

固体物理学作业

Charles Luo

2025 年 6 月 4 日

目录

1	第一章习题	3
2	第二章习题	9
3	第三章习题	12
4	第四章习题	22
5	第五章习题	30

1 第一章习题

习题 1. 在正交直角坐标系中, 若矢量 $\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{i} + n_2 \mathbf{j} + n_3 \mathbf{k}$, 其中 $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ 为单位矢量, $n_i (i = 1, 2, 3)$ 为整数。问下列情况属于什么点阵?

- (a) 当 n_i 为全奇加全偶时;
- (b) 当 n_i 之和为偶数时。

解答.

- (a) 据题意, 全奇加全偶应是两个布拉维格子的叠加。

若 $n_i (i = 1, 2, 3)$ 全为偶数, 可以提取公因子 2 得到 $\mathbf{R}_n = n'_1 (2\mathbf{i}) + n'_2 (2\mathbf{j}) + n'_3 (2\mathbf{k})$, 此时 $n'_i (i = 1, 2, 3)$ 为整数, 对应简单立方点阵, 格矢长度为 2 个单位长度。

同理可得 $n_i (i = 1, 2, 3)$ 全为奇数时也为简单立方点阵, 可由全为偶数时点阵沿 $(1, 1, 1)$ 方向平移一个单位长度得到。

二者的嵌套为体心立方点阵。

- (b) 据题意, $n_1 + n_2 + n_3 = 2k, k \in \mathbb{N}$ 。

不妨取 $k = 1$ 和 $k = 2$ 来猜测, 可以得到格点坐标为 $(1, 1, 0), \dots, (0, 1, 1), (2, 0, 0), \dots, (0, 0, 2)$. 为面心立方点阵。

习题 1 的注记.

- (b) 可取 $k_1 = k - n_1, k_2 = k - n_2, k_3 = k - n_1 - n_2$, 得到 $\mathbf{R}_n = (k_2 + k_3) \mathbf{i} + (k_3 + k_1) \mathbf{j} + (k_1 + k_2) \mathbf{k}$.

习题 2. 分别证明:

- (a) 面心立方 (fcc) 和体心立方 (bcc) 点阵的惯用初基元胞三基矢间夹角 θ 相等, 对 fcc 为 60° , 对 bcc 为 $109^\circ 27'$;
- (b) 在金刚石结构中, 作任一原子与其四个最近邻原子的连线。证明任意两条线之间夹角 θ 均为

$$\arccos \left(-\frac{1}{3} \right) = 109^\circ 27'.$$

解答.

(a) fcc 三个基矢为 $\mathbf{a}_1 = \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a}_2 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a}_3 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$.

$$\text{故 } \cos \theta = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1| |\mathbf{a}_2|} = \frac{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3}{|\mathbf{a}_2| |\mathbf{a}_3|} = \frac{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1}{|\mathbf{a}_3| |\mathbf{a}_1|} = \frac{1}{2}, \text{ 即 } \theta = 60^\circ.$$

bcc 三个基矢为 $\mathbf{a}_1 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a}_2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \mathbf{a}_3 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$.

$$\text{故 } \cos \theta = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1| |\mathbf{a}_2|} = \frac{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3}{|\mathbf{a}_2| |\mathbf{a}_3|} = \frac{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1}{|\mathbf{a}_3| |\mathbf{a}_1|} = -\frac{1}{3}, \text{ 即 } \theta = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109^\circ 27'.$$

(b) 金刚石结构中坐标为 $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$ 的原子相邻的 4 个原子坐标分别为 $(0, 0, 0), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right),$

$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$. 邻边 $\mathbf{l}_1 = \left(-\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}\right), \mathbf{l}_2 = \left(-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \mathbf{l}_3 = \left(\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \mathbf{l}_4 = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}\right)$.

$$\text{故 } \cos \theta = \frac{\mathbf{l}_1 \cdot \mathbf{l}_2}{|\mathbf{l}_1| |\mathbf{l}_2|} = \frac{\mathbf{l}_2 \cdot \mathbf{l}_3}{|\mathbf{l}_2| |\mathbf{l}_3|} = \frac{\mathbf{l}_3 \cdot \mathbf{l}_4}{|\mathbf{l}_3| |\mathbf{l}_4|} = \frac{\mathbf{l}_4 \cdot \mathbf{l}_1}{|\mathbf{l}_4| |\mathbf{l}_1|} = -\frac{1}{3}, \text{ 即 } \theta = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) = 109^\circ 27'.$$

习题 3. 证明在六角晶系中米勒指数为 (hkl) 的晶面族间距为

$$d = \left[\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

解答. 米勒指数以单胞的三条棱为坐标系.

正点阵的一族晶面 (hkl) 垂直于倒格矢 $\mathbf{K}_h = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$, 晶面间距 $\frac{2\pi}{|\mathbf{K}_h|}$.

在六角晶系中 $\mathbf{a} = (a, 0, 0), \mathbf{b} = \left(-\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a, 0\right), \mathbf{c} = (0, 0, c)$.

求倒点阵基矢:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{\sqrt{3}}{3}, 0\right).$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2\sqrt{3}}{3}, 0\right).$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = \frac{2\pi}{c} (0, 0, 1).$$

$$\text{倒格矢 } \mathbf{K}_h = \left(\frac{2\pi}{a}h, \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}h + \frac{4\sqrt{3}\pi}{3a}k, \frac{2\pi}{c}l \right), \text{ 故 } d = \frac{2\pi}{|\mathbf{K}_h|} = \left[\frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

习题 4. 证明底心正交点阵的倒点阵仍为底心正交点阵。

解答. 底心正交阵基矢 $\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, 0 \right)$, $\mathbf{a}_3 = (0, 0, c)$.

倒点阵基矢:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \left(\frac{1}{a}, -\frac{1}{b}, 0 \right).$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \left(0, \frac{2\pi}{b}, 0 \right).$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \left(0, 0, \frac{1}{c} \right).$$

倒点阵仍为底心正交阵, 底面边长为 $\frac{4\pi}{a}$ 和 $\frac{4\pi}{b}$, 高为 $\frac{2\pi}{c}$.

习题 5. 试证明具有四面体对称性的晶体, 其介电常量为标量介电常量:

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon_0 \delta_{\alpha\beta}.$$

解答. 根据电动力学有

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{pmatrix}.$$

四面体对称性包括三个四重反演轴, 绕 x,y,z 轴旋转的操作分别记为 $\mathbf{A}_x, \mathbf{A}_y, \mathbf{A}_z$, 反演操作记为 \mathbf{I} .

$$\mathbf{A}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{A}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{I} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

由题意，应有 $(\mathbf{IA}_x)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{IA}_x)^T = \boldsymbol{\varepsilon}$. 即

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

可得 $\varepsilon_{13} = \varepsilon_{12} = 0, \varepsilon_{21} = -\varepsilon_{31}, \varepsilon_{32} = -\varepsilon_{23}, \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33}$.

利用 $(\mathbf{IA}_y)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{IA}_y)^T = \boldsymbol{\varepsilon}$ 及 $(\mathbf{IA}_z)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{IA}_z)^T = \boldsymbol{\varepsilon}$ 可知 $\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_0\delta_{\alpha\beta}$.

习题 6. 若 AB_3 的立方结构如图所示，设 A 原子的散射因子为 $f_A(\mathbf{K}_{hkl})$, B 原子的散射因子 $f_B(\mathbf{K}_{hkl})$.

(a) 求其几何结构因子 $F(\mathbf{K}_{hkl}) = ?$

(b) 找出 (hkl) 衍射面的 X 射线衍射强度分别在什么情况下有

$$I(\mathbf{K}_{hkl}) \propto \begin{cases} |f_A(\mathbf{K}_{hkl}) + 3f_B(\mathbf{K}_{hkl})|^2 \\ |f_A(\mathbf{K}_{hkl}) - f_B(\mathbf{K}_{hkl})|^2 \end{cases}$$

(c) 设 $f_A(\mathbf{K}_{hkl}) = f_B(\mathbf{K}_{hkl})$, 问衍射面指数中哪些反射消失? 试举出五种最简单的。

解答.

(a) 取原子坐标 $A(0,0,0)$, $B\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$.

$$F(hkl) = \sum_j f_j e^{-2\pi i(hr_{j1} + kr_{j2} + lr_{j3})} = f_A + f_B \left(e^{-\pi i(h+k)} + e^{-\pi i(k+l)} + e^{-\pi i(h+l)} \right).$$

(b) 当 $(h+k), (h+l), (k+l)$ 均为偶数时, $F(hkl) = f_A + 3f_B, I(\mathbf{K}_{hkl}) \propto |f_A(\mathbf{K}_{hkl}) + 3f_B(\mathbf{K}_{hkl})|^2$.

当 $(h+k), (h+l), (k+l)$ 两奇一偶时, $F(hkl) = f_A - f_B, I(\mathbf{K}_{hkl}) \propto |f_A(\mathbf{K}_{hkl}) - f_B(\mathbf{K}_{hkl})|^2$.

(c) 消光条件 $F(hkl) = 0$, 据此可得 $(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1), (1,1,0), (1,0,1)$.

习题 7. 在某立方晶系的铜 $\mathbf{K}_\alpha X$ 射线粉末相中，观察到的衍射角 θ_i 有下列关系：

$$\sin \theta_1 : \sin \theta_2 : \sin \theta_3 : \sin \theta_4 : \sin \theta_5 : \sin \theta_6 : \sin \theta_7 : \sin \theta_8$$

$$= \sqrt{3} : \sqrt{4} : \sqrt{8} : \sqrt{11} : \sqrt{12} : \sqrt{16} : \sqrt{19} : \sqrt{20}.$$

- (a) 试确定对应于这些衍射角的晶面的衍射面指数；
 (b) 问该立方晶体时简单立方、面心立方还是体心立方？

解答.

(a) 晶面间距 $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$, 布拉格反射定律 $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$,

可得 $\sin \theta \propto \sqrt{(nh)^2 + (nk)^2 + (nl)^2}$.

故衍射面指数 $(1, 1, 1), (2, 0, 0), (2, 2, 0), (1, 1, 3), (2, 2, 2), (4, 0, 0), (3, 3, 1), (4, 2, 1)$.

- (b) 简单立方允许所有 (hkl) 值, 没有消光.

体心立方要求 $(h + k + l)$ 为偶数.

面心立方则要求 h, k, l 全奇或全偶.

故该立方晶体是面心立方。

习题 8. X 射线衍射的线宽。

假定一个有限大小的晶体, 点阵节点由 $R_l = \sum_{i=1}^3 l_i \mathbf{a}_i$ 确定, 其中 l_i 取整数 $0, 1, 2, \dots, N_i - 1$, 每个结点处有全同的点散射中心。散射振幅可写为

$$u_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = c \sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \sum_{i=1}^3 l_i \mathbf{a}_i}.$$

(a) 证明散射强度 $I = |u|^2 = u^* u = c^2 \prod_{i=1}^3 \frac{\sin^2 \frac{1}{2} N_i (\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}{\sin^2 \frac{1}{2} (\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}$, $\Delta k = k' - k$;

(b) 当 $\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi h_i$ (h_i 为整数) 时, 出现衍射极大值, 函数 $\sin^2 \frac{1}{2} N_i (\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)$ 的第一个零点定义了 X 射线衍射的线宽 Δ_i , 证明 $\Delta_i = \frac{2\pi}{N_i}$;

(c) 对于一个无限大的晶体, $N_i \rightarrow \infty$, 证明 $I = c^2 N^2 \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{K}_h}$.

解答.

(a) 对散射振幅分析, $u_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = c \sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \sum_{i=1}^3 l_i \mathbf{a}_i} = c \sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-il_1(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1)} \cdot e^{-il_2(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)} \cdot e^{-il_3(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)}.$

写成连乘形式 $u_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = c \prod_{i=1}^3 \sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-il_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}.$

$$\sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-il_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} = \frac{1 - e^{-iN_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}}{1 - e^{-i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}} = \frac{e^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \left(e^{i\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} - e^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \right)}{e^{-i\frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \left(e^{i\frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} - e^{-i\frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \right)}.$$

由欧拉公式可化简为 $\sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{-il_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} = \frac{e^{-i\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \sin \frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}{e^{-i\frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)} \sin \frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}.$

故 $I = |u|^2 = u^* u = c^2 \prod_{i=1}^3 \frac{\sin^2 \frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}{\sin^2 \frac{1}{2}(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)}, \Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}.$

(b) 函数 $\sin^2 \frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)$ 的第一个零点出现在: $\frac{1}{2}N_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) = \pi \implies \Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = \frac{2\pi}{N_i}.$

即 $\Delta_i = \frac{2\pi}{N_i}.$

(c) 当 $N_i \rightarrow \infty$ 时, 每个求和式 $\sum_{l_i=0}^{N_i-1} e^{(-il_i(\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i))}$ 转换为 δ 函数。因此, 散射强度 I 表现为 δ 函数的形式:

$$I = c^2 N^2 \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{K}_h}$$

其中 \mathbf{K}_h 是倒格矢, 满足布拉格条件。

习题 8 的注记.

- (c) 不是很理解。

2 第二章习题

习题 9. 导出 NaCl 型离子晶体中排斥势指数的下列关系式：

$$n = 1 + \frac{4\pi\epsilon_0 \times 18Br_0^4}{\alpha e^2} \text{ (SI 单位)}$$

其中 r_0 为近邻离子间距, α 为以 r_0 为单位的马德隆常数, B 为体积弹性模量。已知 NaCl 晶体的 $B = 2.4 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$, $r_0 = 2.81 \text{ \AA}$, 求 NaCl 的 $n = ?$

解答. $\alpha = 1.747558$, $\epsilon = 8.854 \times 10^{-12}$. 代入公式有

$$n = 1 + \frac{4\pi\epsilon_0 \times 18Br_0^4}{\alpha e^2} = 1 + \frac{4\pi \times 8.854 \times 10^{-12} \times 18 \times 2.4 \times 10^{10} \times (2.81 \times 10^{-10})^4}{1.747588 \times (1.60219 \times 10^{-19})} = 7.78$$

习题 9 的注记. 见书 P63,P64.

设晶体有 N 个元胞, 晶体内能 $U = N \left(-\frac{A_1}{r} + \frac{A_n}{r} \right)$, $A_1 = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0}$, $A_n = 6b$, $V = 2Nr^3$.

由平衡位置能量极小有 $\frac{dU(r)}{dr} = N \left(\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{6nb}{r^{n+1}} \right) = 0$, 即 $6b = \frac{\alpha e^2 r_0^{n-1}}{4n\pi\epsilon_0}$.

代回内能公式有 $U = N \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r} + \frac{r_0^{n-1}}{nr^n} \right)$.

体积弹性模量 $B = V \frac{d^2 U}{dV^2} \Big|_{r_0} = \frac{1}{18Nr_0} \frac{d^2}{dr^2} \Big|_{r_0} = \frac{(n-1)\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 \times 18r_0^4}$.

晶体结合能 $W = -U(r_0) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{N\alpha e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$.

习题 10. 带 $\pm e$ 电荷的两种离子相间排成一维晶格, 设 N 为元胞数, $\frac{A_n}{r_0^n}$ 为排斥势, r_0 为正负离子间距。求证, 当 N 很大时有:

(a) 马德隆常数 $\alpha = 2 \ln 2$;

(b) 结合能 $W = \frac{Ne^2 2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$;

(c) 当压缩晶格时 $r \rightarrow r_0 (1 - \delta)$, 且 $\delta \ll 1$, 则需做功 $\frac{1}{2} (2Nr_0) B \delta^2$, 其中线弹模

$$B = \frac{(n-1) N 2 \ln 2}{8\pi\epsilon_0 r_0^2} e^2$$

解答.

(a) 取一个电子分析, 其静电势能 $u = 2 \times \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-)^i}{ir_0} \right)$.

而 $\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^{n-1}}{n} x$, 取 $x=1$ 得 $\alpha = 2 \ln 2$.

(b) 内能还需考虑排斥势能, 在单电子分析上乘元胞数 N 。

同习题 9 注记, 此时 $\alpha = 2 \ln 2$, 可得 $W = \frac{Ne^2 2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$.

(c) 将内能函数展开, 一次项由于平衡位置能量极小为零, 故在 $\delta \rightarrow 0$ 时仅需考虑二次项变化。

$$U(r) \approx U(r_0) + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2 U}{dr^2} \Big|_{r=r_0} (r - r_0)^2 = \frac{\alpha Ne^2 (n-1)}{8\pi\epsilon_0 r_0^3} (r - r_0)^2.$$

做功等于内能增量 $W = U(r_0(1-\delta)) - U(r_0) = \frac{\alpha Ne^2 (n-1)}{8\pi\epsilon_0 r_0^3} r_0^2 \delta^2 = \frac{1}{2} (2Nr_0) B \delta^2$.

故 $B = \frac{(n-1) N 2 \ln 2}{8\pi\epsilon_0 r_0^2} e^2$.

习题 11. 量子固体。

在量子固体中, 起主导作用的排斥能是原子的零点振动能, 考虑晶态 ^4He 的一个粗略一维模型, 即每个氦原子局限在一段长为 L 的线段上, 每段内的基态波函数取为半波长为 L 的自由粒子波函数。

(a) 试求每个粒子的零点振动能;

(b) 推导维持该线段不发生膨胀所需力的表达式;

(c) 在平衡时, 动能所引起的膨胀倾向被范德瓦耳斯相互作用所平衡, 假定最近邻间的范德瓦耳斯能为 $U(L) = 1.6L^{-6} 10^{-79} J$, 其中 L 以 m 为单位, 求 L 的平衡值。

解答.

(a) 波长 $\lambda = 2L$, 有 $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L}$, $T = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}$.

(b) 记 $U(L)$ 为吸引势，总能量 $E(L) = U(L) + T(L) = U(L) + \frac{h^2}{8mL^2}$.

$$\text{平衡位置有 } \frac{dE(L)}{dL} = \frac{dU(L)}{dL} - \frac{h^2}{4mL^3} = 0.$$

$$\text{故不发生膨胀所需力为 } F(L) = -\frac{dU(L)}{dL} = -\frac{h^2}{4mL^3}.$$

(c) 平衡位置有 $\frac{dE(L)}{dL} = \frac{dU(L)}{dL} - \frac{h^2}{4mL^3} = 0$ ，代入 $U(L) = 1.6L^{-6}10^{-79}J$ 得

$$L = \left(\frac{4m \times 9.6 \times 10^{-79}}{h^2} \right)^{\frac{1}{4}} = \left(\frac{4 \times 1.67 \times 10^{-27} \times 9.6 \times 10^{-79}}{6.626 \times 10^{-34}} \right)^{\frac{1}{4}} = 4.918 \times 10^{-10} \text{m} = 4.918 \text{\AA}.$$

习题 11 的注记.

- (a) 基态波函数满足一维无限深势阱条件: $\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$, 动能算符 $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$.

零点振动能能为动能期望值

$$E_T = \langle \Psi_0 | \hat{T} | \Psi_0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \left| \frac{d\Psi_0}{dx} \right|^2 dx = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot \frac{1}{L} \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{\hbar^2 \pi^2}{4mL^2}.$$

3 第三章习题

习题 12. 在单原子组成的一维点阵中，假设每个原子所受的作用力左右不同，其力常数如图所示相间变化，且 $\beta_1 > \beta_2$ 。试证明在这样的系统中，格波仍存在着声频支和光频支，其格波色散关系为

$$\omega^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{m} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4\beta_1\beta_2 \sin^2 \frac{qa}{2}}{(\beta_1 + \beta_2)} \right]^{\frac{1}{2}} \right\}.$$

解答. 和一维双原子链振动类似，一个周期内有两个不同原子，A 原子左侧力常数为 β_1 ，右侧力常数为 β_2 ，B 原子左侧力常数为 β_2 ，右侧力常数为 β_1 。

不妨记第 n 个 A 原子的位移为 u_n ，第 n 个 B 原子位移为 v_n ，写出 A、B 原子的动力学（运动）方程：

$$m\ddot{u}_n = \beta_1(v_{n-1} - u_n) + \beta_2(v_n - u_n)$$

$$m\ddot{v}_n = \beta_1(u_{n+1} - v_n) + \beta_2(u_n - v_n)$$

将格波试探解 $u_n = Ae^{i(qna - \omega t)}$ ， $v_n = Be^{i(qna - \omega t)}$ 代入运动方程有

$$-m\omega^2 A = \beta_1(Be^{-iqa} - A) + \beta_2(B - A)$$

$$-m\omega^2 B = \beta_1(Ae^{iqa} - B) + \beta_2(A - B)$$

写成矩阵形式，有

$$\begin{bmatrix} m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2 & \beta_1 e^{-iqa} + \beta_2 \\ \beta_1 e^{iqa} + \beta_2 & m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

有解的条件为系数矩阵行列式为零，即

$$\begin{vmatrix} m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2 & \beta_1 e^{-iqa} + \beta_2 \\ \beta_1 e^{iqa} + \beta_2 & m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2 \end{vmatrix} = 0$$

化简得到

$$[m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]^2 - (\beta_1^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos qa + \beta_2^2) = 0$$

即

$$[m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]^2 = (\beta_1 + \beta_2)^2 - 4\beta_1\beta_2 \sin^2 \frac{qa}{2}$$

故可得到格波色散关系为

$$\omega^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{m} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4\beta_1\beta_2 \sin^2 \frac{qa}{2}}{(\beta_1 + \beta_2)} \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

其中光学支取 + 号，声学支取 - 号。

习题 12 的注记. 得到运动方程前的分析:

$$V(u_n) = \frac{1}{2}(u_n - v_{n-1})^2 + \frac{1}{2}(v_n - u_n)^2$$

$$f(u_n) = -\frac{\partial V(u_n)}{\partial u_n} = \beta_1(v_{n-1} - u_n) + \beta_2(v_n - u_n)$$

声学支、光学支的分析:

- 长波极限 $qa = \pi$ 时，光学支声子的色散关系近似为

$$\omega_+(q) = \sqrt{\frac{2(\beta_1 + \beta_2)}{m}} \left[1 - \frac{1}{8} \frac{\beta_1\beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)^2} q^2 a^2 \right]$$

- 长波极限 $qa = \pi$ 时，声学支声子的色散关系退化为连续介质下的声波

$$\omega_-(q) = \sqrt{\frac{\beta_1\beta_2/(\beta_1 + \beta_2)}{2m}} a q = c_s q$$

声速为

$$c_s = \sqrt{\frac{[\beta_1\beta_2/(\beta_1 + \beta_2)]a}{2m/a}} = \sqrt{\frac{B}{\rho}}$$

由此得到线弹性模量 $B = \frac{\beta_1\beta_2}{\beta_1 + \beta_2} a$ ，质量密度为 $\rho = \frac{2m}{a}$ 。

习题 13. 具有二维正方点阵的某简单晶格，设原子质量为 m ，晶格常量为 a ，最近邻原子间相互作用的恢复力常数为 β ，假定原子垂直于点阵平面作横振动，试证明此二维系统的格波色散关系为 $m\omega^2 = 2\beta[2 - \cos(q_x a) - \cos(q_y a)]$ 。

解答. 取原点处原子 (u) 分析，受到周围四个原子 ($u_{10}, u_{01}, u_{-10}, u_{0-1}$) 的作用，其运动方程为

$$m\ddot{u} = \beta(u_{10} + u_{01} + u_{-10} + u_{0-1} - u)$$

将格波试探解 $u_{mn} = Ae^{iq_x ma + iq_y na - i\omega t}$ 代入运动方程有

$$-m\omega^2 A = \beta(e^{q_x a} + e^{q_y a} + e^{-q_x a} + e^{-q_y a} - 4)A$$

化简得到

$$m\omega^2 = 2\beta [2 - \cos(q_x a) - \cos(q_y a)]$$

习题 14. 求：

- (a) 一维单原子链振动的声子态密度 $\rho(\omega)$ ，并作图；
- (b) 一维双原子链振动的声子态密度 $\rho(\omega)$ ，并作图；

解答.

- (a) 对于一维单原子链振动，由书 P72 可知色散关系为 $\omega(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin\left(\frac{1}{2}qa\right) \right|$.

代入约化声子态密度表达式

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_q \delta[\omega - \omega(q)] = \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dq \delta[\omega - \omega(q)]$$

记 $\omega_m = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ 有

$$\rho(\omega) = \frac{a}{\pi} \left| \frac{dq}{d\omega(q)} \right|_{\omega} = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}}$$

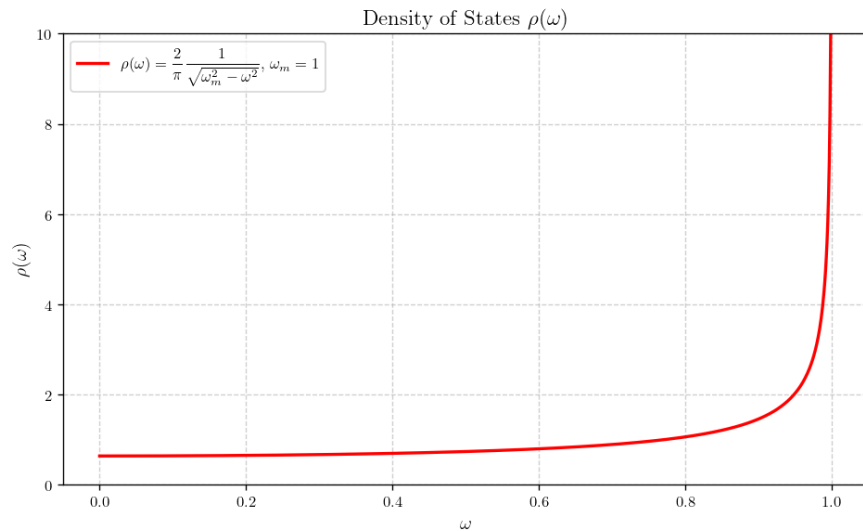


图 1: 一维单原子链振动的声子态密度

(b) 对于一维双原子链振动，由书 P78-79 可知色散关系为

$$\omega_{\pm}^2(q) = \beta \frac{m_2 + m_1}{m_2 m_1} \left\{ 1 \pm \left[1 - \frac{4m_2 m_1}{(m_2 + m_1)^2} \sin^2 \frac{1}{2} qa \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

为得到声子态密度 $\rho(\omega) = \frac{a}{\pi} \left| \frac{dq}{d\omega(q)} \right|_{\omega}$ ，不妨记 $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ ，对色散关系两边求导有

$$2\omega d\omega = \frac{\frac{\beta^2 a}{m_1 m_2} \sin q a dq}{\frac{\beta}{\mu} - \omega^2}$$

得到

$$\frac{dq}{d\omega} = \frac{\frac{2m_1 m_2}{\beta^2 a} \omega \left(\frac{\beta}{\mu} - \omega^2 \right)}{\sin qa}$$

由于 $\rho(\omega)$ 是 ω 的函数，应反解色散关系将 $q(\omega)$ 代入上式，

$$\sin qa = \frac{m_1 m_2 \omega}{2\beta^2} \sqrt{\left(\frac{2\beta}{m_1} - \omega^2 \right) \left(\frac{2\beta}{m_2} - \omega^2 \right) \left(\frac{2\beta}{\mu} - \omega^2 \right)}$$

$$\rho(\omega) = \frac{4}{\pi} \frac{\left| \frac{\beta}{\mu} - \omega^2 \right|}{\sqrt{\left(\frac{2\beta}{m_1} - \omega^2 \right) \left(\frac{2\beta}{m_2} - \omega^2 \right) \left(\frac{2\beta}{\mu} - \omega^2 \right)}}$$

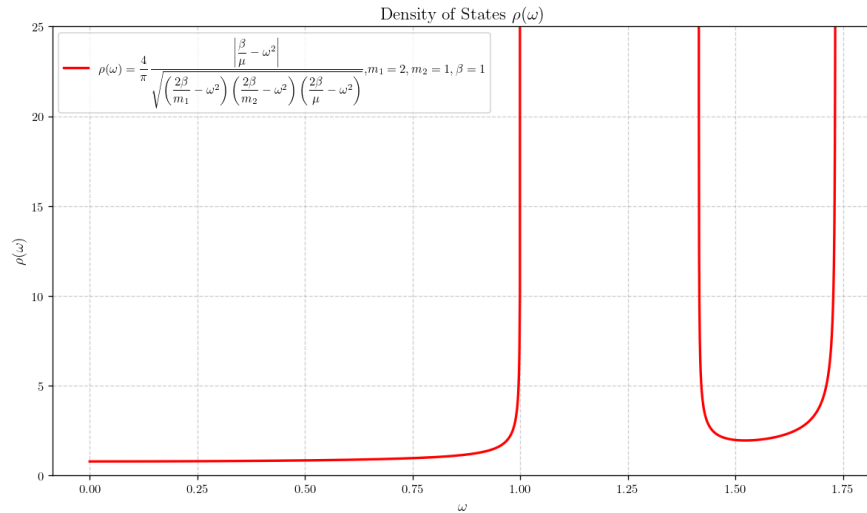


图 2: 一维双原子链振动的声子态密度

习题 15. 设某三维晶体光频支声子的某支色散关系为 $\omega(q) = \omega_0 - Aq^2$ ，试证明其声子态密度为

$$\rho(\omega) = \begin{cases} \frac{V}{4\pi^2 A^{\frac{3}{2}}} (\omega_0 - \omega)^{\frac{1}{2}}, & \omega_{min} < \omega < \omega_0 \\ 0, & \omega > \omega_0 \\ 0, & \omega < \omega_{min} \end{cases}$$

式中 $\omega_{min} = \omega_0 - A \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$ ， N 为晶体的元胞数。

解答. 根据三维声子态密度

$$\rho(\omega) = \sum_q \delta[\omega - \omega(q)] = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q \delta[\omega - \omega(q)] = \frac{V}{(2\pi)^3} \iint \frac{dS_\omega}{|\nabla\omega(q)|}$$

而 $\omega(q) = \omega_0 - Aq^2$ ，等频率面为球面， $\iint dS_\omega = 4\pi q^2$ ， $\nabla\omega(q) = \frac{d\omega(q)}{dq} = -2Aq$ 。

$$\rho(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} q^2 \frac{1}{2Aq} = \frac{V}{4\pi^2 A} q = \frac{V}{4\pi^2 A^{\frac{3}{2}}} (\omega_0 - \omega)^{\frac{1}{2}}$$

由声子态密度守恒，

$$N = \int_{\omega_{min}}^{\omega_0} \rho(\omega) d\omega = \frac{V}{4\pi^2 A^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{2}{3} \right) (\omega_0 - \omega_{min})^{\frac{3}{2}}$$

解得

$$\omega_{min} = \omega_0 - A \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}$$

习题 16. 设 d 维简单晶格中，声子色散关系 $\omega(\mathbf{q})$ 与 q^μ 成正比，试证明

(a) 声子态密度 $\rho = B\omega^{\frac{d}{\mu}-1}$;

(b) 比热容 $C_V = CT^{\frac{d}{\mu}}$ 。 B 、 C 为常量。

解答.

(a) 设 $\omega(q) = Aq^\mu$ ，由约化声子态密度定义式有

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_q \delta[\omega - \omega(q)] = \frac{\Omega}{(2\pi)^d} \int d^d q \delta[\omega - \omega(q)] \propto q^{d-1} \left| \frac{dq}{d\omega(q)} \right|$$

故有

$$\rho(\omega) \propto \frac{q^{d-1}}{q^{\mu-1}} \propto q^{d-\mu} \propto \omega^{\frac{d}{\mu}-1}$$

即

$$\rho = B\omega^{\frac{d}{\mu}-1}$$

(b) 内能为

$$U = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(K_B T)} - 1} B\omega^{\frac{d}{\mu}-1} d\omega = \frac{B(k_B T)^{\frac{d}{\mu}+1}}{\hbar^{\frac{d}{\mu}}} \int_0^{\omega_D} \frac{(\frac{\hbar\omega}{k_B T})^{\frac{d}{\mu}} d(\frac{\hbar\omega}{k_B T})}{e^{\hbar\omega/(K_B T)} - 1}$$

令 $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$, 故当 $T \rightarrow 0$ 时, $x \rightarrow \infty$, 此时积分项近似为常数, 故有

$$U \propto T^{\frac{d}{\mu}+1} \Rightarrow C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = C T^{\frac{d}{\mu}}$$

习题 17. 求在一维单原子链中, $\omega > \omega_m$ (截止频率) 声子模式的阻尼系数 α 与 ω 的关系。

解答. 由书 P72 可得一维单原子链色散关系为

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin\left(\frac{1}{2}qa\right) \right|$$

截止频率 $\omega_m = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$, 显然当 $\omega > \omega_m$ 时, q 应为复数, 不妨记 $q = x + iy$, 故有

$$\omega(q) = \pm\omega_m \sin\left(\frac{1}{2}ax + i\frac{1}{2}ay\right)$$

由复数正弦公式

$$\sin(x + iy) = \sin x \cdot \cosh y + i \cos x \cdot \sinh y$$

可以得到

$$\omega(q) = \pm\omega_m \left(\sin \frac{1}{2}ax \cdot \cosh \frac{1}{2}ay + i \cos \frac{1}{2}ax \cdot \sinh \frac{1}{2}ay \right)$$

由于 ω 为实数, 得到

$$x = \frac{\pi}{a}, \quad \omega = \omega_m \cosh \frac{1}{2}ay$$

代回格波试探解 $u_n = Ae^{i(qna - \omega t)}$ 得到

$$u_n = Ae^{i\left(\frac{\pi}{a} \pm \frac{2}{a} \cosh^{-1} \frac{\omega}{\omega_m}\right)na - i\omega t} = Ae^{in\pi} e^{2n \cosh^{-1} \frac{\omega}{\omega_m}} e^{-i\omega t}$$

指数衰减因子¹ $\alpha = 2 \cosh^{-1} \frac{\omega}{\omega_m}$.

习题 17 的注记. 复数正弦公式推导:

1. 定义复数正弦函数

基于欧拉公式 $e^{iz} = \cos z + i \sin z$, 复数正弦可定义为:

$$\sin z = \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i}$$

其中 $z = x + iy$ ($x, y \in \mathbb{R}$).

2. 代入复数角度

将 $z = x + iy$ 代入并展开指数项:

$$\begin{aligned} \sin(x + iy) &= \frac{e^{i(x+iy)} - e^{-i(x+iy)}}{2i} \\ &= \frac{e^{-y+ix} - e^{y-ix}}{2i} \end{aligned}$$

3. 分离实部与虚部

进一步展开欧拉公式中的三角函数:

$$\begin{aligned} e^{-y}(\cos x + i \sin x) &= e^{-y} \cos x + ie^{-y} \sin x, \\ e^y(\cos x - i \sin x) &= e^y \cos x - ie^y \sin x. \end{aligned}$$

代入原式后合并同类项:

$$\sin(x + iy) = \frac{(\cos x)(e^{-y} - e^y) + i(\sin x)(e^{-y} + e^y)}{2i}$$

4. 引入双曲函数

利用双曲函数的定义 $\cosh y = \frac{e^y + e^{-y}}{2}$ 和 $\sinh y = \frac{e^y - e^{-y}}{2}$, 化简得到:

$$\begin{aligned} \sin(x + iy) &= \frac{-2 \cos x \sinh y + i(2 \sin x \cosh y)}{2i} \\ &= \sin x \cosh y + i \cos x \sinh y \end{aligned}$$

最终公式为:

$$\boxed{\sin(x + iy) = \sin x \cosh y + i \cos x \sinh y}$$

¹ 只有轻杂质才会在能隙内或带边外产生 $\omega > \omega_m$ 的局域模, 可在此基础上进行分析。

习题 18. 格林艾森常数。

(a) 证明频率为 ω 的声子模式的自由能为 $k_B T \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) \right]$;

(b) 如果 Δ 是体积的相对变化量, 则晶体的自由能密度可以写为

$$F(\Delta, T) = \frac{1}{2} B \Delta^2 + k_B T \sum_q \ln \left\{ 2 \sinh \left[\frac{\hbar \omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right] \right\}$$

其中 B 为体积弹性模量。假定 $\omega(\mathbf{q})$ 与体积关系为 $\frac{d\omega(\mathbf{q})}{\omega(\mathbf{q})} = -\gamma \Delta$, γ 为格林艾森常数, 且与模 \mathbf{q} 无关。证明当 $B\Delta = \gamma \sum_q \frac{1}{2} \hbar \omega(\mathbf{q}) \coth \left[\frac{\hbar \omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right]$ 时, F 对 Δ 为极小。利用内能密度的定义, 证明 Δ 可近似表达为 $\Delta = \frac{\gamma U(T)}{B}$ 。

(c) 根据德拜模型证明 $\gamma = -\frac{\partial \ln \theta_D}{\partial \ln V}$, 其中 $\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$ 。

解答.

(a) 根据书 P83-84 声子定义可知, 晶格振动谐振子能谱为

$$E = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

由书 P107-108 知系统自由能为

$$F^V(T, V) = -k_B T \ln Z^V$$

其中 Z^V 为系统的配分函数

$$Z^V = \sum_n e^{-\frac{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega}{k_B T}} = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}$$

化简得到

$$Z^V = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} - e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}}} = \left(2 \sinh \frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^{-1}$$

故

$$F^V(T, V) = -k_B T \ln Z^V = k_B T \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right) \right]$$

- (b) 体积为 V 的晶体在有限温度下的自由能由零温时的内能 $U_0(V)$ 和有温度下声子激发贡献的自由能两部分组成，其中零温时的内能可以在平衡体积 V_0 处展开

$$U_0(V) = U_0(V_0) + U'(V_0)\delta V + \frac{1}{2}U''(V_0)\delta V^2$$

平衡位置处 $U'(V_0) = 0$ ，体弹性模量 $B = V_0 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)$ ，故内能随体积的变化为

$$U_0(V) = U_0(V_0) + \frac{1}{2}V_0 B \left(\frac{\delta V}{V_0} \right)^2 = V_0 \left[\frac{U_0(V_0)}{V_0} + \frac{1}{2}B\Delta^2 \right]$$

这样给定温度和单位体积 ($V_0 = 1$)，亥姆霍兹自由能密度可写为

$$F(\Delta, T) = \frac{1}{2}B\Delta^2 + k_B T \sum_{\mathbf{q}} \ln \left\{ 2 \sinh \left[\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right] \right\}$$

要证明当 $B\Delta = \gamma \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} \hbar\omega(\mathbf{q}) \coth \left[\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right]$ 时， F 对 Δ 为极小，有

$$\frac{\partial F}{\partial \Delta} = B\Delta + k_B T \sum_{\mathbf{q}} \frac{2 \cosh [\hbar\omega(\mathbf{q})/2k_B T]}{2 \sinh [\hbar\omega(\mathbf{q})/2k_B T]} \times \frac{\hbar}{2k_B T} \frac{d\omega(\mathbf{q})}{d\Delta} = 0$$

由于 $d\Delta = dV$ ， $\frac{d\omega(\mathbf{q})}{\omega(\mathbf{q})} = -\gamma\Delta$ ，有 $\frac{d\omega(\mathbf{q})}{d\Delta} = \frac{d\omega(\mathbf{q})}{dV} = -\gamma\omega(\mathbf{q})$ ，故

$$B\Delta = \gamma \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} \hbar\omega(\mathbf{q}) \coth \left[\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right]$$

经检验， $\frac{\partial^2 F}{\partial \Delta^2} > 0$ ，此时确实为自由能极小值。

根据自由能可计算熵

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -k_B \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[\left(2 \sinh \frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right) \right] + \frac{1}{T} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} \hbar\omega(\mathbf{q}) \coth \left(\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right)$$

内能密度函数

$$U(T, \Delta) = F + TS = \frac{1}{2}\Delta^2 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} \hbar\omega(\mathbf{q}) \coth \left(\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right)$$

利用 $B\Delta = \gamma \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} \hbar\omega(\mathbf{q}) \coth \left[\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_B T} \right]$ 得到

$$U(T, \Delta) = \frac{1}{2}B\Delta^2 + \frac{B\Delta}{\gamma} \approx \frac{B\Delta}{\gamma}$$

故 Δ 可近似表达为 $\Delta = \frac{\gamma U(T)}{B}$ 。

(c) 推广的格林艾森常数表达式为

$$\gamma = \frac{\sum_{\mathbf{qs}} \gamma_{\mathbf{qs}} C_V^{\mathbf{qs}}}{\sum_{\mathbf{qs}} C_V^{\mathbf{qs}}}$$

其中 $\gamma_{\mathbf{qs}} = \frac{\partial \ln \omega_s(\mathbf{q})}{\partial \ln V}$ 是 (\mathbf{qs}) 模式的格林艾森常数, $C_V^{\mathbf{qs}}(T)$ 是 (\mathbf{qs}) 模式的比热容。

德拜模型是单参量的晶格振动模型, ω_D 是计及非谐效应的唯一参量。德拜模型隐含假定 $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_D f_s(\mathbf{q})$, $f_s(\mathbf{q})$ 是与晶体结构有关的函数, 非谐效应只包含在 ω_D 中, 所以有

$$\gamma = \frac{\sum_{\mathbf{qs}} \gamma_{\mathbf{qs}} C_V^{\mathbf{qs}}}{\sum_{\mathbf{qs}} C_V^{\mathbf{qs}}} = \frac{\sum_{\mathbf{qs}} \gamma_D C_V^{\mathbf{qs}}}{\sum_{\mathbf{qs}} C_V^{\mathbf{qs}}} = \gamma_D$$

其中 $\gamma_D = -\frac{\partial \ln \omega_D}{\partial \ln V} = -\frac{\partial \ln \theta_D}{\partial \ln V}$, 其中 $\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$ 。

4 第四章习题

习题 19. 求证由 δ 函数构成的一维周期势场 $V(x) = V_0 \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \delta(x - la)$ 中，单电子能谱由下列克勒尼希-彭尼 (Kronig-Penny) 关系决定： $\cos ka = \frac{maV_0 \sin \alpha a}{\alpha a} + \cos(\alpha a)$, $\alpha^2 = 2mE/\hbar^2$ 。由此结果说明每一能带色散关系均满足 $E(k + K_h) = E(k)$ ，当 V_0 为负数，该模型是单电子在一维原子链中运动的一种很好的描述。

解答. 分析势场函数，从 $-\infty$ 到 ∞ 每间隔 a 有一个 δ 势垒¹。代入薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi + V_0 \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \delta(x - la) \Psi = E \Psi$$

考虑原点附近波函数的解，

$$\Psi = \begin{cases} Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} & -a < x < 0 \\ Ce^{i\alpha x} + De^{-i\alpha x} & 0 < x < a \end{cases}, \text{ 其中 } \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

由布洛赫定理 $\Psi_k(x + a) = e^{ika} \Psi_k(x)$ ，有

$$Ce^{i\alpha(x+a)} + De^{-i\alpha(x+a)} = e^{ika} (Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x})$$

即

$$Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} = Ce^{i\alpha(x+a)-ika} + De^{-i\alpha(x+a)-ika}$$

由量子力学知识， δ 势垒在原点处需满足

$$\begin{cases} \Psi(0^-) = \Psi(0^+) \\ \Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \Psi(0) \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} (e^{ika} - e^{i\alpha a})C + (e^{ika} - e^{-i\alpha a})D = 0 \\ (i\alpha e^{ika} - i\alpha e^{i\alpha a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} e^{ika})C + (-i\alpha e^{ika} + i\alpha e^{-ika} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} e^{ika})D = 0 \end{cases}$$

¹根据量子力学知识有： δ 势垒仅存在散射态。

若方程有解，则

$$\begin{vmatrix} e^{ika} - e^{i\alpha a} & e^{ika} - e^{-i\alpha a} \\ i\alpha e^{ika} - i\alpha e^{i\alpha a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} e^{ika} & -i\alpha e^{ika} + i\alpha e^{-i\alpha a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} e^{ika} \end{vmatrix} = 0$$

解出

$$\cos ka = \frac{maV_0 \sin \alpha a}{\alpha a} + \cos(\alpha a), \alpha^2 = 2mE/\hbar^2$$

由于 α 是 k 的周期函数，故 $E(k)$ 也是 k 的周期函数。

当 V_0 为负数时， δ 势垒变为 δ 势阱，存在束缚态。

习题 20. 电子在周期场中的势能

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

且 $a = 4b$ ， ω 是常量。试画出该势能曲线，并求该势能的平均值。

解答.

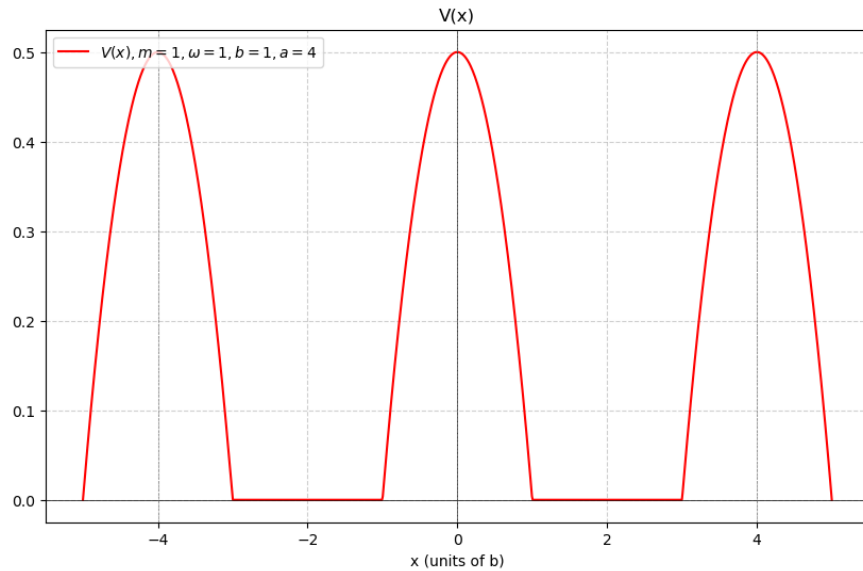


图 3: 势能曲线

$$\begin{aligned}
 \overline{V}(x) &= \frac{1}{4b} \int_{-2b}^{2b} V(x) dx \\
 &= \frac{1}{2b} \int_0^b \frac{1}{2} m\omega^2 (b^2 - x^2) dx \\
 &= \frac{1}{4b} m\omega^2 \left(b^2 x - \frac{1}{3} x^3 \right) \Big|_0^b \\
 &= \frac{1}{4b} m\omega^2 \cdot \frac{2}{3} b^3 \\
 &= \frac{1}{6} m\omega^2 b
 \end{aligned}$$

习题 21. 用近自由电子近似处理上题，求此晶体第一及第二能隙宽度。

解答. 近自由电子近似在电子波矢靠近布里渊区边界时，其格波色散关系为

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{E_0(\mathbf{k}) + E_0(\mathbf{k} - \mathbf{K}_h)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k} - \mathbf{K}_h)}{2} \right)^2 + |V(\mathbf{K}_h)|^2}$$

能隙宽度正比于 $2|V(\mathbf{K}_h)|$ ，对周期势作傅立叶展开

$$V(x) = \sum_{K_h} V(K_h) e^{iK_h x}, \quad V(K_h) = \frac{1}{4b} \int_{-b}^b V(x) e^{-iK_h x} dx, \quad K_h = \frac{2\pi}{a} h$$

$$\begin{aligned}
 V(K_h) &= \frac{1}{8b} m\omega^2 \int_{-b}^b (b^2 - x^2) \cos K_h x dx \\
 &= \frac{m\omega^2}{4bK_h} \left[(b^2 - x^2) \sin K_h x \Big|_0^b - \int_0^b \sin K_h x \cdot (-2x) dx \right] \\
 &= -\frac{m\omega^2}{2bK_h^2} \int_0^b x d \cos K_h x \\
 &= \frac{m\omega^2}{2bK_h^3} [\sin K_h b - (K_h b) \cos K_h b]
 \end{aligned}$$

第一能隙宽度

$$E_g^1 = 2 \left| V(K_1 = \frac{\pi}{2b}) \right| = \frac{8b^2}{\pi^3} m\omega^2$$

第二能隙宽度

$$E_g^2 = 2 \left| V(K_2 = \frac{\pi}{b}) \right| = \frac{b^2}{\pi^3} m\omega^2$$

习题 22. 设二维正方晶格的周期势为

$$V(\mathbf{r}) = V(x, y) = -4U \cos \frac{2\pi x}{a} \cos \frac{2\pi y}{a}$$

a 为晶格常量，求：

(a) $V(\mathbf{r})$ 按倒格矢展开的傅立叶系数 $V(\mathbf{K}_h)$;

(b) 对近自由电子近似而言，在哪些布里渊区界线上有布拉格反射，并写出相应的能隙。

解答.

(a) 对于二维正方点阵有

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \mathbf{a}_2 = a\mathbf{j}; \mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\mathbf{i}, \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\mathbf{j}, \mathbf{K}_{h_1h_2} = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2$$

故

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= -4U \cos \frac{2\pi x}{a} \cos \frac{2\pi y}{a} \\ &= -U \left[e^{i\left(\frac{2\pi x}{a} + \frac{2\pi y}{a}\right)} + e^{i\left(\frac{2\pi x}{a} - \frac{2\pi y}{a}\right)} + e^{i\left(-\frac{2\pi x}{a} + \frac{2\pi y}{a}\right)} + e^{i\left(-\frac{2\pi x}{a} - \frac{2\pi y}{a}\right)} \right] \end{aligned}$$

即

$$V(\mathbf{K}_h) = \begin{cases} -U, & \mathbf{K}_h = \mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}_3, \mathbf{K}_4 \\ 0, & \text{others} \end{cases}$$

$$\text{其中 } \mathbf{K}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}\right), \mathbf{K}_2 = \left(\frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{a}\right), \mathbf{K}_3 = \left(-\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}\right), \mathbf{K}_4 = \left(-\frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{a}\right).$$

(b) 布拉格反射条件， $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}$.

只有 $\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}_3, \mathbf{K}_4$ 时 $V(\mathbf{K}_h)$ 不为零，且 $V = -U$.

故在近自由电子近似下在布里渊区边界 $\left[\frac{1}{2}\mathbf{K}_1, \frac{1}{2}\mathbf{K}_2, \frac{1}{2}\mathbf{K}_3, \frac{1}{2}\mathbf{K}_4\right]$ 发生布拉格反射，能隙为 $2U$ 。

习题 23. 已知近自由电子近似在布里渊区边界附近能量为

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left\{ [E^0(\mathbf{k}) + E^0(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h)] \pm \sqrt{[E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h)]^2 + 4|V(\mathbf{K}_h)|^2} \right\}$$

证明在布里渊区界面上，垂直于布里渊区界面的电子速度分量为 0。

解答. 群速度定义式

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}), \quad E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

代入近自由电子近似在布里渊区界面附近的能量, 有

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\hbar} \left\{ \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{m} + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{K}_h)}{m} \right] \pm \frac{[E^0(\mathbf{k} - E^0(\mathbf{k} - \mathbf{K}_h))] \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{m} - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{K}_h)}{m} \right]}{\sqrt{[E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h)]^2 + 4|V(\mathbf{K}_h)|^2}} \right\}$$

化简得到

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2m} (2\mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \left\{ 1 \pm \frac{E^0(\mathbf{K}_h) \hat{\mathbf{K}}_h \hat{\mathbf{K}}_h}{\sqrt{[E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h)]^2 + 4|V(\mathbf{K}_h)|^2}} \right\}$$

在布里渊区发现上的分量为

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{K}}_h = \frac{\hbar}{2m} (2\mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \hat{\mathbf{K}}_h \left\{ 1 \pm \frac{E^0(\mathbf{K}_h) \hat{\mathbf{K}}_h \hat{\mathbf{K}}_h}{\sqrt{[E^0(\mathbf{k}) - E^0(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h)]^2 + 4|V(\mathbf{K}_h)|^2}} \right\} \propto (2\mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \hat{\mathbf{K}}_h = 0$$

习题 24. 设二维长方晶格的周期势 $V(\mathbf{r}) = V_0 + A \cos \frac{4\pi x}{a} + B \cos \frac{2\pi y}{a}$, 试用近自由电子近似求电子状态为 $\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{a}, k_y \right)$ 的能量及其相应的波函数。

解答. 由周期势 $V(\mathbf{r}) = V_0 + A \cos \frac{4\pi x}{a} + B \cos \frac{2\pi y}{a}$ 可知, 该长方晶格的晶格常量为

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} \hat{\mathbf{i}}, \quad \mathbf{a}_2 = a \hat{\mathbf{j}}, \quad \mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{a} \hat{\mathbf{i}}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{\mathbf{j}}$$

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + \frac{A}{2} \left(e^{i\frac{4\pi}{a}x} + e^{-i\frac{4\pi}{a}x} \right) + \frac{B}{2} \left(e^{i\frac{2\pi}{a}y} + e^{-i\frac{2\pi}{a}y} \right)$$

周期势不为零的傅立叶分量为 $V(\mathbf{K}_{10}) = V(\mathbf{K}_{\bar{1}0}) = \frac{A}{2}, V(\mathbf{K}_{01}) = V(\mathbf{K}_{0\bar{1}}) = \frac{B}{2}$. 由薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$$

将试探解 $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}_h} C(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}}, V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}_h} V(\mathbf{K}_h) e^{i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}}$ 代回有

$$\sum_{\mathbf{K}_h} \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_h)^2 C(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{K}_h''} V(\mathbf{K}_h'') \sum_{\mathbf{K}_h'} C(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h') e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h' + \mathbf{K}_h'') \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{K}_h} E C(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}}$$

令 $\mathbf{K}' + \mathbf{K}_h'' = \mathbf{K}_h$, 则 $e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_h)\cdot\mathbf{r}}$ 的系数方程简化为

$$[E_0(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) - E] C(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) + \sum_{\mathbf{K}'} V(\mathbf{K}_h - \mathbf{K}_h') C(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h') = 0, \quad E_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2$$

据题意 $\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{a}, k_y\right)$, $\mathbf{k}_x = \frac{2\pi}{a}$ 正好在布里渊区边界上,

考虑两个能量相等、波矢相差 $\pm \mathbf{b}_1$ 的两个分量 $C(\mathbf{k})$ 和 $C(\mathbf{k} - \mathbf{b}_1)$, 相应的两个方程为

$$[E_0(\mathbf{k}) - E] C(\mathbf{k}) + \frac{A}{2} C(\mathbf{k} - \mathbf{b}_1) = 0$$

$$\frac{A}{2} C(\mathbf{k}) + [E_0(\mathbf{k} - \mathbf{b}_1) - E] C(\mathbf{k} - \mathbf{b}_1) = 0$$

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 \pm \frac{|A|}{2}$$

代入本证方程得到

$$C(\mathbf{k}) = \pm \text{sign}(A) C(\mathbf{k} - \mathbf{b}_1)$$

考虑 $A > 0$, 对于上述两个简并态,

$$\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{a}, k_y\right), \mathbf{k} - \mathbf{b}_1 = \left(-\frac{2\pi}{a}, k_y\right)$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = C(\mathbf{k}) [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \pm e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{b}_1)\cdot\mathbf{r}}]$$

故

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} 2C(\mathbf{k}) \cos \frac{2\pi}{a} x e^{ik_y y}, & E_+ = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 + \frac{A}{2} \\ 2C(\mathbf{k}) i \sin \frac{2\pi}{a} x e^{ik_y y}, & E_+ = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 - \frac{A}{2} \end{cases}$$

类似地, 如果 $\mathbf{k} = \left(k_x, \frac{\pi}{a}\right)$, $\mathbf{k} - \mathbf{b}_2 = \left(k_x, -\frac{\pi}{a}\right)$, 考虑 $A > 0$ 得到

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} 2C(\mathbf{k}) \cos \frac{\pi}{a} y e^{ik_x x}, & E_+ = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 + \frac{B}{2} \\ 2C(\mathbf{k}) i \sin \frac{\pi}{a} y e^{ik_x x}, & E_+ = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 - \frac{B}{2} \end{cases}$$

对于在四个顶点处的简并波函数和能级, 只需在上述得到的非简并波函数和能级的基础上再简并微扰一次得到, 最终结果为

$$\Psi_{++}(\mathbf{r}) = 4C(\mathbf{k}) \left(\cos \frac{2\pi}{a} x\right) \left(\cos \frac{\pi}{a} y\right), \quad E_{++} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \frac{A}{2} + \frac{B}{2}$$

$$\Psi_{+-}(\mathbf{r}) = 4C(\mathbf{k}) \left(\cos \frac{2\pi}{a}x \right) \left(i \sin \frac{\pi}{a}y \right), \quad E_{+-} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 + \frac{A}{2} - \frac{B}{2}$$

$$\Psi_{-+}(\mathbf{r}) = 4C(\mathbf{k}) \left(i \sin \frac{2\pi}{a}x \right) \left(\cos \frac{\pi}{a}y \right), \quad E_{-+} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 - \frac{A}{2} + \frac{B}{2}$$

$$\Psi_{--}(\mathbf{r}) = 4C(\mathbf{k}) \left(i \sin \frac{2\pi}{a}x \right) \left(i \sin \frac{\pi}{a}y \right), \quad E_{--} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 - \frac{A}{2} - \frac{B}{2}$$

习题 24 的注记. 参考自参考答案

习题 25. 用紧束缚近似方法求出面心立方晶体 s 态电子能带

$$E(\mathbf{k}) = E_s - J_0 - 4J_1 \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_z a}{2} \cos \frac{k_x a}{2} \right)$$

并求能带底部的有效质量。

解答. 对于面心立方晶格, 每个原子有 12 个最近邻原子, 位置为

$$\left(\pm \frac{1}{2}a, \pm \frac{1}{2}a, 0 \right), \left(0, \pm \frac{1}{2}a, \pm \frac{1}{2}a \right), \left(\pm \frac{1}{2}a, 0, \pm \frac{1}{2}a \right)$$

$$E(\mathbf{k}) = E_s - J_0 - 4J_1 \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_z a}{2} \cos \frac{k_x a}{2} \right)$$

假定 $J_1 > 0$, 极小值为 $E_{min} = E_s - J_0 - 12J_1$, 极大值为 $E_{max} = E_s - J_0 + 4J_1$.

在极小值处展开 $E(\mathbf{k})$

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) = & E_s - J_0 - 4J_1 \left\{ \left[1 - \frac{1}{8}(k_x a)^2 \right] \left[1 - \frac{1}{8}(k_y a)^2 \right] \right. \\ & + \left[1 - \frac{1}{8}(k_y a)^2 \right] \left[1 - \frac{1}{8}(k_z a)^2 \right] \\ & \left. + \left[1 - \frac{1}{8}(k_z a)^2 \right] \left[1 - \frac{1}{8}(k_x a)^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

即

$$E(\mathbf{k}) = E_s - J_0 - 12J_1 + J_1 a^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_{min} + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2$$

故带底电子的有效质量为 $m = \frac{\hbar^2}{2J_1 a}$.

习题 26. 某晶体中电子的等能面是椭球面 $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_1} + \frac{k_y^2}{m_2} + \frac{k_z^2}{m_3} \right)$, 求该能谱的电子态密度。

解答. 将等能面方程写成标准的椭球方程

$$\frac{k_x^2}{\left(\frac{2m_1E}{\hbar^2}\right)} + \frac{k_y^2}{\left(\frac{2m_2E}{\hbar^2}\right)} + \frac{k_z^2}{\left(\frac{2m_3E}{\hbar^2}\right)} = 1$$

记

$$a(E) = \sqrt{\frac{2m_1E}{\hbar^2}}, \quad b(E) = \sqrt{\frac{2m_2E}{\hbar^2}}, \quad c(E) = \sqrt{\frac{2m_3E}{\hbar^2}}$$

由旋转椭球体积公式

$$V(E) = \frac{4}{3}\pi a(E)b(E)c(E) = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{2E}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{m_1m_2m_3}$$

E 内 \mathbf{k} 空间总的状态数等于 $\int_0^E N(E)dE$, 由此得到

$$\int_0^E N(E)dE = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4}{3}\pi \left(\frac{2E}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{m_1m_2m_3} = \frac{\Omega}{3\pi^2} \left(\frac{2E}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{m_1m_2m_3}$$

故

$$N(E) = \frac{d}{dE} \int_0^E N(E)dE = \frac{\Omega}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{2m_1m_2m_3E}$$

5 第五章习题

习题 27. 二维自由电子气系统，每单位面积中的电子数为 n ，试求出系统的

(a) 电子能态密度 $N(E)$;

(b) 有限温度下的化学势 $\mu(T) = k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{nh^2}{4\pi m k_B T} \right) - 1 \right]$.

解答.

(a) 自由电子色散关系 $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ，其约化电子态密度为

$$N(E) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta[E - E(\mathbf{k})] = \frac{2\Omega}{4\pi^2} \int d^2k \delta[E - E(\mathbf{k})] = \frac{\Omega}{\pi} k \left| \frac{dk}{dE(\mathbf{k})} \right|_E = \frac{m\Omega}{\pi \hbar^2}$$

其中 Ω 为元胞面积。

(b) 自由电子满足费米-狄拉克分布，

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$$

在给定温度下，系统的电子化学势由电子数守恒确定，

$$N = \int_0^\infty N(E) f(E) dE = \frac{m\Omega k_B T}{\pi \hbar^2} \ln(1 + e^{\mu/T})$$

反解得到

$$\mu(T) = k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{nh^2}{4\pi m k_B T} \right) - 1 \right]$$

习题 28. 设阻尼项为 $-m^* \mathbf{v} \tau$ ，试证明当 $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$, $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ 时直流电导率公式为

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma}{1 + (\omega_c \tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ \omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + (\omega_c \tau)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

其中， $\sigma = ne^2 \tau / m^*$ ， $\omega_c = eB / m^*$.

解答. 电子漂移速度满足

$$\frac{d}{dt}\mathbf{v} = \frac{1}{m^*}(-e\mathbf{E} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{\mathbf{v}}{\tau}$$

定态有 $\frac{d}{dt}\mathbf{v} = 0$, $\omega_c = eB/m^*$, 故得到

$$\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = -\left(\frac{e\tau}{m^*}\right) \frac{1}{1 + (\omega_c\tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + (\omega_c\tau)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

而 $J = n(-e)\mathbf{v}$, $\sigma = ne^2\tau/m^*$, 故

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma}{1 + (\omega_c\tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + (\omega_c\tau)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$

习题 29. 电子漂移速度 \mathbf{v} 满足方程 $m^* \left(\frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\mathbf{v}}{\tau} \right) = -e\mathbf{E}$. 试证明频率为 ω 的电导率为 $\sigma(\omega) = \sigma(0) \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}$, 其中 $\sigma(0) = ne^2\tau/m^*$.

解答. 由 Fourier Transform 有

$$\mathbf{E}(\tau) = \int \mathbf{E}(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega$$

$$\mathbf{v}(\tau) = \int \mathbf{v}(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega$$

代入漂移方程得到

$$-i\omega\mathbf{v}(\omega) + \frac{1}{\tau}\mathbf{v}(\omega) = -\frac{e}{m^*}\mathbf{E}(\omega)$$

故

$$\mathbf{v}(\omega) = -\frac{e\tau/m^*}{1 - i\omega\tau}\mathbf{E}(\omega)$$

而 $\mathbf{J} = n(-e)\mathbf{v} = \sigma\mathbf{E}$, 故

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau/m^*}{1 - i\omega\tau} = \sigma(0) \frac{1 + i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}$$

其中 $\sigma(0) = ne^2\tau/m^*$.

习题 30. 在低温下实验测出某绝缘体晶体的比热容与温度的关系 $C_V/T^{3/2} - T^{3/2}$ 为一直线，斜率为 B ，截距为 A ，如图所示。

- (a) 写出低温下 C_V 与 T 关系；
- (b) 若已知直线的斜率部分来源于声子对比热容的贡献，求 B 与德拜温度 θ_D 的关系；
- (c) 设截距部分来源于某玻色子对比热容的贡献，试估计该准粒子的色散关系中 $\omega(\mathbf{q}) \approx q^\mu$ 的 μ 。

解答.

- (a) 根据图像有 $C_V/T^{3/2} = A + BT^{3/2}$ ，故 $C_V = AT^{3/2} + BT^3$ 。

- (b) 根据德拜模型

$$C_V^D(T) = \frac{12}{5}\pi^4 Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

而 $C_V = AT^{3/2} + BT^3$ ，故 $B \sim \frac{1}{\theta_D^3}$ 。

- (c) 由习题16知 $C_V \propto T^{\frac{d}{\mu}}$ ，故 $\mu = 2$ 。