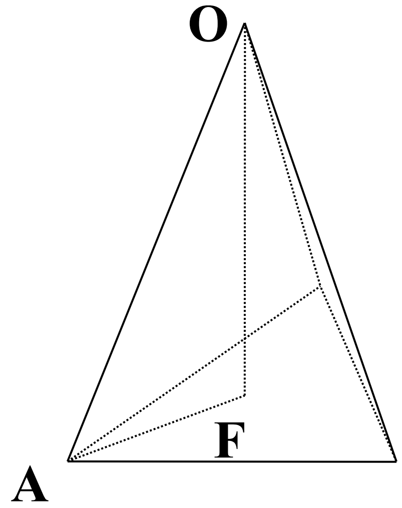
1-1试证理想六方密堆结构中*c*/*a*=1.633



证：配位数12；

令$|\mathrm{OA}| = a; |\mathrm{OF}| = \dfrac{c}{2}$

$$|\mathrm{AF}| = \frac{2}{3} \times \frac{\sqrt{3}}{2} a = \frac{\sqrt{3}}{3} a;$$

$$|\mathrm{OF}| = \frac{c}{2} = \sqrt{a^2 - \frac{1}{3} a^2} = a\sqrt{\frac{2}{3}} = \frac{\sqrt{6}}{3} a$$

$$\therefore \frac{c}{a} = \frac{2}{3}\sqrt{6} \approx 1.633$$

1—2若晶胞基矢$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$互相垂直，试求晶面族(hkl)的面间距。

解：令$\vec{a}=a\vec{i};\vec{b}=b\vec{j};\vec{c}=c\vec{k};$且$V=a\cdot b\cdot c$

则：$\vec{b}_1=\vec{b}\times\vec{c}\cdot\frac{2\pi}{V}=\frac{2\pi}{a}\vec{i};$

$$\vec{b}_2=\vec{c}\times\vec{a}\cdot\frac{2\pi}{V}=\frac{2\pi}{b}\vec{j};$$

$$\vec{b}_3=\vec{a}\times\vec{b}\cdot\frac{2\pi}{V}=\frac{2\pi}{c}\vec{k}$$

那么， $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = 2\pi\left(\frac{h}{a}\vec{i} + \frac{k}{b}\vec{j} + \frac{l}{c}\vec{k}\right)$

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

1－3若在体心立方晶胞的每个面中心处加上一个同类原子，试说明这种结构的基元应如何选取？其布拉菲晶格是什么格子？

解：将整个晶体看成是5个简单立方格子套构而成。

布拉菲格子：简单立方；

基元：顶点原子、体心、三个相邻面心

1—4试求面心立方结构的(111)和(110)面的原子面密度。

解：(111)面：顶点3个原子，每个1/6；

边上3个原子，每个1/2；

$$S_{111}=\frac{1}{2}\cdot\sqrt{2}a\cdot\frac{\sqrt{3}}{2}\cdot\sqrt{2}a=\frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$

$$\therefore \text{面密度}\ \sigma_{111}=\frac{3\times\frac{1}{6}+3\times\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2}=\frac{4}{\sqrt{3}a^2}$$

同理，(110)面：顶点4个原子，每个1/4;

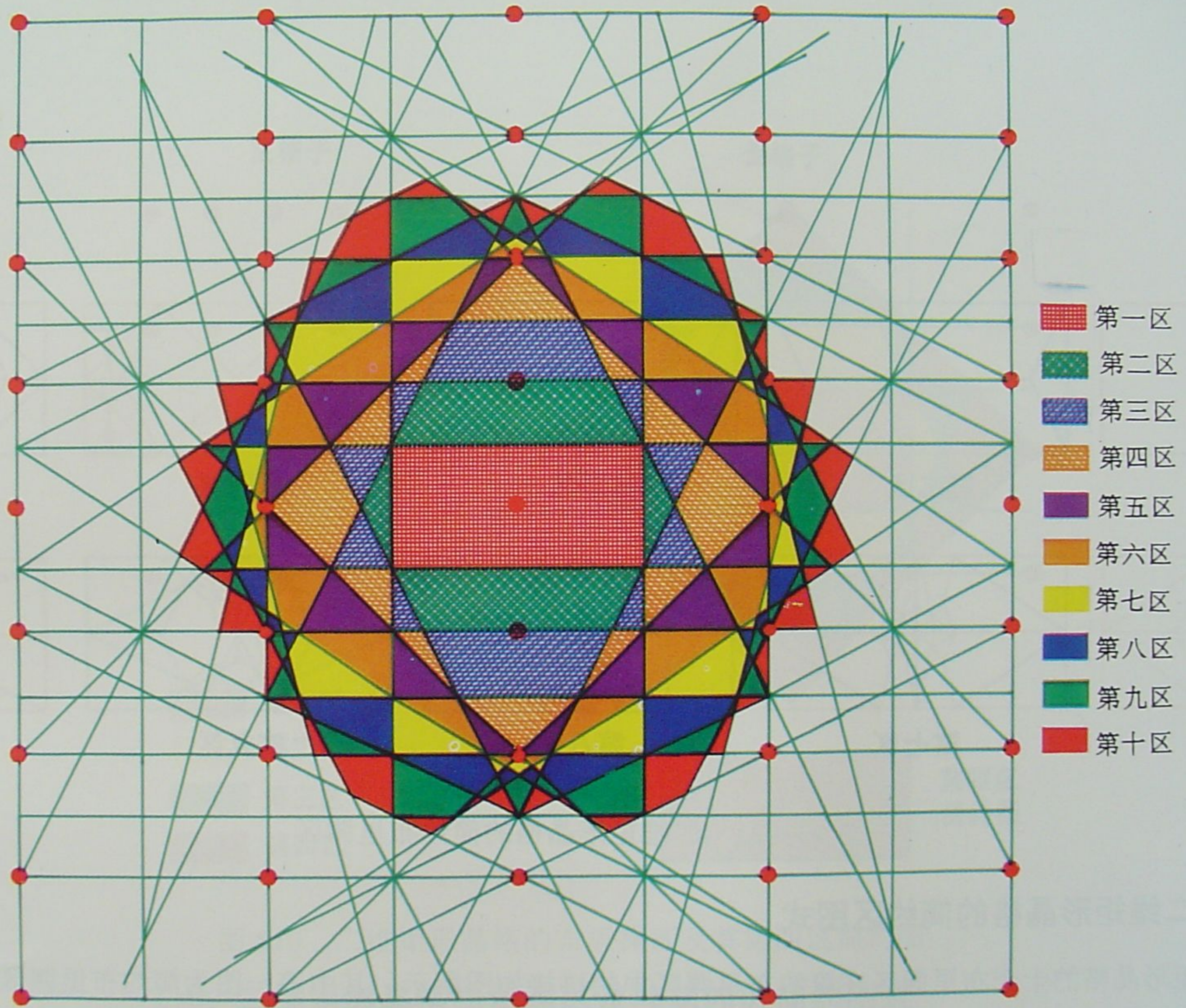
边上2个原子，每个1/2;

$$S_{110} = \sqrt{2}a \cdot a = \sqrt{2}a^2$$

$$\therefore \sigma_{110} = \frac{4\times\frac{1}{4}+2\times\frac{1}{2}}{\sqrt{2}a^2} = \frac{\sqrt{2}}{a^2}$$

1—5设二维矩形格子的基矢为$\vec{a}_1 = a\vec{i}, \vec{a}_2 = 2a\vec{j}$,试画出头三个布里渊区。

解：倒格子基矢：$\vec{b}_1 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{i}, \vec{b}_2 = \dfrac{\pi}{a}\vec{j}$



2007 12 2

图 109(1)　二维矩形晶格的十个布里渊区的扩展区图式

109－1．二维矩形晶格的十个布里渊区的扩展区图式

$1-6$**六方密堆结构的原胞基 矢为**

$$\vec{a}_1=\frac{a}{2}\vec{i}+\frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{j};$$

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

$$\vec{a}_3=c\vec{k};$$

试求倒格子基矢并画出 第一布里渊区。

解： $\upsilon = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \dfrac{\sqrt{3}}{2} a^2 c;$

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

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

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

第一布里渊区为六棱柱

1—7试求金刚石的结构因子，并讨论X射线衍射消失的条件。

解：考虑一个晶胞，独 立的原子共有8个：顶点一个、面心三个、体心四个;8个原子的坐标为：

$$\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \vec{r}_5 = \frac{a}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\vec{r}_2 = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{pmatrix}; \qquad \vec{r}_6 = \frac{a}{4}\begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\vec{r}_3 = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \end{pmatrix}; \qquad \vec{r}_7 = \frac{a}{4}\begin{pmatrix} 3 & 1 & 3 \end{pmatrix};$$

$$\vec{r}_4 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{pmatrix}; \qquad \vec{r}_8 = \frac{a}{4}\begin{pmatrix} 1 & 3 & 3 \end{pmatrix};$$

则$S(\vec{G})=\sum_{j=1}^{8} f_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$；其中，$\vec{G}=\frac{2\pi}{a}(n_1\vec{i}+n_2\vec{j}+n_3\vec{k})$

简单立方的倒格矢；$f_1=f_2=......=f_8$

$$\therefore S(\vec{G})=f[1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n_1+n_2)\pi}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n_1+n_3)\pi}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n_2+n_3)\pi}$$

$$+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}(n_1+n_2+n_3)}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}(3n_1+3n_2+n_3)}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}(3n_1+n_2+3n_3)}$$

$$+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}(n_1+3n_2+3n_3)}]$$

$$= f[1 + e^{i(n_1+n_2)\pi} + e^{i(n_1+n_3)\pi} + e^{i(n_2+n_3)\pi}]$$

$$\cdot[1 + e^{i\frac{\pi}{2}(n_1+n_2+n_3)}]$$

消光条件为：$\begin{cases} n_1 + n_2 + n_3 = 2(2N+1), N\textbf{为整数；} \\ n_1, n_2, n_3\textbf{中有二奇一偶或二偶一奇} \end{cases}$

2−1证明一维$NaCl$晶格的马德隆常数$\alpha = 2\ln 2$.

证明：任选一参考离子i，则左右两侧对称分布，

令$r_{ij} = a_j a$；这里a为晶格常数（正负离子最近距离）

那么，有：

$$\alpha = \sum_j \pm \frac{1}{a_j} = 2\left[\frac{1}{1} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \ldots\ldots\right];$$

其中，异号为+；同号为−.

利用展开式：$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \ldots\ldots$

令$x=1$，得：$\ln 2 = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \ldots\ldots$

$$\therefore \alpha = 2\ln 2$$

2—2若离子间的排斥势用$\lambda e^{-r/\rho}$来表示，只考虑最近邻离子间的排斥作用，试导出离子晶体结合能的表达式，并讨论参数λ和ρ应如何决定。

解：设最近邻离子间距离为r，则$r_{ij}=a_j r$（以i离子为原点）

$$u(r_{ij})=\begin{cases}\lambda e^{-r_{ij}/\rho}-\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}}, & \text{（最近邻，} r_{ij}=r\text{）}\\ \pm\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}}, & \text{（最近邻以外）}\end{cases}$$

总相互作用能为：

$$U=-\frac{N}{2}\left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\sum_{j(\neq i)}^{N}\pm\frac{1}{a_j}-\sum_{\text{最近邻}}\lambda \mathrm{e}^{-r/\rho}\right]$$

$$\therefore U=\frac{N}{2}\left[-\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+Z\lambda \mathrm{e}^{-r/\rho}\right];\text{..........................}(1)$$

其中Z为最近邻离子数

由平衡条件：$\left(\frac{\partial U}{\partial r}\right)_{r=r_0}=0$；得：

$$\frac{\rho\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2}=Z\lambda \mathrm{e}^{-r_0/\rho}\text{..........................}(2)$$

得： $$U=\frac{N}{2}\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left[\frac{\rho}{r_0}-1\right]\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(3)$$

结合能 $E_{\mathrm{c}}=-U(r_0)$

对于NaCl等离子晶体：

$$K=\frac{1}{9Nr_0}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}\right)_{r=r_0}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(4)$$

$$\therefore K=\frac{1}{18r_0}\left[\frac{-2\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r_0^3}+\frac{Z\lambda}{\rho^2}\mathrm{e}^{-r_0/\rho}\right]\cdots\cdots\cdots\cdots(5)$$

将(2)代入(5)得：

$$K=\frac{1}{18r_0}\left[-\frac{2\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^3}+\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2}\cdot\frac{1}{\rho}\right]\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(6)$$

$$\therefore\rho=\frac{\alpha e^2 r_0}{2\alpha e^2+72\pi\varepsilon_0 r_0^4 K}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(7)$$

由(2)得： $$\lambda=\frac{\rho\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2 Z}\mathrm{e}^{r_0/\rho}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots(8)$$

2－3如果NaCl晶体中离子的电荷增加一倍，假定排斥势不变，试估计晶体的结合能以及离子间的平衡距离将产生多大变化？

解：总相互作用能$U=-\frac{N}{2}\left(\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}-\frac{B}{r^n}\right)$………(1)

$$\left(\frac{\partial U}{\partial r}\right)_{r=r_0}=\frac{N}{2}\left(\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2}-\frac{nB}{r_0^{n+1}}\right)=0\text{…………}(2)$$

得：$r_0=\left(\frac{4\pi\varepsilon_0 nB}{\alpha e^2}\right)^{\frac{1}{n-1}}$……………$(2')$

由(2)得：$B=\dfrac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 n}r_0^{n-1}$……………(3)

(3)代入(1)得：$U(r_0)=-\dfrac{N\alpha e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1-\dfrac{1}{n}\right)$……..(4)

当电荷由e变为$2e$时，由(2')和(4)可知：

$$\frac{r_0(2e)}{r_0(e)}=4^{\frac{1}{1-n}}$$

$$\frac{U(2e)}{U(e)}=4^{\frac{n}{n-1}}$$

3－1在一维单原子晶格中，若考虑每一原子与其余所有原子都有作用，在 简谐近似下求格波的色 散关系。

解：在简谐近似下：

$$U=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\phi(x_{ij}^{0}-u_{ij})=U_{0}+\frac{1}{4}\sum_{i\neq j}\beta_{ij}u_{ij}^{2}$$

第n个原子的运动方程：

$$m\frac{\mathrm{d}^{2}u_{n}}{\mathrm{d}t^{2}}=-\frac{\partial U}{\partial u_{n}}=-\frac{1}{4}\frac{\partial}{\partial u_{n}}(\sum_{i\neq j}\beta_{ij}u_{ij}^{2})$$

$$\text{右边} = -\frac{1}{4}\frac{\partial}{\partial u_n}\left(\sum_{i(\neq n)}\beta_{in}u_{in}^2 + \sum_{j(\neq n)}\beta_{nj}u_{nj}^2\right)$$

$$= -\frac{1}{4}\frac{\partial}{\partial u_n}\left(\sum_{i(\neq n)}\beta_{in}(u_n - u_i)^2 + \sum_{j(\neq n)}\beta_{nj}(u_j - u_n)^2\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\left(\sum_{i(\neq n)}\beta_{in}(u_n - u_i) - \sum_{j(\neq n)}\beta_{nj}(u_j - u_n)\right)$$

$$= \sum_{i(\neq n)}\beta_{in}(u_i - u_n)$$

$$= \sum_{p}\beta_p(u_{n+p} + u_{n-p} - 2u_n)$$

设$u_n = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - naq)}$代入上式得：

$$-m\omega^2 A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - naq)} = \sum_p \beta_p \left(A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-(n+p)aq)} + A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t-(n-p)aq)} - 2u_n \right)$$

整理，得：

$$\omega^2 = \frac{2}{m}\sum_p \beta_p (1-\cos paq)$$

$3-2$设有一维双原子晶格，两种原子的质量相等，最近邻原子间的力常数交错地等于β_1和β_2，试求格波的色散关系。

解：

$$m\frac{\mathrm{d}^2u_n}{\mathrm{d}t^2}=\beta_1(\upsilon_{n-1}-u_n)+\beta_2(\upsilon_n-u_n)$$

$$=\beta_1\upsilon_{n-1}+\beta_2\upsilon_n-(\beta_1+\beta_2)u_n$$

$$m\frac{\mathrm{d}^2\upsilon_n}{\mathrm{d}t^2}=\beta_2(u_n-\upsilon_n)+\beta_1(u_{n+1}-\upsilon_n)$$

$$=\beta_2u_n+\beta_1u_{n+1}-(\beta_1+\beta_2)\upsilon_n$$

试探解： $u_n = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(naq-\omega t)}; \upsilon_n = B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(naq-\omega t)}$

代入方程，得： $-m\omega^2 A = \beta_1 B\mathrm{e}^{\mathrm{i}aq} + \beta_2 B - (\beta_1 + \beta_2)A$

$-m\omega^2 B = \beta_1 A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}aq} + \beta_2 A - (\beta_1 + \beta_2)B$

$$\begin{vmatrix} (\beta_1 + \beta_2) - m\omega^2 & -(\beta_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}aq} + \beta_2) \\ \beta_2 + \beta_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}aq} & m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) \end{vmatrix} = 0$$

经计算，得：

$$\omega^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2 \pm \sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos aq}}{m}$$

$3-3$已知一维单原子晶格的 格波色散关系为

$$\omega^2(q)=\frac{2\beta}{M}(1-\cos qa)$$

试求:(1)格波的模密度 $g(\omega)$;

(2)低温下晶格热容与温度 的比例关系。

解:一维时,模密度 $g(\omega)=\frac{l}{2\pi}\int \mathrm{d}q\delta(\omega-\omega(q))$

由色散关系,得: $\cos aq=1-\frac{M}{2\beta}\omega^2;$

$$2\omega\mathrm{d}\omega=\frac{2\beta a}{M}\sin aq\mathrm{d}q$$

$$\therefore \mathrm{d}q = \frac{\omega \mathrm{d}\omega}{\frac{\beta a}{M}\left(\frac{M}{\beta}\omega^2 - \frac{M^2}{4\beta^2}\omega^4\right)^{1/2}}$$

$$g(\omega) = \frac{l}{2\pi}\cdot 2\int_0^{\omega_m} \omega(q)\mathrm{d}\omega(q) \frac{\delta(\omega - \omega(q))}{\frac{\beta a}{M}\left(\frac{M}{\beta}\omega^2(q) - \frac{M^2}{4\beta^2}\omega^4(q)\right)^{1/2}}$$

$$= \frac{l}{\pi}\frac{\omega}{\frac{\beta a}{M}\left(\frac{M}{\beta}\omega^2 - \frac{M^2}{4\beta^2}\omega^4\right)^{1/2}}$$

晶格热容： $C_\upsilon = \left(\dfrac{\partial E}{\partial T}\right)_\upsilon = \dfrac{\partial}{\partial T}\int_0^{\omega_m} g(\omega)\mathrm{d}\omega \dfrac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_\mathrm{B}T)-1}$

略去ω^4项，（因为低温，$\omega << 1$）

$$\therefore C_\upsilon = \frac{\partial}{\partial T}\int_0^{\omega_m} \frac{l}{\pi}\frac{\omega}{\dfrac{\beta a}{M}\cdot\sqrt{\dfrac{M}{\beta}}\omega}\mathrm{d}\omega\frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}-1}$$

$$= \frac{l}{\pi a}\sqrt{\frac{M}{\beta}}\frac{\partial}{\partial T}\int_0^{\infty}\frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}-1}\mathrm{d}\omega$$

(因为低温，频率低的占主要，所以上限可以近似为无穷大)

$$= \frac{l}{\pi a}\sqrt{\frac{M}{\beta}}\,\frac{k_B^2 T}{\hbar}\int_0^{\infty}\frac{x^2 e^x}{(e^x-1)^2}\,dx$$

经计算，上面积分＝ $\frac{\pi^2}{3}$

$$\therefore C_v = \frac{\pi l k_B^2}{3a\hbar}\sqrt{\frac{M}{\beta}}\cdot T$$

3－4将德拜模型用于一维晶格，求低温下晶格热容与温度的关系，并和上题的结果进行比较，讨论德拜模型的合理性。

解：对于德拜模型，有色散关系： $\omega = cq$

$$\therefore \mathrm{d}\omega = c\mathrm{d}q$$

$$\therefore g(\omega) = \frac{l}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q \cdot \delta(\omega - \omega(q))$$

$$= \frac{l}{\pi}\frac{1}{c}\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\omega \cdot \delta(\omega - \omega(q)) \quad = \frac{l}{\pi c}$$

$$\therefore C_\upsilon = \frac{\partial}{\partial T}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega \cdot g(\omega)\frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}-1} = \frac{l}{\pi c}\frac{k_\mathrm{B}^2 T}{\hbar}\int_0^\infty \frac{x^2\mathrm{e}^x}{(\mathrm{e}^x-1)^2}\mathrm{d}x$$

上面积分$=\dfrac{\pi^2}{3}$ $\qquad \therefore C_\upsilon = \dfrac{l\pi k_\mathrm{B}^2}{3c\hbar}\cdot T$

与上题结果比较，都与 T成正比，说明德拜模型有其合理性，尤其是低 温的情况下。

3—5设想在一维单原子晶格中，只激发出一个动量为$\hbar q(q\neq 0)$的声子，试证明晶体并不因此而获得物理动量。

证明：先证下面的式子：

$$\frac{1}{N}\sum_{n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}na(q_l-q_{l'})}=\delta_{ll'}=\begin{cases}1, & l=l'\\ 0, & l\neq l'\end{cases}$$

$l=l'$时，显然成立。

$l\neq l'$时，左边$=\frac{1}{N}\sum_{n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}na\cdot\frac{2\pi}{Na}(l-l')}=\frac{1}{N}\sum_{n}^{N}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\frac{l-l'}{N}2\pi}$

$$=\frac{1}{N}\cdot\frac{e^{i\frac{l-l'}{N}2\pi}\left(1-e^{i\frac{l-l'}{N}2\pi N}\right)}{1-e^{i\frac{l-l'}{N}2\pi}}=0$$

晶体物理动量$p=\sum_{n}M\dot{u}_{n}=-i\omega Me^{-i\omega t}\sum_{n}e^{inqa}$

$$=0$$

$\therefore$**结论成立。**

$3-6$设有晶格常数为a的一维单原子晶格，考虑波矢落在布里渊区边界上的振动模式：

(1) 画出这种振动模式在某一时刻原子的位移方向；

(2) 若在某一温度下这种振动模式的频率趋于零，这时原子的位移被“冻结”，晶体结构发生变化，试说明所形成的新结构。

解：(1)一维晶格位移 $u_n = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t - naq)}$

对于布里渊区边界，有 $q = \pm\dfrac{\pi}{a}$,

$$\therefore u_n = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t \mp n\pi)} = (-1)^n A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

任何时刻原子运动的位 移在量值上相同，只是相邻原子的位移方向相 反，即： $\frac{u_n}{u_{n+1}} = -1$

(2)**当** $\omega \to 0$ **时，振动至不能恢复， 此时的位移为** $(-1)^n A$**，形成的新晶格是两原 子互相靠近。**

4—1铜的空位形成能约为1.26eV，间隙原子的形成能约 为4eV，试估计接近熔点（1300K）时空位和间隙原子的 浓度，并比较两者的数量级。

解：对于空位，主要由 肖脱基缺陷引起，

$$n_{空} = Ne^{-\frac{u}{k_B T}}$$

$$\therefore \text{空位浓度} \frac{n_{空}}{N} = e^{-\frac{u}{k_B T}} = e^{-\frac{1.26\times1.6\times10^{-19}}{1.38\times10^{-23}\times1300}} = 1.32\times10^{-5}$$

对于间隙原子，由夫伦 克尔缺陷引起：

$$n_{间} = (NN')^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{u}{2k_B T}} \approx Ne^{-\frac{u}{2k_B T}}$$

$$\therefore \text{间隙原子浓度}\ \frac{n_{间}}{N} = e^{-\frac{u}{2k_B T}} = e^{-\frac{4\times 1.6\times 10^{-19}}{2\times 1.38\times 10^{-23}\times 1300}} = 1.79\times 10^{-8}$$

二者差约3个量级。

$4-2$试求产生n个肖脱基缺陷后晶体体积的变化以及对晶体热容的贡献。

解：产生n个肖脱基缺陷就意味着有n个原子从晶体内移动到表面上，这样，晶格的格点就由原来的N个增加到$N+n$个，

令原来的晶体体积为V_0，那么每个原子所占的体积为$\frac{V_0}{N}$，

$$\therefore \text{后来的体积} \ V = V_0 + \frac{V_0}{N} n = V_0 \left(1 + \frac{n}{N}\right)$$

$$\text{体积变化为} \ V - V_0 = \frac{V_0}{N} n$$

产生n个肖脱基缺陷，晶体的能量变化为nu，

而$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V$

$$\therefore \Delta C_V = \left(\frac{\partial \Delta E}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial nu}{\partial T}\right)_V = u\frac{\partial n}{\partial T}$$

而$n = N\mathrm{e}^{-\frac{u}{k_B T}}$

$$\therefore \frac{\partial n}{\partial T} = N\mathrm{e}^{-\frac{u}{k_B T}} \cdot \left(-\frac{u}{k_B}\right) \cdot \frac{(-1)}{T^2} = \frac{Nu}{k_B T^2}\mathrm{e}^{-\frac{u}{k_B T}}$$

$$\therefore \Delta C_V = \frac{Nu^2}{k_B T^2}\mathrm{e}^{-\frac{u}{k_B T}} = \frac{nu^2}{k_B T^2}$$

$5-1$导出一维、二维和三维 自由电子气的能态密度$g(E)$，画出$g(E)$随E的变化曲线，并讨论体 系维度对物理性质的影 响。

解： $$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \Rightarrow k=\left(\frac{2m}{\hbar^2}E\right)$$

一维： E以下的状态数$Z=2\cdot\frac{L}{2\pi}\cdot 2k=\frac{2L}{\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}E\right)^{\frac{1}{2}}$

$$=\frac{2L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}E^{\frac{1}{2}}$$

$$g(E)=\frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}E^{-\frac{1}{2}}=\frac{N\sqrt{2m}}{n\pi\hbar}E^{-\frac{1}{2}}$$

二维： $Z = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \cdot \pi k^2 = \frac{L^2}{2\pi} k^2 = \frac{L^2}{2\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} E$

$$\therefore g(E) = \frac{L^2 m}{\pi \hbar^2} = \frac{Nm}{n\pi\hbar^2}$$

三维： $Z = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{4\pi}{3}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$

$$\therefore g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot E^{\frac{1}{2}}$$

$5-2$证明二维自由电子气的 化学势为：

$$\mu(T)=k_{\mathrm{B}}T\ln\left[\mathrm{e}^{\pi\hbar^2 n/mk_{\mathrm{B}}T}-1\right]$$

n为单位面积上的电子数 。

证明：由$N=\int_0^\infty f(E)g(E)\mathrm{d}E$可以求$\mu(T)$。

二维自由电子气的$0\to E$间的状态数$Z=\dfrac{Nm}{n\pi\hbar^2}E$

$$g(E)=\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}E}=\frac{Nm}{n\pi\hbar^2}$$

$$\therefore N=\int_0^{\infty} f(E)g(E)\mathrm{d}E=\int_0^{\infty}\frac{Nm/n\pi\hbar^2}{\mathrm{e}^{(E-\mu)/k_\mathrm{B}T}+1}\mathrm{d}E$$

$$=\int_0^{\infty}\frac{Nmk_\mathrm{B}T}{n\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{d}\left(\dfrac{E-\mu}{k_\mathrm{B}T}\right)}{\mathrm{e}^{(E-\mu)/k_\mathrm{B}T}+1}=\frac{Nmk_\mathrm{B}T}{n\pi\hbar^2}\int_{-\frac{\mu}{k_\mathrm{B}T}}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{e}^{x}+1}$$

$$=\frac{Nmk_\mathrm{B}T}{n\pi\hbar^2}\int_{-\frac{\mu}{k_\mathrm{B}T}}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x}{\mathrm{e}^{-x}+1}=\frac{Nmk_\mathrm{B}T}{n\pi\hbar^2}\int_{-\frac{\mu}{k_\mathrm{B}T}}^{\infty}\frac{-\mathrm{d}(\mathrm{e}^{-x}+1)}{\mathrm{e}^{-x}+1}$$

$$=\frac{-Nmk_\mathrm{B}T}{n\pi\hbar^2}\ln\left[\mathrm{e}^{-x}+1\right]_{-\frac{\mu}{k_\mathrm{B}T}}^{\infty}=\frac{Nmk_\mathrm{B}T}{n\pi\hbar^2}\ln\left[\mathrm{e}^{\frac{\mu}{k_\mathrm{B}T}}+1\right]$$

$$\Rightarrow \frac{n\pi\hbar^2}{mk_{\mathrm{B}}T} = \ln\left[\mathrm{e}^{\frac{\mu}{k_{\mathrm{B}}T}} + 1\right]$$

$$\Rightarrow \mu = k_{\mathrm{B}}T \ln\left(\mathrm{e}^{\frac{n\pi\hbar^2}{mk_{\mathrm{B}}T}} - 1\right)$$

5−3试根据自由电子气量子理论的结果导出*Lorentz*数*L*的表达式，并与经典理论的结果比较。

解：根据量子理论： $C_e = \frac{\pi^2}{2} n k_B \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$

$$\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m}$$

热导率 $K = \frac{1}{3} C_e \upsilon l = \frac{1}{3} C_e \upsilon^2 \tau = \frac{1}{3} C_e \frac{2E_F}{m} \tau$

$$= \frac{1}{3} \frac{\pi^2}{2} n k_B \left(\frac{k_B T}{E_F} \right) \frac{2E_F}{m} \tau = \frac{\pi^2}{3} \frac{n k_B^2 \tau}{m} \cdot T$$

$$\therefore \frac{K}{\sigma} = \frac{\dfrac{\pi^2}{3} \dfrac{n k_B^2 \tau}{m} \cdot T}{\dfrac{n e^2 \tau}{m}} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 \cdot T$$

$$\therefore \textbf{劳仑兹数} \, L = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2$$

与书上经典结果对比。

5－4若金属中传导电子的碰撞阻力用$-\dfrac{p}{\tau}$来表示，p是电子动量，试求金属在交变电场中的电导率。

解：在电场E作用下电子的运动方程（假定E沿x方向）：

$$m\frac{\mathrm{d}\upsilon}{\mathrm{d}t}=-eE-\frac{p}{\tau}=-eE-\frac{m\upsilon}{\tau}$$

$$\therefore m\left(\frac{\mathrm{d}\upsilon}{\mathrm{d}t}+\frac{\upsilon}{\tau}\right)=-eE$$

设：$E=E_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t},\upsilon=\upsilon_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t},x=x_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$，则：

（电子能够跟上电场的 频率）

$$\left(-\mathrm{i}\omega+\frac{1}{\tau}\right)\upsilon=-\frac{e}{m}E$$

$$\therefore \upsilon=\frac{-(\mathrm{i}\omega\tau+1)}{\omega^2\tau^2+1}\frac{e\tau}{m}E$$

$$\therefore \sigma(\omega)=\frac{j}{E}=\frac{-ne\upsilon}{E}=\frac{1+\mathrm{i}\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2}\cdot\frac{ne^2\tau}{m}$$

$6-1$设有单价原子组成的一维晶格，晶格常数为a，晶体中的单电子势$V(x)$由原子势叠加而成，即

$$V(x)=-\sum_{n} A\delta(x-na)$$

式中A为常量，是δ函数势的强度，n为整数，自由原子的归一化电子波函数为

$$\varphi(x)=\beta^{1/2}\mathrm{e}^{-\beta|x|}$$

能量为E_0，试用紧束缚近似证明价电子的能量为

$$E(k)=E_0-2A\beta\mathrm{e}^{-\beta a}\cos ka$$

解：由紧束缚近似， $E(\vec{k}) = E_0^{'} - \beta^{'} - \sum_{(n,n)} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_m}\gamma^{'}(\vec{R}_m)$

(1)求$\beta^{'}$：

$$\Delta V(x) = -\sum_n A\delta(x-na) + A\delta(x)$$

$$\beta^{'} = -\int \varphi^{*}(x)\Delta V(x)\varphi(x)\mathrm{d}x$$

$$= -\beta\int \mathrm{d}x\cdot \mathrm{e}^{-2\beta|x|}[-\sum_n A\delta(x-na) + A\delta(x)]$$

$$= -A\beta + \beta\int \mathrm{d}x\cdot \mathrm{e}^{-2\beta|x|}\sum_n A\delta(x-na)$$

$$= -A\beta + A\beta\sum_n \mathrm{e}^{-2\beta|n|a}$$

$$= A\beta\sum_{n\neq 0} \mathrm{e}^{-2\beta a|n|}$$

(2)求$\gamma^{'}$：

$$\gamma^{'}=-\int\varphi^{*}(x)\Delta V(x)\varphi(x-na)\mathrm{d}x;\quad (n\neq 0, n=\pm 1)$$

当$n=1$时，$\gamma_1^{'}=-\int\beta^{1/2}\mathrm{e}^{-\beta|x|}\cdot\beta^{1/2}\mathrm{e}^{-\beta|x-a|}\cdot\Delta V(x)\mathrm{d}x$

$$=-\beta\int\mathrm{e}^{-\beta|x|}\cdot\mathrm{e}^{-\beta|x-a|}\cdot[-\sum_{n^{'}\neq 0}A\delta(x-n^{'}a)]\mathrm{d}x$$

$$=\beta A\sum_{n^{'}\neq 0}\mathrm{e}^{-\beta a[|n^{'}|+|n^{'}-1|]}=\beta A\mathrm{e}^{-\beta a}$$

（忽略高阶项）

（原子波函数在其它原 子上几率小，$\mathrm{e}^{-\beta a}$为小量）

同理：$\gamma_{-1}^{'}=\beta A\mathrm{e}^{-\beta a}$

$$\therefore E(k)=E_0^{'}-2\beta A\mathrm{e}^{-2\beta a}-[\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\gamma_1^{'}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\gamma_{-1}^{'}]=E_0-2\beta A\mathrm{e}^{-\beta a}\cos ka$$

6－2利用紧束缚近似导出的s带能量的一般公式

$$E(\vec{k})=E_0^{'}-\beta^{'}-\sum_{(n,n)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_m}\gamma^{'}(\vec{R}_m)$$

对m的求和只限于最近邻，试求bcc和fcc晶格s带的能量$E(k)$.

解：（1）对于bcc：

最近邻原子数8个；坐标（$\pm\frac{a}{2},\pm\frac{a}{2},\pm\frac{a}{2}$）

代入上式，得：

$$E_s(\vec{k})=E_s-\beta-\gamma\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_x\frac{a}{2}+k_y\frac{a}{2}+k_z\frac{a}{2})}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-\frac{a}{2}k_x+\frac{a}{2}k_y+\frac{a}{2}k_z)}+\ldots+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-\frac{a}{2}k_x-\frac{a}{2}k_y-\frac{a}{2}k_z)}\right]$$

$$=E_s-\beta-8\gamma\cos\frac{1}{2}k_xa\cos\frac{1}{2}k_ya\cos\frac{1}{2}k_za$$

(2)对于fcc：　最近邻原子数12个。

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

代入，得：

$$E_s(\vec{k})=E_s-\beta-\gamma\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_y\frac{a}{2}+k_z\frac{a}{2})}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_y\frac{a}{2}+k_z\frac{a}{2})}+\ldots\right]$$

$$=E_s-\beta-4\gamma\left(\cos\frac{1}{2}k_xa\cos\frac{1}{2}k_ya+\cos\frac{1}{2}k_xa\cos\frac{1}{2}k_za+\cos\frac{1}{2}k_ya\cos\frac{1}{2}k_za\right)$$

6 − 3 已知简单立方晶格 s 带的能量为

$$E(\vec{k}) = E_s - \beta - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a),$$

试求：能带极值附近电子的有效质量及能态密度。

解：带顶：$(\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{\pi}{a},\pm\frac{\pi}{a})$，**带底：**$(0,0,0)$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = 2\gamma a^2 \cos k_x a$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} = 2\gamma a^2 \cos k_y a$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} = 2\gamma a^2 \cos k_z a$$

对于带顶：

$$m_{xx}^{*}=\frac{\hbar^{2}}{\frac{\partial^{2}E}{\partial k_{x}^{2}}}=\frac{-\hbar^{2}}{2\gamma a^{2}} \qquad m_{yy}^{*}=m_{zz}^{*}=m_{xx}^{*}$$

$\left(\frac{\pi}{a}\quad\frac{\pi}{a}\quad\frac{\pi}{a}\right)$**附近，有：**

$$E(\vec{k})=E_{s}-\beta-2\gamma(-1+\frac{1}{2}a^{2}(k_{x}-\frac{\pi}{a})^{2}-1+\frac{1}{2}a^{2}(k_{y}-\frac{\pi}{a})^{2}-1+\frac{1}{2}a^{2}(k_{x}-\frac{\pi}{a})^{2})$$

$$=E_{s}-\beta+6\gamma-a^{2}\gamma\left[\left(k_{x}-\frac{\pi}{a}\right)^{2}+\left(k_{y}-\frac{\pi}{a}\right)^{2}+\left(k_{z}-\frac{\pi}{a}\right)^{2}\right]$$

令：$E_0 = E_s - \beta + 6\gamma$；$k_x^{'} = k_x - \dfrac{\pi}{a}$；$k_y^{'} = k_y - \dfrac{\pi}{a}$

$k_z^{'} = k_z - \dfrac{\pi}{a}$

则：$E(\vec{k}) = E(\vec{k}^{'}) = E_0 - a^2\gamma k^{'2}$

$$\Rightarrow k^{'2} = \frac{E_0 - E(\vec{k}^{'})}{\gamma a^2}；\quad \mathrm{d}k^{'} = \frac{-1}{2\gamma a^2}\frac{1}{\sqrt{\dfrac{E_0 - E(\vec{k}^{'})}{\gamma a^2}}}\mathrm{d}E(\vec{k}^{'})$$

$$g(E)=\frac{V}{4\pi^3}\int\delta(E-E(\vec{k}^{'}))\mathrm{d}^3k^{'}$$

$$=\frac{V}{4\pi^3}\int_0^{\infty}\delta(E-E(\vec{k}^{'}))4\pi k^{'2}\mathrm{d}k^{'}$$

$$=\frac{V}{4\pi^3}\int_{E_0}^{-\infty}\delta(E-E(\vec{k}^{'}))4\pi\sqrt{\frac{E_0-E(\vec{k}^{'})}{\gamma a^2}}\left(\frac{-1}{2\gamma a^2}\right)\mathrm{d}E(\vec{k}^{'})$$

$$=\frac{V}{4\pi^3}\int_{-\infty}^{E_0}\delta(E-E(\vec{k}^{'}))4\pi\left(\frac{1}{2\gamma a^2}\right)\sqrt{\frac{E_0-E(\vec{k}^{'})}{\gamma a^2}}\mathrm{d}E(\vec{k}^{'})$$

$$=\frac{V}{4\pi^3}\cdot 4\pi\cdot\frac{1}{2\gamma a^2}\sqrt{\frac{E_0-E}{\gamma a^2}}$$

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{1}{(\gamma a)^{3/2}} (E_0 - E)^{1/2}$$

$$= \frac{V}{2\pi^2} \frac{1}{(\gamma a)^{3/2}} (E_s - \beta + 6\gamma - E)^{1/2}$$

对于带底：

$$m_{xx}^{*}=\frac{\hbar^{2}}{\frac{\partial^{2}E}{\partial k_{x}^{2}}}=\frac{\hbar^{2}}{2\gamma a^{2}}\text{；}\quad m_{yy}^{*}=m_{zz}^{*}=\frac{\hbar^{2}}{2\gamma a^{2}}$$

$\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\end{pmatrix}$ **附近，有：**

$$E(\vec{k})=E_{s}-\beta-2\gamma(1-\frac{1}{2}a^{2}k_{x}^{2}+1-\frac{1}{2}a^{2}k_{y}^{2}+1-\frac{1}{2}a^{2}k_{z}^{2})$$

$$=E_{s}-\beta-6\gamma+\gamma k^{2}a^{2}$$

$$=E_{0}^{'}+\gamma k^{2}a^{2}$$

$$\therefore k^2 = \frac{E(\vec{k}) - E_0^{'}}{\gamma a^2} \qquad \mathrm{d}k = \frac{1}{2\sqrt{\gamma a^2}\cdot\sqrt{E(\vec{k}) - E_0^{'}}}\mathrm{d}E(\vec{k})$$

$$\therefore g(E) = \frac{V}{4\pi^3}\int \delta(E - E(\vec{k}))\mathrm{d}^3 k$$

$$= \frac{V}{4\pi^3}\int_0^\infty \delta(E - E(\vec{k}))4\pi k^2 \mathrm{d}k$$

$$= \frac{V}{4\pi^3}\int_{E_0^{'}}^\infty \delta(E - E(\vec{k}))4\pi \frac{E(\vec{k}) - E_0^{'}}{\gamma a^2}\cdot\frac{\mathrm{d}E(\vec{k})}{2\sqrt{\gamma a^2}\cdot\sqrt{E(\vec{k}) - E_0^{'}}}$$

$$= \frac{V}{2\pi^2}\frac{1}{(\gamma a)^{3/2}}\cdot(E - E_0^{'})^{1/2}$$

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{1}{(\gamma a)^{3/2}} (E - E_s + \beta + 6\gamma)^{1/2}$$

6—4设有一维晶格，在$t=0$时电子处在能带底（设能量为零），此时沿晶格方向加静电场，试说明：

(1) 电子在$\vec{k}$空间中的运动是周期性的，并求出周期；

(2) 电子在$\vec{r}$空间中的运动是否也是周期的？

解: (1)电子在$\vec{k}$空间的运动方程为： $\hbar\dfrac{\mathrm{d}\vec{k}}{\mathrm{d}t}=-e\vec{\varepsilon}$

$$\therefore \vec{k}(t)=-\frac{e\vec{\varepsilon}}{\hbar}t \qquad (\vec{k}(t=0)=0)$$

只要证明$\vec{k}(t)$与$\vec{k}(t+T)$对应相同的状态，那么每经历时间T，就达到相同的状态，那么就可以说明在$\vec{k}$空间的运动是以T为周期的。

在晶体中，$\vec{k}$与$\vec{k}+\vec{G}$对应相同的状态，那么$\vec{k}(t)$随时间增长，一定会达到$\vec{k}(t+T)=\vec{k}(t)+\vec{G}$

即：$\vec{G}=-\dfrac{e\vec{\varepsilon}}{\hbar}T$，**而**$\vec{G}=\dfrac{2\pi}{a}\vec{i}$ $\boxed{(令\vec{\varepsilon}=-\varepsilon\vec{i})}$

$$\therefore T=\frac{2\pi\hbar}{e\varepsilon a}$$

(2)**在真实空间中，有：**

$$\vec{\upsilon}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\vec{\nabla}_{\vec{k}}E(\vec{k})$$

$$\vec{r}(t) = \int_0^t \vec{\upsilon}(t)\mathrm{d}t$$

$$\vec{r}(t+T) = \int_0^{t+T} \upsilon(t)\mathrm{d}t = \int_0^t \upsilon(t)\mathrm{d}t + \int_t^{t+T} \upsilon(t)\mathrm{d}t$$

而 $\displaystyle\int_t^{t+T} \upsilon(t)\mathrm{d}t = \int_t^{t+T} \upsilon(\vec{k}(t))\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}k}\mathrm{d}k = -\frac{\hbar}{e\vec{\varepsilon}}\int_{k(t)}^{k(t+T)} \upsilon(k)\mathrm{d}k$

由于$\upsilon(k)$是k的奇函数，所以k变化一个周期积分＝0

$$\therefore \vec{r}(t+T)=\vec{r}(t)$$

即：电子在真实空间的 运动也是周期性的，其 周期与在$\vec{k}$空间相同。

6－5按近自由电子近似，靠 近布里渊区界面时，电 子的能量

$$E(\vec{k})=\frac{1}{2}[E^0(\vec{k})+E^0(\vec{k}+\vec{G}_n)]\pm\frac{1}{2}\left\{[E^0(\vec{k})-E^0(\vec{k}+\vec{G}_n)]^2+4\left|V(\vec{G}_n)\right|^2\right\}^{\frac{1}{2}}$$

试证明：电子的等能面 与布里渊区界面垂直相交。

证：

$$\frac{\partial E_\pm(\vec{k})}{\partial\vec{k}}=\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2\vec{k}+\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2(\vec{k}+\vec{G}_n)$$

$$\pm\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\left\{\left[E^0(\vec{k})-E^0(\vec{k}+\vec{G}_n)\right]^2+4\left|V(\vec{G}_n)\right|^2\right\}^{-1/2}$$

$$\times 2[E^0(\vec{k})-E^0(\vec{k}+\vec{G}_n)]\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 2[\vec{k}-\vec{k}-\vec{G}_n]$$

当$\vec{k}$端点落在布里渊区边界上时：

$$2\vec{k}\cdot\vec{G}_n + G_n^2 = 0 \Rightarrow E^0(\vec{k}) = E^0(\vec{k}+\vec{G}_n)$$

$$\therefore \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \frac{\hbar^2}{m}(\vec{k}+\frac{1}{2}\vec{G}_n)$$

$\dfrac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$与等能面垂直；

而$\vec{k}+\dfrac{1}{2}\vec{G}_n$的方向沿着布里渊区（$-\vec{G}_n$）的边界；

所以，等能面与布里渊区边界垂直相交。

8—1设有二维矩形晶格，原胞边长为a和$2a$，若每原子提供2个价电子，试分别用简约区图式和重复区图式画出自由电子的费米面，如果受到弱周期场的微扰，其费米面的形状发生什么变化？

解：设$\vec{a}_1 = 2a\vec{i}$，$\vec{a}_2 = a\vec{j}$

$\Rightarrow$ 倒格子基矢$\vec{b}_1 = \dfrac{\pi}{a}\vec{i}$，$\vec{b}_2 = \dfrac{2\pi}{a}\vec{j}$

(1)先计算费米波矢k_F

设原子数为N，则电子数$2N$，面积$S = Na2a = 2a^2N$

倒空间中面积元为
$$\frac{4\pi^2}{S} = \frac{4\pi^2}{2a^2N} = \frac{2\pi^2}{a^2N}$$

$$\frac{\frac{\pi k_F^2}{4\pi^2}}{S} \times 2 = 2N \qquad \Rightarrow k_\mathrm{F} = \frac{\sqrt{2\pi}}{a}$$

(2)第一区与第二区边界情况：

$$\frac{b_1}{2} = \frac{\pi}{2a} \qquad \frac{b_2}{2} = \frac{\pi}{a}$$

$$\frac{b_1}{2} < k_{\mathrm{F}} < \frac{b_2}{2}$$

受到弱周期场的作用，在布里渊区边界附近，出现能隙，费米面与边界垂直相交。

8－3有一半金属，其交叠的能带为：

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

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

$m_1 > m_2$，$E_1(0) > E_2(\vec{k}_0)$，**试求：**$T = 0\mathrm{K}$**时的费米能**E_F.

解：设费米能为E_F**，原来系统的电子数恰好填满第一个能带**$E_1(\vec{k})$**，现在发生**E_1**与**E_2**的重叠，那么有部分**$E_1(\vec{k})$**状态空着，而有一部分**$E_2(\vec{k})$**的状态被填充，所以**$T = 0K$**时，**E_1**的空状态数与**E_2**的被占据状态数相同。**

即： $$\int_{E_F}^{E_1(0)} g_1(E_1)\mathrm{d}E_1 = \int_{E_2(k_0)}^{E_F} g_2(E_2)\mathrm{d}E_2$$

而 $$g_1(E_1) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_1}{\hbar^2}\right)^{3/2}[E_1(0) - E_1(\vec{k})]^{1/2}$$

$$g_2(E_2) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_2}{\hbar^2}\right)^{3/2}[E_2(\vec{k}) - E_2(k_0)]^{1/2}$$

代入，得： $$m_1^{3/2}\int_{E_F}^{E_1(0)}[E_1(0) - E]^{1/2}\mathrm{d}E = m_2^{3/2}\int_{E_2(k_0)}^{E_F}[E - E_2(k_0)]^{1/2}\mathrm{d}E$$

$$\Rightarrow m_1[E_1(0) - E_{\mathrm{F}}] = m_2[E_{\mathrm{F}} - E_2(k_0)]$$

$$\therefore E_{\mathrm{F}} = E_1(0) - \frac{E_1(0) - E_2(k_0)}{1 + \dfrac{m_1}{m_2}}$$