

# 中科院固体物理考 研真题解析及考研 辅导(2006)

**soffeeswx**  
**2006**

# 前 言

本资料主要用于中科院的固体物理考研参考。中科院的很多研究所的硕士入学考试都有固体物理(均为可选),例如半导体所、高能物理所、物理所、金属所、上海应用物理研究所、上海技术物理研究所和上海硅酸盐研究所等,这表明固体物理这门课程对我们以后在研究生阶段的学习和研究是非常重要的,因此我们在这门课程的复习过程中要认真对待,对教材的相关内容要理解透彻。

本资料不作理论研究用,仅用于考研复习参考资料,主要是参照中科院的新大纲来编写的。大纲中给出的参考资料有两本,分别为教材一《固体物理基础》(阎守胜编)和教材二《固体物理学》(黄昆编),另外,根据很多同学的推荐本人再向大家推荐一本教材,就是方俊鑫和陆栋主编的《固体物理学(上册)》,在本资料里把它称为教材三。这三本教材中最重要的还是教材二,其中主要是前六章,希望大家都能仔细复习。

本资料按照新大纲要求分为七章,每章都分为三部分(除第三章外):考试指导、基本知识点和试题分析。考试指导是来自于本人考研复习的经验,纯属个人意见,希望能对大家有帮助。基本知识点大多都是考试重点,不是重点内容的将会说明。试题分析是很重要的部分,我们要通过例题来加强对知识的理解和掌握,通过分析解题来进一步抓住考点。另外,本资料例题均选自于往年考试真题,因为真题最具有参考性,解题过程中最重要的是知识点分析,其答案仅供参考。

由于本人知识有限,本资料在编写过程中定有一些不妥或错误之处,诚恳大家在以后的交流中批评、指正。

# 中科院研究生院硕士研究生入学考试 《固体物理》考试大纲

本《固体物理》考试大纲适用于中国科学院凝聚态物理及相关专业的硕士研究生入学考试。《固体物理》是研究固体的结构、组成粒子的相互作用以及运动规律的学科，是物理研究的一个重要组成部分，是许多学科专业的基础课程，其主要内容包括晶体结构、晶格振动、能带理论和金属电子论等内容。要求考生深入理解其基本概念，有清楚的物理图象，能够熟练掌握基本的物理方法，并具有综合运用所学知识分析问题和解决问题的能力。

## （一）考试内容

### 一、 晶体结构

- 1、 单晶、准晶和非晶的结构上的差别
- 2、 晶体中原子的排列特点、晶面、晶列、对称性和点阵的基本类型
- 3、 简单的晶体结构
- 4、 倒易点阵和布里渊区
- 5、 X 射线衍射条件、基元的几何结构因子及原子形状因子

### 二、 固体的结合

- 1、 固体结合的基本形式
- 2、 分子晶体与离子晶体，范德瓦尔斯结合，马德隆常数

### 三、 晶体中的缺陷和扩散

- 1、 晶体缺陷：线缺陷、面缺陷、点缺陷
- 2、 扩散及微观机理
- 3、 位错的物理特性
- 4、 离子晶体中的点缺陷和离子性导电

### 四、 晶格振动与晶体的热学性质

- 1、 一维链的振动：单原子链、双原子链、声学支、光学支、色散关系

- 2、 格波、简正坐标、声子、声子振动态密度、长波近似
- 3、 固体热容：爱因斯坦模型、德拜模型
- 4、 非简谐效应：热膨胀、热传导
- 5、 中子的非弹性散射测声子能谱

## 五、 能带理论

- 1、 布洛赫定理
- 2、 近自由电子模型
- 3、 紧束缚近似
- 4、 费密面、能态密度和能带的特点

## 六、 晶体中电子在电场和磁场中的运动

- 1、 恒定电场作用下电子的运动
- 2、 用能带论解释金属、半导体和绝缘体，以及空穴的概念
- 3、 恒定磁场中电子的运动
- 4、 回旋共振、德·哈斯-范·阿尔芬效应

## 七、 金属电子论

- 1、 金属自由电子的模型和基态性质
- 2、 金属自由电子的热性质
- 3、 电子在外加电磁场中的运动、漂移速度方程、霍耳效应

## （二）考试要求

### 一、晶体结构

1. 理解单晶、准晶和非晶材料原子排列在结构上的差别
2. 掌握原胞、基矢的概念，清楚晶面和晶向的表示，了解对称性和点阵的基本类型
3. 了解简单的晶体结构
4. 掌握倒易点阵和布里渊区的概念，能够熟练地求出倒格子矢量和布里渊区

5. 了解 X 射线衍射条件、基元的几何结构因子及原子形状因子

## 二、 固体的结合

1. 了解固体结合的几种基本形式
2. 理解离子性结合、共价结合、金属性结合、范德瓦尔斯结合等概念

## 三、 晶体中的缺陷和扩散

1. 掌握线缺陷、面缺陷、点缺陷的概念和基本的缺陷类型
2. 了解扩散及微观机理
3. 了解位错的物理特性
4. 大致了解离子晶体中的点缺陷和离子性导电

## 四、 晶格振动与晶体的热学性质

- a) 熟练掌握并理解其物理过程，要求能灵活应用：一维链的振动（单原子链、双原子链）、声学支、光学支、色散关系
- b) 清楚掌握格波、简正坐标、声子、声子振动态密度、长波近似等概念
- c) 熟练掌握并理解其物理过程，要求能灵活应用：固体热容：爱因斯坦模型、德拜模型
- d) 了解非简谐效应：热膨胀、热传导
- e) 了解中子的非弹性散射测声子能谱

## 五、 能带理论

- a) 深刻理解布洛赫定理
- b) 熟练掌握并理解其物理过程，要求能灵活应用：近自由电子模型
- c) 熟练掌握并理解其物理过程，要求能灵活应用：紧束缚近似
- d) 深刻理解费密面、能态密度和能带的特点

## 六、 晶体中电子在电场和磁场中的运动

- a) 熟练掌握并理解其物理过程：恒定电场作用下电子的运动
- b) 能够用能带论解释金属、半导体和绝缘体，掌握空穴的概念

- c) 熟练掌握并理解其物理过程：恒定磁场中电子的运动
- d) 能够解释回旋共振、德·哈斯-范·阿尔芬效应

## 七、 金属电子论

- a) 熟练掌握金属自由电子的模型和基态性质
- b) 了解金属自由电子的热性质
- c) 熟练掌握并理解其物理过程：电子在外加电磁场中的运动、漂移速度方程、霍耳效应

## （三）主要参考书目

- 1、 阎守胜编著，《固体物理学基础》北京大学出版社，2003 年 8 月
- 2、 黄昆原著，韩汝琦改编，《固体物理学》高等教育出版社，1988 年 10 月

# 第一章 晶体结构

## [考试指导]

根据往年试题来看,本章主要是概念题,出题的难度不是太大,属于一般的基础题目,所以应该充分重视,该得的一定不能丢。近几年这个情况没变,一般都是在第一个大题。本章属于基础知识章节,复习的重点还是前4个**基本知识点**对各个概念的理解一定要透彻。

## [基本知识点]

### 1. 晶体,准晶和非晶

#### 1) 三者的区别:

晶体:排列长程有序,即原子排列有周期性。

非晶:排列长程无序,短程有序。

准晶:非长程有序,但具有5次对称性,即有长程的取向序。

#### 2) 一些简单的晶体结构

要清楚掌握一些易考的晶体结构如:NaCl晶体和CsCl晶体以及一些具有面心立方结构的金属晶体。

### 2. 关于晶格的一些基本概念

#### 1) 原胞

定义:一个晶格最小的周期性重复单元。

有些书上将其严格定义为固体物理学原胞,与结晶学原胞(晶胞)和布拉菲原胞相区别。

结晶学原胞简称晶胞,也是固体物理学中的惯用晶胞,在教材一中结晶学原胞又叫单胞或惯用单胞(参见教材一 P34)。布拉菲原胞就是那14种布拉菲格子,所以在简单格子中,结晶学原胞和布拉菲原胞是相同的,而在复式晶格中两者不同(例如在NaCl晶体和CsCl晶体中)。此方面内容可以结合教材三 P18来复习。在下面的例二中,我们具体以NaCl晶体来分析它们的区别。

## 2) 基矢

是指原胞的边矢量。这里要提醒大家的是：要把体心立方晶格和面心立方晶格的基矢表达式记牢。

## 3) 晶面系(也叫晶面族)，晶向和密勒指数

晶面系是一组平行等距的晶面，要注意的是：一个晶面系除了有平行等距的特点以外，还有一个特点就是它包含了晶体中的所有格点。

晶向为晶面的法线方向，而表征晶面取向的互质整数称为晶面系的密勒指数。后面我们还会讨论它和晶面间距的关系。

## 4) 晶格分为简单晶格和复式晶格。

简单晶格中每个原胞中含有一个原子，具有体心立方结构的碱金属和具有面心立方结构的 Au、Ag、Cu 晶体都是简单晶格。

复式晶格中每个原胞中含有两个或两个以上的原子，比较常见的有 NaCl 晶格、CsCl 结构和具有金刚石结构的晶格(例如晶体 Si)

# 3. 晶体的对称性

## 1) 点群和 7 个晶系

点对称操作：分为转轴、镜面和中心反演。

8 种可能存在的独立的对称元素：1, 2, 3, 4, 6,  $\bar{1}$  (中心反演  $i$ ),  $\bar{2}$  (镜面),  $\bar{4}$ 。要会证明为什么不存在 5 次轴或 7 次轴(教材一 P28 和教材二 P30)。

这些点对称操作组成的对称操作群称为点群。这些点群一共有 32 种，按照点群对称性有 7 种布拉菲格子，称为 7 个晶系，即每个晶系具有一定的点群操作。

## 2) 空间群和 14 个布拉菲格子

空间群由平移对称操作和点对称操作组成，总数为 230 个，而其中包含 73 个简单空间群(也叫点空间群)。

按空间群分为 14 个布拉菲格子，每个布拉菲格子都有一定的空间群。

所以同一晶系中可以有不同的布拉菲格子，例如在立方晶系中，简单立方、体心立方和面心立方有着相同的点群操作和不同的空间群操作。

# 4. 倒易点阵和布里渊区

## 1) 倒格子



倒格子是常考知识点。首先，倒格子基矢与正格子基矢的运算规则一定要牢记，另外还要会一些简单的矢量运算。

倒格子基矢  $\vec{b}_j$  与正格子基矢  $\vec{a}_i$  的重要关系式：

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \begin{cases} = 2\pi & (i = j) \\ = 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

与正格子的关系：有着相同的点群对称元素(参阅教材一 P43)；正格子原胞体积和倒格子原胞体积的乘积为  $8\pi^3$ 。

## 2) 倒格矢(可参阅教材二 P18 和教材三 P30)

倒格矢  $\vec{G}_n = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$  与正格子中的晶面系  $(hkl)$  相正交，其简单证明最好也掌握：

倒格矢  $\vec{G}_n = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$  的长度与正格子中的晶面系  $(hkl)$  的面间距成反比： $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_n|}$ ，所以对于立方晶系(包括简单立方、体心立方和面心立方)的晶体有(设晶格常数为  $a$ )

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_n|} = \frac{2\pi}{\left(\frac{2\pi}{a}\right)\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

## 3) 布里渊区

定义：在倒格子空间，以一格点为原点，则由此格点与其它格点的连线的垂直平分面所围成的区域称为布里渊区。另外，其中包含原点在内的最小封闭区域为第一布里渊区。

简单立方有 6 个最近邻，第一布里渊区为立方体；面心立方有 8 个最近邻和 6 个次近邻，第一布里渊区为 14 面体(也叫截角八面体)；体心立方有 12 个最近邻，第一布里渊区为正 12 面体。

## 5. X 射线衍射，几何结构因子及原子散射因子

以前此知识点也考小题，但从现在这个重新制订的大纲中可以看出，本知识点不是重点，要求简单了解。(具体内容可参阅教材三的相关章节)

1) 布拉格定理:

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

式中  $d_{hkl}$  为晶面族  $(hkl)$  的面间距,  $\theta$  为布拉格角,  $\lambda$  为入射波长。

2) 几何结构因子及原子散射因子

原子散射因子: 原子内所有电子的相干散射振幅与位于原子中心的一个电子的相干散射振幅之比。

几何结构因子: 原胞内所有原子的散射波在所考虑的方向上的振幅与一个电子的散射波的振幅之比。

几何结构因子的公式:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^n f_j e^{2\pi ni(hu_j + kv_j + lw_j)}$$

式中  $n$  表示原胞中所包含的有效原子数,  $f_j$  表示原胞中第  $j$  个原子的散射因子,  $(u_j, v_j, w_j)$  为原胞中第  $j$  个原子的坐标。

## [试题分析]

例一:

(97)一、很多元素晶体有面心立方结构, 试

1. 绘出其晶胞形状, 指出它所具有的对称元素。
2. 说明它的倒易点阵类型及第一布里渊区形状。
3. 面心立方的 Cu 单晶(晶格常数  $a=3.61\text{\AA}$ )的 x 射线衍射图(x 射线波长  $\lambda=1.54$ )中, 为什么不出现(100), (110), (422)和(511)衍射线?
4. 它们的晶格振动色散曲线有什么特点?

参考解答:

1. 各个晶胞形状要牢牢记住, 主要包括简单立方、面心立方和体心立方。立方体所有的对称元素在教材二第 21 页有详细描述。
2. 面心立方和体心立方互为倒易点阵, 面心立方的第一布里渊区是 14 面体(也叫截角八面体), 体心立方的第一布里渊区是正十二面体。

3. 大纲中的考试要求中有“了解 X 射线衍射条件、基元的几何结构因子及原子形状因子”，此章节知识可以参考教材一中的第一章内容。对于面心立方，晶面族(hkl)的衍射强度 I 为

$$I_{hkl} \propto F_{hkl}^2 = f^2 [1 + \cos \pi n(h+k) + \cos \pi n(h+l) + \cos \pi n(k+l)]^2 + f^2 [\sin \pi n(h+k) + \sin \pi n(h+l) + \sin \pi n(k+l)]^2$$

由此公式可以看出，只有对于衍射面指数为全奇或全偶的衍射面，衍射强度才不为零，所以不出现(100)和(110)衍射线。另外，根据布拉格公式  $\lambda = 2d \sin \theta$  可知， $\lambda \leq 2d$ ，而立方晶系的面间距为

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

所以  $d_{<511>} = 0.69 \text{ \AA}$ ， $d_{<422>} = 0.74 \text{ \AA}$ ，均小于  $\frac{\lambda}{2} = 0.77 \text{ \AA}$ ，因

此也不会出现(422)和(511)衍射线。

4. 对于原胞含有 n 个原子的复式晶格，对一定的波矢 q 有 3 个声学波和(3n-3)个光学波。而对于面心立方的元素晶体，原胞只含有一个原子，所以有 3 支声学波，没有光学波，3 支声学波有 2 支横波和 1 支纵波，而在(100)和(111)波矢方向两支横声支是简并的。

## 例二：

(98)一、简要回答以下问题

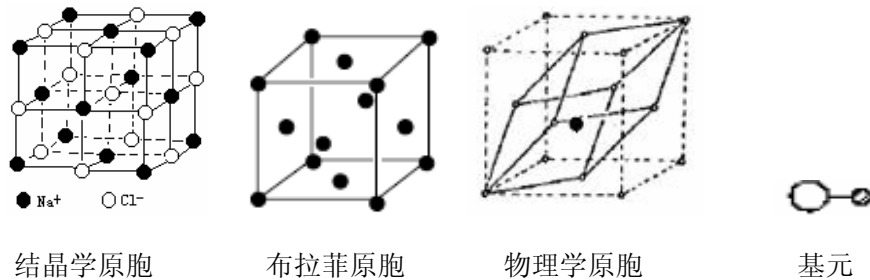
- 1、试绘图表示 NaCl 晶体的结晶学原胞、布拉菲原胞、基元和固体物理学原胞。
- 2、已知三维晶体原胞的体积为  $\Omega$ ，试推导给出倒格子原胞的体积  $\Omega^*$ 。
- 3、假设 CsCl 晶体的 Cs 及 Cl 原子的散射因子分别是  $f_{\text{Cs}}$  和  $f_{\text{Cl}}$ ，试求其结构因子  $F(hkl)$ 。
- 4、试以立方晶体为例列出黄昆方程，并做出定性解释。

## 参考解答：

- 1、本题还是考查基本概念，本题内容主要参考基本知识点的 2.1 和教材

三 P18。这里的固体物理学原胞就是我们通常所说的“原胞”，即在教材二中定义的原胞。这里还要注意在 NaCl 晶体中固体物理学原胞含有两个原子，即一个 Na 原子和一个 Cl 原子。基元是晶体中重复排列的具体单元。

因此，对于 NaCl 晶体有：



2、设晶格的基矢为  $a_1, a_2, a_3$ ，则根据倒格子基矢  $b_1, b_2, b_3$  的定义可以得到

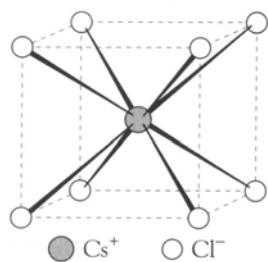
$$\Omega^* = b_1 [b_2 \times b_3] = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^3} [a_2 \times a_3] [a_3 \times a_1] [a_1 \times a_2]$$

应用矢量关系式  $A \times (B \times C) = (A \cdot C)B - (A \cdot B)C$

$$\text{则 } [a_3 \times a_1] \times [a_1 \times a_2] = \{[a_3 \times a_1] \cdot a_2\} a_1 - \{[a_3 \times a_1] \cdot a_1\} a_2 = \Omega a_1$$

$$\text{所以得 } \Omega^* = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^3} [a_2 \times a_3] \Omega a_1 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^2} [a_2 \times a_3] a_1 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

3、CsCl 晶体的结构如下图所示，其基元为一个 Cl 原子和一个 Cs 原子，



它们在晶胞中的坐标分别是  $(0,0,0)$  和  $(1/2, 1/2, 1/2)$ ，  
所以由几何结构因子公式

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^n f_j e^{2\pi ni(hu_j + kv_j + lw_j)}$$

(其中  $(u_j, v_j, w_j)$  为原子坐标)

可求得 CsCl 晶体的几何结构因子

$$F_{hkl} = f_{Cl} + f_{Cs} e^{\pi ni(h+k+l)}$$

4、黄昆方程不是重点，一般很少考到。其具体内容可参考教材二的 P104 页。

黄昆方程为：

$$\ddot{W} = b_{11}W + b_{12}E$$
$$P = b_{21}W + b_{22}E$$

其中， $P$  是宏观极化强度， $E$  是宏观电场强度。

定性解释：第一个方程是决定离子相对振动的动力学方程，第二个方程表示除去正、负离子相对位移产生极化，还要考虑宏观电场存在时的附加极化。

例三：

(99)一、试对晶体进行分类：

- 1、从晶体几何对称性出发分类
- 2、从晶体结合出发分类

**参考解答：** 本题主要考查第一章和第二章关于晶体类型的概念掌握。

- 1、从晶体对称性出发，晶体可以分为 7 个晶系，分别为三斜、单斜、正交、三角、四方、六角和立方晶系。
- 2、从结合类型出发，晶体分为离子晶体、原子晶体、金属晶体和分子晶体，结合方式分别为离子键结合、共价键结合、金属键结合和范德瓦尔斯结合。

例四：

(01)一、简要回答以下问题：

- 1、某种元素晶体具有 6 角密堆结构，试指出该晶体的布拉菲格子类型和其倒格子的类型。
- 2、某元素晶体的结构为体心立方，试指出其格点面密度最大的晶面第的米勒指数，并求出该晶面系相邻晶面的面间距。(设其晶胞参数为  $a$ )
- 3、具有面心立方结构的某元素晶体，它的多晶样品 x 射线衍射谱中，散射角最小的三个衍射峰相应的面指数是什么？

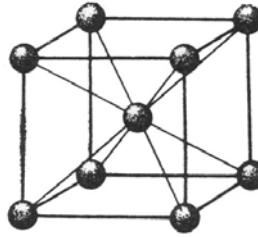
**参考解答：**

- 1、具有 6 角密堆结构，且是元素晶体，即为简单六方格子，其倒格子还是

简单六方格子。

- 2、体心立方晶体结构如右图所示：

面密度是指单位面积上的等效原子数，很容易看出(110)晶面系的格点面密度最大，可以求出此面密度为



$$\rho = \frac{2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{\sqrt{2}}{a^2}$$

且此晶面系相邻晶面的面间距求得为  $\frac{\sqrt{2}}{2}a$ 。

- 3、该题可以结合 97(一)的第 3 小题来解。

首先，由布拉格公式  $\lambda = 2d \sin \theta$  可知，本题中对于波长  $\lambda$  一定的 x 射线，

面间距  $d$  越大，散射角  $\theta$  越小。而面间距  $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ ，再加上面心

立方的衍射峰相应的面指数只能是全奇或全偶，所以相应的面间距从大到小依次为  $d(111)$ 、 $d(200)$ 和  $d(220)$ ，即散射角最小的三个衍射峰相应的面指数依次是(111)、(200)和(220)。

### 例五：

(05)二、简要回答以下问题：

- 1、写出晶体可能有的独立的对称元素；
- 2、按对称类型分类，布拉菲格子的点群类型有几种？空间群类型有几种？  
晶体结构的点群类型有几种？空间群类型有几种？
- 3、某晶体的倒格子结构是体心立方，则该晶体的正格子是什么结构？
- 4、晶体中包含有  $N$  个原胞，每个原胞中有  $n$  个原子，该晶体晶格振动的格波简正模式总数是多少？其中声学波和光学波各有多少？

### 参考解答：

- 1、晶体中 8 种独立的对称元素一定要牢记，它们是 1 次轴，2 次轴，3 次轴，4 次轴，6 次轴，1 次反轴(中心反演)，2 次反轴(镜面)和 4 次反轴。
- 2、首先我们要牢记几个数字：晶体中有 7 个晶系 14 种布拉菲格子，32 个

点群  $\bar{2}30$  个空间群(其中有  $\bar{7}3$  个点空间群)。本题不是常规问法, 不过我们要知道, 按照点群对称性一共有 7 种布拉菲格子, 按空间群分类一共有 14 种布拉菲格子。所以本题答案应该是 7, 14, 32, 230。具体内容请参见教材一 P27 到 P34。

- 3、体心立方和面心立方互为倒易点阵。
- 4、格波模式总数为  $3N$  个, 声学波  $3N$  个, 光学波  $N(3n-3)$  个。参见教材二 P101。

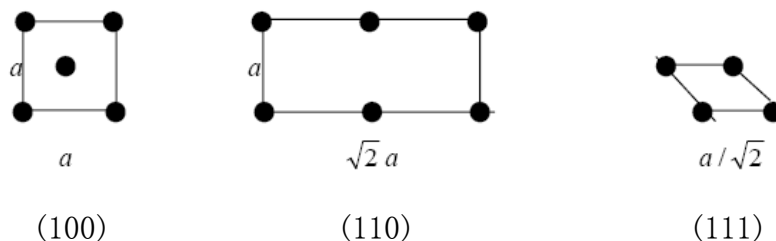
### 例六:

#### (05)三、对面心立方布拉菲格子

- 1、求格点密度最大的三个晶面系的面指数。
- 2、画出各种格点平面上格点的排布。
- 3、设晶胞参数为  $a$ , 分别求出这三个晶面系相邻晶面的面间距。

#### 参考解答:

- 1、根据面心立方结构图我们只需要计算三个晶面系的面密度即(100)、(110)和(111)晶面系。下面是这些晶面系的晶面平面点阵的二维图示



面密度分别为

$$\rho_{100} = \frac{2}{a^2}$$

$$\rho_{110} = \frac{2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{\sqrt{2}}{a^2}$$

$$\rho_{111} = \frac{1}{\frac{\sqrt{3}}{4}a^2} = \frac{4/\sqrt{3}}{a^2}$$

所以有  $\rho_{111} > \rho_{100} > \rho_{110}$

- 2、见上小题。

3、这里我们要特别注意，从严格意义上说对于面心立方晶格不存在(100)和(110)晶面系，因为所谓的晶面系就是要包含晶体的所有格点，显然(100)和(110)晶面系都不能满足，而分别和它们方向相同的(200)和(220)晶面系才满足这个条件。要明白(100)和(110)晶面系所包含的晶面数分别是(200)和(220)晶面系的一半。所以这里实际要求的面间距是(111)、(200)和(220)晶面系的面间距。根据公式

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

求出依次为  $d_{111} = \frac{\sqrt{3}}{3}a$ ,  $d_{200} = \frac{a}{2}$ ,  $d_{220} = \frac{\sqrt{2}}{4}a$

所以由此我们也可以看出,  $d_{111} > d_{200} > d_{220}$

而晶面系的面间距越大，格点面密度就越大，所以有  $\rho_{111} > \rho_{200} > \rho_{220}$ ，这也与小题1的结果相符。

#### 例七:

(05)四、证明：如果一个布拉菲格子有一个对称平面，则存在平行该平面的点阵平面系。

参考解答：本题考查正格子与倒格子的关系以及正格子晶面系和倒格矢的关系。

同一晶格的正格子和倒格子有着相同的点群对称性，例如面心立方和体心立方都具有立方晶系的点群对称元素(它们之间不同的只是空间对称性)。所以，如果正格子有一个对称平面，则其倒格子也有该对称面(对称面即镜面属于点群对称元素)，于是连接镜面内外的两个倒格点则得到垂直于该平面的倒格矢，而一个倒格矢必对应一个垂直于该倒格矢的正格子中的晶面系，所以得证。



## 第二章 固体的结合

### [考试指导]

此章虽不是重点章节，但内容简单易懂，所以要求我们要熟练掌握一些基本概念和公式。大纲要求理解离子性结合、共价结合、金属性结合、范德瓦尔斯结合等概念，值得一提的是，根据往年来看，最可能出题的知识点就是离子性结合和范德瓦尔斯结合。因此，复习本章时，关键是要记住离子性结合和范德瓦尔斯结合相关的几个公式。

根据往年试题来看，本章主要是概念题和简单的计算题，有可能出一道大题或一个小题。所以此部分和第一部分一样，要把真题搞透，公式记牢。可以说，如果此章出题，则题目不会多，但是很可能是“送分”的题目，所以一定要把握住。

### [基本知识点]

#### 1. 固体结合的基本形式

固体结合的基本形式主要有离子性结合、共价键结合、金属性结合和范德瓦尔斯结合，它们对应的晶体类型分别是离子晶体、原子晶体、金属晶体和分子晶体。

#### 2. 分子晶体与离子晶体(本章重点)

##### 1) 分子晶体

靠范德瓦尔斯作用结合，两个原子的范德瓦尔斯结合能为勒纳—琼斯势

$$u(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

式中第一项为重叠排斥作用，第二项为范德瓦尔斯作用能。

含有 N 个原子的晶体的总势能为

$$U = 2N\varepsilon \left[ A_{12} \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - A_6 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

注意在式中  $r$  表示最近邻原子之间的间距,  $A_{12}$ 、 $A_6$  是只与晶体结构有关的晶格求和常数。

## 2) 离子晶体

在离子晶体中, 原胞一般是含有两个原子(严格说是一对正负离子), 靠离子键结合, 一个原胞的能量即一对正负离子的结合能

$$u(r) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{n_1 n_2 n_3} \frac{(-1)^{n_1+n_2+n_3}}{\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}} = -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

其中,  $\alpha$  为马德隆常数, 是一个只与晶体结构有关的正数。

如果晶体中包含  $N$  个原胞(即含有  $2N$  个原子), 则晶体的总内能为

$$U = N \left( -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{6b}{r^n} \right) = N \left( -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n} \right)$$

式中  $\alpha$  为马德隆常数,  $r$  为离子间距,  $b$  为常数,  $A = \frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0}$ ,  $B = 6b$ 。

## [试题分析]

(04)一、

4. 写出离子晶体结合能的一般表达式, 求出平衡态时的离子间距。

**参考解答:** 设晶体含有  $N$  个原子(注意: 教材二中是假设 NaCl 晶体含有  $N$  个原胞, 即含有  $2N$  个原子), 则形成  $N/2$  个离子对, 考虑到每对离子的作用, 晶体结合能的一般表达式为

$$U = \frac{N}{2} \left( -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{6b}{r^n} \right) = \frac{N}{2} \left( -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n} \right) \quad (2-1)$$

平衡态时有  $\frac{dU}{dr} = 0$

即  $\frac{dU}{dr} = \frac{N}{2} \left( \frac{A}{r^2} - \frac{nB}{r^{n+1}} \right) = 0$

所以设平衡态时的离子间距为  $r_0$ ，则有

$$\frac{A}{r_0^2} - \frac{nB}{r_0^{n+1}} = 0$$

求得

$$r_0 = \left( \frac{nB}{A} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (2-2)$$

另外，将(2-2)式代入(2-1)式即得出平衡态时离子晶体的结合能。

(02)二、对惰性元素晶体，原子间的相互作用常采用勒纳—琼斯势

$$u(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

其中  $\sigma$  和  $\varepsilon$  为等待定常数， $r$  为两原子间距

1. 试说明式中两项的物理意义以及物理来源；
2. 证明平衡时的最近邻原子间距  $r_0$  与  $\sigma$  之比为一与晶体结构有关的常数。

**参考解答：**此知识点在教材一、二上都有详细描述。

1. 第一项为重叠排斥作用，起源于泡利原理。第二项为范德瓦尔斯作用能，它是由原子中电荷涨落产生的瞬时电偶极矩所引起的。
2. 设晶体含有  $N$  个原子，则根据每对原子的相互作用势可以给出晶体的结合能为

$$U = \frac{N}{2} \sum_i u(r_i) = 2N\varepsilon \sum_i \left[ \left( \frac{\sigma}{r_i} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_i} \right)^6 \right]$$

设最近邻原子间距为  $r$ ，则  $r_i = \alpha_i r$ ，所以有

$$\begin{aligned} U &= 2N\varepsilon \left[ \sum_i \left( \frac{\sigma}{\alpha_i r} \right)^{12} - \sum_i \left( \frac{\sigma}{\alpha_i r} \right)^6 \right] \\ &= 2N\varepsilon \left[ \left( \sum_i \frac{1}{\alpha_i^{12}} \right) \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \sum_i \frac{1}{\alpha_i^6} \right) \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \end{aligned}$$

令  $A_{12} = \sum_i \frac{1}{\alpha_i^{12}}$  ,  $A_6 = \sum_i \frac{1}{\alpha_i^6}$  , 则得

$$U = 2N\varepsilon \left[ A_{12} \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - A_6 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

平衡时,  $\left. \frac{dU}{dr} \right|_{r=r_0} = 0$

即  $\frac{6A_6\sigma^6}{r_0^7} - \frac{12A_{12}\sigma^{12}}{r_0^{13}} = 0$

所以得  $\frac{r_0}{\sigma} = \left( \frac{2A_{12}}{A_6} \right)^{\frac{1}{6}}$

(97)二、已知原子间相互作用势为  $u(r) = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}$  , 其中  $\alpha, \beta, m, n$  均为大于 0

的常数, 试证明此系统可以处于稳定平衡态的条件是  $n > m$ .

**参考解答:** 本题主要考查系统可以处于稳定平衡态的条件:

$$\left. \frac{dU}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \quad (\text{平衡态})$$

$$\left. \frac{d^2U}{dr^2} \right|_{r=r_0} > 0 \quad (\text{稳定})$$

所以有  $\left. \frac{du}{dr} \right|_{r=r_0} = \frac{m\alpha}{r_0^{m+1}} - \frac{n\beta}{r_0^{n+1}} = 0 \Rightarrow r_0 = \left( \frac{n\beta}{m\alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}}$

因此  $\left. \frac{d^2u}{dr^2} \right|_{r=r_0} = \frac{n\beta}{r_0^{n+2}} (n-m) > 0$

$$\therefore n > m$$

# 第三章 晶体中的缺陷和扩散

## [考试指导]

本章不是重点章节，往年很少考到，但现在中科院新修订的固体物理考试大纲里把它单独编为一部分，所以也应该引起重视。最好要掌握一些基本概念，按照大纲的要求，复习一下教材上的相关章节。

## [基本知识点]

### 1. 缺陷的概念和基本类型

晶体中的缺陷主要有点缺陷、线缺陷和面缺陷。

#### 1) 点缺陷

其物理意义是指：在晶体中的某些格点上，周期性受到了破坏。

晶格中，在热起伏过程中，晶体的某些原子由于剧烈振动而脱离了格点跑到表面上，在内部留下了空格点，即**空位**；或者这些原子进入晶格中的间隙位置，形成**填隙原子**；还有一种情况就是，外来的**杂质原子**进入晶体后，既可以在间隙位置上形成填隙式的杂质，也可以占据空位而形成替位式原子。

这些空位、填隙原子和杂质原子等引起的缺陷叫点缺陷。

#### 2) 线缺陷

当晶格周期性的破坏是发生在晶体内部一条线的周围近邻，就称为线缺陷。

位错就是线缺陷，位错有两种：

(1)刃位错：位错线垂直于滑移方向。

(2)螺位错：位错线平行于滑移方向。

#### 3) 面缺陷

面缺陷将晶体取向不同或结构有异的两部分分开。更一般地，面缺陷是体系自由能相等，但序参量值不同的两部分之间的界面。

### 2. 扩散及微观机理

1) 扩散现象：从微观来看，实际上便是原子的布朗运动。

2) 扩散机制

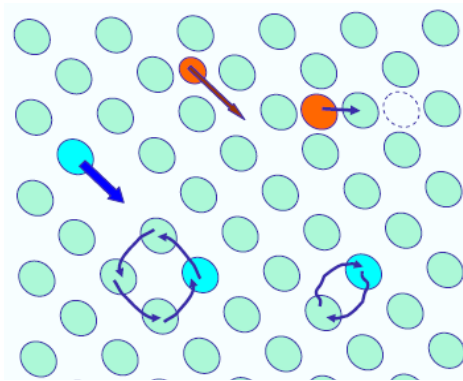
空位扩散机制：

在格点上试图向外扩散的原子，虽然不断尝试，但仅当有一空位出现在它的近邻时，它才实际有可能跳进这一空位从而造成新的空位，这就形成的空位的扩散机制。这种机制是原子扩散的主要机制。

其它扩散机制：

晶体中的扩散除空位机制外，还有填隙原子机制和杂质原子扩散机制等，即原子通过形成填隙原子和杂质原子等进行扩散。

示意图：



原子 □ 空穴(主要机制)

原子 □ 替位式原子

原子 □ 间隙原子

间隙原子单独扩散

## 第四章 晶格振动与晶体的热学性质

### [考试指导]

本章为重点章节，尤其在前三个知识点里最容易出题目，基本上是每年必考。考试题目主要是计算题，也有一些概念题。

因此我们要充分重视本章节，反复复习本章节内容，对一些基本概念要有透彻的理解。只有清楚了物理概念，才能保证对公式的熟练掌握和运用。一些常用的重要公式会在下面的<基本知识点>部分中列出，大部分公式都是需要理解会用的，希望大家有能力的话最好能掌握一些重要公式的推导过程，这样才能保证对本章内容的深刻理解和掌握。

### [基本知识点]

#### 1. 一维原子链的的振动

##### 1) 单原子链

首先看格波解的形式

$$\mu(x) = Ae^{i(\omega t - qx)}$$

在式中  $\mu(x)$  为原子链中位于  $x$  处的原子的随时间变化的位移坐标(即形成格波)，其中  $\omega$  为波的圆频率， $q$  为称为波数。这是在简谐近似下求得的格波解，其物理含义类似于单摆的简谐振动。

其色散关系为

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad (q \text{ 为波数})$$

玻恩—卡曼边界条件：

$$\mu(x + Na) = \mu(x) \Rightarrow e^{-i(Naq)} = 1$$

即

$$q = \frac{2\pi}{Na} \times h, \quad (h = \text{整数})$$

式中  $N$  为单原子链中原胞的数目，所以由边界条件可知， $q$  在  $-\frac{\pi}{a}$  到  $\frac{\pi}{a}$  之间只能取  $N$  个不同的数值。

声子：指格波的量子，其能量为  $\hbar\omega(q)$ 。声子不是真实的粒子，称为“准粒子”，可以结合光子来理解。

## 2) 双原子链(重点)

色散关系：

$$\left. \begin{matrix} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{matrix} \right\} = \beta \frac{m+M}{mM} \left\{ 1 \pm \left[ 1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right]^{1/2} \right\}$$

其推导过程要求掌握。

相邻两原子的振幅比：

$$\left( \frac{B}{A} \right)_{\pm} = -\frac{m\omega_{\pm}^2 - 2\beta}{2\beta \cos aq}$$

玻恩—卡曼边界条件：

$$q = \frac{\pi}{Na} \times h, \quad (h = \text{整数})$$

由  $N$  个原胞组成的一维双原子链， $q$  可以取  $N$  个不同值，每个  $q$  对应两个解，共有  $2N$  个不同的格波。

光学支和声学支：

色散关系中， $\omega_+$  对应的格波称为光学波，光学波声子能量比较大； $\omega_-$  对应的格波称为声学波，声学波声子能量要比光学波声子小得多。

长波极限(指  $q \rightarrow 0$  的情形)：

长声学波中， $q \rightarrow 0$  时，频率  $\omega_-$  正比于  $q$ ，此时长声学波可以近似看作是连续介质时的弹性波，即满足  $\omega = vq$ 。另外，对于长声学波， $q \rightarrow 0$  时

$\omega_- \rightarrow 0$ ，所以有  $\left( \frac{B}{A} \right)_- \rightarrow 1$ ，这表明此时原胞中两种原子的运动完全一致。

长光学波中， $q \rightarrow 0$  时



$$\omega_+ \rightarrow \sqrt{\frac{2\beta(m+M)}{mM}}, \quad \left(\frac{B}{A}\right)_+ \rightarrow -\frac{m}{M}$$

所以长光学波的实际上是描述了两种原子各自形成的格子的相对振动，在振动过程中保持质心不变。

离子晶体的长光学波有特别意义，因为此时产生了一定的电偶极矩，可以和电磁波作用，从而会引起对远红外光的强烈吸收，要记住这个效应。

## 2. 三维晶格的振动

### 1) 色散关系

了解一下推导过程，重要的是结论：

在三维晶格中，对一定的波矢  $\vec{q}$  有 3 支声学波和  $(3n-3)$  支光学波，其中  $n$  为原胞中原子的数目。

晶体中不同的  $\vec{q}$  的总数为  $N$ ，所以不同的格波的总数为  $3nN$ 。

### 2) 波矢 $\vec{q}$ 在 $\vec{q}$ 空间的分布：

周期性边界条件为：(要求理解并记住)

$$\mu(\vec{R}_l + N_1 \vec{a}_1) = \mu(\vec{R}_l)$$

$$\mu(\vec{R}_l + N_2 \vec{a}_2) = \mu(\vec{R}_l)$$

$$\mu(\vec{R}_l + N_3 \vec{a}_3) = \mu(\vec{R}_l)$$

分布密度： $V/(2\pi)^3$

## 3. 晶体比热的量子理论

### 1) 量子比热

量子理论下晶格振动能量量子化：

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

晶体中有  $N$  个原子时，其量子热容为：

$$C_V = k_B \sum_{i=1}^{3N} \left( \frac{\hbar\omega_i}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_i/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_i/k_B T} - 1)^2}$$

若存在频率分布函数且可积，则可以写成：

$$C_V(T) = k_B \int \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} g(\omega) d\omega$$

此公式在一维、二维和三维情况下都成立。

## 2) 爱因斯坦模型

原理：假设晶体中各原子振动相互独立，且所有原子都有同一频率  $\omega_0$ ，直接得出晶体比热为

$$C_V = 3Nk_B \frac{(\hbar \omega_0 / k_B T)^2 e^{\hbar \omega_0 / k_B T}}{(e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1)^2}$$

优点：理论上可以反映出晶体比热在低温时下降的基本趋势。

缺点：在低温时，该模型理论值与实验不相符。

## 3) 德拜模型

原理：考虑了频率分布，把晶格当做弹性介质，忽略晶格中纵波和横波的区别，其色散关系为  $\omega = cq$ ，其中  $c$  为常数。另外，还假定存在一个最大频率  $\omega_m$ 。

德拜模型下三维晶体的热容为：

$$C_V(T) = \frac{9R}{\omega_m^3} \int_0^{\omega_m} \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} \omega^2 d\omega$$

所以在低温极限下，三维晶格的德拜热容与  $T^3$  成正比，这就是非常重要的德拜  $T^3$  定律。

德拜模型下一维原子链的热容在低温极限下为：

$$C_V(T) = \frac{Rk_B T}{\hbar \omega_m} \int_0^\infty \frac{\xi^2 e^\xi}{(e^\xi - 1)^2} d\xi$$

此时，比热与  $T$  成正比。

## 4. 晶格振动模式密度

1) 物理意义：表征频率分布的函数。

2) 一般表达式：

$$g(\omega) = \frac{V}{8\pi^3} \int \frac{dS}{|\nabla_q \omega(q)|}$$

一维单原子链：

$$g(\omega)d\omega = 2 \times \frac{L}{2\pi} dq \Rightarrow g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{dq}{d\omega}$$

二维单晶情况下：

$$g(\omega)d\omega = \frac{S}{4\pi^2} 2\pi q dq \Rightarrow g(\omega) = \frac{Sq}{2\pi} \frac{dq}{d\omega}$$

若是在德拜近似下，且考虑到一定的  $q$  对应两支格波，则有

$$g(\omega) = \frac{S}{\pi c^2} \omega$$

三维情况下：

$$g(\omega) = \frac{Vq^2}{2\pi^2} \frac{dq}{d\omega}$$

若是在德拜近似下，且考虑到一定的  $q$  对应三支格波，则有

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \omega^2$$

## [试题分析]

例一：

(05)五、

- 1) 对一体积为  $V$  的晶体，求周期性边界条件允许的格波波矢  $q$  在  $q$  空间的分布密度，以及在第一布里渊区  $q$  的取值总数。
- 2) 上小题 1) 中，若为电子波，结果如何？
- 3) 用德拜近似求一维单原子链的热容  $C_V(T)$  的表达式，并证明在低温极限下，它与温度  $T$  成正比。

4) 晶格中不同简正模的格波之间达到热平衡的物理原因。

**参考解答：**

- 1) 对于晶体的周期性边界条件(即玻恩—卡曼边界条件)要理解性记忆。本题解法在教材二 P99 有具体描述, 在这里我们要把一些细节推导解释的更清楚一些。首先,  $q$  空间以倒格矢  $b_1, b_2, b_3$  为基矢, 即  $q$  可以写成

$$\vec{q} = x_1 \vec{b}_1 + x_2 \vec{b}_2 + x_3 \vec{b}_3 \quad (4-1)$$

三维情况下, 周期性边界条件为

$$\begin{aligned} \mu(\vec{R}_l + N_1 \vec{a}_1) &= \mu(\vec{R}_l) \\ \mu(\vec{R}_l + N_2 \vec{a}_2) &= \mu(\vec{R}_l) \\ \mu(\vec{R}_l + N_3 \vec{a}_3) &= \mu(\vec{R}_l) \end{aligned} \quad (4-2)$$

其中,  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  为晶格基矢,  $N_1, N_2, N_3$  为沿三基矢方向的原胞数, 总原胞数  $N = N_1 N_2 N_3$ 。由边界条件可得

$$\begin{aligned} \mu(\vec{R}_l) \exp\{-i(\vec{q} \cdot N_i \vec{a}_i)\} &= \mu(\vec{R}_l), \quad (i=1, 2, 3) \\ \text{即} \quad \begin{cases} \vec{q} \cdot N_1 \vec{a}_1 = h_1 2\pi \\ \vec{q} \cdot N_2 \vec{a}_2 = h_2 2\pi \\ \vec{q} \cdot N_3 \vec{a}_3 = h_3 2\pi \end{cases} & \quad (4-3) \end{aligned}$$

其中,  $h_1, h_2, h_3$  为整数。将(4—1)式代入(4--3)式即得

$$2\pi N_1 x_1 = h_1 2\pi, \quad 2\pi N_2 x_2 = h_2 2\pi, \quad 2\pi N_3 x_3 = h_3 2\pi$$

$$\text{所以有} \quad x_1 = \frac{h_1}{N_1}, \quad x_2 = \frac{h_2}{N_2}, \quad x_3 = \frac{h_3}{N_3}$$

$$\text{即} \quad \vec{q} = \frac{h_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{h_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{h_3}{N_3} \vec{b}_3$$

上式即代表了边界条件所允许的  $q$  空间均匀分布的所有格点。设倒格子原胞体积为  $\Omega^*$ , 正格子原胞体积为  $\Omega$ , 则有  $\Omega^* \Omega = (2\pi)^3$ 。所以边界

条件所允许的  $q$  空间中每个格点所占据的体积为

$$\frac{\bar{b}_1}{N_1} \left( \frac{\bar{b}_2}{N_2} \times \frac{\bar{b}_3}{N_3} \right) = \frac{\Omega^*}{N}$$

所以，边界条件允许的格波波矢  $q$  在  $q$  空间的分布密度

$$\rho = \frac{1}{\frac{\bar{b}_1}{N_1} \left( \frac{\bar{b}_2}{N_2} \times \frac{\bar{b}_3}{N_3} \right)} = \frac{N}{\Omega^*} = \frac{N\Omega}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

另外，因为第一布里渊区的体积等于倒格子原胞的体积，所以第一布里

渊区  $q$  的取值总数为： $\rho \cdot \Omega^* = N$

- 2) 上小题中若为电子波，则是从玻恩—卡曼边界条件出发，求出三维  $\bar{k}$  空间中电子波矢  $\bar{k}$  的分布密度。这属于第五章能带论的相关内容(具体请参阅教材一 P55 和教材二 P156)。其求解过程与上小题类似，其中，边界条件为

$$\begin{aligned}\psi(\bar{r} + N_1 \bar{a}_1) &= \psi(\bar{r}) \\ \psi(\bar{r} + N_2 \bar{a}_2) &= \psi(\bar{r}) \\ \psi(\bar{r} + N_3 \bar{a}_3) &= \psi(\bar{r})\end{aligned}$$

关键是再利用布洛赫定理可得

$$\psi(r + N_i \bar{a}_i) = \psi(r) \exp\{i(\bar{k} \cdot N_i \bar{a}_i)\} = \psi(r), \quad i=1,2,3$$

下面步骤与和上小题相似，可求得  $k$  空间中许可态中的态密度为  $\frac{V}{(2\pi)^3}$ ，

第一布里渊区中  $k$  的取值总数为  $N$ ，即晶体中的原胞数。

- 3) 一维单原子链的晶格振动模式密度函数为

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{dq}{d\omega}$$

其中， $L = Na$  为单原子链的长度， $a$  为原子间距， $N$  为原子数目。又在

德拜模型中， $\omega = cq$  ( $c$ 为常数)。所以，此时  $g(\omega) = \frac{L}{\pi c}$ 。

根据德拜理论有

$$\int_0^{\omega_m} g(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_m} \frac{L}{\pi c} d\omega = \frac{L\omega_m}{\pi c} = N$$

$$\therefore \omega_m = \frac{N\pi c}{L} = \frac{\pi c}{a}$$

晶体量子热容公式为

$$\begin{aligned} C_v(T) &= k_B \int_0^{\omega_m} \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} g(\omega) d\omega \\ &= \frac{Lk_B}{\pi c} \int_0^{\omega_m} \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} d\omega \\ &= \frac{Lk_B^2 T}{\pi c \hbar} \int_0^{\hbar\omega_m/k_B T} \frac{\xi^2 e^\xi}{(e^\xi - 1)^2} d\xi \\ &= \frac{Rk_B T}{\hbar\omega_m} \int_0^{\hbar\omega_m/k_B T} \frac{\xi^2 e^\xi}{(e^\xi - 1)^2} d\xi \end{aligned}$$

上式中  $R = k_B T$  为气体常数，式中  $\xi = \hbar\omega/k_B T$ 。

在低温极限下， $\hbar\omega_m/k_B T \rightarrow \infty$ ，所以有

$$C_v(T) = \frac{Rk_B T}{\hbar\omega_m} \int_0^\infty \frac{\xi^2 e^\xi}{(e^\xi - 1)^2} d\xi$$

其中， $\int_0^\infty \frac{\xi^2 e^\xi}{(e^\xi - 1)^2} d\xi$  为一积分常数，所以在低温极限下晶体热容与温度

成正比。

4) 这里考查非简谐效应这个知识点，是非简谐相互作用引起了热膨胀，也

是非简谐相互作用才导致不同简正模的格波之间的耦合以致达到热平衡。

例二：

(04)二、

- 1) 试给出德拜模型下晶格振动色散关系的表达式，说明德拜模型在解释晶格比热—温度关系上有哪些成功和不足并说明原因。

参考解答：

- 1) 首先，要清楚德拜模型的主要特点：把布拉菲晶格看作是各向同性的连续介质，即把格波看作是弹性波，并且还假定纵的和横的弹性波的波速相等。另外我们要知道，对于长声学波，晶格可以视为连续介质，长声学波具有弹性波的性质。

所以，德拜模型下晶格振动色散关系为： $\omega = cq$  ( $c$ 为常数)。德拜模型在解释低温下的晶格比热—温度关系上是非常成功的，尤其是德拜热容的低温极限是严格正确的，而在较高温度时，德拜热容与实验数据偏离较大。这是因为温度降低时，高频振动模对比热的贡献变小，因而在低温时，主要是低频振动模(即长波)对比热起贡献，这种情形与德拜模型非常相近。

例三：

(03)三、有  $N$  个原子组成的体积为  $V$  的晶体，在德拜近似下，设其声速为  $v$ ，试求出：

- 1) 晶格振动态密度函数  $g(\omega)$ ，并绘出  $g(\omega)$  和  $q$  的关系曲线；
- 2) 德拜频率和德拜温度，并简述其意义。

参考解答：

- 1) 三维晶体中，在德拜近似下，考虑到一个  $q$  有一个纵波和两个独立的横波，则有

$$\frac{3V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq = g(\omega) d\omega$$

所以有

$$g(\omega) = \frac{3V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 \frac{dq}{d\omega}$$

而德拜模型中  $\omega = vq$ ，即  $q = \omega/v$

$$\therefore g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \left(\frac{\omega}{v}\right)^2 \frac{1}{v} = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \quad (\text{图略})$$

2) 德拜频率是在德拜模型中假定存在的晶格振动的最高频率  $\omega_m$ ，由条件

$$\int_0^{\omega_m} g(\omega) d\omega = 3N$$

可以求出

$$\omega_m = v \left( \frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

德拜温度是德拜模型中引进的一个温度标准  $\Theta_D = \hbar\omega_m/k_B$ ，它代表了经典统计和量子统计适用的温度分界线，低于德拜温度时应该使用量子统计。

**例四：**

(02)三、

1. 有一维双原子链，两种原子的质量分别为  $M$  和  $m$ ，且  $M > m$ ，相邻原子间的平衡间距为  $a$ ，作用力常数为  $\beta$ 。考虑原子沿链的一维振动：
  - 1) 求格波简正模的频率与波矢之间的关系  $\omega(q)$ ;
  - 2) 证明波矢  $q$  和  $q + \frac{\pi}{a}m$  (其中  $m$  为整数)描述的格波是全同的。
2. 常用热中子与晶格振动的非弹性相互作用来研究晶格振动的色散关系  $\omega(q)$ ，请简要叙述其基本原理。并明确说明实验中测量哪些量，以及如何由此得出色散关系  $\omega(q)$ 。

**参考解答：**

1. 本题考查一维双原子链的基本知识。
  - 1) 此推导过程一定要掌握，对过程的理解要透彻，自己最好亲自推导几



遍，结果也要记牢(具体见教材二 P93)。

2) 由上式可知

$$\omega\left(q + \frac{\pi}{a}m\right) = \omega(q)$$

对于标号为  $2n$  的原子其对应于波矢  $q$  的格波解为

$$\mu_{2n}(q) = A e^{i[\omega t - 2naq]}$$

而对于波矢  $\left(q + \frac{\pi}{a}m\right)$  有

$$\begin{aligned}\mu_{2n}\left(q + \frac{\pi}{a}m\right) &= A e^{i\left[\omega t - 2na\left(q + \frac{\pi}{a}m\right)\right]} \\ &= A e^{i[\omega t - 2naq]} \cdot e^{-i2nm\pi} \\ &= A e^{i[\omega t - 2naq]}\end{aligned}$$

所以，对于标号为  $2n$  的原子波矢  $q$  和  $q + \frac{\pi}{a}m$  描述的格波是全同的。而对于标号为  $(2n+1)$  的原子，首先  $\omega$  不变，再看其相因子

$$\begin{aligned}\exp\left[-i(2n+1)a\left(q + \frac{\pi}{a}m\right)\right] &= \exp[-i(2n+1)aq] \cdot \exp[-i(2n+1)m\pi] \\ &= \begin{cases} \exp[-i(2n+1)aq] & m \text{ 为偶} \\ -\exp[-i(2n+1)aq] & m \text{ 为奇} \end{cases}\end{aligned}$$

又考虑到振幅比为

$$\frac{B}{A} = -\frac{m\omega^2 - 2\beta}{2\beta \cos aq},$$

而因为

$$\cos a\left(q + \frac{\pi}{a}m\right) = \begin{cases} \cos aq & m \text{ 为偶} \\ -\cos aq & m \text{ 为奇} \end{cases}$$

所以对于标号为  $(2n+1)$  的原子，其格波解  $\mu_{2n+1}$  也没变。

2. 本题考查的是光子与声子相互作用的简单原理。主要知识点是：光子与声子的相互作用过程中，同样要满足动量守恒定律和能量守恒定律。

格波振动引起中子的非弹性散射，散射过程分为吸收声子和发射声子两种情况。假设中子的质量为  $m$ ，则散射过程中的能量守恒为

$$\frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \pm \hbar \omega(q) \quad (1)$$

动量守恒为  $\vec{p}' - \vec{p} = \pm \hbar \vec{q}$  (2)

两式中“+”号表示产生一个声子，“-”号表示吸收一个声子。另外，由于波矢为  $\vec{q}$  和  $\vec{q} + \vec{G}_n$  的两个声子是完全等价的(其中  $\vec{G}_n$  为任意倒格矢)，所以②式还可以写成  $\vec{p}' - \vec{p} = \pm \hbar \vec{q} + \hbar \vec{G}_n$  (3)

根据以上原理，对给定的入射中子的初动量  $\vec{p}$ ，可以测定不同散射方向的中子的能量  $E'$  (这样也就测定了  $\vec{p}'$ )，再利用守恒关系即可确定波矢  $\vec{q}$  和待定的声子能量  $\hbar \omega(q)$ 。

#### 例五：

(01)三、设有一维双原子链，两种原子的质量分别为  $M$  和  $m$ ，且  $M > m$ ，相邻原子间的平衡间距为  $a$ ，只考虑最近邻原子间的平衡间距为  $a$ ，作用力常数为  $\beta$ ，在简谐近似下，考虑原子沿链的一维振动：

- 1) 求格波简正模的频率与波矢之间的关系  $\omega(q)$ ;
- 2) 证明波矢  $q$  和  $q + \frac{\pi}{a}m$  (其中  $m$  为整数)描述的格波是全同的;
- 3) 在  $M \gg m$  的极限情形下，求色散关系  $\omega(q)$  的渐近表达式。

参考解答：1)、2)略

- 3) 先写出色散关系表达式

$$\left. \begin{matrix} \omega_+^2 \\ \omega_-^2 \end{matrix} \right\} = \beta \frac{m+M}{mM} \left\{ 1 \pm \left[ 1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right]^{1/2} \right\}$$

所以当  $M \gg m$  时，利用  $M+m \rightarrow M$  和无穷小量代换

$$(1+x)^{1/2} \approx 1 + \frac{x}{2} \quad (x \text{ 为无穷小量})$$

可得

$$\begin{aligned}
\omega_+^2 &\rightarrow \beta \frac{m+M}{mM} \left( 2 - \frac{2mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \right) \\
&\rightarrow \frac{2\beta}{m} \left( 1 - \frac{m}{M} \sin^2 aq \right) \\
\omega_-^2 &\rightarrow \beta \frac{m+M}{mM} - \frac{2mM}{(m+M)^2} \sin^2 aq \\
&\rightarrow \frac{2\beta}{M} \sin^2 aq
\end{aligned}$$

例六：

(00)二、已知  $N$  个质量为  $m$  间距为  $a$  的相同原子组成的一维原子链，其原子在偏离平衡位置  $\delta$  时受到近邻原子的恢复力  $F = -\beta\delta$  ( $\beta$  为恢复力系数)。

1) 试证明其色散关系

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad (q \text{ 为波矢})$$

2) 试绘出它在整个布里渊区的色散关系，并说明截止频率的意义。

3) 试求出它的格波态密度函数  $g(\omega)$ ，并作图表示。

参考解答：

1) 本题在教材二 P83 页有详细推导，要求必须掌握，本资料在此不再重复。

2) 绘图略，但要注意的是题目中要求的是“整个布里渊区”，所以要画完整。

由其色散关系表达式可以看出  $\omega \leq 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ ，所以存在截止频率

$\omega_m = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ ，它表示只有频率小于或等于  $\omega_m$  的格波才能在晶体中传播，

频率大于  $\omega_m$  的则不能。

3) 一维单原子链的晶格振动模式密度函数为

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{dq}{d\omega}$$

考虑波矢  $q \in (0, \pi)$ ，则其色散关系表达式为

$$\begin{aligned}\omega &= \omega_m \sin \frac{aq}{2} \\ \therefore q &= \frac{2}{a} \arcsin \left( \frac{\omega}{\omega_m} \right) \\ \therefore \frac{dq}{d\omega} &= \frac{2}{a} \left( \omega_m^2 - \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

因此得

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a} \left( \omega_m^2 - \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}} = \frac{2N}{\pi} \left( \omega_m^2 - \omega^2 \right)^{-\frac{1}{2}}$$

作图略(绘图时要注意存在截止频率  $\omega_m$ )。

例七:

(98)四、试求三维晶体量子热容表达式。

**参考解答:** 本题属于基础理论题, 难度比较大, 具体内容可以参阅教材一 P109 和教材三 P126。另外关于玻耳兹曼统计方面的知识可以参阅一些热力学统计理论方面的书籍。

首先, 根据量子理论晶格振动能量是量子化的, 即

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots)$$

其中,  $\hbar \omega / 2$  代表零振动能, 对比热无贡献, 可略去不计, 把能量写成

$$E_n = n \hbar \omega \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots)$$

这样可以根据玻耳兹曼统计理论, 频率为  $\omega$  的格波在温度  $T$  时的平均能量为

$$\overline{E}(\omega) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \hbar \omega e^{-n \hbar \omega / k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \hbar \omega / k_B T}} \xrightarrow{\text{令 } \frac{\hbar \omega}{k_B T} = x} \overline{E}(\omega) = \hbar \omega \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}}$$

又因为

$$\frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}} = -\frac{d}{dx} \ln \left( \sum_n e^{-nx} \right) = -\frac{d}{dx} \ln \frac{1}{1-e^{-x}} = \frac{1}{e^x - 1}$$

所以有

$$\overline{E}(\omega) = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}$$

设晶体中含有  $N$  个原子，因为每个原子有 3 个自由度，所以有  $3N$  个振动模和  $3N$  个振动频率，则整个晶体的平均能量为：

$$\overline{E} = \sum_{i=1}^{3N} \overline{E}(\omega_i) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\hbar \omega_i}{e^{\hbar \omega_i / k_B T} - 1}$$

如果频率分布能用可积分函数  $g(\omega)$  来表示，则上式可以改为

$$\overline{E} = \int g(\omega) \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} d\omega$$

所以晶体的量子热容

$$C_V(T) = \left( \frac{\partial \overline{E}}{\partial T} \right)_V = k_B \int \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} g(\omega) d\omega$$

## 第五章 能带理论

### [考试指导]

本章与上一章一样为重点章节，并且由于本章节内容对以后本专业知识的进一步学习非常重要，所以对本章节内容要尽量理解透彻。

本章的往年考题难度一般，但不容马虎，因为本章经常考一些综合性题目，所以所占分值也很大，要认真对待，将往年真题搞透，最好再找一些相关练习题，教材上的少数例题也要搞懂。另外，要记住几个关键公式例如 Bloch 和、紧束缚近似下的能量函数表达式以及能态密度公式等常用公式。

### [基本知识点]

#### 1. 能带论中的几个近似

##### 1) Born-Oppenheimer 近似(也叫绝热近似)

定义：近似认为在原子核运动的每一瞬间，电子的运动都快到足以调整其状态到原子核瞬时分布情况下的本征态，即认为电子是在准静态的核构成的势场中运动，从而可以把电子的运动和核的运动分开试论。

依据：由于电子和原子核在质量上的巨大差别，电子的运动要比原子核快得多。

##### 2) 单电子近似(也叫独立电子近似)

概念：用一个平均场来代替电子和电子之间的相互作用，即在电子体系的哈密顿量中忽略电子和电子之间的相互作用项，而增加一个稳定的平均场作为近似。

##### 3) 周期场近似

这是一个很关键的近似，由晶体的平移对称性出发，将晶体中的势场近似认为具有和晶格同样的平移对称性，即

$$V(\vec{r} + \vec{R}_n) = V(\vec{r})$$

其中  $\vec{R}_n$  晶格格矢。

## 2. 布洛赫定理

### 1) 内容:

当晶体势场具有晶格周期性时, 电子波动方程的解具有以下性质

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \psi(\vec{r})$$

且可以把波函数写成  $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u(\vec{r})$

其中  $u(\vec{r})$  满足  $u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R}_n)$

### 2) 证明过程

布洛赫定理的证明在 06 年以前的真题里还没有考过(包括 06 年), 所以应该重视, 该证明过程在教材二 P155—P157 有详细描述, 有一定难度, 可以结合量子力学知识来理解。

### 3) 关于定理中的简约波矢 $\vec{k}$ (具体内容可参考教材一 P55 和教材二 P157)

这是一个小知识点, 要求熟练掌握。

$\vec{k}$  的取值为一系列  $\vec{k}$  空间中均匀分布的点, 分布密度为  $V/(2\pi)^3$ 。

## 3. 近自由电子模型

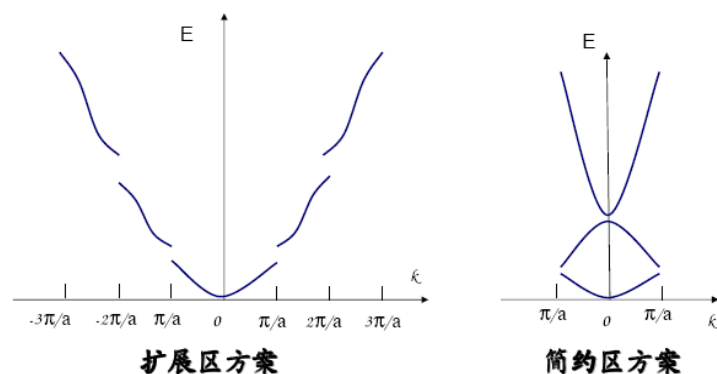
### 1) 一维周期场

将晶格势场近似为一个平均场加上一个微扰来处理:

首先, 在零级近似下考虑到周期性边界条件得到了波矢  $\vec{k}$  的允许取值, 于是推出了能量的准连续性;

第二, 由于考虑二级微扰而推出能量在布里渊区边界会分裂, 且发生了能级间的“排斥作用”, 于是形成了能带和带隙。

示意图:



一维近自由电子模型的能带和带隙

## 2) 三维周期场

解决思想和方法与一维完全类似，还提出了三维情况下布里渊区的概念，注意理解其物理意义。

与一维情况相比有一个重要区别，就是不同能带在能量上不一定分隔开，三维时可以发生能带间的交叠。

## 4. 紧束缚近似

### 1) 该近似下的电子波函数

以原子轨道波函数作为基函数来表示，进一步求出紧束缚近似下晶体电子的波函数为 Bloch 波：

$$\psi(\vec{r}) = c \sum_m e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} \varphi_i(\vec{r} - \vec{R}_m)$$

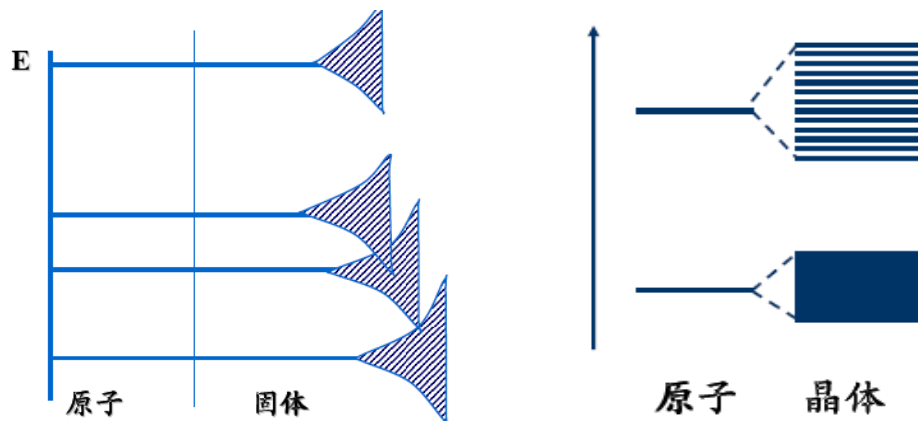
### 2) 近似下的能量表达式

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_i - J_0 - \sum_{\vec{R}_s = \text{近邻}} J(\vec{R}_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

要注意  $\vec{R}_s$  是最近邻格点的格矢。

### 3) 近似所描述的物理概念

紧束缚近似表明：如果原子相互之间距离比较远时，则原子之间近似于独立，每个原子的能级都具有 N 重简并。而在一般晶体中，晶格间距比较小，原子之间相互靠得很近，各原子的电子轨道有不同程度的交叠，电子的运动出现共有化。所以，由于原子之间的相互影响，单一的能级开始分裂，从而形成了一定宽度的能带。图示如下：





## 5. 能态密度

### 1) 物理含义

能量分布函数，一般表达式(记入自旋)

$$N(E) = \frac{V}{4\pi^3} \int_{\text{等能面}} \frac{dS}{|\nabla_k E|}$$

若单价金属晶体中含有  $N$  个电子，电子最大能量为  $E_m$ ，则有

$$N = \int_0^{E_m} N(E) dE$$

### 2) 自由电子模型的能态密度

首先，在自由电子模型中能量为

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

所以得到

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} k = \hbar \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

一维情况下

$$N(E)dE = 2 \times \frac{L}{2\pi} dk \Rightarrow N(E) = \frac{L}{\pi} \left( \frac{dE}{dk} \right)^{-1} = \frac{L\sqrt{2m}}{2\pi\hbar} E^{-\frac{1}{2}}$$

二维情况下

$$N(E)dE = 2 \times \frac{S}{4\pi^2} 2\pi k dk \Rightarrow N(E) = \frac{S}{\pi} \left( \frac{dE}{dk} \right)^{-1} = \frac{mS}{\pi\hbar^2}$$

三维情况中

$$N(E) = \frac{V}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

## [试题分析]

例一：

(05)六、简单立方晶格中，每个原胞中含有一个原子，每个原子只有一个价电子，

使用紧束缚近似，只计入近邻相互作用。

- 1) 求出 s 态组成的 s 能带的  $E(k)$  函数。
- 2) 给出 s 能带带顶和带底的位置和能量值。
- 3) 求电子在能带底部和顶部的有效质量。
- 4) 求出 s 能带电子的能量态密度的表达式。
- 5) 求出电子运动的速度。

参考解答：本题带有一种综合题的性质。

1) 本题在教材二 P193 有详细推导。解本题首先要记住紧束缚近似下晶体能带解  $E(\vec{k})$  的表达式

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_i - J_0 - \sum_{R_s = \text{近邻}} J(\vec{R}_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

这是关键点，然后根据晶体结构就可以解出 s 态组成的 s 能带的  $E(k)$  函数为

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_s - J_0 - 2J_1(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad ①$$

- 2) 由上题公式可以看出 s 能带带顶位置为  $\vec{k}_1 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ ，带顶能量为

$$E(\vec{k}_1) = \varepsilon_s - J_0 + 6J_1 ; \quad \text{带底位置为} \quad \vec{k}_2 = (0, 0, 0) , \quad \text{能量为}$$

$$E(\vec{k}_2) = \varepsilon_s - J_0 - 6J_1。$$

3) 此类题目都是综合题，所以本小题内容属于下一章，在此就提前复习了。有效质量这个知识点很重要，要理解有效质量张量这个概念并记住它的表达式，

有效质量张量的分量为  $m_{\alpha\beta}^* = \hbar^2 \left/ \frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \right.$ 。本小题答案可以参见教材二

P243~P245，在这里不作重复。

4) 这里考查能态密度的一般表达式，其推导过程在教材二 P214 有详细描述。大纲中要求“深刻理解费密面、能态密度和能带的特点”，加上能态密度几

乎是每年必考的知识点，所以此推导过程要求理解透彻，最好自己能不用书本推导出来结果。本题中先写出能态密度的一般表达式

$$N(E) = \frac{V}{4\pi^3} \int_{\text{等能面}} \frac{dS}{|\nabla_k E|} \quad (2)$$

其中， $|\nabla_k E|$  表示沿  $\vec{k}$  空间等能面法线方向能量的改变率，从①式可得

$$\nabla_k E = 2aJ_1(\sin k_x a, \sin k_y a, \sin k_z a,)$$

所以有  $|\nabla_k E| = 2aJ_1 \sqrt{\sin^2 k_x a + \sin^2 k_y a + \sin^2 k_z a}$

将其代入②式中得

$$N(E) = \frac{V}{8\pi^3 a J_1} \int_{\text{等能面}} \frac{ds}{2aJ_1 \sqrt{\sin^2 k_x a + \sin^2 k_y a + \sin^2 k_z a}}$$

5) 根据第五章内容，电子速度和其能量关系为  $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$ ，根

据①式可得电子速度

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E = \frac{2J_1 a}{\hbar} (\vec{i}_{k_x} \sin k_x a + \vec{i}_{k_y} \sin k_y a + \vec{i}_{k_z} \sin k_z a)$$

其中， $\vec{i}_{k_x}, \vec{i}_{k_y}, \vec{i}_{k_z}$  为  $\vec{k}$  空间中的三个方向的单位矢量。

例二：

(04)五、现有 N 个质量为 m 间距为 a 的相同原子组成的一维原子链

1)、2)略。

3) 每个原子只有一个价电子，使用紧束缚近似，只计入近邻相互作用，写出原子 s 态对应的晶体波函数。

4) 在(3)的假设下，求出 s 态组成 s 能带的 E(k)函数。

5) 在(3)的假设下，求出 s 能带电子的能量态密度的表达式。

**参考解答：** 本题难度不大，考查能带论中的基础知识。

3) 紧束缚近似下晶体的波函数为 Bloch 波，波函数为

$$\psi_s(x) = c \sum_m e^{ikx_m} \varphi_s(x - x_m)$$

其中， $c$  为归一化因子， $\varphi_s$  表示孤立原子  $s$  态波动方程的本征态。

4) 本题根据紧束缚近似下晶体能带解  $E(\vec{k})$  的表达式可得

$$\begin{aligned} E(k) &= \varepsilon_s - J_0 - J_1(e^{-ika} + e^{ika}) \\ &= \varepsilon_s - J_0 - 2J_1 \cos ka \\ &= E_0 - 2J_1 \cos ka \end{aligned} \quad (1)$$

式中  $E_0 = \varepsilon_s - J_0$ ，且  $J_1 > 0$ 。

5) 一维能态密度

$$G(E) = \frac{L}{\pi} \left( \frac{dE}{dk} \right)^{-1} = \frac{L}{2\pi a J_1 \sin ka} = \frac{N}{2\pi J_1 \sin ka} \quad (2)$$

由①式可得

$$\cos ka = \frac{E_0 - E}{2J_1} \Rightarrow \sin ka = \frac{\sqrt{4J_1^2 - (E_0 - E)^2}}{2J_1} \quad (3)$$

所以将③代入②得

$$G(E) = \frac{N}{\pi J_1 \sin ka} = \frac{N}{\pi \sqrt{4J_1^2 - (E_0 - E)^2}}$$

例三：

(02)四、半金属交叠的能带为

$$\begin{aligned} E_1(k) &= E_1(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1}, \quad m_1 = 0.18m \\ E_2(k) &= E_2(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_2} (k - k_0)^2, \quad m_2 = 0.06m \end{aligned}$$

其中， $E_1(0)$  为带 1 的带顶， $E_2(k_0)$  为带 2 的带底，交叠部分  $E_1(0) - E_2(k_0) = 0.1\text{eV}$ 。

由于能带交叠，能带 1 中的部分电子转移到能带 2，而在能带 1 中形成空穴，计算  $T=0\text{K}$  时费米能级的位置。

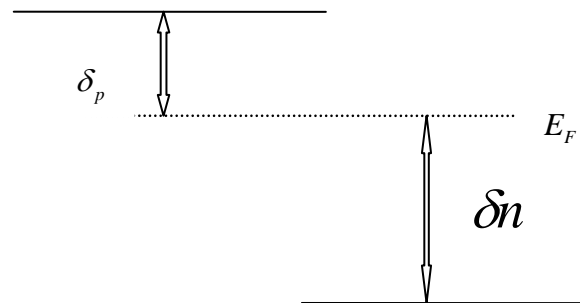
**参考解答：** 本题有一定难度，首先我们要清楚半金属能带交叠的概念，半金属由

于能带之间的交叠而具有了金属的导电性，但是由于能带交叠不大，所以其导电性介于金属和半导体之间。 $T=0K$  时费米能级的位置是表征能带中电子占有态和非占有态的分界线，在这里就是表征半金属能带交叠的部分中空穴能级和电子能级的分界线。所以本题可以利用半金属能带交叠的部分中电子和空穴总数相等这一特点，从自由电子(空穴)能态密度着手来解。

自由电子(空穴)单位体积能态密度为

$$g(E) = \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

下面我们取能带 1 中  $E$  轴向下为正， $k=0$  处为原点；取能带 2 中  $E$  轴向上为正， $k=k_0$  处为原点。另外，我们设半金属能带交叠的部分中电子能带宽度为  $\delta_n$ ，空穴能带宽度为  $\delta_p$ ，则  $\delta_n + \delta_p = 0.1eV$ ，如下图所示。



于是能带 1 中空穴总数为

$$\begin{aligned} p &= \int_0^{\delta_p} g(E) dE \\ &= \int_0^{\delta_p} \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2m_1^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} dE \\ &= \frac{1}{6\pi^2} \left( \frac{2m_1^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \delta_p^{3/2} \end{aligned}$$

同理，能带 2 中电子总数

$$n = \frac{1}{6\pi^2} \left( \frac{2m_2^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \delta_n^{3/2}$$

由于  $p=n$ ，我们可以得到

$$\begin{aligned} m_1\delta_p &= m_2\delta_n \Rightarrow 0.18m\delta_p = 0.06m\delta_n \\ &\Rightarrow 3\delta_p = \delta_n \end{aligned}$$

所以再与  $\delta_n + \delta_p = 0.1eV$  联立可以得出

$$\delta_n = 0.075eV, \quad \delta_p = 0.025eV$$

例四：

(00)四、用紧束缚方法处理晶体 s 态电子，得到其能量表达式为

$$E_s(k) = E_0 + \sum_{\vec{R}_l} J(\vec{R}_l) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l}$$

其中  $E_0$  为常数， $J(\vec{R}_l)$  称为高迭积分(小于零)。

1) 在最近邻作用近似下，求出 x 方向晶格常数为  $a$ ，y 方向晶格常数为

$b(a \neq b)$  的二维矩形晶体 s 态电子能量表达式。

2) 求出 s 态晶体电子能带宽度。

3) 分别培养出能带底电子与能带顶空穴有效质量张量。

**参考解答：** 本题考查紧束缚方法的二维应用，比较有新意，应该重视。

1) 题中已经给出公式，我们只需要确定  $\vec{R}_l$  的坐标就可以解题了。因为是二维矩形晶体，所以每个格点有 4 个最近邻，它们的坐标分别为  $(a,0)$ 、 $(-a,0)$ 、 $(b,0)$  和  $(-b,0)$ 。另外，因为 s 态波函数是球对称的，所以可以令

$$J(\pm a, 0) = J_1^s, \quad J(\pm b, 0) = J_2^s$$

所以将  $\vec{R}_l$  的坐标代入  $E_s(k)$  的表达式即可得

$$\begin{aligned} E_s &= E_0 + J_1^s (e^{ik_x a} + e^{-ik_x a}) + J_2^s (e^{ik_y b} + e^{-ik_y b}) \\ &= E_0 + 2J_1^s \cos k_x a + 2J_2^s \cos k_y b \end{aligned} \quad \textcircled{1}$$

2) 上式与简单立方晶体非常相似，又注意到  $J_1^s < 0, J_2^s < 0$ ，根据经验和函数性质我们可以推出能带带底为  $k_1 = (0,0)$  处，此时带底能量

$$E(k_1) = E_0 + 2J_1^s + 2J_2^s$$

能带带顶为  $k_2 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{b})$  处，带顶能量

$$E(k_2) = E_0 - 2J_1^s - 2J_2^s$$

所以能带宽度为

$$\Delta E = E(k_2) - E(k_1) = -4(J_1^s + J_2^s)$$

3) 解本题的关键是利用余弦函数的泰勒展开近似式，由于带底  $k$  值比较小，因此①式可以展开为

$$\begin{aligned} E_s &= E_0 + 2J_1^s \left(1 - \frac{k_x^2 a^2}{2}\right) + 2J_2^s \left(1 - \frac{b^2 k_y^2}{2}\right) \\ &= E_0 + 2J_1^s + 2J_2^s - J_1^s a^2 k_x^2 - J_2^s b^2 k_y^2 \end{aligned}$$

所以，有效质量张量分量

$$\begin{aligned} m_x^* &= \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = -\frac{\hbar^2}{2J_1^s a^2} \\ m_y^* &= \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} = -\frac{\hbar^2}{2J_2^s b^2} \\ m_{xy}^* &= m_{yx}^* = 0 \end{aligned}$$

即带底电子有效质量张量为

$$m_e^* = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2J_1^s a^2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2J_2^s b^2} \end{pmatrix}$$

同理在能带带顶  $k_2 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{b})$  附近有

$$\begin{aligned} E_s &= E_0 + 2J_1^s \cos k_x a + 2J_2^s \cos k_y b \\ &= E_0 + 2J_1^s \cos(\frac{\pi}{a} + \Delta k_x) a + 2J_2^s \cos(\frac{\pi}{b} + \Delta k_y) b \\ &= E_0 + 2J_1^s \cos(\pi + a\Delta k_x) + 2J_2^s \cos(\pi + b\Delta k_y) \end{aligned}$$

此时利用函数  $\cos(\pi + x)$  在  $\pi$  处的泰勒展开式得  $\cos(\pi + x) \approx -1 + \frac{x^2}{2}$ ，所以得

$$\begin{aligned} E_s &\approx E_0 - 2J_1^s - 2J_2^s + J_1^s a^2 (\Delta k_x)^2 + J_2^s b^2 (\Delta k_y)^2 \\ &= E_0 - 2J_1^s - 2J_2^s + J_1^s a^2 (k_x - \frac{\pi}{a})^2 + J_2^s b^2 (k_y - \frac{\pi}{b})^2 \end{aligned}$$

因此用同样方法可求得带顶电子的有效质量张量为

$$m_e'^* = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2J_1^s a^2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{2J_2^s b^2} \end{pmatrix}$$

所以带顶空穴的有效质量张量为

$$m_h^* = -m_e'^* = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2J_1^s a^2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2J_2^s b^2} \end{pmatrix}$$

在这里我们可以发现，带顶空穴的有效质量与带底电子有效质量相等且均为正值。

**例五：**

(99)八、试推导近自由电子近似金属电子的能态密度  $N(E)$ ，并绘图表示其变化趋势。

**参考解答：** 本题考查能态密度的基本知识点，难度不大，所以必须掌握其推导过



程。另外，该推导结果也很重要，在解其它题目的时候也会经常用到这个结果，因此建议将此结果牢记。

本题解法和结果可参阅教材二 P215，在此我们也给出一种简单解法。近自由电子近似金属电子可看作是三维模型，且电子能量表达式为  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ，所

以也有  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ 。另外根据总能态数目相等，我们可以建立方程

$$N(E)dE = 2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \frac{2mE}{\hbar^2} dk$$

所以得其能态密度为

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{V}{\pi^2} \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{dk}{dE} = \frac{V}{\pi^2} \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \\ &= 4\pi V \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (\text{绘图略}) \end{aligned}$$

## 第六章 晶体中电子在电场和磁场中的运动

### [考试指导]

本章内容不是太难，往年也经常考到本章内容(尤其是有效质量这个知识点)，并且经常是把本章内容和其它内容作为综合题目一起来考查。

本章主要的题型是计算题，也有一些概念题(主要是金属、半导体和绝缘体的能带论解释以及德哈斯—范阿尔芬效应的相关内容)，所以其考点很清晰明了，我们要做的就是认真复习每个基本知识点，理解清楚每个基本概念并熟练掌握一些相关公式。

### [基本知识点]

#### 1. 准经典运动

##### 1) 外力作用下状态的变化和准动量

有外力作用时运动状态变化的基本公式：

$$\frac{d}{dt}(\hbar\vec{k}) = \vec{F}$$

上式和牛顿定律具有相似的形式，其中  $\hbar\vec{k}$  取代了经典力学中的动量。由于准经典运动中  $\hbar\vec{k}$  具有类似于动量的性质，因此常称为**准动量**。

##### 2) 有效质量

倒有效质量表达式：

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}$$

物理概念：在电子运动准经典模型中引入了电子有效质量张量，用来描述在外力作用下，与牛顿相比电子运动所具有的相应质量。

一些性质：能带带底附近电子有效质量为正，带顶附近为负；在同一位置空穴的有效质量与电子的有效质量符号相反。

## 2. 恒定电场下电子的运动(非重点)

### 1) 运动描述

在实空间的振荡：恒定电场下电子在  $\mathbf{k}$  空间做匀速运动，但在准经典运动的框架中，当电子运动到带隙时将全部被反射回来，于是电子在同一能带的  $\mathbf{k}$  空间做循环运动，这表明电子速度随时间作振荡变化，这就意味着电子在实空间的振荡。

### 2) 需要注意的两点

很少考到，但最好大概了解一下，参考教材二 P249。

## 3. 金属、半导体和绝缘体的能带论解释

### 1) 满带电子不导电

参考教材二 P251，要能描述清楚，注意在外场作用下，电子分布发生偏移，但由于  $\bar{k}$  和  $\bar{k} + \bar{G}_n$  对电流的贡献是等价的，满带状况产不改变。

### 2) 部分填充的能带才导电

部分填充能带中的电子分布在外场的作用下会发生偏移，从而可以发生一定的电流。

导体：至少有一个能带是部分填充的。

绝缘体：恰好填满低能带，再高的能带是全空的。

半导体：有类似于绝缘体的能带结构，但价带和导带之间的带隙宽度较小。

半金属：导带底和价带顶发生交叠或具有相同的能量。

## 4. 恒定磁场下电子的运动

### 1) 恒定磁场中的准经典运动

两个结论：沿磁场方向的  $\mathbf{k}$  分量不随时间变化；电子的能量值不随时间变化，即电子在  $\mathbf{k}$  空间的等能面上运动。

对于自由电子：在实空间做螺旋运动，运动在垂直于磁场方向的投影为匀速圆周运动，其回转频率为  $\omega_0 = qB/m$ ；在沿磁场方向的速度为常数。

### 2) 自由电子的量子理论

此时能量本征值为(假设磁场沿  $z$  方向)：

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0$$

就是说，在量子理论中，垂直于磁场方向的圆周运动对应于一种简谐运动，其能量是量子化的，这些量子化的能级就是我们后面要提到的朗道能级。

## 5. 德哈斯—范阿尔芬效应

### 1) 二维自由电子气模型

朗道能级：二维自由电子气在外加垂直磁场时，其圆周运动对应于一种简谐运动，其能量本征值为一系列量子化的能级

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0$$

注意：因为是二维的，所以在磁场下也只有圆周运动。在式中  $\omega_0 = eB/m$ ，为圆周运动的回转频率。

简并度：和紧束缚近似中的能级分裂相反，在垂直磁场下，二维电子气准连续的能级聚集成间隔为  $\hbar\omega_0$  的分立能级，间隔  $\hbar\omega_0$  内包含的电子态的数目就为朗道能级的简并度。

对于二维自由电子气，简并度为(假设其尺寸为  $L \times L$ )

$$D = \frac{eBL^2}{\pi\hbar}$$

### 2) 三维自由电子气模型

恒定外磁场下的三维自由电子气的能态密度：

$$N(E) = \frac{DL\sqrt{2m}}{2\pi\hbar} \sum_n \left[ E - \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

要求掌握其推导过程，可参考教材二 P270。另外，这里的 D 就是朗道能级的简并度，即  $D = eBL^2 / \pi\hbar$ ，可代入上式进一步求得

$$N(E) = \frac{eBL^3}{\pi^2\hbar^2} \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_n \left[ E - \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

### 3) 银的德哈斯—范阿尔芬效应

德哈斯—范阿尔芬效应的定义：低温下电子气系统的磁矩随磁场的振荡变化，其周期为  $2\pi q / \hbar S_F$ ，其中  $S_F$  为二维自由电子气费米圆的面积。

对于银：当磁场沿<111>方向时，其德哈斯—范阿尔芬振荡包括两个周期，这也表明了垂直于此方向的费米球有两个极值截面，根据周期公式

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi q}{\hbar S_F}$$

可知，大的极值截面对应于小的振荡周期，而小的则对应大的周期。另外，当磁场沿其它方向时，德哈斯—范阿尔芬振荡可能有一个周期或者没有，这对应于极值截面的数量。

### [试题分析]

例一：

(00)五、N 个原子组成二维正方格子，每个原子贡献 1 个电子构成二维自由电子气，电子能量表达式是

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$$

1) 推导二维自由气的能态密度公式。

2) 此时在垂直于正方格子方向射入一磁场 B，自由电子气能级将凝聚成朗道能级，问该能级的简并度是多少？

**参考解答：**第 1 个小题是复习上一章的内容，第 2 个小题是考查朗道能级简并理论。

1) 由题可知

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

所以有

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

又有方程

$$g(E)dE = 2 \times \frac{1}{(2\pi)^2} 2\pi k dk = \frac{k}{\pi} dk$$

其中， $g(E)$  为单位面积二维自由电子气的能态密度。

所以得

$$g(E) = \frac{k}{\pi} \left( \frac{dE}{dk} \right)^{-1} = \frac{m}{\pi \hbar^2}$$

2) 本小题可以参阅教材二 P265。作者在此作一些简单解释。

首先我们要清楚朗道能级的由来，分析两种情况：无外磁场时，二维自由电子气具有准连续能谱，且有  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ，能态密度为  $g(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}$ ；而存在恒定垂直外磁场时，准连续的能谱聚集成间隔为  $\hbar \omega_c$  的分立能级 ( $\omega_c$  为回旋频率)，此时能量本征值为一系列朗道能级

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \quad (n = 0, 1, 2, 3 \dots)$$

改组过程中量子态的总数不变，而朗道能级的间隔是  $\Delta E = \hbar \omega_c$ 。

所以朗道能级的简并度  $D$  (单位尺寸的二维自由电子气模型) 应该是

$$D = g(E) \hbar \omega_c = \frac{m}{\pi \hbar} \omega_c$$

又通过简单推导可知  $\omega_c = eB/m$ ，所以得

$$D = \frac{m}{\pi \hbar} \frac{eB}{m} = \frac{eB}{\pi \hbar}$$

例二：

(97) 四、半导体材料的价带基本上填满了电子(近满带)，价带电子能量表达式是  $E(k) = -1.016 \times 10^{-34} k^2 (J)$ ，其中能量零点取在价带顶。这时若  $k = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$  处的电子被激发到更高的能带(导带)，而在该处产生一个空穴。试求出此空穴的有效质量、波矢、准动量、共有化运动速度和能量。

**参考解答：** 本题主要考查同一位置空穴和电子的物理量的关系，同一位置它们的有效质量和能量都符号相反，又由于近似动量守恒，它们的波矢也相反。

1) 先求空穴的有效质量

$$m_h^* = -m_e^* = -\hbar^2 \left/ \frac{d^2 E}{dk^2} \right. = 0.6m_0$$

2) 空穴波矢

$$k_h = -k_e = -1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$$

3) 空穴的准动量为

$$p_h = \hbar k_h = -1.054 \times 10^{-28} \text{ J} \cdot \text{s} / \text{cm}$$

4) 空穴速度可以通过准动量来求

$$v_h = \frac{\hbar k_h}{m_h^*} = -1.93 \times 10^6 \text{ cm} / \text{s}$$

5) 电子能量为负，空穴能量为正

$$\begin{aligned} E_h &= -E_e = 1.016 \times 10^{-34} k^2 \\ &= 1.016 \times 10^{-22} \text{ J} \end{aligned}$$

注意这里在题中给的公式  $E(k) = -1.016 \times 10^{-34} k^2 (\text{J})$  里  $k$  的单位应该就是  $\text{cm}^{-1}$ 。

## 第七章 金属电子论

### [考试指导]

本章的考试内容不难，大多是一些简单计算题，所以最重要的就是要把公式记住，还要认真解题。另外为了计算数值，我们还需要记住一些常量的值和单位。

需要记住的常量有：

电子电荷（绝对值）  $e = 1.602 \times 10^{-19} C$ ，电子静止质量  $m_e = 9.11 \times 10^{-31} kg$ ，普朗克常数  $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} J \cdot s$ ，玻尔兹曼常数  $k_B = 1.38 \times 10^{-23} J / K$ ，阿伏加德罗常数  $N_A = 6.02 \times 10^{23} mol^{-1}$ 。

### [基本知识点]

#### 1. 金属自由电子气模型

##### 1) 模型的三个基本假设

自由电子近似：忽略电子和原子核之间的相互作用。

独立电子近似：忽略电子和电子之间的相互作用。

弛豫时间近似，在讨论电子输运时引进的。

##### 2) 按照三维自由电子气来分析

能态密度：

$$N(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}$$

0K 低温极限下费米能：

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

费米球半径：

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$



由内能得到自由电子气的比热为：

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 N(E_F^0) T = \frac{N_0 \pi^2 k_B^2}{2E_F^0} T = \gamma T$$

其中  $N_0$  为电子总数，由  $N_0 = \int_0^{E_F} N(E) dE$  求出， $\gamma$  称为电子比热系数，

和费米面上的态密度成比例。注意，这一结果只适用于自由电子气体。

## 2. 电场中的自由电子

### 1) 关于电子运动的一些方程

金属电导率的表达式： $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = ne\mu$

其中， $\mu$  为电子迁移率， $\tau$  为电子弛豫时间，也叫电子的平均自由时间。

电子漂移速度  $\bar{v}$  和电子迁移率  $\mu$  的关系式： $v = \mu E$

平均自由程： $\lambda = \tau v$

电流密度： $j = \sigma E = nev$

### 2) 霍尔效应

其物理概念不难懂，对概念的理解可以参考教材二 P345。

霍尔系数： $R_H = -\frac{1}{ne}$

## [试题分析]

例一：

(05)七、

1) 若把银看成具有球形费米面的单价金属，试计算费米能、费米温度和费米球半径。

2) 在室温和低温(20K)时电子的平均自由程。(银的密度为  $10.5 \text{ g/cm}^3$ ，原子量为 107.87，电阻率： $1.61 \times 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$  (T=295K)； $0.038 \times 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$  (T=20K))

参考解答:

1) 求 0K 低温极限下费米能有两种方法。

解法一: 在 0K 的低温极限费米能级  $E_F$  应由下面关系式决定

$$N = \int_0^{E_F} N(E) dE \quad (1)$$

其中,  $N(E)$  为近自由电子近似金属电子的能态密度, 从前面可知

$$N(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}$$

将其代入①式可得

$$\begin{aligned} N &= \int_0^{E_F} N(E) dE \\ &= \int_0^{E_F} \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE \\ &= \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

所以得

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

其中  $n = N/V$  为晶体中电子浓度。

解法二: 在 0K 的低温极限下, 费米面是  $k$  空间中电子占据态与未占据态的分界面。

费米面内的占据区形成一个球, 称为费米球, 其半径  $k_F$  称为费米球半径。

费米能即

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

根据  $k$  空间中的态密度可以得到方程

$$2 \times \frac{V}{8\pi^3} \times \frac{4}{3} \pi k_F^3 = N \Rightarrow k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

所以，费米能级

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}$$

费米温度为  $T_F = E_F / k_B$ ，其中  $k_B$  为玻尔兹曼常数。

对于银有

$$\begin{aligned} n &= \frac{N_A}{m/\rho} = \frac{6.02 \times 10^{23}}{107.87/10.5} \text{ cm}^{-3} = 5.86 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3} \\ &= 5.86 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \end{aligned}$$

在计算过程中要准确记住一些常数例如  $\hbar$  和  $k_B$  的值，经计算参考答案为

$$E_F = 8.82 \times 10^{-19} \text{ J}, T_F = 6.4 \times 10^4 \text{ K}, k_F = 1.2 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$$

2) 首先要明白平均自由程的物理意义，它与弛豫时间以及电子的平均漂移速度相关，表示电子在连续两次碰撞之间所走的路程。可用  $\lambda$  表示平均自由程，弛豫时间为  $\tau$ ，另外根据题意这里要求的是费米面上电子的平均自由程，所以电

子的漂移速度为  $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$ ，显然有  $\lambda = \tau v_F$ 。

根据公式  $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \Rightarrow \tau = \frac{m\sigma}{ne^2} = \frac{m}{ne^2\rho}$

所以得  $\lambda = \tau v_F = \frac{mv_F}{ne^2\rho} = \frac{\hbar k_F}{ne^2\rho}$

所以，当  $T=295\text{K}$  时  $\lambda = 5.24 \times 10^{-8} \text{ m}$

当  $T=20\text{K}$  时  $\lambda = 2.2 \times 10^{-6} \text{ m}$

例二：

(04)四、在自由电子气模型中，假定传导电子可以近似地看作是自由电子气，其中最重要的参数是电子数密度  $n$  及两次碰撞之间的时间  $\tau$  (弛豫时间)。

1. 试导出金属电导率的表达式：  $\sigma = ne^2\tau / m$

其中， $e$  为电子电荷， $m$  为电子质量。

2. 试估计铜中电子的弛豫时间  $\tau$  (铜的电阻率为  $\rho = 1.7 \times 10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$ ，铜的原子密度为  $8.5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ )。

**参考解答：**本题有一定难度，考查的是电子动力学理论，关键要清楚弛豫时间的物理意义，它是电子连续发生两次碰撞之间的时间，也表示由于碰撞作用系统回到平衡分布的时间。此题相关内容可以参阅教材一 P14 页和教材二 P296~P300 页，我们在此也作简单推导。

1. 设  $t$  时刻电子的平均动量为  $\bar{p}(t)$ ，经过  $dt$  时间，电子受到碰撞的几率为  $dt/\tau$ ，受到碰撞的电子恢复到平衡态后它们的动量无规则取向即平均动量为 0，因此它们对于  $t+dt$  时刻的平均动量无贡献；而电子没有受到碰撞的几率为  $1-dt/\tau$ ，只有这部分电子在外力作用下对平均动量有贡献，所以在  $t+dt$  时刻电子的平均动量为

$$\bar{p}(t+dt) = \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) [\bar{p}(t) + \bar{F}(t)dt]$$

在一级近似下，上式中  $(dt/\tau)\bar{F}(t)dt$  可以略去不计，所以展开化简得

$$\bar{p}(t+dt) - \bar{p}(t) = \bar{F}(t)dt - \bar{p}(t) \frac{dt}{\tau}$$

还可以化简为

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = \bar{F}(t) - \frac{\bar{p}}{\tau}$$

上式即称为自由电子在外场作用的动力学方程。引入电子的平均漂移速度  $\bar{v}$ ，则

可知  $\bar{p} = m\bar{v}$ ，将其代入上式中得

$$m \frac{d\bar{v}}{dt} = \bar{F}(t) - m \frac{\bar{v}}{\tau} \quad \text{①}$$

恒定电场时，电子所受外力为  $\bar{F} = -e\bar{E}$ ，且此时从整体上看由碰撞作用而产生的阻力和外场力可以达到一个平衡状态，所以电子的平均漂移速度保持恒定，

即  $\frac{d\bar{v}}{dt} = 0$ ，将其代入①式即得

$$\bar{v} = -\frac{e\tau\bar{E}}{m}$$

则此时在宏观上对应的电流密度为

$$\bar{J} = -ne\bar{v} = \frac{ne^2\tau}{m}\bar{E} \quad (\text{其中 } n \text{ 为自由电子密度})$$

再对照欧姆定律  $\bar{J} = \sigma\bar{E}$ ，可知金属电导率为

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

2. 由上式可得弛豫时间

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{m\sigma}{ne^2} = \frac{m}{ne^2\rho} \\ &= \frac{9.11 \times 10^{-31}}{(8.5 \times 10^{28}) \times (1.6 \times 10^{-19})^2 \times (1.7 \times 10^{-8})} \text{ s} \\ &= 2.46 \times 10^{-14} \text{ s} \end{aligned}$$