_{q=\frac{\pi}{a}} = \frac{20\beta}{m}$$

10. 设三维晶格的光学格波在  $q=0$  的长波极限附近有  $\omega_i(q) = \omega_0 - Aq^2$  ( $A > 0$ ), 求证光学波频率分布函数(格波密度函数)为:

$$g(\omega) = \sum_{i=1}^{3(s-1)} \frac{V}{4\pi^2} \frac{(\omega_0 - \omega_i)^{\frac{1}{2}}}{A^{\frac{3}{2}}} \quad \omega_i \leq \omega_0$$

$$g(\omega) = 0 \quad \omega_i > \omega_0$$

证: 由格波密度函数的定义已知, 对一支格波在  $d\omega_i$  区间格波数为

$$g(\omega_i)d\omega_i = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega_i}^{\omega_i+d\omega_i} d\tau_q$$

在长波极限下等频率面为球面 则  $g(\omega_i)d\omega_i = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq$

当  $\omega_i \leq \omega_0$  时 因为  $q^2 = \frac{\omega_0 - \omega_i(q)}{A}$   $q = \sqrt{\frac{\omega_0 - \omega_i(q)}{A}}$

$$dq = -\frac{d\omega_i(q)}{2A^{1/2}[\omega_0 - \omega_i(q)]^{1/2}}$$

$$\text{所以 } g(\omega_i) = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \cdot \frac{\omega_0 - \omega_i}{A} \cdot \frac{-1}{2A^{1/2}(\omega_0 - \omega_i)^{1/2}} = -\frac{V(\omega_0 - \omega_i)^{1/2}}{4\pi^2 A^{3/2}}$$

由模式密度的物理意义，取其绝对值

而当  $\omega_i > \omega_0$  时 因为  $\omega_i = \omega_0 - Aq^2$  所以  $Aq^2 = \omega_0 - \omega_i$

又因为  $A > 0$   $q^2 > 0$  (因为  $q$  本身为实数)

所以 上式右边必满足  $\omega_0 > \omega_i$  即不存在  $\omega_i > \omega_0$  的格波则 则  $g(\omega_i) = 0$

又因为 三维晶体中共要有  $3(S-1)$  支光学格波

所以 光学波频率分布函数为：

$$g(\omega) = \sum_{i=1}^{3S-3} \frac{V(\omega_0 - \omega_i)^{1/2}}{4\pi^2 A^{3/2}} \quad \omega_i \leq \omega_0$$

$$g(\omega) = 0 \quad \omega > \omega_0$$

11. 求一维单原子链的格波密度函数；若用德拜模型，计算系统的零点能。

解：(1) 设一维单原子链长  $L = Na$ ， $a$  为原子间距， $N$  为原子数，在  $-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$  区域内  $q$  只能取  $N$  个值， $dq$  间距内的格波数为

$$f(q)dq = \frac{N}{2\pi/a} dq = \frac{Na}{2\pi} dq = \frac{L}{2\pi} dq$$

色散关系为  $\omega = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$  (1)

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m} (1 - \cos qa) = \frac{\omega_m^2}{2} (1 - \cos qa) \quad (2)$$

其中  $\omega_m = \left( \frac{4\beta}{m} \right)^{1/2}$

由于对应于 $\pm q$ ,  $\omega$ 取相同的值, (色散关系的对称性), 则  $d\omega$  区间的格波数为

$$g(\omega)d\omega = 2 \cdot \frac{Na}{2\pi} dq = \frac{Nad\omega}{\pi \frac{d\omega}{dq}} \quad (3)$$

由色散关系 (2) 可得:  $2\omega d\omega = \frac{\omega_m^2 a}{2} \sin qa \, dq$

$$\frac{d\omega}{dq} = \frac{\omega_m^2 a}{4\omega} \sin qa = \frac{\omega_m^2 a}{4\omega} \sqrt{1 - \cos^2 qa} = \frac{a}{2} \sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}$$

代入(3)可得:  $g(\omega) = \frac{2N}{\pi \sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}$  (4)

(2)在德拜模型下, 色散关系为线性  $\omega = v_p q$   $\frac{d\omega}{dq} = v_p$  代入(3)式

得:  $g(\omega) = \frac{Na}{\pi v_p} = \frac{L}{\pi v_p}$  (5)

则零点能为:  $E_{\text{零}} = \int_0^{\omega_D} g(\omega) \cdot \frac{1}{2} \eta \omega d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{L\eta}{2\pi v_p} \omega d\omega = \frac{L\eta \omega_D^2}{4\pi v_p}$  (6)

又因为  $\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{L}{\pi v_p} d\omega = \frac{L\omega_D}{\pi v_p} = N$

得:  $v_p = \frac{\omega_D L}{N\pi}$  (7)

代入 (6) 式 得:

$$E_{\text{零}} = \frac{\eta N}{4} \omega_D = \frac{N}{4} K_B Q_D = \frac{\pi N \eta v_p}{4a}$$

12 试用平均声子数  $n = (e^{\eta\omega/kT} - 1)^{-1}$  证明: 对单式格子, 波长足够长的格波平均能量为  $KT$ ;

当  $T \ll Q_D$  时, 大约有多少模式被激发? 并证明此时晶体比热正比于  $(\frac{T}{Q_D})^3$ 。

解: 单式格子仅有声学格波, 而对声学波波长入足够长, 则 $\omega$ 很低对满足  $\frac{\eta\omega}{k_B T} \ll 1$  的格波

把  $e^{\eta\omega/k_B T}$  泰勒展开, 只取到一次项  $e^{\eta\omega/k_B T} - 1 \approx (1 + \frac{\eta\omega}{k_B T}) - 1 = \frac{\eta\omega}{k_B T}$ ,

平均声子数  $\bar{n} = (e^{\eta\omega/kT} - 1)^{-1}$ ，所以  $\bar{n} \approx \frac{k_B T}{\eta\omega}$  而属于该格波的声子能量为

$$\eta\omega$$

当  $T \ll \theta_D$  时，可使用德拜模型，格波密度函数为教材 (3-72)  $g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_\rho^3} \omega^2$

只有  $\omega \leq \frac{k_B T}{\eta}$  的格波才能激发，已激发的格波数可表示为：

$$A = \int_0^{\frac{k_B T}{\eta}} g(\omega) d\omega = \frac{V}{2\pi^2 v_\rho^3} \left( \frac{k_B T}{\eta} \right)^3$$

由上已知，此时格波平均能量为  $K_B T$  则晶格热容可表示为

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left[ \frac{V}{2\pi^2 v_\rho^3} \left( \frac{k_B T}{\eta} \right) k_B T \right]$$

$$= \frac{2v k_B^4}{\pi^2 v_\rho^3 \eta^3} T^3$$

把 (3-75) 式  $\omega_D = (6\pi^2 \frac{N}{V})^{1/3} v_\rho$  及  $\eta\omega_D = K_B \theta_D$  代入整理为：

$$C_V = 12NK_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

所以晶格比热正比于  $\left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3$  得证

13. 对于金刚石、Zns、单晶硅、金属 Cu、一维三原子晶格，分别写出

- (1) 初基元胞内原子数；
- (2) 初基元胞内自由度
- (3) 格波支数；
- (4) 声学波支数
- (5) 光学波支数

解：

	金刚石	Zns	Si	Cu	一维三原子晶格
初基元胞内原子数	2	2	2	1	3
初基元胞内自由度	6	6	6	3	3
格波支数	6	6	6	3	3
声学波支数	3	3	3	3	1
光学波支数	3	3	3	0	2

14. 证明在极低温下，一维单式晶格的热容正比于  $T$ 。

证：在极低温下，可用德拜模型，q 点密度为  $\frac{L}{2\pi}$   $\omega = v_\rho q$

$$d\omega \text{ 区间格波数为 } g(\omega)d\omega = 2 \cdot \frac{L}{2\pi} dq = \frac{1}{\pi} \frac{d\omega}{\frac{dw}{wq}} = \frac{L}{\pi v_\rho} d\omega$$

$$\text{所以格波密度函数 } g(\omega) = \frac{L}{\pi v_\rho}$$

只有  $\omega \leq \frac{k_B T}{\eta}$  的格波才能被激发，已激发的格波数为：

$$A = \int_0^{\frac{k_B T}{\eta}} g(\omega) d\omega = \frac{L}{\pi v_\rho} \cdot \frac{k_B T}{\eta}$$

由第 12 题已证，在极低温度下，一维单式格子主要是长声波激发对满足  $\frac{\eta\omega}{kT} \ll 1$  的格波能量为  $K_B T$ 。则晶格热容为

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left[ \frac{L K_B T}{\pi v_\rho \eta} \cdot K_B T \right] = \frac{2 L K_B^2}{\pi \eta v_\rho} T \quad \text{即热容正比于 } T。$$

15. NaCl 和 KCl 具有相同的晶体结构。其德拜温度分别为 320K 和 230K。KCl 在 5K 时的定容热容量为  $3.8 \times 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ，试计算 NaCl 在 5K 和 KCl 在 2K 时的定容热容量。

解： 设 NaCl 和 KCl 晶体所包含的初基元胞数相等，均为 N， $T \ll \theta_D$ ，可用德拜模型（德拜温度分别为 NaCl=320K，KCl=230K）利用

$$C_V = q N k \left( \frac{T}{Q_D} \right)^3 \int_0^{\frac{Q_D}{T}} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}$$

$$\frac{Q_D}{T} \gg 1. \quad \text{积分上限近似可取为 } \infty \text{、则有}$$

$$\int_0^\infty \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} = \frac{4\pi^2}{15}$$

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} N K_B \left( \frac{T}{Q_D} \right)^3$$

$$\text{对 KCl: } T=5\text{K 时} \quad C_V = 3.8 \times 10^{-2}$$

$$\text{当 } T=2\text{K 时} \quad C_V^1 = \frac{C_V}{5^3} \cdot 2^3 = \frac{3.8 \times 8}{125} = 0.24 \times 10^{-2} (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$$

$$\text{对 NaCl: } T=5\text{K 时} \quad C_V^{11} = \frac{(C_V \cdot Q_D^3)}{(Q_D^{11})^3} = \frac{3.8 \times 10^{-2} \times (230)^3}{(320)^3} = 1.41 \times 10^{-2} (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$$

## 固体物理习题参考解答      缺陷

1. 设  $U_f$  为费仑克尔缺陷形成能证明在温度  $T$  时, 达到热平衡的晶体中费仑克尔缺陷的数目为:

$$n_f = \sqrt{NN'} e^{-u_f/2k_bT} \quad \text{式中 } N \text{ 和 } N' \text{ 分别为晶体的原子格点总数和间隙位置数,}$$

解: 已知  $N$ : 晶体的原子格点数,  $N'$ : 间隙位置数

$$U_f = U_1 + U' \quad \text{其中 } U_1: \text{空位形成能} \quad U': \text{填隙缺陷形成能}$$

$$\text{可知, 温度为 } T \text{ 时, 某一格点上形成空位的几率为 } \frac{n_1}{N} = e^{-U_1/k_bT} \quad (1)$$

$$\text{某一间隙位置上形成填隙原子的几率为 } \frac{n'}{N'} = e^{-U'/k_bT} \quad (2)$$

费仑克尔缺陷是形成填隙原子一空位对, 即  $n_1 = n' = U_f$

$$\text{其几率为 } (1) \times (2): \quad \frac{n_1 \cdot n'}{N \cdot N'} = e^{-(U_1+U')/k_bT} \quad \text{又 } \because U_1 + U' = U_f$$

$$\therefore n_f = \sqrt{NN'} e^{-U_f/2k_bT}$$

2. 已知某晶体肖特基缺陷的形成能是 1eV, 问温度从  $T=290K$  到  $T=1000K$  时, 肖特基缺陷增大多少倍?

$$\text{解: 由式} \quad n_1 = N e^{-U_1/k_bT_1} \quad n_2 = N e^{-U_1/k_bT_2}$$

$$\alpha = \frac{n_2}{n_1} = e^{-\frac{U_1}{k_b}(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1})} = e^{\frac{U_1}{k_b}(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1})}$$

$$\text{代入数据: } U_1 = 1\text{eV} \approx 1.60 \times 10^{-19}(\text{J})$$

$$T_1 = 290K$$

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23}(\text{J/K})$$

$$T_2 = 1000K$$

$$\alpha = \exp \left[ \frac{1.60 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23}} \left( \frac{1}{290} - \frac{1}{1000} \right) \right] \approx \exp(28.4) = 2.1 \times 10^{12} (\text{倍}) \quad \text{the end}$$

3. 已知铜金属的密度为  $8.93\text{g/cm}^3$ , 原子量为 63.54, 它在 1000K 及 700K 时自扩散系数分别为  $1.65 \times 10^{-11}$  及  $3.43 \times 10^{-15} \text{cm}^2/\text{s}$ , 又知空位邻近的原子跳入空位必须克服的势垒高度为 0.8eV。

试求 (1) 1000K 及 700K 的铜金属中的空位浓度, (设自扩散完全由空位机制所引起)。

(2) 已知形成一个填隙原子所需要的能量约为 4eV, 结算接近熔点 1300K 时填隙原子的浓度及空位的浓度。

$$\text{解: (1) 由教材(4-41)式, 在空位机制中} \quad D_1 = D_0 e^{-\Delta E_1/k_bT} \quad \Delta E_1 = U_1 + E_1$$

$$\text{由题意已知} \quad T = 1000 \text{ 时} \quad D_1 = 1.65 \times 10^{-11}$$

$$T = 700K \text{ 时} \quad D_1 = 3.43 \times 10^{-15}$$

$$\text{代入上式得: } D_1 = D_0 e^{-\Delta E_1/k_bT} \quad (1)$$



$$D_1' = D_{01} e^{-\Delta E_1 / k_B T} \quad (2)$$

(1)/(2) 得:

$$\frac{D_1}{D_1'} = e^{\frac{\Delta E}{k_B} \left( \frac{1}{1700} - \frac{1}{1000} \right)} \quad \text{代入数据得: } 4.81 \times 10^3 = e^{\frac{\Delta E}{K_B} \times 4.29 \times 10^{-4}}$$

$$K_B = 1.38 \times 10^{-23} (\text{J/K}) \quad \text{两边取自然对数得:} \quad 8.478 = \Delta E_1 \times 3.11 \times 10^{19}$$

$$\Delta E_1 = 2.726 \times 10^{-19} (\text{J}) = 1.70 \text{ eV} \quad (1 \text{ eV} \approx 1.60 \times 10^{-19} \text{ J})$$

$$U_1 = \Delta E_1 - E_1 = 1.70 - 0.8 = 0.9 \text{ eV} = 1.446 \times 10^{-19} \text{ J}$$

又由 空位浓度:  $\frac{n_1}{N_1} = e^{\frac{-U_1}{k_B T}}$

$$T = 1000 \text{ K 时} \quad \frac{n_1}{N_1} = e^{\frac{1.446 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} \times 1000}} = e^{-10.5} \approx 2.75 \times 10^{-5}$$

$$T = 700 \text{ K 时} \quad \frac{n_1}{N_1} = 3.06 \times 10^{-7}$$

(2)  $T = 1300 \text{ K 时}$ , 空位浓度  $\frac{n_1}{N_1} = 3.11 \times 10^{-4}$   $E_2 = 4 \text{ eV}$   $N_2$  间隙数

$$\text{填隙原子浓度: } \frac{n_2}{N_2} = e^{\frac{-U_2}{k_B T}} = e^{\frac{-4 \times 1.6 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} \times 1300}} \approx 3.21 \times 10^{-16}$$

4. 求体心立方、面心立方 六角密集三种晶体的伯格矢量的浓度和方向。

解: 伯格矢量又称滑移矢量  $\vec{b}$ , 其模为滑移方向的平衡原子间距, 方向为滑移方向。

$$\text{由教材 P117 f.c.c 的滑移方向为 } \langle 110 \rangle \quad \vec{b} = \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{j})$$

$$\text{b.c.c 的滑移方向为 } \langle 111 \rangle \quad \vec{b} = \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

5. 已知余误差函数  $\text{erf}(Z)$  在  $Z$  很小时, ( $Z < 0.5$ ) 可以近似地写为  $\text{erf}(Z)$ , 现将一硅片置于  $1300^\circ \text{C}$  的铝蒸汽中, 使铝扩散进入硅片。如果要求硅片距表面的  $0.01 \text{ cm}$  深处的浓度是表面浓度的 35%, 问扩散需多长的时间? 铝在硅中的扩散系数由题图 4-1 给出。

解: 由式(4-34)  $C = C_0 [1 - \text{erf}(z)]$  由题意  $0.35 = \frac{C}{C_0} = 1 - \frac{0.01}{2\sqrt{Dt}}$

$$\sqrt{Dt} = \frac{10^{-2}}{2 \times 0.65} = 7.7 \times 10^{-3} \quad Dt = 0.59 \times 10^{-4}$$

$$\text{由图可查得, } T = 1300^\circ \text{C} = 1573 \text{ K 时 } \ln D \approx -10 (\text{cm}^2/\text{s}) \quad D \approx 0.45 \times 10^{-4}$$

$$\therefore t = \frac{0.59 \times 10^{-4}}{0.45 \times 10^{-4}} \approx 1.3$$

## 第五章 金属自由电子论

1. 电子在每边长为  $L$  的方盒子中运动，试用索末菲量子自由电子模型和周期性边界条件求出它的最低的四个能级的所有波函数，绘出这四个能级的能量和简并度（每个能级所具有的电子态总数称为这个能级的简并度）。

解：由教材（5-18）式 电子能量

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

不考虑  $n_x = n_y = n_z = 0$  的情况，则最小能量分别对应于：

$(n_x, n_y, n_z)$  为  $(1,0,0)$   $(0,1,0)$   $(0,0,1)$  简并度：3

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2$$

$(1,1,0)$   $(1,0,1)$   $(0,1,1)$  简并度：3

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 \times 2$$

$(1,1,1)$  简并度：1

$$E_3 = \frac{\hbar^2}{3m} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 \times 3$$

$(2,0,0)$ ,  $(0,2,0)$ ,  $(0,0,2)$  简并度：3

$$E_4 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 \times 4$$

波函数分别为：

$$E=E_1 \quad \left\{ \begin{array}{l} \psi_{11} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\vec{K}_x \cdot \vec{r}} \quad \psi_{12} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\vec{K}_y \cdot \vec{r}} \\ \psi_{13} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\vec{K}_z \cdot \vec{r}} \end{array} \right.$$

$$E=E_2 \quad \left\{ \begin{array}{l} \psi_{21} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i(K_x \vec{i} + K_y \vec{j}) \cdot \vec{r}} \\ \psi_{22} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i(K_x \vec{j} + K_z \vec{k}) \cdot \vec{r}} \\ \psi_{23} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i(K_y \vec{j} + K_z \vec{k}) \cdot \vec{r}} \end{array} \right.$$

$$E=E_3$$

$$\psi_{31} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i(K_x \vec{i} + K_y \vec{j} + K_z \vec{k}) \cdot \vec{r}}$$

$$E=E_4$$

$$\psi_{41} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i(2K_x \vec{i}) \cdot \vec{r}}, \psi_{42} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i2K_y \vec{j} \cdot \vec{r}}, \psi_{43} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i2K_z \vec{k} \cdot \vec{r}}$$

2. 限制在边长为二维正方形势阱中的  $N$  个自由电子，电子能量为（与第六章 16 题相同）

试求：（1）能量从  $E$  到  $E+dE$  之间的状态数

（2） $T=0$  时费米能量的表示式

$$E(K_x, K_y) = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2)$$

解：（1）解 1：在二维情况下，每个  $\vec{K}$  点在倒二维空间占的面积为  $(2\pi/L)^2$ ， $\vec{K}$  点面密度为

$$\frac{L^2}{(2\pi)^2}$$

考虑电子自旋，在  $\vec{K}$  单位面积内电子态总数为（电子态密度）

$$2 \times \frac{L^2}{4\pi^2} = \frac{L^2}{2\pi^2}$$

对题示的电子，等能面为圆， $K$  空间半径为  $|k| = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  的园内电子态数目为

$$Z = \pi \times \frac{2mE}{\hbar^2} \times \frac{L^2}{2\pi^2} = \frac{mEL^2}{\hbar^2 \pi}$$

态密度

$$D = \frac{dZ}{dE} = \frac{mL^2}{\hbar^2 \pi}$$

$dE$  间隔的电子状态数  $dZ = g dE$

$$= \frac{mL^2}{\hbar^2 \pi} dE$$

解 2：

$$dZ = \frac{L^2}{2\pi^2} 2\pi K dK$$

$$dE = \frac{\hbar^2}{2m} 2K dK$$

$$K = \frac{\sqrt{2mE}}{\eta}, dK = \frac{\sqrt{m}}{\eta\sqrt{2E}} dE$$

$$\therefore dZ = \frac{L^2}{\pi} \frac{\sqrt{2mE}}{\eta^2} \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2E}} dE = \frac{L^2 m}{\pi \eta^2} dE$$

(2) T=0 时 电子把  $E < E_F^0$  之能级全部填满  $f=1$

$$\begin{aligned} N &= \int_0^{E_F^0} f D(E) dE = \int_0^{E_F^0} f dZ = \int_0^{E_F^0} dZ \\ &= \int_0^{E_F^0} \frac{L^2 m}{\pi \eta^2} dE = \frac{L^2 m}{\pi \eta^2} E_F^0 \end{aligned}$$

设电子密度  $n_e = (N/L^2)$

$$E_F^0 = \frac{N \pi \eta^2}{L^2 m} = \frac{n_e \pi \eta^2}{m}$$

3. 试证元胞是正方形的二维晶格第一布里渊区顶角上的自由电子动能比区边中点处大一倍，对于简立方晶体，相应的倍数是多少？

解：在索末菲模型中认为晶体中电子仍为自由电子，相互间势能=0。(而在近自由电子模型还要考虑周期势场的影响)。

自由电子能量

$$E = \frac{\eta^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2)$$

在 B.Z 顶角， $K_x = K_y = (\pi/a)$

$$E_1 = \frac{\eta^2}{2m} \times 2 \times \left( \frac{\pi}{a} \right)^2$$

在 B.Z 边中点的一点（其他点类似） $K_x = (\pi/a)$ ， $K_y = 0$

$$E_2 = \frac{\eta^2}{2m} \cdot \left( \frac{\pi}{a} \right)^2$$

$$\therefore (E_1/E_2) = 2$$

得证.

对 S.C 晶体中 自由电子能量

$$E = \frac{\eta^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$$

B.Z 区顶点  $K_x = K_y = K_z = (\pi/a)$

一个 B.Z 区面心中点  $K_x = (\pi/a)$   $K_y = K_z = 0$

$$\therefore \text{类似可得 } (E_1/E_2) = 3$$

4.试估算在温度 T 时，金属中被热激发到达高能态的电子数目所占全部电子数的比例，解：

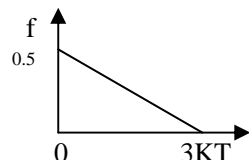
严格应为：

$$\frac{\int_{E_f}^{\infty} g(\omega) f(\omega \cdot T) dE}{N} = \frac{\int_{E_f}^{\infty} \frac{V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\eta^2}\right)^{3/2} \frac{dE}{e^{(E-E_f)/KT} + 1}}{N}$$

但积分运算困难，作为估算不妨使用下方法：可算出当  $E-E_f=3KT$  时  $f(E,T)=0.05$

$E=E_f$  时  $f=0.5$  设  $E-E_f=3KT$  时  $f(E,T)=0$  设  $X=E-E_f$

如图直线方程：



$$f = -\frac{0.5}{3KT} X + 0.5 = -\frac{1}{6KT} X + 0.5$$

斜线下电子数

$$N' = \int_0^{3KT} f g dx$$

不妨把电子态密度设为正方二维格子的情况，（题 2：  $g = \frac{mL^2}{\eta^2\pi}$ ）

$$\begin{aligned} N' &= \int_0^{3KT} \left(-\frac{1}{6KT} x + 0.5\right) \cdot \frac{mL^2}{\eta^2\pi} dx \\ &= +\frac{mL^2}{\eta^2\pi} \cdot \left(\frac{-1}{6KT} \cdot \frac{1}{2} x^2 + 0.5x\right) \Big|_0^{3KT} \\ &= \frac{mL^2}{\eta^2\pi} \left(-\frac{3}{4} KT + 1.5KT\right) = \frac{3}{4} \frac{mL^2}{\eta^2\pi} KT \end{aligned}$$

$$\text{总电子 } N = \int_0^{E_f^0} g(E) f dE, f=1$$

$$= \int_0^{E_f^0} \frac{mL^2}{\eta^2\pi} dE = \frac{mL^2}{\eta^2\pi} E_f^0$$

$$\frac{N'}{N} = \frac{3KT}{4E_f^0} \quad KT \equiv \frac{4.14}{1.0} \times 10^{-2} \text{ eV}$$

设  $T=300K$

$$\text{一般材料} \quad E_f^0 \sim \text{几个 eV} \quad \therefore \frac{N'}{N} \sim 10^{-2}$$

5. 证明费米能级  $E_f$  处的电阻态密度可以写为  $D(E) = 3N_0/2E_f$ , 其中  $N_0$  为价电子数。  
解:

$$\text{对索末菲自由电子} \quad D = \frac{dz}{dE} = \frac{4\pi V_c (2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2}$$

$$T=0 \text{ 时} \quad \text{电子均有费米球内} \quad f = \frac{1}{e^{(E-E_f)/KT} + 1} = 1$$

常温时, 费米能级略有下降, 电子仍基本均在费米球内

$$\text{电子数} \quad N_0 = \int_0^\infty f \cdot D \cdot dE = \int_0^{E_f} D dE = \int_0^{E_f} \frac{4\pi V_c (2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} dE$$

$$= \frac{4\pi V_c}{h^3} (2m)^{3/2} \frac{2}{3} E_f^{3/2}$$

$$N \text{ 式与 } D \text{ 式比较可知} \quad D(E) = 3N_0/2E_f$$

6. 已知银是单价金属, 费米面近似为球形, 银的密度  $\rho_m = 10.5 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  原子量  $A = 107.87$ , 电阻率在 295K 时为  $1.61 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ , 在 20K 时为  $0.0038 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ , 试计算

- (1) 费米能, 费米温度和费米速度;
- (2) 费米球的半径和费米球的最大截面积;
- (3) 室温下和绝对零度附近电子平均自由时间和平均自由程

解:  $1\text{m}^3$  的银的摩尔数 =  $(10.5 \times 10^6 / 107.87) = 97.3 \times 3 \text{ mol}$

其中原子数为摩尔数  $\times N_0 = 97.3 \times 6.02 \times 10^{26} = 5.86 \times 10^{28}$

银为一价原子, 故价电子数亦为  $N: 5.86 \times 10^{28}$  个,

价电子密度  $n_e = (N/V) = 5.86 \times 10^{28} \text{ 个/m}^3$

(1) 费米能: 由式 (5-30)

$$E_F^0 = \frac{\eta^2}{2m} (3n_e \pi^2)^{2/3} \quad \eta = \frac{h}{2\pi} = 1.0545 \times 10^{-34}$$

$$\text{电子静止质量} \quad m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$E_F^0 = \frac{1.112 \times 10^{-68}}{2 \times 9.109 \times 10^{-31}} (3 \times 5.86 \times 10^{28} \times 3.14^2)^{2/3} = 8.8 \times 10^{-19} \text{ (J)}$$

单位换为 eV

费米速度:

$$\frac{1}{2} m v_F^2 = E_F^0$$

$$v_F^2 = E_F^0 \cdot \frac{2}{m} = \frac{8.8 \times 10^{-19} \times 2}{9.1 \times 10^{-31}} = 1.934 \times 10^{12}$$

$$v_F = 1.391 \times 10^6 \text{ (m/s)}$$

费米温度: (K)

$$T_F = \frac{E_F^0}{K_B} = \frac{8.8 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23}} = 6.38 \times 10^4$$

(2) 费米球半径  $K_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3} = (3 \times 3.14^2 \times 5.86 \times 10^{28})^{1/3} = 12.02 \times 10^9 \text{ (1/m)}$

另外:

$$K_F = \sqrt{\frac{2mE_F^0}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 8.8 \times 10^{-19}}{1.05^2 \times 10^{-68}}} = 1.2 \times 10^9 \left(\frac{1}{m}\right)$$

费米球最大截面积:

$$S_{\max} = \pi K_F^2 = \pi \cdot \frac{2mE_F^0}{\hbar^2} = 4.56 \times 10^{20} \left(\frac{1}{m^2}\right)$$

(3) 常温下电子平均自由时间  $\tau$ 、平均自由程  $L$

设  $T=295K$  由式 (5-56)  $\sigma = n_e e^2 \tau / m$

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{n_e e^2 \tau}$$

$$\tau = \frac{m}{n_e e^2 \rho} = \frac{9.1 \times 10^{-31}}{5.86 \times 1.0^{28} \times 1.6^2 \times 10^{-38} \times 1.61 \times 10^{-8}} = 3.77 \times 10^{14} \text{ (s)}$$

$$L = \tau \cdot v_F = 3.77 \times 10^{14} \times 1.39 \times 10^6 = 5.24 \times 10^{-8} \text{ (m)}$$

设低温  $T=20K$

$$\rho' = 0.0038 \times 10^{-8} \quad (\rho / \rho') = (1.61 / 0.0038) \approx 424$$

$$\tau' = 424 \times \tau = 424 \times 3.77 \times 10^{14} \text{ s} = 1.6 \times 10^{11} \text{ (m)}$$

$$L' = \tau' \cdot v_F = 1.6 \times 10^{11} \times 1.39 \times 10^6 = 2.22 \times 10^{-5} \text{ (m)}$$

7. 已知锂的密度为  $0.534 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , 德拜温度为  $344K$ , 试求

(1) 室温下电子比热

(2) 在什么温度下电子比热和晶格比热有相同值?

解: (1) 由教材 p146、表 5-1 已知 Li 的  $E_F=4.47\text{eV}$ , Li 的电子摩尔比热 (式 5-46)

$$C_{ve} = \frac{\pi^2}{2} Z N_0 K_B^2 \frac{T}{E_F^0}$$

$$Z=1 \quad E_F^0 \approx E_F \quad \text{设 } T=300K \quad \text{原子量}=6.95$$

单位质量电子比热

$$C'_{ve} = \frac{C_{ve}}{6.95} = \frac{1}{6.95} \cdot \frac{3.14^2}{2} \times 6.02 \times 10^{23} \times 1.38^2 10^{-46} \times \frac{300}{4.74 \times 1.60 \times 10^{-19}} = 0.224 / 6.95 \approx 0.0322 \text{ (J/g)}$$

(2) 由式 (5-45) (5-46) 当  $C_{v1} = C_{ve}$   $\theta_D = 344K$

$$T^2 = \frac{5\theta_D^3}{24\pi^2 E_F^0} = \frac{5 \times 344^3 \times 1.38 \times 10^{-23}}{24 \times 3.14^2 \times 4.74 \times 1.60 \times 10^{-19}} = 15.632$$

$$\frac{12}{5} \pi^4 N_0 K_B \frac{T^3}{\theta_D^3} = \frac{\pi^2}{2} z N_0 K_B^2 \frac{T}{E_F^0}$$

$$T = 4K$$

8. 在低温下金属钾的摩尔比热的实验结果可写为

$$C_v = 2.08T + 2.57T^3 \quad \text{mJ/mol} \cdot K$$

若有一个摩尔钾有  $N_v = 6 \times 10^{23}$  个电子, 试求钾的费米温度和德拜温度  $\theta_D$

解: 由式(5-49). 低温时电子比热  $C_v = C_{ve} + C_{vL} = \gamma T + bT^3$

与题给  $C_v$  式比较可知

$$\gamma = 2.08 \times 10^{-3} \quad b = 2.57 \times 10^{-3} \quad \text{费米温度 } K_B T_F = E_F^0 \quad \text{并用式(5-47)可得:}$$

$$10^{-3} \times 2.08 = \frac{\pi^2 z N_0}{2T_F} K_B$$

$$\text{钾: } z = 1$$

$$T_F = \frac{\pi^2 N_0 K_B}{2 \times 2.08 \times 10^{-3}} = \frac{\pi^2 R}{2 \times 2.08 \times 10^{-3}} = \frac{3.14^2 \times 8.31}{2 \times 2.08 \times 10^{-3}} \approx 20000K$$

又: 由式(5-45):

$$\frac{12}{5} \pi^4 N_0 K_B \left(\frac{1}{\theta_D}\right)^3 = 2.57 \times 10^{-3}$$

$$\theta_D^3 = \frac{12}{5} \pi^4 R \cdot \frac{10^3}{2.57} = 756 \times 10^3$$

$$\therefore \theta_D \approx 91K \quad (\text{与 P94 表示 3-2 数据一致})$$

9. 试用里查逊公式证明: 两种金属的接触电势差  $V_1 - V_2 = 1/e (\Phi_I - \Phi_{II})$  其中  $\Phi_I$ 、 $\Phi_{II}$  分别为两种金属的功函数。

解: 设两块金属温度都是  $T$ , 当它们接触时, 每秒内从金属 I 的单位表面积所逸出的电子数为

$$I_I = 4\pi \frac{m(K_B T)^2}{\eta^3} e^{-\Phi_I / K_B T}$$

每秒从金属 II 单位面积逸出的电子数为

$$I_{II} = 4\pi \frac{m(K_B T)^2}{\eta^2} e^{-\Phi_{II} / K_B T}$$

若  $\Phi_I < \Phi_{II}$ , 则从金属 I 逸出的电子数比金属 II 多, 于是二者接触后金属 I 带正电, 金属 II 带负电。  $V_I > 0 \quad V_{II} < 0$  这样两块金属中的电子分别具有附加的静电势能为

$$-eV_I < 0 \quad -eV_{II} > 0$$

它们发射的电子数分别变成

$$I_I^1 = 4\pi \frac{m(K_B T)^2}{\eta^3} e^{-(\Phi_I + eV_I) / K_B T}$$

$$I_{II}^1 = 4\pi \frac{m(K_B T)^2}{\eta^3} e^{-(\Phi_{II} + eV_{II}) / K_B T}$$

平衡时

$$I_I^1 = I_{II}^1$$



由此得  $\Phi_I + eV_I = \Phi_{II} + eV_{II}$

所以接触电势差  $V_I - V_{II} = (1/e)(\Phi_{II} - \Phi_I)$  (注意  $V_{II} < 0$ )

## 固体能带习题

12. 在近邻近似下，按紧束缚近似，针对简立方晶体 S 能带

- (1) . 计算  $E_s \sim \vec{k}$  关系；
- (2) . 求能带宽度；
- (3) . 讨论在第一 B·Z 中心附近等能面的形状。

注： $\cos X = 1 - X^2/(2!) + X^4/(4!) - \dots$

解：(1) . 对简立方，最近邻原子处于  $\vec{R}_n = \pm a \vec{i}, \pm a \vec{j}, \pm a \vec{k}$

$$E_s = E_s^{at} - A - B \left[ e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a} \right]$$

$$= E_s^{at} - A - 2B (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

$$(2) . \text{当 } K_x = K_y = K_z = 0 \text{ 时} \quad E_{s\min} = E_s^{at} - A - 6B$$

$$\text{当 } K_x = K_y = K_z = \pi / a \text{ 时} \quad E_{s\max} = E_s^{at} - A + 6B$$

$$\text{能带宽度} = E_{\max} - E_{\min} = 12B$$

(3) 当  $K_x, K_y, K_z$  均趋于零时

$$E_s(\vec{k}) \approx E_s^{at} - A - 2B \left( 1 - \frac{K_x^2 a^2}{2} + 1 - \frac{K_y^2 a^2}{2} + 1 - \frac{K_z^2 a^2}{2} \right)$$

$$= E_s^{at} - A - 2B \left[ 3 - \frac{a^2}{2} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) \right] \quad \text{—— 球形}$$

13. 在近邻近似下，用紧束缚近似导出体心立方晶体 S 能带的  $E_s(\vec{k})$ ，试画出沿  $K_x$  方向 ( $K_y = K_z = 0$ ) 的散射关系曲线，并计算能带宽度。

解：选体心原子为参考点，最近邻原子的位置  $\vec{R}_n = \pm \frac{a}{2} \vec{i} \pm \frac{a}{2} \vec{j} \pm \frac{a}{2} \vec{k}$  (共八个)

$$\text{则} \quad E_s(\vec{k}) = E_s^{at} - A - B \left[ e^{\frac{ia}{2}(k_x+k_y+k_z)} + e^{\frac{ia}{2}(k_x+k_y-k_z)} + e^{\frac{ia}{2}(k_x-k_y+k_z)} + e^{\frac{ia}{2}(-k_x+k_y+k_z)} \right. \\ \left. + e^{\frac{ia}{2}(k_x-k_y-k_z)} + e^{\frac{ia}{2}(-k_x+k_y-k_z)} + e^{\frac{ia}{2}(-k_x-k_y+k_z)} + e^{\frac{ia}{2}(-k_x-k_y-k_z)} \right] = E_s^{at} - A - 2B \times$$

$$\left[ e^{\frac{ia}{2}(k_x+k_y)} \cos \frac{a}{2} kz + e^{\frac{ia}{2}(k_x-k_z)} \cos \frac{a}{2} kz + e^{\frac{ia}{2}(-k_x+k_y)} \cos \frac{a}{2} kz + e^{\frac{ia}{2}(-k_x-k_y)} \cos \frac{a}{2} kz \right]$$

$$= E_s^{at} - A - 2B \times 2 \left[ e^{\frac{ia}{2}k_x} \cos \frac{a}{2} ky + e^{-\frac{ia}{2}k_x} \cos \frac{a}{2} ky \right] \cos \frac{a}{2} kz$$

$$= E_s^{at} - A - 4B \times 2 \left( \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right)$$

$$= E_s^{at} - A - 8B \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}$$

$$\text{当 } K_y = K_z = 0 \text{ 时} \quad E_s(k_x) = E_s^{at} - A - 8B \cos \frac{k_x a}{2}$$

$$\text{同时 } K_x=0 \text{ 时 } E_{\min}=E_s^{at}-A-8B$$

$$\text{当 } K_x=K_y=K_z=2\pi/a \text{ 时 } E_{\max}=E_s^{at}-A+8B$$

$$\text{能带宽度}=E_{\max}-E_{\min}=16B$$

14. 利用一维 Bloch 电子模型证明：在布里渊区边界上，电子的能量取极值。

解：由教材式 (6-76)、(6-77)

$$E_+=T_h+|V_h|+T_h(2T_h/|V_h|+1)\Delta^2$$

$$E_-=T_h-|V_h|-T_h(2T_h/|V_h|-1)\Delta^2$$

$$\frac{\partial E_+}{\partial \Delta}=2T_h(2T_h/|V_h|+1)\Delta=0 \text{ 处 } \Delta=0$$

$$E_+=T_h+|V_h|$$

$$\frac{\partial E_-}{\partial \Delta}=2T_h(2T_h/|V_h|-1)\Delta=0 \text{ 处 } \Delta=0$$

$$E_-=T_h-|V_h|$$

15. 利用布洛赫定理， $\Psi_K(x+n\alpha)=\Psi_K(x)e^{ikna}$  的形式，针对一维周期势场中的电子波函数。

$$(1) \Psi_K(x)=\sin \frac{\pi}{a} x$$

$$(2) \Psi_K(x)=i\cos \frac{\pi}{a} x$$

$$(3) \Psi_K(x)=\sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x-la) \quad (f \text{ 为某一确定函数})$$

求电子在这些状态的波矢  $K$  ( $a$  为晶格常数)

$$\begin{aligned} \text{解：} (1) \Psi_K(x) &= \sin \frac{\pi}{a} x & \Psi_K(x+na) &= \sin \left[ \frac{\pi}{a} (x+na) \right] = \sin \left( \frac{\pi}{a} x + n\pi \right) \\ & & &= (-1)^n \sin \left( \frac{\pi}{a} x \right) = (-1)^n \Psi_K(x) \end{aligned}$$

$$\therefore e^{ikna} = (-1)^n = e^{i\pi(n+2m)} \quad (m \text{ 也为整数}) \quad kna = \pi(n+2m) \text{ 所以 } K = \frac{\pi}{a} \left( 1 + \frac{2m}{n} \right)$$

$$(2) \Psi_K(x) = i\cos \left[ \frac{\pi}{a} x \right]$$

$$\begin{aligned} \Psi_K(x+na) &= i\cos \left[ \frac{\pi}{a} (x+na) \right] \\ &= i\cos \left( \frac{\pi}{a} x + 8n\pi \right) = \Psi_K(x) \end{aligned}$$

$$\therefore e^{ikna} = 1 \quad kna = 2\pi m \quad k = \frac{2\pi m}{na}$$

$$(3) \Psi_K(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x-la)$$

$$\Psi_K(x+na) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x+na-la) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f[x-(l-n)a]$$

设  $l-n=m$

$$\Psi_K(x+na) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f(x-ma) = \Psi_K(x) \text{ 所以 } e^{ikna} = 1 \quad lna = 2N\pi \quad N \text{ 也为整数和零}$$

$$\therefore K = \frac{2N\pi}{na}$$

17. 已知一维晶体的电子能带可写成  $E(k) = \frac{\eta^2}{ma^2} \left( \frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

- 其中  $a$  为晶格常数, 求 (1) 能带宽度;  
 (2) 电子在波矢  $K$  状态的速度;  
 (3) 带顶和带底的电子有效质量。

$$\begin{aligned} \text{解: (1)} \quad E(k) &= \frac{\eta^2}{ma^2} \left( \frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right) \\ &= \frac{\eta^2}{ma^2} \left[ \frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} (2\cos^2 ka - 1) \right] \\ &= \frac{\eta^2}{4ma} [(\cos ka - 2)^2 - 1] \end{aligned}$$

$$\text{当 } ka = (2n+1)\pi \text{ 时, } n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$E(k)_{\max} = \frac{2\eta^2}{ma^2}$$

$$\text{当 } ka = 2n\pi \text{ 时 } E(k)_{\min} = 0$$

$$\text{所以能带宽度} = E_{\max} - E_{\min} = \frac{2\eta^2}{ma^2}$$

$$(2) \quad \vec{v}(\vec{K}) = \frac{1}{\eta} \nabla E(\vec{K}) = \frac{\partial E}{\partial K} = \left( \frac{\eta}{ma} \right) [\sin ka - (1/4) \sin 2ka]$$

(3)

$$m^* = \frac{\eta^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial K^2}}$$

$$= m (\cos ka - 1/2 \cos 2ka)^{-1}$$

$$\text{当 } k=0 \text{ 时为带底, } m^* = 2m;$$

$$\text{当 } k = \pi/a \text{ 时为带顶, } m^* = -2m/3$$

18. 证明面心立方晶体 S 电子能带  $E(\vec{K})$  函数沿着布里渊区几个主要对称方向上可化为:

(1) 沿  $\Gamma X$  ( $K_y = K_z = 0, K_x = 2\pi\delta/a, 0 \leq \delta \leq 1$ )

$$E = E_s^a - A - 4B(1 + 2\cos\delta\pi)$$

(2) 沿  $\Gamma L$  ( $K_x = K_y = K_z = 2\pi\delta/a, 0 \leq \delta \leq 1/2$ )

$$E = E_s^a - A - 12B\cos^2\delta\pi$$

(3) 沿  $\Gamma K$  ( $K_z = 0, K_x = K_y = 2\pi\delta/a, 0 \leq \delta \leq 3/4$ )

$$E = E_s^a - A - 4B(\cos^2\delta\pi + 2\cos\delta\pi)$$

(4) 沿  $\Gamma W$  ( $K_z = 0, K_x = 2\pi\delta/a, K_y = \pi\delta/a, 0 \leq \delta \leq 1$ )

$$E = E_s^a - A - 4B(\cos\delta\pi \times \cos\delta\pi/2 - \cos\delta\pi - \cos\delta\pi/2)$$

解: 面心立方最近邻的原子数为 12, 根据禁束缚近似 S 带计算公式, (教材 P184)

$$E_s(\vec{K}) = E_s^a - A - 4B \left( \cos \frac{a}{2} K_x \cdot \cos \frac{a}{2} K_y + \cos \frac{a}{2} K_y \cdot \cos \frac{a}{2} K_z + \cos \frac{a}{2} K_z \cdot \cos \frac{a}{2} K_x \right)$$

把各方向的  $K_x$ 、 $K_y$ 、 $K_z$  值代入上式即可得到相应的答案, 具体计算略。

## 补充题

1. 据一维晶格中波矢取值为  $n \cdot 2\pi/L$ , 证明单位长度的晶体中电子态密度为

$$D(E) = \frac{2}{\pi} \frac{dk}{dE}$$

证: 一维 K 空间, K 点密度为  $\frac{L}{2\pi}$

因为 E(K) 是偶函数, dE 间隔对应正、负二个 dk, 所以在 dk 对应的能量间隔 dE 间, 第

n 个能带对应的电子状态数

$$dz = 4 \times \frac{L}{2\pi} dk = \frac{2L}{\pi} dk \quad \text{又有} \quad dz = D(E) dE$$

$$\therefore D(E) = \frac{2L}{\pi} \frac{dk}{dE}$$

$$\text{当 } L=1(\text{单位长度}) \text{ 时, } D(E) = \frac{2}{\pi} \frac{dk}{dE}$$

2. 索末菲自由电子模型, 证明在  $\vec{k}$  空间费米球半径为:  $K_f = (3\pi^2 n)^{1/3}$  其中 n 为电子浓度

证: 对自由电子  $E = \frac{\eta^2 k^2}{2m}$  在  $\vec{k}$  空间等能面为球面, 二等能面间体积  $\Delta v = 4\pi k^2 dk$

$$dk = \frac{\sqrt{m/2}}{\eta} \cdot \frac{1}{2} E^{-1/2} dE \quad \text{考虑到自旋, } \Delta v \text{ 内的状态数 } dE = \frac{2V_c}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

$$D = \frac{dz}{dE} = \frac{4\pi V_c (2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} \quad \text{对索末菲自由电子} \quad E_f = \frac{\eta^2 k_f^2}{2m}$$

$$T=0 \text{ 时} \quad \text{电子均在费米球内} \quad f = \frac{1}{e^{(E-E_f)/KT} + 1} = 1$$

常温时, 费米能级略有下降, 电子仍基本均在费米球内

$$\text{电子数} \quad N = \int_0^\infty f \cdot D \cdot dE = \int_0^{E_f} D dE = \int_0^{E_f} \frac{4\pi V_c (2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} dE$$

$$= \frac{4\pi V_c}{h^3} (2m)^{3/2} \frac{2}{3} E_f^{3/2} = \frac{4\pi V_c}{h^3} \cdot \frac{2}{3} \cdot (\eta k_f)^3 = \frac{V_c K_f^3}{3\pi^2}$$

$$\text{又电子浓度 } n = \frac{N}{V_c} \quad \text{所以 } K_f = \left(3\pi^2 \frac{N}{V_c}\right)^{1/3} = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

3. 据上题, 当电子浓度 n 增大时, 费米球膨胀。证明当电子浓度 n 与原子浓度  $n_a$  之比

$$\frac{n}{n_a} = 1.36 \text{ 时, 费米球与 fcc 第一布里渊区的边界接触。}$$

解: 由教材 p181 图 6-20, f.c.c 的第一 B、Z 为 14 面体, 14 面体表面离中心 T 点最近的点

为 L 点。坐标为  $\frac{2\pi}{a}(1/2, 1/2, 1/2)$  TL 距离为  $\frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{3}{4}} = \frac{\pi}{a}\sqrt{3} \approx 5.4/a$

由上题费米球半径为  $K_f = (3\pi^2 n)^{1/3}$

f.c.c 原子密度为  $n_a = \frac{4}{a^3}$  当  $n = 1.36n_a \approx \frac{1.36 \times 4}{a^3}$  时

$K_f = (3\pi^2 \times \frac{1.36 \times 4}{a^3})^{1/3} \approx 5.4/a$  所以费米球与 f.c.c 的第一 b.z 相切。

4. 绝对温度  $T \neq 0$  时, 求含 N 个电子的自由电子费米气系统的动能。

解:  $T=0$  时, N 个自由电子的总动能为  $U_0 = 2 \sum_{k \leq k_f} \frac{\eta^2 k^2}{2m}$

因子 2 是因为每一 K 态可容纳二个自旋相反的电子,  $K_f$  为费米波矢,

波矢空间 k 点 “密度”  $= \frac{V}{8\pi^3}$ , 体积 V 内电子的总动能

$$U_0 = \frac{2V}{8\pi^3} \int_{k \leq k_f} \frac{\eta^2 k^2}{2m} d\tau = \frac{\eta^2}{8\pi^3 m} \int_0^{k_f} 4\pi k^4 dk$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \frac{\eta^2 k_f^5}{10m} \quad \text{另一方面, 在费米球内所允许的电子总数为}$$

$$N = 2 \times \left( \frac{4}{3} \pi k_f^3 \right) \cdot \frac{V}{8\pi^3} = \frac{k_f^3 V}{3\pi^2} \quad \text{即 } K_f^3 V = 3\pi^2 N \quad \text{代入上式}$$

$$\text{得: } U_0 = \frac{3}{5} N \frac{\eta^2 k_f^2}{2m} = \frac{3}{5} N E_f \quad E_f: \text{费米能}$$

5. 一个晶格常数为 a 的二维正方晶格, 求:

(1) 用紧束缚近似求 S 能带表示式, 能带顶及能带底的位置及能带宽度;

(2) 带底电子和带顶空穴的有效质量;

(3) S 带电子的速度表示式。

解：（1）选某一原子为坐标原点，最近邻的原子有四个，位置为  $\vec{R}_n = \pm \frac{a}{2} \vec{i}, \pm \frac{a}{2} \vec{j}$

$$\text{由 } E_s = E_s^{at} - A - B \left[ e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} \right]$$

$$= E_s^{at} - A - 2B (\cos k_x a + \cos k_y a)$$

在第一 B.Z 区 带底位置：  $K_x = K_y = 0$ ， 带顶位置：  $K_x = \pm \pi / a$   $K_y = \pm \pi / a$

带宽：  $8B$

$$(2) m_{xx}^* = \frac{\eta^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial K_x^2}} = \eta^2 / (2a^2 B \cos K_x a)$$

$$m_{yy}^* = \frac{\eta^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial K_y^2}} = \eta^2 / (2a^2 B \cos K_y a) \quad m_{xy}^* = m_{yx}^* = 0$$

把带底位置  $K_x = K_y = 0$  代入 得：  $m_{xx}^* = m_{yy}^* = m^* = \eta^2 / (2a^2 B)$

把带顶位置：  $K_x = \pm \pi / a$ ，  $K_y = \pm \pi / a$  代入 得：  $m_{xx}^* = m_{yy}^* = m^* = -\eta^2 / (2a^2 B)$

带顶空穴有效质量  $m_h^* = -m^* = \eta^2 / (2a^2 B)$

$$(3) \rho = \frac{1}{\eta} \nabla_{\vec{k}} E_s(\vec{k}) = \frac{1}{\eta} * 2aB (\sin K_x a \vec{i} + \sin K_y a \vec{j})$$

6. Cu 的费米能  $E_f = 7.0 \text{ eV}$ ，试求电子的费米速度  $V_f$ 。在  $273 \text{ K}$  时，Cu 的电阻率为  $P = 1.56 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ ，试求电子的平均自由时间  $\tau$  和平均自由程  $\lambda$ 。

解：对金属处于费米面上的电子，其能量  $E_f = \frac{\eta^2 K^2}{2m}$

$$\text{其速度 } V_f = \frac{\eta K_f}{m} = \sqrt{\frac{2E_f}{m}}$$

$$\text{又因为 } K_f = \frac{m V_f}{\eta} = \frac{\sqrt{2mE_f}}{\eta}$$

由（4-61）式 又有  $K_f = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$

$$\text{比较以上二式可得价电子密度 } n_e = \frac{m^2 V_f^3}{3\pi^2 \eta^3}$$

$$\text{由（5-68）式 } \rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{n_e e^2 \tau (k_f)}$$

$$\text{所以 } \tau(k_f) = \frac{m}{n_e e^2 \rho} = \frac{3\pi^2 \eta^3}{e^2 \rho m^2 V_f^3}$$

在  $E_f$  附近, 由于电子受核作用 (晶格场作用) 较弱, 可设  $m=m$  则代入数据, 可得

$$V_f = 1.57 \times 10^6 \text{ 米/秒} \quad \tau_f = 2.68 \times 10^{-14} \text{ 秒} \quad \lambda = \tau_f V_f = 4.21 \times 10^{-8} \text{ 米}$$

7. 说明外电场  $\vec{\varepsilon}$  对费米分布函数  $f_0(E)$  的影响; 证明

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = - \left[ T \frac{d}{dt} \left( \frac{E_f}{T} \right) + \frac{E}{T} \right] \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (\text{略去 } E \text{ 与 } T \text{ 的关系})$$

解: 无外场时, 晶体为平衡态,  $E_f$  在晶体中处处相等, 为常数

$$f_0(\vec{K}, T) = \frac{1}{e^{[E(\vec{K}) - E_f]/KT} + 1}$$

当存在外场时 (外场不一定均匀),  $\dot{\vec{E}} = \frac{1}{\eta} \vec{F}_{\text{外}}, \vec{F}_{\text{外}}$  使  $E(\vec{K})$  变化,  $E_f$  也可以是  $\vec{r}$  的函数。

电子分布由平衡态变为非平衡态。

设  $E' = (E - E_f)/KT$ . 由  $f_0$  的表示式可得:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial T} &= \frac{\partial f_0}{\partial E'} \frac{\partial E'}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial E'} \cdot \frac{\partial E'}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \partial T \cdot \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{E - E_f}{KT} \right) \\ &= \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot T \left[ \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{E}{T} \right) - \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{E_f}{T} \right) \right] \quad \text{设 } \frac{\partial E}{\partial T} = 0 \\ &= - \left[ T \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{E_f}{T} \right) + \frac{E}{T} \right] \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad \text{the end.} \end{aligned}$$

8. 金属中传导电子的碰撞阻力可写成  $-\frac{\vec{p}}{\tau}$ , 其中  $\vec{p}$  是电子的动量, 试从运动方程出发求金

属在变电场  $\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}_0 \cos \omega t$  中的电导率。

解: 若把电子惯性质量  $m$  改为有效质量  $m^*$ ,  $\tau$  明确为费米面上的弛豫时间, 经典模型与半经典模型是一致的, 即可用经典模型的表示式。

$$\text{由 (5-45) 式} \quad m^* \dot{\vec{V}} = -e \vec{\varepsilon} - \frac{m^*}{\tau} \vec{V}_d \quad (1)$$



由 (5-46) 式  $\vec{V}_d = \vec{V} - \vec{V}_h$  若设  $V_d \gg V_h$  则  $\vec{V}_d \approx \vec{V}$  (2)

$m^* \vec{V} = \vec{P} = \eta \vec{K}$  又由 (5-13) . (5-18) 二式, 知  $m^* \dot{\vec{V}} = \eta \dot{\vec{K}}$  (3)

由(1).(2).(3)式可得运动方程 (为书写简单, 设为一维情况)

则  $\eta \frac{dk}{dt} = -\lambda \varepsilon - \frac{\eta k}{\tau}$

积分得  $Ke^{\int \frac{1}{\tau} dt} = -\frac{e}{\eta} \int \varepsilon e^{\int \frac{1}{\tau} dt} dt + C$

把  $\varepsilon = \varepsilon_0 \cos \omega t$  代入 得  $Ke^{\frac{t}{\tau}} = -\frac{\lambda \varepsilon_0}{\eta} \int e^{\frac{t}{\tau}} \cos \omega t dt$

$$= -\frac{\lambda \varepsilon_0}{\eta} \cdot \frac{\lambda^{\frac{t}{\tau}} (\omega \sin \omega t + \frac{1}{\tau} \cos \omega t)}{\frac{1}{\tau^2} + \omega^2 \tau^2}$$

所以  $K = -\frac{\lambda \varepsilon_0}{\eta} \cdot \frac{(\omega \tau^2 \sin \omega t + \tau \cos \omega t)}{1 + \omega^2 \tau^2}$

由  $m^* V = \eta K, V = \frac{\eta K}{m^*}$   $j = -enV = \sigma \varepsilon$

所以 电导率  $\sigma = -\frac{enV}{\varepsilon} = -\frac{en\eta K}{m^* \varepsilon_0 \omega \varepsilon \omega t}$  把 k 表示式代入

整理得  $= \frac{e^2 n \tau (\omega \tau g \omega t + 1)}{m^* (1 + \tau^2 \omega^2)}$  当  $\omega \rightarrow 0$  时  $\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m^*}$  与 (5-68) 式一致。