目的

- 作业中要求熟记的内容，分析考题与习题关系及必须掌握的要点
  - ＊ 2（第一章）
  - ＊ 10（第二章）
  - ＊ 19+20（第三、四章）
  - ＊ 24+26（第五章）

金属自由电子气模型要点

- 电子气基本性质
  - * 能量空间的状态密度
    - # 但是因为k空间状态密度是常数，所以 一般总是从k空间状态密度转换得到能量空间状态密度
    - # 能量状态密度的物理意义是简并度，即某一能级，共有多少状态
  - * 费米能级
    - # T=0时，电子最高占据能级 $N=\int_0^{E_F} D(E)dE$
  - * 总能
    - # 所有电子能量之和 $U=\int_0^{\infty} f(E)D(E)EdE$

回家作业

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k的取值和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那里？用哪个边界条件更符合实际情况？更合理？为什么？

要求：独立完成，要求熟记得到态密度所有细节

解答：波函数

- 驻波：尝试解(分离变量后的结果。y,z类同)

$$\varphi_1(x) = Ae^{ik_x x} + Be^{-ik_x x}$$

- 代入方程后得到

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

- 用驻波边界条件，得

$$k_i = \frac{n_i \pi}{L}, i = x, y, z; n_i = \text{正整数}$$

- 用归一条件得

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

- 平面波：尝试解(三维)

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

- 用Born-von Karman循环边界条件，得

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i, i = x, y, z; n_i = \text{整数}$$

- 用归一条件得

$$A = \sqrt{\frac{1}{V}}$$

状态数

- 驻波解：k空间，常数，每个状态的体积为

$$\Delta\mathbf{k} = \pi^3 / V$$

$$1/\Delta\mathbf{k}$$

- 驻波条件时，*n*只取正整数，所以只分布在k空间的第一象限，因此，只有1/8的球壳体积

$$\frac{1}{8}4\pi k^2 dk$$

- *E*~*k*²，球壳内*E*相等，*E*~*E*+*dE*，因此状态数

$$dN = \frac{2V}{\pi^3}\frac{1}{8}4\pi k^2 dk$$

- 平面波解：k空间，常数，每个状态的体积为

$$\Delta\mathbf{k} = (2\pi)^3 / V$$

- 平面波条件时，n能取整数，所以能分布在整个k空间因此，整个球壳体积。(注意一维)

$$4\pi k^2 dk$$

- 状态数

$$dN = \frac{2V}{(2\pi)^3}4\pi k^2 dk$$

回家作业分析

状态密度，费米能级，平均能量

- 驻波、平面波解，对$E(k)$关系求导

$$dE = \frac{\hbar^2 2k}{2m} dk \qquad dk = \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{E}} dE$$

- 于是

$$dN = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}\, dE$$

- 费米能级

$$E_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$$

- 平均能量

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} E_F^0$$

出现在空间任一点的几率，平均动量

- 驻波解

$$\psi = \sqrt{\frac{8}{V}} \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z$$

- 几率为

$$|\psi|^2 = \frac{8}{V} \sin^2 k_x x \sin^2 k_y y \sin^2 k_z z$$

- 平均动量(y, z类同)

$$< p_x > = \int \psi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dxdydz$$
$$= \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{n_x \pi \hbar}{i} \int_0^L \sin \frac{\pi n_x}{L} x \cos \frac{\pi n_x}{L} x dx$$
$$= 0$$

- 平面波解

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

- 几率为

$$|\psi|^2 = \frac{1}{V}$$

- 平均动量

$$< \mathbf{p} > = \int \psi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \hbar \mathbf{k}$$

讨论

驻波解

- 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
- 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

- 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
- 平面波解在空间各点出现的几率一样，空间分布是常数
- 平面波解符合自由电子气体性质
- 循环边条件是无限体系的数学处理，与晶体周期性无关

晶体结构要点

- 晶体结构的数学描写
  - * 格子、基矢、原胞和晶胞
  - * 倒格子、基矢、布里渊区
- 不同的晶体结构
  - * 常见的晶体结构
  - * ？
- 晶体结构的衍射实验
  - * **von Lauer**方程，**Bragg**反射定律
  - * 结构因子得到消光条件

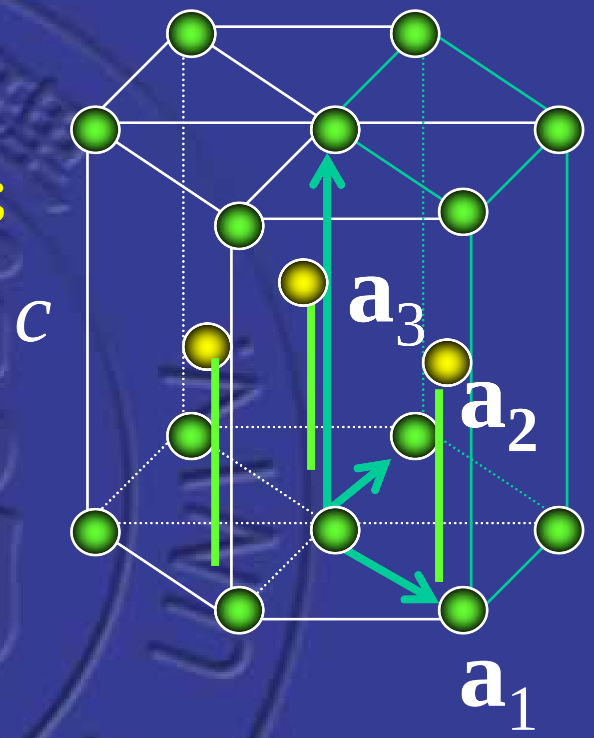
相关要点

- 晶面
- 晶向

回家作业

10. 六角密堆积结构，试确定

① 晶胞、基矢、晶胞内原子位矢；
② 倒格子基矢；
③ 几何结构因子；
④ 讨论其消光条件。



要求：能够独立完成，熟记所有细节

解答

- 原胞基矢

$$\mathbf{a}_1 = a(1,0,0), \quad \mathbf{a}_2 = a\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \quad \mathbf{a}_3 = c(0,0,1).$$

- 原胞内原子位置矢量

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

- 原胞体积

$$\Omega = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c,$$

- 所以可得倒格子基矢

$$\mathrm{b}_1 = \frac{2\sqrt{3}}{3}\frac{2\pi}{a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \quad \mathrm{b}_2 = \frac{2\sqrt{3}}{3}\frac{2\pi}{a}(0,1,0), \quad \mathrm{b}_3 = \frac{2\pi}{c}(0,0,1).$$

- 如 $\mathbf{K} = \alpha \mathrm{b}_1 + \beta \mathrm{b}_2 + \gamma \mathrm{b}_3,$ 结构因子根据公式就是

$$S_k = \sum_i f_i \exp(i\mathbf{K}\cdot\tau_i) = f\left\{1 + \exp\left[i2\pi\left(\frac{2}{3}\alpha + \frac{1}{3}\beta + \frac{1}{2}\gamma\right)\right]\right\} = f\left[1 + e^{i\pi(\frac{4}{3}\alpha + \frac{2}{3}\beta + \gamma)}\right]$$

- 消光条件

$$\pi\left(\frac{4}{3}\alpha + \frac{2}{3}\beta + \gamma\right) = (2n+1)\pi$$

- 最终得

$$4\alpha + 2\beta + 3\gamma = 6n$$

- 消光条件为\gamma为奇数，与alpha和beta无关

能带理论要点

- **Bloch**定理和能带结构（***E*****(k)**）
  - * 紧束缚方法： **Bloch和**
  - * 近自由电子近似：平面波
  - * 空晶格模型修正
  - * 能隙（由势能的傅立叶系数确定）
    - # 根据近自由电子近似，不同能带次序的能隙由势能的傅立叶不同系数V_n决定
      - † 可以用傅立叶展开做积分
      - † 也可以按势能函数的表达式直接改写成傅立叶展开的形式，比如**sin**和**cos**函数都可以直接改写成指数函数

$$\cos x, \sin x \rightarrow e^{ix}, e^{-ix}$$

能带理论要点

- 解读能带结构和由能带结构得到的物理量
  - * 能带宽度
  - * 带顶和带底的有效质量
  - * 费米速度
  - * 能带填充：第一布里渊区内的状态数
  - * 导体、半导体、绝缘体

相关要点

- 布里渊区
  - * 确定倒格子基矢，画倒格点
  - * 选某一倒格点作为原点，做近邻倒格点的中垂面（线），还需检查所围成的区域是否正好与原胞体积（面积）成倒数的关系（另有(2\pi)**维数的因子）
- 费米面作图要领
  - * 费米面跨越边界性质

相关要点

- 由势能确定能隙的要领
  - * 根据近自由电子近似，不同能带次序的能隙由势能的傅立叶不同系数V_n决定
- 求势能函数的傅立叶系数V_n=?
  - # 可以用傅立叶展开做积分
  - # 也可以按势能函数的表达式直接改写成傅立叶展开的形式，比如sin和cos函数都可以直接改写成指数函数，相当于傅立叶展开

$$\cos x, \sin x \to e^{ix}, e^{-ix}$$

回家作业

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

要求：能够独立完成，理解所有的步骤并熟记其中的细节

解答

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

- 总是用这个公式，最重要的是相因子所需要的信息和J的正负号。相因子需要知道紧邻坐标，这时，作为fcc，共12个最紧邻，写出坐标

(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)；

- 代入公式整理后可得

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

- 注意，J<0，所以k=0时是能带底，

$$E(\mathbf{k}) = E^{原子} + C + 12J$$

- 当kx, ky, kz有两个使比如2pi m/a和2pi n/a中的为m,n一奇一偶，另一为任意值时，得到能带顶

$$E(\mathbf{k}) = E^{\text{原子}} + C - 4J$$

- 所以带宽是16|J|

回家作业

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。

要求:能独立完成,本题给出紧束缚能带形式,紧束缚能带也要求能够独立完成,如前题

解答

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

- 前一题没有有效质量，这题已知能带结构，除带顶带底外，还需求速度和有效质量。
- 先看能带底能带顶，分别在**k=0**和**pi/a**。
- 带宽是

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

- 速度

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

- 有效质量分别是 $m^*=2m$ $m^*=-(2/3)m$

晶格振动要点

- 晶格振动的求解
  - * 简谐近似的运动方程、尝试解、振动谱
- 晶格振动量子化和声子概念
- 振动能及有关概念
  - * 频率分布的简单模型
    - \# 德拜模型，爱因斯坦模型
  - * 振动能、比热

相关要点

- 振动谱的求解（读懂书中解的全过程）
  * 用力常数和原子偏离平衡位置的位移建立运动方程
    # 力常数是对势函数的二次导数
  * 写出满足布洛赫定理的尝试解
  * 将尝试解代入方程，整理后得解

$$m\frac{d^2x_n}{dt^2}=\beta(x_{n+1}-x_n)+\beta(x_{n-1}-x_n)$$

$$F=-\frac{dV}{d\delta}=-\left(\frac{d^2V}{d\delta^2}\right)_0\delta=-\beta\delta$$

$$u=Ae^{i(qna-\omega t)}$$

相关要点

- 其他频率分布的简单模型?
  - * 爱因斯坦模型 $\rho_{\text{Einstein}}(\omega)=3N\delta(\omega-\omega_{\text{Einstein}})$
- 如何求比热?
  - * 与温度有关的振动能量? $U=\int_0^{\omega_{最大}}\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}\rho(\omega)d\omega$
  - * 对此求导数

相关要点

- 非简谐近似
  - * 热膨胀
  - * 热传导

回家作业

24.（书中5.3题）考虑一维双原子链的晶格振动，链上最近邻原子间的力常数交替地等于c和10c。令原子质量相同，且最近邻距离等于a/2，试求在q=0和q= π /a处的 $\omega(q)$，并大致画出色散关系。

要求：能够独立完成，熟记所有细节。

解答

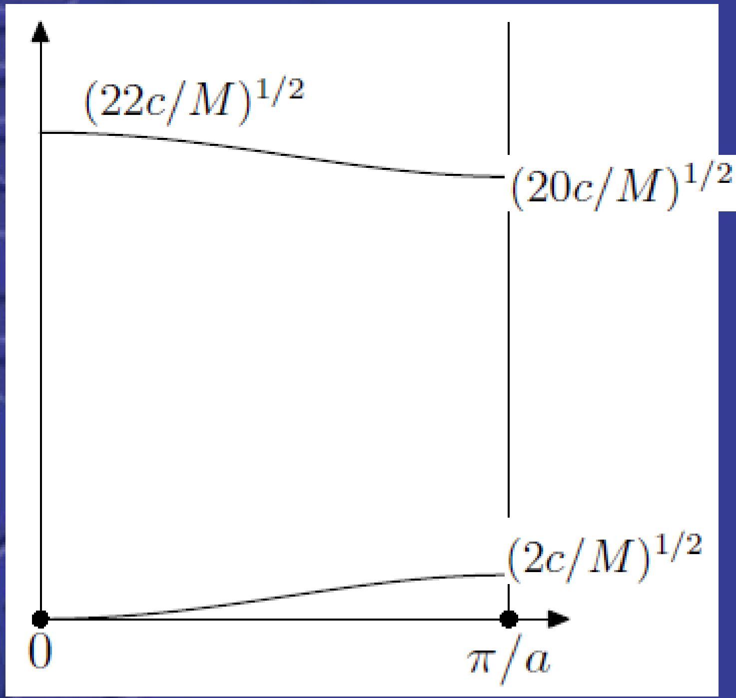
$$M\ddot{u}_n = 10c(v_n - u_n) - c(u_n - v_{n-1}) = c(10v_n + v_{n-1} - 11u_n),$$

$$M\ddot{v}_n = c(u_{n+1} - v_n) - 10c(v_n - u_n) = c(u_{n+1} + u_n - 11v_n).$$

$u_n = u_0 e^{-\mathrm{i}(wt-nqa)}$ 和 $v_n = v_0 e^{-\mathrm{i}(wt-nqa)}$,

$$\begin{aligned} c(10 + e^{-\mathrm{i}qa})v + (Mw^2 - 11c)u &= 0 \\ (Mw^2 - 11c)v + c(10 + e^{\mathrm{i}qa})v &= 0 \end{aligned}$$

$$w_\pm^2 = \frac{c}{M}\{11 \pm [121 - 20(1 - \cos qa)]^{1/2}\},$$



回家作业

26. (书中第5.4题)对于原子间距为a，有*N*个原子组成的一维单原子链，在德拜近似下，

a) 计算晶格振动频谱；
b) 证明在低温极限下，比热正比于温度T。

要求：能够独立完成，熟记所有细节。

解答

- 德拜近似

$$\omega = v_p q\text{，}\quad d\omega = v_p dq$$

$$dN = \frac{L}{2\pi} 2dq = \frac{L}{\pi v_p} d\omega$$

$$\rho(\omega) = \frac{Na}{\pi v_p}$$

$$U = \int_0^{\omega_D} f(\omega)\rho(\omega)\hbar\omega d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{Na}{\pi v_p} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} d\omega$$

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T}$$

$$= \frac{Na}{\pi v_p \hbar} \frac{\partial}{\partial T} (kT)^2 \int_0^{x_D} \frac{x}{e^x - 1} dx$$

$$= \frac{Nak^2}{\pi v_p \hbar} T \int_0^{x_D} \frac{x}{e^x - 1} dx \propto T$$

谢谢各位！