固体物理习题参考答案

1. 尝试用 Drude 模型推导焦耳定律

$$W = RI^2$$

解：记电子在两次碰撞之间经过的距离为 l, 导体横截面为 S, 总电子数为 N, 则

$$R = \frac{l}{\sigma S}, \qquad I = jS.$$

在 Drude 模型中

$$j = -env,$$

结合 $j = \sigma E$ 得到： $j^2 = -env\sigma E$, 因此

$$nEv = -\frac{j^2}{\sigma e}.$$

因此，

$$W = NFv = -nSleEv = Sle\frac{j^2}{\sigma e} = Sl\frac{j^2}{\sigma} = RI^2$$

此即焦耳定律。

2. 用无限深势阱代替周期性边界条件，即在边界处有无限高势垒，试确定：

(1) 波矢 $\boldsymbol{k}$ 的取值和 $\boldsymbol{k}$ 空间状态密度

(2) 能量空间状态密度

(3) 零温度时的费米能级和电子气总能

(4) 电子出现在空间任何一点的几率

(5) 平均动量

(6) 问：由上面这些结果，无限深势阱边界条件与周期性边界条件的解有什么不同？两种边界条件的解的根本差别在哪里？用哪个边界条件更符合实际情况？更合理？为什么？

解：(1) 容易得到无限深势阱内波函数的形式为

$$\psi(x,y,z) = A\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z)$$

其中,

$$k_i = \frac{n_i\pi}{L}, \quad i = x,y,z; \quad n_i = \pm1, \pm2, \pm3, \cdots$$

由边界条件给出。归一化波函数得到

$$A = \sqrt{\frac{8}{L^3}} = \sqrt{\frac{8}{V}}.$$

由于每个状态在 $\boldsymbol{k}$ 空间所占的体积为 $\Delta\mathbf{k}=\pi^3/V$, 所以 $\boldsymbol{k}$ 空间状态密度为

$$\frac{1}{\Delta\mathbf{k}}=\frac{V}{\pi^3}.$$

(2) 能量 E 到 $E+\mathrm{d}E$ 之间的状态数为

$$\mathrm{d}N=2\times\frac{V}{\pi^3}4\pi k^2\mathrm{d}k$$

而

$$\mathrm{d}E=\frac{\hbar^2}{2m}2k\mathrm{d}k\ \rightarrow\ \mathrm{d}k=\left(\frac{m}{2\ \hbar^2}\right)^{1/2}\frac{1}{\sqrt{E}}\mathrm{d}E$$

所以

$$\mathrm{d}N=\frac{4V}{\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E}\mathrm{d}E.$$

能量空间状态密度为

$$D(E)=\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E}=\frac{4V}{\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E}.$$

(3) 状态密度积分得到电子总数

$$\int_0^{E_{\mathrm{F}}^0}\frac{4V}{\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E}\mathrm{d}E=N.$$

所以费米能级可表示为

$$E_{\mathrm{F}}^0=\frac{\hbar^2}{8m}(3\pi^2n)^{2/3},$$

其中 $n=N/V$。因此系统总能量为

$$\int_0^{E_{\mathrm{F}}^0}\frac{4V}{\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}E\sqrt{E}\mathrm{d}E=\frac{3}{5}E_{\mathrm{F}}^0N.$$

(4) 电子出现在空间任意一点的几率为

$$|\psi(x,y,z)|^2=\frac{8}{V}\sin^2(k_xx)\sin^2(k_yy)\sin^2(k_zz).$$

(5) 电子 x 方向的平均动量为（y,z 方向类似）

$$<\mathbf{p}_x>=\int_0^L\int_0^L\int_0^L\psi\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi}{\partial x}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=\sqrt{\frac{2}{L}}\frac{n_x\pi\hbar}{\mathrm{i}}\int_0^L\sin\frac{\pi n_xx}{L}\cos\frac{\pi n_xx}{L}\mathrm{d}x=0.$$

(6) 讨论

驻波解：

（a）驻波解不是动量算符的本征解。因此，尽管电子是运动的，但其平均动量为零

（b）电子在势垒反射下，来回往复运动，波函数迭加形成驻波，空间分布不是常数，有起伏

行波解：

（a）平面波解又称行波解，是动量算符的本征解，电子有确定的动量和速度

（b）平面波解在空间各点出现的几率一样，空间分布是常数

（c）平面波解符合自由电子气体的性质

（d）循环边界条件是无限体系的数学处理，与晶体周期性无关

3. 求低温一维、二维电子气体的费米能级和电子气体平均能量，并与零温度的结果进行比较。

解：(1) 一维时，

$$\mathrm{d}N = 2 \times \frac{L}{2\pi} \times 2\mathrm{d}k$$

其中第一个 2 表示电子自旋简并，第二个 2 表示一维 $\pm\boldsymbol{k}$ 对称简并。根据

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ \rightarrow \ k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \ \rightarrow \ \mathrm{d}k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\mathrm{d}E,$$

得到能量空间状态密度为

$$D(E) = \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E} = \frac{L}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{1}{\sqrt{E}} = C_{1D}\frac{1}{\sqrt{E}}.$$

利用 Sommerfeld 积分

$$I = Q(E_\mathrm{F}) + \frac{\pi^2}{6}Q''(E_\mathrm{F})(k_\mathrm{B}T)^2,$$

对于电子总数

$$Q(E) = \int_0^E D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = 2C_{1D}\sqrt{E},\ Q''(E) = -\frac{1}{2}C_{1D}E^{-3/2},$$

因此 $(k_\mathrm{B}T \ll E_\mathrm{F})$,

$$N = 2C_{1D}\sqrt{E_\mathrm{F}}\left[1 - \frac{\pi^2}{24}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{E_\mathrm{F}}\right)^2\right] \ \rightarrow \ 2C_{1D}\sqrt{E_\mathrm{F}^0} = 2C_{1D}\sqrt{E_\mathrm{F}}\left[1 - \frac{\pi^2}{24}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{E_\mathrm{F}}\right)^2\right]$$

$$\rightarrow \ E_\mathrm{F}^0 = E_\mathrm{F}\left[1 - \frac{\pi^2}{24}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{E_\mathrm{F}}\right)^2\right]^2 \approx E_\mathrm{F}\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{E_\mathrm{F}}\right)^2\right] \ \rightarrow \ E_\mathrm{F}^2 - E_\mathrm{F}E_\mathrm{F}^0 - \frac{\pi^2}{12}(k_\mathrm{B}T)^2 = 0.$$

解上面的一元二次方程得到低温时的费米能级

$$E_\mathrm{F} \approx E_\mathrm{F}^0\left[1 + \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{E_\mathrm{F}^0}\right)^2\right].$$

对于系统总能量

$$Q(E)=\int_0^E D(\varepsilon)\varepsilon\mathrm{d}\varepsilon=\frac{2}{3}C_{1D}E^{3/2},\ Q''(E)=\frac{1}{2}C_{1D}E^{-1/2}.$$

因此，

$$\begin{aligned}U&=\frac{2}{3}C_{1D}E_{\mathrm{F}}^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}}\right)^2\right]=\frac{2}{3}C_{1D}(E_{\mathrm{F}}^0)^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}^0}\right)^2\right]^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}^0}\right)^2\right]\\&=\frac{2}{3}C_{1D}(E_{\mathrm{F}}^0)^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}^0}\right)^2\right]\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}^0}\right)^2\right]=\frac{2}{3}C_{1D}(E_{\mathrm{F}}^0)^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{4}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}^0}\right)^2\right].\end{aligned}$$

所以电子的平均能量为

$$\frac{U}{N}=\frac{1}{3}E_{\mathrm{F}}^0\left[1+\frac{\pi^2}{4}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}^0}\right)^2\right].$$

(2) 二维时，

$$\mathrm{d}N=2\times\frac{A}{(2\pi)^2}2\pi k\mathrm{d}k,$$

能量空间状态密度为

$$D(E)=\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E}=\frac{Am}{\pi\hbar^2}=C_{2D}.$$

利用 Sommerfeld 积分，对于电子总数

$$Q(E)=\int_0^E D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon=C_{2D}E,\ Q''(E)=0\ \rightarrow\ N=C_{2D}E_{\mathrm{F}},\ E_{\mathrm{F}}=E_{\mathrm{F}}^0.$$

对于系统总能量，

$$Q(E)=\int_0^E D(\varepsilon)\varepsilon\mathrm{d}\varepsilon=\frac{1}{2}C_{2D}E^2,\ Q''(E)=C_{2D}\ \rightarrow\ U=\frac{1}{2}C_{2D}(E_{\mathrm{F}}^0)^2\left[1+\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}^0}\right)^2\right]$$

所以电子的平均能量为

$$\frac{U}{N}=\frac{1}{2}E_{\mathrm{F}}^0\left[1+\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{E_{\mathrm{F}}^0}\right)^2\right].$$