

## 一、名词解释

1. 晶态—晶态固体材料中的原子有规律的周期性排列，或称为长程有序。
2. 非晶态—非晶态固体材料中的原子不是长程有序地排列，但在几个原子的范围内保持着有序性，或称为短程有序。
3. 准晶—准晶态是介于晶态和非晶态之间的固体材料，其特点是原子有序排列，但不具有平移周期性。
4. 单晶—一整块晶体内原子排列的规律完全一致的晶体称为单晶体。
5. 多晶—由许多取向不同的单晶体颗粒无规则堆积而成的固体材料。
6. 理想晶体（完整晶体）—内在结构完全规则的固体，由全同的结构单元在空间无限重复排列而构成。
7. 空间点阵（布喇菲点阵）—晶体的内部结构可以概括为是由一些相同的点在空间有规则地做周期性无限重复排列，这些点子的总体称为空间点阵。
8. 节点（阵点）—空间点阵的点代表晶体结构中的相同位置，称为节点（阵点）。
9. 点阵常数（晶格常数）—惯用元胞棱边的长度。
10. 晶面指数—描写布喇菲点阵中晶面方位的一组互质整数。
11. 配位数—晶体中和某一原子相邻的原子数。
12. 致密度—晶胞内原子所占的体积和晶胞体积之比。
13. 原子的电负性—原子得失价电子能力的度量；电负性=常数（电离能+亲和能）
14. 肖特基缺陷—晶体内格点原子扩散到表面，体内留下空位。
15. 费伦克尔缺陷—晶体内格点原子扩散到间隙位置，形成空位—填隙原子对。
16. 色心—晶体内能够吸收可见光的点缺陷。
17. F心—离子晶体中一个负离子空位，束缚一个电子形成的点缺陷。
18. V心—离子晶体中一个正离子空位，束缚一个空穴形成的点缺陷。
19. 近邻近似—在晶格振动中，只考虑最近邻的原子间的相互作用。
20. Einstein模型—在晶格振动中，假设所有原子独立地以相同频率 $\omega_E$ 振动。
21. Debye模型—在晶格振动中，假设晶体为各向同性连续弹性媒质，晶体中只有3支声学波，且 $\omega = vq$ 。
22. 德拜频率  $\omega_D$ ——Debye 模型中  $g(\omega)$  的最高频率。
23. 爱因斯坦频率  $\omega_E$ ——Einstein 模型中  $g(\omega)$  的最可几频率。
24. 电子密度分布—温度  $T$  时，能量  $E$  附近单位能量间隔的电子数。
25. 接触电势差—任意两种不同的物质 A、B 接触时产生电荷转移，并分别在 A 和 B 上产生电势  $V_A$ 、 $V_B$ ，这种电势称为接触电势，其差称为接触电势差。
25. Bloch 电子费米气—把质量视为有效质量  $\vec{m}$ ，除碰撞外相互间无互作用，遵守费米分布的 Bloch 电子的集合称为 Bloch 电子费米气。
26. 惯用元胞（单胞）：既能反映晶格周期性，又能反映其对称性的结构单元。
27. 简谐近似：晶体中粒子相互作用势能泰勒展开式中只取到二阶项的近似。
28. 杜隆-珀替定律：高温下固体比热为常数。
29. 晶体的对称性：经过某种对称操作后晶体能自身重合的性质。
30. 格波的态密度函数（振动模式密度）：在  $\omega$  附近单位频率间隔内的格波总数。
31. 晶体结合能：原子在结合成晶体过程中所释放出来的能量。
32. 倒格矢：

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{\Omega} \\ b_2 &= 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{\Omega} \\ b_3 &= 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{\Omega} \end{aligned} \right\}$$

其中  $\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3)$  为正格子元胞体积。我们称  $b_1$ 、 $b_2$ 、 $b_3$  为倒格子基矢。

33. 带隙（禁带）：晶体中电子运动状态不允许占据的能量范围。

34. 摩尔热容：每摩尔物质升高或降低单位温度吸收或释放出的热量。

35. 空间群：晶格全部对称操作的集合。

36. 色散关系：晶格振动中  $\omega$  和  $q$  之间的关系。

37. 第一布里渊区：离到格子原点最近的倒格矢中垂面围成的区域。

38. 晶面：由布拉菲格子中不共线的三个格点所决定的平面。

39. 格波：晶体中粒子的振动模式。

40. 德拜定律：低温下固体比热与  $T^3$  成正比。

41. 布洛赫定律：晶体中的电子波函数是由晶格周期性调制的调幅平面波，即： $\psi(\vec{K}, \vec{r}) =$

$$u(\vec{K}, \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad u(\vec{K}, \vec{r}) = u(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n)$$

另一种表示： $\psi(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \psi(\vec{k}, \vec{r})$ 。

42. 基元：构成晶体的全同的基本结构单元

43. 倒格子：以正格子基矢决定的倒格矢平移所得到的一个周期性的空间格子。

44. 能态密度：给定体积的晶体，单位能量间隔内所包含的电子状态数。

45. 声子：对于晶格振动， $\hbar\omega$  为格波谐振子的能量量子，称其为声子。

46. 布里渊区：在倒格子中，以某一点为坐标原点，作所有倒格矢的垂直平分面，倒格子空间被这些平面分成许多区域，这些区域称为布里渊区。

47. 费米面：K 空间中，能量  $E$  为费米能  $E_F$  的等能面称为费米面。

48. 功函数：晶体中电子所处势阱深度  $E_0$  与费米能  $E_F$  之差，称为功函数

49. 离子晶体：质点间通过离子键相互作用结合而成的晶体。

## 二、单项选择题

1、晶体结构的**基本**特性是（ B ）

A、各向异性 B、周期性 C、自范性 D、同一性

2、晶体的性能特点不具有（ C ）

A、各向异性 B、均一性 C、各向同性 D、对称性

3、单质半导体的晶体结构类型是（ A ）。

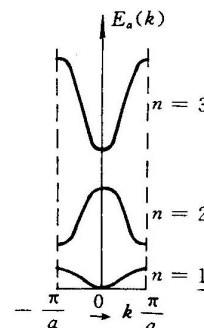
A、金刚石型结构 B、闪锌矿型结构 C、钙钛矿结构 D、密堆积结构

4、共价键的基本特点不具有（ D ）。

A、饱和性 B、方向性 C、键强大 D、各向同性

5、晶体中的点缺陷不包括（ D ）。

- A、肖特基缺陷 B、佛伦克尔缺陷 C、自填隙原子 D、堆垛层错
- 6、离子晶体的基本特点有( C )
- A、低熔点 B、高塑性 C、高强度 D、半导性
- 7、氯化钠晶体结构是由( B )
- A、由二套面心格子沿体对角线方向滑  $1/4$  长度套构而成  
B、由二套面心立方格子沿晶轴方向滑  $1/2$  长度套构而成  
C、由二套体心立方格子沿体对角线方向滑  $1/4$  长度套构而成  
D、由一套体心格子和一套面心格子沿体对角线方向滑  $1/4$  长度套构而成
- 8、布里渊区的特点包括( B )
- A、各个布里渊区的形状都不相同  
B、各布里渊区经过适当的平移，都可移到第一布里渊区且与之重合  
C、每个布里渊区的体积都不相等  
D、晶体结构的布喇菲格子虽然相同，但其布里渊区形状却不会相同
- 9、金属晶体的热传导主要是通过( A )传输实现的
- A、电子 B、声子 C、光子 D、质子
- 10、在一维单原子链的晶格振动中，有( A )支声学波、( A )支光学波。
- A、1, 0 B、1, 1 C、3, 3 D、3, 6
- 11、依照量子自由电子论，K 空间中电子的等能面是( A )。
- A、球面 B、椭球面 C、抛物面 D、不规则曲面
- 12、根据能带理论，电子的能态密度随能量变化的趋势是随能量增高而( D )。
- A、单调增大 B、不变 C、单调减小 D、复杂变化
- 13、周期性边界条件决定了电子的波矢 K 在第一布里渊区内可取值数量与晶体的初基元胞数 N( A )。
- A、相等 B、大于 C、小于 D、不一定
- 14、按照费米分布，费米能级所对应的能态电子占据的几率为( B )。
- A、1 B、0.5 C、0
- 15、根据能带的能量是波矢的周期函数的特点，能带的表示图式可以有三种。以下不正确的是( D )。
- A、简约区图式 B、扩展区图式  
C、反复图式 D、单一图式
- 16、量子自由电子论是建立在( B )的基本假设之上的。
- A、周期性势场 B、恒定势场 C、无势场
- 17、晶体的宏观特性包括( A )
- A、各向异性 B、周期性 C、重复性 D、单一性
- 18、不属于半导体主要晶体结构类型的是( D )。
- A、金刚石型结构 B、闪锌矿型结构 C、钙钛矿结构 D、密堆积结构
- 19、晶体中的线缺陷包括( C )。
- A、小角晶界 B、空位 C、螺位错 D、堆垛层错
- 20、根据能带的能量是波矢的周期函数的特点，能带的表示图式可以有



式可以有

C、重复图式 D、周期图式

21、金刚石结构是由( A )

- A、由二套面心格子沿体对角线方向滑  $1/4$  长度套构而成
- B、由二套简单立方格子沿体对角线方向滑  $1/4$  长度套构而成
- C、由二套体心立方格子沿体对角线方向滑  $1/4$  长度套构而成
- D、由一套体心格子和一套面心格子沿体对角线方向滑  $1/4$  长度套构而成

22、布里渊区的特点不包括( A )

- A、各个布里渊区的形状都是相同的(不同的)
- B、各布里渊区经过适当的平移,都可移到第一布里渊区且与之重合
- C、每个布里渊区的体积都是相同的
- D、无论晶体是由哪种原子组成,只要布喇菲格子相同,其布里渊区形状也就相同

23、绝缘晶体的热传导是通过( B )传输实现的

- A、电子 B、声子 C、光子 D、质子

24、在一维双原子链的晶格振动中,有( A )支声学波、( A )支光学波。

- A、1, 1 B、2, 2 C、3, 3 D、4, 4

25、按照费米分布,绝对 0 度时费米能以下的能态电子占据的几率为( A )。

- A、1 B、0.5 C、0

26、能带理论是建立在( A )的基本假设之上的。

- A、周期性势场 B、恒定势场 C、无势场

### 三. 填空

1. 晶体结构的基本特点是具有( 周期 )性和( 重复 )性.
2. 离子晶体的( 光学波 )波会引起对远红外线的吸收.
3. 描述晶体对称性可以概括为( 32 )个点群,( 230 )个空间群.
4. 金属主要是依靠( 电子 )导热,而绝缘体主要依靠( 声子 )导热.
5. 对一维晶体,其晶格振动仅存在( 声学 )波,而二、三维晶体振动既有( 声学 )波,又有( 光学 )波.
6. 对于量子化的自由电子,其 K 空间中的等能面为( 球面 ).
7. 费米能是指电子占据几率为(  $1/2$  )的电子态本征能量大小.
8. 能带理论中,电子的  $E \sim K$  关系具有( 倒格子 )周期性.
9. 对晶格常数为  $a$  的简单立方晶体,与正格矢  $R = ai + 2aj + 2ak$  正交的倒格子晶面族的面指数为( 122 ).
10. 离子晶体的(光学波)会引起离子晶体的极化.
11. 金刚石晶体的结合类型是典型的(共价结合)晶体,它有( 6 )支格波.
12. 两种不同金属接触后,费米能级高的带(正)电.

### 四、判断对错

- 1、各向异性是晶体的基本特性之一。(  $\checkmark$  )
- 2、单质半导体和二元化合物半导体的主要晶体结构类型为金刚石型结构和闪锌矿型结构。(  $\checkmark$  )
- 3、各布里渊区经过适当的平移,仍无法移到第一布里渊区且与之重合。(  $\times$  )
- 4、在一维单原子链的晶格振动中,有 1 支光学波、无声学波。(  $\times$  )
- 5、依照能带理论,电子的能态密度随能量变化的趋势总是随能量增高而增大。(  $\times$  )

6、周期性边界条件决定了电子的波矢  $K$  在第一布里渊区内可取值数量与晶体的初基元胞数  $N$  相等。(  $\checkmark$  )

7、同一晶体在绝对 0 度时的费米能大于绝对 0 度时以上时的费米能。(  $\checkmark$  )

8、能带理论是建立在恒定势场的基本假设之上的。(  $\times$  )

9、晶体的宏观特性包括各向异性、解理性、周期性、重复性。(  $\times$  )

10、空位、小角晶界、螺位错、堆垛层错都是晶体中的线缺陷。(  $\times$  )

11、共价晶体的基本特点有高强度、高硬度、高熔点。(  $\checkmark$  )

12、布里渊区的特点包括 A、B、C:

A、各个布里渊区的形状都是相同的

B、各布里渊区经过适当的平移，都可移到第一布里渊区且与之重合

C、每个布里渊区的体积都是相同的

D、无论晶体是由哪种原子组成，只要布喇菲格子相同，其布里渊区形状也就相同(  $\times$  )

13、绝缘晶体的热传导是通过声子传输实现的。(  $\checkmark$  )

14、在一维双原子链的晶格振动中，有 1 支声学波、1 支光学波。(  $\checkmark$  )

15、依照量子自由电子论， $K$  空间中电子的等能面是不规则曲面。(  $\times$  )

16、依照量子自由电子论，态密度随能量变化的总趋势是随能量增高而增大。(  $\checkmark$  )

17 按照费米分布，绝对 0 度时费米能以下的能态电子占据的几率为 0。(  $\times$  )

## 五、简述及问答题

1. 试述晶态、非晶态、准晶、多晶和单晶的**结构特征**。

解：晶态固体材料中的原子有规律的周期性排列，或称为长程有序。非晶态固体材料中的原子不是长程有序地排列，但在**几个原子的范围内保持着有序性**，或称为短程有序。准晶态是介于晶态和非晶态之间的固体材料，其特点是原子有序排列，但不具有**平移周期性**。

另外，晶体又分为单晶体和多晶体：整块晶体内原子排列的规律完全一致的晶体称为单晶体；而多晶体则是由许多取向不同的单晶体颗粒无规则堆积而成的。

2. 晶格点阵与实际晶体结构有何区别和联系？

解：晶格点阵是一种数学抽象，其中的格点代表基元中某个原子的位置或基元质心的位置，也可以是基元中任意一个等价的点。当晶格点阵中的格点被具体的基元代替后才形成实际的晶体结构。晶格点阵与实际晶体结构的关系可总结为：

$$\text{晶格点阵} + \text{基元} = \text{实际晶体结构}$$

3. 晶体结构可分为Bravais格子和复式格子吗？

解：晶体结构可以分为Bravais格子和复式格子，当基元只含一个原子时，每个原子的周围情况完全相同，格点就代表该原子，这种晶体结构就称为简单格子或Bravais格子；当基元包含 2 个或 2 个以上的原子时，各基元中相应的原子组成与格点相同的网格，这些格子相互错开一定距离套构在一起，这类晶体结构叫做复式格子。

4. 试述晶体结构，空间点阵，基元，B 格子、单式格子和复式格子之间的关系和区别。

解：(1) 晶体结构 = 空间点阵 + 基元，空间点阵 = B 格子，晶体结构 = 带基元的 B 格子。

(2) 基元内所含的原子数 = 晶体中原子的种类数。(元素相同，由于周围环境不同，可以认为是不同种类的原子，ex: 金刚石。)

(3) B 格子的基本特征：各格点情况完全相同。

(4) 单式格子：晶体由一种原子组成。

复式格子：晶体由几种原子组成，每种原子组成一个子格子，晶体由几个子格子套构而成。所以，复式格子 = 晶体结构，复式格子  $\neq$  B 格子。

5. 倒格子的实际意义是什么？一种晶体的正格矢和相应的倒格矢是否有一一对应的关系？

解：倒格子的实际意义是由倒格子组成的空间实际上是状态空间（波矢K空间），在晶体的X射线衍射照片上的斑点实际上就是倒格子所对应的点子。

设一种晶体的正格基矢为 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ ，根据倒格子基矢的定义：

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{\Omega} \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{\Omega} \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{\Omega} \end{aligned} \right\}$$

式中 $\Omega$ 是晶格原胞的体积，即 $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]$ ，由此可以唯一地确定相应的倒格子空间。同样，反过来由倒格矢也可唯一地确定正格矢。所以一种晶体的正格矢和相应的倒格矢有一一对应的关系。

## 6. 正、倒格子之间有哪些关系？

解：若 $h_1$ 、 $h_2$ 、 $h_3$ 为互质整数，则 $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 为该方向最短倒格矢；

(1) 正、倒格子互为倒格子；

(2)  $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$  垂直于晶面族  $(h_1, h_2, h_3)$ ；

(3) 某方向最短倒格矢 $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 之模和晶面族 $(h_1, h_2, h_3)$ 的面间距 $d_h$ 成反比

$$d_h = \frac{2\pi}{|\vec{G}_h|}$$

(4)  $\vec{G}_h \cdot \vec{R}_n = 2\pi m$  ( $m$ 为整数)

(5)  $\Omega \cdot \Omega^* = (2\pi)^3$

## 7. 为什么要使用“倒空间”的概念？

解：波的最主要的指标是波矢 $K$ ，波矢 $K$ 的方向就是波传播的方向，波矢的模值与波长成反比，波矢的量纲是 $1/m$ 。讨论晶体与波的相互作用是固体物理的基本问题之一。一般情况下晶体的周期性、对称性等均在正空间描述，即在 $m$ 的量纲中描述。为了便于讨论晶体与波的相互作用，必须把二者放到同一个空间，同一坐标系中来。我们的选择是把晶体变换到量纲是 $1/m$ 的空间即倒空间来，即在倒空间找到正空间晶体的“映射”。

8. 点对称操作的基本操作是哪几个？解：点对称操作的基本操作共有八个，分别是 $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$ 、 $C_6$ 、 $i$ 、 $m$ 、 $\overline{C_4}$ 。

9. 一个物体或体系的对称性高低如何判断？有何物理意义？一个正八面体有哪些对称操作？

解：对于一个物体或体系，我们首先必须对其经过测角和投影以后，才可对它的对称规律，进行分析研究。如果一个物体或体系含有的对称操作元素越多，则其对称性越高；反之，含有的对称操作元素越少，则其对称性越低。晶体的许多宏观物理性质都与物体的对称性有关，例如六角对称的晶体有双折射现象。而立方晶体，从光学性质来讲，是各向同性的。正八面体中有3个4度轴，其中任意2个位于同一个面内，而另一个则垂直于这个面；6个2度轴；6个与2度轴垂直的对称面；3个与4度轴垂直的对称面及一个对称中心。

10. 晶体中有哪几种密堆积，密堆积的配位数是多少？

解：密堆积是具有最大配位数(12)的排列方式，有 h c p: ABAB...结构和 fcc: ABCABC...结构，共两种。

11. 解理面是面指数低的晶面还是指数高的晶面？为什么？

晶体容易沿解理面劈裂，说明平行于解理面的原子层之间的结合力弱，即平行解理面的原层的间距大。因为面间距大的晶面族的指数低。所以解理面是面指数低的晶面。

12. 晶体结构、B格子、所属群之间的关系如何？

解：晶体结构不同，B格子可以相同，例如，金刚石结构和 NaCl 结构的 B 格子均为 FCC；



B 格子可比晶体结构有更多的对称操作数，或说具有更高的对称性；

不同的晶体结构，不同的 B 格子，可以属于相同的群，例如，B 格子分别为 fcc 和 bcc 均属于  $O_h$  群。

1 3. 对六角晶系的晶面指数和晶向指数使用四指标表示有什么利弊？

解：优点：使在晶体学和物理上等价的晶面、晶向具有相似的指数。

缺点：没有三指标简单；

四指标中加了“前三个指标和为零”的限制条件，否则指标可能出现不惟一性。

1 4. 试问7种典型晶体结构的配位数（最近邻原子数）分别是多少？

解：7种典型的晶体结构的配位数如下表所示：

晶体结构	配位数	晶体结构	配位数
面心立方	12	氯化钠型结构	6
六角密积		氯化铯型结构	8
体心立方	8	金刚石型结构	4
简单立方	6		

1 5. 七种晶系和十四种 B 格子是根据什么划分的？

解：七种晶系：B 格子的点对称性的种类数只有 7 种，称之为七种晶系。

十四种 B 格子：B 格子的空间对称性的种类数共有 14 种，称之为 14 种 B 格子。

	晶体结构	B 格子
点群数	32	7 七种晶系
空间群数	230	14 十四种 B 格子

1 6. 试述离子键、共价键、金属键、范德瓦尔斯和氢键的基本特征。

解：（1）离子键：无方向性，键能相当强；（2）共价键：饱和性和方向性，其键能也非常强；（3）金属键：有一定的方向性和饱和性，其价电子不定域于2个原子实之间，而是在整个晶体中巡游，处于非定域状态，为所有原子所“共有”；（4）范德瓦尔斯键：依靠瞬时偶极距或固有偶极距而形成，其结合力一般与  $r^7$  成反比函数关系，该键结合能较弱；（5）氢键：依靠氢原子与2个电负性较大而原子半径较小的原子（如O，F，N等）相结合形成的。该键也既有方向性，也有饱和性，并且是一种较弱的键，其结合能约为50kJ/mol。

1 7. 原子间的排斥作用和吸引作用有何关系？各自起主导的范围是什么？

在原子由分散无规则的中性原子结合成规则排列的晶体过程中，吸引力起了主要作用。在吸引力的作用下，原子间的距离缩小到一定程度，原子间才出现排斥力。当排斥力与吸引力相等时，晶体达到稳定结合状态。可见，晶体要达到稳定结合状态，吸引力与排斥力缺一不可。设此时相邻原子间的距离为  $r_0$ ，当相邻原子间的距离  $r > r_0$  时，吸引力起主导作用；当相邻原子间的距离  $r < r_0$  时，排斥力起主导作用。

1 8. 是否有与库仑力无关的晶体结合类型？对照晶体的各种键合类型说明之。

共价结合中，电子虽然不能脱离电负性大的原子，但靠近的两个电负性大的原子可以各出一个电子，形成电子共享的形式，即这一对电子的主要活动范围处于两个原子之间，通过库仑力，把两个原子连接起来。离子晶体中，正离子与负离子的吸引力就是库仑力。金属结合中，原子实依靠原子实与电子云间的库仑力紧紧地吸引着。分子结合中，是电偶极矩把原本分离的原子结合成了晶体。电偶极矩的作用力实际就是库仑力。氢键结合中，氢先与电负性大的原子形成共价结合后，氢核与负电中心不再重合，迫使它通过库仑力再与另一个电负性大的原子结合。可见，所有晶体结合类型都与库仑力有关。

1 9. 有人说“晶体的内能就是晶体的结合能”，对吗？

解：这句话不对，晶体的结合能是指当晶体处于稳定状态时的总能量（动能和势能）与组成这晶体的N个原子在自由时的总能量之差，即  $E_b = E_N - E_0$ 。（其中  $E_b$  为结合能， $E_N$  为组成这晶体的N个原子在自由时的总能量， $E_0$  为晶体的总能量）。而晶体的内能是指晶体处于某一状态时（不一定是稳定平衡状态）的，其所有组成粒子的动能和势能的总和。

2 0. 棱(刃)位错和 螺位错分别与位错线的关系如何?

解: 棱(刃)位错: 滑移方向垂直位错线。

螺位错: 滑移方向平行位错线。

2 1. 位错线的定义和特征如何?

解: 位错线的定义: 滑移区与未滑移的分界线;

位错线的特征:

(1) 线附近原子排列失去周期性;

(2) 位错线不是热运动的结果;

(3) 位错线可在体内形成闭合线, 可在表面露头, 不可能在体内中断。

2 2. 周期性边界条件的物理含义是什么? 引入这个条件后导致什么结果? 如果晶体是无限大,  $q$  的取值将会怎样? 解: 由于实际晶体的大小总是有限的, 总存在边界, 而显然边界上原子所处的环境与体内原子的不同, 从而造成边界处原子的振动状态应该和内部原子有所差别。考虑到边界对内部原子振动状态的影响, 波恩和卡门引入了周期性边界条件。其具体含义是设想在一长为  $Na$  的有限晶体边界之外, 仍然有无穷多个相同的晶体, 并且各块晶体内相对应的原子的运动情况一样, 即第  $j$  个原子和第  $tN+j$  个原子的运动情况一样, 其中  $t=1, 2, 3\cdots$ 。

引入这个条件后, 导致描写晶格振动状态的波矢  $q$  只能取一些分立的不同值。如果晶体是无限大, 波矢  $q$  的取值将趋于连续。

2 3. 讨论晶格振动时的物理框架是牛顿力学还是量子力学? 解: 牛顿力学+量子力学修正, 所以又可称为半经典理论。

2 4. 一维格波波矢  $q$  的取值范围是什么?  $q$  在第一 B. Z 内取值数是多少?  $q$  有哪些特点?

解:  $q$  的取值范围: 为保证唯一性,  $q$  在第一 B. Z 内取值, 即  $-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$

$q$  在第一 B. Z 内取值数为  $N$  (初基元胞数)。  $q$  不连续 (准连续); 均匀分布; 密度  $\frac{Na}{2\pi} = \frac{L}{2\pi}$

2 5. 在三维晶体中, 格波独立的  $\vec{q}$  点数, 格波个数, 格波总支数, 声学波支数, 光学波支数分别等于多少? 解: 独立的  $\vec{q}$  点数 = 晶体的初基元胞数  $N$ ; 格波个数 = 晶体原子振动自由度数,  $3NS$  个;

格波支数 =  $3S$  (初基元胞内原子振动的自由度数); 其中 3 支声学波,  $3(s-1)$  支光学波。

2 6. 定性地讲, 声学波和光学波分别描述了晶体原子的什么振动状态?

解: 定性地讲, 声学波描述了胞质心的运动, 光学波描述了元胞内原子的相对运动。

描述元胞内原子不同的运动状态是二支格波最重要的区别。

2 7. 晶格振动的色散曲线有哪些对称性? 解: (1)  $\omega_i(\vec{q}) = \omega_i(\vec{q} + \vec{G}_n)$   $\omega_i(\vec{q}) = \omega(-\vec{q})$  2 还具有与晶体结构相同的对称性。

2 8. 讨论晶格振动的系统能量时为什么要引入简正坐标  $Q_q(t)$ ?

解: 为了消去交叉项, 便于数学处理和看出物理意义 (简谐格波间相互独立)。

2 9. 什么叫声子? 对于一给定的晶体, 它是否拥有一定种类和一定数目的声子?

解: 声子就是晶格振动中的简谐振子的能量量子, 它是一种玻色子, 服从玻色-爱因斯坦统计, 即具有能量为  $\hbar\omega_j(q)$  的声子平均数为

$$n_j(q) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_j(q)/(k_B T)} - 1}$$

对于一给定的晶体, 它所对应的声子种类和数目不是固定不变的, 而是在一定的条件下发生变化。

3 0. 讨论晶格振动时的量子力学修正体现在什么地方? 解: 体现在把谐振子能量用量子谐振



子能量表示。并不是体现在引入格波、格波用谐振子等效及  $\vec{q}$  不连续等方面。

### 3 1. 声子有哪些性质？

解：(1) 声子是量子谐振子的能量量子；

(2) 3NS 格波与 3NS 个量子谐振子一一对应；

(1) 声子为玻色子；

(2) 平衡态时声子是非定域的；

(3) 声子是准粒子 遵循能量守恒  $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_3$

准动量选择定则  $\hbar q_1 + \hbar q_2 = \hbar(q_3 + \vec{G}_h)$

(4) 非热平衡态，声子扩散伴随着热量传导；

(5) 平均声子数

### 3 2. 晶体中声子数目是否守恒？

频率为  $\omega_i$  的格波的 (平均) 声子数为

$$n(\omega_i) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_i/K_B T} - 1}$$

即每一个格波的声子数都与温度有关，因此，晶体中声子数目不守恒，它随温度的改变而改变。

### 3 3. 绝对零度时，价电子与晶格是否交换能量？

晶格的振动形成格波。价电子与晶格交换能量。实际是价电子与格波交换能量。格波的能量量子称为声子，价电子与格波交换能量可视为价电子与声子交换能量。频率为  $\omega_i$  的格波的声子数

$$n(\omega_i) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_i/K_B T} - 1}$$

从上式可以看出。绝对零度时，任何频率的格波的声子全都消失。出此，绝对零度时，价电子与晶格不再交换能量。

### 3 4. 长光学支格波与长声学支格波本质上有何差别？

答：长光学支格波的特征是每个原胞内的不同原子做相对振动，振动频率较高，它包含了晶格振动频率最高的振动模式。长声学支格波的特征是原胞内的不同原子没有相对位移，原胞做整体运动，振动频率较低，它包含了晶格振动频率最低的振动模式，波速是一常数。任何晶体都存在声学支格波，但简单晶格 (非复式格子) 晶体不存在光学支格波。

### 3 5. 试举一例说明固体物理中处理晶体内微观粒子 (原子或电子) 运动态问题的基本过程。

答：以求解金属晶体中自由电子的运动状态为例，基本的处理过程如下：

(1) 建模 (索末菲模型)。

结构模型：金属晶体由不动的离子实 (包括原子核和核外封闭壳层内的电子) 构成三维周期性骨架，成为自由电子。

势场模型：离子实之间存在一无穷大的势垒。

$$V(r) = \begin{cases} 0 & 0 < x, y, z < L \\ \infty & x, y, z \leq 0; x, y, z \geq L \end{cases}$$

(2) 建立运动方程 (简化的定态薛定谔方程)

描述自由电子在金属晶体运动状态的态函数满足：

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + E \Psi(\mathbf{r}) = 0$$

(3) 假定自由电子运动的边界条件（周期性边界条件，即玻恩—卡曼边界条件）

假设在有限晶体之外有无穷多个和这个有限晶体完全相同的假想晶体与之毫无缝隙地衔接在一起，组成一个无限的晶体，自由电子即处于这样的假想晶体中运动。

$$\left. \begin{aligned} \Psi(0, y, z) &= \Psi(L, y, z) \\ \Psi(x, 0, z) &= \Psi(x, L, z) \\ \Psi(x, y, 0) &= \Psi(x, y, L) \end{aligned} \right\}$$

(4) 求解

在上述边界条件下解薛定谔方程，得：

$$\Psi(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}$$

其中  $\mathbf{K}$  为电子的波矢量  $\mathbf{K} = K_x \mathbf{i} + K_y \mathbf{j} + K_z \mathbf{k}$ ;

$A$  是归一化常数，由波函数的归一化条件

$$\int_V \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1$$

$$A = L^{-\frac{3}{2}} = \frac{1}{\sqrt{V}}$$

(5) 对解的讨论（金属晶体中自由电子的运动状态的特点）

由  $|\Psi(\mathbf{r})|^2 = \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = A^2 = \frac{1}{L^3}$  即指电子是在金属中很自由的，是自由电子。

3.6. 晶格比热容的爱因斯坦模型和德拜模型采用了什么简化假设？各取得了什么成就？各有什么局限性？为什么德拜模型在极低温度下能给出精确结果？

解：我们知道晶体比热容的一般公式为

$$c_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \int_0^{\omega_D} k_B \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / (k_B T)} \rho(\omega) d\omega}{(e^{\hbar \omega / (k_B T)} - 1)^2}$$

由上式可以看出，在用量子理论求晶体比热容时，问题的关键在于如何求角频率的分布函数  $\rho(\omega)$ 。但是对于具体的晶体来讲， $\rho(\omega)$  的计算非常复杂。为此，在爱因斯坦模型中，假设晶体中所有的原子都以相同的频率振动，而在德拜模型中，则以连续介质的弹性波来代表格波以求出  $\rho(\omega)$  的表达式。

爱因斯坦模型取得的最大成就在于给出了当温度趋近于零时，比热容  $c_V$  亦趋近于零的结果，这是经典理论所不能得到的结果。其局限性在于模型给出的是比热容  $c_V$  以指数形式趋近于零，快于实验给出的以  $T^3$  趋近于零的结果。德拜模型取得的最大成就在于它给出了在极低温度下，比热和温度  $T^3$  成比例，与实验结果相吻合。其局限性在于模型给出的德拜温度  $\Theta_D$  应视为恒定值，适用于全部温度区间，但实际上在不同温度下，德拜温度  $\Theta_D$  是不同的。

在极低温度下，并不是所有的格波都能被激发，而只有长声学波被激发，对比热容产生影响。而对于长声学波，晶格可以视为连续介质，长声学波具有弹性波的性质，因而德拜的模型的假设基本符合事实，所以能得出精确结果。

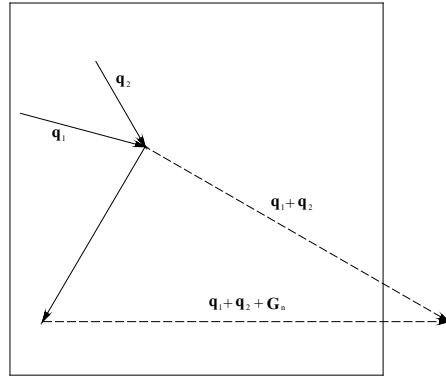
3 7. 声子碰撞时的准动量守恒为什么不同于普通粒子碰撞时的动量守恒？U过程物理图像是什么？它违背了普遍的动量守恒定律吗？

解：声子碰撞时，其前后的总动量不一定守恒，而是满足以下的关系式

$$\hbar \mathbf{q}_1 + \hbar \mathbf{q}_2 = \hbar \mathbf{q}_3 + \hbar \mathbf{G}_n$$

其中上式中的  $\mathbf{G}_n$  表示一倒格子矢量。

对于  $\mathbf{G}_n = 0$  的情况，即有  $\hbar \mathbf{q}_1 + \hbar \mathbf{q}_2 = \hbar \mathbf{q}_3$ ，在碰撞过程中声子的动量没有发生变化，这种情况称为正规过程，或N过程，N过程只是改变了动量的分布，而不影响热流的方向，它对热阻是没有贡献的。对于  $\mathbf{G}_n \neq 0$  的情况，称为翻转过程或U过程，其物理图像可由下图3.2来描述：



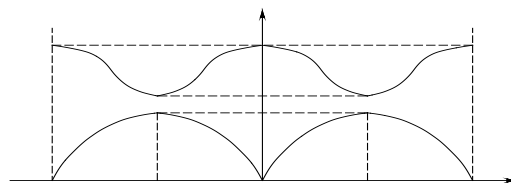
在上图3.2中， $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$  是向“右”的，碰撞后  $\mathbf{q}_3$  是向“左”的，从而破坏了热流的方向，所以U过程对热阻是有贡献的。U过程没有违背普遍的动量守恒定律，因为声子不是实物量子，所以其满足的是准动量守恒关系。

3 8. 从一维双原子晶格色散关系出发，当  $m$  逐渐接近  $M$  和  $m = M$  时，在第一布里渊区中，晶格振动的色散关系如何变化？试与一维单原子链的色散关系比较，并对结果进行讨论。

解：一维双原子晶格的色散关系为

$$\omega_{\pm}^2 = \left( \frac{\beta}{M} + \frac{\beta}{m} \right) \pm \sqrt{\left( \frac{\beta}{M} + \frac{\beta}{m} \right)^2 - 4 \frac{\beta}{M} \cdot \frac{\beta}{m} \sin^2 qa}$$

由此可做出如下图的一维双原子链振动的色散关系曲线图



一维双原子链振动的色散关系曲线

由上图可以看出，当  $m$  逐渐接近  $M$  时，在第一布里渊区边界，即  $q = \pm \frac{\pi}{2a}$  处，声学波的频率开始增大，而光学波的频率则开始减小，而当  $m = M$  时，则声学波的频率和光学波的频率在  $q = \pm \frac{\pi}{2a}$  处相等，都等于  $\sqrt{\frac{2\beta}{M}}$ 。

而在一维单原子链中，其色散关系为  $\omega^2 = \frac{4\beta}{M} \sin^2 \frac{qa}{2}$ ，由此可见，在一维单原子链中只存在一支

格波，其色散关系曲线与一维双原子链中的声学波的色散关系曲线基本相似，在其布里渊区边界，即  $q = \pm \frac{\pi}{a}$  处，其格波频率为  $\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}$ ，是双原子链的格波在布里渊边界的频率值的2倍。

3 9. 有人定性地认为，德拜温度  $\theta_D$  是经典概念与量子概念解释比热的分界线，你的看法如何？

解：德拜频率  $\omega_D$  ——  $g(\omega)$  的最高频率；

爱因斯坦频率  $\omega_E$  ——  $g(\omega)$  中最可几频率；

德拜温度  $\theta_D$  与德拜频率  $\omega_D$  相对应。  $\theta_D$  成为经典概念与量子概念解释比热的分界线，是因为经典理论认为：谐振子能量按自由度均分——即认为所有波格均激发，而当  $T < \theta_D$  时，出现格波冻结，按经典理论处理造成较大的误差，而当  $T > \theta_D$  时，不出现格波冻结，按经典理论处理造成的误差也就相对较小了。

4 0. 热膨胀系数  $\alpha_v$  是如何表示的？

解：  $\alpha_v = \frac{\gamma}{KV} C_v$  式中  $\gamma$ ：格林爱森系数；  $K$ ：体弹性模量；

$V$ ：晶体体积；  $C_v$ ：晶体的热容

4 1. 热传导系数（热导率） $\lambda$  是如何表示的？

解：  $\lambda = \frac{1}{3} C_v \bar{v} L$  式中：  $C_v$ ：单位体积热容；  $\bar{v}$ ：声子平均速率；  $L$ ：声子平均自由程。

4 2. 什么叫 N 过程和 U 过程？

以三声子过程为例：  $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_3$   $\hbar\vec{q}_1 + \hbar\vec{q}_2 = \hbar(\vec{q}_3 + \vec{G}_h)$

$\vec{G}_h = 0$  —— N 过程  $\vec{G}_h \neq 0$  —— U 过程

4 3. 为什么说光学支一般对热导贡献小？

解：因为：(1) 温度不太高时 ( $T < \theta_D$ ) 光学支先冻结，对  $C_v$  贡献小

(2) 光学支  $\bar{v}$  小， $\bar{v}$  的物理意义是声子运动的平均速率，而声子的运动携带着能量的传播，因此  $\bar{v}$  的意义应与能量传播的速度相对应，能速  $v_g = \frac{d\omega}{dq}$ ，光学支色散曲线  $\omega \sim q$  平坦， $v_g$  较小，即  $\bar{v}$  较小。

(3) 光学支  $\omega$  小的  $|q|$  大，易于发生 U 过程，而 U 过程将造成热阻。

4 4. 有人说，热容  $C_v$  是声子密度的度量，你的看法如何？

解：由热膨胀系数  $\alpha_v$ 、热导率  $\lambda$  的表示式可知  $\alpha_v \propto C_v$ 、 $\lambda \propto C_v$ ，而由  $\alpha_v$ 、 $\lambda$  的物理意义可知， $\alpha_v$ 、 $\lambda$  均应与声子密度相关，考察  $\alpha_v$ 、 $\lambda$  的表示式，只有认为  $C_v$  表示声子的密度，所以在相同温度下，认为热容  $C_v$  是晶体中声子密度的度量是可以的。

4 5. 为什么说“晶格振动”理论是半经典理论？

解：首先只能求解牛顿方程，并引入了格波，而且每个格波的能量可用谐振子能量来表示。之后进行了量子力学修正，量子力学修正体现在谐振子能量不用经典谐振子能量表示式，而用量子谐振子能量表示式。

4 6. 简述晶格振动理论中简谐近似的成功之处和局限性。

解：成功得出格波（声学格波、光学格波）及其相应的色散曲线，引入了声子，并成功地解释了热容。其局限性主要表现为不能解释热膨胀、热传导等现象。

4 7. 什么是声子的准动量？为什么称它们是“准”动量，而不直接称为动量？

解：声子是准粒子， $\hbar q_1$  是声子的准动量。准动量  $\hbar q_1$  具有动量的量纲，但声子间相互作用满足准动量选择定则  $\hbar q_1 + \hbar q_2 = \hbar(q_3 + \vec{G}_h)$  其中  $\vec{G}_h$  是晶体的任意倒格矢。

4 8. 金属自由电子论作了哪些假设？得到了哪些结果？

解：金属自由论假设金属中的价电子在一个平均势场中彼此独立，如同理想气体中的粒子一样是“自由”的，每个电子的运动由薛定谔方程来描述；电子满足泡利不相容原理，因此，电子不服从经典统计而服从量子的费米—狄拉克统计。根据这个理论，不仅导出了魏德曼—佛兰兹定律，而且而得出电子气对晶体比热容的贡献是很小的。

4 9. 金属自由电子论在 $k$ 空间的等能面和费米面是何形状？费米能量与哪些因素有关？

解：金属自由电子论在 $k$ 空间的等能面和费米面都是球形。费米能量与电子密度和温度有关。

5 0. 在低温下电子比热容比经典理论给出的结果小得多，为什么？

解：因为在低温时，大多数电子的能量远低于费米能，由于受泡利原理的限制基本上不能参与热激发，而只有在费米面附近的电子才能被激发从而对比热容有贡献。

5 1. 弛豫时间的物理意义是什么？它与哪些因素有关？

解：弛豫时间的物理意义是指电子在两次碰撞之间的平均自由时间，它的引入是用来描写晶格对电子漂移运动的阻碍能力的。弛豫时间的大小与温度、电子质量、电子浓度、电子所带电量及金属的电导率有关。

5 2. 当2块金属接触时，为什么会产生接触电势差？

解：由于2块金属中的电子气系统的费米能级高低不同而使热电子发射的逸出功不同，所以这2块金属接触时，会产生接触电势差。

5 3. 固体能带论的两个基本假设是什么？

解：(1)绝热近似，原子实的影响用周期势场等效，把多体问题化为多电子问题。

(2)单电子近似，把其余电子对某一电子作用也用等效的平均势场表示，把多电子问题简化为单电子问题。

5 4. 固体能带论的基本思路是怎样的？解：用绝热近似和单电子近似，把原子实及其它电子的影响用等效的周期势场 $\vec{V}(r)$ 来表示，进而求解S—方程，并用量子力学的微扰论求出固体中电子的波函数和能量。关键是等效的周期势场 $\vec{V}(r)$ 该如何表示。

5 5. 固体中电子状态的主要特征有哪些？解：用周期势场 $\vec{V}(r)$ 等效相互作用之后

(1) 由孤立原子的能级变成固体的能带；

(2) 出现电子的共有化；

(3) 由周期边界条件波矢 $\vec{K}$ 取值不连续  $\vec{K} = \frac{l}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{l}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{l}{N_3}\vec{b}_3$  其中  $l_1, l_2, l_3 =$

$0, \pm 1, \pm 2, \dots, N_1, N_2, N_3$  为 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 方向初基元胞数。

5 6. 布洛赫电子论作了哪些基本近似？它与金属自由电子论相比有哪些改进？

解：布洛赫电子论作了3条基本假设，即①绝热近似，认为离子实固定在其瞬时位置上，可把电子的运动与离子实的运动分开来处理；②单电子近似，认为一个电子在离子实和其它电子所形成的势场中运动；③周期场近似，假设所有电子及离子实产生的场都具有晶格周期性。布洛赫电子论相比于金属自由电子论，考虑了电子和离子实之间的相互作用，也考虑了电子与电子的相互作用。

5 7. 由Bloch定理有哪些结论和推论？

解：(1) a.  $|\psi(\vec{k}, \vec{r})|^2$ 代表电子出现的几率，具有正晶格周期性。

b. 但 $\psi(\vec{k}, \vec{r})$ 本身不具有正晶格周期性。

c.  $\psi(\vec{k}, \vec{r})$ 本身具有倒格子周期性 $\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \psi(\vec{k} + \vec{G}_n, \vec{r})$   $\vec{G}_n$ ：任意倒格矢

(2) a. 能量具有倒格子周期性 即  $E_n(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G}_n)$ 。

b. 因电子能量为物理的实在, 也具有正晶格周期性。

a. 同一能带对  $\vec{k} = 0$  的点具有反对称性,  $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$

b.  $E(\vec{k})$  具有与正晶格相同的对称性。

5 8. 周期场对能带形成是必要条件吗?

解: 周期场对能带的形成是必要条件, 这是由于在周期场中运动的电子的波函数是一个周期性调幅的平面波, 即是一个布洛赫波。由此使能量本征值也称为波矢的周期函数, 从而形成了一系列的能带。

5 9. 在第一 B、Z 内波矢  $\vec{K}$  的取值,  $\vec{K}$  点数,  $\vec{K}$  点密度。

解:  $\vec{k} = \frac{l_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \vec{b}_3$ , 第一 B、Z 内独立的  $\vec{K}$  点数为  $N$  (初基元胞数), 每个  $\vec{K}$  点

在倒空间所占体积为  $(2\pi)^3/V$ ,  $\vec{k}$  点密度为  $\frac{V}{(2\pi)^3}$

6 0. 能态密度  $D$  是如何定义的?

解: 对给体积的晶体, 单位能量间隔的电子状态数。

(1) 若能带不交叠:  $E \rightarrow E+dE$  二等能面间电子状态数  $dZ = 2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \int_E^{E+dE} d\tau_{\vec{k}}$

$$dZ = D(E_n) dE, \quad D = \frac{dz}{dE} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{\text{等}E\text{面}} \left| \frac{ds_E}{\nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})} \right|$$

(2) 若能带交叠  $D(E) = \sum_n D(E_n)$

6 1. 试计算自由电子的能态密度  $D$ 。

解:  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  等能面为球面, 得  $D = \frac{dz}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$  但不能说  $E \uparrow$  电子数  $\downarrow$

6 2. 一个能带有  $N$  个准连续能级的物理原因是什么?

解: 这是由于晶体中含有的总原胞数  $N$  通常都是很大的, 所以  $k$  的取值是十分密集的, 相应的能级也同样十分密集, 因而便形成了准连续的能级。

6 3. 特鲁多模型及其成功与不足之处有哪些?

解: 特鲁多模型假设: (1) 价电子构成“自由电子气”, 无规则热运动与原子实碰撞, 满足经典的玻尔兹曼分布;

(2) 两次碰撞间, 电子不受力的作用, 电子能量只有动能;

(3) 电子与原子实的碰撞过程用平均自由程  $l$  和平均自由时间  $\tau$  等自由气体热运动的术语表征。

成功之处: 较好地解释了金属的导电、热导现象。

不足: (1) 忽略了原子实周期势场和电子间的相互作用。

(2) 不能正确解释金属的比热。

6 4. 特鲁多模型的“自由电子气”与无限大真空中自由电子能量有何异同?

解: 相同之处: 均设势场  $V(\vec{r}) = 0$  则  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

不同之处: 特鲁多模型中的自由电子气, 除假设的与原子实碰撞外, 还要受到边界的反射, 由周期边界条件  $k$  不连续。

6 5. 索末菲的“自由电子费米气”模型与特鲁多模型的异同。



解：相同之处：(1)  $V(\vec{r}) = \text{const}$  (可假设为零)

(2) 碰撞图象

(3) 在晶体边界均碰撞(散射)

(4) 满足周期边界条件。

不同之处：索末菲模型 (1) 求解 S-方程，而不是牛顿方程；

(2) 足费米-狄拉克分布，而不是经典的玻氏分布；

(3) 满足泡利不相容原理。

#### 6 6. 费米分布函数的表示式和物理意义是什么？

解：若能量为 E 的状态是电子可以占据的状态，则在热平衡条件下，电子占据该状态的几率：

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{(E-E_f)/k_B T} + 1} \quad \text{式中 } E_f \text{ 称为费米能级, } E=E_f \text{ 时, } f=\frac{1}{2} \text{ 所以 } E_f \text{ 是标志电子在能级}$$

上填充水平的重要参量。

#### 6 7. 为什么温度升高，费密能反而降低？

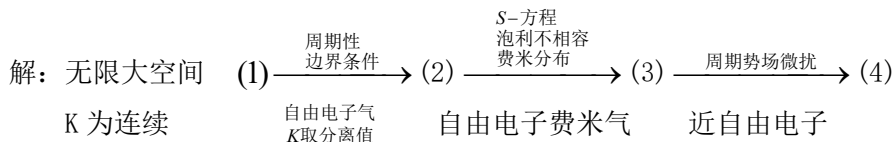
答：当  $T \neq 0$  时，有一半量子态被电子所占据的能级即是费密能级。温度升高，费密面附近的电子从格波获取的能量就越大，跃迁到费密面以外的电子就越多，原来有一半量子态被电子所占据的能级上的电子就少于一半，有一半量子态被电子所占据的能级必定降低。也就是说，温度升高，费密能反而降低。

#### 6 8. 电子密度分布的意义是什么？

解：温度 T 时，能量 E 附近单位能量间隔的电子数。

$$\rho(E, T) = D(E) f(E, T) \quad \text{系统中电子总数 } N = \int_0^{\infty} D(E) f(E, T) dE$$

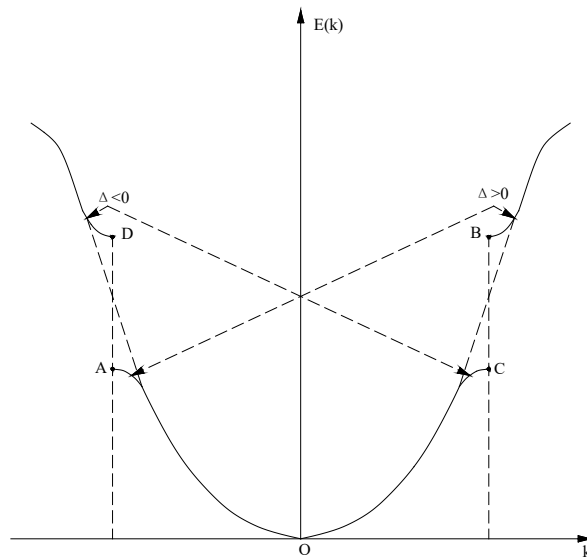
#### 6 9. 简述无限大真空自由电子，晶体中特鲁多模型，索末菲模型，近自由电子模型的关系。



#### 7 0. 禁带形成的原因如何？您能否用一物理图像来描述？

解：对于在倒格矢  $\mathbf{K}_s$  中垂面及其附近的波矢  $\mathbf{k}$ ，即布里渊区界面附近的波矢  $\mathbf{k}$ ，由于采用简并微扰计算，致使能级间产生排斥作用，从而使  $E(\mathbf{k})$  函数在布里渊区界面处“断开”，即发生突变，从而产生了禁带。

可以用下面的图来描述禁带形成的原因：



### 7 1. 近自由电子模型与紧束缚模型各有何特点？它们有相同之处？

解：所谓近自由电子模型就是认为电子接近于自由电子状态的情况，而紧束缚模型则认为电子在一个原子附近时，将主要受到该原子场的作用，把其它原子场的作用看成微扰作用。这两种模型的相同之处是：选取一个适当的具有正交性和完备性的布洛赫波形式的函数集，然后将电子的波函数在所选取的函数集中展开，其展开式中有一组特定的展开系数，将展开后的电子的波函数代入薛定谔方程，利用函数集中各基函数间的正交性，可以得到一组各展开系数满足的久期方程。这个久期方程组是一组齐次方程组，由齐次方程组有解条件可求出电子能量的本征值，由此便揭示出了系统中电子的能带结构。

7 2. 接近自由电子模型能求解哪些问题，近自由电子近似的零级近似如何取？它主要能计算哪些物理量？

解：答：零级近似为无限大真空中自由电子，故它适用于金属中的价电子，利用 N.F.E 模型主要可计算禁带宽度。

7 3. 按紧束缚模型能求解哪些问题，紧束缚近似的零级近似如何取？它主要能计算哪些物理量？

解：答：为孤立原子中的电子状态的组合，故它主要适用于绝缘体，主要可计算 S 带的能带宽度。

7 4. 布洛赫电子的费米面与哪些因素有关？确定费米面有何重要性？

解：布洛赫电子的费米面与晶体的种类及其电子数目有关。由于晶体的很多物理过程主要是由费米面附近的电子行为决定的，如导电、导热等，所以确定费米面对研究晶体的物理性质及预测晶体的物理行为都有很重要的作用。

7 5. 存在外电场  $\vec{E}$  时，讨论晶体中电子的运输的基本思路是怎样的？为什么未采用解薛定格方程的方法？

解：目前量子力学擅长求解定态 S-方程，即能量 E 为确定值。在有外场存在时，晶体中电子受到外场作用，能量 E 是变化的，不是定态问题，而非定态 S-方程不易求解。所以只得回到牛顿力学框架中来，而牛顿方程  $\vec{F} = m\vec{a}$ ，特长就是求解有外力作用的问题，但  $\vec{F}$  应为物体受到的合外力，而晶体中电子受到的合外力  $\vec{F} = \vec{F}_{\text{外}} + \vec{F}_l$ ， $\vec{F}_l$  表示晶格场力，但  $\vec{F}_l$  不易测量，把  $\vec{F}_l$  的影响归入电子的有效质量张量  $\vec{m}^{-1}$ ，引入  $\vec{m}$  后，Bloch 电子在外场作用下，运动

规律形式上遵守牛顿方程，只是把  $m$  用  $\vec{m}^*$  代替。

$$\vec{v} = \vec{m}^*{}^{-1} \cdot \vec{F}_{\text{外}} \quad \text{在此基础，求解晶体中的电流等问题。}$$

7 6. Bloch 电子的运动速度如何表示？

解：  $\vec{v}_n(\vec{K}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{K}} E_n(\vec{K})$  式中下标  $n$  为能带指数，即 Bloch 电子的运动速度和  $\vec{K}$  空

间能量梯度成正比，方向在等能面法线方向。当等能面为球形时电子的运动速度与波矢的方向相同，当等能面不是球形时电子的运动速度与波矢的方向一般不相同。

7 7. 什么是 Bloch 电子的准动量，为什么称之为“准”动量？

解：  $\hbar\vec{K}$  称为 Bloch 电子的准动量，因为  $\vec{F}_{\text{外}} = \hbar\vec{K}$ ，而  $\hbar\vec{K}$  为自由电子的动量，又与牛顿定律  $\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt}$  比较，形式类似， $\hbar\vec{K}$  具有动量的量纲，但牛顿定律  $\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt}$  中的  $\vec{F}$  为物体受到的合外力。而 Bloch 电子还受到晶格场力  $\vec{F}_l$  的作用并未反映在  $\hbar\vec{K}$  中，所以， $\hbar\vec{K}$  并未完全表示 Bloch 电子的动量。所以称  $\hbar\vec{K}$  为 Bloch 电子的准动量。

另外，可证明， $\hbar\vec{K}$  不是 Bloch 电子动量算符的本征值，故它不是真实动量，且  $[\hat{H}, \hat{P}] \neq 0$  (二算符不对易)，故 Bloch 电子没有确定的动量。

7 8. 试述晶体中的电子作准经典运动的条件和准经典运动的基本公式。

解：在实际问题中，只有当波包的尺寸远大于原胞的尺寸，才能把晶体中的电子看做准经典粒子。

准经典运动的基本公式有：

晶体电子的准动量为

$$\vec{p} = \hbar\vec{k};$$

晶体电子的速度为

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k});$$

晶体电子受到的外力为

$$\vec{F} = \frac{\hbar d\vec{k}}{dt}$$

晶体电子的倒有效质量张量为

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}};$$

在外加电磁场作用下，晶体电子的状态变化满足：

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{k}}{dt} &= -\frac{e}{\hbar} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \\ \frac{d\vec{v}}{dt} &= -\frac{e}{m^*} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \end{aligned}$$

7 9. 简述 Bloch 电子的有效质量的重要特征。

解：  $\vec{m}^*$  为二阶张量，矩阵表示有九个分量，其值与波矢  $\vec{K}$ 、能带结构有关。

当等能面为球面时  $\vec{m}^*$  才为标量  $m^*$ 。  $m^* = \hbar^2 / \frac{d^2 E}{dk^2}$  与能带结构  $K$  有关。

引入有效质量  $\vec{m}^*$  后  $\vec{v} = \vec{m}^*{}^{-1} \cdot \vec{F}_{\text{外}}$  与牛顿定律  $\vec{F} m^{-1} = \vec{v}$  形式上一致，把不易测量的  $\vec{F}_l$  并入  $\vec{m}^*$  中，而  $\vec{m}^*$  又可由能带结构求出。一般情况下  $\vec{m}^*$  中的其中三个分量  $m_{xx}^* \neq m_{yy}^* \neq m_{zz}^*$ ，则使得 Bloch 电子的加速度与外力方向不一致。

8 0. 什么是 Bloch 电子费米气？

解：把质量视为有效质量  $m^*$ ，除碰撞外相互间无相互作用，遵守费米分布的 Bloch 电子的集合称为 Bloch 电子费米气。它与索末菲模型的自由电子费米气的区别在于把晶格场力的影响归入  $m^*$ ，但又保留了碰撞模型。

### 8 1. 试述有效质量、空穴的意义。引入它们有何用处？

解：有效质量实际上是包含了晶体周期势场作用的电子质量，它的引入使得晶体中电子准经典运动的加速度与外力直接联系起来了，就像经典力学中牛顿第二定律一样，这样便于我们处理外力作用下晶体电子的动力学问题。

当满带顶附近有空状态  $k$  时，整个能带中的电流，以及电流在外电磁场作用下的变化，完全如同存在一个带正电荷  $q$  和具有正质量  $m^+$ 、速度  $v(k)$  的粒子的情况一样，这样一个假想的粒子称为空穴。空穴的引入使得满带顶附近缺少一些电子的问题和导带底有少数电子的问题十分相似，给我们研究半导体和某些金属的导电性能带来了很大的方便。

### 8 2. 试述导体、半导体和绝缘体能带结构的基本特征。

解：在导体中，除去完全充满的一系列能带外，还有只是部分地被电子填充的能带，后者可以起导电作用，称为导带。

在半导体中，由于存在一定的杂质，或由于热激发使导带中存有少数电子，或满带中缺少少数电子，从而导致一定的导电性。

在绝缘体中，电子恰好填满了最低的一系列能带，再高的各带全部都是空的，由于满带不产生电流，所以尽管存在很多电子，并不导电。

### 8 3. 半导体和半金属有何异同？

解：相同处：T≠0 时，从电导率上讲无差别，不同处：从能带结构上讲 半金属(ex: Bi)与金属类似，T=0 时，导带几乎全空，价带几乎全满。半导体与绝缘体类似，T=0 时，导带全空，价带全满，仅为禁带  $E_g$  小些而已。

### 8 4. 晶体电阻的起因是什么？

解：广义缺陷与 Bloch 电子的相互作用，即声子、杂质、缺陷对载流子的散射。

## 六、计算及证明题

1. 设某晶体每对原子的势能具  $\frac{A}{r^9} - \frac{B}{r}$  的形式，平衡时  $r_0 = 2.8 \times 10^{-10} m$ ，结合能为  $U = 8 \times 10^{-19} J$ ，试计算 A 和 B 以及晶体的有效弹性模量。

解：由题意有以下方程成立：

$$\begin{cases} \frac{A}{r_0^9} - \frac{B}{r_0} = -U \\ \left( \frac{du}{dr} \right)_{r_0} = -\frac{9A}{r_0^{10}} + \frac{B}{r_0^2} = 0 \end{cases}$$

把  $r_0$ ， $U$  的具体数值代入上述方程组，即得：

$$\begin{cases} \frac{A}{(2.8 \times 10^{-10})^9} - \frac{B}{2.8 \times 10^{-10}} = -8 \times 10^{-19} \\ -\frac{9A}{(2.8 \times 10^{-10})^{10}} + \frac{B}{(2.8 \times 10^{-10})^2} = 0 \end{cases}$$

由此可得：  $A = 1.0578 \times 10^{-105} J \cdot m^9$ ，  $B = 2.52 \times 10^{-28} J \cdot m$

该晶体的有效弹性模量为：

$$K = V_0 \left( \frac{d^2 u}{dr^2} \right)_{r_0}$$

又：

$$V = Nv = N\beta^3$$

（上式中  $N$  表示晶体中所含的原子个数， $\beta$  表示与晶体结构有关的因子）

故

$$K = \frac{1}{9\beta N r_0} \left( \frac{d^2 u}{dr^2} \right)_{r_0} = \frac{1}{9\beta N r_0} \left( \frac{90A}{r_0^{11}} - \frac{2B}{r_0^3} \right) = \frac{1}{9\beta N} \times 3.2797 \times 10^{11}$$

2. 试证明体心立方格子和面心立方格子互为正倒格子。

解：我们知体心立方格子的基矢为：

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k}) \end{cases}$$

根据倒格子基矢的定义，我们很容易可求出体心立方格子的倒格子基矢为：

$$\begin{cases} \mathbf{b}_1 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{\Omega} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{j} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{\Omega} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i} + \mathbf{k}) \\ \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{\Omega} = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i} + \mathbf{j}) \end{cases}$$

由此可知，体心立方格子的倒格子为一面心立方格子。同理可得出面心立方格子的倒格子为一体心立方格子，所以体心立方格子和面心立方格子互为正倒格子。

3. 已知由  $N$  个相同原子组成的一维单原子晶格格波的态密度可表示为

$$\rho(\omega) = \frac{2N}{\pi} (\omega_m^2 - \omega^2)^{-\frac{1}{2}}$$

式中  $\omega_m$  是格波的最高频率。求证它的振动模总数恰好等于  $N$ 。

解：由题意可知该晶格的振动模总数为

$$\begin{aligned} N &= \int_0^{\omega_m} \rho(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_m} \frac{2N(\omega_m^2 - \omega^2)^{-\frac{1}{2}}}{\pi} d\omega \\ &= \frac{2N}{\pi} \arcsin \frac{\omega}{\omega_m} \Big|_0^{\omega_m} = \frac{2N}{\pi} \left( \frac{\pi}{2} - 0 \right) = N \end{aligned}$$

4. 设某离子晶体离子间的相互作用势能为

$$u(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^2}$$

式中  $B$  为待定常数； $r$  为近邻原子间距。求该晶体的线膨胀系数。已知近邻原子的平均距离为  $3 \times 10^{-10} \text{ m}$ 。

解：由平衡条件  $\left. \frac{du(r)}{dr} \right|_{r_0} = 0$ ，可得

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} - \frac{2B}{r_0^3} = 0 \quad \text{由此可得} \quad B = \frac{e^2 r_0}{8\pi\epsilon_0}$$

于是可求得

$$C = \frac{1}{2!} \left( \frac{d^2 u(r)}{dr^2} \right)_{r_0} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_0^3}, \quad g = -\frac{1}{3!} \left( \frac{d^3 u(r)}{dr^3} \right)_{r_0} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^4}$$

那么线膨胀系数为

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{r_0} \frac{d\bar{\delta}}{dT} = \frac{3}{4} \frac{gk_B}{C^2 r_0} = \frac{12\pi\epsilon_0 k_B r_0}{e^2} \\ &= \frac{12 \times 3.14 \times 8.854 \times 10^{-12} \times 1.381 \times 10^{-23} \times 3 \times 10^{-10}}{(1.6 \times 10^{-19})^2} \\ &= 5.4 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1} \end{aligned}$$

5. 金属锂是体心立方晶格，晶格常数为  $a = 3.5 \times 10^{-10} \text{ m}$ 。试计算绝对零度时电子气的费米能量  $E_F^0$ （以 eV 表示）

解：由题意可求得金属锂的电子浓度为

$$n = \frac{2}{a^3} = \frac{2}{(3.5 \times 10^{-10})^3} = 4.66 \times 10^{28} / \text{m}^3$$

故绝对零度时金属锂的电子气的费米能量为

$$E_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m} (3n\pi^2)^{\frac{2}{3}}$$

$$= \frac{(1.055 \times 10^{-34})^2}{2 \times 9.11 \times 10^{-31}} \times (3 \times 4.66 \times 10^{28} \times 3.14^2)^{\frac{2}{3}}$$

$$= 7.57 \times 10^{-19} \text{ J} = 4.72 \text{ eV}$$

6. 室温下利用光电效应已测得银及铯的光电效应阈值分别为4.8eV和1.8eV。求：
- (1) 采用里查孙-杜师曼公式分别估算银及铯在室温下的热电子发射电流密度；
  - (2) 若温度上升至800K时，其热电子发射电流密度为多少？
  - (3) 若把银与铯两种金属接触在一起，求出室温下它们的接触电势差。

解：(1) 在室温下银的热电子发射电流密度为

$$j = A_{Ag} T^2 e^{-W_{Ag}/(k_B T)}$$

$$= 1.2 \times 10^6 \times 298^2 e^{-4.8 \times 1.6 \times 10^{-19} / (1.38 \times 10^{-23} \times 298)}$$

$$= 8.36 \times 10^{-71} \text{ A/m}^2$$

在室温下铯的热电子发射电流密度为

$$j = A_{Cs} T^2 e^{-W_{Cs}/(k_B T)}$$

$$= 1.6 \times 10^6 \times 298^2 e^{-1.8 \times 1.6 \times 10^{-19} / (1.38 \times 10^{-23} \times 298)}$$

$$= 5.47 \times 10^{-20} \text{ A/m}^2$$

- (2) 在800K时银的热电子发射电流密度为

$$j = A_{Ag} T^2 e^{-W_{Ag}/(k_B T)}$$

$$= 1.2 \times 10^6 \times 800^2 e^{-4.8 \times 1.6 \times 10^{-19} / (1.38 \times 10^{-23} \times 800)}$$

$$= 4.72 \times 10^{-19} \text{ A/m}^2$$

在室温下铯的热电子发射电流密度为

$$j = A_{Cs} T^2 e^{-W_{Cs}/(k_B T)}$$

$$= 1.6 \times 10^6 \times 800^2 e^{-1.8 \times 1.6 \times 10^{-19} / (1.38 \times 10^{-23} \times 800)}$$

$$= 4.80 \text{ A/m}^2$$

- (3) 若把银与铯两种金属接触在一起，它们的接触电势差为

$$V_D = \frac{1}{e} (W_{Ag} - W_{Cs}) = 3 \text{ V}$$

7. 一维周期场中电子的波函数 $\psi_k(x)$ 应当满足布洛赫定理。若晶格常数为 $a$ ，电子的波函数为

- (1)  $\psi_k(x) = \sin \frac{\pi}{a} x$ ;
- (2)  $\psi_k(x) = i \cos \frac{3\pi}{a} x$ ;
- (3)  $\psi_k(x) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} f(x - ia)$  (其中 $f$ 为某个确定的函数)。

试求电子在这些状态的波矢。

解：布洛赫函数可写成 $\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$ ，其中， $u_k(x+a) = u_k(x)$ 或写成 $\psi_k(x+a) = e^{ika} \psi_k(x)$

$$(1) \quad \psi_k(x+a) = \sin \frac{x+a}{a} \pi = -\sin \frac{x}{a} \pi = -\psi_k(x)$$

$$\text{故} \quad e^{ika} = -1 \quad k = \frac{\pi}{a}$$

$$\psi_k(x) = e^{i\frac{\pi}{a}x} \left[ e^{-i\frac{\pi}{a}x} \sin \frac{\pi}{a} x \right] = e^{i\frac{\pi}{a}x} u_k(x)$$

显然有  $u_k(x+a) = u_k(x)$

故 $\psi_k(x) = \sin \frac{\pi}{a} x$ 的波矢是 $\frac{\pi}{a}$ 。

$$(2) \quad \psi_k(x+a) = i \cos \frac{3(x+a)}{a} \pi = -i \cos \frac{3x}{a} \pi = -\psi_k(x)$$

$$\text{所以} \quad e^{ika} = -1 \quad k = \frac{\pi}{a}$$

$$\psi_k(x) = e^{i\frac{\pi}{a}x} \left[ e^{-i\frac{\pi}{a}x} i \cos \frac{3x}{a} \pi \right] = e^{i\frac{\pi}{a}x} u_k(x)$$

显然有  $u_k(x+a) = u_k(x)$

故 $\psi_k(x) = i \cos \frac{3\pi}{a} x$ 的波矢是 $\frac{\pi}{a}$ 。



$$(3) \quad \psi_k(x+a) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} f(x+a-ia) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} f[x-(i-1)a] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f(x-ma) = \psi_k(x)$$

$$\text{故} \quad e^{ika} = 1 \quad k = 0$$

$$\psi_k(x) = e^{i0x} \left[ \sum_{i=-\infty}^{\infty} f(x-ia) \right] = e^{i0x} u_k(x)$$

故  $\psi_k(x) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} f(x-ia)$  的波矢为0。

要说明的是，上述所确定的波矢  $k$  并不是唯一的，这些  $k$  值加上任一倒格矢都是所需的解。因为  $k$  空间中相差任一倒格矢的两个  $k$  值所描述的状态是一样的。

8. 已知电子在周期场中的势能为

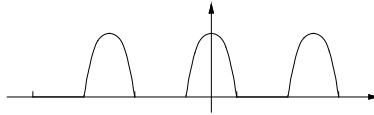
$$\begin{cases} U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 [b^2 - (x-na)^2], & \text{当 } na-b \leq x \leq na+b \text{ 时} \\ U(x) = 0, & \text{当 } (n-1)a+b \leq x \leq na-b \text{ 时} \end{cases}$$

其中：  $a = 4b$ ，  $\omega$  为常数。

(1) 画出势能曲线，并求出其平均值；

(2) 用近自由电子模型求出此晶体的第1及第2个禁带宽度。

解：(1) 该周期场的势能曲线如下所示：



其势能平均值为：

$$\bar{U} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} U(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx} = \frac{\int_{-3b}^b U(x) dx}{\int_{-3b}^b dx} = \frac{\int_{-3b}^b \frac{1}{2} m \omega^2 (b^2 - x^2) dx}{4b} = \frac{1}{6} m \omega^2 b^2$$

(2) 根据近自由电子模型，此晶体的第1及第2个禁带宽度为

$$\Delta E_1 = 2|U_1| \quad \Delta E_2 = 2|U_2|$$

其中  $U_1$  和  $U_2$  表示周期场  $U(x)$  的展开成傅立叶级数的第一和第二个傅立叶系数。

于是有

$$U_1 = \frac{1}{4b} \int_{-3b}^b e^{-i2\pi \frac{1}{4b} \xi} U(\xi) d\xi = \frac{1}{4b} \int_{-b}^b e^{-i2\pi \frac{1}{4b} \xi} \frac{1}{2} m \omega^2 (b^2 - \xi^2) d\xi = \frac{4m\omega^2 b^2}{\pi^3}$$

$$U_2 = \frac{1}{4b} \int_{-3b}^b e^{-i2\pi \frac{2}{4b} \xi} U(\xi) d\xi = \frac{1}{4b} \int_{-b}^b e^{-i2\pi \frac{2}{4b} \xi} \frac{1}{2} m \omega^2 (b^2 - \xi^2) d\xi = \frac{m\omega^2 b^2}{2\pi^2}$$

故此晶体的第1及第2个禁带宽度为

$$\Delta E_1 = 2|U_1| = \frac{8m\omega^2 b^2}{\pi^3} \quad \Delta E_2 = 2|U_2| = \frac{m\omega^2 b^2}{\pi^2}$$

9. 求出长为  $L$  的一维金属中自由电子的能态密度？

[解 答]

一维情况下自由电子的色散关系为：

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

由此得：

$$dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk = \left( \frac{2\hbar^2}{m} \right)^{1/2} E^{1/2} dk,$$

则:

$$dk = \left( \frac{m}{2\hbar^2} \right)^{1/2} E^{-1/2} dE.$$

对应同一个  $dE$ , 在  $\pm k$  方向各有一个  $dE$ , 因此  $k$  空间中  $E$  与  $E + dE$  之间的  $k$  区间为:

$$d\tau = 2dk = \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} E^{-1/2} dE.$$

在该范围内的状态数为:

$$dZ = \frac{L}{\pi} d\tau = \frac{L}{\pi} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} E^{-1/2} dE,$$

其中  $L$  是晶格长度。于是, 态密度

$$N(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{L}{\pi} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} E^{-1/2}.$$

10. 已知一维晶体的电子能带可写成:

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

式中  $a$  是晶格常数。试求

- (1) 能带的宽度;
- (2) 电子在波矢  $k$  的状态时的速度;
- (3) 能带底部和顶部电子的有效质量。

解: (1) 在能带底  $k=0$  处, 电子能量为

$$E(0) = 0$$

在能带顶  $k = \frac{\pi}{a}$  处, 电子能量为

$$E\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$$

故能带宽度为  $\Delta E = E\left(\frac{\pi}{a}\right) - E(0) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

(2) 电子在波矢  $k$  的状态时的速度为

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar}{ma} \left( \sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka \right)$$

(3) 电子的有效质量为

$$m^* = \hbar^2 / \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{m}{\cos ka - \frac{1}{2} \cos 2ka}$$

于是有在能带底部电子的有效质量为  $m_1^* = 2m$

在能带顶部电子的有效质量为  $m_2^* = -\frac{2}{3}m$