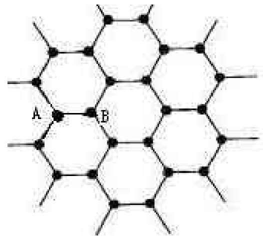
第一章　晶体的结构及其对称性

1.1 石墨层中的碳原子排列成如图所示的六角网状结构，试问它是简单还是复式格子。为什么？作出这一结构所对应的两维点阵和初基元胞。

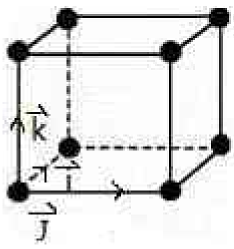


解：石墨层中原子排成的六角网状结构是复式格子。因为如图点 A 和点 B 的格点在晶格结构中所处的地位不同，并不完全等价，平移 A→B, 平移后晶格结构不能完全复原所以是复式格子。

1.2 在正交直角坐标系中，若矢量 $\vec{R}_l = l_1\vec{i} + l_2\vec{j} + l_3\vec{k}$，$\vec{i}$，$\vec{j}$，$\vec{k}$ 为单位向量。$l_i(i=1,2,3)$ 为整数。问下列情况属于什么点阵？

（a）当 $\vec{l}_i$ 为全奇或全偶时；

（b）当 $\vec{l}_i$ 之和为偶数时。



解：

$$\begin{aligned}\vec{R}_l &= l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3 \\ &= l_1\vec{i} + l_2\vec{j} + l_3 k\end{aligned} \qquad (l_1, l_2, l_3 = 0, \pm1, \pm2 \ldots)$$

当 l 为全奇或全偶时为面心立方结构点阵，当 $l_1 + l_2 + l_3$ 之和为偶数时是面心立方结构

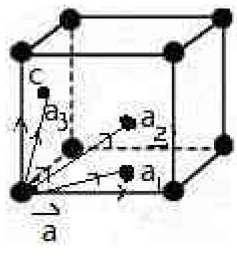
1.3　在上题中若 $l_1 + l_2 + l_3 =$ 奇数位上有负离子，$l_1 + l_2 + l_3 =$ 偶数位上有正离子，问这一离子晶体属于什么结构？

解：是离子晶体，属于氯化钠结构。

1.4　（a）分别证明，面心立方（fcc）和体心立方（bcc）点阵的惯用初基元胞三基矢间夹角相等，对 fcc 为 60°，对 bcc 为 $109^\circ 27'$

（b）在金刚石结构中，作任意原子与其四个最近邻原子的连线。证明任意两条线之间夹角 θ 均为

$a \quad c \quad r\left(-\frac{1}{3}\right)c= \quad s$。　$a \quad c \quad r\left(-\frac{1}{3}\right)c= \quad s$。



解:（1）对于面心立方

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(\vec{j} + \vec{k}\right) \qquad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{k}\right) \qquad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j}\right)$$

$$\left|\vec{a}_1\right| = \left|\vec{a}_2\right| = \left|\vec{a}_3\right| = \frac{\sqrt{2}}{2}a$$

$$COS\left(\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2\right) = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2}{|a_1||a_2|} = \frac{1}{2} = 60^{\circ}$$

$$COS\left(\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3\right) = \frac{\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3}{|a_2||a_3|} = \frac{1}{2} = 60^{\circ}$$

$$COS\left(\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_3\right) = 60^{\circ}$$

（2）对于体心立方

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}\right) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}\right) \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right)$$

$$\left|\vec{a}_1\right| = \left|\vec{a}_2\right| = \left|\vec{a}_3\right| = \frac{\sqrt{3}}{2}a$$

$$COS\left(\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2\right) = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2}{|a_1||a_2|} = -\frac{1}{3} = 129^{\circ}\angle /$$

$$COS\left(\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_3\right) = -\frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_3}{|a_1||a_3|} = \frac{1}{3} = 129^{\circ}\angle /$$

$$COS\left(\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3\right) = 129^{\circ}\angle /$$

（3）对于金刚石晶胞

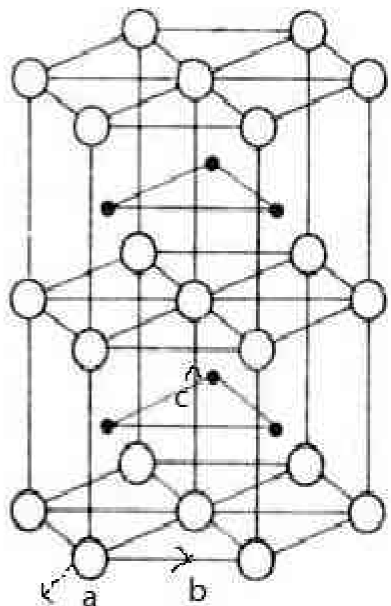
$$\vec{\eta}_1 = \frac{\sqrt{3}}{4}a\left(\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}\right) \quad \vec{\eta}_2 = \frac{\sqrt{3}}{4}a\left(\vec{i}-\vec{j}-\vec{k}\right)$$

$$COS\left(\vec{\eta}_1 \cdot \vec{\eta}_2\right) = \frac{\vec{\eta}_1 \cdot \vec{\eta}_2}{|\eta_1||\eta_2|} = \frac{-\frac{a^2}{4^2}}{\frac{9a^2}{4^2}} = -\frac{1}{3}$$

$$<\overrightarrow{\eta_1}, \overrightarrow{\eta_2}> = 109^{\circ}27'$$

1.5　证明：在六角晶系中密勒指数为（h,k,l）的晶面族间距为

$$d = \left[\frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)+\frac{l^2}{c^2}\right]^{-\frac{1}{2}}$$



证明： $\left|\vec{a}\right| = \left|\vec{b}\right| = a$

元胞基矢的体积

$$\vec{a} = ai$$

$$\vec{b} = -a\cos 60^{\circ}\vec{i} + \cos 30^{\circ}\vec{j}$$

$$= -\frac{1}{2}a\vec{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{j}$$

$$\vec{c} = c\vec{k}$$

$$\Omega = \begin{vmatrix} a & 0 & 0 \\ -\frac{a}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2 c$$

倒格子基矢 $\vec{a}^* = \frac{2\pi[\vec{b}\times\vec{c}]}{\Omega} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \frac{\sqrt{3}}{3}\vec{j})$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi[\vec{c}\times\vec{a}]}{\Omega} = \frac{4\pi\sqrt{3}}{3a}\vec{j}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi[\vec{a}\times\vec{b}]}{\Omega} = \frac{2\pi}{c}\vec{k}$$

倒格矢：

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

晶面间距 $d_{hkl} = \frac{2\pi}{\left|G_{hkl}\right|} = \frac{2\pi}{\left|h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*\right|^2}$

$$\left|h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*\right|^2 = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hk\left(\vec{a}^*\cdot\vec{b}^*\right) + 2kl\left(\vec{b}^*\cdot\vec{c}^*\right) + 2hl\left(\vec{a}^*\cdot\vec{c}^*\right)$$

$$\vec{a}^{*2} = \frac{4}{3}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \qquad \vec{b}^{*2} = \frac{4}{3}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \qquad \vec{c}^{*2} = \left(\frac{2\pi}{c}\right)^2$$

$$\vec{a}^*\cdot\vec{b}^* = \frac{2}{3}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \quad \vec{b}^*\cdot\vec{c}^* = 0 \quad \vec{a}^*\cdot\vec{c}^* = 0$$

$$d_{hkl} = \left[\frac{4}{3}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 h^2 + \frac{4}{3}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 k^2 + \frac{4}{3}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 l^2 + \frac{4}{3}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 hk\right]^{-\frac{1}{2}}$$

$$= \left[\frac{4}{3}\left(\frac{h^2 + k^2 + kl}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2}\right]^{-\frac{1}{2}}$$

1.6 证明：底心正交的倒点阵仍为底心正交的。

证明：简单六角点阵的第一布里渊区是一个六角正棱柱体

底心正交点阵的惯用晶胞如图：

$\vec{a}_1 = a\vec{x}$ $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}\vec{x} + \frac{b}{2}\vec{y}$ $\vec{a}_3 = c\vec{z}$ $m = 0, \theta = \frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$

初级晶胞体积： $V_c = \frac{abc}{2}$

倒易点阵的基矢：$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c}\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = 2\pi\left(\frac{}{a}\vec{x} - \frac{}{b}\vec{y}\right)$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c}\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{}{c}\mathrm{y}$$

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

这组基矢确定的面是正交底心点阵

1.7 证明：正点阵是其本身的倒易点阵的倒格子。

证明：倒易点阵初级元胞的体积: V_c 是初基元胞的体积

$$V_c = \vec{b}_1 \cdot \left(\vec{b}_2 \times \vec{b}_3\right)$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c}\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c}\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 \qquad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c}\vec{a}_1 \times \vec{a}_2$$

$V_c = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ 而

$$\vec{b}_2 \times \vec{b}_3 = \left(\frac{2\pi}{V_c}\right)\left(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\right) \times \left(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\right)$$

$$= \left(\frac{2\pi}{V_c}\right)^2 \left\{\left[\left(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\right) \cdot \vec{a}_2\right]\vec{a}_1 - \left[\left(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\right) \cdot \vec{a}_1\right]\vec{a}_2\right\}$$

$$\left(A \times B\right) \times \left(C \times D\right) = \left[\left(A \times B\right) \cdot D\right]C - \left[\left(A \times B\right) \cdot C\right]D$$

由于 $(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_1 = 0$ $b_1 \times b_2 = \left(\frac{2\pi}{V_c}\right)^2 \left[\left(a_3 \times a_1\right) \cdot a_2\right]\vec{a}_1$

而 $V_c = \left(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\right)\vec{a}_2$ $\therefore b_2 \times b_3 = \frac{\left(2\pi\right)^2}{V_c}a_1$

$$\vec{b}_1\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)=\frac{(2\pi)^2}{V_c}\vec{a}_1\cdot\vec{b}_1$$

$$=\frac{(2\pi)^3}{V_c{}^2}\vec{a}_1\left(\vec{a}_2\times\vec{a}_3\right)$$

$$=\frac{(2\pi)^3}{V_c}$$

或：$\vec{b}_1\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)=\dfrac{(2\pi)^3}{\vec{a}_1\left(\vec{a}_2\times\vec{a}_3\right)}$

现 在 证 明 ： $\vec{a}_1=2\pi\dfrac{\vec{b}_2\times\vec{b}_1}{\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)}$　　$\vec{a}_2=2\pi\dfrac{\vec{b}_3\times\vec{b}_1}{\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)}$

$\vec{a}_3=2\pi\dfrac{\vec{b}_1\times\vec{b}_2}{\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)}$

又 $\vec{b}_2\times\vec{b}_3=\dfrac{(2\pi)^2}{V_c}\vec{a}_1$

令

$$\vec{c}_1=2\pi\frac{\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_1\right)}{\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)}$$

$$=2\pi\left[\frac{(2\pi)^2}{V_c}\vec{a}_1\right]\Big/\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)$$

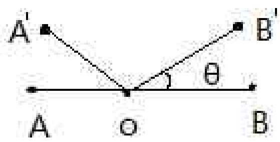
又：$\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)=\dfrac{(2\pi)^3}{V_c}$ 代入

$\vec{c}_1=\dfrac{(2\pi)^3}{V_c}\vec{a}_1\left[\dfrac{V_c}{(2\pi)^3}\right]=\vec{a}_1$ 同理　　$\vec{c}_2=2\pi\dfrac{\left(\vec{b}_3\times\vec{b}_1\right)}{\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)}=\vec{a}_2$

$$\vec{c}_3=2\pi\frac{\left(\vec{b}_1\times\vec{b}_2\right)}{\vec{b}_1\cdot\left(\vec{b}_2\times\vec{b}_3\right)}=\vec{a}_3$$

1.8　从二维平面点阵作图说明点阵不可能有七重旋转对称轴。

解：　$A'B'=2a\left|\cos\theta\right|=ma$　　$\left|\cos\theta\right|=\dfrac{m}{2}\le 1$



$m=0,\theta=\dfrac{\pi}{2},\dfrac{3\pi}{2}$　　$m=1,\theta=\dfrac{\pi}{3},\dfrac{2\pi}{3},\dfrac{4\pi}{3},\dfrac{5\pi}{3}$

$m=2,\theta=\pi,2\pi$

1.9　试解释为什么：

（a）四角（四方）晶系中没有底心四角和面心四角点阵。
（b）立方晶系中没有底心立方点阵。
（c）六角晶中只有简单六角点阵。
解：（a）因为四方晶系加底心，会失去 4 次轴。

（b）因为立方晶系加底心，将失去四条3 次轴。

（c） 六角晶系加底心会失去 6 次轴。

1.10 证明：在氯化钠型离子晶体中晶面族（h,k,l）的衍射强度为

$$I_{hkl}\begin{cases}\left|f_A+f_B\right|^2,\text{当（h, k, l）为偶数时}\\ \left|f_A-f_B\right|^2,\text{当（h, k, l）为奇数时}\\ 0\text{，其它情况}\end{cases}$$

其中 f_A 、 f_B 分别为正负离子的散射因子。如何用此结果说明 KCL 晶体中 h,k,l 均为奇数的衍射消失？

证明：Nacl 初基原胞中有 Na^+ 和 Cl^- 两种离子。

$$\vec{\mathrm{r}}_i : A\left(0,0,0\right)B\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$$ A、B 分别代表 Na^+ 和 Cl^- 。

因此几何结构因子：

$$F\left(h_1,h_2,h_3\right)=\sum f_i e^{-2i\pi\left(h_1x_{i1}+h_2x_{i2}+h_3x_{i3}\right)}$$

$$=f_A+f_Be^{2\frac{-i}{2}\pi\left(h_1+h_2+h_3\right)}$$

$$=\begin{cases}f_A+f_B,h_1+h_2+h_3\text{为偶}\\ f_A-f_B,h_1+h_2+h_3\text{为奇}\end{cases}$$

射强度： $I\propto\left|F\left(h_1h_2h_3\right)\right|^2$, 对于 $h_1+h_2+h_3$ 为奇数的衍射面 $f_A=f_B$ 则会消光。

1.11 试讨论金刚石结构晶体的消光法则。

解：金刚石结构中，金刚石单胞有 8 个碳原子，坐标为：

$$\left(0,0,0\right),\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right),\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right),\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right),\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right),\left(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right),\left(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right),\left(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right),\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right)$$

几何结构因子 $F_{hkl}=\sum f_je^{-2i\pi n\left(h_1x_{j1}+h_2x_{j2}+h_3x_{j3}\right)}$

$$F_{hkl}=f\left\{1+\exp\left[-i\pi n\left(h+k\right)\right]+\exp\left[-i\pi n\left(k+l\right)\right]+\exp\left[-i\pi n\left(l+k\right)\right]\right\}$$

$$+f\left\{\exp\left[-i\pi n\frac{1}{2}\left(h+k+l\right)\right]\right\}\cdot$$

$$\left\{\exp\left[-\frac{i\pi n}{2}\cdot2\left(h+k\right)\right]+\exp\left[-i\pi n\left(k+l\right)\right]+\exp\left[-i\pi\left(l+h\right)\right]+1\right\}$$

$$F_{hkl}=f\left\{1+\exp\left[-i\pi\frac{n}{2}\left(h+k+l\right)-i\sin\frac{n\pi}{2}\left(h+k+l\right)\right]\right\}\left\{1+\cos n\pi\left(h+k\right)+\cos n\pi\left(k+l\right)\right\}$$

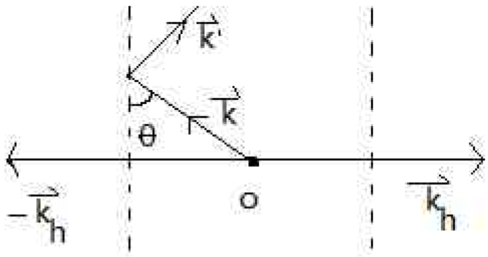
$$I_{hkl}\propto F_{hkl}^{2}=I_{hkl}^{f_{hkl}}\left\{\left[1+\cos\frac{n\pi}{2}\left(h+k+l\right)\right]^{2}+\sin^{2}\frac{n\pi}{2}\left(h+k+l\right)\right\}$$

衍射强度不为零：（1）nh nk nl 都为基数。

（2）nh nk nl 都为偶数（包括零），且$\frac{1}{2}\left(nh+nk+nl\right)$也为偶数。

如不满足以上条件，则这些面的衍射消失，例如金刚石不可能找到（3，2，1）或（2，2，1）的一级衍射斑，也不可能有（4，4，2）这样的二级衍射斑点。

1.12 证明：在倒易空间中，当$\vec{k}$落于一倒格矢$\vec{k}_h$垂直平分面上时，发生布拉格反射。



证明：当波矢满足$\left|\vec{k}+\vec{k}_h\right|^{-}=k^2$时有

$$\vec{k}_h\cdot\left(\vec{k}+\frac{\kappa_n}{2}\right)=0$$

$\therefore$令 $\vec{k}=\vec{k}+\vec{k}_h$

$\therefore \vec{K}'$刚好是$\vec{k}_h$中垂直面的反射波。

又$\because d_1=\frac{2\pi}{\left|\vec{k}_h\right|}$，由图知：$\frac{\left|\vec{k}_h\right|}{2}=k\sin\theta=\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta$

$\therefore 2d\sin\theta=m\lambda$ （其 中$\vec{k}_h=m\vec{k}_h$） $\vec{D}=\varepsilon\vec{E}$

1.13 试证明：具有四面体对称性的晶体，其介电常数为一标量介电常量：

$$\varepsilon_{\alpha\beta}=\varepsilon_0\delta_{\alpha\beta}$$

证明： 由$\vec{D}=\varepsilon\vec{E}$ $\varepsilon=\begin{pmatrix}\varepsilon_{11}&\varepsilon_{12}&\varepsilon_{13}\\\varepsilon_{21}&\varepsilon_{22}&\varepsilon_{23}\\\varepsilon_{31}&\varepsilon_{32}&\varepsilon_{33}\end{pmatrix}$

各物理量在新旧坐标中：$\vec{D}'=\varepsilon'\vec{E}'$ $p'=\overrightarrow{AD}$ $\vec{E}'=AE$

$\vec{D}=A^{-1}\varepsilon\overrightarrow{AE}=A^{+}\varepsilon\overrightarrow{AE}$（由于对称操作$\vec{D}'=\varepsilon\vec{E}'$）

$\therefore\varepsilon'=A^{-1}\varepsilon\mathrm{A}=A^{+}\varepsilon A$

A_x 是绕 X(a) 轴转动 90° 是一个对称的操作 $A_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$

A_y 是绕 Y(b) 轴转动 90° 也是一个对称操作 $A_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

将 A_x 代入 $\varepsilon' = A^{+}\varepsilon A \qquad \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ 0 & -\varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$

再将 A_x 和 ε 代入 $\varepsilon' = A^{+}\varepsilon A \qquad \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{11} \end{pmatrix}$

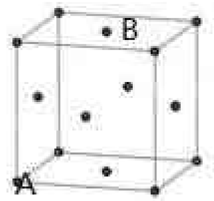
1.14　若 AB_3 的立方结构如图所示，设 A 原子的散射因子为 f_A，B 原子的散射因子为 f_B，

（a）求其几何结构因子 $F_{hkl} = ?$

（b）找出（h, k, l）晶面族的 X 光衍射强度分别在什么情况下有

$$I_{hkl} \infty \begin{cases} \left|F_A + 3f_B\right|^2 \\ \left|F_A - f_B\right|^2 \end{cases}$$

(c) 设　$f_A = f_B$，问衍射面指数中哪些反射消失？试举出五种最简单的。



解：AB_3 结构中，单胞中含有 3 个 B 原子，1 个 A 原子。

$$F_{hkl} = \sum f_j e^{-2\pi i\left(hx_{j1} + kx_{j2} + lx_{j3}\right)}$$

取　$A(0,0,0)\,B\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$

$$\therefore F_{hkl} = f_A + f_B\left(e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)}\right)$$

当 h+k 与 h+l，k+l 均为偶数时　$F_{hkl} = f_A + 3f_B$

当 h+k，h+l，k+l 其中两个为奇数，一个为偶数时　$F_{hkl} = f_A - f_B$

当 $f_A = f_B$ 时有　（0，0，1）　（0，1，0）　（1，0，0）　（0，1，1）

（1，1，0）（1，0，1） 衍射面指数的消光。

1.15 在某立方晶系的铜K_αX射线粉末相中，观察到的衍射角θ_i有下列关系：

$$\begin{aligned}&\sqrt{3}:\sqrt{4}:\sqrt{8}:\sqrt{11}:\sqrt{12}:\sqrt{16}:\sqrt{19}:\sqrt{20}\\&=\sin\theta_1:\sin\theta_2\ldots\sin\theta_8\\&=\sqrt{1^2+1^2+1^2}+\sqrt{2^2+0^2+0^2}+\sqrt{2^2+2^2+0^2}+\sqrt{1^2+1^2+3^2}\\&+\sqrt{2^2+2^2+2^2}+\sqrt{4^2+0^2+0^2}+\sqrt{3^2+3^2+1^2}+\sqrt{4^2+2^2+0^2}\end{aligned}$$

（a）试确定对应于这些衍射角的晶面的衍射面指数；
（b）问该立方晶体是简立方、面立方还是体心立方？

解：$d_{hkl}=\dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ 又 $2d_{hkl}\sin\theta=n\lambda$

$$\therefore\frac{\sin\theta}{\left[(nh)^2+(nk)^2+(nl)^2\right]}=\frac{\lambda}{2a}\qquad\therefore\sin\theta\propto\sqrt{(nh)^2+(nk)^2+(nl)^2}$$

$$\begin{aligned}&\sqrt{3}:\sqrt{4}:\sqrt{8}:\sqrt{11}:\sqrt{12}:\sqrt{16}:\sqrt{19}:\sqrt{20}\\&=\sin\theta_1:\sin\theta_2\ldots\sin\theta_8\\&=\sqrt{1^2+1^2+1^2}+\sqrt{2^2+0^2+0^2}+\sqrt{2^2+2^2+0^2}+\sqrt{1^2+1^2+3^2}\\&+\sqrt{2^2+2^2+2^2}+\sqrt{4^2+0^2+0^2}+\sqrt{3^2+3^2+1^2}+\sqrt{4^2+2^2+0^2}\end{aligned}$$

∴ h k l = (1,1,1) (2,0,0) (2,2,0)……
∴该立方晶体是面心立方.

第二章 晶体的结合

2.1 导出 NaCl 型离子晶体中排斥势指数的下列关系式：

$$n=1+\frac{4\pi\varepsilon_0\times18kR_0^4}{\alpha e^2}\quad\text{(SI 单位)}$$

其中 k 为体变模量，设已知 NaC 晶体的$k=2.4\times10^{10}N/m^2,R_0=0.281nm$，求 NaCl 的 n=?

解：NaCl 晶体排斥势指数的关系，设晶体有 N 个元胞。

则晶体的内能：$U=N(\dfrac{-\alpha e^2}{r}+\dfrac{6b}{r^n})=N[\dfrac{-A}{r}+\dfrac{B}{r^n}]$

其中：$A=\alpha e^2$，$B=6b^2$对于 NaCl 结构$r=2Nr^3$，（$2r^3$为元胞的体积）

$$\therefore\quad dr=6Nr^2dr$$

$$\left.\frac{du}{dV}\right|_{r_0}=\frac{du}{dr}\frac{dr}{dv}=\frac{1}{6Nr_0^{\ 2}}\frac{du}{dr}=\frac{N}{6Nr_0^{\ 2}}\left(\frac{A}{r_0^{\ 2}}-\frac{nB}{r_0^{\ n+1}}\right)=0$$

∴ 在 r_0 为平衡位置处：$\frac{B}{A}=-\frac{1}{n}r_0^{\ n-1}$

由 $k=r\left.\frac{d^2u}{dr^2}\right|_{r_0}=\frac{1}{18Nr_0}\left.\frac{d^2u}{dr^2}\right|_{r_0}=\frac{(n-1)\alpha e^2}{18r_0^4}$

∴ $n=\frac{18kr_0^{\ 4}}{\alpha e^2}+1$ （如取 SI） $n=\frac{4\pi\varepsilon_0\times 18kr_0^{\ 4}k}{\alpha e^2}+1$

对于 NaCl、CsCl、ZnS 结构 $a=1.747$、1.762、1.638

$k=2.4\times 10^{10}N/m^2$ $r_0=0.281nm$

∴可求 n

2.2 带±e 电荷的两种离子相间排成一维晶格，设 N 为元胞数，B/R_0^n为排斥势，R_0为正负离子间最短的平衡值。证明，当 N 有很大时有：

（a）马德隆常数 $\alpha=2\ln 2$ ；

（b）结合能 $U(R)=\frac{2Ne^2\ln 2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}\left(1-\frac{1}{n}\right)$；

（c）当压缩晶格时，$R\rightarrow R_0(1-\delta)$，且 $\delta\ll 1$，则需做功 $\frac{1}{2}C\delta^2$，其中

$$C=\frac{2(n-1)N\ln 2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}e^2$$

解：（a）一维原子链，正负离子的距离为 a，相距为 r_{ij} 的两个离子间的相互作用势能：

$u(r_{ij})=\mp\frac{q^2}{4\pi r_{ij}}+\frac{b}{r_{ij}^{\ n}}$ $r_{ij}=a_jR$ （R 为邻近间距总离子间的相互作用势能）

$$U=\frac{N}{2}\sum_{i,j}u(r_{ij})=-\frac{N}{2}\left[\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\sum_j{}'\left(\frac{\pm 1}{a_j}\right)-\frac{1}{R^n}\sum_j{}'\frac{b}{a_j^{\ n}}\right]$$

$u=\sum_j{}'\pm\frac{1}{a_j}$ 为离子晶格的马德隆常数

$$u=\sum\left(\frac{\pm 1}{a_j}\right)=2\left[\frac{1}{1}-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}-\frac{1}{4}+...\right]$$

$$\ln(1+x)=x-\frac{x^2}{2}+\frac{x^3}{3}-\frac{x^4}{4}+...$$

令 $x=1 \qquad \ln 2=1-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}-\frac{1}{4}+...$

$\therefore \quad u=2\ln 2$

(b) 利用平衡条件 $\left.\frac{du}{dR}\right|_{R_0}=0 \qquad \therefore\ b=\frac{Nq^2\ln 2R_0^{n-1}}{n}$

$$\therefore\ u(R)=-2Nq^2\ln 2\left(\frac{1}{R}-\frac{R_0^{\ n-1}}{nR^n}\right) \qquad u(R_0)=-\frac{2Nq^2\ln 2}{R_0}\left(1-\frac{1}{n}\right)$$

(c) $u_1(R)=u(R_0)+\left.\frac{du}{dR}\right|_{R_0}(R-R_0)+\frac{1}{2}\left.\frac{d^2u}{dR^2}\right|_{R=R_0}(R-R_0)^2+\cdots$

由于外力做的功等于晶体内能的增量，外力做功的主项

$$w=u(R)-u(R_0)=\frac{1}{2}\left.\frac{d^2u}{dR^2}\right|_{R_0}(R-R_0)^2$$

将 $R=R_0(1-\delta)$ 代入：$w=\frac{1}{2}[\ln 2\cdot(n-1)q^2]2NR_0\delta\cdot\delta$

晶体被压缩单位长度的过程中，外力做功的主项：

$$\frac{w}{2NR_0\delta}=\frac{1}{2}\left[\frac{(n-1)q^2\ln 2}{R_0^{\ 2}}\right]\delta=\frac{1}{2}c\delta$$

设 $\delta=\delta_e$ 时外力为 F_e，外力与晶体(格)的形变成正比.

$F=\alpha(2NR_0\delta)$，$F_e=\alpha(2NR_0\delta_e)$，$\alpha$ 为比例函数.

$$W_e=\int_0^{2NR_0\delta_e}Fdx=\int_0^{\delta_e}(\alpha 2NR_0\delta)2NR_0d\delta$$

$$=\alpha(2NR_0)^2\frac{1}{2}\delta_e^2=\frac{1}{\alpha}2NR_0\delta_eF$$

此即为离子链被压缩 $2NR_0\delta_e$ 的过程中外力做功。

$W_e=\frac{c}{2}\delta_e(2NR_0\delta_e)$ 所以压缩 $2NR_0\delta_e$ 时外力 $F_e=C\delta_e=\frac{q^2\ln[2(n-1)]\delta_e}{R_0^2}$

2.3 量子固体

在量子固体中，起主导作用的排斥能是原子的零点能，考虑晶态 He^4 的一

个粗略一维模型，即每个氦原子局限在一段长为L的线段上，每段内的基态波函数取为半波长为L的自由粒子波函数。

（a） 试求每个粒子的零点振动能；

（b）推导维持该线不发生膨胀所需力的表达式；

（c）在平衡时，动能所引致的膨胀倾向被范德瓦尔斯相互作用所平衡，非常粗略的给出最近邻间的范德瓦尔斯能为 $U(L)=-1.6L^{-6}10^{-60}erg$，其中L以cm表示，求L的平衡值。

解：(a)根据量子力学，限制在 L 线段内的自由He^4原子的波函数有

$\psi = Ae^{ikx}$形式

$k=\dfrac{2\pi}{\lambda}$ 又$L=\dfrac{\lambda}{2}$的波函数为基态波函数$k_0=\dfrac{2\pi}{2L}=\dfrac{\pi}{L}$，所以基态

波函数 $\psi_0 = Ae^{i\frac{\pi}{L}x}$ 每个原子的零点动能也就是基态平均动能.

$$\langle T\rangle = \frac{\int_0^L \psi_0^*\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_0\right)dx}{\int_0^L \psi_0^*\psi_0 d\tau} = \frac{\hbar^2}{8mL^2}$$

(b) 因零点动能会引起线段的膨胀，为了保持长度为L的线段结构，必须增加力

$$p=-\frac{d\langle T\rangle}{dL}=-\frac{d}{dL}\left(\frac{\hbar^2}{8mL^2}\right)=\frac{\hbar^2}{4mL^3}$$

有范德瓦尔斯相互作用时，体系总能量$U=\langle T\rangle+U(L)$

U（L）是范德瓦尔斯能：$U=1.6\times L^{-6}\times 10^{-60}erg$

（c）平衡时：$\left.\left(\dfrac{dU}{dL}\right)\right|_{L_0}=0=\dfrac{\hbar}{4mL_0^3}-1.6\times\dfrac{6}{L_0^7}\times 10^{-60}$

∴ $L_0^4 = 5.813\times 10^{-80}cm^4$ L_0的平衡值 $L_0 = 4.91A$

第三章 晶格动力学和晶体的热学性质

3.1 在同类原子组成的一位点阵中，若假设每个原子所受的作用力左右不同，其力常数如下图所示相间变化，且$\beta_1>\beta_2$. 试证明：在这样的系统中，格波仍存在着声频支和光频支，其格波频率为

$$\omega^2 = \frac{\beta_1+\beta_2}{M}\left\{1 \pm \left[1 - \frac{4\beta_1\beta_1\left(\sin^2\frac{ka}{2}\right)}{\left(\beta_1+\beta_2\right)^2}\right]^{\frac{1}{2}}\right\}$$

解：用V_s和r_s分别表示第 S 个初基原胞中两个原子相对平衡位置的位移.

$$\begin{cases} M\ddot{u}_s = -\beta_1\left(u_s - V_s\right) - \beta_2\left(u_s - V_{s-1}\right) \\ M\ddot{V}_s = -\beta_1\left(V_s - u_s\right) - \beta_2\left(V_s - u_{s+1}\right) \end{cases}$$

令 $u_s = ue^{i(ska-\omega t)}$ $\qquad V_s = Ve^{i(ska-\omega t)}$

$$\therefore \quad \begin{cases} \left[M\omega^2 - \left(\beta_1+\beta_2\right)\right]u + \left[\beta_1 + \beta_2 e^{-ika}\right]V = 0 \\ \left[\beta_1 + \beta_2 e^{-ika}\right]u + \left[M\omega^2 - \left(c_1 + c_2\right)\right]V = 0 \end{cases}$$

$$\therefore \begin{vmatrix} M\omega^2 - \left(\beta_1+\beta_2\right) & \beta_1 + \beta_2 e^{-ika} \\ \beta_1 + \beta_2 e^{-ika} & M\omega^2 - \left(\beta_1+\beta_2\right) \end{vmatrix} = 0$$

$$\left[M\omega^2 - \left(\beta_1+\beta_2\right)\right]^2 = \left(\beta_1 + \beta_2 e^{-ika}\right)^2$$

$$\omega^2 = \frac{\beta_1+\beta_2}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2\cos ka}$$

$$= \frac{\beta_1+\beta_2}{M}\left\{1 \pm \left[1 - \frac{4\beta_1\beta_2\sin^2\frac{ka}{2}}{\left(\beta_1+\beta_2\right)^2}\right]^{\frac{1}{2}}\right\}$$

3.2 具有两维立方点阵的某简单晶格，设原子的质量为 M，晶格常数为 a，最近邻原子间相互作用的恢复力常数为 c，假定原子垂直于点阵平面作横振动，试证明：此二维系统的格波色散关系为 $M\omega^2 = 2c\left(2 - \cos k_x a - \cos k_y a\right)$

解：只考虑最近邻作用第（l，m）个原子受四个原子的作用.

$(l+1, m): c\left(u_{l+1,m} - u_{l,m}\right)$ $\qquad (l-1, m): c\left(u_{l,m} - u_{l-1,m}\right)$

$(l, m+1): c\left(u_{l,m+1} - u_{l,m}\right)$ $\qquad (l, m-1): c\left(u_{l,m} - u_{l,m-1}\right)$

∴ 运动方程： $m\dfrac{d^2 u_{lm}}{dt^2} = c\left[\left(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{l,m}\right) + \left(u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{l,m}\right)\right]$

设 $u_{lm} = u_0 \exp\left[i\left(lk_x a + mk_y a - \omega t\right)\right]$

$$\therefore \begin{aligned}\omega^2 &= -c\left(e^{ik_x a}+e^{-ik_x a}+e^{ik_y a}+e^{-ik_y a}-4\right)\\ &= 2c\left(2-\cos k_x a-\cos k_y a\right)\end{aligned}$$

3.3　求：

（a）一维单原子点阵振动的声子谱密度$\rho(\omega)$，并作图；

（b）一维双原子点阵振动的声子谱密度$\rho(\omega)$，并作图.

解：一维单原子链：

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}\left|\sin\left(\frac{1}{2}qa\right)\right| \qquad \therefore \rho(\omega)=\frac{L}{2\pi}\sum_s 2/\left|d\omega\left(\vec{q}\right)/dq\right|$$

$S=1\cdots$　（有个 3n 色散关系）

一维单原子链

$S=1$

$$\therefore \rho(\omega)=\frac{L}{2\pi}\cdot 2\frac{1}{2\sqrt{\frac{\beta}{M}}\frac{1}{2}a\left|\cos\frac{1}{2}qa\right|}$$

$$=\frac{\mathrm{L}}{\pi}\sqrt{\frac{\beta}{M}}\frac{1}{a\left|\cos\frac{1}{2}qa\right|}$$

一维双原子链：　$$\omega_{\pm}^2=\beta\frac{m+M}{mM}\left\{1\pm\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2\frac{1}{2}qa\right]^{\frac{1}{2}}\right\}$$

$$\therefore \omega_{+}=\left\{\beta\frac{m+M}{mM}\left\{1+\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2\frac{1}{2}qa\right]^{\frac{1}{2}}\right\}\right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\therefore \omega_{-}=\sqrt{\beta\frac{m+M}{mM}}\left\{1-\left[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2\frac{1}{2}qa\right]^{\frac{1}{4}}\right\}$$

$$\therefore \rho(\omega)=\frac{\mathrm{L}}{2\pi}\cdot 2\left\{1/\frac{d\omega_+}{dq}+1/\frac{d\omega_-}{dq}\right\}$$

$$=\frac{L}{\pi}\sqrt{\frac{mM\beta}{m+M}}\{1/\{\frac{1}{4}\{1+[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2\frac{1}{2}qa]^{-\frac{3}{4}}\cdot\frac{-4mM}{(m+M)^2}\frac{1}{2}a\cdot 2\sin\frac{1}{2}qa\cos\frac{1}{2}qa\}$$

$$+1/\frac{1}{4}\{1-[1-\frac{4mM}{(m+M)^2}\sin^2\frac{1}{2}qa]^{-\frac{3}{4}}\frac{-4mM}{m+M}\cdot\frac{a}{2}\cdot 2\sin\frac{1}{2}qa\cos\frac{1}{2}qa\}$$

3.4　设某三维晶体光频声子的色散关系为$\omega(q)=\omega_0-Aq^2$，试证明，其声子谱密度为

$$\rho(\omega)=\begin{cases}\dfrac{V}{4\pi^2A^{\frac{3}{2}}}(\omega_0-\omega)^{\frac{1}{2}},\omega_{\min}<\omega<\omega_0\\ 0,\omega>\omega_0\\ 0,\omega<\omega_{\min}\end{cases}$$

式中$\omega_{\min}=\omega_0-\left(\frac{6\pi^2N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$A，N为晶体的原胞数.

解：$\rho(\omega)=\frac{V_c}{(2\pi)^3}\sum\int_{s_\alpha}\frac{ds}{|\nabla_q\omega_s|}$

第支α格波的模式密度$\dfrac{V_c}{2\pi^3\int_{s\alpha}\frac{ds}{|\nabla_q\omega|}}$其中$s\alpha$为第$\alpha$支格波的等频面.

又因为在q=0附近 $\omega(q)=\omega_0-Aq^2$

∴ 等频面是一个球面. 又$|\nabla_q\omega|=|-A2q|=2Aq$

$$\therefore\quad \frac{V_c}{2\pi^3\int_{s\alpha}\frac{ds}{|\nabla_q\omega|}}=\frac{1}{2Aq}\cdot 4\pi q^2=\frac{V_c(\omega_0-\omega)^{\frac{1}{2}}}{4A^{3/2}\pi^2}$$

3.5　使用德拜近似讨论同类原子所组成的下列系统的低温比热容为

（a）在一维系统中$C_v\propto T$；

（b）在二维系统中$C_v\propto T^2$；

解：对于一维简单格子，按德拜模型：$\omega=qv$

dω范围内包含 $dL=\frac{2dqL}{2\pi}=\frac{dqL}{\pi}=\frac{Ld\omega}{\pi V}$

$\int_0^{\omega_0}D(\omega)d\omega=N=\frac{L}{a}$ （N 为原子数目）

$\therefore \omega_0=\frac{\pi}{a}V$ 比热容：

$$C_V=\int_0^{\omega_0}k_B\left(\frac{\hbar}{K_BT}\right)^{2}\frac{D(\omega)d\omega}{\left(e^{\hbar}-1\right)^2}$$

$$=\int_0^{\omega_0}k_B\left(\frac{L}{\pi V}\right)\left(\frac{\hbar}{K_BT}\right)^{2}\frac{e^{\hbar}}{\left(e^{\hbar}-1\right)^2}d\omega$$

$$=\frac{2Tk_B^2}{\pi\hbar}\int^{\Theta_D/T}\frac{e^x x^2dx}{\left(e^x-1\right)^2}$$

$\Theta_D=\frac{\omega\hbar}{k_B}$ $\quad x=\frac{\omega\hbar}{K_BT}$ 在高温时：$x\to 0\therefore\frac{e^x x^2}{\left(e^x-1\right)^2}\approx 1$

$\therefore$ $C_V=\frac{L}{a}k_B=Nk_B$

低温时

$\Theta_D/T\to\infty$ $\quad \frac{e^x x^2}{\left(e^x-1\right)^2}=x^2e^x\left(1-e^x\right)^{-2}=x^2\sum_{n=1}^{\infty}ne^{-nx}$

$\int_0^{\infty}\frac{e^x xdx}{\left(e^x-1\right)^2}=\sum_{n=1}^{\infty}\int ne^{-nx}x^2dx=2\sum\frac{1}{n^2}=\frac{\pi^2}{3}$ $\quad C_V=\frac{2\pi TK_B^{\ 2}}{3\hbar}$

对于二维简单格子：$\rho(\omega)=\frac{s}{(2\pi)^2}\sum_s\int\frac{dl\omega}{\left|\nabla_q\omega_s q\right|}$

$\omega=vq$ ，所以格波等频（能）线为圆.

$$\rho(\omega)=\frac{S}{(2\pi)^2}\cdot\int\frac{dl\omega}{V}=\frac{S2\pi q}{(2\pi)^2V}=\frac{s\omega}{2\pi V^2}$$

二维介质有两支格波, 一支声学波, 一支光学波.

$D(\omega)=\rho(\omega)=\frac{s\omega}{\pi V_p^2}$ $\quad \frac{2}{V_p^2}=\frac{1}{V_L^2}+\frac{1}{V_\tau^2}$

$$E=\int_0^{\omega_m}\frac{\rho(\omega)\hbar}{e^{\hbar}-1}=\int_0^{\omega_m}\frac{S\hbar}{\pi V_p^2\left(e^{\hbar}-1\right)^2}d\omega$$

$\int_0^{\omega_m}\rho(\omega)d\omega=2N=\int_0^{\omega_m}\frac{S\omega}{\pi V_p^2}d\omega$

$$\therefore \omega_m = \left(4\pi \frac{N}{S}\right)^{\frac{1}{2}} V_p$$

$$C_V = \frac{s}{\pi V_p^2}\int_0^{\omega_m} k_B \left(\frac{\hbar}{k_B T}\right)^2 \frac{\omega d\omega}{\left(e^{\hbar} -1\right)^2}$$

$$= \frac{s}{\pi V_p^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 \int^{\Theta_D/T} \frac{e^x x^3 dx}{\left(e^x -1\right)^2}$$

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_m}{k_B}$$

当温度较高时：$e^x \approx 1 + x$

$$C_V = \frac{sk_B}{\pi V_p^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 \int^{\Theta_D/T} \frac{e^x x^3 dx}{\left(e^x -1\right)^2}$$

$$= \frac{sk_B}{\pi V_p^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 \Theta_D$$

$$= 2Nk_B$$

当温度较低时：$\int_0^{\infty} \frac{e^x x^3}{\left(e^x -1\right)^2} = \sum_{n=1}^{\infty}\int_0^{\infty} ne^{-nx} x^3 dx = 6\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^3} 6\varsigma(3)$

$\therefore$ $C_V = AT^2$ $\qquad A = \frac{6\varsigma(3) SK_B^3}{\pi V_p^2 \hbar}$

3.6　设某特殊二维系统声子频率 $\omega(K) = Aq^{\frac{3}{2}}$ ，试证明，此系统的

（a）平均振动能量正比于 $T^{\frac{7}{3}}$；

（b）声子比热容及熵正比于 $T^{\frac{4}{3}}$.

解：3.7 题中 $C_V = CT^{d/\mu}$ $\quad U \propto T^{\frac{d}{\mu}+1}$

对于二维系统 $d = 2$ $\quad \mu = \frac{3}{2}$

$\therefore$ $C_V \propto T^{\frac{4}{3}}$ 　同理熵：S$\propto T^{\frac{4}{3}}$

$\therefore$ $U \propto T^{\frac{d}{\mu}+1} = T^{\frac{2}{3/2}+1} = T^{\frac{7}{3}}$

3.7　设 d 维简单晶格中，频率ω与 q^{μ} 成正比，试证明

（a）简正模（声子谱）密度 $\rho(\omega)=B\omega^{\frac{d}{\mu}-1}$；

（b）比热容 $C_v=CT^{\frac{d}{\mu}}$. B、C 为常数.

解：　$\omega=kq^{\mu}$　　$\frac{d\omega}{dq}\propto \mathrm{q}^{\mu-1}$　　$\omega=q^{d}k$　　$d\omega=Kdq^{d-1}=c'q^{d-1}$

$$\rho(\omega)\propto\int_{S_d}\frac{dS_d}{d\omega/dq}$$ S_d 为 d 维空间等频球面.

∴　$\rho(\omega)\propto\frac{q^{d-1}}{q^{\mu-1}}\propto q^{d-\mu}$　　$q\propto\omega^{\frac{1}{\mu}}$　∴　$\rho(\omega)\propto\omega^{\frac{d}{\mu}-1}$

$$C_V=\frac{dE}{dT}=\frac{d}{dt}\int_0^{\infty}\frac{\hbar \qquad {}^{\frac{d}{}-1}}{e^{\hbar}-1}$$

$$=\frac{\frac{d}{dT}c''\cdot(K_BT)^{\frac{d}{\mu}+1}}{\hbar^{\frac{d}{}}}\int_0^{\omega_D}\frac{\left(\frac{\hbar}{K_BT}\right)^{\frac{d}{}}d\left(\frac{\hbar}{K_BT}\right)}{e^{\frac{\hbar}{K_BT}}-1}$$

$$=\int_0^{\infty}K_B\left(\frac{\hbar}{K_BT}\right)^{2}\frac{\hbar^{\frac{d}{}}}{\left(e^{\hbar}-1\right)^2}$$

$dz(q)=cq^{d-1}dq=g(\omega)d\omega$　　$g(\omega)=c'\omega^{d-1}$

$$U=\int_0^{\omega_D}\frac{\hbar}{e^{\hbar}-1}c\,\omega^{d-1}d\omega$$

$$=\frac{c'(k_BT)^{d+1}}{\hbar}\int^{\omega_D}\frac{\left(\frac{\hbar}{k_BT}\right)^{d}d\left(\frac{\hbar}{k_BT}\right)}{e^{\frac{\hbar}{k_BT}}-1}$$

令 $\frac{\hbar\omega}{k_BT}=x$　　$U=\frac{c'(k_BT)}{\hbar^{d}}\int_0^{x_D}\frac{x^{d}dx}{e^{x}-1}$　当 $T\to 0$ 时

$U\propto T^{d+1}$　　$C_v\propto T^{d}$

这时　$g(\omega)=c''\omega^{\frac{d}{\mu}-1}$

$$U=\int_0^{\omega_D}\frac{\hbar}{e^{\hbar \quad _D}-1}c\,\omega^{\frac{d}{\mu}-1}d\omega$$

$$=\frac{c''\left(k_BT\right)^{\frac{d}{\mu}+1}}{\hbar^{\frac{d}{}}}\int_0^{\omega_D}\frac{\left(\frac{\hbar}{k_BT}\right)^{\frac{d}{}}d\left(\frac{\hbar}{k_BT}\right)}{e^{\hbar \quad _D}-1}$$

故在低温时 $U\propto T^{\frac{d}{\mu}+1}$ $\quad C_V=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V\propto T^{d/\mu}$

3.8　求在一维单原子链中，$\omega>\omega_m$（截止频率）格波的阻尼系数 α 与 ω 的关系.

$$\alpha=2ar\cosh\frac{\omega}{\omega_m}$$

解：　单原子链：　$U_n=Ae^{i\left[qna-\omega(q)t\right]}$　　$q\in 1BZ$

$$\omega(q)=2\sqrt{\frac{\beta}{M}}\left|\sin\frac{1}{2}qa\right| \qquad \omega_m=2\sqrt{\frac{\beta}{M}}$$

当 $\omega>\omega_m$ 时　$\left|\sin\frac{1}{2}qa\right|>1$　，q 必定为复数，令 $q=q_1+iq_2$

$$\frac{\omega}{\omega_m}=\sin\frac{1}{2}\left(q_1+iq_2\right)a=\sin\frac{1}{2}q_1aar\cosh\frac{1}{2}q_2a+i\cos\frac{1}{2}q_1a\sinh\frac{1}{2}q_2a$$

$$\therefore\cos\frac{1}{2}q_1a=0 \qquad \frac{1}{2}q_1a=\left(h\pm\frac{1}{2}\right)\pi \qquad q_1=\left(h\pm\frac{1}{2}\right)\frac{2\pi}{a}=K_n\pm\frac{\pi}{a}$$

将 $q_1=\frac{\pi}{a}$ 带入 $q=\frac{\pi}{a}+i\frac{2}{a}ar\cosh\frac{\omega}{\omega_m}$

$$U_n=Ae^{i\left[\left(\frac{\pi}{a}+i\frac{2}{a}ar\cosh\frac{\omega}{\omega_m}\right)na-\omega t\right]}$$
$$=Ae^{i\pi}e^{-2nar\cosh\frac{\omega}{\omega_m}}e^{-i\omega t}$$
$$=Ae^{in\pi}e^{-na}e^{-i\omega t}$$
$$=A\left(-1\right)^ne^{na}e^{i\omega t}$$

$\alpha=2arcsh\frac{\omega}{\omega_m}$　为指数衰减因子.

3.9　Grüneisen 常量. $f_{n-p,n} \approx \frac{(-1)^p e^2}{(pa)^2}\left[1-\frac{2(U_n-U_{n-p})}{pa}\right]$

（a）证明频率为ω的声子模的自由能为 $K_B T \ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar}{2K_b T}\right)\right]$；

（b）如果Δ是体积的相对变化，则晶体的自由能可以写为

$$F(\Delta,T)=\frac{1}{2}B\Delta^2+K_B T\sum_q \ln\left\{2\sinh\left[\frac{\hbar}{2K_b T}\right]\right\}$$

其中 B为体积的弹性模量，假定 $\omega(\vec{q})$ 与体积关系为 $\frac{d\omega(\vec{q})}{\omega(\vec{q})}=-\gamma\Delta$，$\gamma$ 为 Grüneisen 常量，如果认为γ与模q无关，证明，当 $B\Delta=\gamma\sum_q \frac{1}{2}\hbar\omega(\vec{q})\coth[\frac{\hbar\omega(\vec{q})}{2K_B T}]$ 时，F 对Δ为极小，并证明利用热能密度，可将它写为 $\Delta=\gamma U(T)/B$；

（c）根据 Debye 证明：$\gamma=-\frac{\partial\ln\theta}{\partial\ln V}$. 其中 $\theta=\frac{\hbar}{K_B}$ (k_B为波尔兹曼常量).

解：考虑频率为ω的声子模，配分函数为

$$Z=\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\left(\frac{1}{2}+n\right)\hbar}{K_B T}}$$
$$=e^{-\frac{\hbar}{2K_B T}}\left(1+e^{-\frac{\hbar}{K_B T}}+e^{-\frac{\hbar}{K_B T}}+\ldots\right)$$
$$=\frac{e^{-\frac{\hbar}{K_B T}}}{\left(1-e^{-\frac{\hbar}{K_B T}}\right)}$$
$$=\frac{1}{e^{\frac{\hbar}{2K_B T}}-e^{-\frac{\hbar}{2K_B T}}}$$

自由能：　$F=-K_B T\ln z=K_B T\ln\left(2\sinh\frac{\hbar\omega}{2K_B T}\right)$

晶体的自由能为：$F(r,T)=E(r)+K_B T\sum_K \ln\left(2\sinh\frac{\hbar}{2K_B T}\right)$

若晶体体积改变为δr则

$$F\left(r+\delta r,T\right)=E\left(r+\delta r\right)+K_BT\sum_{k=0}^{\infty}\ln\left(2\sinh\frac{\hbar\omega_k\left(r+\delta r\right)}{2K_BT}\right)$$

$$E\left(r+\delta r\right)=E\left(r\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2E}{\partial r^2}\right)_0\left(\delta r\right)^2$$

$$=E\left(r\right)+\frac{1}{2}B\Delta^2$$

$B=r^2\left(\frac{\partial^2E}{\partial r^2}\right)_0$为体弹性模量.　$\Delta=\frac{dr}{r}$

$$\therefore\quad F\left(\Delta,T\right)=\frac{1}{2}B\Delta^2+K_BT\sum_K\ln\left(2\sinh\frac{\hbar\omega_k\left(r+\delta r\right)}{2K_BT}\right)$$

$$\omega_k\left(r+\delta r\right)=\omega_k\left(r\right)+\frac{\partial\omega_k}{\partial r}dr$$

$$=\omega_k\left(r\right)+\frac{r}{\omega_k}\left(\frac{\partial\omega_k}{\partial r}\right)\omega_k\frac{\delta r}{r}$$

$$=\omega_k-\gamma_k\omega_k\Delta\phi$$

其中$\gamma_K=-\frac{r}{\omega_K}\left(\frac{\partial\omega_K}{\partial r}\right)=-\frac{\partial\ln\omega_K}{\partial\ln r}$为Grüneisen 常数

假定γ_K与 k 无关　$\gamma_K=\gamma$

$$\frac{\partial F}{\partial\Delta}=B\Delta+K_BT\frac{\partial}{\partial\Delta}\sum_K\ln\left(2\sinh\frac{\hbar\omega_K\left(r+\delta r\right)}{2K_BT}\right)$$

$$=B\Delta+\frac{1}{2}\hbar\sum_K\left(\frac{\hbar\omega_K}{2K_BT}\right)\frac{\partial\omega_k\left(r+\delta r\right)}{\partial\Delta}$$

$$=0$$

$$\therefore\quad B=-\frac{\hbar}{2}\sum_K\coth\left(\frac{\hbar\omega_K}{2K_BT}\right)\frac{\partial\omega_K\left(r+\delta r\right)}{\partial\Delta}$$　其中$\frac{\partial\omega_K\left(r+\delta r\right)}{\partial\Delta}=\gamma\omega_K$

$$\therefore\quad\Delta B=\gamma\sum_K\frac{1}{2}\hbar\omega_K\left(\frac{\hbar\omega_K}{2K_BT}\right)$$

平均热能：

$$U\left(T\right)=F-T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{r}=-T^{2}\left(\frac{\partial\left(\frac{F}{T}\right)}{\partial T}\right)_{V}$$

$$=-T^{2}\frac{\partial}{\partial T}\left\{k_{B}\sum_{K}\ln\left[2\sinh\frac{\hbar}{2K_{B}T}\right]\right\}$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{K}\hbar\qquad\left(\frac{\hbar}{2K_{B}T}\right)$$

假定ω_K与 T 无关 $\Delta=\gamma U\left(T\right)/B$

由物态方程 $P=-\left(\frac{\partial E}{\partial r}\right)_{T}=-\left(\frac{dE}{dr}\right)-\frac{\partial}{\partial r}\left\{K_{B}T\sum_{k}\ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar}{2K_{B}T}\right)\right]\right\}$

利用 Deby 近似，将第二项化为：

$$-K_{B}T\int_{\theta}^{\omega_{D}}\frac{\partial}{\partial\omega}\ln\left[2\sinh\frac{\hbar}{2K_{B}T}\right]\cdot\frac{}{\partial r}D\left(\omega\right)d\omega$$

$$=-K_{B}T\int_{\theta}^{\omega_{D}}\frac{\hbar}{2K_{B}T}\coth\left(\frac{\hbar}{2K_{B}T}\right)\cdot\frac{}{\partial r}\frac{V}{\omega_{D}^{2}}\cdot\omega^{2}d\omega$$

$$=-\frac{qN\hbar}{2\omega_{D}^{3}r}\int_{0}\coth\left(\frac{\hbar}{2K_{B}T}\right)\frac{}{\partial\ln r}\omega^{3}d\omega$$

令$\gamma=-\frac{\partial\ln\omega}{\partial\ln r}$， $X=\frac{\hbar}{K_{B}T}$ ， $\theta=\frac{\hbar}{K_{B}}$上式化为：

$$\frac{q}{2}NK_{B}T\left(\frac{T}{\theta}\right)^{3}\frac{\gamma}{r}\int_{0}^{\frac{\theta}{T}}\coth\left(\frac{x}{2}\right)x^{3}dx$$

∴ 平均热能：

$$U\left(T\right)=\sum_{K}\frac{1}{2}\hbar\qquad\left(\frac{\hbar}{2K_{B}T}\right)$$

$$=\frac{q}{2}NK_{B}T\left(\frac{T}{\theta}\right)^{3}\int_{0}^{\frac{\theta}{T}}\coth\left(\frac{x}{2}\right)x^{3}dx$$

$$\therefore P=-\left(\frac{dE}{dr}\right)+\gamma\frac{U\left(T\right)}{r}$$

$$=P_{0}+\gamma\frac{U\left(T\right)}{r}$$

取$\omega=\omega_D$时$\gamma=-\frac{\partial\ln\omega}{\partial\ln r}=-\frac{\partial\ln\theta}{\partial\ln r}$为正值（Grüneisen 常量）

3.10 科恩（Kohn）反常.

假定作用在 l 平面上总的力为方程

$$F_L = \sum_P C_P \left(U_{P+s} - U_s \right)$$

其中晶面间的力常量 C_P 为

$$C_P = A\frac{\sin K_0 Pa}{Pa}$$

式中 A 和 K_0 为常数，p 取遍所有整数. 在金属中可能有这种形式. 利用此式和晶格振动方程证明其色散关系为 $\omega^2(q) = \dfrac{2}{M}\sum_{P>=} C_P \left(1-\cos qpa\right)$

计算 $\dfrac{\partial \omega^2(q)}{\partial q}$ 的表达式. 证明当 $q = K_0$ 时，$\dfrac{\partial \omega^2(q)}{\partial q}$ 为无穷大，并讨论 $\omega^2(q)$ 的变化情况.

解：若力常数为 C_P 代入 $m\ddot{U}_s - \sum_P C_P\left(U_{p+s} - U_s\right)$

令：$U_s = Ae^{i(qna-\omega t)}$ 得：

$$\omega^2 = \frac{2}{M}\sum_{P>0} C_P \left(1-\cos PKa\right)$$
$$= \frac{2}{M}\sum_{P>0} A\frac{\sin PK_0 a}{Pa}\left(1-\cos PKa\right)$$

$$\frac{\partial \omega^2}{\partial k^2} = \frac{2A}{M}\sum_{p>0} \sin pk_0 a \cdot \sin pka$$

当 $k = k_0$ 时 $\dfrac{\partial \omega^2}{\partial k} = \dfrac{2A}{M}\sum_{p=1} \sin^2 pk_0 a \cdot$ 右边发散

即：$\dfrac{\partial \omega^2}{\partial K} \to \infty$ 说明声子色散关系 $\omega^2(K)$ 或 $\omega\left(\vec{K}\right)$ 曲线在 $K = K_0$ 处斜率出现了垂直的正切变化，也就是声子色散关系在曲线 k_0 处有曲折（kink）此即 Kohn 反常

3.11 软声子模.

设有等质量而电荷交替变号的一维离子链，第 1 个离子的电荷为 $e_l = e\cdot(-1)^l$. 原子间的势为两种贡献之和：（1）最近邻离子间的短程弹性相互作用，力常量为 $C_{1e} = \beta$，以及（2）所有离子间的库伦相互作用.

（a） 证明库伦相互作用对原子的力常量的贡献为 $C_{lc} = 2(-1)^l \frac{e^2}{l^3 a^3}$，其中 a 是最近邻平衡距离.

（b） 由晶格振动方程推导下列一般的声子色散关系：

$$\omega^2(q) = \frac{2}{M}\sum_{p>0} C_p(1-\cos qpa)$$

证明：色散关系可写为 $\frac{\omega^2}{\omega_m^2} = \sin^2\frac{1}{2}qa + \sigma\sum_{l=1}^{\infty}(-1)^l(1-\cos qla)l^{-3}$ 式中 $\omega_m^2 = \frac{4\beta}{M}$，而 $\sigma = \frac{e^2}{\beta\alpha^3}$

（c） 证明在布里渊区边界 $qa = \pi$ 处，若 $\sigma > 0.475$ 或 $4/7\varsigma(3)$ 时，则 $\omega^2(q)$ 是负的（不稳定模），这里 ς 是 Riemann-Zeta 函数.进而证明，如果 $\sigma > 2\ln 2^{-1} = 0.721$，则对于小的 qa 声速为虚数.所以若 $0.475 < \sigma < 0.721$，对于在 $(0,\pi)$ 区间内的某个 qa，$\omega^2(q)$ 变为零，因而晶格不稳定.注意，声子谱不是双原子晶格型的，因为任一离子与其近邻的相互作用与其他离子相同.

解：软声子模

（a） 设离子链沿水平方向，第 n 个离子右端的第 n+p 个离子与第 n 个离子间的库伦力

$$f_{n+p,n} = -\frac{(-1)^{n+p}(-1)^n e^2}{\left[pa+(U_{n+p}-U_n)\right]^2}$$

考虑 $\left|U_{n+p}-U_n\right| << pa$ 将上式展成 $U_{n+p}-U_n$ 的级数

$$f_{n+p,n} \approx a - \frac{(-1)^p e^2}{(pa)^2}\left[1-\frac{2-(U_{n+p}-U_n)}{pa}\right]$$

第 n 个离子左端的第 $n-p$ 个离子与第 n 个离子间的库伦力

$$f_{n-p,n} \approx \frac{(-1)^{n-p}(-1)^n e^2}{\left[pa+(U_n-U_{n-p})\right]^2}$$

$$f_{n-p,n} \approx \frac{(-1)^p e^2}{(pa)^2}\left[1-\frac{2(U_n-U_{n-p})}{pa}\right]$$

$$f_{n\pm p,n} \approx \frac{2\left(-1\right)^{p} e^{2}}{p^{3}a^{3}}\left(U_{n+p}+U_{n-p}-2U_{n}\right)$$

∴ 库伦力时常数贡献 $2\left(-1\right)^{p}\dfrac{e^{2}}{p^{3}a^{3}}$

(b) 第 n 个离子的运动方程：

$$m\frac{du_{n}}{dt}=\beta\left(u_{n+1}+u_{n-1}-2u_{n}\right)+\sum_{P=1}^{\infty} f_{n\pm P,n}$$

$$=\beta\left(u_{n+1}+u_{n-1}-2u_{n}\right)+\sum_{P=1}^{\infty}\frac{2\left(-1\right)^{P} e^{2}}{\left(Pa\right)^{3}}\left(u_{n+P}+u_{n-P}-2u_{n}\right)$$

$$U_{n+p}=Ae^{i(n+p)qa-\omega t} \qquad U_{n}=Ae^{i(qna-\omega t)}$$

$$\omega^{2}=\frac{\beta}{m}\left(2-e^{iqa}-e^{-iqa}\right)+\frac{1}{m}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{2\left(-1\right)^{p} e^{2}}{\left(pa\right)^{3}}\left(2-e^{ipqa}-e^{-ipqa}\right)$$

$$=\frac{2}{m}\left[\beta\left(1-\cos qa\right)+\sum_{p=1}^{\infty}\frac{2\left(-1\right)^{p}}{\left(pa\right)^{3}}\left(1-\cos pqa\right)\right]$$

$$=\frac{4\beta}{m}\left[\sin^{2}\left(\frac{qa}{2}\right)+\frac{e^{2}}{\beta a^{3}}\sum_{p=1}^{\infty}\left(-1\right)^{p}\left(1-\cos pqa\right)p^{-3}\right]$$

令 $\omega_{0}=\dfrac{4\beta}{m}$ $\qquad \sigma=\dfrac{e^{2}}{\beta\alpha^{3}}$

$$\frac{\omega}{\omega_{0}}=\sin^{2}\left(\frac{qa}{2}\right)+\sigma\sum\left(-1\right)^{p}\left(1-\cos qpa\right)p^{-3}$$

$Qa=\pi$ 有

$$\frac{\omega^{2}}{\omega_{D}}=1-2\sigma\left[1+\left(\frac{1}{3}\right)^{3}+\left(\frac{1}{5}\right)^{3}+\left(\frac{1}{7}\right)^{3}+\ldots\right]$$

$$=1-2\sigma\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{\left(2m+1\right)^{3}}$$

$$=1-2\sigma\left\{\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m^{3}}-\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{\left(2m\right)^{3}}\right\}$$

$$=1-2\sigma\frac{7}{8}\sum\frac{1}{m^{3}}$$

$$=1-2\sigma\frac{7}{8}\varsigma\left(3\right)$$

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2}=1-\frac{7\varsigma(3)}{4}\sigma \qquad \sigma=\frac{4}{7\varsigma(3)}=0$$ 时

$\omega\to 0$ ，$\omega\propto\beta^{\frac{1}{2}}$

$\omega\to 0,\beta\to 0$（软模）

第四章　能带论

4.1　一维周期场中电子的波函数$\psi_k(x)$满足 Bloch 定理，若晶格常数为 a 的电子波函数为

（a）　$\Psi_K(x)=\sin\dfrac{\pi x}{a}$

（b）$\Psi_K(x)=i\cos\dfrac{3\pi x}{a}$

（c）$\Psi_K(x)=\sum_{i=-\infty}^{+\infty}f(x-la)$

f 是某确定的函数，试求电子在这些态的波矢.

解：由 $\Psi(\vec r+\vec R_n)=e^{i\vec r\cdot\vec R_n}\Psi(\vec r)$

在一维周期场：$\Psi_K(x+a)=e^{ika}\Psi_K(x)$

$$\begin{aligned}\Psi_k(x+a)&=i\cos\left[\frac{3\pi}{a}(x+a)\right]\\&=i\cos\left(\frac{3\pi}{a}x+\pi\right)\\&=-i\cos\left(\frac{3\pi}{a}x\right)\\&=-\Psi_k(x)\\&=e^{ika}\Psi(x)\end{aligned}$$

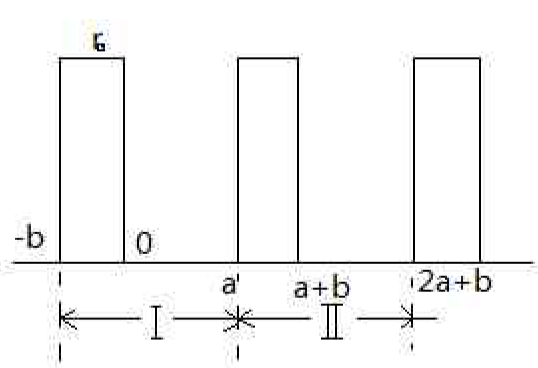
$\therefore\quad e^{ika}=-1 \qquad k=\pm\dfrac{\pi}{a},\pm\dfrac{3\pi}{a},\pm\dfrac{5\pi}{a}$

$-\dfrac{\pi}{a}<k\le\dfrac{\pi}{a},k=\dfrac{\pi}{a}$

$$\Psi_k(x+a)=\sin\left[\frac{\pi}{a}(x+a)\right]$$
$$=\sin\left(\frac{\pi}{a}x+\pi\right)$$
$$=-\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$
$$=e^{ika}\sin\frac{\pi}{a}x$$
$$e^{ika}=-1 \quad \therefore \quad k=\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{3\pi}{a},\pm\frac{5\pi}{a}$$

$$\Psi_k(x+a)=\sum_{\ell}^{\infty} f(x+a-\ell \quad ,$$
$$=\sum_{\ell}^{\infty} f[x-(\ell \quad , \quad]$$
$$\ell'=\ell-1$$
$$\Psi_k(x+a)=\sum_{\ell}^{\infty} f(x-\ell \quad ,$$
$$=\Psi_k(x)$$
$$=e^{ika}\Psi(x)$$
$$e^{ika}=1 \quad \therefore \quad k=0,\pm\frac{2\pi}{a},\pm\frac{4\pi}{a},\pm\frac{6\pi}{a}\cdots \qquad \text{在布里渊区内 } k=0$$

4.2　试证明，在δ函数组成的以为周期势场$V(x)=A\sum_{l=-\infty}^{+\infty}\delta(x-la)$中，单电子能量由下列 Kronig—Penney 关系决定：$\cos ka=\frac{maA}{\hbar}\frac{\sin\alpha a}{\alpha a}+\cos\alpha a$，$\alpha^2=\frac{2mE}{\hbar}$；并用结果说明每一能带曲线均满足$E(k+k_h)=E(k)$当$A=bV_0$且$V_0$为负数时，它可以认为是单电子在一维链中运动的一种良好模型．$E(k+k_h)=E(k)$



证明：在Ⅰ区域中：$(-b<x<a)$

$$\psi_x=\begin{cases}Ae^{ikx}+Be^{-ikx}\,(0<x<a)\\ Ce^{ik'x}+De^{-ik'x}\,(-b<x<0)\end{cases}$$

其中 $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ， $K^{'}=\sqrt{2m\left(E-V_0\right)}/h$

在 $x=0$ 处波函数连续且 ψ ， $\psi^{'}$ 连续得： $A+B=C+$
$\frac{k}{k^{'}}\left(A-B\right)=C-D$

$$\therefore C=\frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{K}{K^{'}}\right)A+\left(1-\frac{K}{K^{'}}\right)\right]B$$

$$D=\frac{1}{2}\left[\left(1-\frac{K}{K^{'}}\right)A+\left(1+\frac{K}{K^{'}}\right)\right]B \quad D=\frac{1}{2}\left[\left(1-\frac{K}{K^{'}}\right)A+\left(1+\frac{K}{K^{'}}\right)\right]B$$

在区域 II $\psi\left(X\right)=e^{ik(a+b)}\psi\left(x-a-b\right)\left(a<X<2a+b,-b<x-a-b<a\right)$

按 Flogue 定理　在区域和 II 的交界处$\left(x=a\right)$，ψ 及$\psi^{'}$ 必须连续得：

$$Ae^{ika}+Be^{-ika}=e^{ik(a+b)}\Psi\left(-b\right)$$
$$=e^{ik(a+b)}\left(Ce^{-ik^{'}b}-De^{ik^{'}b}\right)$$

代入 C，D 得：

$$\left\{e^{ika}-\frac{1}{2}e^{ik(a+b)}\left[\left(1+\frac{k}{k^{'}}\right)e^{-ik^{'}b}+\left(1-\frac{k}{k^{'}}\right)e^{ik^{'}b}\right]\right\}A+$$
$$\left\{e^{-ika}-\frac{1}{2}e^{ik(a+b)}\left[\left(1-\frac{k}{k^{'}}\right)e^{-ik^{'}b}+\left(1+\frac{k}{k^{'}}\right)e^{ik^{'}b}\right]\right\}B=0$$

$$\left\{e^{ika}-\frac{1}{2}e^{ik(a+b)}\left[\left(1+\frac{k}{k^{'}}\right)e^{-ik^{'}b}+\left(1-\frac{k}{k^{'}}\right)e^{ik^{'}b}\right]\right\}A-$$
$$\left\{e^{-ika}+\frac{1}{2}e^{ik(a+b)}\left[\left(\frac{k}{k^{'}}-1\right)e^{-ik^{'}b}-\left(\frac{k}{k^{'}}+1\right)e^{ik^{'}b}\right]\right\}B=0$$

方程有解条件为行列式为零

$$\left(k+k^{'}\right)^2\cos\left(k^{'}b+ka\right)-\left(k-k^{'}\right)\cos\left(k^{'}b-ka\right)=4kk^{'}\cos k\left(a+b\right)$$

化简得：$\cos ka\cos k^{'}b-\frac{\left(k^2+k^{'2}\right)}{2kk^{'}}\sin ka\sin k^{'}b=\cos k\left(a+b\right)$

∴ 只有当$\left|\cos ka\cos k^{'}b-\frac{k^2+k^{'2}}{2kk^{'}}\sin ka\sin k^{'}b\right|\leq 1$ 才有解，这是对能量本正值的限制.

对于 $E < r_0$ 只需把 $k' \to ik$ $\quad k = \dfrac{\sqrt{2m(r_0 - E)}}{\hbar}$

又∵ 、 $) = chkb \qquad \sin(ikb) = ishkb$

$$\therefore \left| \cos ka \cos kb - \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin ka \sin kb \right| = \left| \cos k(a+b) \right| \le 1$$

当 $b \to 0 \qquad r_0 \to \infty$ 令 $b_0 r_0 = \gamma$ （常数）

$$r(x) = \gamma \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + \eta a) \quad \gamma = br_0 = \frac{\Omega\hbar}{m}$$

即：$\dfrac{mr_0}{\hbar} = \dfrac{\Omega}{}$

γ 为常数 $b \to 0 \quad (r_0 \to \infty) \quad chkb \to 0 \quad shkb \to kb$

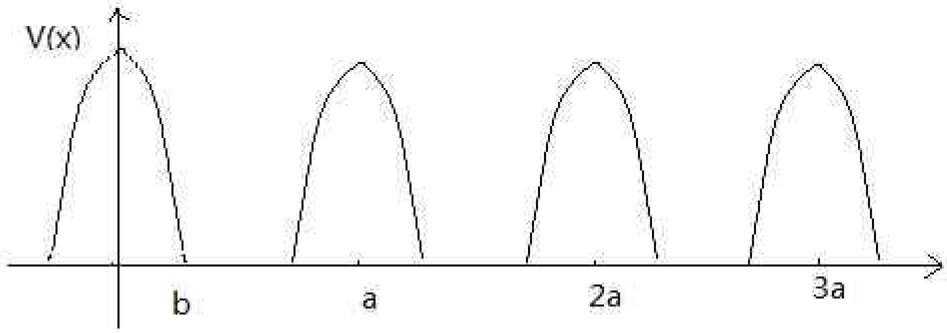
而 $k^2 << \dfrac{2m(r_0 - E)}{\hbar} \approx \dfrac{\sqrt{2mr_0}}{\hbar} = \dfrac{\sqrt{2\Omega}}{}$

$$\therefore \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka = \cos ka$$

4.3 电子在周期场中的势能

$$V(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2} m\omega^2 \left[b^2 - (x - na)^2 \right], na - b \le x \le na + b \\ 0, (n-1)a + b \le x \le na - b \end{cases}$$

且 $a = 4b$，ω是常数. 试画出此势能曲线，并求此势能的平均值.



$$\vec{V} = \frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{a} V(x)dx$$

$$= \frac{1}{4b}\int_{-2b}^{2b} V(x)dx$$

$$= \frac{1}{4b}\int_{-b}^{b}\frac{1}{2}m\omega^2\left[b^2 - x^2\right]dx$$

$$= \frac{m\omega^2}{8b}\left[b^2 x - \frac{1}{3}x^3\right]_{-b}^{b}$$

$$= \frac{1}{6}m\omega^2 b^2$$

4.4　用近自由电子模型处理上题，求此晶体第一及第二禁带宽度.

解：自由电子模型，某带宽度 $E_g = 2\left|V_n\right|$

$$V_n = \frac{1}{N\Omega}\int V\left(r\right)e^{-i\vec{K}_h\cdot\vec{r}dr}$$

$$= \frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} V\left(r\right)e^{iK_h\cdot x}dx$$

$$K_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$$

$$K_1 = b_1 = \frac{2\pi}{a}$$

$$E_{g_1} = 2\left|V_1\right| = 2\left|\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} r\left(x\right)e^{-i\frac{2\pi}{a}x}dx\right|$$

$$= 2\left|\frac{1}{4b}\int_{-\frac{a}{2}(-b)}^{\frac{a}{2}(b)}\frac{m}{2}\omega^2\left(b^2 - x^2\right)e^{-i\frac{2\pi}{a}x}dx\right|$$

$$= 2\left|\frac{1}{4b}\int_{-b}^{b}\frac{m}{2}\omega^2\left(b^2 - x^2\right)\cos\left(\frac{\pi}{2b}x\right)dx\right|$$

$$= \frac{8m\omega^2 b^2}{\pi^3}$$

$$E_{g_2}=2\left|V_2\right|=2\left|\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}r\left(x\right)e^{-i\frac{4\pi}{a}x}dx\right|$$

$$=2\left|\frac{1}{4b}\int_{-b}^{b}\frac{m}{2}\omega^2\left(b^2-x^2\right)e^{-i\frac{\pi}{b}x}dx\right|$$

$$=2\left|\frac{1}{4b}\int_{-b}^{b}\frac{m}{2}\omega^2\left(b^2-x^2\right)\cos\left(\frac{\pi}{b}x\right)dx\right|$$

$$=\frac{m\omega^2b^2}{\pi^2}$$

4.5 设两维正方格子的周期势为

$V\left(\vec{r}\right)=V\left(x,y\right)=-4U\cos\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{2\pi y}{a}$ a 为晶格常数，求：

（a） $V\left(\vec{r}\right)$ 按倒格矢展开的傅里叶系数 $V\left(\vec{k}_h\right)$；

（b） 对近自由电子而言，在哪些布里渊区界线上有 Bragg 反射？并写出相应的能隙.

解：由 $V\left(\vec{k}_h\right)=\frac{1}{\Omega}\int_{\Omega}V(\vec{r})e^{-ik_h\vec{r}}d\vec{r}$ 得

$$V_1\int_0^a\int_0^a\left[-4u\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)\right]\exp\left[-\frac{2\pi i}{a}\left(x+y\right)\right]dxdy$$

$$=-\frac{U}{a^2}\int_0^a\int_0^a(\exp\left[i\frac{2\pi}{a}x\right]+\exp\left[-i\frac{2\pi}{a}y\right](\exp\left[i\frac{2\pi}{a}y\right]+\exp\left[-i\frac{2\pi}{y}\right])\exp\left[-i\frac{2\pi}{a}(x+y)\right]dxdy$$

$$=-\frac{U}{a^2}\int_0^a\int_0^a\left(1+\exp\left[\frac{-i4\pi x}{a}\right]\right)\left(1+\exp\left[-i4\pi y\right]\right)dxdy$$

$$=-\frac{U}{a^2}\left(x+\frac{\exp\left[-4\pi x/a\right]}{-i4\pi/a}\right)\Bigg|_0^a\left(y+\frac{\exp\left[-4\pi y/a\right]}{-i4\pi y/a}\right)\Bigg|_0^a$$

$$=-\frac{U}{a^2}\left[a+\frac{1}{-4\pi i/a}\left(\cos4\pi-1\right)\right]\left[a+\frac{1}{-i4\pi/a}\left(\cos4\pi-1\right)\right]$$

$$=-U$$

$$\therefore 2\left|V_1\right|=2U$$

∴能隙为 $2\left|V_1\right|=2U$ 此即布里渊区顶角 $\left(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right)$ 处能隙.

所求倒格基矢 $\vec{b}_1=\frac{2\pi}{a}\vec{i}$ $\vec{b}_2=\frac{2\pi}{a}\vec{j}$ $\vec{k}_h=\vec{b}_1+\vec{b}_2$ 最近邻 $(\pm b,0)(0,\pm b)$ 次近邻 $(\pm b,\pm b)$

电子波函数 $\psi_k\left(x\right)=\psi_0^k\left(x\right)+\psi_k^1\left(x\right)+\cdots$

$$\psi_0^k(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx} \qquad \Psi_k^1(x)=\sum\frac{<k'\left|\gamma'\right|k>}{E_0^0-E_{k'}^0}\Psi_{k'}^{(0)}$$

$$<k'\left|\gamma'\right|k>=V(n) \quad (k=k') \qquad <k'\left|\gamma'\right|k>=0 \quad (k\neq k')$$

以Ｉ ｊ 表示单位矢量，$\vec{b}_1$　$\vec{b}_2$表示倒格矢

$\vec{r}=x\vec{i}+y\vec{j}$，$\vec{G}=G_1\vec{b}_1+G_2\vec{b}_2=\frac{2\pi}{a}\left(g_1\vec{b}_1+g_2\vec{b}_2\right)$

g_1,g_2 为整数. 晶体势能$U(x,y)=-4U\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right)$

$U(r)=-U\left(e^{i\frac{2\pi}{\sigma}x}+e^{-i\frac{2\pi}{\sigma}x}\right)\left(e^{i\frac{2\pi}{\sigma}y}+e^{-i\frac{2\pi}{\sigma}y}\right)\sum_{G(1,1)}e^{iG(1,1)}$ 其中$U_{G(1,1)}=-U$

而其他势能缚氏系数 $U_{G(1,0)}=U_{G(2,0)}=\cdots$

这样基本方程：$(\lambda_k-\varepsilon)C(k)+\sum_G U_G G(k-G)=0$变为

$$(\lambda_k-\varepsilon)C(k)+U_{G(1,1)}C\left(k-G_{(1,1)}\right)+U_{G(\bar{1},\bar{1})}C\left(k-G_{(1,1)}\right)+U_{G(1,\bar{1})}C\left(k-G_{(1,\bar{1})}\right)+$$
$$U_{G(\bar{1},1)}C\left(k-G_{(\bar{1},1)}\right)=0$$

求布里渊区角顶$\left(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}\right)$　即$k=G\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{2}G(1,1)$处的能隙，可利用双项平面波近似：

$$\varphi=C(k)e^{ikr}+C(k-G)e^{i(k-G)r}$$

当$k=\frac{1}{2}G(1,1),k=-\frac{1}{2}G(1,1)$时依次有　$k-G(1,1)=-\frac{1}{2}G(1,1)$

$k-G(\bar{1},\bar{1})=\frac{1}{2}G(1,1)$　而其它的$\left|k-G(1,\bar{1})\right|>\left|G(1,\bar{1})\right|$所以在双项平面波近似下只有：

$$C\left(\frac{1}{2}G(1,1)\right),C\left(k-G(1,1)\right)=C\left(-\frac{1}{2}G(1,1)\right)C\left(\frac{1}{2}G(1,1)\right),C\left(k-G(\bar{1},\bar{1})\right)=C\left(\frac{1}{2}G(1,1)\right)$$

$$\begin{cases}\left(\lambda_{\frac{1}{2}G(1,1)}-\varepsilon\right)C\left(\frac{1}{2}G(1,1)\right)-UC\left(-\frac{1}{2}G(1,1)\right)=0\\ \left(\lambda_{-\frac{1}{2}G(1,1)}-\varepsilon\right)C\left(-\frac{1}{2}G(1,1)\right)-UC\left(\frac{1}{2}G(1,1)\right)=0\end{cases}\Rightarrow$$

$$\begin{vmatrix} \lambda_{\frac{1}{2}G(1,1)} - \varepsilon & -\mu \\ -\mu & \lambda_{-\frac{1}{2}G(1,1)} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

因为 $\lambda_{\frac{1}{2}G(1,1)} = \lambda_{-\frac{1}{2}G(1,1)} = \lambda = \frac{\hbar}{2m}\left\lfloor \frac{1}{2}G(1,1) \right\rfloor^{2} = \frac{\hbar}{ma^{2}}$

由行列式：$(\lambda-\varepsilon)^2 - U^2 = 0 \qquad \varepsilon = \lambda \pm U = \frac{\hbar}{ma^2} \pm U$

4.8 平面正六角形晶格（如图）六角形两个对边的间距是 a，基矢为

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a\vec{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{j} \qquad \vec{a}_2 = -\frac{1}{2}a\vec{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{j}$$

试画出此晶体的第一、二、三布里渊区.

解：取单位矢量$\vec{k}$ 垂直 $\vec{a}_1,\vec{a}_2 \quad \vec{a}_3 = k$

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$

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

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

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

在 $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$ 平面内选一倒格点为原点，原点最近邻倒格矢有 6 个 $\pm\vec{b}_1$、$\pm\vec{b}_2$、$\pm(\vec{b}_1+\vec{b}_2)$ 正六边形为第一布里渊区.

4.9 用紧束缚方法导出体心立方晶体 s 态电子的能带:

$$\mathrm{E}(\vec{k}) = \mathrm{E}_s - J_0 - 8J_1 \cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2}\cos\frac{k_z a}{2}$$

试画出沿 k_x 方向 $(k_y = k_z = 0)$，$E(k_x)$ 和 $V(k_x)$ 的曲线.

解:紧束缚 s 态电子能带 $\mathrm{E_s} = \mathrm{E_s^{\alpha t}} - C_s - 8J_s \cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2}\cos\frac{k_z a}{2}$

用紧束缚方法，只计其最近邻格点作用时

$$\mathrm{E_s}\left(\vec{K}\right)=\mathrm{E_s^{\alpha t}}-C_s-\sum e^{i\vec{K}\vec{R}_n} \qquad \vec{R}_n \text{ 是最近邻格点}$$

取参考点的坐标$(0,0,0)\left(\pm\frac{a}{2},\pm\frac{a}{2},\pm\frac{a}{2}\right)$代入上式

$$E_s\left(\vec{K}\right)=E_s^{\alpha t}-C_s-J_s\sum_n e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}_n}$$

$$=E_s^{\alpha t}-C_s-J_s\left[e^{i\frac{a}{2}\left(k_x+k_y+k_z\right)}+e^{i\frac{a}{2}\left(k_x+k_y-k_z\right)}+e^{i\frac{a}{2}\left(k_x-k_y+k_z\right)}+e^{i\frac{a}{2}\left(-k_x+k_y+k_z\right)}\right]$$

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

$$=E_s^{\alpha t}-C_s-2J_s\left[e^{i\frac{a}{2}\left(k_x+k_y\right)}\cos\frac{k_z}{2}a+e^{i\frac{a}{2}\left(k_x-k_y\right)}\cos\frac{k_z}{2}a+e^{i\frac{a}{2}\left(-k_x+k_y\right)}\cos\frac{k_z}{2}a+e^{i\frac{a}{2}\left(-k_x-k_y\right)}\cos\frac{k_z}{2}a\right]$$

$$=E_s^{\alpha t}-C_s-4J_s\left[\left(e^{i\frac{a}{2}k_x}+e^{-i\frac{a}{2}k_x}\right)\cos\frac{k_ya}{2}\cos\frac{k_za}{2}\right]$$

$$=E_s^{\alpha t}-C_s-8J_s\cos\frac{k_xa}{2}\cdot\cos\frac{k_ya}{2}\cdot\cos\frac{k_za}{2}$$

在$[1,1,1]$方向上$k_x=k_x=k_z=\frac{\sqrt{3}}{3}k$

在第一布里渊区边界：$k_x=k_x=k_z=\pm\frac{\pi}{a}$

$$\mathrm{E_s}=\mathrm{E_0}-8J_s\cos^3\left(\frac{\sqrt{3}}{6}ka\right)$$

$k_x=k_x=k_z=0$最小值为$\mathrm{E_s}\ \therefore k_x=k_x=k_z=0$是能带底

$$m_{xx}^*=\frac{\hbar}{\left.\frac{\partial^2E_s}{\partial K_x^2}\right|_{K_x=0}}=\frac{\hbar}{2J_sa^2}=m_{yy}^{\cdot}=m_{zz}^*$$

在边界$\left(\pm\frac{2\pi}{a},0,0\right),\left(0,\pm\frac{2\pi}{a},0\right),\left(0,0,\pm\frac{2\pi}{a}\right)$是能带顶

$$m_{xx}^*=m_{yy}^*=m_{zz}^*=-\frac{\hbar}{2J_sa^2}$$

其它交叉项的倒数也会为零。

4.10　用紧束缚方法导出面心立方晶体 s 态电子能带：

$$\mathrm{E}\left(\vec{\mathrm{K}}\right)=\mathrm{E_s}-J_0-4J_1\left(\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{k_y a}{2}+\cos\frac{k_y a}{2}\cos\frac{k_z a}{2}+\cos\frac{k_z a}{2}\cos\frac{k_x a}{2}\right)$$

并求能带底部的有效质量.

解：由 $\mathrm{E_s}\left(\vec{\mathrm{K}}\right)=\mathrm{E_s^{\alpha t}}-C_s-J_s\sum e^{i\vec{K}\vec{R_n}}\sum_n e^{i\vec{K}\vec{R_n}}$ （$\vec{R_n}$ 为最近邻）

以 $(0,0,0)$ 为坐标原点有 12 个最近邻：

$$\left(\pm\frac{a}{2},\pm\frac{a}{2},0\right),\left(\pm\frac{a}{2},0,\pm\frac{a}{2}\right),\left(0,\pm\frac{a}{2},\pm\frac{a}{2}\right)$$

$$E_s\left(\vec{k}\right)=E_s^{\alpha t}-C_s-J_s\left[e^{i\frac{a}{2}\left(k_x+k_y\right)}+e^{-i\frac{a}{2}\left(k_x+k_y\right)}+e^{i\frac{a}{2}\left(k_x-k_y\right)}+e^{-i\frac{a}{2}\left(k_x-k_y\right)}\right]-$$

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

$$=E_s^{\alpha t}-C_s-2J_s\left[\cos\frac{a}{2}\left(k_x+k_y\right)+\cos\frac{a}{2}\left(k_x-k_y\right)\right]-$$

$$2J_s\left[\cos\frac{a}{2}\left(k_x+k_z\right)+\cos\frac{a}{2}\left(k_x-k_z\right)\right]-2J_s\left[\cos\frac{a}{2}\left(k_y+k_z\right)+\cos\frac{a}{2}\left(k_y-k_z\right)\right]$$

$$=E_s^{\alpha t}-C_s-4J_s\left[\cos\frac{k_x a}{2}\cdot\cos\frac{k_y a}{2}+\cos\frac{k_y a}{2}\cdot\cos\frac{k_z a}{2}+\cos\frac{k_z a}{2}\cdot\cos\frac{k_x a}{2}\right]$$

能带底即 $E_s\left(\vec{K}\right)$ 最小值 $K\left(0,0,0\right)$

$$m_{xx}^*=\frac{\hbar}{\left.\frac{\partial^2 E}{\partial K_x^2}\right|_{K_x=0}}=\frac{\hbar}{2J_s a}=m_{yy}=m_{zz}^*\quad \begin{gathered}\varphi_s^{\alpha t}\left(x-na\right)=\alpha^{\frac{1}{\alpha}}e^{-\alpha\left|x-na\right|}\\ V\left(X\right)=-\sum_{n=1}^{N}A\delta\left(x-na\right)\end{gathered}$$ 其它交叉项

为零.

4.11　设一维晶体晶格常数为 a，系统的哈密顿量 $H=-\frac{\hbar}{2m}\frac{}{dx^2}+V\left(X\right)$，其中

$V\left(X\right)=-\sum_l A\delta\left(x-la\right)$ ，若已知孤立原子的势和波函数为

$$V_a=-A\delta\left(x-la\right),\varphi_a=\alpha^{\frac{1}{2}}e^{-\alpha\left|x-la\right|},E_a=-\frac{\hbar}{2m}$$

试用紧束缚近似求 s 态电子的

（a）能带公式；（b）能带宽度；（c）带底有效质量.

解：由 $V\left(X\right)=-\sum_{n=1}^{N}A\delta\left(x-na\right)$

$\delta\left(x-na\right)$ 为δ，孤立原子中 s 态电子的波函数

$$\varphi_s^{\alpha t}\left(x-na\right)=\alpha^{\frac{1}{\alpha}}e^{-\alpha\left|x-na\right|}$$

$$\mathrm{E_s}\left(\overrightarrow{\mathrm{K}}\right)=\mathrm{E_s^{\alpha t}}-C_s-J_s\sum e^{i\overrightarrow{K}\overrightarrow{R_n}}$$ $\overrightarrow{R_n}$为最近邻

$$C_s=-\int_{Na}\varphi_s^{at^*}\left(x\right)\left[V\left(X\right)-V^{at}\left(X\right)\right]\varphi_s^{at}\left(X\right)dX$$

取等号格点 $n^{'}a=x$，则

$$C_s=-\int_{Na}\varphi_s^{at^*}\left(x-n^{'}a\right)\left[-\sum_{n=1}^{N}A\delta\left(n-a\right)+A\delta\left(x-n^{'}a\right)\right]\varphi_s^{at}\left(x-n^{'}a\right)dx$$

$$=-\int_{Na}\varphi_s^{at^*}\left(x-n^{'}a\right)\left[-\sum_{n\neq n^{'}}^{N}A\delta\left(x-na\right)\varphi_s^{at}\left(x-n^{'}a\right)\right]dx$$

$$=0$$

$$J_s=-\int_{Na}\varphi_s^{at^*}\left(x-n^{'}a\right)\left[-\sum A\delta\left(x-na\right)+A\delta\left(x-n^{'}a-a\right)\right]\varphi_s^{at}\left(x-n^{'}a-a\right)dx$$

$$=-\int_{Na}\varphi_s^{at^8}\left(x-n^{'}a\right)\left[-\sum_{n\neq n^{'}}^{N}A\delta(x-na)\varphi_s^{at}(x-n^{'}a-a)\right]dx$$

$$=-\alpha\int_{Na}e^{-\alpha\left|x-n^{'}a\right|}\left[-A\delta\left(x-n^{'}a\right)\right]e^{-\alpha\left|x-n^{'}a-a\right|}dx$$

$$=\alpha Ae^{-\alpha a}$$

上式积分只取了右边的最近邻，取左边最近邻也相同.

又 $\sum_n e^{i\overrightarrow{K}\overrightarrow{R_n}}=e^{iKa}+e^{-iKa}=2\cos Ka$ （由于等号点左右两个最近邻）

$$E\left(K\right)=\varphi_s^{\alpha t}-2A\alpha e^{-\alpha a}\cos Ka$$

$K=\dfrac{\pi}{a}$ 时能最大 $E\left(\dfrac{\pi}{a}\right)=E_s^{\alpha t}+2A\alpha e^{-\alpha a}$

$K=\dfrac{2\pi}{a}$ 时能最小 $E\left(\dfrac{2\pi}{a}\right)=E_s^{\alpha t}-2A\alpha e^{-\alpha a}$

带宽 $E\left(\dfrac{\pi}{a}\right)-E\left(\dfrac{2\pi}{a}\right)=4A\alpha e^{-\alpha a}$

带顶有效质量 $m_{xx}^*=\dfrac{\hbar^2}{\left.\dfrac{\partial^2E}{\partial k_x^2}\right|_{k=\frac{\pi}{a}}}$ 带顶 $m_{xx}^*=\dfrac{\hbar^2}{\left.\dfrac{\partial^2E}{\partial k_x^2}\right|_{k=\frac{2\pi}{a}}}$ 带底

4.12 试由紧束缚近似证明晶格常数为 a 的简单一维晶体中，第 l 格位上 s 电子的概率幅 $C_l(t)$ 满足方程：$i\hbar$ [illegible] $C_l\left(t\right)-BC_{l-1}\left(t\right)-C_{l+1}\left(t\right)$

式中 $A=E_s-J_0$， $B=J_1$， E_s 是孤立原子 s 轨道的能量， J_0 是晶场劈裂，

J_1 是最近邻交叠积分. 假定一维中晶链中原子总数为 N，试求：

（a） 电子的能量与波矢关系 $E\left(\vec{K}\right)=?$

（b） 能带宽度和带顶空穴及带底电子的有效质量；

（c） 设 $A=0$，求能带电子的态密度 $\rho\left(E\right)=?$

（d） 假定原子有一个价电子，试求 $T=0$ 时的费米子能 E_F^0.

解：设第 n 个格点上电子的几率振幅为：

$C_n=C_0e^{i\left(Kna-\frac{E}{\hbar}t\right)}$ 第 $n-1$ 和第 $n+1$ 个格点上

$C_{n-1}=C_0e^{i\left[K(n-1)a-\frac{E}{\hbar}t\right]}$ $\qquad C_n=C_0e^{i\left[K(n+1)a-\frac{E}{\hbar}t\right]}$

将以上三式代入 $i\hbar\dot{\ }_n \qquad {}_n-BC_{n-1}-BC_{n+1}$ 得：

$i\hbar\left(\quad\frac{E}{\hbar}\right)=A-Be^{-ika}-Be^{ika}$ ， $E=A-2B\cos ka$. 为电子能量

$k=0$ 是电子能带底，在能带底电子能量的有效质量

$$m^*=\frac{\hbar}{\left.\frac{\partial^2E}{\partial K_x^2}\right|_{K=0}}=\frac{\hbar}{2Ba}$$

$K=\pm\frac{\pi}{a}$ 为能带顶 $m^*=\frac{\hbar}{\left.\frac{\partial^2E}{\partial K_x^2}\right|_{K=\pm\frac{\pi}{2}}}=-\frac{\hbar}{2Ba}$

带顶空穴有效质量 $m^*=\frac{\hbar}{2Ba}$

$E\sim E+dE$ 能量区间波矢数为： $\frac{Na}{2\pi}\cdot 2dk$

$$dz=2\frac{Na}{2\pi}\cdot 2dk=\frac{2Na}{\pi}\cdot\frac{1}{\frac{dE}{dk}}\cdot dE$$

$$=\frac{2Na}{\pi}\cdot\frac{1}{2Ba\sin ka}dE$$

$$=\frac{2N}{\pi}\frac{1}{\sqrt{4B^2-\left(A-E\right)^2}}dE$$

$A=0$ 时能态密度： $N\left(E\right)=\left(\frac{dZ}{dE}\right)_{A=0}=\frac{2N}{\pi}\frac{1}{\sqrt{4B^2-E^2}}$

设 晶体有N个电子，在绝对零度时都分布在费米能及以下，采用 $N=0$ 时的能态密度

$$N=\int_0^{E_F} N(E)dE$$

$$=\int_0^{E_F}\frac{N}{\pi B}\frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{E}{2B}\right)^2}}dE$$

$$=\int\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx$$

$$=\sin^{-1}x$$

$$\therefore \frac{2}{\pi}\left[\sin^{-1}\left(\frac{E_F^0}{2B}\right)\right]=0 \quad \sin\frac{\pi}{2}=\frac{E_F^0}{2B} \qquad E_F^0=2B$$

4.13　某晶体中电子的等能面是椭球面 $E(\vec{K})=\frac{\hbar}{2}\left(\frac{K_x^2}{m_1}+\frac{K_y^2}{m_2}+\frac{K_z^2}{m_3}\right)$，求能量 $E\sim E+dE$ 之间的状态数.

解：由：$E=\frac{\hbar}{2}\left(\frac{K_x^2}{m_1}+\frac{K_y^2}{m_2}+\frac{K_z^2}{m_3}\right)$　得：

$$\frac{K_1^2}{\frac{2m_1E_1}{\hbar}}+\frac{K_2^2}{\frac{2m_2E_2}{\hbar}}+\frac{K_3^2}{\frac{2m_3E_3}{\hbar}}=1$$

$$\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}+\frac{z^2}{c^2}=1$$　等能面围成的椭球体积：

$$\tau=\frac{4}{3}\pi\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_1m_2m_3}E^{\frac{3}{2}}dE \qquad d\tau=\frac{4\pi}{\hbar}\sqrt{2m_1m_2m_3}E^{\frac{1}{2}}dE$$

在能量区间 $E\to(E+dE)$ 内电子数状态数目

$$dZ=2\frac{V_c}{(2\pi)^3}d\tau=\frac{V_c}{\pi^2\hbar}\sqrt{2m_1m_2m_3}E^{\frac{1}{2}}dE$$

电子能态密度：$N(E)=\frac{dZ}{dE}=\frac{V_c}{\pi^2\hbar}\sqrt{2m_1m_2m_3}E^{\frac{1}{2}}$

$$E(\vec{K})=\frac{\hbar K_1^2}{2m_1}+\frac{\hbar K_2^2}{2m_2}+\frac{K_3^2}{2m_3}$$

$$\nabla_k E\left(\vec{K}\right)=\frac{\partial E}{\partial k_1}\vec{k}_1+\frac{\partial E}{\partial k_2}\vec{k}_2+\frac{\partial E}{\partial k_3}\vec{k}_3$$

$$=\frac{\hbar k_1}{m_1}k_1+\frac{\hbar k_2}{m_2}k_2+\frac{\hbar k_3}{m_3}k_3$$

$$=\vec{v}\left(k\right)$$

磁感应强度$\vec{B}=B\left(\overrightarrow{K_1}\alpha+\overrightarrow{K_2}\beta+\overrightarrow{K_3}\gamma\right)$代入电子运动方程：$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt}=-q\vec{v}\times\vec{B}$

应用： $\vec{k}_1\times\vec{k}_2=\vec{k}_3$ 带入运动方程：

$$\frac{d\overrightarrow{K}}{dt}=-q\beta\left[\left(\frac{K_1}{m_1}\overrightarrow{K_1}+\frac{K_2}{m_2}\overrightarrow{K_2}+\frac{K_3}{m_3}\overrightarrow{K_3}\right)\times\left(\overrightarrow{K_1}\alpha+\overrightarrow{K_2}\beta+\overrightarrow{K_{3\gamma}}\right)\right]\Rightarrow$$

$$\frac{dK_1}{dt}=-qB\left(\frac{K_2}{m_2}\gamma-\frac{K_3}{m_3}\beta\right)\frac{dK_2}{dt}=-qB\left(\frac{K_3}{m_3}\alpha-\frac{K_1}{m_1}\gamma\right)\frac{dK_3}{dt}=-qB\left(\frac{K_1}{m_1}\beta-\frac{K_2}{m_2}\alpha\right)$$

令 $K_1=K_1^0e^{i\omega t}$ $K_2=K_2^0e^{i\omega t}$ $K_3=K_3^0e^{i\omega t}$

即：$i\omega K_1^0+\frac{qB\gamma}{m_2}K_2^0-\frac{qB\beta}{m_3}K_3^0=0$

$$i\omega K_2^0+\frac{qB\gamma}{m_3}K_3^0-\frac{qB\gamma}{m_1}K_1^0=0$$

$$i\omega K_3^0+\frac{qB\beta}{m_1}K_1^0-\frac{qB\alpha}{m_2}K_2^0=0$$

由系数行列式为零

$$\begin{vmatrix} i\omega & \frac{qB\gamma}{m_2} & -\frac{qB\gamma}{m_3} \\ -\frac{qB\gamma}{m_1} & i\omega & \frac{qB\alpha}{m_3} \\ \frac{qB\beta}{m_1} & -\frac{qB\alpha}{m_2} & i\omega \end{vmatrix}=0$$

$$\therefore i\omega\left\{-\omega^2+\frac{(qB)^2}{m_2m_3}\alpha^2+\frac{(qB)^2}{m_1m_2}\gamma^2+\frac{(qB)^2}{m_1m_3}\beta^2\right\}=0 \qquad \omega=0\text{无意义}$$

$$\omega=qB\left(\frac{1}{m_2m_3}\alpha^2+\frac{1}{m_1m_2}\gamma^2+\frac{1}{m_1m_3}\beta^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega = \frac{qB}{\omega^*} \qquad m^* = \left[\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1\alpha^2 + m_2\beta^2 + m_3\gamma^2} \right]^{\frac{1}{2}}$$

4.14 一维金属的 peierls 失稳（详见基泰尔《固体物理导论》10.7 式）

考虑一维金属电子气费米波矢为 k_F，满足自由电子能谱 $E(k) = \frac{\hbar}{2m} k$ 如果一维晶格由电子气相互作用产生的周期形变为 $\Delta\cos 2k_F x$，其弹性能可表示为 $E_{弹} = \frac{1}{2}c\Delta^2 < \cos^2 2k_F x \geq \frac{1}{4}c\Delta^2$ 该形变同时使电子处在一个周期势场 $V(x) = 2A\Delta\cos 2k_F x$ 中 $V(x) = 2A\Delta\cos 2k_F x$

试计算：

（a）在该周期势作用下电子在附近的能谱；

（b）对系统的电子能量和形变能求导，求出系统的最低能量所对应的型变；

（c）在 $\hbar \quad r \quad mA^2 >> 1$ 时，形变 Δ 的表达式为 $\Delta = -2\hbar \quad r \quad e^{-\hbar\ r} \quad \tau A^2$；

解：考虑一个一维金属，在绝对零度下其中电子充满所有导带轨道直到波矢 k_F，peierls 提出这样一个线性金属在波矢为 $G = 2k_F$ 的周期性静态点阵下是不稳定的，这个形变在费米面上产生能隙，使能隙下面的能量降低，形变继续增大，直到被弹性能的增加所限止平衡形变 Δ 由 $\frac{d}{d\Delta}(E_{电} + \mathrm{E}_{弹}) = 0$ 确定

假定使导电子感受到的点阵位势比倒于形变：$V(x)2A\Delta\cos 2k_F x$

根据 $\varepsilon_k = \frac{\hbar}{2m}\left(k_F + V\right) \pm \left[4\left(\hbar \quad r\right) 2\left(\frac{\hbar}{2m}\right) + A\ \Delta \right]^{\frac{1}{}}$ 并定义 $x_k = \frac{\hbar}{m}$

$$x_F = \frac{\hbar \quad r}{m} \quad x = \frac{\hbar \quad r}{m} \quad \frac{d\varepsilon_k}{d\Delta} = \frac{\Delta}{\left(x_F x_k + A^2\Delta^2\right)^{\frac{1}{2}}}$$

$\therefore$ 单位长度中轨道数目为 $\frac{1}{\pi}$，可得：

$$\frac{dE_{弹}}{\mathrm{d}\Delta} = \frac{2}{\pi}\int_0^{k_F} dk \frac{d\varepsilon_k}{d\Delta} = \left(\frac{2A^2\Delta}{\pi}\right)\int_0^{k_F} \frac{dk}{\left(x_F x_k + A^2\Delta^2\right)^{\frac{1}{2}}}$$

$$= \left(\frac{k_F}{x_F}\right)\int_0^{x_F} \frac{dx}{\left(x^2 + A^2\Delta^2\right)^{\frac{1}{2}}} = \left(\frac{k_F}{x_F}\right)\sinh^{-1}\left(\frac{x_F}{A\Delta}\right)$$

$\therefore$ 平衡方程化为：$\frac{1}{2}c\Delta + \left(2A^2 mA/\pi\hbar \quad r\right) \quad {}^{-1}\left(\frac{\hbar \quad r}{mA\Delta}\right) = 0$

相应于能量极小的Δ由 $\frac{\hbar \quad _r}{mA\Delta} = \sinh\left(\frac{\hbar \quad _r}{4mA^2} \right)$ 如果 $\frac{-\hbar \quad _r}{4mA^2} >> 1$

$$\therefore A\Delta \approx \left(\frac{2\hbar \quad _r}{m} \right) e^{\;_{nv_F}\pi c/4mA^2}$$

第五章　金属电子论

5.1　设一个二维自由电子气系统，每单位面积中的电子数为 n，试求出该系统的

（a）能级密度 N（E）；

（b）费米能（化学式）　$E_F(T) = K_BT\ln\left[\exp\left(\frac{nh^2}{4\pi mK_BT}\right) - 1\right]$

解：二维电子气能太密度　$N(E) = \frac{mS}{\pi\hbar}$

　　则单位面积金属的电子总数：

$$n = \frac{1}{s}\int_0^{\infty} N(E)f(E)dE$$

$$= \frac{m}{\pi\hbar}\int^{\infty} \frac{dE}{\quad _F)/K_BT} + 1}$$

令：　$x = \frac{E - E_F}{K_BT}$

$$n = \frac{mK_BT}{\pi\hbar}\int^{\infty}_{\quad _BT} \frac{dx}{e^x + 1}$$

$$= \frac{mK_BT}{\pi\hbar}\int^{\infty}_{\quad _BT} \frac{e^{-x}dx}{e^{-x} + 1}$$

$$= -\frac{mK_BT}{\pi\hbar}\ln\left(1 + e^{-x}\right)\Big|_{-E_F/K_BT}^{\infty}$$

$$= \frac{mK_BT}{\pi\hbar}\ln\left(1 + e^{E_F/K_BT}\right)\Big|$$

$$1 + e^{\frac{E_F}{K_BT}} = e^{\frac{n\pi\hbar}{mK_BT}} \qquad \therefore E_F = K_BT\ln\left(e^{\frac{n\pi\hbar}{mK_BT}} - 1\right)$$

5.2　设阻尼项为 $-m^*\vec{v}/\tau$，试证明：当 $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$，$\vec{B} = (0.0.B)$ 时电导率公式为

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma}{1+(\omega_c\tau)^2}\begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+(\omega_c\tau)^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$ 其中 $\sigma = ne^2\tau / m^*$， $\omega_c = eB / m^*$

证明：由 $m\left(\frac{d}{d\tau}+\frac{1}{\tau}\right)\vec{v} = -e\left(\vec{E}+\vec{v}\times\vec{B}\right)$

在 x, y 平面： $\begin{cases} m\left(\frac{d}{d\tau}+\frac{1}{\tau}\right)v_x = -e\left(E_x + Bv_y\right) \\ m\left(\frac{d}{d\tau}+\frac{1}{\tau}\right)v_y = -e\left(E_y - Bv_x\right) \end{cases}$

∴ $\begin{cases} v_x = \frac{-e\tau E_x}{m} - \omega_c\tau v_y \\ v_y = \frac{-e\tau E_y}{m} + \omega_c\tau v_x \end{cases}$

在 z 方向上： $m\left(\frac{d}{d\tau}+\frac{1}{\tau}\right)v_z = -eE_z$

在恒定电场的定态情况： $\frac{dv_z}{d\tau} = 0$ ∴ $v_z = \frac{-\tau eE_z}{m}$

$J_z = -nev_z = \frac{ne^2\tau}{m}\vec{E}$

∴ $J_x = -nev_x \quad J_y = -nev_y$

∴ $$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma}{1+(\omega_c\tau)^2}\begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+(\omega_c\tau)^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

5.3 用电子漂移速度 $\vec{V}$ 的方程 $m^*\left(\frac{dV}{dt}+\frac{V}{\tau}\right) = -eE$ 证明：频率为 ω 的电导率为

$\sigma(\omega) = \sigma(0)\frac{1+i\omega t}{1+(\omega t)^2}$ ，其中 $\sigma(0) = ne^2\tau / m*$

证明：电子源移速度： $m\left(\frac{d\vec{V}_d}{dt}+\frac{\vec{r}}{\tau}\right) = -e\varepsilon \qquad \sigma(\omega) = \sigma(0)\left[\frac{1+i\omega t}{1+(\omega t)^2}\right]$

设交变电场： $\varepsilon = \varepsilon_0 e^{i\omega t}$

$$\therefore m\left(\frac{d\vec{V}_d}{dt}+\frac{\vec{r}_d}{\tau}\right)=-\frac{e}{m}\varepsilon_0 e^{i\omega t}$$

设上式特解为： $Ae^{i\omega t}$

$$\therefore i\omega A+\frac{A}{\tau}=-\frac{e\varepsilon_0}{m} \qquad \therefore A=-\frac{e\tau\varepsilon_0}{m\left(1+i\omega t\right)}$$

$\dfrac{d\vec{V}_d}{dt}+\dfrac{\vec{V}_d}{\tau}=0 \qquad \therefore \vec{B}\cdot e^{\ \tau}$ 为 $\vec{V}_d$ 的通解

$$\therefore \vec{V}_d=\vec{B}\cdot e^{\ \tau}-\frac{e\tau\varepsilon_0}{m\left(1+i\omega t\right)}e^{i\omega t}$$

当电子达到稳定时： $t\to\infty$

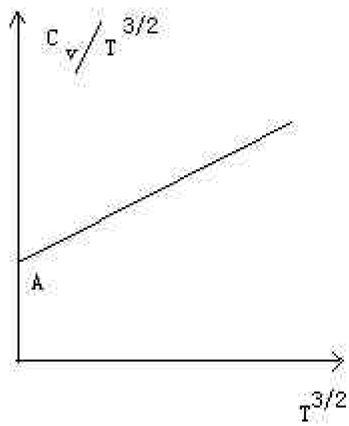
$$\vec{V}_d=-\frac{e\tau\varepsilon_0}{m\left(1+i\omega t\right)}e^{i\omega t}$$

$$\vec{J}=-ne\vec{V}_d=\frac{ne^2\tau\varepsilon_0 e^{i\omega t}}{m\left(1+i\omega t\right)}=\sigma\left(\omega\right)\varepsilon$$

$\sigma\left(\omega\right)=\sigma\left(0\right)\left[\dfrac{1-i\omega t}{1+\left(\omega t\right)^2}\right]$ 其中： $\sigma\left(0\right)=\dfrac{ne^2\tau}{m}$

$$\varepsilon=\varepsilon_0 e^{-i\omega t} \qquad \sigma\left(\omega\right)=\sigma\left(0\right)\left[\frac{1+i\omega t}{1+\left(\omega t\right)^2}\right]$$

5.4 在低温下实验测出某绝缘晶体的比热容与温度的关系 $C_v/T^{3/2}-T^{3/2}$ 为一直线，斜率为 B 截距为 A，如图所示



（a）写出低温下 C_v 与 T 的关系；

（b）若已知直线的斜率部分来源于声子对比热容的贡献，求 B 与德拜温度 θ_D 的关系；

（c）设截距部分来源于某波色子对比热容的贡献，试估计该准粒子的色散关系

$\omega\approx q^{\mu}$ 中的 $\mu=?$

解： $C_v/T^{\frac{3}{2}}+A \quad \therefore C_v=BT^3+AT^{\frac{3}{2}}$

又根据德拜模型，在低温下 $C_v = \frac{12\pi^4 NK_B}{5}\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$

$\therefore\ B = \frac{12\pi^4 NK_B}{5}\frac{1}{\Theta_D^3} \quad \Theta_D = \left(\frac{12\pi^4 NK_B}{5B}\right)^{\frac{1}{3}}$

又 $AT^{\frac{3}{2}}$ 来自声子对比热容的贡献

如 3.7 题在 d 维晶格中，设 $\omega \propto q^{\mu} \quad C_v \propto T^{\frac{d}{\mu}}$ 截距部分比热容 $AT^{\frac{3}{2}}$

又因为三维晶格 $d = 3 \ \therefore\ \mu = 2 \ \therefore\ \omega \approx q^2$

目 录

第一章　晶体的结构及其对称性 1

第二章　晶体的结合 9

第三章　晶格动力学和晶体的热学性质 12

第四章　能带论 26

第五章　金属电子论 41

致 谢

时间就像被不断拨动的钟，无论你在干什么都感觉到它的流逝，趟过时间的河流不知不觉我们的大学的生活已即将结束。在大学的四年中无论是专业知识还是对人生价值的认识都得到很大提高。

首先感谢培养了我们四年的母校——伊犁师范学院，再次感谢物理科学与技术学院各位领导及老师的大力支持，感谢你们为我们提供了优良的学习环境，感谢学院各位老师四年来对我们的栽培，使我们拥有了一定的专业知识和技能。

本次论文是在赵新军老师的悉心指导下完成的，赵老师学识渊博，理论功底深厚，教学严谨认真。在完成这篇论文的过程中，尽管他教学工作非常繁忙，但还是给予了我耐心的指导，对论文初稿进行了认真审阅，并对论文初稿提出了十分宝贵的修改意见，在我的论文的撰写过程中，老师花费了很多的时间和精力进行指导。在此，我谨向我的指导老师赵新军老师致以我诚挚的谢。

感谢所有老师、同学、朋友、及所有关心我和对我提供帮助的人。愿他们接受我最诚挚的谢意。