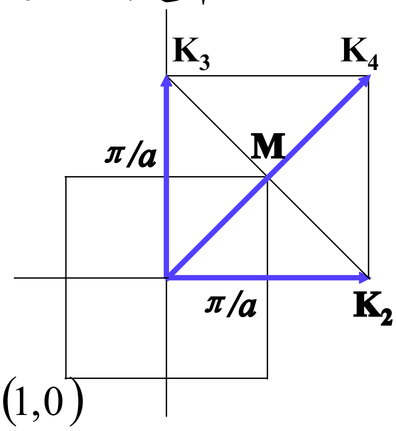
16. 设有二维正方晶格，其晶格势场

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

按弱周期性势场处理，求出布里渊区边界顶角处（π/**a**，π/**a**）的能隙宽度。这里**U**是常数。

解答



M点是三个边界面**(10), (01), (11)**的交点，自由电子的**4**度简并能量

$$\mathbf{K}_M = \frac{2\pi}{a}(0.5,0.5),\ \mathbf{K}_1 = 0,\ \mathbf{K}_2 = \frac{2\pi}{a}(1,0)$$

$$\mathbf{K}_3 = \frac{2\pi}{a}(0,1),\ \mathbf{K}_4 = \frac{2\pi}{a}(1,1)$$

$$E_i^0 = \frac{\hbar^2}{2m}[\mathbf{k} - \mathbf{K}_i]^2$$

$$E_1^0 = E_2^0 = E_3^0 = E_4^0 = \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{K}_M^2 = E^0$$

4个平面波为

$$\varphi_1 = e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_1)\bullet\mathbf{r}},\ \varphi_2 = e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_2)\bullet\mathbf{r}},\ \varphi_3 = e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_3)\bullet\mathbf{r}},\ \varphi_4 = e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_4)\bullet\mathbf{r}}$$

简并微扰，用它们组成尝试波函数

$$\psi = C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2 + C_3\varphi_3 + C_4\varphi_4$$

代入**Schroedinger**方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) - E\right)\psi = 0$$

分别用这**4**个平面波左乘后积分，即可得

$$\sum_{j=1}^{4}\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}-\mathbf{K}_i)^2 - E\,\delta_{ij} + V_{\mathbf{K}_j-\mathbf{K}_i}\right)C_j = 0$$

有解的条件是

$$\begin{pmatrix} E_1^0 - E & V_{\mathbf{K}_2-\mathbf{K}_1} & V_{\mathbf{K}_3-\mathbf{K}_1} & V_{\mathbf{K}_4-\mathbf{K}_1} \\ V_{\mathbf{K}_1-\mathbf{K}_2} & E_2^0 - E & V_{\mathbf{K}_3-\mathbf{K}_2} & V_{\mathbf{K}_4-\mathbf{K}_2} \\ V_{\mathbf{K}_1-\mathbf{K}_3} & V_{\mathbf{K}_2-\mathbf{K}_3} & E_3^0 - E & V_{\mathbf{K}_4-\mathbf{K}_3} \\ V_{\mathbf{K}_1-\mathbf{K}_4} & V_{\mathbf{K}_2-\mathbf{K}_4} & V_{\mathbf{K}_3-\mathbf{K}_4} & E_4^0 - E \end{pmatrix} = 0$$

其中势能的傅立叶分量 $V_{\mathbf{K}_j-\mathbf{K}_i} = \int V(x,y) e^{i(\mathbf{K}_j-\mathbf{K}_i)\bullet\mathbf{r}} d\mathbf{r}$

如果将**U(r)**展开，成

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= -4U \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \\ &= -U\left(e^{i\mathbf{b}_1\bullet\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{b}_1\bullet\mathbf{r}}\right)\left(e^{i\mathbf{b}_2\bullet\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{b}_2\bullet\mathbf{r}}\right) \\ &= -U\left(e^{i(\mathbf{b}_1+\mathbf{b}_2)\bullet\mathbf{r}} + e^{-i(\mathbf{b}_1+\mathbf{b}_2)\bullet\mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{b}_1-\mathbf{b}_2)\bullet\mathbf{r}} + e^{-i(\mathbf{b}_1-\mathbf{b}_2)\bullet\mathbf{r}}\right) \end{aligned}$$

那么，只有当$\mathbf{K_j}$-$\mathbf{K_i}$为如前的$\{\mathbf{b_1},\mathbf{b_2}\}$组合时，才不为零

$$\begin{pmatrix} E_1^0 - E & 0 & 0 & -U \\ 0 & E_2^0 - E & -U & 0 \\ 0 & -U & E_3^0 - E & 0 \\ -U & 0 & 0 & E_4^0 - E \end{pmatrix} = 0$$

这个**4X4**矩阵可以改写为两个**2X2**的对角矩阵，因为实际上零级能量是相同的，即简并

$$\begin{pmatrix} E^0 - E & -U \\ -U & E^0 - E \end{pmatrix} = 0$$

可解得 $E = E^0 \pm U$

简并分裂为$\mathbf{2}U$，**1~4**和**2~3**的简并被打开，但仍是俩两简并的

固体物理习题参考答案

17. (书中 3.4 题) 考虑晶格常数为 a 和 c 的简单六角晶体的第一布里渊区，令 G_c 为平行于晶格 c 轴的最短倒格矢。

(1) 证明六角密堆积结构，晶体势场 $V(r)$ 的傅立叶分量 $V(G_c)$ 为零；

(2) $V(2G_c)$ 是否也为零？

(3) 为什么二价原子构成的简单六角晶格在原则上有可能是绝缘体？

(4) 为什么不可能得到由单价原子六角密堆积形成的绝缘体？

解：(1) 对六角密堆积结构晶体，原胞内两个原子位矢（以基矢为基）为：

$$\tau_1 = (0,0,0), \quad \tau_2 = \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right).$$

所以有：

$$S(G_c) = \sum_i f_i e^{\mathrm{i}G_c\tau_i} = f[1 + e^{\mathrm{i}2\pi\frac{1}{2}}] = 0$$

故 $V(G_c) = 0$.

(2)

$$S(2G_c) = \sum_i f_i e^{\mathrm{i}2G_c\tau_i} = f[1 + e^{\mathrm{i}2\pi\times2\times\frac{1}{2}}] = 2f \neq 0$$

故 $V(2G_c) \neq 0$.

(3) 简单六角晶体：因为 1 个原胞只有 1 个原子，故 $V(G_c) \neq 0$, 简并被打开，有能隙。而二价原子的 2 个电子正好填满第一能带，故原则上是绝缘体。

六角密堆积结构：1 个原胞 2 原子，虽然 $V(G_c) = 0$，但是 $V(2G_c) \neq 0$，第二能带顶部简并被打开，有能隙。2 个二价原子 4 个电子填满第一、第二能带，原则上仍然是绝缘体。

(4) 因为对六角密堆积结构，原胞中 2 个单价原子共 2 个电子填满第一能带，第二能带是空的，但由于 $V(G_c) = 0$，中间无能隙，所以不是绝缘体。

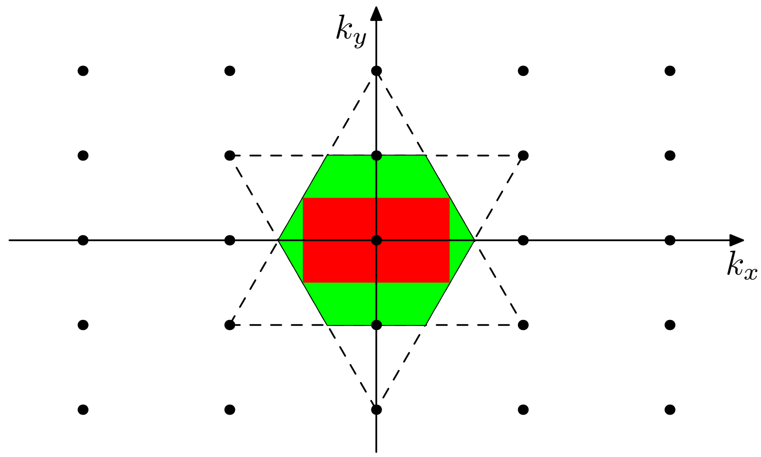
18. 设有二维矩形格子晶体，长、宽分别为 $a, \sqrt{3}a$。晶体的周期势为

$$V(x,y) = -2V_0\left(\cos\frac{2\pi}{a}x + \cos\frac{2\pi}{b}y\right).$$

(a) 画出第一、第二布里渊区；

(b) 以近自由电子近似模型求 $E(k_x,0)$ 的第一能带与 $E(0,k_y)$ 的第二能带交迭的条件。

解：(a) 二维矩形格子晶体，原胞基矢为： $a_1 = a(1,0)$, $a_2 = a(0,\sqrt{3})$. 倒格子基矢为： $b_1 = 2\pi/a(1,0)$, $b_2 = 2\pi/a(0,1/\sqrt{3})$.



第一（红色区域）、第二（绿色区域）布里渊区如图所示。

(b) 先考虑空晶格模型： $E(k_x,0)$ 的第一能带

$$E(k_x,0)=(k_x+K_x)^2+K_y^2,\quad \mathbf{K}=(0,0).$$

所以， $E(0,0)=0\quad E(\pi/a,0)=(\pi/a)^2\equiv E_0.$

$E(0,k_y)$ 的第二能带

$$E(0,k_y)=K_x^2+(k_y+K_y)^2,\quad \mathbf{K}=\left(0,-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\right).$$

所以， $E(0,0)=4E_0/3\quad E(0,\pi/(\sqrt{3}a))=E_0/3.$

接着考虑近自由电子气近似模型：

$$\begin{aligned}V(x,y)&=-2V_0\left(\cos\frac{2\pi}{a}x+\cos\frac{2\pi}{b}y\right).\\&=-V_0\left[\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{a}x\right)+\exp\left(-\mathrm{i}\frac{2\pi}{a}x\right)+\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}y\right)+\exp\left(-\mathrm{i}\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}y\right)\right]\end{aligned}$$

所以， $E(k_x,0)$ 的第一能带的能量范围为： $0\to E_0-V_0$； $E(0,k_y)$ 的第二能带的能量范围为： $E_0/3+V_0\to 4E_0/3-V_0$。能带交迭的条件：

$$E_0-V_0\geq\frac{E_0}{3}+V_0,$$

即 $E_0\geq 3V_0.$