第四五章作业

•1、已知一维晶格中电子的能带可写成

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

式中a是晶格常数，m是电子的质量，求：

•能带宽度，

•电子的平均速度

•在带顶和带底处的电子的有效质量

（1）能带宽度为

$$\Delta E=E_{\max}-E_{\min}.$$

由极值条件

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

得

上式的唯一解是 $\sin ka=0$ 的解，此式在第一布里渊区内的解为

$$k=0,\frac{\pi}{a}.$$

当 $k=0$时, $E(k)$ 取极小值 $E_{\min}$，且有

$$E_{\min}=E(0)=0$$

当 $k=\frac{\pi}{a}$时, $E(k)$，E(k) 取极大值 $E_{\max}$，且有

$$E_{\max}=E\left(\frac{\pi}{a}\right)=\frac{2\hbar^2}{ma^2}.$$

由以上可得能带宽度为

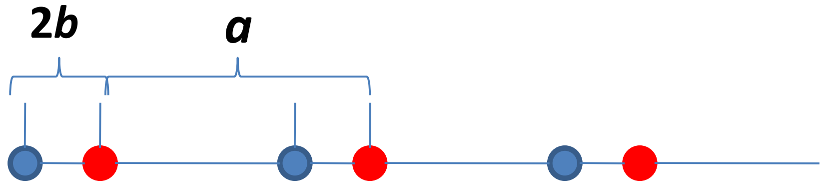
$$\Delta E=E_{\max}-E_{\min}=\frac{2\hbar^2}{ma^2}.$$

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

（3） $m^*\Big|_{k=\pm\frac{\pi}{a}}=\left[\frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}\right]_{k=\pm\frac{\pi}{a}}=m\left(\cos ka-\frac{1}{2}\cos 2ka\right)^{-1}\Big|_{k=\pm\frac{\pi}{a}}=-\frac{2}{3}m.$

$$m^*\Big|_{k=0}=\left[\frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial^2 k}}\right]_{k=0}=m\left(\cos ka-\frac{1}{2}\cos 2ka\right)^{-1}\Big|_{k=0}=2m.$$

2. 设一维晶体由N个双原子分子构成，如下图所示：



- 晶体长度为L=*Na*，*a*为相邻分子间的距离。每个分子中两原子的间距为2*b*，且*a*>4*b*，若势能可表示为如下形式：

$$V(x) = -V_0 \sum_{n=0}^{N-1} \left[\delta(x - na + b) + \delta(x - na - b) \right]$$

- 式中V_0是大于零的常数。

a) 若V_0很小，请计算第一布里渊区边界上的能隙。

b) 若每个原子只有一个价电子，请判断晶体是否为导体？

- 解：周期势场 $V(x)$ 展开为具有周期性平面波的叠加形式：

$$V(x)=\sum_n V_n e^{ikx}=\sum_n V_n e^{i\frac{2n\pi}{a}x}, n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

- V_n 作傅里叶展开

$$V_n=\frac{1}{a}\int_0^a V(x)e^{-i\frac{2\pi n}{a}x}dx=\frac{1}{a}\int_0^a -V_0\sum_{n=0}^{N-1}\left[\delta(x-na+b)+\delta(x-na-b)\right]e^{-i\frac{2\pi n}{a}x}dx=-\frac{2V_0}{a}\cos n\frac{2\pi b}{a}$$

- 按照近自由电子模型，第一布里渊区边界的能隙

$$E_g=2|V_1|$$

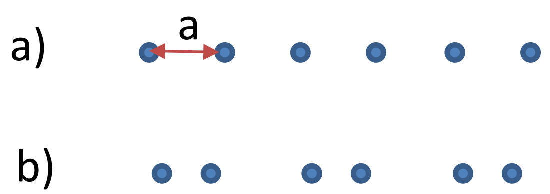
$$\therefore E_g=2|V_1|=2\times\frac{2V_0}{a}\cos\frac{\pi b}{a}=\frac{4V_0}{a}\cos\frac{2\pi b}{a}$$

- 第一布里渊区 $-\frac{\pi}{a}<k\leq\frac{\pi}{a}$ ，k 的个数为：

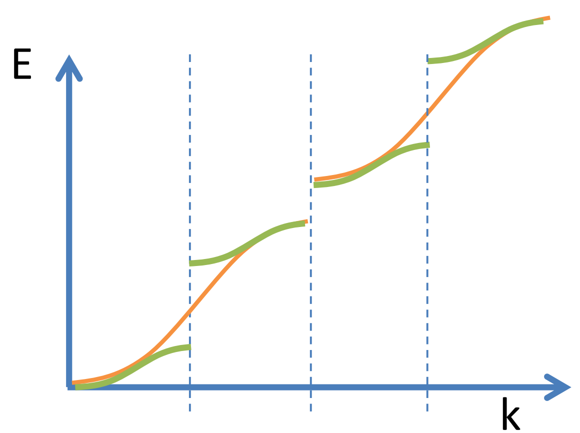
$$\frac{2\pi}{a}\Big/\frac{2\pi}{Na}=N$$

- 考虑自旋后第一布里渊区共有 $2N$ 个状态。由于有N个分子，每个分子有两个原子，每个原子只有一个价电子，所以共有2N个电子，这2N个电子正好填满第一布里渊区，因此这种材料不是导体。

3. 单价原子，排列成如图a的一维晶体。如果每隔一个原子发生了如图b的原子移动。试用空晶格模型加微扰方法，分析原子结构变化前后的能带变化，并画出能带示意图



答：原胞变大，布里渊区变小，原来一条能带折叠成两条能带，根据微扰方法，边界上简并的能带将发生分裂，原来原胞内只有一个原子，一个电子，现在的原胞内有两个原子，两个电子。
这使得原本半满的能带，变成全满，实现了金属到绝缘体的转变。



4、对有限尺寸晶体（如量子点，量子线或量子阱），你认为其晶体能带相对于理想晶体会有什么变化？

周期性边界条件破坏，边界效应开始变得明显能带不再是准连续的。当尺寸与电子的德布罗意波长可比拟的时候，能带又分裂成能级，比如量子点在三维上均是分立的能级，量子线在垂直于轴线的平面上是分立的能级，量子阱在生长方向的能级是分立的。

5 有效质量为0有什么物理意义？试举出有效质量为0的一种材料，并解释相对应的物理性质。

1，有效质量为0对应着加速度无穷大

2，石墨烯，具有非常高的迁移率

6 朗道能级形成的本质原因是什么？什么是De Haas－Van Alphen效应。

根据量子理论，电子在垂直于磁场平面内的匀速圆周运动对应于一种简谐振动，其能量是量子化的。我们将这种量子化的能级称为朗道能级（Landau level）。

磁化率 χ 随磁场的倒数 1/B 作周期振荡的现象称为 De Haas－Van Alphen效应。