1. 晶格常数为a的一维晶格中，电子的波函数为

(1) $\psi_k(x)=i\cos\frac{3\pi}{a}x$，

(2) $\psi_k(x)=\sum_{l=-\infty}^{\infty}f(x-la)$，$f$是某一函数，

求电子在以上状态中的波矢.

王老师，教材，p229

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

且 $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}_n)$

其中, $\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ 为正格矢

一维周期性势场中电子波函数为：

$$\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$$

且 $u_k(x) = u_k(x+na)$

$$\psi_k(x + na) = u_k(x + na)e^{ik(x+na)}$$

$$u_k(x) = u_k(x + na)$$

$$\psi_k(x + na) = u_k(x)e^{ikx}e^{ikna}$$

$$\psi_k(x + na) = \psi_k(x)e^{ikna}$$

（1）

$$\psi_K(x) = i\cos\left(\frac{3\pi}{a}x\right)$$

$$\psi_K(x+na) = i\cos\left(\frac{3\pi}{a}(x+na)\right)$$

$$= i\cos\left(\frac{3\pi}{a}x + 3n\pi\right)$$

$$= i(-1)^{3n}\cos\left(\frac{3\pi}{a}a\right)$$

$$= (-1)^{3n}\psi_k(x)$$

根据 $\psi_K(x+na)=\psi_K(x)e^{iKna}$，得：

$$e^{ikna}=(-1)^{3n} \qquad kna=3n\pi$$

$$k=\frac{3\pi}{a}$$

（2） $$\psi_K(x+na)=\sum_{L=-\infty}^{+\infty} f(x+na-La)$$

$$=\sum_{l=-\infty}^{\infty} f[x-(L-n)a]$$

$$=\sum_{L^*=-\infty}^{\infty} f(x-L^*a)=\psi_k(x)$$

根据 $\psi_K(x+na)=\psi_K(x)e^{iKna}$，得：

$$e^{ikna}=1 \qquad kna=2n\pi$$

$$k=\frac{2\pi}{a}$$

4. 已知一维晶格中电子的能带可写成

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

式中 a 是晶格常数，m 是电子的质量，求

(1)能带宽度，

(2)电子的平均速度，

(3)在带顶和带底的电子的有效质量.

王老师，教材，p230

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

$$E = \frac{\hbar^2}{4ma^2}\left[3 - 4\cos(ka) + \cos^2(ka)\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{4ma^2}\left[\left(\cos(ka) - 2\right)^2 - 1\right]$$

当 cos(ka)=-1 时，即 k=π/a，具有最大值，$E_{\max} = \dfrac{2\hbar^2}{ma^2}$

当 cos(ka)=1 时，即 k=0，具有最小值，$E_{\min} = 0$

$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k}\vec{i}$$

$$= \frac{\hbar}{2ma}\left[2 - \cos(ka)\right]\sin(ka)$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

$$= \frac{1}{2ma}\frac{\partial}{\partial k}\{[2 - \cos(ka)\sin(ka)]\}$$

$$= \frac{1}{2m}\{\sin^2(ka) + 2\cos(ka) - \cos^2(ka)\}$$

带顶，$\dfrac{1}{m^*} = -\dfrac{3}{2m}$ $\qquad m^* = -\dfrac{2}{3}m$

带底，$\dfrac{1}{m^*} = \dfrac{1}{2m}$ $\qquad m^* = 2m$

2. 二维电子气的能态密度

$$N(E)=\frac{m}{\pi\hbar^2},$$

证明费密能

$$E_F=k_BT\ln[e^{n\pi\hbar^2/mk_BT}-1],$$

其中 n 为单位面积的电子数.

王老师，教材，p272

二维情况下态密度的一般表示式为

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

其中 S 是晶格的面积，积分沿能量为 E 的等能线进行。

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

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

于是有

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

自由电子数：

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

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

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

$$E_F = k_BT\ln[\exp(\frac{\pi\hbar^2 N}{mk_BTS})-1]$$