

《固体物理》 第一章 作业题

题1

- 如果将等体积球分别排成下列结构，设 x 表示钢球所占体积与总体积之比，证明：

结构	x
简单立方	$\pi/6$
体心立方	$\sqrt{3}\pi/8$
面心立方	$\sqrt{2}\pi/6$
六方密排	$\sqrt{2}\pi/6$
金刚石	$\sqrt{3}\pi/16$

证明：

设想晶体由刚性原子球堆积而成， n 为一个晶胞中的刚性原子球数， r 表示刚性原子球半径， V 表示晶胞体积，则 $x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3$ 。

(1) 简单立方

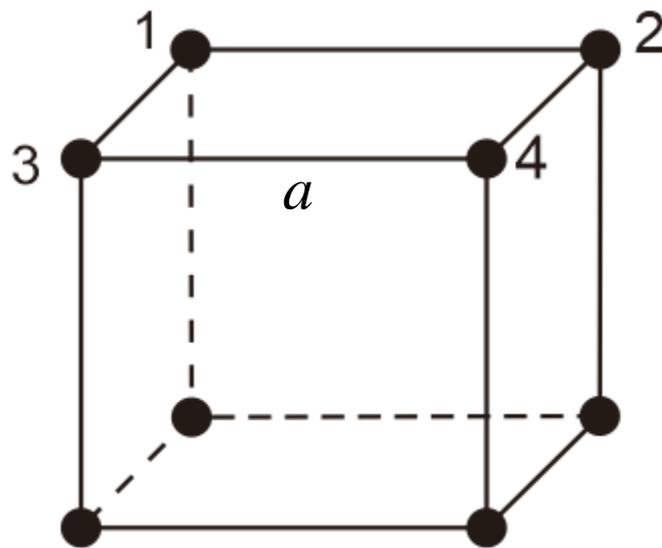
对简单立方晶体，任一原子有6个最近邻，如图(a)所示，

中心在1、2、3和4处的原子球将依次相切。

因为 $a = 2r, V = a^3 = 8r^3$,

一个晶胞内包括一个原子，所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{1}{8r^3} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{\pi}{6} \approx 0.52$$

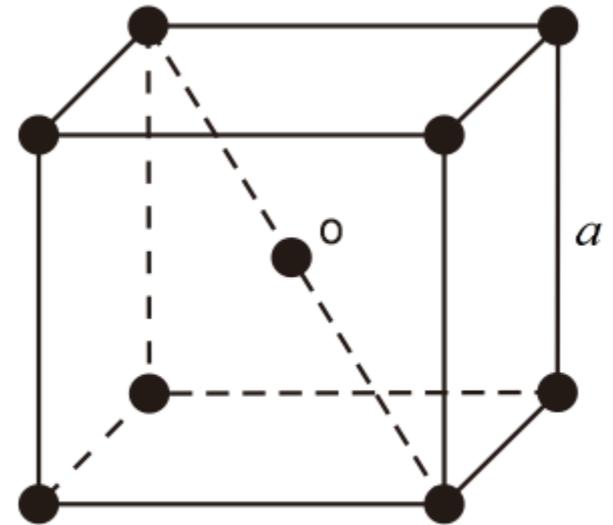


(a)简单立方

(2) 体心立方

对体心立方晶体，任一原子有8个最近邻，如图（b）所示。体心位置的原子球与处在8个角顶位置的原子球相切，因此晶胞空间对角线的长度为 $\sqrt{3}a = 4r$, $V = a^3$, 一个晶胞内含有2个原子，所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{2}{a^3} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4} a \right)^3 = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.68$$

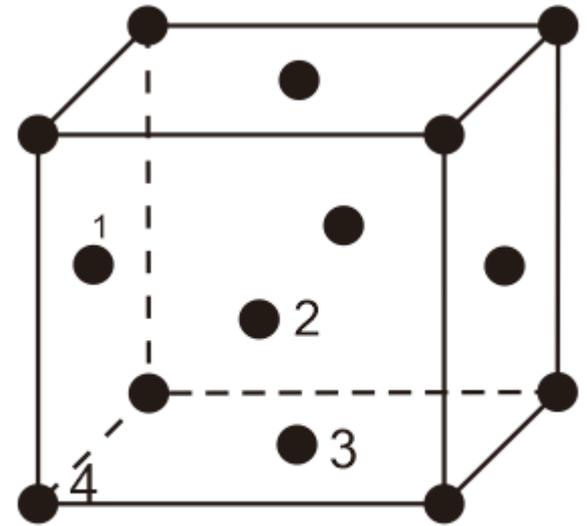


(b)体心立方

(3) 面心立方

对面心立方晶体，任一个原子有12个最近邻，如图（c）所示。中心位于晶胞立方体顶点的原子球（图中4）与近邻的面心原子球（图中1、2、3）相切，因此 $\sqrt{2}a = 4r$ ，1个晶胞内含有4个原子，所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{2}{a^3} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4} a \right)^3 = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$$



(c)面心立方

(4) 六方密排

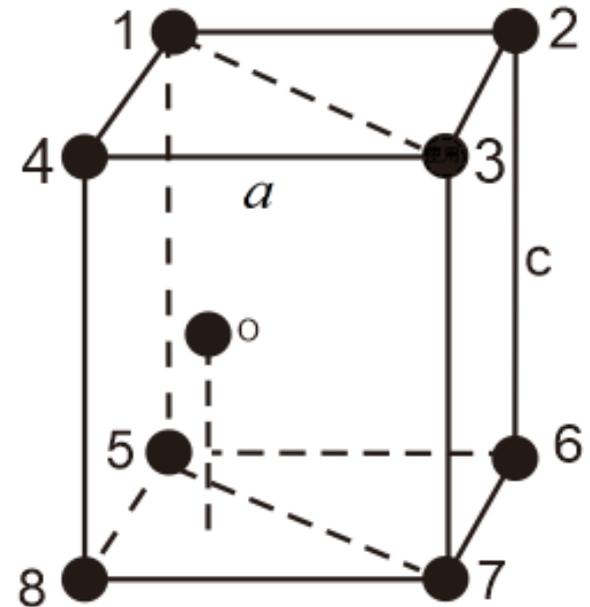
对六方密排结构，任一原子有12个最近邻（面内6个，上下各3个），如图（d）所示。中心在O的原子球与中心在1、3、4、5、7和8处的原子球相切，即O点处原子与5、7和8处的原子分布在正四面体的四个顶点上。

由于正四面体的高为
$$h = \sqrt{\frac{2}{3}}a = 2\sqrt{\frac{2}{3}}r = \frac{c}{2}$$

晶胞体积为
$$V = ca^2 \sin 60^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} ca^2$$

1个晶胞内含有2个原子，所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{1}{2}a\right)^3}{\frac{\sqrt{3}}{2} ca^2} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$$

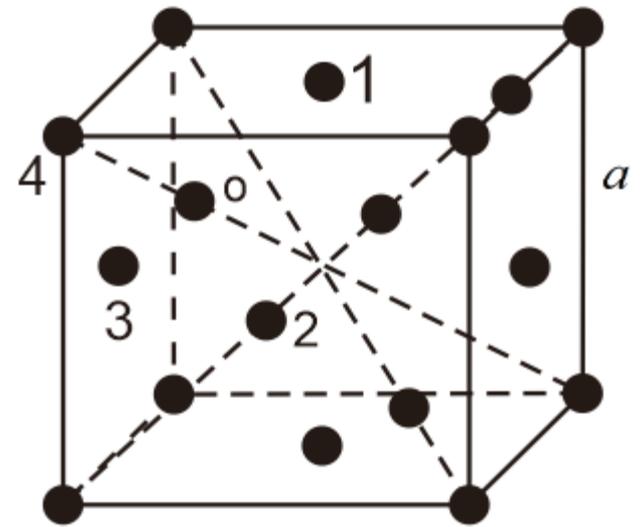


(d)六方密排

(5) 金刚石

对金刚石结构，任一原子有4个最近邻，如图（e）所示。中心在空间对角线四分之一处O点的原子球与中心在1、2、3和4处的面心处原子球相切，因此 $\sqrt{3}a = 8r, V = a^3$ 。1个晶胞内包含8个原子，所以

$$x = \frac{n}{V} \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{8}{a^3} \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{8} a \right)^3 = \frac{\sqrt{3}\pi}{16} \approx 0.34$$



(e) 金刚石

题2

画出体心立方和面心立方晶格结构的金属在(100), (110), (111) 面上的原子排布。

解答：

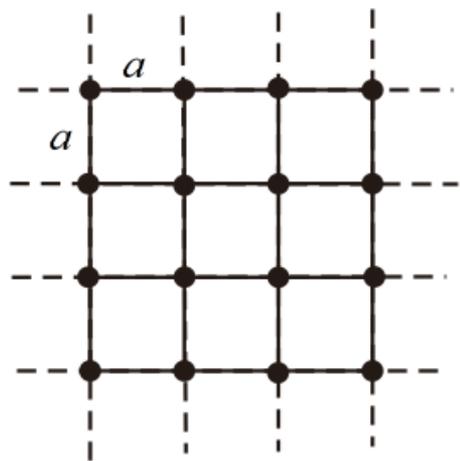
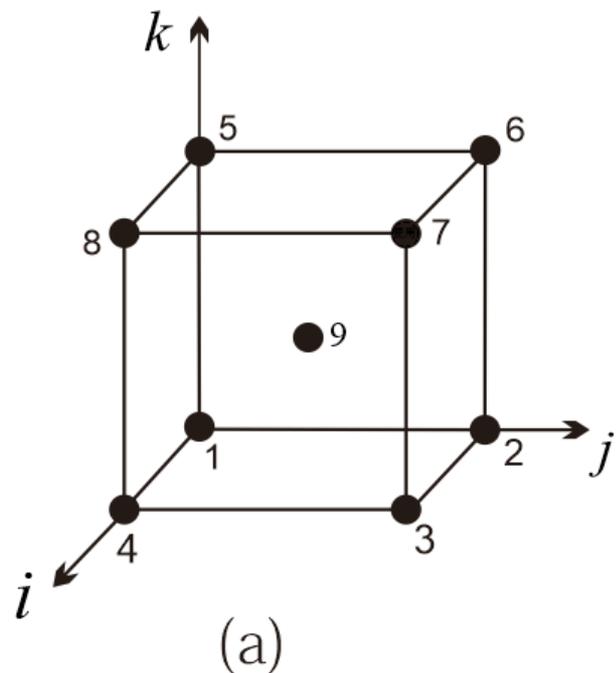
(1) 体心立方

(100) 面：图1.3中3、4、8和7号原子所在的面，原子排布如图1.3 (b) 所示；

(110) 面：图1.3中2、4、8和6号原子所在的面，原子排布如图1.3 (c) 所示；

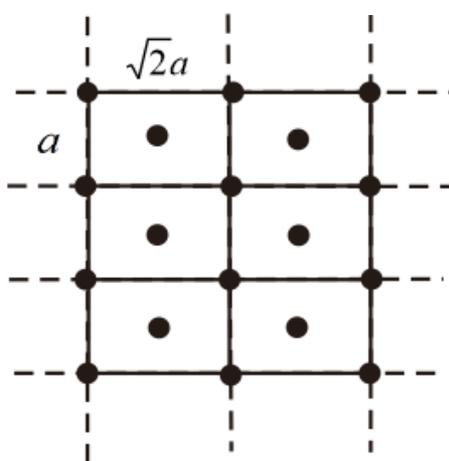
(111) 面；图1.3中2、4和5号原子所在的面，原子排布如图1.3 (d) 所示。

图1.3 体心立方晶格和 (100)、(110) 以及 (111) 面上原子排布示意图



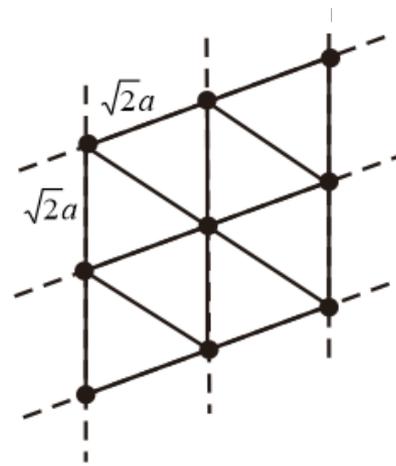
(100)

(b)



(110)

(c)



(111)

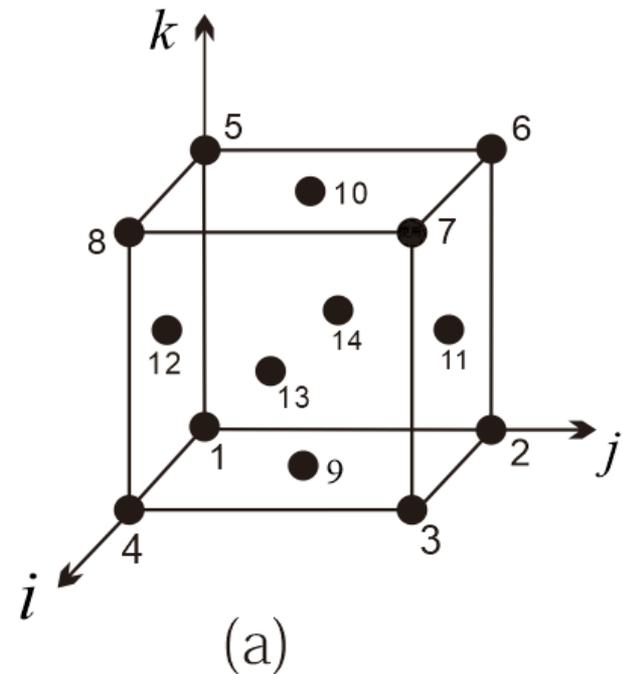
(d)

(2) 面心立方

(100) 面：图1.4中3、4、8、7和13号原子所在的面，原子排布如图1.4 (b) 所示；

(110) 面：图1.4中2、4、8、6、9和10号原子所在的面，原子排布如图1.4 (c) 所示；

(111) 面：图1.4中2、4、5、9、12和14号原子所在的面，原子排布如图1.4 (d) 所示。



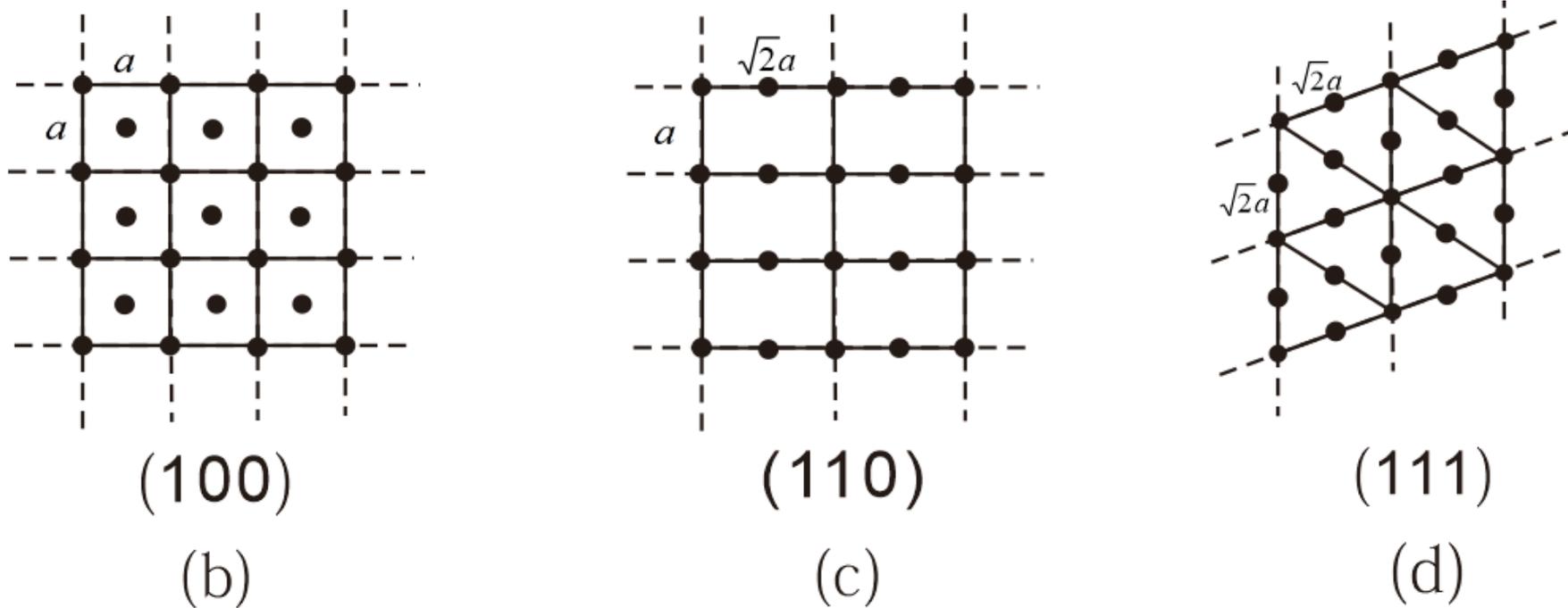


图1.4 面心立方晶格和 (100)、(110) 以及 (111) 面上原子排布示意图

题3

B、C两点是面心立方晶胞上的两面心。

(1) 求ABC面的密勒指数；

(2) 求AC晶列的指数和相应原胞坐标系中的指数。

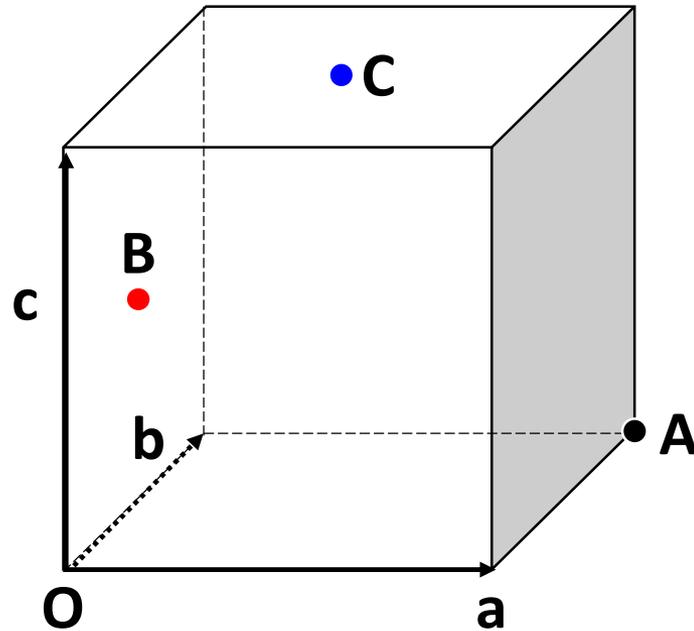


图1.10 面心立方晶胞

解答：

(1) 矢量 \vec{BA} 与矢量 \vec{BC} 的叉乘即是ABC面的法矢量。

$$\vec{BA} = \vec{OA} - \vec{OB} = (\vec{a} + \vec{b}) - \frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c}) = \frac{1}{2}(2\vec{a} + \vec{b} - \vec{c})$$

$$\vec{BC} = \vec{OC} - \vec{OB} = \left[\vec{c} + \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b}) \right] - \frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c}) = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c})$$

$$\vec{BA} \times \vec{BC} = \frac{1}{2}(2\vec{a} + \vec{b} - \vec{c}) \times \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c}) = \frac{a}{4}(\vec{a} - 3\vec{b} - \vec{c})$$

因为对立方晶系，晶列 $[hkl]$ 与晶面族 (hkl) 正交，所以ABC面的密勒指数为 (131) 。

$$(2) \overrightarrow{AC} = \overrightarrow{OC} - \overrightarrow{OA} = \left[\vec{c} + \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b}) \right] - (\vec{a} + \vec{b}) = -\frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} - 2\vec{c})$$

可见 \overrightarrow{AC} 与晶列 $(\vec{a} + \vec{b} - 2\vec{c})$ 平行，因此AC晶列的晶列指数为 $[112]$ 。

由《固体物理教程》(1.3)式可得面心立方结构晶胞基矢与原胞基矢的关系

$$\vec{a} = -\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3$$

$$\vec{b} = \vec{a}_1 - \vec{a}_2 + \vec{a}_3$$

$$\vec{c} = \vec{a}_1 + \vec{a}_2 - \vec{a}_3$$

晶列 $(\vec{a} + \vec{b} - 2\vec{c})$ 可化为 $(\vec{a} + \vec{b} - 2\vec{c}) = -2(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 - 2\vec{a}_3)$

由上式可知，AC晶列在原胞坐标系中的指数为 $[11\bar{2}]$

题4.对于晶格常数为 a 的简单立方晶格，考虑晶格中的一个晶面 (hkl) ，证明该晶面所属的晶面族的面间距：

$$d_{hkl} = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

证明：设沿立方晶系晶轴 a_1, a_2, a_3 的单位矢量为 i, j, k ,

则正格子基矢为 $a_1 = ai, a_2 = aj, a_3 = ak$

相应的倒格子基矢为 $b_1 = \frac{2\pi}{a}i, b_2 = \frac{2\pi}{a}j, b_3 = \frac{2\pi}{a}k$

与晶面簇 (hkl) 正交的倒格矢为 $G_{hkl} = hb_1 + kb_2 + lb_3$

由晶面间距 d_{hkl} 与倒格矢 G_{hkl} 的关系式 $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|G_{hkl}|}$

可得

$$d^2 = \frac{4\pi^2}{(hb_1)^2 + (kb_2)^2 + (lb_3)^2} = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

题5

试回答：与晶向 $[n_1 n_2 n_3]$ 垂直的倒格晶面的晶面指数是什么？

答：与晶向 $[n_1 n_2 n_3]$ 垂直的倒格晶面的晶面指数是 $[n_1 n_2 n_3]$ 。

黄昆《固体物理》第 2, 3, 4 次作业习题解答

小木虫网

小本虫物理版

第二章 习题

2.3 若一晶体的相互作用能可以表示为 $u(r) = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}$,

求 1) 平衡间距 r_0 2) 结合能 W (单个原子的) 3) 体弹性模量 4) 若取 $m=2, n=10, r_0=0.3\text{ nm}, W=4\text{ eV}$, 计算 α, β 值.

解 1) 晶体内能 $U(r) = \frac{N}{2} \left(-\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n} \right)$

$$\text{平衡条件 } \left. \frac{dU}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \quad -\frac{m\alpha}{r_0^{m+1}} + \frac{n\beta}{r_0^{n+1}} = 0 \quad r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}}$$

2) 单个原子的结合能 $W = -\frac{1}{2}u(r_0)$

$$u(r_0) = \left(-\frac{\alpha}{r_0^m} + \frac{\beta}{r_0^n} \right) \Big|_{r=r_0} \quad W = \frac{1}{2} \alpha \left(1 - \frac{m}{n} \right) \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{-m}{n-m}}$$

3) 体弹性模量 $K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_{V_0} \cdot V_0$

晶体的体积 $V = NA r^3$ —— A 为常数, N 为原胞数目

$$\begin{aligned} \text{晶体内能 } U(r) &= \frac{N}{2} \left(-\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n} \right) \\ &= \frac{N}{2} \left(\frac{m\alpha}{r^{m+1}} - \frac{n\beta}{r^{n+1}} \right) \frac{1}{3NA r^2} \\ \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} &= \frac{N}{2} \frac{\partial r}{\partial V} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{m\alpha}{r^{m+1}} - \frac{n\beta}{r^{n+1}} \right) \frac{1}{3NA r^2} \right] \end{aligned}$$

体弹性模量 $K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_{V_0} \cdot V_0$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-\frac{m^2\alpha}{r_0^m} + \frac{n^2\beta}{r_0^n} - \frac{m\alpha}{r_0^m} + \frac{n\beta}{r_0^n} \right]$$

由平衡条件 $\left. \frac{\partial U}{\partial V} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \left(\frac{m\alpha}{r_0^{m+1}} - \frac{n\beta}{r_0^{n+1}} \right) \frac{1}{3NA r_0^2} = 0$

$$\frac{m\alpha}{r_0^m} = \frac{n\beta}{r_0^n}$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-\frac{m^2 \alpha}{r_0^m} + \frac{n^2 \beta}{r_0^n} \right]$$

体弹性模量 $K = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_{V_0} \cdot V_0$ $U_0 = \frac{N}{2} \left(-\frac{\alpha}{r_0^m} + \frac{\beta}{r_0^n} \right)$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-\frac{m^2 \alpha}{r_0^m} + \frac{n^2 \beta}{r_0^n} \right]$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{N}{2} \frac{1}{9V_0^2} \left[-m \frac{m\alpha}{r_0^m} + n \frac{n\beta}{r_0^n} \right]$$

$$\left(\frac{m\alpha}{r_0^m} = \frac{n\beta}{r_0^n} \right) = -\frac{N}{2} \frac{nm}{9V_0^2} \left[-\frac{\alpha}{r_0^m} + \frac{\beta}{r_0^n} \right]$$

$$\left. \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} = \frac{mn}{9V_0^2} (-U_0) \quad K = |U_0| \frac{mn}{9V_0}$$

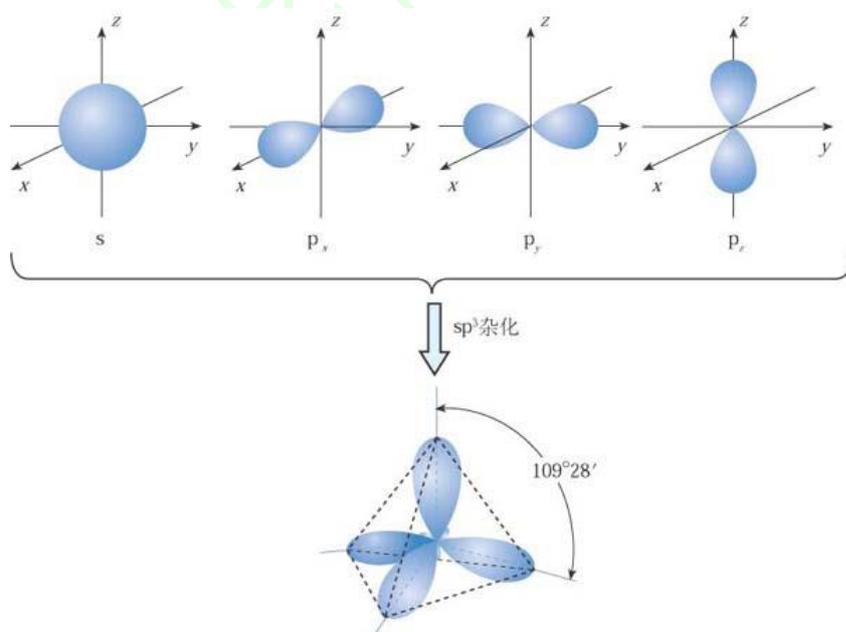
$$4) \quad \frac{m\alpha}{r_0^m} = \frac{n\beta}{r_0^n} \quad r_0 = \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}} \quad W = \frac{1}{2} \alpha \left(1 - \frac{m}{n} \right) \left(\frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{-m}{n-m}}$$

$$\beta = \frac{W}{2} r_0^{10} \quad \beta = 1.18 \times 10^{-95} \text{ eV} \cdot \text{m}^{10}$$

$$\alpha = r_0^2 \left[\frac{\beta}{r_0^{10}} + 2W \right] \quad \alpha = 9.0 \times 10^{-19} \text{ eV} \cdot \text{m}^2$$

2.4 经过 sp^3 杂化后形成的共价键，其方向沿着立方体的四条对角线的方向，求共价键之间的夹角。

解 sp^3 轨道杂化过程形成的共价键如图所示



共价键沿立方体四对角线方向，与中心可构成正四面体，易得键角为 $109^{\circ}28'$

2.7. 对于 H_2 ，从气体的测量得到 Lennard—Jones 势参数为 $\varepsilon = 50 \times 10^{-6} J$, $\sigma = 2.96 \text{ \AA}$. 计算 H_2 结合成面心立方固体分子氢时的结合能 (以 KJ/mol 单位)，每个氢分子可当做球形来处理。结合能的实验值为 0.751 kJ / mol ，试与计算值比较。

解 以 H_2 为基团，组成 fcc 结构的晶体，如略去动能，分子间按 Lennard—Jones 势相互作用，则晶体的总相互作用能为：

$$U = 2N\varepsilon \left[\sum_i 'P_{ij}^{-12} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \sum_j 'P_{ij}^{-6} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right].$$

$$\sum_j 'P_{ij}^{-6} = 14.45392; \sum_i 'P_{ij}^{-12} = 12.13188,$$

$$\varepsilon = 50 \times 10^{-16} \text{ erg}, \sigma = 2.96 \text{ \AA}, N = 6.022 \times 10^{23} / \text{mol}.$$

将 R_0 代入 U 得到平衡时的晶体总能量为

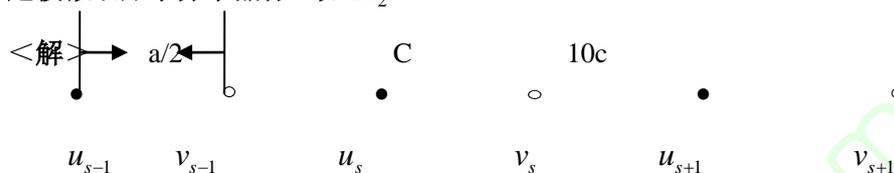
$$U = 2 \times 6.022 \times 10^{23} / \text{mol} \times 50 \times 10^{-16} \text{ erg} \times \left[(12.13) \left(\frac{2.96}{3.16} \right)^{12} - (14.45) \left(\frac{2.96}{3.16} \right)^6 \right] \approx -2.55 \text{ KJ / mol}.$$

因此，计算得到的 H_2 晶体的结合能为 2.55 KJ / mol ，远大于实验观察值 0.751 KJ / mol 。

对于 H_2 的晶体，量子修正是很重要的，我们计算中没有考虑零点能的量子修正，这正是造成理论和实验值之间巨大差别的原因。

第三章 习题

3.3. 考虑一双原子链的晶格振动，链上最近邻原子间力常数交错的等于 c 和 $10c$ 。令两种原子质量相同，且最近邻间距为 $\frac{a}{2}$ 。求在 $k=0$ 和 $k=\frac{\pi}{a}$ 处的 $\omega(k)$ 。大略地画出色散关系。本题模拟双原子分子晶体，如 H_2 。



$$\left. \begin{aligned} M \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= C(v_{s-1} - u_s) + 10C(v_s - u_s), \\ M \frac{d^2 v_s}{dt^2} &= 10C(u_s - v_s) + C(u_{s+1} - v_s), \end{aligned} \right\}$$

将 $u_s = u e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t}$, $v_s = V e^{isKa} \cdot e^{-i\omega t}$ 代入上式有

$$\left. \begin{aligned} -M\omega^2 u &= C(10 + e^{-ika})V - 11Cu, \\ -M\omega^2 V &= C(e^{ika} + 10)u - 11CV, \end{aligned} \right\}$$

是 u, v 的线性齐次方程组，存在非零解的条件为

$$\begin{vmatrix} M\omega^2 - 11C, C(10 + e^{-ika}) \\ C(e^{ika} + 10), M\omega^2 - 11C \end{vmatrix} = 0, \text{ 解出}$$

$$M^2 \omega^4 - 22MC\omega^2 + 20C^2(1 - \cos Ka) = 0$$

$$\therefore \omega_{\pm}^2 = \frac{C}{M} \left[11 \pm \sqrt{121 - 20(1 - \cos Ka)} \right].$$

当 $K=0$ 时，

当 $K=\pi/a$ 时

$$\left. \begin{aligned} \omega_+^2 &= 22C/M, \\ \omega_-^2 &= 0, \end{aligned} \right\} \left. \begin{aligned} \omega_+^2 &= 20C/M, \\ \omega_-^2 &= 2C/M, \end{aligned} \right\}$$

ω^2 与 K 的关系如下图所示。这是一个双原子(例如 H_2)晶体

3.5 已知某离子晶体每对离子平均相互作用能为 $u(r) = -\frac{\alpha q^2}{r} + \frac{\beta}{r^n}$ 其中马德隆常数

$\alpha = 1.75, n = 9$, 平衡离子间距 $r_0 = 2.82 \text{ \AA}$ 。

(a) 试求离子在平衡位置附近的振动频率。

(b) 计算与该频率相当的电磁波的波长, 并与 NaCl 红外吸收频率的测量值 $61 \mu\text{m}$ 进行比较。

解: (a) 把一对 NaCl 离子看成一对谐振子, 其振动势能可表示为

$$u_0 = \frac{1}{2} \beta r_0^2 \quad (1)$$

其中 β 为力常数。它与振动频率有如下关系

$$\omega = \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}} \quad (2)$$

其中,
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \quad (3)$$

(1)式 u_0 左边为每对离子的平均作用能。

因为
$$\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=r_0} = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} - \frac{nc}{r_0^{n+1}} = 0$$

所以
$$\frac{c}{r_0^n} = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \cdot \frac{1}{n} \quad (4)$$

$$E_b = |u(r_0)| = +\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) = 1.27 \times 10^{-18} \text{ J}$$

由(1)(2)(3)式得

$$\omega = \sqrt{\frac{2}{\mu} \frac{2E_b}{r_0^2}} = \frac{2}{r_0} \sqrt{u \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}$$

把数值代入得

$$\omega = 5.25 \times 10^{13}$$

所以

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 8.35 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

(b) 波长
$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8}{8.35 \times 10^{12}} = 3.59 \times 10^{-5} \text{ m} = 36 \mu\text{m}$$
。与吸收频带的测量

值 $\lambda = 61\mu\text{m}$ 很接近。

3.6 计算一维单原子链的频率分布函数 $\rho(\omega)$ 。

解 设单原子链长度 $L = Na$

$$\begin{aligned} \text{波矢取值 } q &= \frac{2\pi}{Na} \times h & \text{每个波矢的宽度 } & \frac{2\pi}{Na} \\ \text{状态密度 } & \frac{Na}{2\pi} & \text{dq 间隔内的状态数 } & \frac{Na}{2\pi} dq \end{aligned}$$

—— 对应 $\pm q, \omega$ 取值相同, $d\omega$ 间隔内的状态数目

$$\rho(\omega)d\omega = 2 \times \frac{Na}{2\pi} dq$$

$$\text{一维单原子链色散关系 } \omega^2 = \frac{4\beta}{m} \sin^2\left(\frac{aq}{2}\right)$$

$$\text{令 } \omega_0 = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \quad \omega = \omega_0 \sin\left(\frac{aq}{2}\right)$$

$$\text{两边微分得到 } d\omega = \omega_0 \frac{a}{2} \cos\left(\frac{aq}{2}\right) dq$$

$$\cos\left(\frac{aq}{2}\right) = \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2}} \quad d\omega = \frac{a}{2} \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} dq$$

$$d\omega = \frac{a}{2} \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} dq \quad dq = \frac{2}{a} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$$

$$\text{代入 } \rho(\omega)d\omega = 2 \times \frac{Na}{2\pi} dq = 2 \times \frac{N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}} d\omega$$

$$\text{一维单原子链的频率分布函数 } \rho(\omega) = \frac{2N}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}}$$

3.8. 有 N 个相同原子组成的面积为 S 的二维晶格, 在德拜近似下计算比热, 并论述在低温极限比热正比于 T^2 。

证明: 在 k 到 $k + dk$ 间的独立振动模式对应于平面中半径 n 到 $n + dn$ 间圆环的面积

$$2\pi n dn, \text{ 且 } 2\pi n dn = \frac{L^2}{2\pi} k dk = \frac{5}{2\pi} k dk \text{ 即 } \rho(\omega) = \frac{3s\omega}{2\pi v_\rho^2} d\omega \text{ 则}$$

$$E = \frac{3s}{2\pi v_\rho^2} \int_0^{\omega_m} \frac{\hbar \omega^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} + E_0 = \frac{3s(k_B T)^3}{2\pi v_\rho^2 \hbar^2} \int_D \frac{\hbar \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 d\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{3s(k_B T)^3}{2\pi v_\rho^2 \hbar^2} \int_D \frac{x^2 dx}{e^x - 1}$$

$$T \rightarrow 0 \text{ 时, } E \propto T^3, \therefore C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_s \propto T^2$$

3.10. 设晶体中每个振子的零点振动能为 $\frac{1}{2}\hbar\omega$, 使用德拜模型求晶体的零点振动能.

证明: 根据量子力学零点能是谐振子所固有的, 与温度无关, 故 $T=0\text{K}$ 时振动能 E_0 就是各振

动模零点能之和. $E_0 = \int_0^{\omega_m} E_0(\omega)g(\omega)d\omega$ 将 $E_0(\omega) = \frac{1}{2}\hbar\omega$ 和 $g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \omega^2$ 代入积

$$\text{分有 } E_0 = \frac{3V}{16\pi^2 v_s^3} \omega_m^4 = \frac{9}{8} \hbar N \omega_m, \text{ 由于 } \hbar\omega_m = k_B \theta_D \text{ 得 } E_0 = \frac{9}{8} N k_B \theta_D$$

一般晶体德拜温度为 $\sim 10^2\text{K}$, 可见零点振动能是相当大的, 其量值可与温升数百度所需热能相比拟.

第四章 习题

4.2. 写出一维近自由电子近似, 第 n 个能带($n=1, 2, 3$)中, 简约波数 $k = \frac{\pi}{2a}$ 的 0 级波函数。

$$\text{解: } \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\bar{k}x} e^{\frac{2\pi}{a}mx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\pi}{2a}x} \cdot e^{i\frac{2\pi}{a}mx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi}{a}(m+\frac{1}{4})x}$$

$$\text{第一能带: } m \cdot \frac{\pi}{2a} = 0, m = 0, \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\pi}{2a}x}$$

$$\text{第二能带: } b = b' \text{ 则 } b' \rightarrow b, m \cdot \frac{2\pi}{a} = -\frac{2\pi}{a}, \text{ 即 } m = -1, (e^{i\frac{2\pi}{a}x} = e^{i\frac{\pi}{2a}x}) \therefore \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{3\pi}{2a}x}$$

$$\text{第三能带: } c' \rightarrow c, m \cdot \frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{a}, \text{ 即 } m = 1, \psi_k^*(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{\pi}{2a}x} \cdot e^{i\frac{2\pi}{a}x} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{5\pi}{2a}x}$$

4.3. 电子在周期场中的势能。

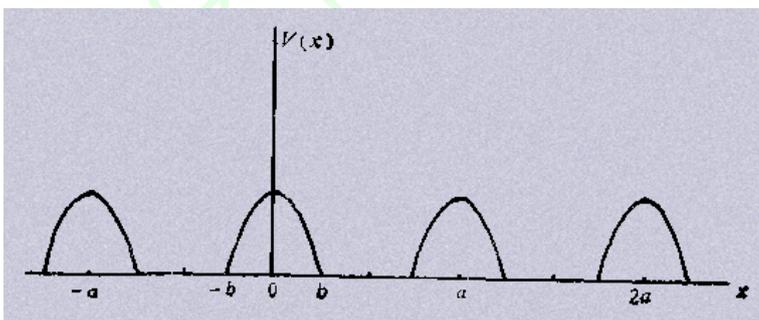
$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} m \omega^2 [b^2 - (x - na)^2], & \text{当 } na - b \leq x \leq na + b \\ 0, & \text{当 } (n-1)a + b \leq x \leq na - b \end{cases}$$

其中 $a = 4b$, ω 是常数。

(1) 试画出此势能曲线, 求其平均值。

(2) 用近自由电子近似模型求出晶体的第一个及第二个带隙宽度。

解: (1) 题设势能曲线如下图所示。



(2) 势能的平均值: 由图可见, $V(x)$ 是个以 a 为周期的周期函数, 所以

$$\bar{V}(x) = \frac{1}{L} \int_L V(x) dx = \frac{1}{a} \int_b^a V(x) dx = \frac{1}{a} \int_{-b}^{a-b} V(x) dx$$

题设 $a = 4b$, 故积分上限应为 $a - b = 3b$, 但由于在 $[b, 3b]$ 区间内 $V(x) = 0$, 故只需

在 $[-b, b]$ 区间内积分。这时, $n = 0$, 于是

$$\bar{V} = \frac{1}{a} \int_{-b}^b V(x) dx = \frac{m\omega^2}{2a} \int_{-b}^b (b^2 - x^2) dx = \frac{m\omega^2}{2a} \left[b^2 x \Big|_{-b}^b - \frac{1}{3} x^3 \Big|_{-b}^b \right] = \frac{1}{6} m\omega b^2.$$

(3), 势能在 $[-2b, 2b]$ 区间是个偶函数, 可以展开成傅立叶级数

$$V(x) = V_0 + \sum_{m=-\infty}^{\infty} V_m \cos \frac{m\pi}{2b} x, V_m = \frac{2}{2b} \int_0^{2b} V(x) \cos \frac{m\pi}{2b} x dx = \frac{1}{b} \int_0^b V(x) \cos \frac{m\pi}{2b} x dx$$

$$\text{第一个禁带宽度 } E_{g_1} = 2|V_1|, \text{以 } m=1 \text{ 代入上式, } E_{g_1} = \frac{m\omega^2}{b} \int_0^b (b^2 - x^2) \cos \frac{\pi x}{2b} dx$$

利用积分公式 $\int u^2 \cos mu du = \frac{u}{m^2} [(mu \sin mu + 2 \cos mu)] - \frac{2}{m^3} \sin mu$ 得

$$E_{g_1} = \frac{16m\omega^2}{\pi^3} b^2 \text{ 第二个禁带宽度 } E_{g_2} = 2|V_2|, \text{以 } m=2 \text{ 代入上式, 代入上式}$$

$$E_{g_2} = \frac{m\omega^2}{b} \int_0^b (b^2 - x^2) \cos \frac{\pi x}{b} dx \text{ 再次利用积分公式有 } E_{g_2} = \frac{2m\omega^2}{\pi^2} b^2$$

4.6 由相同原子组成的一维原子链, 每个原胞中有两个原子, 原胞长度为 a , 原胞内有两个原子相对距离为 b

(1) 根据紧束缚近似, 值计入近邻相互作用, 写出 s 态对应的晶体波函数形式

(2) 求出相应的 $E(k)$ 函数

解 (1) 单原子紧束缚态的波函数 $\psi_{\vec{k}}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} \exp[i\vec{k} \cdot R_m] \varphi_i(r - R_m)$ 变为

$$\psi_{\vec{k}}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} \sum_d \exp[i\vec{k} \cdot (R_m + d)] \varphi_i(r - R_m - d)$$

其中 d 可以去 0 和 b 两个值, 分别表示原胞中两个原子的位置, 用 a, b 表示之

$$\psi_{\vec{k}}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_m} \exp[i\vec{k} \cdot R_m] \{ \exp[i\vec{k} \cdot a] \varphi_i(r - R_m - a) + \exp[i\vec{k} \cdot b] \varphi_i(r - R_m - b) \}$$

(2) 相应的能带函数为

$$E(k) = \varepsilon_i - J_0(0) - \sum_n J(na - a + b) \exp[ik(na - a + b)] + J(na + b) \exp[ik(na + b)]$$

s 态波函数是球对称的, 交叠积分相同, 同时由于 s 态波函数具有偶宇称, $J_1 > 0$

$$E(k) = \varepsilon_i - J_0(0) - J_1 \{ \exp[ik(na - a + b)] + \exp[ik(na + b)] \}$$

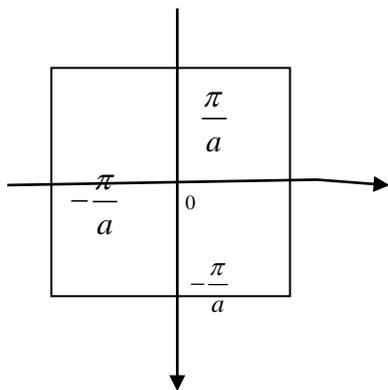
$$E(k) = \varepsilon_i - J_0(0) - J_1 \exp \left[ik \left(\frac{2n-1}{2} a + b \right) \right] \exp \left[-ik \frac{a}{2} \right] + \exp \left[-ik \frac{a}{2} \right]$$

$$E(k) = \varepsilon_i - J_0(0) - 2J_1 \exp \left[ik \left(\frac{2n-1}{2} a + b \right) \right] \cos \left[-ik \frac{a}{2} \right]$$

4.8 (1)证明一个自由简单晶格在第一布里渊区顶角上的一个自由电子动能比该区一边中点大 2 倍。(2)对于一个简单立方晶格在第一布里渊区顶角上的一个自由电子动能比该区面心上大多少?(3)(2)的结果对于二价金属的电导率可能会产生什么影响?

解 (1) 二维简单正方晶格的晶格常数为 a , 倒格子晶格基矢 $A = \frac{2\pi}{a}\hat{i}, B = \frac{2\pi}{a}\hat{j}$

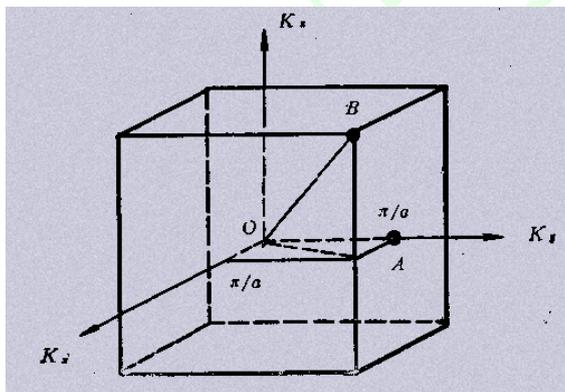
第一布里渊区如图所示



区边中点的波矢为 $K_A = \frac{\pi}{a}\hat{i}$, 角顶 B 点的波矢为 $K_B = \left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{i} + \left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{j}$.

自由电子能量 $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$,

$$A \text{ 点能量 } \varepsilon_A = \frac{\hbar^2}{2m} K_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2,$$



$$A \text{ 点能量 } \varepsilon_A = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2;$$

$$B \text{ 点能量 } \varepsilon_B = \frac{\hbar^2}{2m} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left[3 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right],$$

所以 $\varepsilon_B / \varepsilon_A = 3$

(3)如果二价金属具有简单立方晶格结构, 布里渊区如图所示. 根据自由电子理论,

自由电子的能量为 $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$, Fermi 面应为球面. 由(2)可知, 内切于 4

点的内切球的体积 $\frac{4\pi}{3}\left(\frac{\pi}{a}\right)^3$, 于是在 K 空间中, 内切球内能容纳的电子数为

$$\frac{4\pi}{3}\left(\frac{\pi}{a}\right)^3 \cdot 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} = \frac{\pi}{3}N = 1.047N \quad \text{其中 } V = Na^3$$

二价金属每个原子可以提供 2 个自由电子, 内切球内只能装下每原子 1.047 个电子, 余下的 0.953 个电子可填入其它状态中. 如果布里渊区边界上存在大的能量间隙, 则余下的电子只能填满第一区内余下的所有状态(包括 B 点). 这样, 晶体将只有绝缘体性质. 然而由(b)可知, B 点的能量比 A 点高很多, 从能量上看, 这种电子排列是不利的. 事实上, 对于二价金属, 布里渊区边界上的能隙很小, 对于三维晶体, 可出现一区、二区能带重迭. 这样, 处于第一区角顶附近的高能态的电子可以“流向”第二区中的能量较低的状态, 并形成横跨一、二区的球形 Fermi 面. 因此, 一区中有空态存在, 而二区中有电子存在, 从而具有导电功能. 实际上, 多数的二价金属具有六角密堆和面心立方结构, 能带出现重迭, 所以可以导电.

4.10 向铜中掺锌, 一些铜原子将被锌原子所取代, 采用自由电子模型, 求锌原子与铜原子之比为什么值是, 费米球与第一布里渊区边界相接触? (铜是面心立方晶格, 单价, 锌是二价)

解 设锌原子个数与总原子个数之比为 m , 则有 $2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \times \frac{4\pi}{3} k_F^3 = N$

$$k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} = 3\pi^2 \frac{4+4m}{a^3}$$

面心立方倒格子为体心立方, 晶格常数为 $4\pi/a$, $[111]$ 方向

$$k_{\min} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{3}\pi}{a}$$

$$\text{相切时有 } k_F = k_{\min}, \quad m = \frac{\sqrt{3}}{4}\pi - 1$$

$$\text{所以锌原子与铜原子之比为 } \frac{m}{1-m} = \frac{\sqrt{3}\pi - 4}{\sqrt{3}\pi + 8}$$

4.13 证明面心立方晶体的 s 带紧束缚近似下的 $E(k)$ 函数, 在沿着布里渊区几个主对称轴方向, 可以约化成以下形式

$$(1): \text{沿 } \Gamma X \text{ 方向 } \left(k_x = \frac{2\pi}{a}\mu, k_y = k_z = 0, 0 \leq \mu \leq 1 \right)$$

$$E_s = \varepsilon_s - \beta - 4\gamma(1 + 2\cos \mu\pi)$$

(2): 沿 ΓL 方向, ($k_x = \frac{2\pi}{a}\mu = K_y = K_z$, $0 \leq \mu \leq 1/2$)

$$E_s = \varepsilon_s - \beta - 12\gamma \cos^2 \mu\pi$$

(3): 沿 ΓK 方向, ($k_x = \frac{2\pi}{a}\mu = k_y$, $k_z=0$, $0 \leq \mu \leq 3/4$)

$$E_s = \varepsilon_s - \beta - 4\gamma(\cos^2 \mu\pi + 2\cos \mu\pi)$$

(4): 沿 ΓW 方向, ($k_x = \frac{2\pi}{a}\mu$, $k_z=0$, $k_y = \frac{1}{2}\mu\frac{2\pi}{a}$, $0 \leq \mu \leq 1$)

$$E_s = \varepsilon_s - \beta - 4\gamma\left(\cos \mu\pi \cos \frac{\mu\pi}{2} + \cos \mu\pi + \cos \frac{\mu\pi}{2}\right)$$

解: 面心立方点阵最紧邻近似下 S 的电子紧束缚近似能带为

$$\varepsilon(k) = E_s - \beta - 4\gamma\left(\cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_y a + \cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_z a + \cos \frac{1}{2}k_y a \cos \frac{1}{2}k_z a\right)$$

(1): 沿 ΓX 方向, 将 $k_x = \frac{2\pi}{a}\mu$, $k_x = k_y = 0$, 代入 (1) 得:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= E_s - \beta - 4\gamma\left(\cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_y a + \cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_z a + \cos \frac{1}{2}k_y a \cos \frac{1}{2}k_z a\right) \\ &= E_s - \beta - 4\gamma(1 + 2\cos \mu\pi) \end{aligned}$$

(2): 沿 ΓL 方向, 将 $k_x = \frac{2\pi}{a}\mu = K_y = K_z$, 代入 (1) 得:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= E_s - \beta - 4\gamma\left(\cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_y a + \cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_z a + \cos \frac{1}{2}k_y a \cos \frac{1}{2}k_z a\right) \\ &= E_s - \beta - 12\gamma \cos^2 \mu\pi \end{aligned}$$

(3): 沿 ΓK 方向, 将 $k_x = \frac{2\pi}{a}\mu = k_y$, $k_z=0$ 代入 (1) 得:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= E_s - \beta - 4\gamma\left(\cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_y a + \cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_z a + \cos \frac{1}{2}k_y a \cos \frac{1}{2}k_z a\right) \\ &= E_s - \beta - 4\gamma(\cos^2 \mu\pi + 2\cos \mu\pi) \end{aligned}$$

(4): 沿 ΓW 方向, 将 $k_x = \frac{2\pi}{a}\mu$, $k_z = 0, k_y = \frac{1}{2}\mu\frac{2\pi}{a}$ 代入 (1) 得:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= E_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_y a + \cos \frac{1}{2}k_x a \cos \frac{1}{2}k_z a + \cos \frac{1}{2}k_y a \cos \frac{1}{2}k_z a \right) \\ &= E_s - \beta - 4\gamma \left(\cos \mu\pi \cos \frac{\mu\pi}{2} + \cos \mu\pi + \cos \frac{\mu\pi}{2} \right) \end{aligned}$$

小木虫物理版

第五章 习题

5.1 设一维晶体的电子能带可以写成 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

其中 a 为晶格常数, 计算

- 1) 能带的宽度
- 2) 电子在波矢 k 的状态时的速度
- 3) 能带底部和能带顶部电子的有效质量

解 1) 能带的宽度的计算 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

$$\text{能带底部 } k=0 \quad E(0) = 0$$

$$\text{能带顶部 } k = \frac{\pi}{a} \quad E\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$$

$$\text{能带宽度 } \Delta E = E\left(\frac{\pi}{a}\right) - E(0) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$$

2) 电子在波矢 k 的状态时的速度

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

$$\text{电子的速度 } v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$$

$$v(k) = \frac{\hbar}{ma} \left(\sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka \right)$$

3) 能带底部和能带顶部电子的有效质量 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

$$\text{电子的有效质量 } m^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{m}{\cos ka - (1/2) \cos 2ka}$$

$$\text{能带底部 } k=0 \quad \text{有效质量 } m^* = 2m$$

$$\text{能带顶部 } k = \frac{\pi}{a} \quad \text{有效质量 } m^* = -\frac{2}{3}m$$

5.2 晶格常数为 2.5 \AA 的一维晶格, 当外加 10^2 V/m 和 10^7 V/m 电场时, 试分别估算电子自能带底运动到能带顶所需要的时间

解 对晶体施加压力电场, 电子在电场作用下不断改变状态, 表现为电子在 \vec{k} 空间的运动,

$$\text{有晶体中电子运动的准经典运动方程 } \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = e\vec{E}$$

$$\text{则电子在 } \vec{k} \text{ 空间的速度 } \frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e\vec{E}}{\hbar}$$

$$\text{顶与带底相距 } \frac{\pi}{a} \text{ 故所需时间 } t = \frac{\frac{\pi}{a}}{\frac{e\vec{E}}{\hbar}} = \frac{\hbar\pi}{ae\vec{E}}$$

$$E_1 = 10^2 \text{ V/m 时 } t = 8.3 \times 10^{-8} \text{ s}$$

$$E_2 = 10^7 \text{ V/m 时 } t = 8.3 \times 10^{-13} \text{ s}$$

$$5.5 \text{ 设电子等能面为椭球 } E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$$

外加磁场 \mathbf{B} 相对于椭球主轴方向余弦为 α, β, γ

1) 写出电子的准经典运动方程

$$2) \text{ 证明电子绕磁场回转频率为 } \omega = \frac{qB}{m^*}. \text{ 其中 } m^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}}$$

$$\text{解 恒定磁场中电子运动的基本方程 } \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}$$

$$\text{电子的速度 } \vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

$$\text{电子能量 } E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m_3}$$

$$\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \frac{\partial E}{\partial k_1} \hat{k}_1 + \frac{\partial E}{\partial k_2} \hat{k}_2 + \frac{\partial E}{\partial k_3} \hat{k}_3$$

$$\nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{\hbar^2 k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{\hbar^2 k_3}{m_3} \hat{k}_3$$

$$\text{电子的速度 } \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{\hbar k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{\hbar k_3}{m_3} \hat{k}_3$$

$$\text{磁感应强度 } \vec{B} = B(\hat{k}_1 \alpha + \hat{k}_2 \beta + \hat{k}_3 \gamma)$$

电子运动方程 $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}$

应用关系 $\hat{k}_1 \times \hat{k}_2 = \hat{k}_3$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -qB \left[\left(\frac{k_1}{m_1} \hat{k}_1 + \frac{k_2}{m_2} \hat{k}_2 + \frac{k_3}{m_3} \hat{k}_3 \right) \times (\hat{k}_1 \alpha + \hat{k}_2 \beta + \hat{k}_3 \gamma) \right]$$

—— 电子运动方程

$$\begin{cases} \frac{dk_1}{dt} = -qB \left(\frac{k_2}{m_2} \gamma - \frac{k_3}{m_3} \beta \right) \\ \frac{dk_2}{dt} = -qB \left(\frac{k_3}{m_3} \alpha - \frac{k_1}{m_1} \gamma \right) \\ \frac{dk_3}{dt} = -qB \left(\frac{k_1}{m_1} \beta - \frac{k_2}{m_2} \alpha \right) \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{dk_1}{dt} + qB \left(\frac{k_2}{m_2} \gamma - \frac{k_3}{m_3} \beta \right) = 0 \\ \frac{dk_2}{dt} + qB \left(\frac{k_3}{m_3} \alpha - \frac{k_1}{m_1} \gamma \right) = 0 \\ \frac{dk_3}{dt} + qB \left(\frac{k_1}{m_1} \beta - \frac{k_2}{m_2} \alpha \right) = 0 \end{cases}$$

令 $k_1 = k_1^0 e^{i\omega t}$, $k_2 = k_2^0 e^{i\omega t}$, $k_3 = k_3^0 e^{i\omega t}$

$$\begin{cases} \frac{dk_1}{dt} + qB \left(\frac{k_2}{m_2} \gamma - \frac{k_3}{m_3} \beta \right) = 0 & i\omega k_1^0 + \frac{qB\gamma}{m_2} k_2^0 - \frac{qB\beta}{m_3} k_3^0 = 0 \\ \frac{dk_2}{dt} + qB \left(\frac{k_3}{m_3} \alpha - \frac{k_1}{m_1} \gamma \right) = 0 & i\omega k_2^0 + \frac{qB\alpha}{m_3} k_3^0 - \frac{qB\gamma}{m_1} k_1^0 = 0 \\ \frac{dk_3}{dt} + qB \left(\frac{k_1}{m_1} \beta - \frac{k_2}{m_2} \alpha \right) = 0 & i\omega k_3^0 + \frac{qB\beta}{m_1} k_1^0 - \frac{qB\alpha}{m_2} k_2^0 = 0 \end{cases}$$

k_1^0, k_2^0, k_3^0 有非零解, 系数行列式为零

$$\begin{cases} i\omega k_1^0 + \frac{qB\gamma}{m_2} k_2^0 - \frac{qB\beta}{m_3} k_3^0 = 0 \\ i\omega k_2^0 + \frac{qB\alpha}{m_3} k_3^0 - \frac{qB\gamma}{m_1} k_1^0 = 0 \\ i\omega k_3^0 + \frac{qB\beta}{m_1} k_1^0 - \frac{qB\alpha}{m_2} k_2^0 = 0 \end{cases} \quad \begin{vmatrix} i\omega & \frac{qB\gamma}{m_2} & -\frac{qB\beta}{m_3} \\ -\frac{qB\gamma}{m_1} & i\omega & \frac{qB\alpha}{m_3} \\ \frac{qB\beta}{m_1} & -\frac{qB\alpha}{m_2} & i\omega \end{vmatrix} = 0$$

$$i\omega \left\{ -\omega^2 + \frac{(qB)^2}{m_2 m_3} \alpha^2 + \frac{(qB)^2}{m_1 m_2} \gamma^2 + \frac{(qB)^2}{m_1 m_3} \beta^2 \right\} = 0$$

$\omega = 0$ 无意义

$$\text{旋转频率 } \omega = qB \sqrt{\frac{1}{m_2 m_3} \alpha^2 + \frac{1}{m_1 m_2} \gamma^2 + \frac{1}{m_1 m_3} \beta^2}$$

$$\omega = qB \sqrt{\frac{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}{m_1 m_2 m_3}} \quad \omega = \frac{qB}{m^*}$$

$$\text{其中 } m^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 \alpha^2 + m_2 \beta^2 + m_3 \gamma^2}}$$

小木虫物理版

第六章 习题

6.2 在低温下金属钾的摩尔热容量的实验结果可写成 $C_e = 2.08T + 2.57T^3$ mJ/mol·K

如果一个摩尔的金属钾有 $N = 6 \times 10^{23}$ 个电子, 求钾的费米温度 T_F .

解 一摩尔的电子对热容的贡献 $C_V = N_0 \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{E_F^0} \right) k_B$

与实验结果比较 $C_e = 2.08T + 2.57T^3$ mJ/mol·K

$$N_0 \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{k_B T_F} \right) k_B = 2.08 \times 10^{-3} \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}$$

$$\text{费米温度 } T_F = N_0 \frac{\pi^2 k_B}{2 \times 2.08 \times 10^{-3}} = 19624 \text{ K}$$

6.4 设 N 个电子组成简并的自由电子气, 体积为 V , 证明 $T=0\text{K}$ 时

1) 每个电子的平均能量 $\bar{U} = \frac{3}{5} E_F^0$

2) 自由电子气的压强满足 $pV = \frac{2}{3} N\bar{U}$

解 自由电子的能态密度 $N(E) = 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$

$$T=0 \text{ K, 费米分布函数 } f(E) = \begin{cases} 1 & (E \leq E_F^0) \\ 0 & (E > E_F^0) \end{cases}$$

$$\text{电子总数 } N = \int_0^\infty N(E) f(E) dE$$

$$\text{电子平均能量 } \bar{U} = \frac{\int_0^{E_F^0} EN(E) dE}{\int_0^{E_F^0} 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2} dE} \quad \bar{U} = \frac{3}{5} E_F^0$$

将电子气看作是理想气体, 压强 $p = \frac{2}{3} n\bar{U}$

$$p = \frac{2}{3} \frac{N}{V} \bar{U} \quad pV = \frac{2}{3} N\bar{U}$$