

固体物理习题参考答案

14. 一维周期性势场中电子的波函数应当满足 Bloch 定理。若晶格常数为 a ，电子的波函数为

$$\psi_k(x) = \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right),$$

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

$$\psi_k(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x - la);$$

试求电子在这些状态的波矢。

解：由 Bloch 定理，对于任意的 x ，总成立

$$\psi_k(x + a) = e^{ika} \psi_k(x).$$

(1)

$$\sin\left[\frac{\pi}{a}(x + a)\right] = -\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) = e^{ika} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right),$$

所以，波矢

$$k = \frac{(2n + 1)\pi}{a}, \quad n \in Z.$$

(2)

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

所以，波矢

$$k = \frac{(2n + 1)\pi}{a}, \quad n \in Z.$$

(3)

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} f[(x + a) - la] = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f[x - (l - 1)a] = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x - la) = e^{ika} \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x - la),$$

所以，波矢

$$k = \frac{2n\pi}{a}, \quad n \in Z.$$

固体物理习题参考答案

15. (书中 3.3 题) 对于单价原子构成的三维简单立方单原子晶体,

(a) 在空晶格近似下, 用简约布里渊区图式, 画出沿 $[100]$ 方向的前 4 个能带, 并标出每个能带的简并度

(b) 如果晶体受到均匀流体压强, 情况如何?

(c) 如果仅在 $[100]$ 方向受到单轴压力, 情况又如何?

* 提示: 如果是均匀压强, 可考虑 x, y, z 轴三个方向同时缩短一个小量; 如果仅受单轴应力, 则在该轴方向缩短一个小量。

解: (a) 空晶格模型:

$$E = (\mathbf{k} + \mathbf{K})^2 = (k_x + K_x)^2 + (k_y + K_y)^2 + (k_z + K_z)^2,$$

要求沿着 $[100]$ 方向的前 4 个能带, 所以 $k_x = 0 \sim \pi/a$, $k_y = k_z = 0$. 于是有:

$$E = (k_x + K_x)^2 + K_y^2 + K_z^2.$$

前四条能带为:

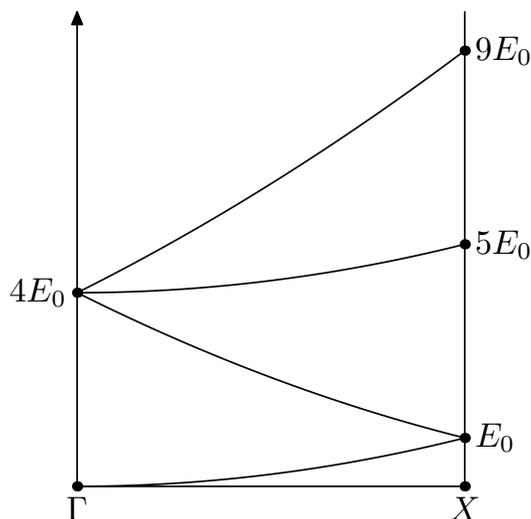
$\mathbf{K} = 0 \rightarrow E = k_x^2: E(\Gamma) = 0, E(X) = (\pi/a)^2 \equiv E_0$ 一重简并,

$\mathbf{K} = 2\pi/a(-1, 0, 0) \rightarrow E = (k_x - 2\pi/a)^2: E(\Gamma) = 4E_0, E(X) = E_0$ 一重简并,

$\mathbf{K} = 2\pi/a(0, \pm 1, 0)$ 或 $2\pi/a(0, 0, \pm 1) \rightarrow E = k_x^2 + (2\pi/a)^2: E(\Gamma) = 4E_0, E(X) = 5E_0$ 四重简并,

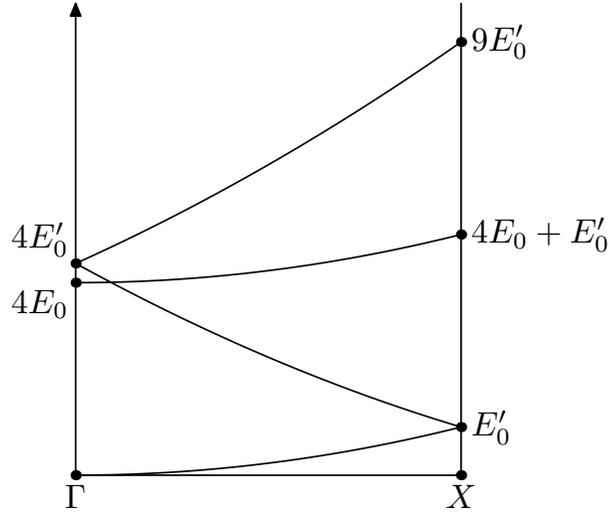
$\mathbf{K} = 2\pi/a(1, 0, 0) \rightarrow E = (k_x + 2\pi/a)^2: E(\Gamma) = 4E_0, E(X) = 9E_0$ 一重简并.

将这四条能带作图如下:



(b) 如果晶体受到均匀流体压强, 三个方向同时缩短一个小量, 相当于上面的计算中的晶格常数 a 变为 $a - \delta a$, 其结果只是导致能带图横坐标波矢标度变大到 $\pi/(a - \delta a)$, 纵坐标能量标度整体变大到 $[\pi/(a - \delta a)]^2$, 能带图整体形状基本不变。

(c) 如果仅在 $[100]$ 方向受到单轴压力，则 x 方向的晶格常数 a 变为 $a - \delta a$ ，而 y 和 z 方向的晶格常数保持为 a 。沿着 $[100]$ 方向的前 4 个能带的简并度没有变化，只是四条能带的相对位置有所变化，如下图：



其中， $E_0 = (\pi/a)^2$ ， $E'_0 = [\pi/(a - \delta a)]^2$ 。