

固体物理作业

郑晓暘 202111030007

2025 年 6 月 11 日

问题与解答

问题 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_+ 。说明它们都代表驻波, 并比较两个电子云分布 (即 $|\psi|^2$) 说明能隙的来源 (假设 $V_n = V_n^*$)。

解答

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

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

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

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

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

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

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 $k = \frac{\pi}{a}$ 时, 电子波的波长 $\lambda = \frac{2\pi}{k} = 2a$, 恰好满足布拉格反射条件, 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, 所以对应不同本征能量。

问题 4.2

写出在一维近自由电子近似，第 n 个能带 ($n = 1, 2, 3$) 中，简约波矢 $k = \frac{\pi}{2a}$ 的 0 级波函数。

解答

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

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

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

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

问题 4.3

电子在周期场中的势能:

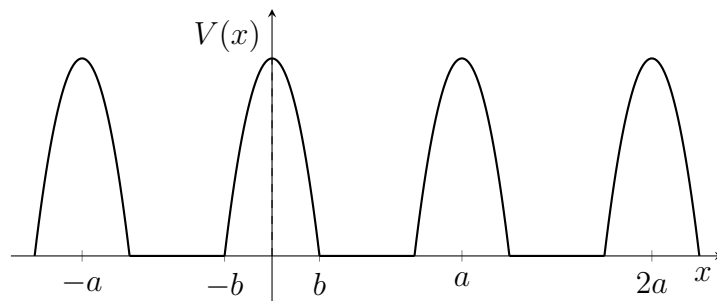
$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2[b^2 - (x - na)^2], & \text{当 } na - b \leq x \leq na + b \\ 0, & \text{当 } (n-1)a + b \leq x \leq na - b \end{cases}$$

其中 $a = 4b$, ω 是常数。

(1) 试图画出势能曲线，并求其平均值。(2) 用近自由电子近似模型求出晶体的第一个及第二个带隙宽度。

解答

(1) 题目设势能曲线如下所示:



(2) 势的平均值: 由图可见, $V(x)$ 是一个以 a 为周期的周期函数, 所以

$$\overline{V(x)} = \frac{1}{L} \int V(x) dx = \frac{1}{a} \int_0^a V(x) dx = \frac{1}{a} \int V(x) dx$$

题目设 $a = 4b$, 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

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

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

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

第一个禁带宽度 $E_{g1} = 2|V_1|$, 以 $m = 1$ 代入上式,

$$E_{g1} = \frac{m\omega^2}{b} \int_0^b (b^2 - x^2) \cos \frac{\pi x}{2b} dx$$

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

$$E_{g1} = \frac{16m\omega^2}{\pi^3} b^2$$

第二个禁带宽度 $E_{g2} = 2|V_2|$, 以 $m = 2$ 代入上式, 代入上式

$$E_{g2} = \frac{m\omega^2}{b} \int_0^b (b^2 - x^2) \cos \frac{\pi x}{b} dx$$

再次利用积分公式有

$$E_{g2} = \frac{2m\omega^2}{\pi^2} b^2$$

问题 4.12

设有二维正方晶格, 晶体势为 $U(x, y) = -4U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$ 。用近自由电子近似的微扰论, 近似求出布里渊区顶角 $(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ 处的能隙。

解答

以 $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}$ 表示位置矢量的单位矢量, 以 $\hat{\mathbf{b}}_1, \hat{\mathbf{b}}_2$ 表示倒易矢量的单位矢量, 则有, $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{i}} + y\hat{\mathbf{j}}$, $\mathbf{G} = G_1\hat{\mathbf{b}}_1 + G_2\hat{\mathbf{b}}_2 = \frac{2\pi}{a}(g_1\hat{\mathbf{b}}_1 + g_2\hat{\mathbf{b}}_2)$, g_1, g_2 为整数。晶体势能 $U(x, y) = -4U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$ 。可以写成傅里叶级数形式:

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

其中非零的傅里叶系数为 $U_{\mathbf{G}(1,1)} = U_{\mathbf{G}(-1,-1)} = U_{\mathbf{G}(1,-1)} = U_{\mathbf{G}(-1,1)} = -U$ 。(注：这里 $\mathbf{G}(g_1, g_2)$ 表示 $g_1 \frac{2\pi}{a} \hat{\mathbf{b}}_1 + g_2 \frac{2\pi}{a} \hat{\mathbf{b}}_2$ 对应的倒格矢，其系数为 $U_{\mathbf{G}}$ 。) 基本方程为

$$(\lambda_{\mathbf{K}} - \epsilon)C(\mathbf{K}) + \sum_{\mathbf{G}} U_{\mathbf{G}}C(\mathbf{K} - \mathbf{G}) = 0$$

其中 $\lambda_{\mathbf{K}} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$ 。考虑布里渊区顶角 $\mathbf{K} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ 。这个波矢与 $\mathbf{K}' = \mathbf{K} - \mathbf{G}(1,1) = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) - (\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}) = (-\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}) = -\mathbf{K}$ 是简并的(在空晶格近似下, $\lambda_{\mathbf{K}} = \lambda_{-\mathbf{K}}$)。根据近自由电子近似的微扰论(特别是二能级近似), 我们主要考虑这两个状态的耦合。其他 $\mathbf{K} - \mathbf{G}$ 的能量 $\lambda_{\mathbf{K}-\mathbf{G}}$ 与 $\lambda_{\mathbf{K}}$ 相差较大。与 $C(\mathbf{K})$ 耦合的主要项是 $U_{\mathbf{G}(1,1)}C(\mathbf{K} - \mathbf{G}(1,1)) = U_{\mathbf{G}(1,1)}C(-\mathbf{K})$ 。与 $C(-\mathbf{K})$ 耦合的主要项是 $U_{\mathbf{G}(-1,-1)}C(-\mathbf{K} - \mathbf{G}(-1,-1)) = U_{\mathbf{G}(-1,-1)}C(\mathbf{K})$ 。注意 $U_{\mathbf{G}(1,1)} = U_{\mathbf{G}(-1,-1)} = -U$ 。因此, 方程组简化为:

$$\begin{cases} (\lambda_{\mathbf{K}} - \epsilon)C(\mathbf{K}) + U_{\mathbf{G}(1,1)}C(-\mathbf{K}) = 0 \\ (\lambda_{-\mathbf{K}} - \epsilon)C(-\mathbf{K}) + U_{\mathbf{G}(-1,-1)}C(\mathbf{K}) = 0 \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} (\lambda_{\mathbf{K}} - \epsilon)C(\mathbf{K}) - UC(-\mathbf{K}) = 0 \\ (\lambda_{-\mathbf{K}} - \epsilon)C(-\mathbf{K}) - UC(\mathbf{K}) = 0 \end{cases}$$

该线性方程组有非零解的条件是系数行列式为零:

$$\begin{vmatrix} \lambda_{\mathbf{K}} - \epsilon & -U \\ -U & \lambda_{-\mathbf{K}} - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

其中

$$\lambda_{\mathbf{K}} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{K}|^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 \right] = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$$

(注：图片中 λ 的计算步骤有歧义，这里给出详细过程) 行列式展开得到:

$$(\lambda_{\mathbf{K}} - \epsilon)^2 - U^2 = 0$$

解得能量本征值:

$$\epsilon = \lambda_{\mathbf{K}} \pm U = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \pm U$$

所以在布里渊区顶角 $(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ 处的两个能级为 $\epsilon_+ = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} + U$ 和 $\epsilon_- = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} - U$ 。能隙宽度为:

$$\Delta\epsilon = \epsilon_+ - \epsilon_- = 2U$$

问题 5.1

设一维晶体的电子能带可以写成

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

其中 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

解答

1. 能带的宽度的计算

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

能带底部 $k = 0$

$$E(0) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(-\frac{7}{8} + \frac{1}{8} \right) = -\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

能带顶部 $k = \frac{\pi}{a}$

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

能带宽度

$$\Delta E = E\left(\frac{\pi}{a}\right) - E(0) = \frac{\hbar^2}{ma^2} - \left(-\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{ma^2} \right) = \frac{7}{4} \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

2. 电子在波矢 k 的状态时的速度

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

电子的速度

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$$

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} a \sin ka - \frac{1}{8} 2a \sin 2ka \right) = \frac{\hbar}{ma} \left(\frac{7}{8} \sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka \right)$$

3. 能带底部和能带顶部电子的有效质量

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

电子的有效质量

$$m^* = \hbar^2 \left/ \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right.$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(-\frac{7}{8}(-a^2) \cos ka + \frac{1}{8}(-4a^2) \cos 2ka \right) = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{7}{8} \cos ka - \frac{1}{2} \cos 2ka \right)$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{7}{8} \cos ka - \frac{1}{2} \cos 2ka \right)} = \frac{m}{\frac{7}{8} \cos ka - \frac{1}{2} \cos 2ka}$$

能带底部 $k = 0$

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

能带顶部 $k = \frac{\pi}{a}$

$$m^* = \frac{m}{\frac{7}{8} \cos \pi - \frac{1}{2} \cos 2\pi} = \frac{m}{-\frac{7}{8} - \frac{1}{2}} = \frac{m}{-\frac{11}{8}} = -\frac{8}{11}m$$