

固体物理习题解答（参考答案）

季正华（13852727010）

第一章 晶体结构

1. 1如果将等体积球分别排列下列结构, 设 x 表示刚球所占体积与总体积之比, 证明

结构	X
简单立方	$\pi/6 \approx 0.52$
体心立方	$\sqrt{3}\pi/8 \approx 0.68$
面心立方	$\sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$
六方密排	$\sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$
金刚石	$\sqrt{3}\pi/16 \approx 0.34$

解: 设 n 为一个晶胞中的刚性原子数, r 表示刚性原子球半径, V 表示晶胞体积,

则致密度为: $\rho = \frac{n \cdot 4\pi r^3/3}{V}$ (设立方晶格的边长为 a)

(1) 简单立方(书P2, 图1-2)

r 取原子球相切时的半径, $r=a/2$, $n=1$, $V=a^3$, 所以 $\rho = \frac{n \cdot 4\pi r^3/3}{V} = \pi/6$

(2) 体心立方(书P3, 图1-3)

r 取原子球相切时的半径 (体对角线的 $1/4$), $r=\sqrt{3}a/4$, $n=2$, $V=a^3$ 所以

$$\rho = \frac{n \cdot 4\pi r^3/3}{V} = \sqrt{3}\pi/8$$

(3) 面心立方(书P4, 图1-7)

r 取原子球相切时的半径 (面对角线的 $1/4$) $r=\sqrt{2}a/4$, $n=4$, $V=a^3$, 所以

$$\rho = \frac{n \cdot 4\pi r^3 / 3}{V} = \sqrt{2}\pi / 6$$

(4) 六方密排 (书P4, 图1-6)

r 取原子球相切时的半径 (正四面体四个顶点处的原子球相切), $r=a/2$, $n=2$, V 为正四面

$$\text{体的体积 } V = \sqrt{2}a^3 \text{ 所以 } \rho = \frac{n \cdot 4\pi r^3 / 3}{V} = \sqrt{2}\pi / 6$$

(5) 金刚石 (书P5, 图1-8)

r 取原子球相切时的半径 ($8r = \sqrt{3}a$), $r = \sqrt{3}a / 8$, $n=8$, $V = a^3$ 所以

$$\rho = \frac{n \cdot 4\pi r^3 / 3}{V} = \sqrt{3}\pi / 16$$

1.2 证明理想的六角密堆积结构 (hcp) 的轴比 $c/a = (8/3)^{1/2} = 1.633$ 。

解: 见补充题 103

1.3 证明: 体心立方晶格的倒格子是面心立方; 面心立方晶格的倒格子是体心立方

证明: 由倒格子定义:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}; \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}; \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$$

$$\text{体心立方晶格原胞基矢 } \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

$$\text{体心立方晶格原胞体积 } \Omega = \frac{1}{2}a^3$$

$$\text{倒格子基矢: } \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{\Omega} \cdot \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \times \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

$$= \frac{2\pi}{\Omega} \cdot \frac{a^2}{4}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \times (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k})$$

同理: $\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{k})$; $\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$

可见由 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 为基矢构成的格子为面心立方格子。

面心立方格子原胞基矢: $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$, $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k} + \vec{i})$, $\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$

面心立方格子原胞体积: $\Omega = \frac{1}{4}a^3$

倒格子基矢: $\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$, $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$

同理 $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$, $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$

可见由 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 为基矢构成的格子为体心立方格子。

1.4 证明倒格子原胞体积为 $v_c^* = \frac{(2\pi)^3}{v_c}$, 其中 v_c 为正格子原胞的体积。

倒格子基矢 $\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$; $\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$; $\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$

倒格子体积: $v_c^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{v_c^3} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$

$\vec{A} \times \vec{B} \times \vec{C} = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}$

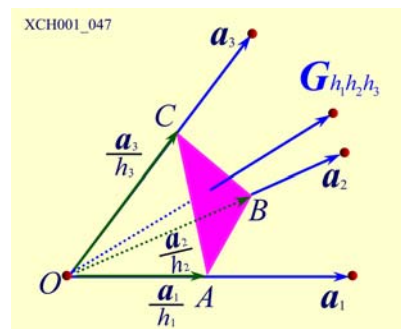
$(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_2]\vec{a}_1 - [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_1]\vec{a}_2 = \Omega \vec{a}_1$

$v_c^* = \frac{(2\pi)^3}{v_c^2} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot \vec{a}_1 = \frac{(2\pi)^3}{v_c}$

1.5证明: 倒格子矢量 $\vec{G} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ 垂直于密勒指数为 (h_1, h_2, h_3) 的晶面系。

解: 因为 $\vec{CA} = \frac{\vec{a}_1}{h_1} - \frac{\vec{a}_3}{h_3}$, $\vec{CB} = \frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_3}{h_3}$

容易证明 $\vec{G}_{h_1h_2h_3} \cdot \vec{CA} = 0$
 $\vec{G}_{h_1h_2h_3} \cdot \vec{CB} = 0$ 所以



$\vec{G} = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ 垂直于密勒指数为 (h_1, h_2, h_3) 的晶面系。

1.6 如果基矢 $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ 构成简单正交系，证明晶面族 (hkl) 的面间距为：

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

并说明面指数简单的晶面，其面密度比较大，容易解理解：简单正交系

$$\vec{a} \perp \vec{b} \perp \vec{c}, \quad \vec{a}_1 = a\vec{i}, \quad \vec{a}_2 = b\vec{j}, \quad \vec{a}_3 = c\vec{k} \quad \text{倒格子基矢} \quad \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3},$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$$

$$\text{倒格子基矢} \quad \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i}, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{b}\vec{j}, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c}\vec{k}$$

$$\text{倒格子矢量} \quad \vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3, \quad \vec{G} = h\frac{2\pi}{a}\vec{i} + k\frac{2\pi}{b}\vec{j} + l\frac{2\pi}{c}\vec{k}$$

$$\text{晶面族} (hkl) \text{ 的面间距} \quad d = \frac{2\pi}{|\vec{G}|} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

—— 面指数越简单的晶面，其晶面的间距越大，晶面上格点的密度越大，这样的晶面越容易解理

1.7 sc, bcc和fcc点阵地第n近邻距离 用 N_n 表示一个给定的布拉菲点阵的第n近邻（例如，在简立方布拉菲点阵中， $N_1=6, N_2=12$ 等），令 r_n 为以最近邻距离的倍数表示的第n近邻距离（例如，在sc点阵中， $r_1=1, r_2=\sqrt{2}=1.414$ ），对于sc, bcc和fcc布拉菲点阵作一个表示 N_n, r_n 值的表（ $n=1, 2, 3, 4, 5, 6$ ）。

解：见下表：

n	sc		bcc		fcc	
	第 n 近邻数	第 n 近距离	第 n 近邻数	第 n 近距离	第 n 近邻数	第 n 近距离
1	6	1	8	1	12	1
2	12	$\sqrt{2}$	6	$\sqrt{3}/4$	6	$\sqrt{2}$
3	8	$\sqrt{3}$	12	$\sqrt{8/3}$	24	$\sqrt{3}$
4	6	$\sqrt{4}$	24	$\sqrt{11/3}$	12	$\sqrt{4}$
5	24	$\sqrt{5}$	8	$\sqrt{12/3}$	24	$\sqrt{5}$
6	24	$\sqrt{6}$	6	$\sqrt{16/3}$	8	$\sqrt{6}$

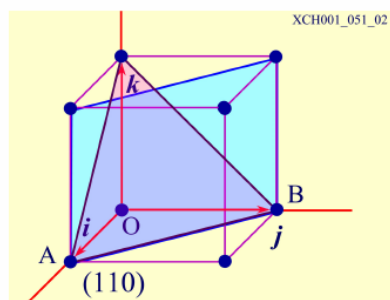
1.8 画出体心立方和面心立方晶格结构的金属在 (100), (110), (111) 面上的原子排列。(解答略)

1.9 指出立方晶格 (111) 面与 (100) 面, (111) 面与 (110) 面的交线的晶向。

如图 XCH_001_051_01 所示 (111) 面与 (100) 面的交线的晶向为 \overline{AB}

将 \overline{AB} 平移, A 点到原点 O, B 点的位矢: $\vec{R}_B = -a\vec{j} + a\vec{k}$

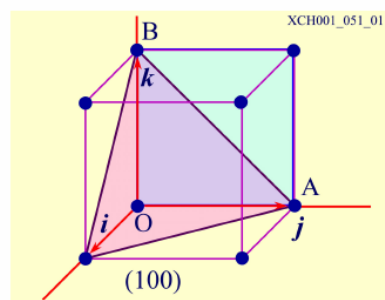
因此, (111) 面与 (100) 面的交线的晶向: $\overline{AB} = -a\vec{j} + a\vec{k} \rightarrow [0\bar{1}1]$



如图 XCH_001_051_02 所示 (111) 面与 (110) 面的交线的晶向 \overline{AB}

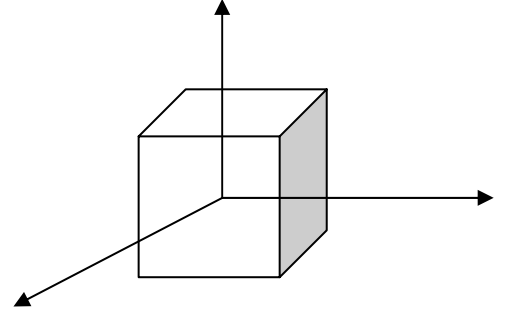
将 \overline{AB} 平移, A 点到原点 O, B 点的位矢: $\vec{R}_B = -a\vec{i} + a\vec{j}$

因此, (111) 面与 (110) 面的交线的晶向: $\overline{AB} = -a\vec{i} + a\vec{j} \rightarrow [\bar{1}10]$



1.10 找出立方体中保持 x 轴不变得所有对称操作，并指出它们中任意两个操作乘积的结果。

解：立方体中保持 x 轴不变，可绕 x 轴转动 $\pi/2$ 、 π 、 $3\pi/2$ ，再加上不动 C_1 ，所有对称操作构成群 C_4 ， $C_4 = (C_1, C_2, C_3, C_4)$ 群中任意两个元素的乘积仍然是群中的元素（具体过程乘积在此省略，请验证）。



1.11 证明六角晶体的介电常数张量为 $\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}$

证明：若 \vec{A} 是一旋转对称操作，则晶体的介电常数 ε 满足 $\vec{\varepsilon} = \vec{A}^T \vec{\varepsilon} \vec{A}$ ，对六角晶系，绕 x 轴（即 \vec{a} 轴）旋转 180 度和绕 z 轴（即 \vec{c} 轴）旋转 120 度都是对称操作，坐标变换矩阵分别为：

$$\vec{A}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \vec{A}_z = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

假设六角晶系的介电常数为 $\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$

则由 $\vec{\varepsilon} = \vec{A}_x^T \vec{\varepsilon} \vec{A}_x$ 得

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & -\varepsilon_{12} & -\varepsilon_{13} \\ -\varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ -\varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \text{ 可见 } \varepsilon_{21} = 0, \varepsilon_{12} = 0, \varepsilon_{13} = 0, \varepsilon_{31} = 0, \text{ 则}$$

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ 0 & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

将上式代入 $\bar{\varepsilon} = A_z^T \varepsilon A_z$ 得

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ 0 & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\varepsilon_{11} + \frac{3}{4}\varepsilon_{22} & -\frac{\sqrt{3}}{4}\varepsilon_{11} + \frac{\sqrt{3}}{4}\varepsilon_{22} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{23} \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}\varepsilon_{11} + \frac{\sqrt{3}}{4}\varepsilon_{22} & \frac{3}{4}\varepsilon_{11} + \frac{1}{4}\varepsilon_{22} & -\frac{1}{2}\varepsilon_{23} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}\varepsilon_{32} & -\frac{1}{2}\varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

由上式可得 $\varepsilon_{23} = 0, \varepsilon_{32} = 0, \varepsilon_{11} = 0$

$$\text{可得六角晶系的介电常数为 } \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

选择相应的坐标变换即可得到 $\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_2 \end{pmatrix}$ ，原命题得证。

1.12 比较面心立方晶格、金刚石晶格、闪锌矿晶格、NaCl 晶格的晶系、布拉伐格子、平移群、点群、空间群。

晶格	晶系	布拉伐格子	点群	空间群
面心立方晶格	立方	面心立方	O_h	F_{m3m}
金刚石晶格	立方	面心立方	O_h	F_{d3m}
闪锌矿晶格	立方	面心立方	T_d	F_{43m}
NaCl 晶格	立方	面心立方	O_h	F_{m3m}

补充题 101 具有笛卡儿坐标 (n_1, n_2, n_3) 的所有点形成什么样的布拉菲菲点阵：如果 (a) n_i 或全为奇数，或全为偶数，(b) 要求 $\sum_i n_i$ 为偶数。

[解]

(a) 若 n_i ($i=1,2,3$) 全为偶数, 则点阵矢量 \vec{R} 可以写为 $\vec{R}=(2l,2m,2n)$,

这里 l,m,n 为整数, 于是有 $\vec{R}=l(2\vec{i})+m(2\vec{j})+n(2\vec{k})=l\vec{a}_1+m\vec{a}_2+n\vec{a}_3$

$$a_1=a_2=a_3=2$$

显然 R 定义的是一个点阵常数为 2 的 SC 点阵。

若 n_i ($i=1,2,3$) 全为奇数, 则点阵矢量 \vec{R}

$\vec{R}=l(2\vec{i})+m(2\vec{j})+n(2\vec{k})+(\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})$ 。由 \vec{R} 所定义的也是一个点阵常数为

2 的 SC 点阵, 但相对于上面一个 SC 点阵位移了一个矢量 $(\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})$,

这个点正好位于体心位置。上面两个 SC 点阵穿套起来正好是一个 bcc

点阵, 故 n_i 或全为奇数, 或全为偶数所定义的是一个 bcc 点阵。

(2) 若 $\sum_i n_i = n_1 + n_2 + n_3 = 2N$ 为偶数。于是点阵矢量为

$$\begin{aligned}\vec{R} &= n_1\vec{i} + n_2\vec{j} + (2N - n_1 - n_2)\vec{k} \\ &= n_1\vec{i} + n_2\vec{j} + [(N - n_1) + (N - n_2)]\vec{k}\end{aligned}$$

令 $l = N - n_1, m = N - n_2$, 则有

$$\vec{R} = (N - l)\vec{i} + (N - m)\vec{j} + (l + m)\vec{k}$$

又令 $n = N - l - m, n$ 仍为整数, 则有

$$\vec{R} = (n + m)\vec{i} + (n + l)\vec{j} + (l + m)\vec{k}$$

$$\vec{R} = n(\vec{i} + \vec{j}) + l(\vec{j} + \vec{k}) + m(\vec{k} + \vec{i})$$

由于 fcc 点阵的矢量是

$$\vec{R} = \frac{a}{2}n_1(\vec{i} + \vec{j}) + \frac{a}{2}n_2(\vec{j} + \vec{k}) + \frac{a}{2}n_3(\vec{k} + \vec{i}), \text{ 可见上述定义的是一个点阵常数}$$

$a=2$ 的 fcc 点阵。

补充题 102 六角密堆积结构

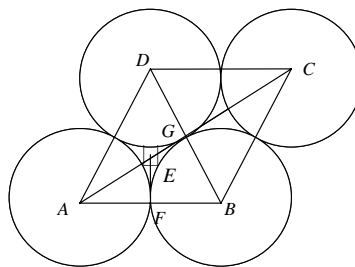
(1) 证明理想的六角密堆积结构 (hcp) 的轴比 $c/a = (8/3)^{1/2} = 1.633$ 。

(2) 钠在 23K 附近从 bcc 结构转变为 hcp 结构 (马氏体相变)，假设在此相变过程中保持密度不变，求 hcp 相变的点阵常数 a 。已知 bcc 相的点阵常数是 4.23 埃，且 hcp 相的 c/a 比值与理想值相同。

[解]

$$AE = 2/3 AG = 2/3 \frac{\sqrt{3}}{2} a = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

$$FE = \frac{c}{2} = \sqrt{\frac{2}{3}} a$$



因此

$$c/a = 2\sqrt{6}/3 = 1.633.$$

(b) 设钠在 bcc 相的点阵常数为 a' ，初基晶胞体积为 $V_e' = \frac{1}{2} a'^3$ 。在 hcp 相，初基晶胞体积为 $V_e = a^2 c \sin 60^\circ = a^3 (\sqrt{8/3} \sqrt{3}/2) = \sqrt{2} a^3$ 。

由相变过程密度不变 $\frac{1}{V_e'} = \frac{2}{V_e}$ 。

因为 bcc 相的每个初基晶胞中包含一个钠原子，而 hcp 相的每个初基

晶胞中包含两个钠原子。 $\frac{2}{a'^3} = \frac{2}{\sqrt{2} a^3}, a = a' 2^{-1/6} \approx 3.77$ 埃

所以 hcp 相的点阵常数 $a = 3.77, c = 6.16$ 埃。

补充题 103 晶体结构的堆积比率 在 sc, bcc 和 fcc 结构中, fcc 是原子排列密积的, sc 是最稀疏的, 它们的配位数分别是 fcc-12, bcc-8, sc-6; 而金刚石结构比简立方结构还要稀疏, 配位数是 4。如果把同样的硬球放置在这些结构原子所在的位置上。球的体积取得尽可能大, 以使最近邻的球正好接触, 但彼此并不重叠。我们把

一个晶胞中被硬球占据的体积和晶胞体积之比定义为结构的堆积比率（又称最大空间利用率）。证明以上四种结构的堆积比率是

$$\text{fcc: } \frac{\sqrt{2}}{6}\pi = 0.74,$$

$$\text{bcc: } \frac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0.68,$$

$$\text{sc: } \frac{1}{6}\pi = 0.52,$$

$$\text{金刚石: } \frac{\sqrt{3}}{16}\pi = 0.34。$$

[证明]

令 Z 表示一个立方晶胞中的硬球数， N_i 是位于晶胞内的球数， N_f 是在晶胞面上的球数， N_e 是在晶胞棱上的球数， N_c 是在晶胞角隅上的球数。于是有

$$Z = N_i + \frac{1}{2}N_f + \frac{1}{4}N_e + \frac{1}{8}N_c$$

边长为 a 的立方晶胞中堆积比率为

$$F = Z \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{r}{a}\right)^3。$$

对于 fcc, $Z = 4, a\sqrt{2} = 4r, F = 0.74$;

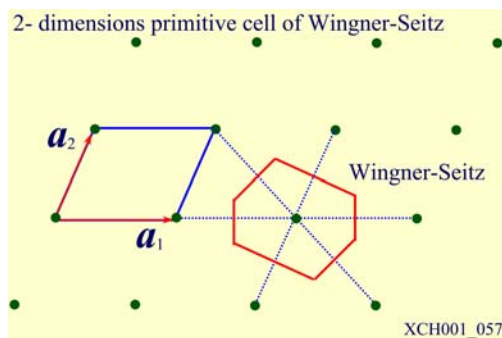
对于 bcc, $Z = 2, a\sqrt{3} = 4r, F = 0.68$;

对于 sc, $Z = 1, a = 2r, F = 0.52$ 。

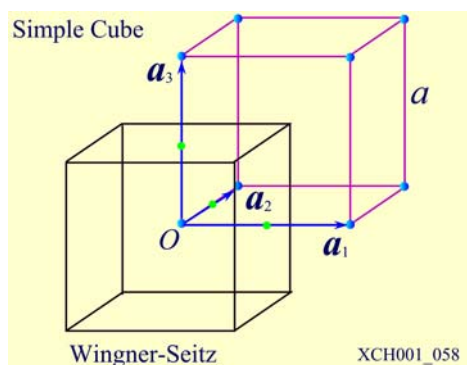
补充题 104 试做出简单立方晶格、面心立方晶格和体心立方晶格的维格纳 — 塞茨原胞(Wigner-Seitz)

解：维格纳—塞茨原胞：选取某一个格点为中心，做出最近各点和次近各点连线的中垂面，这些所包围的空间——维格纳—塞茨原胞

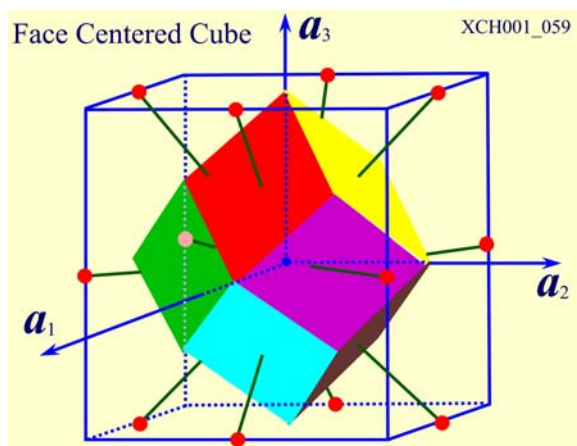
如图所示为一种二维格子的维格纳—塞茨原胞



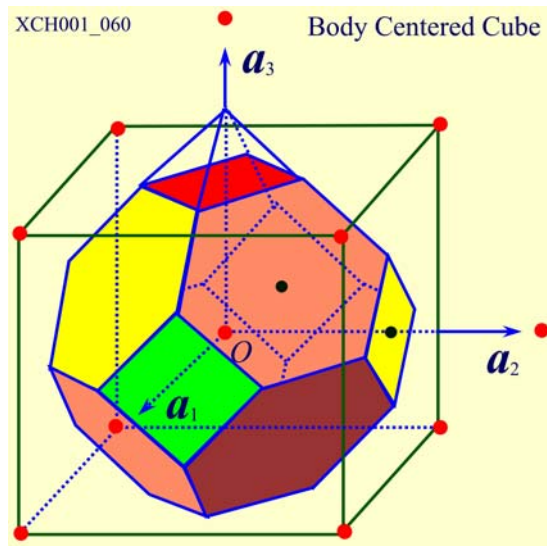
简单立方晶格 维格纳 —— 塞茨原胞为原点和 6 个近邻格点连线的垂直平分面围成的立方体



面心立方格子 维格纳 —— 塞茨原胞为原点和 12 个近邻格点连线的垂直平分面围成的正十二面体



体心立方格子 维格纳 —— 塞茨原胞为原点和 8 个近邻格点连线的垂直平分面围成的正八面体，沿立方轴的 6 个次近邻格点连线的垂直平分面割去八面体的六个角，形成的 14 面体



第二章 晶体的结合

2.1 证明两种一价离子组成的一维晶格的马德隆常数为 $\alpha = 2\ell_n 2$

解：设想一个由正负两种离子相间排列的无限长的离子键，取任一负离子作参考离子（这样马德隆常数中的正负号可以这样取，即遇正离子取正号，遇负离子取负号），用 r 表示相邻离子间的距离，于是有

$$\frac{\alpha}{r} = \sum_j \frac{(\pm 1)}{r_{ij}} = 2 \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{2r} + \frac{1}{3r} - \frac{1}{4r} + \dots \right]$$

前边的因子 2 是因为存在着两个相等距离 r_i 的离子，一个在参考离子左面，一个在其右面，

故对一边求和后要乘 2，马德隆常数为 $\alpha = 2 \left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \right]$

$$\because \ell_n(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$$

当 $x=1$ 时，有 $1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots = \ell_n 2 \therefore \alpha = 2\ell_n 2$

2.2 讨论使离子电荷加倍所引起的对 NaCl 晶格常数及结合能的影响（排斥势看作不变）

解： $u(r) = -\frac{\alpha e^2}{r} + \frac{C}{r^n}$

由 $\frac{du}{dr}|_{r_0} = \frac{\alpha e^2}{r_0^2} - \frac{nC}{r_0^{n+1}} = 0$ 解得 $\frac{\alpha e^2}{r_0^2} = \frac{nC}{r_0^{n+1}} \quad r_0(e) = \left(\frac{nC}{\alpha e^2} \right)^{\frac{1}{n-1}}$

于是当 e 变为 $2e$ 时，有 $r_0(2e) = \left(\frac{nC}{4\alpha e^2} \right)^{\frac{1}{n-1}} = 4^{\frac{1}{n-1}} r_0(e)$

结合能为 $u(r_0) = -\frac{\alpha e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$ 当 e 变为 $2e$ 时，有

$$u(2e) = -\frac{4\alpha e^2}{r_0(2e)} \left(1 - \frac{1}{n} \right) = u(e) \times 4^{\frac{n}{n-1}}$$

2.3 若一晶体两个离子之间的相互作用能可以表示为 $u(r) = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}$

计算：1) 平衡间距 r_0

2) 结合能 W (单个原子的)

3) 体弹性模量

4) 若取 $m=2, n=10, r_0=0.3\text{ nm}, W=4\text{ eV}$ 计算 α, β 的值

解: 1) 平衡间距 r_0 的计算

$$\text{晶体内能 } U(r) = \frac{N}{2} \left(-\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n} \right) \quad \text{平衡条件 } \left. \frac{dU}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \quad \text{即} \quad -\frac{m\alpha}{r_0^{m+1}} + \frac{n\beta}{r_0^{n+1}} = 0$$

$$\text{所以 } r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}}$$

2) 单个原子的结合能

$$W = -\frac{1}{2}u(r_0) \quad u(r_0) = \left(-\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n} \right) \Big|_{r=r_0} \quad r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}}$$

$$W = \frac{1}{2} \alpha \left(1 - \frac{m}{n} \right) \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{-m}{n-m}}$$

3) 体弹性模量

$$K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_{V_0} \cdot V_0$$

晶体的体积 $V = NAr^3$ —— A 为常数, N 为原胞数目

$$\text{晶体内能 } U(r) = \frac{N}{2} \left(-\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n} \right)$$

$$\frac{\partial U}{\partial V} = \frac{\partial U}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial V} = \frac{N}{2} \left(\frac{m\alpha}{r^{m+1}} - \frac{n\beta}{r^{n+1}} \right) \frac{1}{3NAr^2}$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} = \frac{N}{2} \frac{\partial r}{\partial V} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{m\alpha}{r^{m+1}} - \frac{n\beta}{r^{n+1}} \right) \frac{1}{3NAr^2} \right]$$

$$\text{体弹性模量 } K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_{V_0} \cdot V_0 = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-\frac{m^2\alpha}{r_0^m} + \frac{n^2\beta}{r_0^n} - \frac{m\alpha}{r_0^m} + \frac{n\beta}{r_0^n} \right]$$

$$\text{由平衡条件 } \left. \frac{\partial U}{\partial V} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \left(\frac{m\alpha}{r_0^{m+1}} - \frac{n\beta}{r_0^{n+1}} \right) \frac{1}{3NAr_0^2} = 0$$

$$\frac{m\alpha}{r_0^m} = \frac{n\beta}{r_0^n} \quad \left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-\frac{m^2\alpha}{r_0^m} + \frac{n^2\beta}{r_0^n} \right]$$

$$\text{体弹性模量 } K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_{V_0} \cdot V_0 \quad \left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{mn}{9V_0^2} (-U_0)$$

$$K = |U_0| \frac{mn}{9V_0}$$

4) 若取 $m=2, n=10, r_0=0.3 \text{ nm}, W=4 \text{ eV}$ 计算 α, β 的值

$$r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}} \quad W = \frac{1}{2} \alpha \left(1 - \frac{m}{n} \right) \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{-m}{n-m}}$$

$$\beta = \frac{W}{2} r_0^{10} \quad \alpha = r_0^2 \left[\frac{\beta}{r_0^{10}} + 2W \right]$$

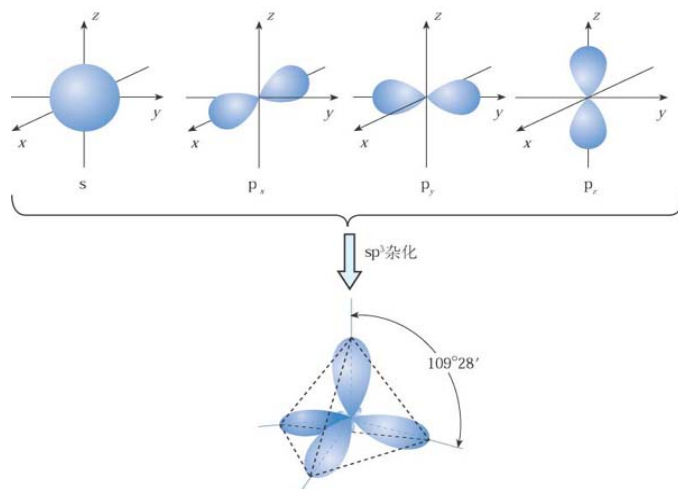
$$\beta = 1.2 \times 10^{-95} \text{ eV} \cdot \text{m}^{10} \quad \alpha = 7.5 \times 10^{-19} \text{ eV} \cdot \text{m}^2$$

2.4 经过 sp^3 杂化后形成的共价键，其方向沿着立方体的四条对角线的方向，求共价键之间的夹角。

解： sp^3 轨道杂化过程形成的共价键如右图所示：

由于形成的是正四面体结构，容易通过几何知识解出键角为

$109^\circ 28'$ (请读者自己推导求解)



2.5 假设 III-V 族化合物中，III 族、V 族原子都是电中性的 ($q^* = 0$)，求出其电离度 f_i 。

解：对于 III 族原子的有效电荷为 $q^* = \left(3 - 8 \frac{\lambda^2}{1 + \lambda^2} \right) = 0$ 解出 $\lambda^2 = 3/5$

根据卡尔森 (Coulson) 定义的电离度, III-V 族化合物 ($q^*=0$) 的电离

$$\text{度为 } f_i = \frac{p_A - p_B}{p_A + p_B} = \frac{1 - \lambda^2}{1 + \lambda^2} = \frac{1 - 3/5}{1 + 3/5} = 1/4 = 0.25$$

2.6 用林纳德 - 琼斯势计算 Ne 在体心立方和面心立方结构中的结合能之比值。

$$\text{解: } u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], u(r) = \frac{1}{2} N(4\varepsilon) \left[A_n \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - A_l \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

$$\left(\frac{du(r)}{dr} \right)_r = 0 \Rightarrow r_0^6 = 2 \frac{A_{12}}{A_6} \sigma^6 \Rightarrow u_0 = -\frac{1}{2} N \varepsilon \frac{A_6^2}{A_{12}}$$

$$\frac{\omega_{bcc}}{\omega_{fcc}} = \left| \frac{u(r_0)_{bcc}}{u(r_0)_{fcc}} \right| = \left(\frac{A_6^2}{A_{12}} \right) / \left(\frac{A_6'}{A_{12}'} \right) = \frac{12.25^2 / 9.11}{14.45^2 / 12.13} = 0.957$$

2.7 对于 H_2 , 从气体的测量得到的林纳德 - 琼斯势参数为

$\varepsilon = 50 \times 10^{-13} J, \sigma = 2.96 \text{ \AA}$ 计算 H_2 结合成面心立方固体分子氢时的结合能 (以千焦耳每摩尔为单位), 每个氢分子可以当作球形来处理, 结合能的实验值为 0.751 kJ/mol , 试与计算值进行比较。

解: 以 H_2 为基团, 组成 fcc 结构的晶体, 如略去动能, 分子间按 Lennard - Jones 势相互作用, 则晶体的总相互作用能为:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{4} N \bullet (4\varepsilon) \left[\sum_i ' P_{ij}^{-12} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \sum_j ' P_{ij}^{-6} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \\ &= 2N\varepsilon \left[\sum_i ' P_{ij}^{-12} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \sum_j ' P_{ij}^{-6} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]. \end{aligned}$$

$$\sum_j ' P_{ij}^{-6} = 14.45392; \sum_i ' P_{ij}^{-12} = 12.13188,$$

$$\varepsilon = 50 \times 10^{-16} \text{ erg}, \sigma = 2.96 \text{ \AA}, N = 6.022 \times 10^{23} / \text{mol}.$$

将 R_0 代入 U 得到平衡时的晶体总能量为

$$U = 2 \times 6.022 \times 10^{23} / \text{mol} \times 50 \times 10^{-16} \text{ erg} \times \left[(12.13) \left(\frac{2.96}{3.16} \right)^{12} - (14.45) \left(\frac{2.96}{3.16} \right)^6 \right] \approx -2.55 \text{ KJ} / \text{mol}.$$

因此，计算得到的 H_2 晶体的结合能为 $2.55 \text{ KJ} / \text{mol}$ ，远大于实验观察值 $0.751 \text{ KJ} / \text{mol}$ 。对于 H_2 的晶体，量子修正是很重要的，我们计算中没有考虑零点能的量子修正，这正是造成理论和实验值之间巨大差别的原因。

第三章 晶格振动与晶体的热学性质

3.1 已知一维单原子链，其中第 j 个格波，在第 n 个格点引起的位移为， $\mu_{nj} = a_j \sin(\omega_j t - naq_j + \sigma_j)$ ， σ_j 为任意个相位因子，并已知在较高温度下每个格波的平均能量为，具体计算每个原子的平方平均位移。

解：任意一个原子的位移是所有格波引起的位移的叠加，即

$$\mu_n = \sum_j \mu_{nj} = \sum_j a_j \sin(\omega_j t + naq_j + \sigma_j) \quad (1)$$

$$\overline{\mu_n^2} = \overline{\left(\sum_j \mu_{nj} \right) \left(\sum_{j'} \mu_{nj'}^* \right)} = \sum_j \overline{\mu_{nj}^2} + \sum_{j \neq j'} \overline{\mu_{nj} \mu_{nj'}^*}$$

由于 $\mu_{nj} \cdot \mu_{nj'}$ 数目非常大的数量级，而且取正或取负几率相等，因此上式得第 2 项与第一项

相比是一小量，可以忽略不计。所以 $\overline{\mu_n^2} = \sum_j \overline{\mu_{nj}^2}$

由于 μ_{nj} 是时间 t 的周期性函数，其长时间平均等于一个周期内的时间平均值为

$$\overline{\mu_j^2} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} a_j^2 \sin^2(\omega_j t + naq_j + \sigma_j) dt = \frac{1}{2} a_j^2 \quad (2)$$

已知较高温度下的每个格波的能量为 KT ， μ_{nj} 的动能时间平均值为

$$\overline{T_{nj}} = \frac{1}{T_0} \int_0^L dx \int_0^{T_0} \left[\frac{1}{2} \rho \left(\frac{d\mu_{nj}}{dt} \right)^2 \right] dt = \frac{\rho \omega_j^2 a_j^2}{2T_0} L \int_0^{T_0} \sin^2(\omega_j t + naq_j + \sigma_j) dt = \frac{1}{4} \rho \omega_j^2 L a_j^2$$

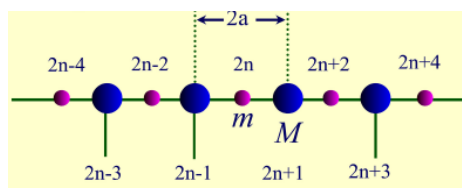
其中 L 是原子链的长度， ρ 是质量密度， T_0 为周期。

$$\text{所以 } \overline{T_{nj}} = \frac{1}{4} \rho \omega_j^2 L a_j^2 = \frac{1}{2} KT \quad (3)$$

因此 将此式代入 (2) 式有 $\overline{\mu_{nj}^2} = \frac{KT}{\rho L \omega_j^2}$

所以每个原子的平均位移为 $\overline{\mu_n^2} = \sum_j \overline{\mu_{nj}^2} = \sum_j \frac{KT}{\rho L \omega_j^2} = \frac{KT}{\rho L} \sum_j \frac{1}{\omega_j^2}$

3.2 讨论 N 个原胞的一维双原子链（相邻原子间距为 a ），其 $2N$ 格波解，当 $M=m$ 时与一维单原子链的结果一一对应。



解：如上图所示，质量为 M 的原子位于 $2n-1, 2n+1, 2n+3 \dots$

质量为 m 的原子位于 $2n, 2n+2, 2n+4 \dots$

牛顿运动方程：

$$m \ddot{\mu}_{2n} = -\beta(2\mu_{2n} - \mu_{2n+1} - \mu_{2n-1})$$

$$M \ddot{\mu}_{2n+1} = -\beta(2\mu_{2n+1} - \mu_{2n+2} - \mu_{2n})$$

体系为 N 个原胞，则有 $2N$ 个独立的方程

$$\text{方程解的形式：} \mu_{2n} = A e^{i[\omega t - (2n)aq]} \quad \mu_{2n+1} = B e^{i[\omega t - (2n+1)aq]}$$

$$\text{将 } \mu_{2n} = A e^{i[\omega t - (2n)aq]} \quad \mu_{2n+1} = B e^{i[\omega t - (2n+1)aq]}$$

代回到运动方程得到

$$\left. \begin{aligned} -m\omega^2 A &= \beta(e^{iaq} + e^{-iaq})B - 2\beta A \\ -M\omega^2 B &= \beta(e^{iaq} + e^{-iaq})A - 2\beta B \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} (2\beta - m\omega^2)A - (2\beta \cos aq)B = 0 \\ -(2\beta \cos aq)A + (2\beta - M\omega^2)B = 0 \end{cases}$$

若 A, B 有非零的解，系数行列式满足：

$$\begin{vmatrix} 2\beta - m\omega^2 & -2\beta \cos aq \\ -2\beta \cos aq & 2\beta - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$\omega^2 = \beta \frac{(m+M)}{mM} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

两种不同的格波的色散关系：

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

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

$$-\frac{\pi}{2a} < q \leq \frac{\pi}{2a} \text{——第一布里渊区}$$

第一布里渊区允许 q 的数目 $\frac{\pi}{a} / \frac{\pi}{Na} = N$

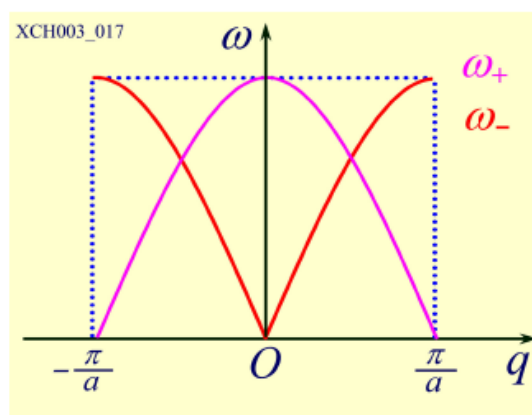
对应一个 q 有两支格波：一支声学波和一支光学波。总的格波数目为 $2N$ 。

当 $M=m$ 时 $\omega^2 = \beta \frac{2}{m} \{1 \pm [1 - \sin^2 aq]^{\frac{1}{2}}\}$

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m} (1 \pm \cos aq)$$

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \cos \frac{aq}{2}$$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \sin \frac{aq}{2}$$



—— 两种色散关系如图所示

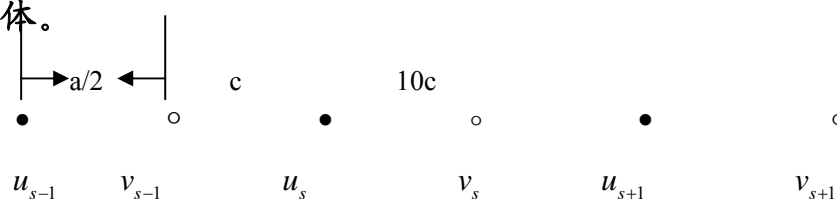
在长波极限($q \rightarrow 0$, $\lambda \gg a$)情况下: 当 $q \rightarrow 0$ $\sin(\frac{qa}{2}) \approx \frac{qa}{2}$, $\omega_- = (2\sqrt{\frac{\beta}{m}})q$

——与一维单原子晶格格波的色散关系一致。

3.3 考虑一双原子链的晶格振动, 链上最近邻原子间力常数交替为 c

和 $10c$. 令两种原子质量相同, 且最近邻间距为 $\frac{a}{2}$. 求在 $k=0$ 和 $k=\frac{\pi}{a}$ 处的 $\omega(k)$. 大略地画出色散关系. 此问题模拟如 H_2 这样的双原子分子晶体。

解



$$\left. \begin{aligned} M \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= C(V_{s-1} - u_s) + 10C(V_s - u_s), \\ M \frac{d^2 V_s}{dt^2} &= 10C(u_s - V_s) + C(u_{s+1} - V_s), \end{aligned} \right\}$$

将 $u_s = u e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t}$, $V_s = V e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t}$ 代入上式有

$$\left. \begin{aligned} -M\omega^2 u &= C(10 + e^{-ika})V - 11Cu, \\ -M\omega^2 V &= C(e^{ika} + 10)u - 11CV, \end{aligned} \right\}$$

是 U, v 的线性齐次方程组, 存在非零解的条件为

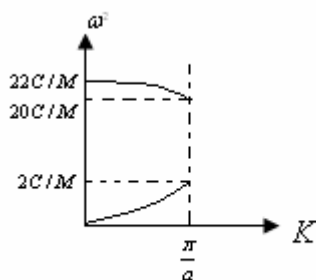
$$\begin{vmatrix} M\omega^2 - 11C, C(10 + e^{-iKa}) \\ C(e^{iKa} + 10), M\omega^2 - 11C \end{vmatrix} = 0, \text{ 解出}$$

$$M^2\omega^4 - 22MC\omega^2 + 20C^2(1 - \cos Ka) = 0$$

$$\therefore \omega_{\pm}^2 = \frac{C}{M} \left[11 \pm \sqrt{121 - 20(1 - \cos Ka)} \right].$$

$$\begin{aligned} \text{当 } K=0 \text{ 时, } \quad \omega_+^2 &= 22C/M, & \omega_+^2 &= 20C/M, \\ \omega_-^2 &= 0, & \text{当 } K=\pi/a \text{ 时 } \quad \omega_-^2 &= 2C/M, \end{aligned}$$

ω^2 与 K 的关系如下图所示. 这是一个双原子(例如 H_2)晶体。

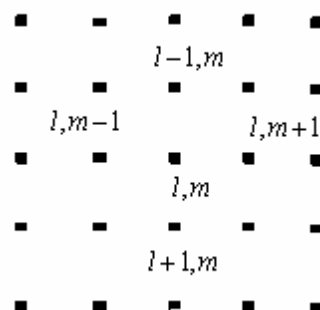


3.4 考虑一个全同原子组成的平面方格子, 用 $\mu_{l,m}$ 记第 l 行, 第 m 列的原子在垂直于格平面的位移, 每个原子质量为 M , 最近邻原子的力常数为 c 。

(a) 证明运动方程为:
$$M \left(\frac{d^2 \mu_{l,m}}{dt^2} \right) = c [(\mu_{l+1,m} + \mu_{l-1,m} - 2\mu_{l,m}) + (\mu_{l,m+1} + \mu_{l,m-1} - 2\mu_{l,m})]$$

(b) 设解的形式为 $\mu_{l,m} = \mu(0) \exp[i(lk_x a + mk_y a - \omega t)]$, 这里 a 是最近邻原子间距, 证明运动方程是可以满足的, 如果

$$\omega^2 M = 2c[2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)] \text{ 这就是色散关}$$



系。

(c) 证明独立解存在的 k 空间区域是一个边长为 $\frac{2\pi}{a}$ 的正方形，这就是平方格子的第一布里渊区，构出 $k = k_x$ ，而 $k_y = 0$ 时，和 $k_x = k_y$ 时的 $\omega - k$ 图。

(d) 对于 $ka \ll 1$ ，证明 $\omega = \left(\frac{ca^2}{M}\right)^{1/2} (k_x^2 + k_y^2)^{1/2} = (ca^2 / M)^{1/2} k$

证明:(a) 左方原子与它的相对位移为 $\mu_{l,m} - \mu_{l,m-1}$ ，右方原子与它的相对位移为 $\mu_{l,m+1} - \mu_{l,m}$ ，上方原子与它的相对位移为 $\mu_{l,m} - \mu_{l-1,m}$ ，下方原子与它的相对位移为 $\mu_{l+1,m} - \mu_{l,m}$ ，并考虑到力的方向性，得到上面平面格子的每个原子的力学方程为：

$$\begin{aligned} M \left(\frac{d^2 \mu_{l,m}}{dt^2} \right) &= c(\mu_{l,m+1} - \mu_{l,m}) - c(\mu_{l,m} - \mu_{l,m-1}) \\ &+ c(\mu_{l+1,m} - \mu_{l,m}) - c(\mu_{l,m} - \mu_{l-1,m}) \quad \text{所以原命题的证。} \\ &= c[(\mu_{l+1,m} + \mu_{l-1,m} - 2\mu_{l,m}) + (\mu_{l,m+1} + \mu_{l,m-1} - 2\mu_{l,m})] \end{aligned}$$

(b) 根据题意， $\mu_{l,m} = \mu(0) \exp[i(lk_x a + mk_y a - \omega t)]$ 为平面格子原子的运动方程

$$\begin{aligned} M \left(\frac{d^2 \mu_{l,m}}{dt^2} \right) &= c[(\mu_{l+1,m} + \mu_{l-1,m} - 2\mu_{l,m})] \text{ 的解,} \\ &+ (\mu_{l,m+1} + \mu_{l,m-1} - 2\mu_{l,m})] \end{aligned}$$

$$\text{因为 } \mu_{l,m} = \mu(0) \exp[i(lk_x a + mk_y a - \omega t)] \quad \text{①}$$

所以可以得到

$$\mu_{l+1,m} = \mu(0) \exp\{i[(l+1)k_x a + mk_y a - \omega t]\} \quad \text{②}$$

$$\mu_{l-1,m} = \mu(0) \exp\{i[(l-1)k_x a + mk_y a - \omega t]\} \quad \text{③}$$

$$\mu_{l,m+1} = \mu(0) \exp[i(lk_x a + (m+1)k_y a - \omega t)] \quad \text{④}$$

$$\mu_{l,m-1} = \mu(0) \exp[i(lk_x a + (m-1)k_y a - \omega t)] \quad \text{⑤}$$

将①②③④⑤式代入平面格子原子的运动方程则容易得到得到色散关系（这里代入过程从略，请自己代入计算）：

$$\omega^2 M = 2c[2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$$

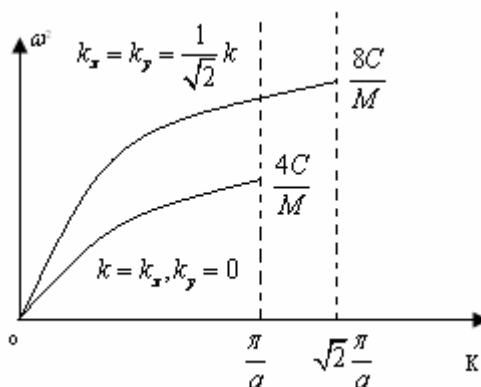
(c) 由色散关系 $\omega^2 M = 2c[2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$ 和周期性边界条件可以得到 $k_x \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$

$k_y \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$, 所以独立解存在的 k

空间区域是一个边长为 $\frac{2\pi}{a}$ 的正方形。

当 $k = k_x$, 且 $k_y = 0$ 时的 $\omega-k$ 图, 和

当 $k_x = k_y$ 时的 $\omega-k$ 图, 如右图所示。



3.5 已知 NaCl 晶体平均每对离子的相互作用能为 $U(r) = -\frac{\alpha e^2}{r} + \frac{\beta}{r^n}$ 其中

马德隆常数 $\alpha = 1.75$, $n=9$, 平均离子间距 $r_0 = 2.82 \text{ \AA}$ 。

(1) 试求离子在平衡位置附近的振动频率

(2) 计算与该频率相当的电磁波的波长, 并与 NaCl 红外吸收频率的测量值 61μ 进行比较。

3.6 计算一维单原子链的频率分布函数 $\rho(\omega)$

解: 设单原子链长度 $L = Na$

波矢取值 $q = \frac{2\pi}{Na} \times h$ 每个波矢的宽度 $q = \frac{2\pi}{Na}$, 状态密度 $\frac{Na}{2\pi}$

dq 间隔内的状态数 $\frac{Na}{2\pi} dq$, 对应 $\pm q$, ω 取相同值

因此 $\rho(\omega) dq = 2 \times \frac{Na}{2\pi} dq$

一维单原子链色散关系, $\omega^2 = \frac{4\beta}{m} \sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$

令 $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\beta}{m}}$, $\omega = \omega_0 \sin\left(\frac{aq}{2}\right)$

两边微分得到 $d\omega = \omega_0 \frac{a}{2} \cos\left(\frac{aq}{2}\right) dq$

将 $\cos\left(\frac{aq}{2}\right) = \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2}}$ 代入到 $d\omega = \omega_0 \frac{a}{2} \cos\left(\frac{aq}{2}\right) dq$

$$d\omega = \frac{a}{2} \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} dq, dq = \frac{2}{a} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$$

$$2 \times \frac{Na}{2\pi} dq = 2 \times \frac{Na}{2\pi} \frac{2}{a} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$$

$$\rho(\omega) = \frac{2N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$$

频率分布函数

3.7 设三维晶格的光学振动在 $q=0$ 附近的长波极限有 $\omega(q) = \omega_0 - Aq^2$

求证: $f(\omega) = \frac{V}{4\pi^2} \frac{1}{A^{3/2}} (\omega_0 - \omega)^{1/2}, \omega < \omega_0$; $f(\omega) = 0, \omega > \omega_0$.

解: $\omega > \omega_0$ 时, $\omega - \omega_0 = Aq^2 > 0, f(\omega) = 0$,

$$\omega < \omega_0 \Rightarrow \omega_0 - \omega = Aq^2 \Rightarrow q = A^{-\frac{1}{2}} (\omega_0 - \omega)^{\frac{1}{2}}$$

依据 $\nabla_q \omega(q) = -2Aq, f(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{s}}{|\nabla_q \omega(q)|}$, 并带入上边结果有

$$f(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{d\vec{s}}{|\nabla_q \omega(q)|} = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{2A^2} 4\pi (\omega_0 - \omega) \frac{A^{1/2}}{(\omega_0 - \omega)^{1/2}} = \frac{V}{(2\pi)^2} \cdot \frac{1}{A^{3/2}} (\omega_0 - \omega)^{1/2}$$

3.8 有 N 个相同原子组成的面积为 S 的二维晶格, 在德拜近似下计算

比热, 并论述在低温极限比热正比与 T^2 。

证明: 在 k 到 $k+dk$ 间的独立振动模式对应于平面中半径 n 到 $n+dn$ 间圆环的面积

$$2\pi n dn, \text{ 且 } 2\pi n dn = \frac{L^2}{2\pi} k dk = \frac{5}{2\pi} k dk \text{ 即 } \rho(\omega) = \frac{3s\omega}{2\pi v_\rho^2} d\omega \text{ 则}$$

$$E = \frac{3s}{2\pi v_\rho^2} \int_0^{\omega_m} \frac{\hbar \omega^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} + E_0 = \frac{3s(k_B T)^3}{2\pi v_\rho^2 \hbar^2} \int_D \frac{\hbar \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 d\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{3s(k_B T)^3}{2\pi v_\rho^2 \hbar^2} \int_D \frac{x^2 dx}{e^x - 1}$$

,

$$T \rightarrow 0 \text{ 时, } E \propto T^3, \therefore C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_s \propto T^2$$

3.9 写出量子谐振子系统的自由能, 证明在经典极限下, 自由能为

$$F \cong U_0 + k_B T \sum_q \ell_n \left(\frac{\hbar \omega_q}{k_B T} \right)$$

$$\text{证明: 量子谐振子的自由能为 } F = U + k_B T \sum_q \left[\frac{1}{2} \frac{\hbar \omega_q}{k_B T} + \ell_n \left(1 - e^{-\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}} \right) \right]$$

经典极限意味着 (温度较高) $k_B T \gg \hbar \omega_g$

应用 $e^x = 1 - x + x^2 + \dots$

$$\text{所以 } e^{-\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}} = 1 - \frac{\hbar \omega_q}{k_B T} + \left(\frac{\hbar \omega_q}{k_B T} \right)^2 + \dots$$

$$\text{因此 } F \cong U + \sum_q \frac{1}{2} \hbar \omega_q + \sum_q k_B T \ell_n \left(1 - 1 + \frac{\hbar \omega_q}{k_B T} \right) \cong U_0 + k_B T \ell_n \left(\frac{\hbar \omega_q}{k_B T} \right)$$

$$\text{其中 } U_0 \cong U + \sum_q \frac{1}{2} \hbar \omega_q$$

3.10 设晶体中每个振子的零点振动能为 $\frac{1}{2} \hbar \omega$, 使用德拜模型求晶体的零点振动能。

证明: 根据量子力学零点能是谐振子所固有的, 与温度无关, 故 $T=0K$ 时振动能 E_0 就是各振

$$\text{动模零点能之和。 } E_0 = \int_0^{\omega_m} E_0(\omega) g(\omega) d\omega \text{ 将 } E_0(\omega) = \frac{1}{2} \hbar \omega \text{ 和 } g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \omega^2 \text{ 代入积分有}$$

分有

$$E_0 = \frac{3V}{16\pi^2 v_s^3} \omega_m^4 = \frac{9}{8} \hbar N \omega_m, \text{ 由于 } \hbar \omega_m = k_B \theta_D \text{ 得 } E_0 = \frac{9}{8} N k_B \theta_D$$

一股晶体德拜温度为 $\sim 10^2 K$, 可见零点振动能是相当大的, 其量值可与温升数百度所需热

能相比拟。

3.11 一维复式格子 $m = 5 \times 1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$, $\frac{M}{m} = 4$, $\beta = 1.5 \times 10^4 \text{ N/m}$ (即 $1.51 \times 10^4 \text{ dyn/cm}$), 求:

- (1) 光学波 $\omega_{\max}^0, \omega_{\min}^0$, 声学波 ω_{\max}^A 。
- (2) 相应声子能量是多少电子伏。
- (3) 在 300K 时的平均声子数。
- (4) 与 ω_{\max}^0 相对应的电磁波波长在什么波段。

解 (1), $\omega_{\max}^A = \sqrt{\frac{2\beta}{M}} = \sqrt{\frac{2 \times 1.5 \times 10^4 \text{ dyn/cm}}{4 \times 5 \times 1.67 \times 10^{-24}}} = 3.00 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$,

$$\omega_{\max}^o = \sqrt{\frac{2\beta(M+m)}{Mm}} = \sqrt{\frac{2 \times 1.5 \times 10^4 \times (4 \times 5 + 5) \times 1.67 \times 10^{-24} \text{ dyn/cm}}{4 \times 5 \times 1.67 \times 10^{-24} \times 5 \times 1.67 \times 10^{-24}}} = 6.70 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$$

$$\omega_{\max}^A = \sqrt{\frac{2\beta}{m}} = \sqrt{\frac{2 \times 1.5 \times 10^4 \text{ dyn/cm}}{5 \times 1.67 \times 10^{-24}}} = 5.99 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$$

$$\hbar \omega_{\max}^A = 6.58 \times 10^{-16} \times 5.99 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} = 1.97 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

$$(2) \hbar \omega_{\max}^o = 6.58 \times 10^{-16} \times 6.70 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} = 4.41 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

$$\hbar \omega_{\min}^o = 6.58 \times 10^{-16} \times 3.00 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} = 3.95 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

$$(3) \overline{n_{\max}^A} = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{\max}^A / k_B T} - 1} = 0.873, \overline{n_{\max}^o} = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{\max}^o / k_B T} - 1} = 0.221$$

$$\overline{n_{\min}^o} = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{\min}^o / k_B T} - 1} = 0.276$$

$$(4) \lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = 28.1 \mu\text{m}$$

第四章 能带理论

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.

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

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 $m = -1, (e^{i\frac{2\pi}{a}x} = e^{i\frac{\pi}{2a}x}) \therefore \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{3\pi}{2a}x}$

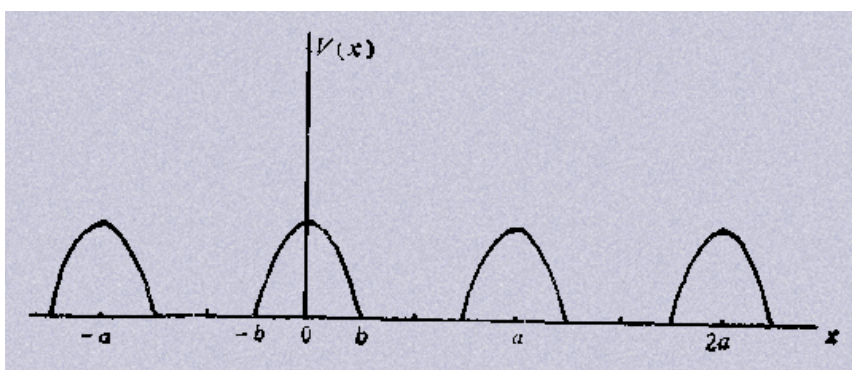
第三能带: $c' \rightarrow c, m \cdot \frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}$, 即 $m = 1, \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\pi}{2a}x} \cdot e^{i\frac{2\pi}{a}x} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{5\pi}{2a}x}$

4.3 电子在周期场中的势能.

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 [b^2 - (x-na)^2], & \text{当 } na-b \leq x \leq na+b \\ 0, & \text{当 } (n-1)a+b \leq x \leq na-b \end{cases}$$

其中 $d=4b$, ω 是常数. 试画出此势能曲线, 求其平均值及此晶体的第一个和第二个禁带度.

<解>(I)题设势能曲线如下图所示.



(2)势能的平均值: 由图可见, $V(x)$ 是个以 a 为周期的周期函数, 所以

$$\bar{V}(x) = \frac{1}{L} \int_L V(x) dx = \frac{1}{a} \int_b^{a+b} V(x) dx = \frac{1}{a} \int_{-b}^b V(x) dx$$

题设 $a=4b$, 故积分上限应为 $a-b=3b$, 但由于在 $[b, 3b]$ 区间内 $V(x)=0$, 故只需在 $[-b, b]$ 区间内积分. 这时, $n=0$, 于是

$$\bar{V} = \frac{1}{a} \int_{-b}^b V(x) dx = \frac{m\omega^2}{2a} \int_{-b}^b (b^2 - x^2) dx = \frac{m\omega^2}{2a} \left[b^2 x \Big|_{-b}^b - \frac{1}{3} x^3 \Big|_{-b}^b \right] = \frac{1}{6} m\omega b^2.$$

(3), 势能在 $[-2b, 2b]$ 区间是个偶函数, 可以展开成傅立叶级数

$$V(x) = V_0 + \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_m \cos \frac{m\pi}{2b} x, V_m = \frac{2}{2b} \int_0^{2b} V(x) \cos \frac{m\pi}{2b} x dx = \frac{1}{b} \int_0^b V(x) \cos \frac{m\pi}{2b} x dx$$

第一个禁带宽度 $E_{g_1} = 2|V_1|$, 以 $m=1$ 代入上式, $E_{g_1} = \frac{m\omega^2}{b} \int_0^b (b^2 - x^2) \cos \frac{\pi x}{2b} dx$

利用积分公式 $\int u^2 \cos mu du = \frac{u}{m^2} [(mu \sin mu + 2 \cos mu)] - \frac{2}{m^3} \sin mu$ 得

$E_{g_1} = \frac{16m\omega^2}{\pi^3} b^2$ 第二个禁带宽度 $E_{g_2} = 2|V_2|$, 以 $m=2$ 代入上式, 代入上式

$$E_{g_2} = \frac{m\omega^2}{b} \int_0^b (b^2 - x^2) \cos \frac{\pi x}{b} dx \text{ 再次利用积分公式有 } E_{g_2} = \frac{2m\omega^2}{\pi^2} b^2$$

4.4 用紧束缚近似求出面心立方晶格和体心立方晶格 s 态原子能级相对应的能带

$E^s(\vec{k})$ 函数

解：面心立方晶格——s 态原子能级相对应的能带函数

$$E^s(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0 - \sum_{\vec{R}_s = \text{Nearest}} J(\vec{R}_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

——s 原子态波函数具有球对称性

$$J_1 = J(\vec{R}_s) = -\int \phi_i^{0*}(\vec{\xi} - \vec{R}_s) [U(\vec{\xi}) - V(\vec{\xi})] \phi_i^0(\vec{\xi}) d\vec{\xi} > 0$$

$$E^s(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0 - J_1 \sum_{\vec{R}_s = \text{Nearest}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

——任选取一个格点为原点

——最近邻格点有 12 个

12 个最邻近格点的位置

$$\begin{Bmatrix} \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 \\ \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & 0 \\ -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 \\ -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & 0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 0, & \frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ 0, & \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \\ 0, & -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ 0, & -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{a}{2}, & 0, & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2}, & 0, & -\frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & 0, & \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & 0, & -\frac{a}{2} \end{Bmatrix}$$

$$\vec{R}_s = \frac{a}{2} \vec{i} + \frac{a}{2} \vec{j} + 0\vec{k} \quad E^s(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0 - J_1 \sum_{\vec{R}_s = \text{Nearest}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

$$e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s} = e^{-i(k_x \frac{a}{2} + k_y \frac{a}{2} + k_z \cdot 0) \cdot (\frac{a}{2} \vec{i} + \frac{a}{2} \vec{j} + 0\vec{k})} = e^{-i\frac{a}{2}(k_x + k_y)} \sqrt{b^2 - 4ac}$$

$$= (\cos \frac{k_x a}{2} - i \sin \frac{k_x a}{2}) (\cos \frac{k_y a}{2} - i \sin \frac{k_y a}{2})$$

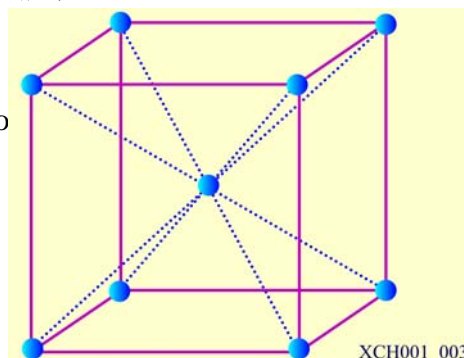
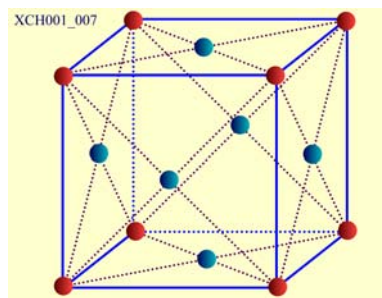
——类似的表示共有 12 项

——归并化简后得到面心立方 s 态原子能级相对应的能带

$$E^s(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0$$

$$-4J_1 (\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2})$$

——对于体心立方格子，任选取一个格点为原点



$$\left\{ \begin{array}{ccc} \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \\ -\frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2}, & -\frac{a}{2}, & -\frac{a}{2} \end{array} \right\}$$

$$\bar{R}_s = \frac{a}{2} \bar{i} + \frac{a}{2} \bar{j} + \frac{a}{2} \bar{k} \quad E^s(\bar{k}) = \varepsilon_s - J_0 - J_1 \sum_{R_s = \text{Nearest}} e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}_s}$$

$$e^{-i\bar{k} \cdot \bar{R}_s} = e^{-i(k_x \bar{i} + k_y \bar{j} + k_z \bar{k}) \cdot (\frac{a}{2} \bar{i} + \frac{a}{2} \bar{j} + \frac{a}{2} \bar{k})} = e^{-i \frac{a}{2} (k_x + k_y + k_z)}$$

$$= (\cos \frac{k_x a}{2} - i \sin \frac{k_x a}{2}) (\cos \frac{k_y a}{2} - i \sin \frac{k_y a}{2}) (\cos \frac{k_z a}{2} - i \sin \frac{k_z a}{2}) \quad \text{—— 类似的表示共有 8 项}$$

—— 归并化简后得到体心立方 s 态原子能级相对应的能带

$$E^s(\bar{k}) = \varepsilon_s - J_0 - 8J_1 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}$$

4.7, 有一一维单原子链。间距为 a 。总长度为 Na 。求 (1), 用紧束缚近似求出原子 s 态能级对应的能带 $E(k)$ 函数。(2) 求出其能态密度函数的表达式。(3), 如果每个原子 s 态只有一个电子, 求等于 $T=0K$ 的费米能级 E_F^0 及 E_F^0 处的能态密度。

$$\langle \text{解} \rangle (1), E(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0 - J_1 (e^{ika} + e^{-ika}) = \varepsilon_s - J_0 - 2J_1 \cos ka = E_0 - 2J_1 \cos ka$$

$$\left[E(\vec{k}) = E - J_0 - \sum J(p_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s} \right]$$

$$(2), N(E) = 2 \times \frac{L}{2\pi} \times 2 \left| \frac{dk}{dE} \right| = \frac{2Na}{\pi} \times \frac{1}{2J_1 a \sin ka} = \frac{N}{\pi J_1 \sin ka}$$

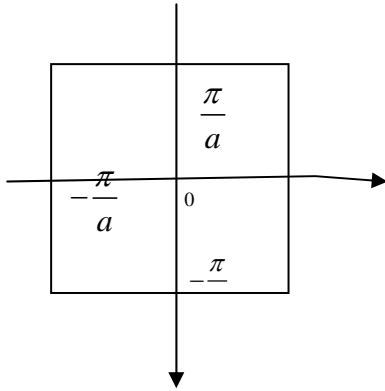
$$(3), N = \int_0^{k_F^0} 2\rho(\vec{k}) \cdot 2dk = 2 \cdot \frac{Na}{2\pi} \cdot 2k_F^0 = \frac{2Nak_F^0}{\pi} \therefore k_F^0 = \frac{\pi}{2a}$$

$$E_F^0 = E(k_F^0) = E - 2J_1 \cos \frac{\pi}{2a} \cdot a = E_s, N(E_F^0) = \frac{N}{\pi J_1 \sin \frac{\pi}{2a} \cdot a} = \frac{N}{\pi J_1}$$

4.8, 证明一个自由简单晶格在第一布里渊区顶角上的一个自由电子动能比该区一边中点大 2 倍。(b) 对于一个简单立方晶格在第一布里渊区顶角上的一个自由电子动能比该区面心上大多少? (c) (b) 的结果对于二价金属的电导率可能会产生什么影响?

$$\langle \text{解} \rangle (a) \text{ 二维简单正方晶格的晶格常数为 } a, \text{ 倒格子晶格基矢 } A = \frac{2\pi}{a} \hat{i}, B = \frac{2\pi}{a} \hat{j}$$

第一布里渊区如图所示



区边中点的波矢为 $K_A = \frac{\pi}{a}\hat{i}$, 角顶 B 点的波矢为 $K_B = \left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{i} + \left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{j}$.

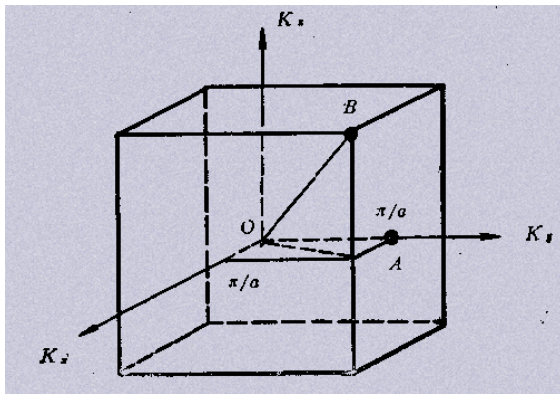
自由电子能量 $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$,

$$A \text{ 点能量 } \varepsilon_A = \frac{\hbar^2}{2m} K_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2,$$

$$B \text{ 点能量 } \varepsilon_B = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left[2 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right], \text{ 所以 } \varepsilon_B / \varepsilon_A = 2$$

b) 简单立方晶格的晶格常数为 a , 倒格子基矢为 $A = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{i}, B = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{j}, C = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{k}$,

第一布里渊区如图 7—2 所示.



$$A \text{ 点能量 } \varepsilon_A = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2;$$

$$B \text{ 点能量 } \varepsilon_B = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left[3 \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 \right],$$

所以 $\varepsilon_B / \varepsilon_A = 3$

(c) 如果二价金属具有简单立方品格结构, 布里渊区如图 7—2 所示. 根据自由电子

理论, 自由电子的能量为 $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$, Fermi 面应为球面. 由(b)可知, 内

切于 4 点的内切球的体积 $\frac{4\pi}{3} \left(\frac{\pi}{a} \right)^3$, 于是在 K 空间中, 内切球内能容纳的电子数为

$$\frac{4\pi}{3} \left(\frac{\pi}{a} \right)^3 \frac{V}{(2\pi)^3} = \frac{\pi}{3} N = 1.047 N \quad \text{其中 } V = Na^3$$

二价金属每个原子可以提供 2 个自由电子, 内切球内只能装下每原子 1.047 个电子, 余下的 0.953 个电子可填入其它状态中. 如果布里渊区边界上存在大的能量间隙, 则余下的电子只能填满第一区内余下的所有状态(包括 B 点). 这样, 晶体将只有绝缘体性质. 然而由(b)可知, B 点的能比 A 点高很多, 从能量上看, 这种电子排列是不利的. 事实上, 对于二价金属, 布里渊区边界上的能隙很小, 对于三维晶体, 可出现一区、二区能带重迭. 这样, 处于第一区角顶附近的高能态的电子可以“流向”第二区中的能量较低的状态, 并形成横跨一、二区的球形 Fermi 面. 因此, 一区中有空态存在, 而二区中有电子存在, 从而具有导电功能. 实际上, 多数的二价金属具有六角密堆和面心立方结构, 能带出现重迭, 所以可以导电.

4.9 半金属交叠的能带

$$E_1(k) = E_1(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}, \quad m_1 = 0.18 m$$

$$E_2(k) = E_2(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_2} (\bar{k} - \bar{k}_0)^2, \quad m_2 = 0.06 m$$

其中 $E_1(0)$ 为能带 1 的带顶, $E_2(k_0)$ 为能带 2 的带底. $E_1(0) - E_2(k_0) = 0.1 \text{ eV}$ 由于能带的

交叠, 能带 1 中的部分电子转移到能带 2 中, 而在能带 1 中形成空穴, 讨论 $T = 0 \text{ K}$ 时的费

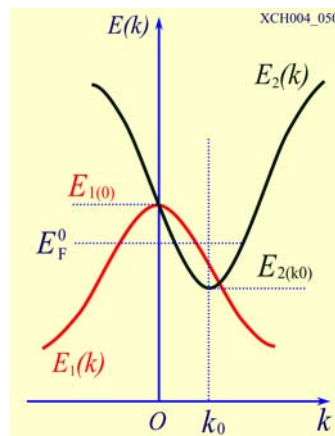
密能级

解: 半金属的能带 1 和能带 2 如图所示

$$E_1(k) = E_1(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}$$

$$E_2(k) = E_2(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_2} (\bar{k} - \bar{k}_0)^2$$

$$k = \frac{\sqrt{2m_1[E_1(0) - E_1(k)]}}{\hbar}$$



能带 1 的能态密度

$$N_1(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|} \quad |\nabla_k E| = \frac{\hbar^2 k}{m_1}$$

$$|\nabla_k E| = \hbar \sqrt{2[E_1(0) - E_1(k)]/m_1} \quad N_1(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|}$$

$$N_1(E) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k^2}{\hbar \sqrt{2[E_1(0) - E_1(k)]/m_1}}$$

$$N_1(E) = \frac{2V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_1}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_1(0) - E_1(k)}$$

同理能带 2 的能态密度

$$N_2(E) = \frac{2V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_2(k) - E_2(k_0)}$$

半金属如果不发生能带重合，电子刚好填满一个能带。由于能带交叠，能带 1 中的电子填充到能带 2 中，满足

$$\int_{E_F^0}^{E_1(0)} N_1(E) dE = \int_{E_2(k_0)}^{E_F^0} N_2(E) dE$$

$$\int_{E_F^0}^{E_1(0)} \frac{2V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_1}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_1(0) - E_1(k)} dE = \int_{E_2(k_0)}^{E_F^0} \frac{2V}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m_2}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_2(k) - E_2(k_0)} dE$$

$$-m_1^{\frac{3}{2}} [E_1(0) - E_1(k)]^{\frac{3}{2}} \Big|_{E_F^0}^{E_1(0)} = m_2^{\frac{3}{2}} [E_2(k) - E_2(k_0)]^{\frac{3}{2}} \Big|_{E_2(k_0)}^{E_F^0}$$

$$m_1[E_1(0) - E_F^0] = m_2[E_F^0 - E_2(k_0)]$$

$$E_F^0 = \frac{m_1 E_1(0) + m_2 E_2(k_0)}{m_1 + m_2} \quad (m_1 = 0.18 m, m_2 = 0.06 m, E_1(0) - E_2(k_0) = 0.1 \text{ eV})$$

$$E_F^0 = E_2(k_0) + 0.075 \text{ eV}$$

4.12, 正方晶格. 设有二维正方晶格, 晶体势为 $U(x, y) = -4U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$.

用基本方程, 近似求出布里渊区角 $\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ 处的能隙.

<解> 以 \hat{i}, \hat{j} 表示位置矢量的单位矢量, 以 \hat{b}_1, \hat{b}_2 表示倒易矢量的单位矢量, 则有,

$$r = x\hat{i} + y\hat{j}, G = G_1\hat{b}_1 + G_2\hat{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(g_1\hat{b}_1 + g_2\hat{b}_2), g_1, g_2 \text{ 为整数。}$$

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

$$U(r) = -U \left(e^{i\frac{2\pi}{\sigma}x} + e^{-i\frac{2\pi}{\sigma}x} \right) \left(e^{i\frac{2\pi}{\sigma}y} + e^{-i\frac{2\pi}{\sigma}y} \right) \sum_{G(11)} U_{G(11)} e^{iG(11)r}$$

其中 $U_{G(11)} = -U$, 而其他势能傅氏系数 $U_{G(10)} = U_{G(20)} = \dots = 0$ 。这样基本方程

$$(\lambda_k - \varepsilon)C(K) + \sum_G U_G C(K - G) = 0 \text{ 变为}$$

$$(\lambda_k - \varepsilon)C(K) + U_{G(11)}C(K - G_{(11)}) + U_{G(\bar{1}\bar{1})}C(K - G_{(\bar{1}\bar{1})}) + U_{G(1\bar{1})}C(K - G_{(1\bar{1})}) + U_{G(\bar{1}1)}C(K - G_{(\bar{1}1)}) = 0$$

求布里渊区角顶 $\left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$, 即 $k = G\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}G(11)$ 处的能隙, 可利用双项平面波近

似

$$\Psi = C(K)e^{iKr} + C(K - G)e^{i(K-G)r} \text{ 来处理。}$$

当 $K = \frac{1}{2}G(11), K = -\frac{1}{2}G(11)$ 时依次有

$$K - G(11) = -\frac{1}{2}G(11), K - G(\bar{1}\bar{1}) = +\frac{1}{2}G(11) \text{ 而其他的 } |K - G(1\bar{1})|,$$

$|K - G(\bar{1}1)| > |G(11)|$, 所以在双项平面波近似下上式中只有

$$C\left(\frac{1}{2}G(11)\right), C(K - G(11)) = C\left(-\frac{1}{2}G(11)\right);$$

$$C\left(\frac{1}{2}G(11)\right), C(K - G(\bar{1}\bar{1})) = C\left(+\frac{1}{2}G(11)\right);$$

$$\left. \begin{aligned} \left(\lambda_{\frac{1}{2}G(11)} - \varepsilon \right) C\left(\frac{1}{2}G(11)\right) - UC\left(-\frac{1}{2}G(11)\right) &= 0 \\ \left(\lambda_{-\frac{1}{2}G(11)} - \varepsilon \right) C\left(-\frac{1}{2}G(11)\right) - UC\left(+\frac{1}{2}G(11)\right) &= 0 \end{aligned} \right\}$$

$$\begin{vmatrix} \lambda_{\frac{1}{2}G(11)} - \varepsilon & -u \\ -u & \lambda_{-\frac{1}{2}G(11)} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \text{ 因为}$$

$$\lambda_{\frac{1}{2}G(11)} = \lambda_{-\frac{1}{2}G(11)} = \lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{2}G(11) \right]^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$

$$\text{由行列式有 } (\lambda - \varepsilon)^2 - U^2 = 0 \text{ 解得 } \varepsilon = \lambda \pm U = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \pm U,$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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)

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

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。

补充习题 一维周期势场中电子的波函数应当满足布洛赫定理。如果晶格常数为 a , 电子的波函数为

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

$$2) \psi_k(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^m f(x - ma)$$

$$3) \psi_k(x) = i \cos \frac{3x}{a} \pi$$

$$4) \psi_k(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x - la)$$

求电子在这些态中的波矢

解: 根据布洛赫定理

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

一维情形布洛赫定理

$$\psi(x+a) = e^{ika} \psi(x)$$

1) 电子的波函数

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

$$\psi_k(x+a) = \sin \frac{x+a}{a} \pi = -\sin \frac{x}{a} \pi$$

$$\psi_k(x+a) = -\psi_k(x) = e^{ika} \psi_k(x)$$

$$e^{ika} = -1 \quad \text{电子的波矢 } k = \frac{\pi}{a}$$

$$\psi(x+a) = e^{ika} \psi(x)$$

2) 电子的波函数

$$\psi_k(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-i)^m f(x - ma)$$

$$\psi_k(x+a) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} (-i)^m f[x - (m-1)a]$$

$$= -i \sum_{m=-\infty}^{+\infty} (-i)^{m-1} f[x - (m-1)a]$$

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

$$(e^{ika} = -i, \text{ 电子的波矢 } k = -\frac{\pi}{2a})$$

$$\psi(x+a) = e^{ika} \psi(x)$$

3) 电子的波函数

$$\psi_k(x) = i \cos \frac{3x}{a} \pi$$

$$\psi_k(x+a) = i \cos 3 \frac{(x+a)}{a} \pi$$

$$= -i \cos \frac{3x}{a} \pi = -\psi_k(x)$$

$$e^{ika} = -1$$

$$\text{电子的波矢 } k = \frac{\pi}{a}$$

$$\psi(x+a) = e^{ika} \psi(x)$$

4) 电子的波函数

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

$$\psi_k(x+a) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} f[x - (l-1)a]$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{+\infty} f(x - ma) = \psi_k(x)$$

$$e^{ika} = 1 \text{ 电子的波矢 } k = 0$$

补充习题 电子的能量为

$$E(k) = E_k + \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right) \frac{\hbar^2}{2} \text{ 求能态密度}$$

解答 (初稿) 作者 季正华

将电子能量改写为

$$\frac{1}{\frac{2}{\hbar^2}(E-E_k)} \left[\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right] = 1 \quad \text{--- } \mathbf{k} \text{ 空间的一个椭球方程}$$

半轴 a, b, c 分别为

$$a = \left[\frac{2m_x(E-E_k)}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad b = \left[\frac{2m_y(E-E_k)}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad c = \left[\frac{2m_z(E-E_k)}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}}$$

椭球在 \mathbf{k} 空间的体积

$$\Omega_k = \frac{4}{3} \pi abc$$

\mathbf{k} 空间的状态密度 $2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$

椭球内的状态数 $Z = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{4}{3} \pi abc$

$$Z = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4}{3} \pi (m_x m_y m_z)^{1/2} \left(\frac{2}{\hbar^2}\right)^{3/2} (E-E_k)^{3/2}$$

$$dZ = \frac{3}{2} \cdot 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2}{\hbar^2}\right)^{3/2} (m_x m_y m_z)^{1/2} (E-E_k)^{1/2} dE$$

能态密度

$$N(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2}{\hbar^2}\right)^{3/2} (m_x m_y m_z)^{1/2} (E-E_k)^{1/2}$$

5.1 设一维晶体的电子能带可以写成

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

式中 a 为晶格常数。计算1) 能带的宽度；2) 电子在波矢 k 的状态时的速度；3) 能带底部和能带顶部电子的有效质量

☒ 1) 能带的宽度 能带底部 $k = 0$ $E(0) = 0$

能带顶部 $k = \frac{\pi}{a}$ $E\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

能带宽度 $\Delta E = E\left(\frac{\pi}{a}\right) - E(0) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

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

电子在波矢 \mathbf{k} 的状态时的速度

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk} \quad v(k) = \frac{\hbar}{ma} \left(\sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka \right)$$

电子的有效质量 $m^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$ $m^* = \frac{m}{\cos ka - \frac{1}{2} \cos 2ka}$

能带底部 $k = 0$ 有效质量 $m^* = 2m$

能带顶部 $k = \frac{\pi}{a}$ 有效质量 $m^* = -\frac{2}{3}m$

5.5 设电子等能面为椭球

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$$

外加磁场 \mathbf{B} 相对于椭球主轴方向余弦为 α, β, γ

1) 写出电子的准经典运动方程

2) 证明电子绕磁场回转频率为 $\omega = \frac{qB}{m^*}$

$$\text{其中 } m^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}}$$

☒ 恒定磁场中电子运动的基本方程 $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}$

电子的速度 $\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k})$

电子能量 $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$

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

$$\nabla_k E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{\hbar^2 k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{\hbar^2 k_3}{m_3} \hat{k}_3$$

电子的速度

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{\hbar k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{\hbar k_3}{m_3} \hat{k}_3$$

磁感应强度

$$\vec{B} = B(\hat{k}_1 \alpha + \hat{k}_2 \beta + \hat{k}_3 \gamma)$$

代入电子运动方程

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}$$

应用关系

$$\hat{k}_1 \times \hat{k}_2 = \hat{k}_3$$

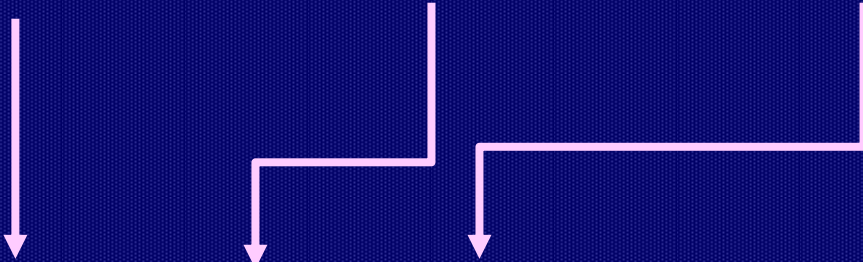
$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -qB \left[\left(\frac{k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{k_3}{m_3} \hat{k}_3 \right) \times (\hat{k}_1 \alpha + \hat{k}_2 \beta + \hat{k}_3 \gamma) \right]$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -qB\left[\left(\frac{k_1}{m_1}\hat{k}_1 + \frac{k_2}{m_2}\hat{k}_2 + \frac{k_3}{m_3}\hat{k}_3\right) \times (\hat{k}_1\alpha + \hat{k}_2\beta + \hat{k}_3\gamma)\right]$$

电子运动方程

$$\begin{cases} \frac{dk_1}{dt} = -qB\left(\frac{k_2}{m_2}\gamma - \frac{k_3}{m_3}\beta\right) \\ \frac{dk_2}{dt} = -qB\left(\frac{k_3}{m_3}\alpha - \frac{k_1}{m_1}\gamma\right) \\ \frac{dk_3}{dt} = -qB\left(\frac{k_1}{m_1}\beta - \frac{k_2}{m_2}\alpha\right) \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{dk_1}{dt} + qB\left(\frac{k_2}{m_2}\gamma - \frac{k_3}{m_3}\beta\right) = 0 \\ \frac{dk_2}{dt} + qB\left(\frac{k_3}{m_3}\alpha - \frac{k_1}{m_1}\gamma\right) = 0 \\ \frac{dk_3}{dt} + qB\left(\frac{k_1}{m_1}\beta - \frac{k_2}{m_2}\alpha\right) = 0 \end{cases}$$

令 $k_1 = k_1^0 e^{i\omega t}$, $k_2 = k_2^0 e^{i\omega t}$, $k_3 = k_3^0 e^{i\omega t}$



$$\begin{cases} \frac{dk_1}{dt} + qB\left(\frac{k_2}{m_2}\gamma - \frac{k_3}{m_3}\beta\right) = 0 & i\omega k_1^0 + \frac{qB\gamma}{m_2}k_2^0 - \frac{qB\beta}{m_3}k_3^0 = 0 \\ \frac{dk_2}{dt} + qB\left(\frac{k_3}{m_3}\alpha - \frac{k_1}{m_1}\gamma\right) = 0 & i\omega k_2^0 + \frac{qB\alpha}{m_3}k_3^0 - \frac{qB\gamma}{m_1}k_1^0 = 0 \\ \frac{dk_3}{dt} + qB\left(\frac{k_1}{m_1}\beta - \frac{k_2}{m_2}\alpha\right) = 0 & i\omega k_3^0 + \frac{qB\beta}{m_1}k_1^0 - \frac{qB\alpha}{m_2}k_2^0 = 0 \end{cases}$$

k_1^0, k_2^0, k_3^0 有非零解, 系数行列式为零

$$\begin{vmatrix} i\omega k_1^0 + \frac{qB\gamma}{m_2} k_2^0 - \frac{qB\beta}{m_3} k_3^0 = 0 & i\omega & \frac{qB\gamma}{m_2} & -\frac{qB\beta}{m_3} \\ i\omega k_2^0 + \frac{qB\alpha}{m_3} k_3^0 - \frac{qB\gamma}{m_1} k_1^0 = 0 & -\frac{qB\gamma}{m_1} & i\omega & \frac{qB\alpha}{m_3} \\ i\omega k_3^0 + \frac{qB\beta}{m_1} k_1^0 - \frac{qB\alpha}{m_2} k_2^0 = 0 & \frac{qB\beta}{m_1} & -\frac{qB\alpha}{m_2} & i\omega \end{vmatrix} = 0$$

$$i\omega \left\{ -\omega^2 + \frac{(qB)^2}{m_2 m_3} \alpha^2 + \frac{(qB)^2}{m_1 m_2} \gamma^2 + \frac{(qB)^2}{m_1 m_3} \beta^2 \right\} = 0$$

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

$\omega = 0$ 无意义

旋转频率 $\omega = qB \sqrt{\frac{1}{m_2m_3}\alpha^2 + \frac{1}{m_1m_2}\gamma^2 + \frac{1}{m_1m_3}\beta^2}$

$$\omega = qB \sqrt{\frac{m_1\alpha^2 + m_2\beta^2 + m_3\gamma^2}{m_1m_2m_3}} \quad \omega = \frac{qB}{m^*}$$

其中 $m^* = \sqrt{\frac{m_1m_2m_3}{m_1\alpha^2 + m_2\beta^2 + m_3\gamma^2}}$

*6.2 在低温下金属钾的摩尔热容量的实验结果可写成

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

如果一个摩尔的金属钾有 $N = 6 \times 10^{23}$ 个电子，求钾的费米温度 T_F 和德拜温度 Θ_D

☒ 一摩尔的电子对热容的贡献 $C_V = N_0 \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{E_F^0} \right) k_B$

与实验结果比较得到

$$N_0 \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{k_B T_F} \right) k_B = 2.08 \times 10^{-3} T \text{ J} / \text{mol} \cdot \text{K}$$

$$\text{费米温度 } T_F = N \frac{\pi^2 k_B}{2 \times 2.08 \times 10^{-3}} = 19624 \text{ K}$$

德拜定律 $C_V = \frac{12\pi^4 Nk_B}{5} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$

与实验结果比较

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

$$\frac{12\pi^4 Nk_B}{5} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 = 2.57 \times 10^{-3} T^3 \text{ J} / \text{mol} \cdot \text{K}$$

德拜温度 $\Theta_D = \left(\frac{12\pi^4 Nk_B}{5 \times 2.57 \times 10^{-3}}\right)^{1/3} = 91 \text{ K}$

6.4 设N个电子组成简并电子气，体积为V，证明T=0 K时

1) 每个电子的平均能量 $\bar{U} = \frac{3}{5} E_F^0$

2) 自由电子气的压强满足 $pV = \frac{2}{3} N\bar{U}$

✉ 自由电子的能态密度 $N(E) = 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$

T=0 K时，费米分布函数 $f(E) = \begin{cases} 1 & (E \leq E_F^0) \\ 0 & (E > E_F^0) \end{cases}$

金属中的电子总数 $N = \int_0^\infty N(E) f(E) dE$

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

$$N(E) = 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

电子平均能量 $\bar{U} = \frac{\int_0^{E_F^0} E N(E) dE}{\int_0^{E_F^0} 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2} dE}$ $\bar{U} = \frac{3}{5} E_F^0$

将电子气看作是理想气体，压强 $p = \frac{2}{3} n \bar{U}$

$$p = \frac{2}{3} \frac{N}{V} \bar{U} \quad pV = \frac{2}{3} N \bar{U}$$

7.1 InSb的电子有效质量 $m_e = 0.015m$,

介电常数 $\varepsilon = 18$, 晶格常数 $a = 0.6479 \text{ nm}$, 计算

1) 施主的电离能

2) 基态的轨道半径

3) 如果施主均匀分布, 相邻杂质原子的轨道之间发生交叠时, 掺有的施主杂质浓度应高于多少?

☒ 电离能
$$E_i = \frac{m^* q^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \varepsilon^2 (2\hbar^2)} = \frac{0.015}{(18)^2} \frac{mq^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 (2\hbar^2)}$$

$$E_i = 6.3 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

基态的轨道半径

$$a = \frac{4\pi\hbar^2 \varepsilon \varepsilon_0}{m^* q^2} = \frac{18}{0.015} \frac{4\pi\hbar^2 \varepsilon_0}{mq^2}$$
$$= \frac{18}{0.015} a_0 = 62.4 \text{ nm}$$

相邻杂质原子的轨道之间发生交叠，杂质原子之间的间距

$$d = 2a = 124.8 \text{ nm}$$

掺杂施主浓度

$$n = \frac{1}{d^3} = 5.1 \times 10^{28} / \text{cm}^3$$