固体物理习题参考答案

19. 只考虑 s 电子，试求面心立方结构紧束缚能带；讨论能带顶和能带底的 k 位置，以及能带宽度；讨论能带顶、能带底与 Bloch 和相因子的关系。

解答:

只考虑最近邻原子的 s 电子紧束缚能带结构为:

$$E(\mathbf{k}) = E^{\text{原子}} + C + \sum_{\mathbf{R}}^{\text{最近邻}} J(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$$

对面心立方结构，1 个原子有 12 个近邻 (设晶格常数为 a) ：

（0.5a，0.5a，0）;（- 0.5a，- 0.5a，0）;（- 0.5a，0.5a，0）;（0.5a，- 0.5a，0）;

（0.5a，0，0.5a）;（- 0.5a，0，- 0.5a）;（- 0.5a，0，0.5a）;（0.5a，0，- 0.5a）;

（0，0.5a，0.5a）;（0，- 0.5a，- 0.5a）;（0，- 0.5a，0.5a）;（0，0.5a，- 0.5a）;

于是,

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{R}}^{\text{最近邻}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} =& e^{i\frac{a}{2}(k_x+k_y)} + e^{-i\frac{a}{2}(k_x+k_y)} + e^{i\frac{a}{2}(k_x-k_y)} + e^{-i\frac{a}{2}(k_x-k_y)} \\ &+ e^{i\frac{a}{2}(k_x+k_z)} + e^{-i\frac{a}{2}(k_x+k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(k_x-k_z)} + e^{-i\frac{a}{2}(k_x-k_z)} \\ &+ e^{i\frac{a}{2}(k_y+k_z)} + e^{-i\frac{a}{2}(k_y+k_z)} + e^{i\frac{a}{2}(k_y-k_z)} + e^{-i\frac{a}{2}(k_y-k_z)} \\ &= 4(\cos\frac{a}{2}k_x \cos\frac{a}{2}k_y + \cos\frac{a}{2}k_y \cos\frac{a}{2}k_z + \cos\frac{a}{2}k_z \cos\frac{a}{2}k_x)\end{aligned}$$

由此得到能带结构：

$$E(\mathbf{k}) = E^{\text{原子}} + C + 4J(\cos\frac{a}{2}k_x \cos\frac{a}{2}k_y + \cos\frac{a}{2}k_y \cos\frac{a}{2}k_z + \cos\frac{a}{2}k_z \cos\frac{a}{2}k_x)$$

为得到能带极值, 令

$$f(k_x, k_y, k_z) = \cos\frac{a}{2}k_x \cos\frac{a}{2}k_y + \cos\frac{a}{2}k_y \cos\frac{a}{2}k_z + \cos\frac{a}{2}k_z \cos\frac{a}{2}k_x$$

在极值处有

$$\begin{cases}\dfrac{\partial f}{\partial k_x} = -\dfrac{a}{2}\sin\dfrac{a}{2}k_x(\cos\dfrac{a}{2}k_y + \cos\dfrac{a}{2}k_z) = 0 \\ \dfrac{\partial f}{\partial k_y} = -\dfrac{a}{2}\sin\dfrac{a}{2}k_y(\cos\dfrac{a}{2}k_x + \cos\dfrac{a}{2}k_z) = 0 \\ \dfrac{\partial f}{\partial k_z} = -\dfrac{a}{2}\sin\dfrac{a}{2}k_z(\cos\dfrac{a}{2}k_x + \cos\dfrac{a}{2}k_y) = 0\end{cases}$$

当 k_x, k_y, k_z 其中两个分别为 $\dfrac{2n\pi}{a}, \dfrac{2m\pi}{a}$ (m, n 一奇一偶)，其余一个为任意值时， f = -1, 是最小值;

当 $k_x = \dfrac{2m\pi}{a}, k_y = \dfrac{2n\pi}{a}, k_z = \dfrac{2p\pi}{a}$ (m, n, p 全奇或全偶) 时, f = 3, 是最大值。

若将 k_x, k_y, k_z 限制在第一布里渊区，且考虑到 $J<0$，则

当 $k=(0,0,0)$ 时，f 最大，能量 $E(\mathbf{k})=E^{原子}+C+12J$ 最小，处于能带底，此时 Bloch 和相因子都为 1。

当 $k=\begin{cases}\frac{2\pi}{a}(\pm 1,0,c)\\ \frac{2\pi}{a}(\pm 1,c,0)\\ \frac{2\pi}{a}(c,\pm 1,0)\\ \frac{2\pi}{a}(0,\pm 1,c)\\ \frac{2\pi}{a}(c,0,\pm 1)\\ \frac{2\pi}{a}(0,c,\pm 1)\end{cases}$ 时（这些点都位于布里渊区边界上），其中 $c\in[-\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}]$， f 最小，

能量 $E(\mathbf{k})=E^{原子}+C-4J$ 最大，处于能带顶，此时 Bloch 和中，4 个相因子为-1，其余 8 个相因子取值任意 ，但能互相抵消。

能带宽度：-16J。

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；