



一、简述

1. Bloch 定理;

晶体中电子的波函数是按晶格周期调幅的平面波, 即电子波函数具有如下形式: $\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r})$, $u_k(\vec{r} + \vec{R}_n) = u_k(\vec{r})$, 其中 k 为电子的波矢, $\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ 为正格矢。

2. 结合图示说明: 在周期性势场中运动的电子, 其能量与波矢关系的特征(即: 能带结构的特征);

(1) 许可能级形成能带带两相邻能带之间存在不许可的能量状态称之为禁带;



(2) 电子能量 E 是波矢的偶函数;

(3) 对于任一个给定的能量, 能量 E 是波矢的 K 的周期函数, 周期等于倒格子周期;

(4) 禁带位置出现在布里渊区边界;

(5) 能带宽度随能量增加而变宽。



3. 近自由电子近似的基本假设及其处理方法;

将晶格势场近似为一个平均场加上一个微扰来处理:

首先, 在零级近似下考虑到周期性边界条件得到了波矢 \vec{k} 的允许取值, 于是推出了能量的准连续性;

第二, 由于考虑二级微扰而推出能量在布里渊区边界会分裂, 且发生了能级间的“排斥作用”, 于是形成了能带和带隙。



4. 根据近自由电子近似理论，解释禁带产生的原因；

根据近自由电子近似的观点产生原因为电子在布里渊区边界受到强烈散射，散射波与入射波产生相干叠加，形成两种形式的驻波，并在布里渊区边界产生两种能量状态，从而产生禁带。

5. 紧束缚近似的基本假设及其处理方法；

以原子轨道波函数作为基函数来表示，进一步求出紧束缚近似下晶体电子的波函数为 Bloch 波：

$$\psi(\vec{r}) = c \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} \varphi_i(\vec{r} - \vec{R}_m)$$



6. 根据紧束缚近似理论，解释禁带产生的原因；

根据紧束缚近似，孤立原子的外层电子具有不同的能级，原子在形成固体时，由于相互作用力的存在，原孤立原子的各分立能级相互平移，并拓展形成能带，但在形成能带的同时，由于孤立原子能级本身就不连续，如果各能带之间并未发生交叠，则仍然存在能量不许可区间，这就是禁带。



7.与自由电子的惯性质量相比，有效质量的特点有哪些？

物理概念：在电子运动准经典模型中引入了电子有效质量张量，用来描述在外力作用下，与牛顿相比电子运动所具有的相应质量。

一些性质：能带带底附近电子有效质量为正，带顶附近为负；在同一位置空穴的有效质量与电子的有效质量符号相反。



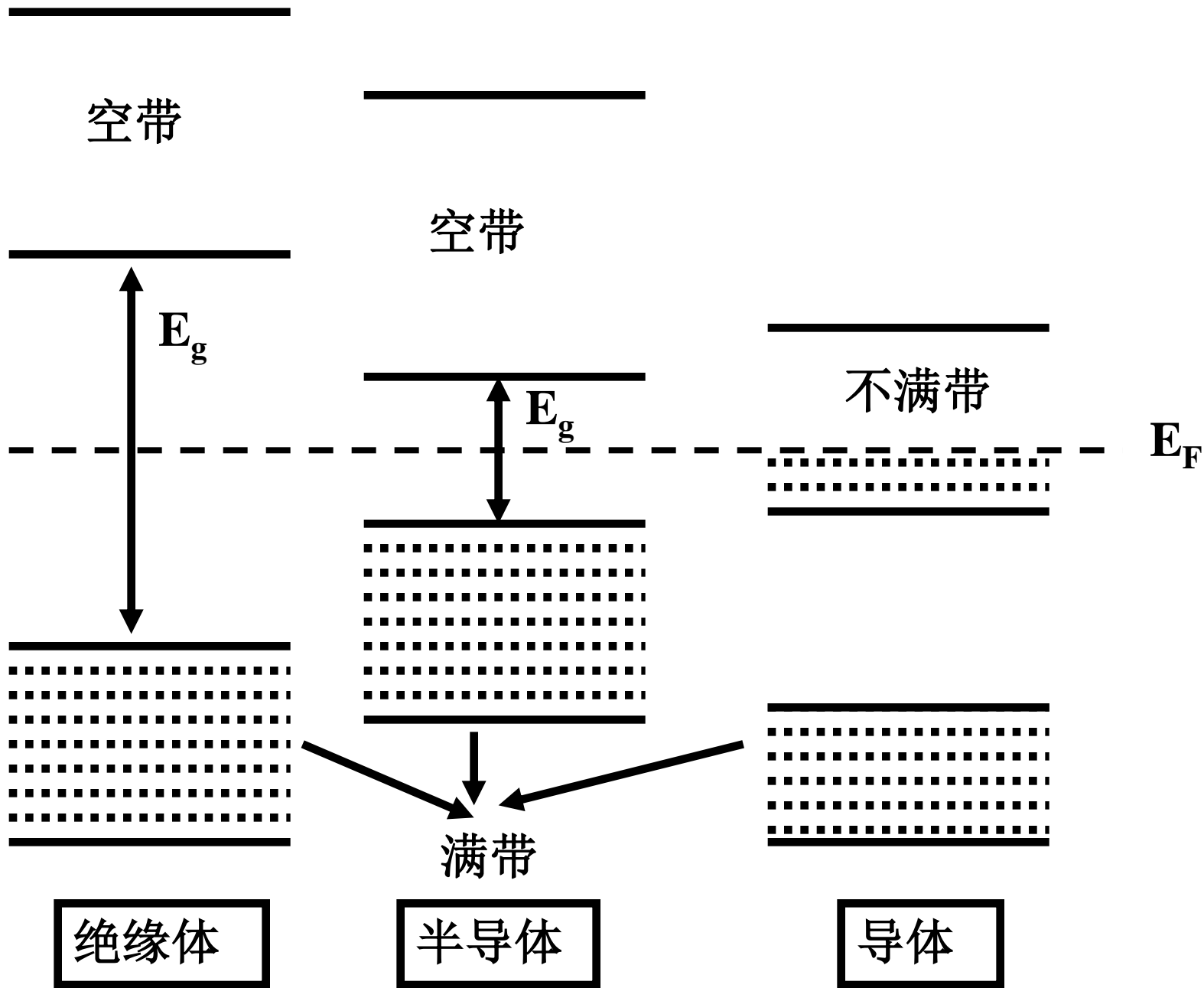
8. 在能带顶部，电子的有效质量是小于 0 的，解释其原因。

一方面，外场的作用电子获得动量，另一方面，电子受晶格散射而动量减小。如果，电子从外场获得的动量大于电子传递给晶格的动量，则总体表现为：在外场的作用下，电子的动量增加，体现为 $m^* > 0$ ；如果电子从外场获得的动量小于它传递给晶格的动量，则总体表现为：在外场的作用下，电子的动量反而减小，体现为 $m^* < 0$ 。能带顶部电子特征正好符合后者，表现出来就是电子的有效质量小于零。



9. 结合图示说明导体、半导体、绝缘体的能带结构特点，并从能带结构的特点出发，解释其导电性能差异的原因。

满带中的电子对电导没有贡献，只有不满带的电子对电导才有贡献，导体的导带为不满的能带所以才能导电，半导体和绝缘体的能带非常相似，其导带均为满带，价带都是空带，但他们导带与价带之间的带系不同，半导体的导带与价带之间的带系较小，在常温下，可以通过热激发将导带上的电子激发到价带上，从而导致导带和价带均不满，具有一定的导电性。而绝缘体的导带与价带之间的带系较大，在常温下无法通过热激发将导带上的电子激发到价带上从而不导电）





10. 费米面

能量值等于费米能的的等能面

11. 金属中虽然存在大量的自由电子，但电子的比热非常小，请解释其原因；

电子比热涉及到电子能态的改变，在金属中只有在费米面附近的电子才有可能在温度升高的时候跃迁到费米能级之上的能级去也就是说只有费米面附近的电子才对系统能量改变有贡献，因此金属中存在大量自由电子但电子比热很小。



12. 请分别写出绝缘体和导体的低温比热表达式

绝缘体: $C_V = bT^3$; 导体: $C_V = \gamma T + bT^3$

13. 功函数

答: 费米能与真空能级的差被称为功函数, 他代表电子脱离材料成为自由电子所需要的能量)

14. 接触电势差产生的原因。

答: 由于不同金属的费米能级高度不同, 因此当 2 种金属相接触的时候, 电子将从费米能级高的金属流向费米能级低的金属从而在接触面形成空间电荷层。从而产生接触电势差)



15. 电子枪可以发射电子，解释其原因

基于热电子发射原理，当金属被加热时，一部分电子获得足够能量，就可以挣脱金属的束缚，从金属表面发射出去。在电子枪中有一个金属灯丝，在工作时在金属灯丝两端施加一定电流，使灯丝发热，从而产生热电子发射，这就是电子枪的工作原理。



二、计算

1. 设有一面积为 S 的二维金属晶体，包含了 N 个自由电子，求：

(1). 电子的状态密度， (2). 电子的费米能， (3). 电子的平均能量及电子的比热。

二维情况下态密度的一般表示式为

$$N(E) = \frac{S}{2\pi^2} \int_L \frac{dL}{|\nabla_k E|}.$$

其中 S 是晶格的面积，积分沿能量为 E 的等能线进行。



由 $E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)$ 得:

$$|\nabla_k E| = \frac{\hbar^2}{m} (k_x^2 + k_y^2)^{1/2} = \frac{\hbar^2 k}{m} .$$

于是有

$$N(E) = \frac{S}{2\pi^2} \int_L \frac{dL}{|\nabla_k E|} = \frac{S}{2\pi^2} \left(\frac{\hbar^2 k}{m} \right)^{-1} 2\pi k = \frac{S}{\pi} \frac{m}{\hbar^2} .$$



自由电子数:

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

$$= \frac{mS}{\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} f(E) dE = \frac{mS}{\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{dE}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1}$$

$$= \frac{mS}{\pi \hbar^2} k_B T \int_{-E_F/k_B T}^{\infty} \frac{dx}{e^x + 1} = \frac{mS}{\pi \hbar^2} k_B T \ln(1 + e^{-E_F/k_B T})$$



自由电子数:

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

$$= \frac{mS}{\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} f(E) dE = \frac{mS}{\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{dE}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1}$$

$$= \frac{mS}{\pi \hbar^2} k_B T \int_{-E_F/k_B T}^{\infty} \frac{dx}{e^x + 1} = \frac{mS}{\pi \hbar^2} k_B T \ln(1 + e^{-E_F/k_B T})$$

$$E_F = k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{\pi \hbar^2 N}{m k_B T S} \right) - 1 \right]$$



T 趋于零时, $\exp\left(\frac{\pi\hbar^2 N}{mk_B TS}\right) \gg 1$, 所以:

$$E_F^0 \approx k_B T \frac{\pi\hbar^2 N}{mk_B TS} = \frac{\pi\hbar^2 N}{mS}$$



自由电子总能量:

$$\begin{aligned} E_T &= \int_0^{\infty} EN(E)f(E)dE = \frac{S}{\pi} \frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} Ef(E)dE \\ &= \frac{S}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} \left[-\int_0^{\infty} E^2 \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE \right] \end{aligned}$$



$$I = - \int_0^{\infty} g(E) \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE = g(E_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g''(E_F) + \dots$$

令 $g(E) = E^2$, 上式写为:

$$E_T = \frac{S}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} [E_F^2 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2]$$

$$= \frac{S}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} E_F^2 [1 + \frac{\pi^2}{3} (\frac{k_B T}{E_F})^2]$$



令 $g(E) = E^2$ ，上式写为：

$$E_T = \frac{S}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} [E_F^2 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2]$$

$$= \frac{S}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2} E_F^2 [1 + \frac{\pi^2}{3} (\frac{k_B T}{E_F})^2]$$

热容： $C_V = (\frac{\partial E_T}{\partial T})_V = \frac{\pi S}{3} \frac{m}{\hbar^2} k_B^2 T$



3. 今有一晶格常数为 a 的一维金属，在电场强度为 E 的电场作用下，求电子运动的周期。

$$F = eE = \frac{\hbar dk}{dt}$$

$$dk = \frac{eE}{\hbar} dt$$



所谓周期就是：电子波矢从 $-\pi/a$ 变为 π/a 所需要的时间

$$dk = \frac{eE}{\hbar} dt$$

$$\frac{2\pi}{a} = \frac{eE}{\hbar} T$$

$$\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk = \int_0^T \frac{eE}{\hbar} dt$$

$$T = \frac{2\pi\hbar}{aeE}$$



4. 设有一个晶格常数为 a 的二维简单正方晶格，求：

- (1). 正格子原胞基矢和倒格子原胞基矢； (2). 画出第一和第二布里渊区； (3). 用紧束缚近似计算 S 电子的能量表达式及其能带宽度； (4). 写出 S 电子的速度表达式；
- (5). 计算 S 能带带底和能带顶的电子有效质量。
-

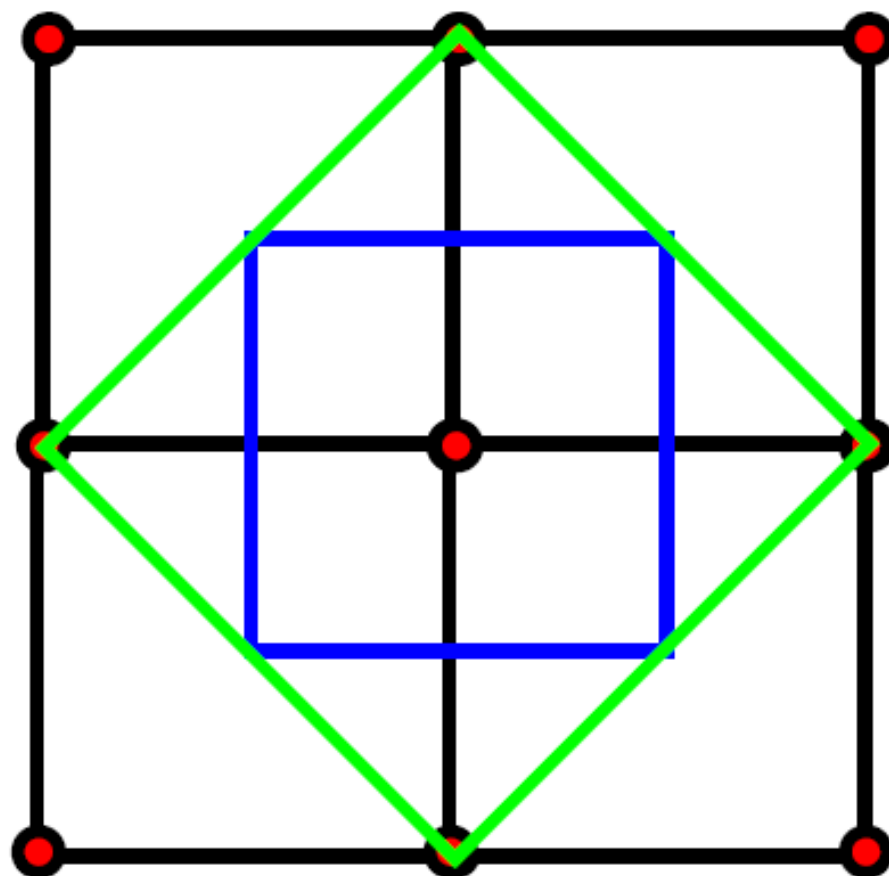


(1)、原胞基矢为

$$a_1 = ai \quad a_2 = aj$$

引入 $a_3 = ck$, 计算得出:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}i, \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}j$$



(2)、蓝色区域内是第一布里渊区，蓝色和绿色所夹的四个三角形为第二布里渊区



(3)、用紧束缚近似计算 S 电子的能量表达式及能带宽度
最近邻点的坐标: $(a,0)$, $(-a,0)$, $(0,a)$, $(0,-a)$

$$E(\vec{k}) = E_s^{at} + C_s - 2J[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$

最小值位于 $k_x = k_y = 0$ 处 $E_{\min} = E_s^{at} + C_s - 4J$

最大值位于 $k_x = k_y = \pi/a$

$$E_{\max} = E_s^{at} + C_s + 4J$$

—— 能带宽度 $\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 8J$ ——



(4)、S 电子的速度

$$\vec{V}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \vec{i} + \frac{\partial E}{\partial k_y} \vec{j} \right)$$

$$\vec{V}(\vec{k}) = \frac{2Ja}{\hbar} \left[\sin(k_x a) \vec{i} + \sin(k_y a) \vec{j} \right]$$



(5)、S 电子的有效质量

将 $E(k)$ 关系带入：

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \end{vmatrix}$$

得：

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{vmatrix} 2Ja^2 \cos(k_x a) & 0 \\ 0 & 2Ja^2 \cos(k_y a) \end{vmatrix}$$



S 能带底和能带顶的电子有效质量

能带低——能量最小值， 位于 $k_x = k_y = 0$ 处

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{vmatrix} 2Ja^2 & 0 \\ 0 & 2Ja^2 \end{vmatrix}$$

有些书也写成

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}$$



严谨一点的话，应该写成：

$$m_{xx}^* = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}$$

$$m_{yy}^* = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}$$



最大值位于 $k_x = k_y = \pi/a$

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = -\frac{1}{\hbar^2} \begin{vmatrix} 2Ja^2 & 0 \\ 0 & 2Ja^2 \end{vmatrix}$$

有些书也写成

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2Ja^2}$$



严谨一点的话，应该写成：

$$m_{xx}^* = -\frac{\hbar^2}{2Ja^2} \quad m_{yy}^* = -\frac{\hbar^2}{2Ja^2}$$
