固体物理作业

郑晓旸 202111030007

2025 年 5 月 5 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

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

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

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

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。由于两驻波的电子分布不同，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 $b'\to b$, $m\cdot\frac{2\pi}{a}=-\frac{2\pi}{a}$, 即 $m=-1$, $\psi_k^*(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{i\frac{3\pi}{2a}x}$
第三能带: $c'\to c$, $m\cdot\frac{2\pi}{a}=\frac{2\pi}{a}$, 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:

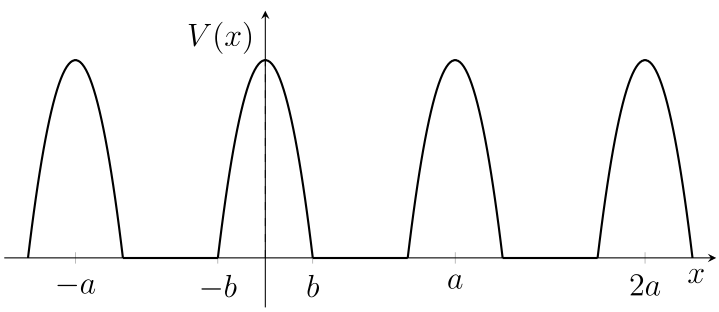
$$V(x)=\begin{cases}\frac{1}{2}m\omega^2[b^2-(x-na)^2], & \text{当}na-b\le x\le na+b\\ 0, & \text{当}(n-1)a+b\le x\le na-b\end{cases}$$

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

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

(3) 势能在 $[-2b,2b]$ 区间是个偶函数，可以展开成傅里叶级数

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

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 $\int u^2\cos mudu=\frac{u}{m^2}(mu\sin mu+2\cos mu)-\frac{2}{m^3}\sin mu$ 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

$$m^* = \hbar^2 \bigg/ \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

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

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

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 $k = \frac{\pi}{a}$

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