固体物理习题参考答案

20. (书中 4.1 题) 设有一维晶体电子能带可以写成

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

其中 a 是晶格常数。试求：

(a) 能带宽度；

(b) 电子在波矢 k 状态时的速度；

(c) 能带底部和顶部电子的有效质量。

解：(a)

$$\begin{aligned}
E(k) &= \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8}\cos 2ka\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{ma^2}\left[\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8}(2\cos^2 ka - 1)\right] \\
&= \frac{\hbar^2}{4ma^2}(3 - 4\cos ka + \cos^2 ka) \\
&= \frac{\hbar^2}{4ma^2}(\cos ka - 1)(\cos ka - 3)
\end{aligned}$$

能带底： $k = 0,\ E = 0$；能带顶： $k = \pi/a,\ E = 2\hbar^2/(ma^2)$. 所以能带宽度为：

$$\Delta E = \frac{2\hbar^2}{ma^2}.$$

(b) 电子的速度：

$$\begin{aligned}
v(k) &= \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}E(k)}{\mathrm{d}k} \\
&= \frac{\hbar}{ma}\left(\sin ka - \frac{1}{4}\sin 2ka\right)
\end{aligned}$$

(c) 电子的有效质量：

$$m^* = \hbar^2\left(\frac{\mathrm{d}^2E(k)}{\mathrm{d}k^2}\right)^{-1} = \frac{m}{\cos ka - (1/2)\cos 2ka}$$

能带底： $k = 0,\ m^* = 2m$；能带顶： $k = \pi/a,\ m^* = -(2/3)m.$

21. 原子排列成平面正六角形结构，六角形边长为 a，

* 画出前三个布里渊区；

* 如果每个原子有一个电子，在简约布里渊区画出费米圆；

* 如果每个原子有两个电子，在简约布里渊区画出费米圆；

* 如果费米圆恰是内接圆，求所对应的每个原子平均电子数；

* 计算它的结构因子，用近自由电子近似，讨论对能隙的影响，讨论对费米圆在布里渊区边界处形状的影响，即如何修饰布里渊区边界处的畸变。

解：原胞基矢和倒格子基矢分别为：

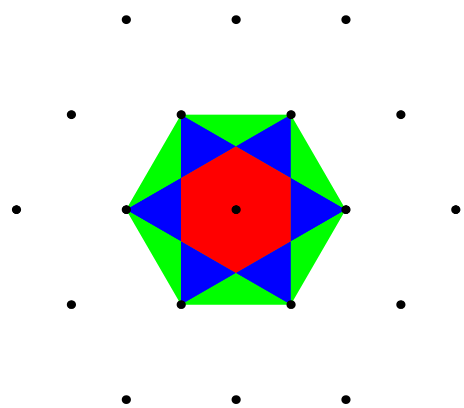
$$\vec{a}_1 = a\left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \vec{a}_2 = a\left(\frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right);$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{3}, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

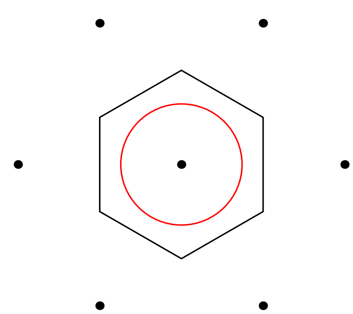
原胞内原子位矢为： $\vec{\tau}_1 = (0, 0)$, $\vec{\tau}_1 = (2/3)(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$. 原胞体积为：

$$A = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2.$$

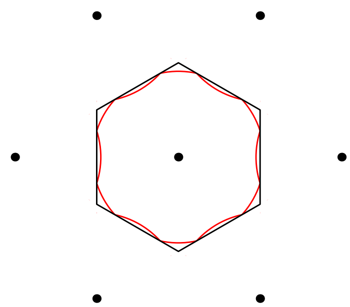
(1) 前三个布里渊区如图所示：其中，黑色圆点代表倒格点，红色区域为第一布里渊区，蓝色区域为第二布里渊区，绿色区域为第三布里渊区。



(2) 如果每个原子有一个电子，在简约布里渊区画出费米圆 (红色)



(3) 如果每个原子有两个电子，在简约布里渊区画出费米圆 (红色)



(4) 如果费米圆恰是内接圆，则有

$$k_{\mathrm{F}} = \frac{2\pi}{3a}, \quad 2 \times \pi k_{\mathrm{F}}^2 = N \times \frac{4\pi^2}{A}$$

所以 $N = \pi/\sqrt{3} \approx 1.814$，即所对应的每个原子平均电子数目约为 1.814。

(5)

$$S(G_h) = \sum_i f_i e^{\mathrm{i}G_h \tau_i} = f[1 + e^{\mathrm{i}2\pi \times \frac{2}{3}(h+k)}]$$

费米面在靠近布里渊区边界发生畸变，边界处不连续。靠近布里渊区边界时，费米面偏离圆而向外凸出；离开布里渊区边界时，费米面偏离圆而向内收缩；费米面与布里渊区边界正交。

22. 一晶体中电子的等能面是椭球面：

$$E(k)=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_1^2}{m_1}+\frac{k_2^2}{m_2}+\frac{k_3^2}{m_3}\right)$$

试求能量 E~E+dE 之间的状态数。

解答：

等能椭球面：$\dfrac{k_1^2}{2m_1E/\hbar^2}+\dfrac{k_2^2}{2m_2E/\hbar^2}+\dfrac{k_3^2}{2m_3E/\hbar^2}=1$

该椭球体积：$\Omega_k(E)=\dfrac{4\pi}{3}(\dfrac{2m_1E}{\hbar^2})^{\frac{1}{2}}(\dfrac{2m_2E}{\hbar^2})^{\frac{1}{2}}(\dfrac{2m_3E}{\hbar^2})^{\frac{1}{2}}=\dfrac{4\pi}{3}\dfrac{(8m_1m_2m_3)^{\frac{1}{2}}}{\hbar^3}E^{\frac{3}{2}}$

故：$d\Omega_k(E)=2\pi\dfrac{(8m_1m_2m_3)^{\frac{1}{2}}}{\hbar^3}E^{\frac{1}{2}}dE$

由此得到态密度：$D(E)=\dfrac{2V}{(2\pi)^3}d\Omega_k(E)/dE=\dfrac{V(8m_1m_2m_3)^{\frac{1}{2}}}{2\pi^2\hbar^3}E^{\frac{1}{2}}$