

2. 什么是声子？声子与光子有哪些共同特点？

声子是晶格振动的能量量子（或答晶格振动的元激发、描述量子化晶格振动的准粒子等答案都正确）。声子与光子的共同特点：1）都是玻色子；2）都具有动量和能量；3）都是准粒子；4）都可以与电子相互作用；5）其他合理答案。

3. 为什么晶体中电子的能量会形成不连续的能带？

简单地讲，由于晶体中周期势场的作用，电子能量在布里渊区边界断开形成不连续的能带。（回答至此即可）

具体地说，在近自由电子近似条件下，由非简并微扰论得到的电子能量在布里渊区边界发散，其原因在布里渊区边界附近存在两个以上能量相近的状态，故应使用简并微扰论。在简并微扰论中，这些能量相近的态的进行相互作用后，使得原本能量高的状态能量更高，原本能量低的状态能量更低，导致了能量的不连续。

3.6 求出一维单原子链的频率分布函数 $g(\omega)$

解答：

一维单原子链的色散关系为：

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \left| \sin \frac{1}{2}aq \right| = \omega_m \left| \sin \frac{1}{2}aq \right|$$

其中 ω_m 为最大振动频率。

对上式微分可得：

$$d\omega = \frac{a}{2} \omega_m \left| \cos \frac{1}{2}aq \right| dq = \frac{a}{2} \sqrt{\omega_m^2 - \omega^2} dq$$

一维下，波矢 q 的分布密度为 $Na/2\pi$ ，在线元 dq 中的振动模式数目为：

$$dn = 2 \times \frac{Na}{2\pi} dq = 2 \times \frac{Na}{2\pi} \frac{dq}{d\omega} d\omega$$

注意，每一个 ω 对应正负两个 q ，故乘以 2

则振动模式密度为：

$$g(\omega) = \frac{dn}{d\omega} = \frac{2N}{\pi \sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}$$

4.1、根据 $k = \pm \frac{\pi}{a}$ 状态简并微扰结果，求出与 E_- 及 E_+ 相应的波函数 ψ_- 及 ψ_+ ，并说明它们的特性。说明它们都代表驻波，并比较两个电子云分布 $|\psi|^2$ 说明能隙的来源(假设 $V_n = V_n^*$)。

<解> 令 $k = +\frac{\pi}{a}$, $k' = -\frac{\pi}{a}$, 简并微扰波函数为 $\psi = A\psi_k^0(x) + B\psi_{k'}^0(x)$

$$\begin{cases} [E^0(k) - E]A + V_n^* B = 0 \\ V_n A + [E^0(k') - E]B = 0 \end{cases} \quad \text{取 } E = E_+$$

带入上式，其中 $E_+ = E^0(k) + |V_n|$

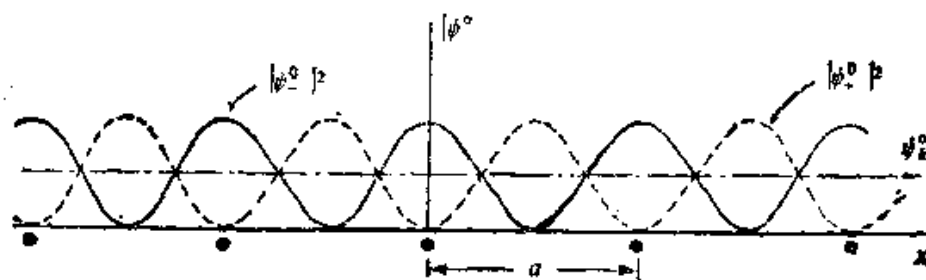
$V(x) < 0, V_n < 0$, 从上式得到 $B = -A$, 于是

$$\psi_+ = A[\psi_k^0(x) - \psi_{k'}^0(x)] = \frac{A}{\sqrt{L}} \left[e^{i\frac{n\pi}{a}x} - e^{-i\frac{n\pi}{a}x} \right] = \frac{2A}{\sqrt{L}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

取 $E = E_-$, $E_- = E^0(k) - |V_n|$ $|V_n|A = -V_n B$, 得到 $A = B$

$$\psi_- = A[\psi_k^0(x) + \psi_{k'}^0(x)] = \frac{A}{\sqrt{L}} \left[e^{i\frac{n\pi}{a}x} + e^{-i\frac{n\pi}{a}x} \right] = \frac{2A}{\sqrt{L}} \cos \frac{n\pi}{a} x$$

由教材可知， Ψ_+ 及 Ψ_- 均为驻波。在驻波状态下，电子的平均速度 $v(k)$ 为零。产生驻波因为电子波矢 $k = \frac{n\pi}{a}$ 时，电子波的波长 $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2a}{n}$ ，恰好满足布拉格发射条件，这时电子波发生全反射，并与反射波形成驻波由于两驻波电子分布不同，所以对应不同代入能量。



例 2 图 ψ_+ 及 ψ_- 的电子云分布

4.2、写出一维近自由电子近似，第 n 个能带($n=1, 2, 3$)中，简约波数 $k = \frac{\pi}{2a}$ 的 0 级波函数。

<解> $\psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\tilde{k}x} e^{i\frac{2\pi}{a}mx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\pi}{2a}x} \cdot e^{i\frac{2\pi}{a}mx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi}{a}(m+\frac{1}{4})x}$

第一能带: $m \cdot \frac{\pi}{2a} = 0, m = 0, \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{\pi}{2a} x}$

第二能带: $b = b'$ 则 $b' \rightarrow b, m \cdot \frac{2\pi}{a} = -\frac{2\pi}{a}$, 即 $m = -1, (e^{i \frac{2\pi}{a} x} = e^{i \frac{\pi}{2a} x}) \therefore \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{3\pi}{2a} x}$

第三能带: $c' \rightarrow c, m \cdot \frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}$, 即 $m = 1, \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{\pi}{2a} x} \cdot e^{i \frac{2\pi}{a} x} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{5\pi}{2a} x}$