高等学校教学参考书

固体物理习题详解

吴代鸣等　解答
苏文辉　　校订

北京师范大学
藏书
1085869
图书馆

吉林人民出版社

前　言

美国C.Kittel著的《Introduction to Solid State Physics》(Fifth Edition)(1976)一书，是目前国际上有名的固体物理学教材之一，已有十一种文字的译本，颇受欢迎．全书共分十八章，其中包括晶体结构、晶格振动与声子、自由电子论、能带论、各种元激发、晶体的光学性质、超导电性、磁性以及力学性质等内容，精选了一百三十道习题．所选习题有助于巩固已学知识，并深入掌握全书的基本内容；很多习题颇有启发性，它能诱导人们进一步学会运用基本概念和重要模型去解决复杂的固体物理问题；还有不少习题涉及固体物理学中的一些较新的问题，解答这些问题将扩大知识面，习题解答起着全书补篇的作用．目前国内尚没有一本固体物理习题解答．有这样一份材料，对固体物理学课程的教学工作也许是有益的．本书可供固体物理学有关专业的大学生、研究生以及科学工作者参考．

本书是在吉林大学的固体物理学课程的教学实践中完成的．全部习题由吴代鸣、董维义、金曾孙、何岚鹰、郝兆印、苏文辉解答，由苏文辉校订．由于固体物理学的分支学科很多、内容丰富、范围广泛，而我们的水平有限，加上时间匆促，可能会有错误，希望读者批评指正．

1980年6月于长春

21世际黄天　刊此一游！

目　录

前　言

第一章　晶体结构

1．四面体键角 ……（1）
2．晶面指数 ……（2）
3．六角密堆(hcp)结构 ……（3）

第二章　晶体衍射与倒易格子

1．傅里叶级数的逆变换 ……（5）
2．晶面间距 ……（7）
3．由线排列与矩形排列产生的衍射 ……（8）
4．六角空间晶格 ……（12）
5．布里渊区的体积 ……（15）
6．衍射峰的宽度 ……（15）
7．中子截止滤波器 ……（17）
8．金刚石的结构因子 ……（17）
9．氢原子的散射因子 ……（19）
10．双原子线 ……（20）

第三章　晶体的结合

1．量子固体 ……（22）
2．bcc和fcc Ne的结合能 ……（23）
3．固体分子氢 ……（25）
4．形成离子晶体R^+R^-的可能性 ……（26）

5．线型离子晶体 ……（27）
6．立方ZnS结构 ……（29）
7．LiF的体模量 ……（30）
8．双价离子晶体 ……（32）
9．高压实验 ……（33）

第四章　声子（Ⅰ），晶格振动

1．正方形晶格的振动 ……（35）
2．单原子线性晶格 ……（38）
3．连续波方程 ……（41）
4．含有两个不同原子的基团 ……（43）
5．科恩(Kohn)反常 ……（44）
6．双原子链 ……（45）
7．金属中的原子振动 ……（47）
8．软声子模 ……（49）

第五章　声子（Ⅰ），热性质

1．模密度的奇异点 ……（54）
2．晶体原胞的RmS热膨胀 ……（55）
3．零点晶格位移与应变 ……（56）
4．一维晶格与层状晶格的热容 ……（58）
5．Grüneisen常数 ……（60）
6．正方形晶格的模密度 ……（64）

第六章　自由电子费米气体

1．电子气体的动能 ……（67）
2．电子气体的压强和体模量 ……（68）
3．二维电子气体的化学势 ……（69）
4．天体物理中的费米气体 ……（70）

5．液体He^4 ……（72）
6．电导率与频率关系 ……（73）
7．自由电子的动力学磁致电导率张量 ……（74）
8．自由电子费米气体的结合能 ……（77）
9．静态磁致电导率张量 ……（80）

第七章　能　　带

1．正方形晶格，自由电子能量 ……（83）
2．简约区中的自由电子能量 ……（86）
3．Kronig—Penney模型 ……（90）
4．金刚石结构中的势能 ……（92）
5．能隙中的复数波矢 ……（98）
6．正方晶格 ……（100）

第八章　半导体晶体

1．杂质轨道 ……（104）
2．施主的电离 ……（105）
3．含有两类载流子的霍尔效应 ……（105）
4．球体等能面的回旋共振 ……（107）
5．施主电离 ……（110）
6．含有两类载流子的磁阻 ……（111）

第九章　费米面与金属

1．矩形晶格的布里渊区 ……（116）
2．布里渊区，矩形晶格 ……（117）
3．六角密堆结构 ……（119）
4．二维二价金属的布里渊区 ……（122）
5．开轨道 ……（124）
6．对方势阱求结合能 ……（125）

7．钾的De Haas-Van Alphen周期 ……（128）
8．基于k·p 微扰理论的带边结构 ……（129）
9．Wannier 函数 ……（132）
10．开轨道与磁致电阻 ……（133）

第十章　等离子体振荡量子、电磁声子和极化子

1．表面等离子体振荡量子 ……（135）
2．介面等离子体振荡量子 ……（136）
3．Alfvén 波 ……（138）
4．螺旋波(Helicon waves) ……（141）
5．球体的等离子体振荡量子模 ……（142）
6．磁等离子体振荡频率 ……（143）
7．小波矢处的光学支 ……（144）
8．等离子体频率与电导率 ……（146）
9．费米气体的体模量 ……（147）
10．电子气体的响应 ……（148）
11．间隙等离子体振荡量子与范德瓦耳斯相互作用 ……（150）

第十一章　光学过程与激子

1．因果关系与响应函数 ……（155）
2．耗散求和规则 ……（156）
3．垂直入射时的反射 ……（157）
4．电导率求和规则与超导电性 ……（159）
5．介电常数与半导体能隙 ……（162）
6．金属红外反射的Hagen—Rubens关系 ……（163）
7．激子谱线的达维多夫劈裂 ……（165）

第十二章　超导电性

1．平板超导体中的磁场穿透 ……（167）

2．超导薄膜的临界场 …… （168）
3．超导体的二流体模型 …… （170）
4．磁通线的涡旋结构 …… （172）
5．London 穿透深度 …… （175）
6．Josephson 结的衍射效应 …… （176）
7．超导球的Meissner 效应 …… （177）

第十三章　电介质与铁电体

1．氢原子的极化率 …… （179）
2．导体球的极化率 …… （180）
3．空气间隙的影响 …… （181）
4．介面极化 …… （183）
5．球形介质的极化强度 …… （184）
6．原子的铁电性判据 …… （185）
7．居里点处的饱和极化强度 …… （186）
8．低于转变温度的介电常数 …… （187）
9．软模与晶格转变 …… （188）
10．铁电性的线型晶格 …… （189）

第十四章　抗磁性与顺磁性

1．氢原子的抗磁磁化率 …… （191）
2．Hund规则 …… （191）
3．三重激发态 …… （193）
4．来自内部自由度的热容量 …… （195）
5．泡利自旋磁化率 …… （197）
6．传导电子的铁磁性 …… （199）
7．二能级体系 …… （202）
8．S＝1体系的顺磁性 …… （204）

第十五章　铁磁性与反铁磁性

1．磁振子的色散关系 ……（205）
2．磁振子的热容量 ……（207）
3．奈耳(Neèl)温度 ……（208）
4．磁弹耦合 ……（210）
5．微粒的矫顽力 ……（213）
6．Tc附近的饱和磁化强度 ……（215）

第十六章　磁共振与微波激射器

1．等效电路 ……（216）
2．转动坐标系 ……（216）
3．超精细结构对金属中电子自旋共振的影响 ……（219）
4．各向异性场中的铁磁共振（FMR） ……（221）
5．交换共振频率 ……（222）
6．射频（Rf）饱和 ……（224）

第十七章　点缺陷与合金

1．夫伦克耳缺陷 ……（227）
2．肖脱基空位 ……（228）
3．F 心 ……（228）
4．Cu_3Au 的超格子谱线 ……（229）
5．位形热容量 ……（231）

第十八章　位　　错

1．原子最密集堆积线 ……（232）
2．位错对 ……（232）
3．作用于位错上的力 ……（233）

第一章　晶体结构

1．四面体键角．如图 1 — 1 所示，金刚石四面体键之间的交角与立方体的体对角线之间的交角相同．试用初等矢量分析求此角度的值．

〈解〉

如图 1 — 1 所示，$|\mathbf{a}'| = |\mathbf{b}'| = |\mathbf{c}'| = \sqrt{3}a/2$，金刚石的

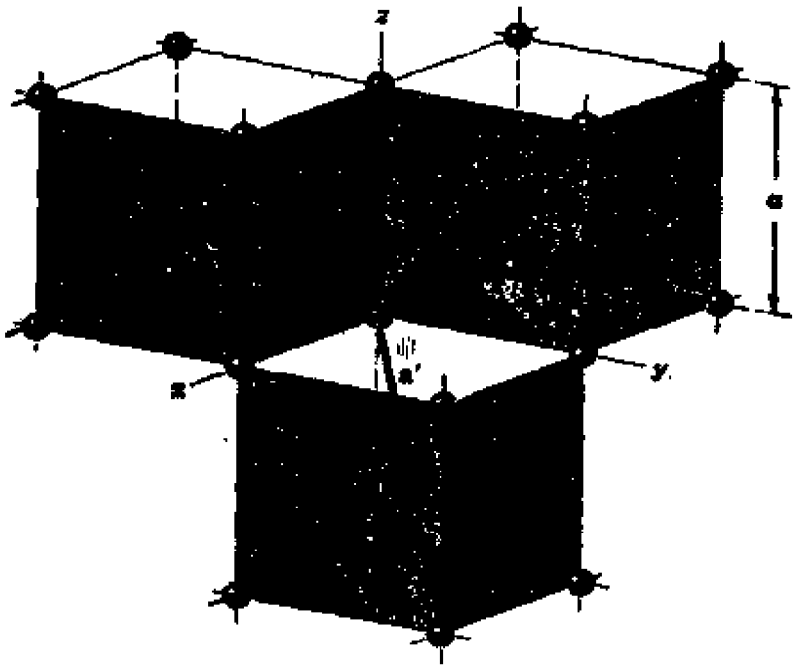


图1—1 体心立方晶格的平移基矢．这些矢量联结位于原点的格点和位于体心的格点．初基原胞为菱面体．立方体边长以 a 表示，则平移基矢为：

$$\mathbf{a}' = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}),$$

$$\mathbf{b}' = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}),$$

$$\mathbf{c}' = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}),$$

四面体键之间的夹角θ_{ab}，θ_{ac}，θ_{bc}为：

$$\cos\theta_{ab}=\frac{\mathbf{a}'\cdot\mathbf{b}'}{|\mathbf{a}'|\,|\mathbf{b}'|}=\frac{1}{3}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})\cdot(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$

$$=-\frac{1}{3},$$

$$\cos\theta_{ac}=\frac{\mathbf{a}'\cdot\mathbf{c}'}{|\mathbf{a}'|\,|\mathbf{c}'|}$$

$$=\frac{1}{3}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})\cdot(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})=-\frac{1}{3},$$

$$\cos\theta_{bc}=\frac{\mathbf{b}'\cdot\mathbf{c}'}{|\mathbf{b}'|\,|\mathbf{c}'|}$$

$$=\frac{1}{3}(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})\cdot(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})=-\frac{1}{3},$$

所以，$\theta_{ab}=\theta_{ac}=\theta_{bc}=109°\ 28'$.

2．晶面指数．考虑指数为（100）和（001）的晶面；晶格为面心立方（fcc），晶面指数是参照惯用立方晶胞选取的。若参照图1—2的初基轴时，这些晶面的指数是什么？

〈解〉

如图1—2，（100）面在$\mathbf{a}'$，$\mathbf{b}'$，$\mathbf{c}'$坐标系中与$\mathbf{b}'$轴平行，在$\mathbf{a}'$，$\mathbf{c}'$轴上的截距为$2a'$和$2c'$，截距的倒数$\frac{1}{2}$，$\frac{1}{\infty}$，$\frac{1}{2}$，故面指数为（101）。同样，（001）面在$\mathbf{a}'$，$\mathbf{b}'$，$\mathbf{c}'$三轴上的截距为$\infty a'$，$2b'$，$2c'$，截距的倒数为0，1/2，1/2，面指数为（011）。

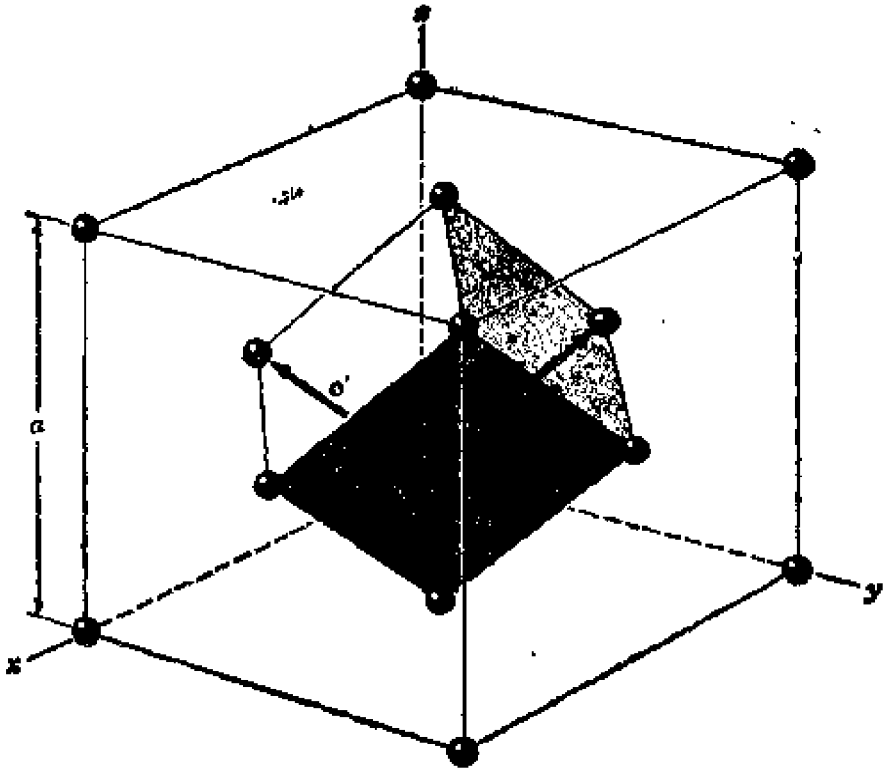


图 1 — 2 面心立方晶体的菱形初基原胞。平移基矢a′，b′，c′联结原点和位于面心的格点，如图所示，平移基矢为：

$$\mathbf{a}' = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}), \quad \mathbf{b}' = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}), \quad \mathbf{c}' = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}),$$

轴间交角为60°。

3．六角密堆（hcp）结构。 证明理想六角密堆结构的轴比c/a等于 $(8/3)^{1/2} = 1.633$。如果c/a明显大于此值，则晶体结构可以认为是由原子密排面所组成，但这些平面之间是疏松堆积的。

〈解〉

如图 1 — 3 所示，六角层内最近邻原子间距为a，而相邻两

层间的最近邻原子间距为

$$d=(a^2/3+c^2/4)^{1/2},$$

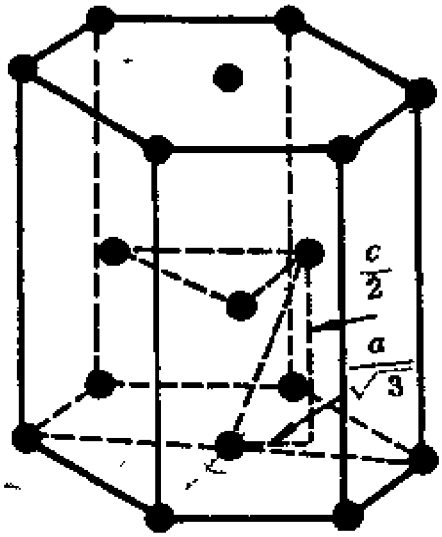


图 1—3 六角密堆结构。

当$d=a$时构成理想的密堆六角结构，此时有

$$a=(a^2/3+c^2/4)^{1/2},$$

由此解出，$c/a=(8/3)^{1/2}=1.633$。

若$c/a>1.633$时，则表示原子平面的层间距较理想结构的层间距大，因此层间堆集不够紧密。

第二章　晶体衍射与倒易格子

1. 傅里叶级数的逆变换

（a）证明方程式

$$n(x)=\sum_p n_p\exp(i2\pi px/a)$$

中的傅里叶系数n_p为。

$$n_p=a^{-1}\int_0^a dx n(x)\exp(-i2\pi px/a)。$$

（b）证明

$$n(\mathbf{r})=\sum n_G\exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r})$$

的逆变换为

$$n_G=V_c^{-1}\int_{Cell}dv n(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}),$$

式中V_c为晶体原胞的体积。

〈解〉

（a）若$n(x)$展为傅氏级数

$$n(x)=\sum_p n_p\exp(i2\pi px/a),$$

式中 p 为整数，上式两边乘以$a^{-1}\exp(-i2\pi px/a)$，并对x积分，得

$$\frac{1}{a}\int_0^a dx n(x)\exp(-i2\pi px/a)$$

$$=\sum_{p'}n_{p'}\frac{1}{a}\int_0^a dx\exp[i2\pi(p'-p)x/a],$$

而

$$\frac{1}{a}\int_0^a dx\exp[i2\pi(p'-p)x/a]$$

$$=\delta(p'-p)=\begin{cases}1, & \text{当}p'=p\text{时};\\ 0, & \text{当}p'\neq p\text{时}.\end{cases}$$

所以有：

$$\sum_{p'} n_{p'}\delta(p'-p)=n_p$$

$$=\frac{1}{a}\int_0^a dx n(x)\exp(-i2\pi px/a).$$

（b）若有三维傅氏级数

$$n(\mathbf{r})=\sum n_G\exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}),$$

为计算 n_G，可在上式两边乘以 $v_c^{-1}\exp(-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r})$，并对原胞c积分，则得

$$V_c^{-1}\int_c dv n(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r})$$

$$=\sum_{G'} n_G V_c^{-1}\int_c dv\exp[i(\mathbf{G}'-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}], \qquad (1)$$

其中V_c为原胞体积，$\mathbf{G}$，$\mathbf{G}'$为倒易矢量．上式右边的积分有如下的结果

$$\int_c dv\exp[i(\mathbf{G}'-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}]=V_c\delta(\mathbf{G}'-\mathbf{G})$$

$$=\begin{cases}V_c, & \text{当}\quad \mathbf{G}'=\mathbf{G}\text{时};\\ 0, & \text{当}\quad \mathbf{G}'\neq\mathbf{G}\text{时}.\end{cases} \qquad (2)$$

$\mathbf{G}'=\mathbf{G}$的结果是显然的．现只需证明$\mathbf{G}'\neq\mathbf{G}$的情况，令$\mathbf{G}'-\mathbf{G}=\mathbf{G}''$，只需证明

$$\int_c dv\exp(i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r})=0 \qquad \mathbf{G}''\neq 0$$

即可．因为$\mathbf{G}'$，$\mathbf{G}$均为晶体的倒易矢量，$\mathbf{G}''$也应为倒易矢量，所以$\exp(i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r})$必具有晶格周期性，故上式对原胞的积分与原胞的选择无关．若将原胞平移任意矢量$\mathbf{d}$，积分区域就平移至原胞c'，于是有

$$\int dv\exp[i\mathbf{G}''\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{d})]=\int_{c'}dv\exp(i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r})$$

$$=\int_{c}dv\exp(i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r}),$$

所以

$$[\exp(i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{d})-1]\int_{c}dv\exp(i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r})=0.$$

因d是任意一个矢量，$\exp(i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{d})\neq 1$，故$\mathbf{G}''\neq 0$时，必

$$\int_{c}dv\exp(i\mathbf{G}''\cdot\mathbf{r})=0,$$

于是，（2）式成立。将（2）式代入（1）式，得

$$n_G=V_c^{-1}\int_{c}dvn(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}).$$

2. 晶面间距. 设晶格中的一个平面为hkl.（a）证明倒易矢量$\mathbf{G}=h\mathbf{A}+k\mathbf{B}+l\mathbf{C}$垂直于这个平面。（b）证明晶格的两相邻平行平面（这些平面通过格点）之间的距离为$d(hkl)=2\pi/|\mathbf{G}|$，$\mathbf{G}=h\mathbf{A}+k\mathbf{B}+l\mathbf{C}$。（c）对于简单立方晶格，证明$d^2=a^2/(h^2+k^2+l^2)$。

〈解〉

（a）晶面(hkl)在基矢a、b、c上的截距为a/h，b/k，c/l。作矢量

$$\mathbf{m}_1=\mathbf{a}/h-\mathbf{b}/k,$$

$$\mathbf{m}_2=\mathbf{b}/k-\mathbf{c}/l,$$

$$\mathbf{m}_3=\mathbf{c}/l-\mathbf{a}/h.$$

显然这三个矢量互不平行，均落在(hkl)晶面上，且

$$\mathbf{m}_1\cdot\mathbf{G}=(\mathbf{a}/h-\mathbf{b}/k)\cdot(h\mathbf{A}+k\mathbf{B}+l\mathbf{C})$$

$$=(\mathbf{a}/h-\mathbf{b}/k)\cdot\left[2\pi h\frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}+2\pi k\frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}\right.$$

$$+2\pi l-\frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}\cdot]=0,$$

同理有

$$\mathbf{m}_2\cdot\mathbf{G}=0,$$

$$\mathbf{m}_3\cdot\mathbf{G}=0,$$

故倒易矢量G垂直于晶面（hkl）。

（b）晶面族（hkl）的面间距为

$$d_{hkl}=\mathbf{a}/h\cdot\mathbf{G}/|\mathbf{G}|=\mathbf{a}/h\cdot\frac{(h\mathbf{A}+k\mathbf{B}+l\mathbf{C})}{|\mathbf{G}|}=2\pi/|\mathbf{G}|,$$

（c）对于简立方晶格，

$$|\mathbf{G}|=(2\pi/a)(h^2+k^2+l^2)^{1/2},$$

所以 $$d^2{}_{hkl}=a^2/(h^2+k^2+l^2),$$

3．由线排列与矩形排列产生的衍射。晶格常数为 a 的线性结构的衍射花样由图 2—1 来说明．有些类似的结构在分子生物学中是重要的；脱氧核糖核酸（DNA）和许多蛋白质是螺线形的．（a）让图 2—1 b的衍射花样使圆柱状底片曝光，圆柱轴与线性结构或丝状样品的轴重合．试描述底片上衍射花样的图形．（b）平板照相底片放在丝状样品的后面并垂直于入射束。粗略画出在底片上的衍射花样图形．（c）一层原子平面形成晶格常数为 a 的矩形晶格．平面垂直于入射 x 射线束。请粗略画出在照相底片上的衍射花样．（d）图 2—2 表示从Ni 晶体的（110）表面的Ni原子背反射的电子衍射花样。说明衍射图形的取向与在模型中所显示的表面原子的位置的关系．假定在低能电子反射中只有表面原子起作用．

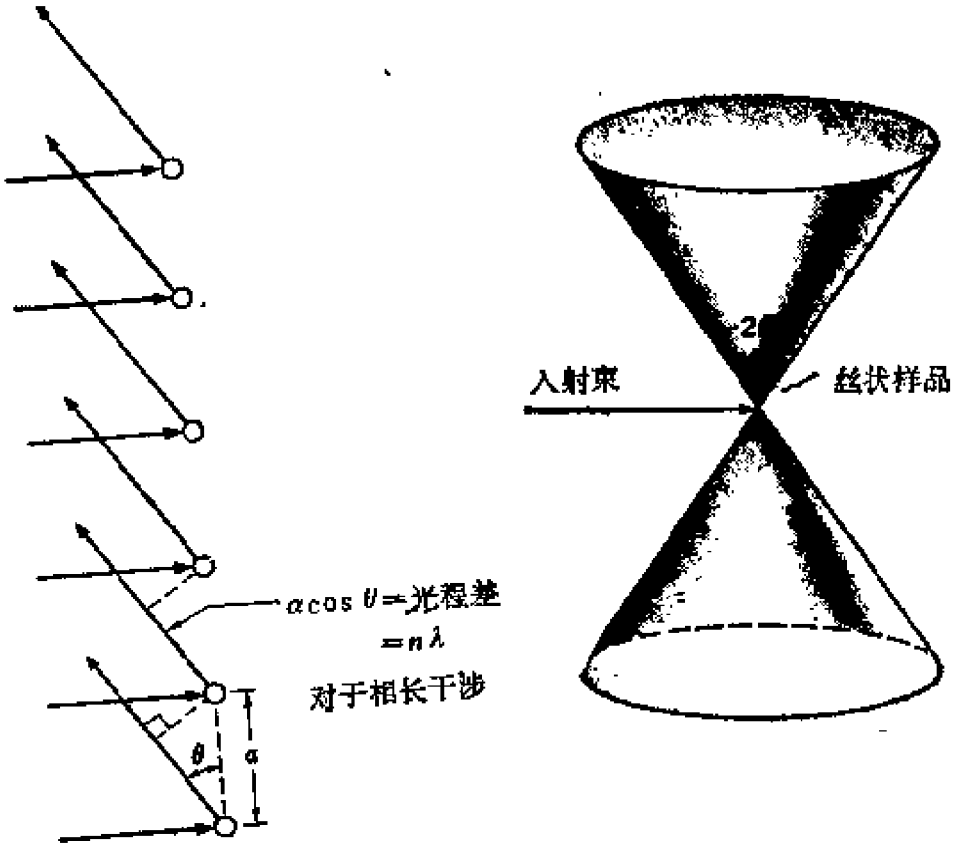


图 2—1 单色x射线束垂直于晶格常数为a的线性晶格的衍射图案。（a）相长干涉的条件为 $a\cos\theta = n\lambda$ n为整数。（b）对于给定的n,λ相同的衍射线落在一锥面上。

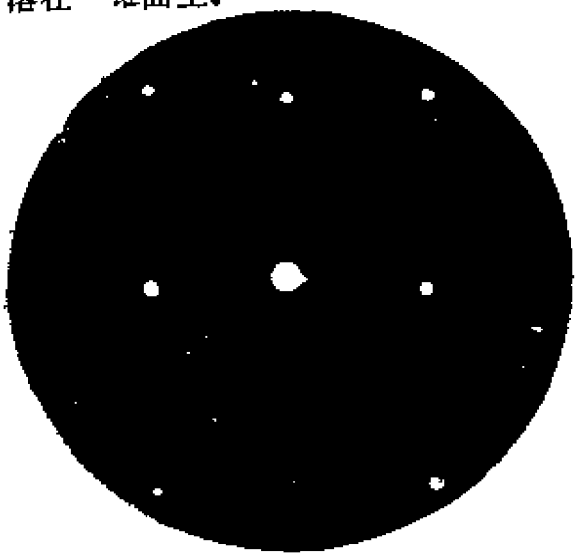
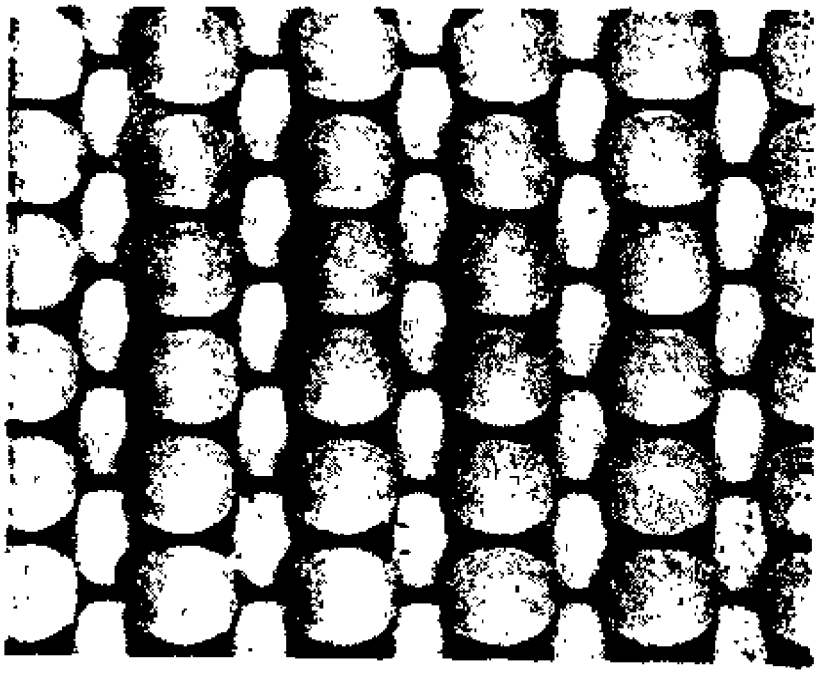


图 2—2（a）



（b）

图 2—2 （a）76ev的电子垂直入射至Ni晶体（110)面上的背散射花样，表面的模型在（b）中

〈解〉

（a）对一维原子行列，波长为λ的x射线垂直入射时，满足条件 $n\lambda = a\cos\theta$的衍射线构成顶角为2θ 的圆锥，每一圆锥相当于n的一定值，见图 2—1 b．如果照片圈成以原子行列为轴的圆筒，则圆锥与同轴圆筒底片所成的交线就是我们得到的衍射线，当底片摊平后，它们是一些平行的直线，如图 2—3 所示．

（b）当底片是一平行于原子行列的平面时，圆锥与底片平面的交线是一系列双曲线，如图 2—4 所示．

（c）对二维晶格的一个原子平面，垂直入射的 x 射线的散射只能在同时满足以下两个方程的方向上发生：

$$a\cos\theta_1 = n\lambda,$$

$$b\cos\theta_2 = m\lambda,$$

a，b分别为晶轴a，b上的周期。从几何上说，满足上述每一方程式的是一组同轴的圆锥体，只有在不同组的圆锥体的交线上才同时满足这二个方程式。x射线被原子平面的衍射只在交线方向上强度极大，在其它方向强度是极其微弱的。当照相底片与原子平面平行时，两组圆锥体与底片平面的交线为两组双曲线，这两组双曲

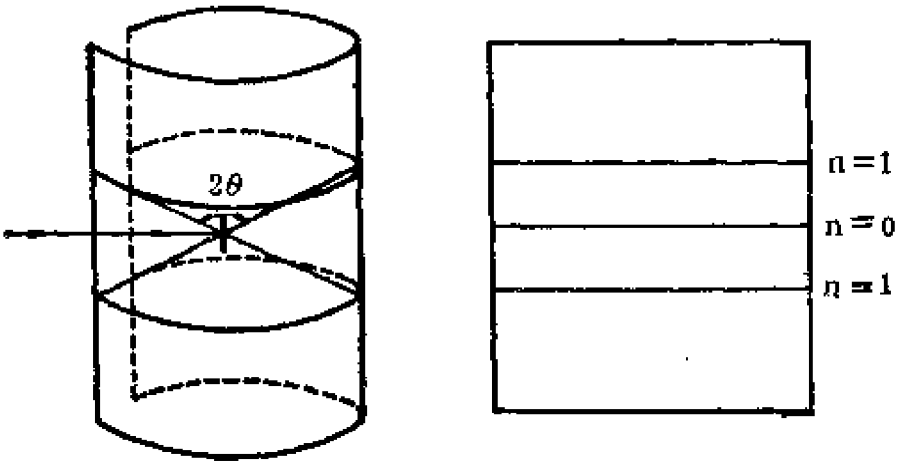


图 2—3　一维原子列衍射线。（底片围成以原子列为轴的圆筒）

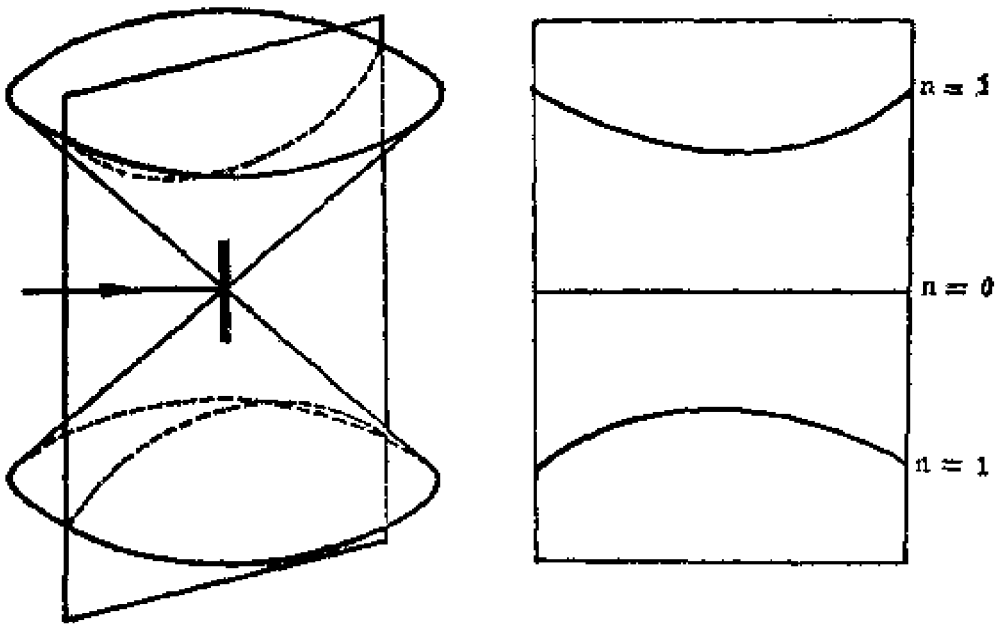


图 2—4　一维原子列衍射线（底片平面平行于原子列）

线的交点就是我们所得到的衍射斑点，定性地如图 2 — 5 所示。

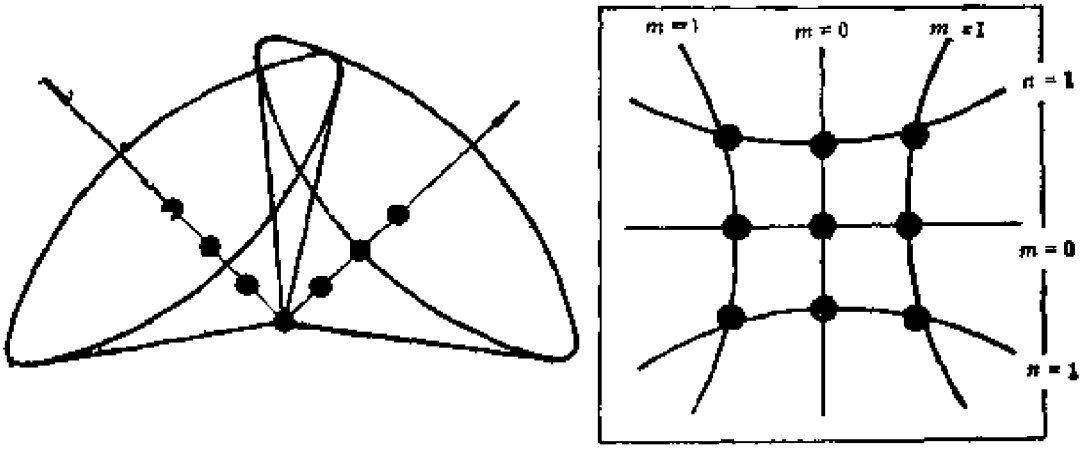


图 2 — 5　二维晶格的衍射花样

（d）利用（c）的分析可以理解图 2 — 2 所示的低能电子对Ni（110）表面的衍射结果。因为电子能量低只有表面原子起作用。图 2 —2 *a*的衍射斑点排成二维矩形点阵，*x*和*y*轴方向上的周期不同，表明原子平面上*x*轴和*y*轴方向上原子的周期亦不同，衍射斑点在*x* 方向上的距离比*y* 方向的距离小，对应于原子平面*x*方向的周期要比*y*方向的周期大，原子平面的模型如图 2 — 2 b 所示。低能电子衍射（LEED）方法正是根据这种原理确定晶体的表面结构的。

4．六角空间晶格。六角空间晶格的平移基矢可以取为：

$$\mathbf{a}=\left(\frac{3^{1/2}a}{2}\right)\hat{x}+\left(\frac{a}{2}\right)\hat{y}\,;\quad \mathbf{b}=-\left(\frac{3^{1/2}a}{2}\right)\hat{x}+\left(\frac{a}{2}\right)\hat{y}\,;$$

$$\mathbf{c}=c\hat{z}\,.$$

（a）证明初基原胞体积为 $(3^{1/2})a^2c$。（b）证明倒易格子的平移基矢为

$$\mathbf{A}=\left(\frac{2\pi}{3^{1/2}a}\right)\hat{x}+\left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{y}\,,$$

$$\mathbf{B} = -\left(\frac{2\pi}{3^{1/2}a}\right)\hat{x} + \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{y},$$

$$\mathbf{C} = \left(\frac{2\pi}{c}\right)\hat{z},$$

所以这种晶格是六角空间晶格自已的倒易格子，不过晶轴有了旋转。（c）说明并绘出六角空间晶格的第一布里渊区。

〈解〉

（a）六角晶格原胞的体积为

$$V_c = |\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})|$$

$$= \left(\frac{3^{1/2}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}\right)\cdot\left[\left(-\frac{3^{1/2}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}\right)\times c\hat{z}\right]$$

$$= \left(\frac{3^{1/2}}{2}\right)a^2c.$$

（b）六角晶格的倒易平移基矢为

$$\mathbf{A} = \frac{2\pi}{V_c}\mathbf{b}\times\mathbf{c} = \frac{2\pi}{V_c}\left(-\frac{3^{1/2}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}\right)\times c\,\hat{z}$$

$$= \frac{2\pi}{3^{1/2}a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y},$$

$$\mathbf{B} = \frac{2\pi}{V_c}\mathbf{c}\times\mathbf{a} = \frac{2\pi}{V_c}c\hat{z}\times\left(\frac{3^{1/2}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}\right)$$

$$= -\frac{2\pi}{3^{1/2}a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y},$$

$$\mathbf{C} = \frac{2\pi}{V_c}\mathbf{a}\times\mathbf{b} = \frac{2\pi}{V_c}\left(\frac{3^{1/2}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}\right)\times\left(-\frac{3^{1/2}a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}\right)$$

$$= \frac{2\pi}{c}\hat{z}.$$

与正格子的平移基矢a，b，c形式相同，可见倒格子亦为六角格子。

（c）六角晶格的倒易矢量为

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} - l\mathbf{C}$$

$$= \frac{2\pi}{3^{1/2}a}(h-k)\hat{x} + \frac{2\pi}{a}(h+k)\hat{y} + \frac{2\pi}{c}l\hat{z}.$$

选某一倒易格点为原点，其最近邻、次近邻格点的位置如图 2—6 a 所示．从原点出发作以下八个倒易格点（hkl）：

$$(\pm 1,\ 0,\ 0),(0,\ \pm 1,\ 0),(0,\ 0,\ \pm 1),$$

$$(+1,\ +1,\ 0),(-1,\ -1,\ 0),$$

这八个格点与原点（0，0，0）分别组成八个倒易矢量，做这八个倒易矢量的垂直平分面，构成一六角柱体，即为第一布里渊区，如图 2—6 b 所示．布里渊区的界面方程为：

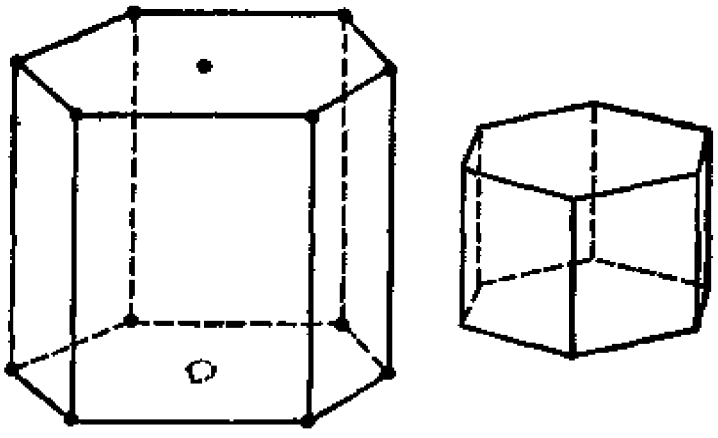
$$\mathbf{K}\cdot\mathbf{G} = \frac{1}{2}G^2$$

或者写成

$$\frac{1}{\sqrt{3}a}(h-k)k_x + \frac{1}{a}(h+k)k_y + \frac{l}{c}k_z$$

$$= \pi\left[\frac{4(h^2+k^2+hk)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}\right],$$

其中k_x，k_y，k_z是波矢量R的分量。



（a）　　（b）

图 2—6 六角空间晶格（a）和它的第一布里渊区（b）

5．布里渊区的体积. 证明第一布里渊区的体积为 $(2\pi)^3/V_c$，V_c为晶体初基原胞的体积。

〈解〉

利用正、倒格子基矢间的关系

$$\mathbf{A}=\frac{2\pi}{V_c}\mathbf{b}\times\mathbf{c},\quad \mathbf{B}=\frac{2\pi}{V_c}\mathbf{c}\times\mathbf{a},\quad \mathbf{C}=\frac{2\pi}{V_c}\mathbf{a}\times\mathbf{b},$$

V_c为正格子原胞的体积，布里渊区的体积就等于倒易格子原胞的体积，即

$$\begin{aligned}V_b&=|\mathbf{A}\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{C})|\\&=\left(\frac{2\pi}{V_c}\right)^3\left|(\mathbf{b}\times\mathbf{c})\cdot\left[(\mathbf{c}\times\mathbf{a})\times(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\right]\right|\\&=\left(\frac{2\pi}{V_c}\right)^3\left[(\mathbf{b}\times\mathbf{c})\cdot\mathbf{a}\right]\left[\mathbf{c}\cdot(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\right]\\&=\frac{(2\pi)^3}{V_c}\end{aligned}$$

6．衍射峰的宽度. 假定在线性晶体中的每一格点$\rho_m=m\mathbf{a}$（m为整数）上有相同的点散射中心。与散射振幅

$$a'=\int dv n(\mathbf{r})\exp(-i\Delta\mathbf{K}\cdot\mathbf{r})$$

类似，总的散射振幅正比于

$$a'=\sum\exp[-im\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k}].$$

求和遍及M个格点，其值为

$$a'=\frac{1-\exp[-iM(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})]}{1-\exp[-i\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k}]},$$

其中用了级数

$$\sum_{m=0}^{M-1}x^m=\frac{1-x^M}{1-x}.$$

（a）散射强度正比于$|a'|^2$．证明

$$|a'|^2 = a'^{*}a' = \frac{\sin^2\frac{1}{2}M(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})}{\sin^2\frac{1}{2}(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})}.$$

（b）我们知道，当$\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k} = 2\pi h$时，出现衍射极大，$h$为整数.略微改变$\Delta\mathbf{k}$并在$\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k} = 2\pi h + \varepsilon$中使$\varepsilon$给出$\sin\frac{1}{2}M(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})$中的第一个零值来确定$\varepsilon$。证明$\varepsilon = 2\pi/M$。因此，衍射峰的宽度正比于$1/M$，对于$M$的宏观值，峰宽是非常窄的。三维晶体也有同样的结果。

〈解〉

（a）散射振幅正比于

$$a' = \frac{1-\exp[-iM(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})]}{1-\exp[-i(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})]},$$

散射强度正比于$|a'|^2$，而

$$|a'|^2 = a'^{*}a' = \left\{\frac{1-\exp[iM(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})]}{1-\exp[i(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})]}\right\}\left\{\frac{1-\exp[-iM(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})]}{1-\exp[-i(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})]}\right\},$$

因为

$$\begin{aligned}&[1-\exp(ix)][1-\exp(-ix)]\\&= 2-\exp(ix)-\exp(-ix)\\&= 2(1-\cos x) = 4\sin^2\frac{1}{2}x,\end{aligned}$$

所以

$$|a'|^2 = \frac{\sin^2\frac{1}{2}M(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})}{\sin^2\frac{1}{2}(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k})}.$$

（b）若$\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k} = 2\pi h + \varepsilon$，利用

$$\sin\frac{1}{2}M(\mathbf{a}\cdot\Delta\mathbf{k}) = \sin\frac{1}{2}M(2\pi h + \varepsilon)$$

$$= \pm\sin\frac{M\varepsilon}{2}$$

的第一个零值，即要求

$$\frac{M\varepsilon}{2} = \pi$$

确定出的ε为

$$\varepsilon = \frac{2\pi}{M},$$

所以，衍射极大值的宽度正比于$1/M$。M是格点数，故衍射线宽是非常窄的，这一结论也适用于三维晶体。

7．中子截止滤波器。对反应堆产生的中子，说明透射长波热中子的滤波器的作用。这种滤波器是一个填满粉末晶体的管子。

〈解〉

当中子束通过装满某种粉末晶体的管子时，会受到各种取向的小晶粒的散射，满足条件$2d\sin\theta = n\lambda$，便发生布喇格反射。考虑$n=1$的情况，由于是粉末晶体，存在各种不同的θ值，因为$|\sin\theta|\leqslant 1$，所以$\lambda\leqslant 2d$的中子均被反射，只有$\lambda > 2d$的中子可以通过。一般晶体的晶格常数的数量级为几个A，故可透射的中子的波长亦为几个A或更长。利用这一原理可以制成中子滤波器，只允许长波长的热中子通过。

8．金刚石的结构因子。金刚石的晶体结构已在原书第一章中说明了。如果原胞取为惯用的立方体，基团（basis）包含八个原子。（a）求基团的结构因子。（b）求结构因子的零点，并证明金刚石结构的允许反射满足条件$h+k+l=4n$，其中指数

hkl全为偶数或全为奇数，n为任意整数（见图 2 — 7）。

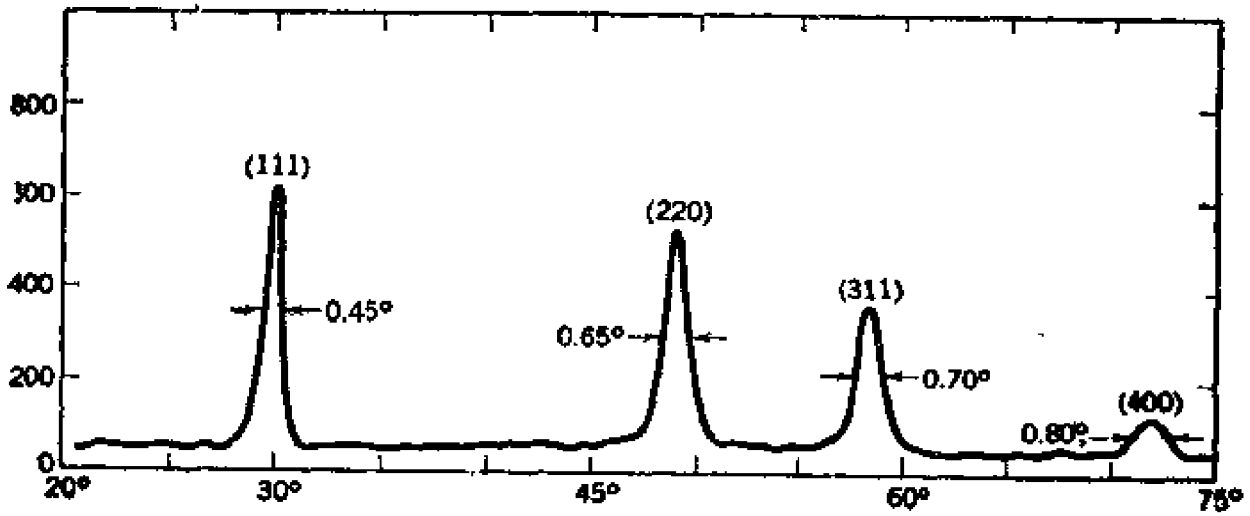


图 2 — 7 粉末金刚石的中子衍射图（取自G.Bacon）

〈解〉

（a）金刚石结构的立方原胞含八个原子，其坐标为

$$(0,\ 0,\ 0),\ (\frac{1}{4},\ \frac{1}{4},\ \frac{1}{4}),(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0),(\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{2}),$$

$$(0,\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}),(\frac{1}{4},\ \frac{3}{4},\ \frac{3}{4}),(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}),(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\ \frac{1}{4}).$$

结构因子为

$$S=\sum_j f_j\exp(-i\mathbf{r}_j\cdot\mathbf{G})$$

$$=\sum_j f_j\exp[-i2\pi(x_jh+y_jk+z_jl)].$$

因每个原子的散射因子 f_j 都相同，于是

$$S=f\Big\{1+\exp[-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)]+\exp[-i\pi(h+k)]$$

$$+\exp[-i\pi(h+l)]+\exp[-i\pi(k+l)]$$

$$+\exp[-i\frac{\pi}{2}(h+3k+3l)]+\exp[-i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l)]$$

$$+\exp[-i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)]\Big\}$$

$$= f\left\{1+\exp[-i\pi(h+k)]+\exp[-i\pi(h+l)]\right.$$

$$\left.+\exp[-i\pi(k+l)]\right\}\left\{1+\exp[-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)]\right\}.$$

（b）$S=0$的条件是：

（1）当hkl部份为奇部份为偶时，有

$$\left\{1+\exp[-i\pi(h+k)]+\exp[-i\pi(k+l)]+\exp[-i\pi(h+l)]\right\}=0;$$

（2）当$\frac{1}{2}(h+k+l)=2n+1$时，有

$$1+\exp[-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)]=0.$$

要使$S\neq 0$，则由条件（1），hkl应全为奇或全为偶，同时由条件（2），要求$\frac{1}{2}(h+k+l)=2n$，但当hkl全为奇时不可能满足这一要求。所以$S\neq 0$的条件是：

（1）$h+k+l=4n$，且hkl全为偶；

（2）hkl全为奇。

衍射强度正比于S^2，只有相应于$S\neq 0$的衍射线才能被观察到，图2—6所表示的粉末金刚石的中子衍射谱完全证实上述结果。

9．氢原子的散射因子。对于处在基态的氢原子，电子数密度为$n(r)=(\pi a_0^3)^{-1}\exp(-2r/a_0)$，$a_0$为玻尔半径。证明散射因子为$f_G=16/(4+G^2a_0^2)^2$。

〈解〉

氢原子基态电子密度为

$$n(r)=\frac{1}{\pi a_0^3}\exp(-2r/a_0),$$

其散射因子为

$$f_G=\int d\tau n(r)\exp(-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r})$$

$$=\frac{2}{iGa_0^3}\int_0^\infty \exp(-2r/a_0)[\exp(iGr)-\exp(-iGr)]rdr.$$

利用积分公式

$$\int_0^\infty x^n\exp(-ax)dx=\frac{n!}{a^{n+1}},$$

很容易算出

$$f_G=\frac{2}{iGa_0}\left[\frac{1}{(2-iGa_0)^2}-\frac{1}{(2+iGa_0)^2}\right]$$

$$=\frac{16}{(4+G^2a_0^2)^2}.$$

10. 双原子线. 设有A-B键长为$\frac{1}{2}a$的原子线 ABAB……AB，原子A、B的散射因子分别为f_A，f_B，入射x射线束垂直于原子线。（a）证明干涉条件为$n\lambda=a\cos\theta$，θ为衍射束与原子线之间的交角。（b）证明h为奇数时衍射束的强度正比于$|f_A-f_B|^2$，h为偶数时正比于$|f_A+f_B|^2$。（c）说明$f_A=f_B$时会发生什么现象？

〈解〉

（a）光程差为$a\cos\theta$，所以干涉条件为

$$a\cos\theta=n\lambda.$$

（b）现在每一原胞含有两个原子，其坐标分别为0，$\frac{1}{2}$，结构因子为

$$S = f_A + f_B\exp(-ih\pi).$$

衍射线强度

$$I \sim S^2 = [f_A + f_B\exp(-ih\pi)][f_A + f_B\exp(ih\pi)]$$

$$= f_A^2 + f_B^2 + 2f_Af_B\cos h\pi$$

$$= \begin{cases} (f_A + f_B)^2, & h\text{为偶数;} \\ (f_A - f_B)^2, & h\text{为奇数.} \end{cases}$$

（c）若$f_A \approx f_B$两种原子的散射因子相同，对x射线来说，相当于只有一种原子的线性晶格.根据（b）的结果，只有h为偶数的衍射线出现。在某些离子晶体如KCl中，K^+和Cl^-是等电子的，$f_{K^+} \approx f_{Cl^-}$，所以h为奇数的反射线很弱，研究这种弱的反射线可以得到由于不同核电荷引起的离子半径的差别的有用的资料。

第三章　晶体的结合

1．量子固体．量子固体中主要的排斥能是原子的零点能．考虑结晶 He^4 的一个粗略的一维模型，每个 He 原子限制在长度为 L 的线段内．取线段为半波长的自由粒子波函数为基态波函数．（a）求每个粒子的零点动能．（b）求出由于膨胀而仍保持线性结构所需要的力的表达式．（c）平衡时动能的扩张倾向被范德瓦耳斯相互作用所抵消．最近邻原子间的范德瓦耳斯能很粗略地由 $U(L) = -1.6L^{-6}10^{-60}$erg给出，$L$以$cm$为单位，求$L$的平均值．

〈解〉

（a）根据量子力学，限制在L线段内的自由 He^4 原子的波函数有$\psi = Ae^{ikx}$形式，其中K为波矢，$K = 2\pi/\lambda$．对应于$L = \lambda/2$的波函数为基态波函数，则$K_0 = 2\pi/2L \equiv \pi/L$．所以基态波函数为 $\psi_0 = Ae^{i\frac{\pi}{L}x}$．每个原子的零点动能也就是基态的平均动能：

$$\langle T\rangle = \frac{\int_0^L \psi_0^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi_0 dx}{\int_0^L \psi_0^*\psi_0 dx} = \frac{\hbar^2}{8mL^2}.$$

由此可见，每个粒子的零点动能与原子的质量 m和线段长度L的平方成反比．

（b）因零点动能会引起线段的膨胀，为保持长度为L的线段结构，必须施加的力为：

$$F = -\frac{d\langle T\rangle}{dL} = -\frac{d}{dL}\left(\frac{\hbar^2}{8mL^2}\right) = \frac{\hbar^2}{4mL^3}.$$

（c）有范德瓦耳斯相互作用时，体系的总能量为 $U = \langle T\rangle + U(L)$，$U(L)$是范德瓦耳斯能，

$$U = \frac{\hbar^2}{8mL^2} - \frac{1.6}{L^6}\times 10^{-60},$$

当平衡时，

$$\left(\frac{dU}{dL}\right)_{L_0} = 0 = -\frac{\hbar^2}{4mL_0^3} + 1.6\frac{6}{L_0^7}\times 10^{-60}.$$

于是解得：

$$L_0^4 = \frac{4m\times 1.6\times 6\times 10^{-60}}{\hbar^2} = 5.813\times 10^{-30}\text{cm}^4 .$$

所以L的平衡值为$L_0 = 4.91\text{A}$。

2. bcc和fcc Ne的结合能。用林纳德-琼斯(Lennard-Jones)势计算Ne在bcc和fcc结构中的结合能之比值。bcc结构的晶格和为

$$\sum_j{}' P_{ij}^{-12} = 9.11418;\quad \sum_j{}' P_{ij}^{-6} = 12.2533.$$

〈解〉

如果略去Ne原子的动能，利用Lennard-Jones势，Ne晶体的总相互作用能为：

$$U_{tot} = \frac{1}{2}N(4\varepsilon)\left[\sum_j{}'\left(\frac{\sigma}{P_{ij}R}\right)^{12} - \sum_j{}'\left(\frac{\sigma}{P_{ij}R}\right)^{6}\right]. \qquad (1)$$

平衡时，

$$\left(\frac{dU_{tot}}{dR}\right)_{R=R_0} = 0 = \frac{1}{2}N(4\varepsilon)$$

$$\left[-\frac{12\sigma^{12}}{R^{13}}\sum_j{}'\frac{1}{P_{ij}^{12}}+\frac{6\sigma^6}{R^7}\sum_j{}'P_{ij}^{-6}\right],$$

于是解得：

$$\frac{\sigma}{R_0}=\left\{\sum_j{}'P_{ij}^{-6}\Big/2\sum_j{}'P_{ij}^{-12}\right\}^{\frac{1}{6}}. \qquad (2)$$

对于fcc结构，

$$\sum_j{}'P_{ij}^{-12}=12.19188,$$

$$\sum_j{}'P_{ij}^{-6}=14.45392;$$

对于bcc结构，

$$\sum_j{}'P_{ij}^{-12}=9.11418,$$

$$\sum_j{}'P_{ij}^{-6}=12.2533. \qquad (3)$$

将（2）式代入（1）式得：

$$U_{tot}=\frac{1}{2}N(4\varepsilon)\left[\frac{(\sum_j{}'P_{ij}^{-6})^2}{(2\sum_j{}'P_{ij}^{-12})^2}\sum_j{}'P_{ij}^{-12}-\frac{\sum_j{}'P_{ij}^{-6}}{2\sum_j{}'P_{ij}^{-12}}\cdot\sum_j{}'P_{ij}^{-6}\right]$$

$$=-\frac{1}{2}N\varepsilon\left(\sum_j{}'P_{ij}^{-6}\right)^2\Big/\sum_j{}'P_{ij}^{-12}.$$

令 $\beta=\dfrac{U_{tot\ fcc}}{U_{tot\ bcc}}$，

再将（3）的数值代入，得：

$$\beta\approx1.040.$$

由此可见，Ne取fcc结构形式比bcc结构更稳定些。

3．固体分子氢．对于H_2，从气体的测量得到Lennard-Jones参数为$\varepsilon = 50\times10^{-16}$erg，$\sigma = 2.96$A．计算fcc结构的$H_2$的结合能（以KJ/mol为单位），每个氢分子可当做球形来处理．结合能的实验值为0.751KJ/mol，试与计算值比较之．

〈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：

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

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

$\varepsilon = 50\times10^{-16}$erg，　　$\sigma = 2.96$A，

$N = 6.022\times10^{23}$/mol，

平衡时，$\left(\frac{dU_{tot}}{dR}\right)_{R_0} = 0 = 2N\varepsilon\frac{d}{dR}\left[(12.13)\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - (14.45)\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right]_{R_0}$，

解得：　　$R_0 \approx 3.16$A．

将R_0代入U_{tot}，得到平衡时晶体的总能为：

$$U_{tot} = 2\times6.022\times10^{23}/\text{mol}\times50\times10^{-16}\text{erg}\times\left[(12.13)\left(\frac{2.96}{3.16}\right)^{12} - (14.45)\left(\frac{2.96}{3.16}\right)^{6}\right]$$

$$\approx -2.55\text{KJ/mol}.$$

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

4．形成离子晶体R^+R^-的可能性。 设想晶体依靠相同原子或分子R形成的正负离子的库仑吸引而结合。应用离化能等的数据计算取NaCl结构形式的Na^+Na^-的晶体相对于常态金属Na的稳定性。计算在金属Na的实测原子间距下的Na^+Na^-的能量，以0.78 ev作为Na的电子亲和能。

〈解〉

将Na^+Cl^-结构中的Cl^-换成Na^-离子，形成以正、负Na离子相互吸引的离子晶体Na^+Na^-，总的晶格能为：

$$U_{tot} = -\frac{N\alpha q^2}{R}\left(1-\frac{\rho}{R}\right).$$

其中，α为NaCl结构的麦德隆常数α = 1.747565，

$N = 6.022\times10^{23}/\text{mol}$，

$q = 4.803\times10^{-10}\text{esu}$，

Na^+Na^-的ρ近似用NaCl结构的参数$\rho = 0.321\text{A}$代替。

R应取Na^+Na^-的最近距离，根据题目要求取金属Na的最近邻距离R = 3.659A来计算。因此，代入上式可得平均每一对分子Na^+Na^-的相互作用能为：

$$E = \frac{U_{tot}}{N} = -\frac{\alpha q^2}{R}\left(1-\frac{\rho}{R}\right)$$

$$= \frac{-1.747565\times(4.803\times10^{-10}\text{esu})^2}{3.659\times10^{-8}\text{cm}}\left(1-\frac{0.321}{3.659}\right)$$

$$\approx -6.27\text{ev}.$$

另外，利用Na的离化能，电子亲和能的数据，也可以估算出形成一对Na^+Na^-分子所需要的能量：

E' = Na的一次离化能 + Na的电子亲和能

= 5.14ev − 0.78ev

= 4.36ev。

由上述关于Na^+Na^-的理论计算和估算，知道一对Na^+Na^-离子分子的结合能约在 4.36～6.27ev 之间，而常态下的金属 Na的结合能约为 1.113ev/atom（见第三章表1）。因此，从理论上分析，Na^+Na^-有较金属Na更大的结合能，从而有存在离子晶体R^+R^-的可能性。但实验上尚未发现有单原子R的R^+R^-结构，相信以分子作基团的某些有机分子晶体也许可能出现这种结构。

5. 线型离子晶体. 设由2N个离子组成的线晶格，电荷 $\pm q$ 交替排列，最近邻离子间的排斥能为 A/R^n。（a）证明在平衡距离下

$$(\text{CGS})\quad U(R_0) = -\frac{\alpha N q^2 \ln 2}{R_0}\left(1-\frac{1}{n}\right).$$

（b）压缩晶体，使$R_0 \to R_0(1-\delta)$，证明晶体压缩一个单位长度所做的功的首项为$\frac{1}{2}C\delta^2$，其中

$$(\text{CGS})\quad C = \frac{(n-1)q^2\ln 2}{R_0}.$$

用 $q^2/4\pi\varepsilon_0$代替q^2就得到SI单位制的结果。

〈解〉

（a）第 i 个离子与其余离子的相互作用能为

$$U_i = \frac{A}{R^n} - \sum_j{}' \frac{1}{P_{ij}}\,\frac{q^2}{R},$$

体系总的相互作用能为：

$$U_{tot} = NU_i = N\left(\frac{A}{R^n} - \sum_j{}' \frac{1}{P_{ij}}\,\frac{q^2}{R}\right). \qquad (1)$$

平衡时有

$$\left(\frac{dU_{tot}}{dR}\right)_{R_0} = 0 = N\left(-\frac{nA}{R^{n+1}} + \sum_j{}' \frac{1}{P_{ij}}\,\frac{q^2}{R^2}\right),$$

解得：

$$A=\frac{R_0^n}{n}\frac{q^2}{R_0}\sum_j{}'P_{ij}^{-1}。\qquad(2)$$

将（2）代入（1）并令$R=R_0$得：

$$U_{tot}=N\left(\frac{R_0^N}{n}\frac{q^2}{R_0}\sum_j{}'\frac{1}{P_{ij}}\frac{1}{R_0^n}-\sum_j{}'\frac{1}{P_{ij}}\frac{q^2}{R_0}\right)$$

$$=N\frac{q^2}{R_0}\sum_j{}'\frac{1}{P_{ij}}\left(\frac{1}{n}-1\right),$$

其中

$$\sum{}'P_{ij}^{-1}\simeq 2\ln 2,$$

所以

$$U_{tot}=-\frac{2Nq^2\ln 2}{R_0}\left(1-\frac{1}{n}\right)。$$

（b）外力所做的功等于体系内能的改变。

设W为晶体受压一个单位长度所做的功，则

$$W=U(R_0)-U[R_0(1-\delta)],\qquad(3)$$

其中$U(R_0)$已由（a）的计算求出，现在计算$U[R_0(1-\delta)]$。由（a）的计算知道：

$$U_{tot}(R)=2Nq^2\ln 2\left(\frac{R_0^{n-1}}{nR^n}-\frac{1}{R}\right),\qquad(4)$$

令 $R=R_0(1-\delta)$代入（4）中得：

$$U[R_0(1-\delta)]=2Nq^2\ln 2\left(\frac{R_0^{n-1}}{n}\cdot\frac{1}{R_0^n(1-\delta)^n}-\frac{1}{R_0(1-\delta)}\right)$$

$$=\frac{2Nq^2\ln 2}{R_0(1-\delta)}\left\{\frac{1}{n(1-\delta)^{n-1}}-1\right\}。\qquad(5)$$

因δ很小，式中对δ展开，略去高级项后得到

$$U[R_0(1-\delta)] = 2Nq^2\ln 2/R_0\left\{\frac{(n-1)}{2}\delta^2 + \frac{1-n}{n}\right\}.$$

代入（3）式得：

$$W = -\frac{2Nq^2\ln 2}{R_0}\left(1-\frac{1}{n}\right) - \frac{2Nq^2\ln 2}{R_0}$$

$$\left\{\frac{n-1}{2}\delta^2 - \left(1-\frac{1}{n}\right)\right\}$$

$$= -\frac{2Nq^2\ln 2}{R_0}\ \frac{(n-1)}{2}\delta^2.$$

令 $$C = \frac{(n-1)q^2\ln 2}{R_0},$$

则 $$W = -2N\cdot\frac{1}{2}c\delta^2.$$

因此，晶体压缩一个单位长度，外力对一个离子所做的功首项为$\frac{1}{2}c\delta^2$.

6. 立方 ZnS 结构. 利用λ和ρ值以及书中给出的麦德隆常数，计算KCl取立方 ZnS结构型式的结合能. 将结果与 KCl取NaCl结构型式的计算值比较之.

〈解〉

如KCl取ZnS结构型式时，晶体总相互作用能可用公式

$$U_{tot} = N\left(Z\lambda e^{-R/\rho} - \frac{\alpha q^2}{R}\right)$$

来表达，其中$N = 6.022\times 10^{23}/\text{mol}$，$\rho = 0.326\text{A}$，$\alpha = 1.6381$. KCl取NaCl结构型式时，最邻近配位数$Z = 6$，$Z\lambda = 2.05\times 10^{-8}\text{erg}$，而取立方ZnS时，Z应为 4，所以$Z\lambda = \frac{4}{6}\times 2.05\times 10^{-8}\text{erg}$.

如果KCl取立方ZnS结构，其原胞的晶格常数与其取 NaCl结构时的晶格常数相同， 则$a=2\times3.147\text{A}=6.294\text{A}$。那么取立方ZnS结构的情况，最邻近原子间距$R$应为立方原胞体对角线长的$\frac{1}{4}$即 $R=\frac{\sqrt{3}}{4}a=2.725\text{A}$。于是，

$$U_{tot}=6.022\times10^{23}/\text{mol}\times\left(\frac{4}{6}\times2.05e^{-\frac{2.725}{0.326}}\times10^{-8}\text{erg}-\frac{1.6381\times(4.803\times10^{-10}\text{esu})^2}{2.725\times10^{-8}\text{cm}}\right)$$

$$\approx-6.441\times10^{12}\text{erg/mol}$$

$$\approx-153.8\text{KCal/mol}.$$

已知KCl取NaCl结构时结合能的计算值为161.6KCal/mol， 现在按立方ZnS结构计算， 结合能为153.8KCal/mol， 因此， KCl取NaCl型有更大的稳定性。

7. LiF的体模量. 用结合能和最近邻间距的实验值， 计算LiF的体模量. 将计算结果与观测值进行比较.

〈解〉

LiF具有NaCl 面心立方结构， 如晶体的总相互作用能为U，最近邻距离为R，晶体中N个分子所占的总体积为$2NR^3$，则有：

$$\frac{dU}{dV}=\frac{dU}{dR}\frac{dR}{dV},\qquad \frac{dR}{dV}=\frac{1}{dV/dR}=\frac{1}{6NR^2},$$

$$\frac{d^2U}{dV^2}=\frac{d}{dV}\left(\frac{dU}{dV}\right)=\frac{d}{dV}\left(\frac{dU}{dR}\frac{dR}{dV}\right)$$

$$=\left[\frac{d}{dV}\left(\frac{dU}{dR}\right)\right]\frac{dR}{dV}+\frac{dU}{dR}\left(\frac{d^2R}{dV^2}\right)$$

$$=\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)\left(\frac{dR}{dV}\right)^2+\left(\frac{dU}{dR}\right)\left(\frac{d^2R}{dV^2}\right).$$

平衡时，

$$\left(\frac{dU}{dR}\right)_{R_0}=0,$$

于是晶体的体模量为：

$$B=V\left(\frac{d^2U}{dV^2}\right)_{R_0}=V\left(\frac{dR}{dV}\right)^2_{R_0}\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0}$$

$$=2NR_0^3\left(\frac{1}{6NR_0^2}\right)^2\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0}$$

$$=\frac{1}{18NR_0}\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0}. \qquad (1)$$

晶体的总相互作用能为：

$$U=N\left(Z\lambda e^{-R/\rho}-\frac{\alpha q^2}{R}\right).$$

由 $$\left(\frac{dU}{dR}\right)_{R_0}=N\left(-Z\lambda\frac{1}{\rho}e^{-R/\rho}+\frac{\alpha q^2}{R^2}\right)_{R_0}=0$$

解得 $$\frac{Z\lambda}{\rho}e^{-R_0/\rho}=\frac{\alpha q^2}{R_0^2}.$$

对二级微商，有

$$\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0}=N\left(Z\lambda\frac{1}{\rho^2}e^{-R_0/\rho}-\frac{2\alpha q^2}{R_0^3}\right)$$

$$=\frac{N\alpha q^2}{R_0^3}\left(\frac{R_0}{\rho}-2\right),$$

于是，体模量公式（1）变成：

$$B=\frac{1}{18NR_0}\left(\frac{N\alpha q^2}{R_0^3}\right)\left(\frac{R_0}{\rho}-2\right)$$

$$=\frac{\alpha q^2}{18R_0^4}\left(\frac{R_0}{\rho}-2\right). \qquad (2)$$

对于LiF，$\alpha=1.747565$，$\rho=0.291\text{A}$，$R_0=2.014\text{A}$，

代入公式（2）得：

$$B=\frac{1.747565\times(4.803\times10^{-10}esu)^2}{18\times(2.014\times10^{-8}\text{cm})^4}\left(\frac{2.014}{0.291}-2\right)$$

$\approx 6.7\times10^{11}\mathrm{dyn/cm^2}$。

LiF 晶体的体模量的计算值 $6.7\times10^{11}\mathrm{dyn/cm^2}$ 与实验值 $6.71\times10^{11}\mathrm{dyn/cm^2}$ 符合得很好。

8．双价离子晶体。 BaO具有NaCl结构。试估计假想晶体 Ba^+O^- 和 $Ba^{++}O^{--}$ 相对于分开为中性原子时每个分子的结合能。观测到的最近邻核间距为 $R_0=2.76\mathrm{A}$；Ba的第一和第二电离能为5.19ev和9.96ev；附加于中性氧原子的第一和第二电子亲和能为1.5ev和－9.0ev。中性氧原子的第一电子亲和能是反应 $O+e\rightarrow O^-$ 中所放出的能量。第二电子亲和能是在反应 $O^-+e\rightarrow O^{--}$ 中所放出的能量。假定两种氧化钡形式有相同的 R_0，并略去排斥能，预言将会出现那种价态？

〈解〉

假定 Ba^+O^- 及 $Ba^{++}O^{--}$ 具有NaCl结构，其离子晶体总相互作用能可用公式

$$U_{tot}=-\frac{N\alpha q^2}{R_0}\left(1-\frac{\rho}{R_0}\right)$$

来计算。其中 $R_0=2.76\mathrm{A}$，$\alpha=1.747565$。题中没有给出 Ba^+O^-，$Ba^{++}O^{--}$ 的 ρ 值，但我们的目的仅是为了粗略估算相互作用能，因此可用NaCl结构的 ρ 值近似代替之，$\rho=0.321\mathrm{A}$。

于是

$$U_{Ba^+O^-}=-\frac{6.022\times10^{23}/\mathrm{mol}\times1.747565\times(4.803\times10^{-10}\mathrm{esu})^2}{2.76\times10^{-8}\mathrm{cm}}\times\left(1-\frac{0.321}{2.76}\right)$$

$$=-77.74\times10^{11}\mathrm{erg/mol},$$

$$U_{Ba^{++}O^{--}}=-\frac{6.022\times10^{23}/\mathrm{mol}\times1.747565\times}{2.76\times10^{-8}\mathrm{cm}}$$

$$(2\times 4.803\times 10^{-10}\text{esu})^2\times\left(1-\frac{0.321}{2.76}\right)$$

$$=-310.96\times 10^{11}\text{erg/mol}.$$

这里，$U_{Ba^+O^-}$及$U_{Ba^{++}O^{--}}$的数值是将Ba^+O^-及$Ba^{++}O^{--}$分成离子，而不是分成中性原子所需要的能量。为计算分成中性原子所需要的能量，必须考虑Ba^+，Ba^{++}的电离能及O^-和O^{--}的亲和能。Ba^+的一次电离能为5.19ev，O^-的一次电子亲和能为1.5ev。欲把Ba^+O^-分成中性原子，必须在分成孤立的Ba^+及O^-离子的基础上，拔去O^-的电子，并使电子与Ba^+结合成中性的Ba原子。因此，将一个Ba^+O^-分子拆成两个中性原子所需要的能量为。

$$-\frac{U_{Ba^+O^-}}{N}-(5.19-1.5)=4.37(\text{ev}).$$

同理，把一个$Ba^{++}O^{--}$分子拆成中性原子所需要的能量为：

$$-\frac{U_{Ba^{++}O^{--}}}{N}-\Big\{[9.96-(-9.0)]$$

$$+(5.19-1.5)\Big\}=9.58(\text{ev}).$$

由此可见，两种氧化钡的形式中，$Ba^{++}O^{--}$有比Ba^+O^-更高的结合能，因此，$Ba^{++}O^{--}$是更有利的价态。

9．高压实验．在静态高压实验中，常用的压力达到10^5atm（10^{11}dyn/cm^2），在冲击波实验中压力已达到10^7atm．NaCl的体模量B为2.40×10^{11}dyn/cm^2．计算在0.2Mb时，NaCl最近邻距离的相对改变，假定B为常量。实验结果表示在图3—1中。

〈解〉

由体模量的公式知：

$$B=-V\frac{dP}{dV},$$

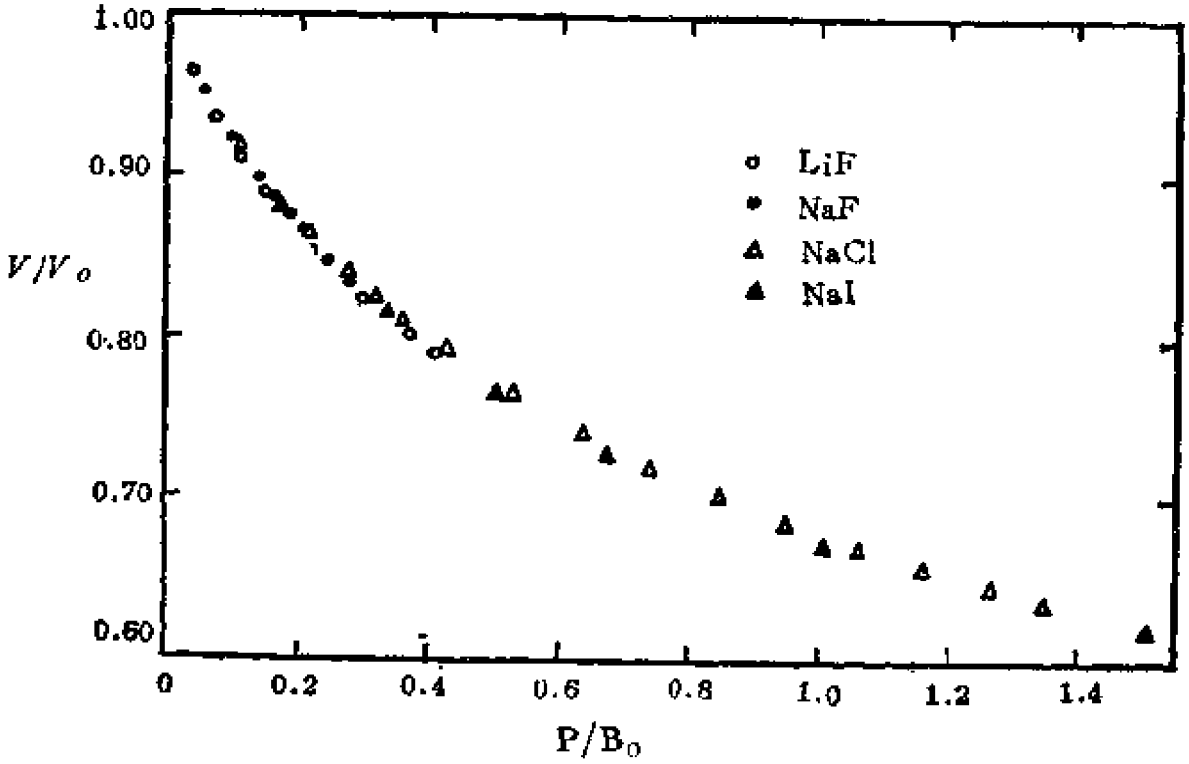


图 3—1　室温下LiF，NaF，NaCl，NaI的复合约化状态方程。〔取自C.S.Smith和K.O.McLean，J.Phys.Chem.Solid,34,1143(1973)〕。

其中V是体积，P是压力，由此可以求得：

$$P=\int_0^P dp=-B\int_{V_0}^{V}\frac{dV}{V}=-B\ln V/V_0,$$

对NaCl结构，$V_0=R^3$，$P=-3B\ln\frac{R}{R_0}$，

所以　　$$\frac{R}{R_0}=e^{-P/3B}.$$

当　　$P=0.2\text{Mb}=2\times0.987\times10^{11}\text{dyn/cm}^2$时，

$$\frac{R}{R_0}=e^{-\frac{2\times0.987\times10^{11}\text{dyn/cm}^2}{3\times2.40\times10^{11}\text{dyn/cm}^2}}\approx0.76,$$

即当NaCl受到0.2Mb压力时，最近邻原子间距约缩短24%。

第四章　声子(Ⅰ)，晶格振动

1．正方形晶格的振动．考虑由相同原子的行和列组成的平面正方格子的横振动，令$u_{l,m}$表示在第l列第m行（图4—1）的原子垂直于晶格平面的位移．每个原子的质量为M，最近邻原子的力常数为C．（a）证明运动方程式为

$$M\frac{d^2u_{l,m}}{dt^2}=C[(u_{l+1,m}+u_{l-1,m}-2u_{l,m})$$

$$+(u_{l,m+1}+u_{l,m-1}-2u_{l,m})].$$

（b）假定形式解为

$u_{l,m}=u_{(0)}\exp[i(lK_xa+mK_ya-\omega t)]$，式中$a$为最近邻原子之间的距离．证明若

$$\omega^2M=2C(2-\cos K_xa-\cos K_ya)\ ,$$

则满足运动方程式．这就是本问题的色散关系．

（c）证明有独立解存在的K空间区域可以取边长为$2\pi/a$的正方形．对$K=K_x$，$K_y=0$以及$K_x=K_y$画出ω随K的变化曲线．

（d）对于$Ka\ll1$，证明

$$\omega=\left(\frac{Ca^2}{M}\right)^{1/4}(K_x^2+K_y^2)^{1/2}=\left(\frac{Ca^2}{M}\right)^{1/2}K,$$

所以在此极限内速度是常数．

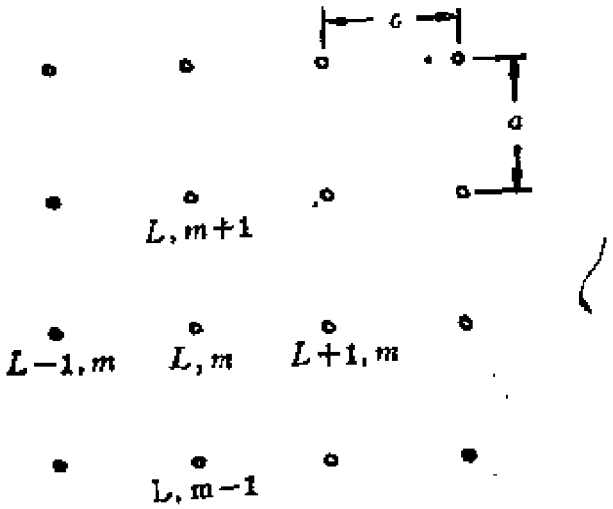


图4—1　晶格常数为a的正方形阵列

〈解〉

(a) 如图4—1所示，只考虑最近邻原子的作用，第 l,m 原子受到(l+1,m)，(l−1,m)，(l,m+1)，(l,m−1) 四个原子的作用力为：

(l+1,m) 对它的作用力 $= C(u_{l+1,m} - u_{l,m})$，

(l−1,m) 对它的作用力 $= C(u_{l,m} - u_{l-1,m})$，

(l,m+1) 对它的作用力 $= C(u_{l,m+1} - u_{l,m})$，

(l,m−1) 对它的作用力 $= C(u_{l,m} - u_{l,m-1})$。

由于(l+1,m)和(l−1,m)对它的作用力以及(l,m+1)和(l,m-1)对它的作用力的方向都是相反的，于是运动方程式可以写为：

$$I\frac{d^2u_{l,m}}{dt^2} = C[(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{l,m}) + (u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{l,m})]. \quad (1)$$

(b) 设解为如下形式

$$u_{l,m} = u_{(0)}\exp[i\ (lK_xa + mK_ya - \omega t)], \quad (2)$$

代入运动方程 (1) 后，得到色散关系

$$\omega^2 M = -C\ (e^{iK_x a} + e^{-iK_x a} + e^{iK_y a} + e^{-iK_y a} - 4)$$

$$= 2C\ (2 - \cos K_x a - \cos K_y a)。 \qquad (3)$$

(c) 从（2）、（3）两式可以看出，$u_{l,m}$，ω^2均为K_x，K_y的周期函数，周期为$2\pi/a$。所以K_x，K_y的取值可以限制在

$$-\frac{\pi}{a} < K_x \leqslant \frac{\pi}{a}, \qquad -\frac{\pi}{a} < K_y \leqslant \frac{\pi}{a}$$

的区域内，也就是说，全部独立的解都落在K空间中一个边长为$2\pi/a$的正方形区域内，这就是二维正方格子的第一布里渊区。

对于布里渊区中$K = K_x$，$K_y = 0$以及$K_x = K_y$两个特殊方向上的色散关系很容易从（3）式求出：

$$K = K_x,\ K_y = 0, \quad \omega^2 = \frac{2C}{M}(1 - \cos Ka)\ ; \qquad (4)$$

$$K_x = K_y\ , \qquad \omega^2 = \frac{4C}{M}(1 - \cos K_x a)$$

$$= \frac{4C}{M}\left(1 - \cos\frac{1}{\sqrt{2}}Ka\right)。 \qquad (5)$$

ω^2与K的关系如图4—2所示。

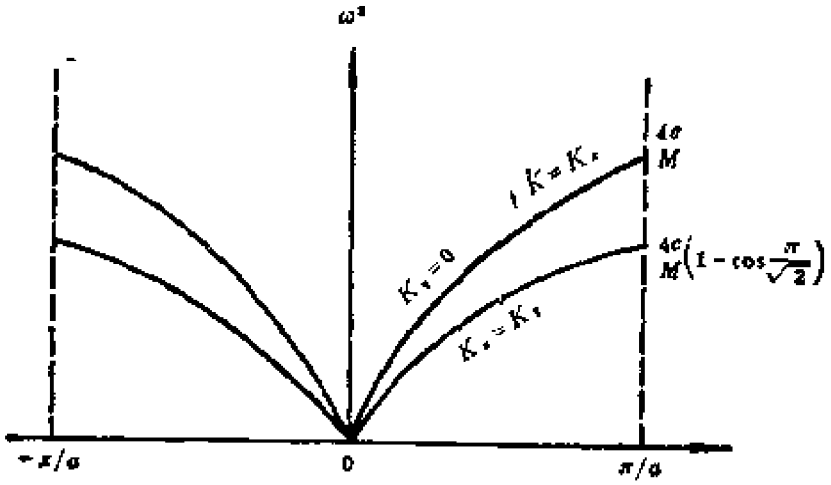


图4—2　二维正方格子的色散关系

(*d*) 对于$Ka \ll 1$，（3）式可以近似写为

$$\omega^2 \approx \frac{2C}{M}[2-(1-\frac{1}{2}K_x^2a^2)-(1-\frac{1}{2}K_y^2a^2)]$$

$$=\frac{Ca^2}{M}(K_x^2+K_y^2),$$

所以 $$\omega=\left(\frac{Ca^2}{M}\right)^{1/2}(K_x^2+K_y^2)^{1/2}$$

$$=\left(\frac{Ca^2}{M}\right)^{1/2}K.$$

这样，在$Ka \ll 1$，即振动的波长$\lambda \gg a$的极限情况下，群速度

$$v=\frac{d\omega}{dK}=\left(\frac{Ca^2}{M}\right)^{1/2}$$

是与K无关的常数.

2. 单原子线性晶格. 设有一纵波

$$u_s=u\cos(\omega t-sKa)$$

沿着质量为M的单原子线性晶格传播，原子间距为a，最近邻相互作用力常数为C。（*a*）证明波的总能量为

$$E=\frac{1}{2}M\sum_s\left(\frac{du_s}{dt}\right)^2+\frac{1}{2}C\sum_s(u_s-u_{s+1})^2,$$

式中s取遍所有原子。（*b*）将u_s代入这个公式，证明每个原子的总能量的时间平均值为

$$\frac{1}{4}M\omega^2u^2+\frac{1}{2}C(1-\cos Ka)u^2=\frac{1}{2}M\omega^2u^2.$$

〈解〉

（*a*）第s个原子的位移为

$$u_s=u\cos(\omega t-sKa),\qquad(1)$$

动能为 $\frac{1}{2}M\left(\frac{du_s}{dt}\right)^2$，晶体的总动能为

$$T=\frac{1}{2}M\sum_s\left(\frac{du_s}{dt}\right)^2.$$

晶体的总位能为

$$\Phi=\sum_{ss'}\phi(R_{ss'}),$$

其中$R_{ss'}$为s，s'原子间的距离，

$$R_{ss'}=r_{ss'}+u_s-u_{s'},$$

$r_{ss'}$为s，s'原子间的平衡距离。将ϕ展开，只取简谐近似，得，

$$\phi(R_{ss'})=\phi(r_{ss'})+\frac{1}{2}\phi''_{ss'}(u_s-u_{s'})^2,$$

其中 $$\phi''_{ss'}=\left(\frac{\partial^2\phi(R_{ss'})}{\partial R_{ss'}^2}\right)R_{ss'}=r_{ss'}$$

为力常数。若只考虑最近邻原子的作用，则总位能为

$$\Phi=\sum_{s<s'}\phi(r_{ss'})+\frac{1}{2}\sum_{s<s'}\phi''_{ss'}(u_s-u_{s'})^2$$

$$=\Phi_0+\frac{1}{2}\sum_s C(u_s-u_{s+1})^2.$$

第一项为总的平衡位能，第二项为简谐振动位能。于是振动的总能量为

$$E=\frac{1}{2}M\sum_s\left(\frac{du_s}{dt}\right)^2+\frac{1}{2}C\sum_s(u_s-u_{s+1})^2. \qquad (2)$$

(b) 将 (1) 代入 (2) 式，得：

$$E=\frac{1}{2}M\omega^2u^2\sum_s\sin^2(\omega t-sKa)$$

$$+\frac{1}{2}Cu^2\sum_s[\cos(\omega t-sKa)-\cos(\omega t-(s+1)Ka)]^2$$

$$= \frac{1}{2}M\omega^2u^2\sum_s \sin^2(\omega t - sKa)$$

$$+ \frac{1}{2}Cu^2\sum_s \Big\{ (1-\cos Ka)^2\cos^2(\omega t - sKa)$$

$$+ \sin^2 Ka \cdot \sin(\omega t - sKa)$$

$$- 2(1-\cos Ka)\sin Ka\sin(\omega t - sKa)\cos(\omega t - sKa)\Big\}.$$

将上式对时间t求平均，得到

$$\overline{E} = \frac{1}{T}\int_0^T E dt = \frac{\omega}{2\pi}\int_0^{2\pi/\omega} E dt$$

$$= \frac{1}{2}M\omega^2u^2\sum_s \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\sin^2(x - sKa)dx$$

$$+ \frac{1}{2}Cu^2\sum_s \Big\{(1-\cos Ka)^2\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2(x - sKa)dx$$

$$+ \sin^2 Ka \cdot \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\sin^2(x - sKa)dx$$

$$- 2(1-\cos Ka)\sin Ka \cdot \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\sin(x - sKa)$$

$$\cos(x - sKa)dx\Big\}$$

$$= \sum_s \Big\{\frac{1}{4}M\omega^2u^2 + \frac{1}{4}Cu^2[(1-\cos Ka)^2 + \sin^2 Ka]\Big\}$$

$$= \sum_s \Big\{\frac{1}{4}M\omega^2u^2 + \frac{1}{2}Cu^2(1-\cos Ka)\Big\}$$

$$= N\Big\{\frac{1}{4}M\omega^2u^2 + \frac{1}{2}Cu^2(1-\cos Ka)\Big\},$$

其中N为原子总数．所以每个原子的能量的时间平均值为

$$\varepsilon = \frac{\overline{E}}{N} \simeq \frac{1}{4}M\omega^2u^2 + \frac{1}{2}C(1-\cos Ka)u^2.$$

利用色散关系式$\omega^2 = (2C/M)(1-\cos Ka)$，第二项有

$$\frac{1}{2}C(1-\cos Ka)u^2 = \frac{1}{4}M\omega^2u^2,$$

$$\therefore \quad \varepsilon = \frac{1}{2}M\omega^2\overline{u^2}.$$

3．连续波方程．证明对于长波极限情况，运动方程

$M\frac{d^2u_s}{dt^2} = \sum_p C_p(u_{s+p}-u_s)$ 可化为连续弹性波方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

式中v是声速．

〈解〉

已知运动方程为

$$M\frac{d^2u_s}{dt^2} = \sum_p C_p(u_{s+p}-u_s)$$

$$= \sum_{p>0} C_p[(u_{s+p}-u_s)+(u_{s-p}-u_s)]. \qquad (1)$$

对于$\lambda \gg a$，即长波极限下，位移u_s随s的变化是非常缓慢的，可看作是连续改变的，上式可改写为

$$M\frac{d^2u(x,t)}{dt^2} = \sum_{p>0} C_p\{[u(x+pa,t)-u(x,t)]$$

$$+[u(x-pa,t)-u(x,t)]\Big\}$$

$$=\sum_{p>0}C_p\Big\{\Big[\frac{du(x,t)}{dx}\cdot pa+\frac{1}{2}\frac{d^2u(x,t)}{dx^2}(pa)^2\Big]$$

$$+\Big[-\frac{du(x,t)}{dx}pa+\frac{1}{2}\frac{d^2u(x,t)}{dx^2}(pa)^2\Big]\Big\}$$

$$=\sum_{p>0}C_p p^2a^2\frac{d^2u(x,t)}{dx^2}. \tag{2}$$

若试探解用$u_{s+p}=u\exp\{-i[\omega t-(s+p)Ka]\}$的形式，则由(1)式很容易解出色散关系

$$\omega^2=\frac{2}{M}\sum_{p>0}C_p\ (1-\cos pKa). \tag{3}$$

对于长波极限，$pKa\ll 1$，则

$$\cos pKa\approx 1-\frac{1}{2}(pKa)^2,$$

(3)式变为

$$\omega^2=K^2(a^2/M)\sum_{p>0}p^2C_p$$

$$=v^2K^2,$$

其中声速v为

$$v^2=\frac{a^2}{M}\sum_{p>0}p^2C_p\ . \tag{4}$$

于是(2)式就变为

$$\frac{d^2u}{dt^2}=v^2\frac{d^2u}{dx^2}.$$

4．含有两个不同原子的基团. 对于第四章由公式（18）到（26）所处理的问题，求在$K_{max}=\pi/a$处两支振动的振幅比u/V. 证明在此K值时两个晶格好像是没有耦合作用的：当另一晶格 运动时这一晶格仍然处在静止状态。

〈解〉

运动方程

$$\left.\begin{aligned} M_1\frac{d^2u_s}{dt^2}&=C(v_s+v_{s-1}-2u_s)\ ,\\ M_2\frac{dv_s}{dt^2}&=C(u_{s+1}+u_s-2v_s)\ ,\end{aligned}\right\}\qquad(1)$$

设形式解为

$$u_s=u_e^{isKa}\cdot e^{-i\omega t}\quad,\quad v_s=v_e^{isKa}\cdot e^{-i\omega t}\ .$$

代入（1），得：

$$\left.\begin{aligned} -\omega^2M_1u&=Cv\,(1+e^{-iKa})-2Cu\ ,\\ -\omega^2M_2v&=Cu\,(e^{iKa}+1)-2Cv\ ,\end{aligned}\right\}\qquad(2)$$

解出色散关系

$$M_1M_2\omega^4-2C(M_1+M_2)\omega^2+2C^2(1-\cos Ka)=0.\qquad(3)$$

当$K=K_{max}=\pi/a$时，（2）式变为

$$\left.\begin{aligned} \omega^2M_1u&=2Cu\ ,\\ \omega^2M_2v&=2Cv.\end{aligned}\right\}\qquad(4)$$

（3）式有两个解，各为

$$\omega^2_+=\frac{2C}{M_2}\quad,\quad\omega^2_-=\frac{2C}{M_1}\quad,\quad M_1>M_2.\qquad(5)$$

将ω_+，ω_-分别代入（4）式，得到

当 $\omega=\omega_+$ 时，

$$\begin{cases}\dfrac{M_1}{M_2}u=u,\\ v=v\ ,\end{cases}\qquad \therefore 必\ u=0; \tag{6}$$

当$\omega=\omega_-$时，

$$\begin{cases}u=u\ ,\\ \dfrac{M_2}{M_1}v=v,\end{cases}\qquad \therefore 必 v=0. \tag{7}$$

这样，在$K=K_{max}=\pi/a$处，无论是光学支或声学支振动，两类不同原子的运动情况都是：当某一类原子运动时，另一类原子不动。

5. 科恩(Kohn)反常. 假定作用在S平面上总的力为方程

$$F_s=\sum_p C_p(u_{p+s}-u_s),$$

其中晶面间的力常数C_p为

$$C_p=A\frac{sinpk_0a}{pa},$$

这里A和k_0为常数，p取遍所有整数。在金属中可能有这种形式.利用此式和方程

$$\omega^2=\frac{2}{M}\sum_{p>0}C_p(1-\cos pKa)$$

求ω^2以及$\partial\omega^2/\partial K$的表达式。证明当$K=k_0$时，$\partial\omega^2/\partial K$为无穷大，并讨论 $\omega^2(K)$ 的变化情况。

〈解〉

若面间力常数取

$$C_p = A\frac{\sin pk_0 a}{pa}$$

的形式，代入色散关系

$$\omega^2 = \frac{2}{M}\sum_{p>0} C_p(1-\cos pKa)$$

中就得到

$$\omega^2 = \frac{2}{M}\sum_{p>0} A\frac{\sin pk_0 a}{pa}(1-\cos pKa)$$

和 $$\frac{\partial\omega^2}{\partial K} = \frac{2A}{M}\sum_{p>0}\sin pk_0 a \cdot \sin pKa \ .$$

当$K = k_0$时，

$$\frac{\partial\omega^2}{\partial K} = \frac{2A}{M}\sum_{p=1}^{\infty}\sin^2 pk_0 a$$

右边级数发散，即$\frac{\partial\omega^2}{\partial K}\to\infty$。这说明声子色散关系$\omega^2(K)$或$\omega(K)$曲线在$K = k_0$处的斜率出现了垂直的正切变化，也就是声子色散关系曲线在k_0处有扭折（kink）。这种情况称为 Kohn 反常。有关的效应W。Kohn在文献 Phys. ReV. Letters, 2, 393 (1959) 中曾作过预言。在某些金属（如pb, Al 等）中已经观察到这种效应。$\omega(K)$的精确的中子测量实验中清楚地看到奇异点的存在。

6. 双原子链. 研究最近邻原子间力常数交替为C和10C的线性链的简正模。令原子质量相同，且最近邻距离为$a/2$。求在$K = 0$和$K = \pi/a$处的$\omega(K)$。大略地画出色散关系。此问题模拟象H_2这样的双原子分子晶体。

〈解〉

如图4—3所示的双原子链。按题设条件，运动方程为

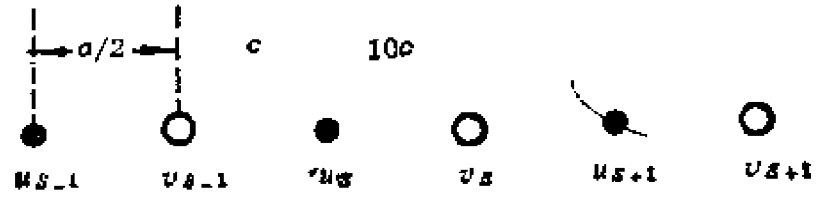


图4—3　双原子链

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

设解为

$$u_s = ue^{isKa}\cdot e^{-i\omega t}\quad,\quad V_s = Ve^{isKa}\cdot e^{-i\omega t}\ . \tag{2}$$

代入（1）式，得：

$$\left.\begin{aligned} -M\omega^2u &= C(10+e^{-iKa})V-11Cu\ ,\\ -M\omega^2V &= C(e^{iKa}+10)u-11CV\ . \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

是u，V的线性齐次方程组，存在非零解的条件为

$$\begin{vmatrix} M\omega^2-11C & C(10+e^{-iKa})\\ C(e^{iKa}+10) & M\omega^2-11C \end{vmatrix} = 0\ , \tag{4}$$

解出

$$M^2\omega^4-22MC\omega^2+20C^2(1-\cos Ka)=0\ , \tag{5}$$

$$\therefore\quad \omega_\pm^2 = \frac{C}{M}\left[11\pm\sqrt{121-20(1-\cos Ka)}\right]\ . \tag{6}$$

当 $K=0$ 时，

$$\left.\begin{aligned}\omega_+^2 &\simeq 22C/M,\\ \omega_-^2 &= 0 \quad .\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

当$K=\pi/a$时，

$$\left.\begin{aligned}\omega_+^2 &\simeq 20C/M,\\ \omega_-^2 &= 2C/M.\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

ω^2与K的关系如图4—4所示。这是一个双原子（例如 H_2）晶体

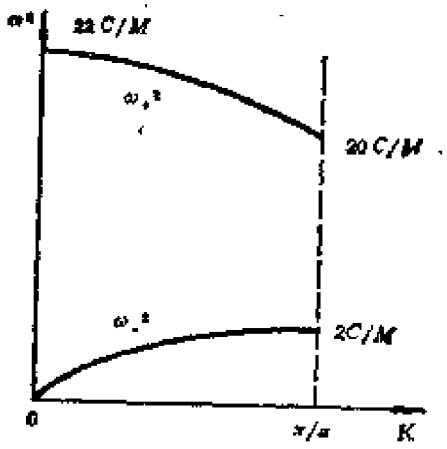


图4—4　双原子分子晶体的色散关系

的例子．分子内原子间的力常数要比分子间的力常数大得多。反映分子整体振动的声学波频率决定子分子间比较弱的相互作用，频率较低．而反映分子内原子的相对振动的光学波，决定于分子内原子比较强的相互作用，其振动频率要比声学波高得多．

7．金属中的原子振动．在简单金属中，我们可以提出一个德拜频率的近似模型：质量为M电荷为e的点离子浸在均匀传导电子海中．设想离子当处在正常格点位置上时是稳定平衡的．如果一个离子从它的平衡位置位移一小距离r，则其恢复力主要来自

以平衡位置为中心的半径为r的球内的电荷。取离子（或传导电子）的数密度为$3/4\pi R^3$，由此定义了R.（a）证明单离子参与振动的频率为$\omega=(e^2/MR^3)^{1/2}$。（b）近似估计Na的频率值。（c）从（a），（b）以及某些常识，估计金属中声速的数量级.

〈解〉

（a）按题设的简单模型，半径为r的均匀带电球体内距球心$\mathbf{r}'$处的电场强度$\mathbf{E}$为

$$\mathbf{E}=-\frac{q}{r^3}\mathbf{r}',$$

其中q为球体内的总电荷，它等于

$$q=\frac{4\pi}{3}r^3\cdot\frac{3e}{4\pi R^3}$$

$$=\frac{er^3}{R^3},$$

所以 $$\mathbf{E}=-\frac{e^2\mathbf{r}'}{R^3}.$$

若电荷为e的正离子处在距球心$\mathbf{r}'$位置上，所受到的力为

$$\mathbf{F}=-\frac{e^2}{R^3}\mathbf{r}'.$$

于是正离子偏离平衡位置$\mathbf{r}$时所受到的恢复力为

$$\mathbf{F}=-\frac{e^2}{R^3}\mathbf{r},\qquad(1)$$

运动方程式可写为

$$M\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}+\frac{e^2}{R^3}\mathbf{r}=0$$

或 $$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}+\omega^2\mathbf{r}=0.\qquad(2)$$

这是一简谐振子的运动方程，比较之，得振动频率为

$$\omega \approx \left(\frac{e^2}{MR^3}\right)^{1/2}. \tag{3}$$

(b) 已知Na的原子质量为

$$M = 23.0 \times 1.66 \times 10^{-24}\mathrm{g}$$
$$\approx 3.82 \times 10^{-23}\mathrm{g}\ ;$$

每个Na原子所占的体积为$\frac{4\pi}{3}R^3$，Na为体心立方结构，晶格常数为$a = 4.29 \times 10^{-8}\mathrm{cm}$，于是

$$\frac{4\pi}{3}R^3 = \frac{1}{2}a^3\ ,$$

$$\therefore \qquad R^3 = \frac{3}{8\pi}a^3 \approx 9.43 \times 10^{-24}\mathrm{cm}^3\ ;$$

由（3）式得

$$\omega = \left[\frac{(4.803 \times 10^{-10}esu)^2}{3.82 \times 10^{-23}g \times 9.43 \times 10^{-24}\mathrm{cm}^3}\right]^{1/2}$$
$$\approx 2.53 \times 10^{13}\mathrm{Hz}\ . \tag{4}$$

(c) 在长波极限下可把晶体看成连续介质，声波的传播速度可近似表示为$V = \omega/K$，在$K = K_{max} = \pi/a$时，

$$V \approx \omega_{max}/K_{max} = \omega_{max}a/\pi, \tag{5}$$

a为原子间最近邻距离，ω_{max}为声学波振动的极大频率。若取$\omega_{max} \approx 10^{13}\mathrm{Hz}$，$a \approx 4 \times 10^{-8}\mathrm{cm}$，则在一般金属中声速的数量级为

$$V \approx 1.3 \times 10^5\mathrm{cm/sec}\ .$$

8. 软声子模。 设有等质量而电荷交替变号的离子线晶格，第p个离子的电荷为$e_p = e \cdot (-1)^p$。原子间势为两种贡献之和：

（1）只作用于最近邻间的力常数为$C_{1R}=\gamma$的短程相互作用，以及（2）所有离子间的库仑相互作用。（a）证明库仑相互作用对原子的力常数的贡献为$C_{p\infty}=2(-1)^p\frac{e^2}{p^3a^3}$，其中$a$是最近邻平衡距离。（b）由公式$\omega^2=\frac{2}{M}\sum_{p>0}C_p(1-\cos pKa)$，证明色散关系可写为

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2}=\sin^2\frac{1}{2}Ka+\sigma\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p(1-\cos pKa)p^{-3},$$

式中$\omega_0^2=4\gamma/M$，而$\sigma=e^2/\gamma a^3$。（c）证明在布里渊区边界$Ka=\pi$处，若$\sigma>0.475$或$4/7\zeta(3)$时，则ω^2是负的（不稳定模），这里ζ是黎曼（Riemann）ζ函数。进而证明，如果$\sigma>(2\ln 2)^{-1}=0.721$，则对于小的$Ka$，声速为虚数。所以若$0.475<\sigma<0.721$，对于在$(0,\pi)$区间内的某个$Ka$值，$\omega^2$变为零，因而晶格不稳定。注意，声子谱不是双原子晶格型的，因为任一离子与其近邻的相互作用与其它离子相同。

〈解〉

（a）设l'与l离子的相互作用能为$\phi(x_{ll'})$，则晶体中总相互作用能为

$$\Phi=\frac{1}{2}\sum_{l}\sum_{l'\neq l}\phi(x_{ll'}),\tag{1}$$

其中
$$x_{ll'}=x_{ll'}^{0}+u_l-u_{l'},\tag{2}$$

u_l为第l离子偏离平衡位置的位移。将Φ展开并取简谐近似，得到

$$\Phi=\frac{1}{2}\sum_{l}\sum_{l'\neq l}\left[\phi(x_{ll'}^{0})+\frac{1}{2}\phi_{ll'}(u_l-u_{l'})^2\right]$$

$$=\Phi_0+\frac{1}{4}\sum_{l}\sum_{l'\neq l}\phi_{ll'}(u_l-u_{l'})^2,\tag{3}$$

其中 $$\phi_{ll'}=\left[\frac{d^2}{dx_{ll'}^2}\phi(x_{ll'})\right]_{x_{ll'}=x_{ll'}^0}. \tag{4}$$

运动方程为

$$\begin{aligned}M\frac{d^2u_s}{dt^2}&=-\frac{\partial\Phi}{\partial u_s}\\&=-\frac{1}{4}\sum_{l\neq l'}\sum\phi_{ll'}\frac{\partial}{\partial u_s}(u_l-u_{l'})^2\\&=-\frac{1}{2}\sum_{l(\neq s)}\phi_{sl}(u_s-u_l)+\frac{1}{2}\sum_{l(\neq s)}\phi_{ls}(u_l-u_s)\\&=\sum_{l(\neq s)}\phi_{sl}(u_l-u_s).\end{aligned} \tag{5}$$

最后一步利用对称性 $\phi_{sl}=\phi_{ls}$。力常数 ϕ_{sl} 包含短程作用和所有离子间的长程库仑作用两部分：

$$\phi_{sl}=\phi_{sl}^R+\phi_{sl}^C.$$

短程的 ϕ_{sl}^R，只考虑最近邻离子间的作用时，可表示为

$$\phi_{sl}^R=\gamma\delta_{l,s\pm1}, \tag{6}$$

而长程的 ϕ_{sl}^C 为

$$\begin{aligned}\phi_{sl}^C&=\left[\frac{d^2}{dx_{ll'}^2}\left(\frac{(-1)^{l+l'}e^2}{x_{ll'}}\right)\right]_{x^0{}_{ll'}=x_{ll'}}\\&=\frac{2(-1)^{l+l'}e^2}{(x^0{}_{ll'})^3}.\end{aligned}$$

由于 $x_{ll'}^0=(l'-l)a$，令 $p=l'-l$，则上式可表示为

$$\phi_{ll'}=C_{pc}=\frac{2(-1)^pe^2}{p^3a^3}. \tag{7}$$

将（6）、（7）两式代入（5），得

$$M\frac{d^2u_s}{dt^2}=\gamma(u_{s+1}+u_{s-1}-2u_s)+\sum_pC_{pc}(u_{s+p}-u_s)$$

$$= \gamma(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s)$$

$$+ \sum_{p>0} C_{pc}(u_{s+p} + u_{s-p} - 2u_s). \qquad (8)$$

(b) 令$u_s = u\exp(isKa) \cdot \exp(-i\omega t)$，代入（8），求出色散关系

$$-M\omega^2 = 2\gamma(\cos Ka - 1) + \sum_{p=1}^{\infty} C_{pc} \cdot 2(\cos pKa - 1).$$

将C_{pc}的表达式（7）代入，即得

$$M\omega^2 = 2\gamma(\cos Ka - 1)$$

$$+ \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p \frac{4e^2}{p^3 a^3} (1 - \cos pKa),$$

或

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2} = \sin^2 \frac{1}{2} Ka + \sigma \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p^3} (1 - \cos pKa). \qquad (9)$$

(c) 当$Ka = \pi$时，（9）式变为

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2} = 1 + \sigma \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p^3} (1 - \cos p\pi)$$

$$= 1 - 2\sigma \left[1 + \left(\frac{1}{3}\right)^3 + \left(\frac{1}{5}\right)^3 + \cdots\cdots \right]$$

$$= 1 - 2\sigma \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^3},$$

而

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^3} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^3}$$

$$= \frac{7}{8} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} = \frac{7}{8} \zeta(3),$$

$\therefore$

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2} = 1 - \frac{7\zeta(3)}{4}\sigma, \qquad (10)$$

可见，当

$$\sigma>\frac{4}{7\zeta(3)}=0.475 \tag{11}$$

时，　$\omega^2<0$.

当$Ka\ll1$时，将（9）式展开，只保留$(Ka)^2$项，得

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2}\approx\frac{1}{4}(Ka)^2+\sigma\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p\frac{\frac{1}{2}(pKa)^2}{p^3}$$

$$=\frac{1}{2}(Ka)^2\left[\frac{1}{2}+\sigma\sum_{p=1}^{\infty}\frac{(-1)^p}{p}\right]$$

$$=\frac{1}{2}(Ka)^2\left(\frac{1}{2}-\sigma\ln2\right), \tag{12}$$

所以当

$$\sigma>(2\ln2)^{-1}=0.721 \tag{13}$$

时，$\omega^2<0$，同时声速

$$V=\frac{\omega_0 a}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{1}{2}-\sigma\ln2}$$

为虚数.

由于$Ka=\pi$，$\sigma>0.475$以及$Ka\ll1$，$\sigma>0.721$时，ω^2都是负的，所以Ka取$(0,\pi)$间隔内的某个值，σ在$0.475<\sigma<0.721$范围内变化时，ω^2变号，必存在某一个σ值，使$\omega^2\to0$。这种现象称为振动模的软化。

第五章　声子(Ⅱ)，热性质

1．模密度的奇异点。（a）根据第四章所导出的，关于由只有最近邻相互作用的N个原子构成的单原子线性晶格的色散关系，证明模密变为

$$D(\omega)=\frac{2N}{\pi}\cdot\frac{1}{(\omega_m^2-\omega^2)^{1/2}},$$

式中ω_m是最大频率，（b）假定三维晶格中 $K=0$ 附近光学支声子的色散关系为 $\omega(K)=\omega_0-AK^2$，证明对于 $\omega<\omega_0$，

$$D(\omega)=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{2\pi}{A^{3/2}}\right)(\omega_0-\omega)^{\frac{1}{2}},$$

而对于$\omega>\omega_0$，$D(\omega)=0$．这里模密度是不连续的。

〈解〉

（a）长度为$L=Na$的线性晶格的模密度为

$$D(\omega)=\frac{Na}{\pi}\Big/\left|\frac{d\omega}{dK}\right|,\qquad(1)$$

其中a为原子间距。只考虑最近邻原子间相互作用时，单原子线性晶格的色散关系为

$$\omega^2=\omega_m^2\sin^2\left(\frac{1}{2}Ka\right),\qquad(2)$$

ω_m为极大频率，由此得出

$$\frac{d\omega}{dK}=\frac{a}{2}\omega_m\cos\left(\frac{1}{2}Ka\right)$$

$$= \frac{a\omega_m}{2}\left[1-\sin^2\left(\frac{1}{2}Ka\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{a}{2}\left(\omega_m^2-\omega^2\right)^{\frac{1}{2}} . \qquad (3)$$

代入（1）式得

$$D(\omega) = \frac{2N}{\pi}(\omega_m^2-\omega^2)^{-\frac{1}{2}} . \qquad (4)$$

（b）三维晶格中，若光学支在$K=0$附近的色散关系为

$\omega = \omega_0 - AK^2$，

则 $$N(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi}{3}K^3 = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi}{3}\left(\frac{\omega_0-\omega}{A}\right)^{\frac{3}{2}}.$$

所以，

$$D(\omega) = \left|\frac{dN(\omega)}{d\omega}\right| = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{2\pi}{A^{3/2}}(\omega_0-\omega)^{\frac{1}{2}}, \text{ 当}\omega<\omega_0\text{时.}$$

因ω_0为光学支的最大频率，所以当$\omega>\omega_0$时

$D(\omega) = 0$.

2. 晶体原胞的RmS热膨胀。（a）估计300K时Na原胞的热膨胀$\frac{\Delta V}{V}$的均方根（RmS）值。取体模量为7×10^{10}erg cm^{-3}。注意到Debye温度 158K比300K小，所以热能为k_BT的量级。（b）用此结果来估计晶格常数的均方根热涨落$\frac{\Delta a}{a}$。

〈解〉

（a）利用状态方程

$$P = -B\frac{\Delta V}{V} + \gamma\frac{\overline{E}}{V} , \qquad (1)$$

在室温附近可取$P=0$，于是得到

$$\frac{\Delta V}{V}=\frac{\gamma\overline{E}}{BV}. \tag{2}$$

大多数固体的γ值在1～3之间，可取$\gamma=2$，而热能的数量级为k_BT，考虑每原胞含有 2个原子，可取$\overline{E}\approx 2k_BT$，于是

$$\frac{\Delta V}{V}\approx\frac{4k_BT}{Ba^3}. \tag{3}$$

将$B=7\times10^{10}$erg cm^{-3}，$T=300$K，$k_B=1.38\times10^{-16}$erg/K，$a=4.29\times10^{-8}$cm代入上式，即得

$$\frac{\Delta V}{V}\approx 0.030. \tag{4}$$

(*b*) 线膨胀系数约为体膨胀系数的 $\frac{1}{3}$，即

$$\frac{\Delta a}{a}\approx\frac{1}{3}\frac{\Delta V}{V}=0.010. \tag{5}$$

3. 零点晶格位移与应变. (*a*) 在Debye近似中证明绝对零度下原子的均方位移为$\langle R^2\rangle=3\hbar\omega_D^2/8\pi^2\rho v^3$，$v$为声速. 从原书公式(4.29)出发，对独立晶格模求和：$\langle R^2\rangle=(\frac{\hbar}{2\rho V})\sum\omega^{-1}$. 从平方振幅到平方位移要引入因子$\frac{1}{2}$. (*b*) 证明一维晶格的$\sum\omega^{-1}$和$\langle R^2\rangle$是发散的，但均方应变是有限的. 把$\langle(\frac{\partial R^2}{\partial x})\rangle=\frac{1}{2}\sum K^2u_0^2$作为均方应变，对每原子质量为$M$的、由$N$个原子构成的原子线，只考虑纵模时，证明它等于$\frac{\hbar\omega_D^2L}{4\pi MNv^3}$. 对于任何物理

测量来说，R^2发散是不重要的。

〈解〉

（a）根据原书第四章（4、29）式，对于某一振动频率ω_i，晶格中原子的零点振动振幅的平方为

$$u_{0i}^2 = \frac{\hbar}{\rho V}\frac{1}{\omega_i} \quad , \tag{1}$$

原子的平方零点位移为$\frac{1}{2}u_{0i}^2$，对全部本征振动频率求和后，就得到方均零点位移：

$$\langle R^2\rangle = \frac{\hbar}{2\rho V}\sum_i \frac{1}{\omega_i} \quad . \tag{2}$$

在Debye近似下，上式可改写为

$$\begin{aligned}\langle R^2\rangle &= \frac{\hbar}{2\rho V}\int_0^{\omega_D}\frac{D(\omega)}{\omega}d\omega \\ &= \frac{\hbar}{2\rho V}\cdot\frac{3V}{2\pi^2 v^3}\int_0^{\omega_D}\omega d\omega \\ &= \frac{3\hbar}{8\pi^2\rho v^3}\omega_D^2 \quad ,\end{aligned} \tag{3}$$

ω_D为Debye截止频率。

（b）对于一维晶格，

$$D(\omega) = \frac{L}{\pi v} \quad ,$$

由此有

$$\begin{aligned}\sum_i \frac{1}{\omega_i} &= \int_0^{\omega_D}\frac{L}{\pi v}\frac{d\omega}{\omega} \\ &= \frac{L}{\pi U}\ln\omega\Big|_0^{\omega_D} \to \infty,\end{aligned} \tag{4}$$

故$\sum_i \frac{1}{\omega_i}$以及 $\langle R^2 \rangle$ 是发散的。现在考虑应变的方均值：

$$\langle (\frac{dR}{dx})^2 \rangle = \frac{1}{2}\sum_i K_i^2 u_{0i}^2$$

$$= \frac{\hbar}{2\rho V}\sum_i K_i^2 \frac{1}{\omega_i}$$

$$= \frac{\hbar}{2\rho V}\int_0^{\omega_D} \frac{K^2}{\omega} D(\omega)d\omega \ . \qquad (5)$$

只考虑纵振动，取$D(\omega) = \frac{L}{\pi v}$ ，且$\omega = Kv$，则

$$\langle (\frac{dR}{dx})^2 \rangle = \frac{\hbar L}{2\pi\rho V v^3}\int_0^{\omega_D} \omega d\omega$$

$$= \frac{\hbar L\omega_D^2}{4\pi\rho V v^3}$$

$$= \frac{\hbar\omega_D^2 L}{4\pi M v^3 N} \ , \quad (\text{其中用到}\rho V = NM). \qquad (6)$$

可见，虽然 $\langle R^2 \rangle$ 发散，但是 $\langle (\frac{dR}{dx})^2 \rangle$ 却是有限的。

4．一维晶格与层状晶格的热容。 (*a*) 证明在 Debye 近似下一维单原子晶格的热容在低温 ($T \ll \theta$) 下正比于 T/θ，θ 是一维晶格的有效Debye温度，其定义为 $\theta = \hbar\omega_m/k_B = \hbar\pi v_s/k_B a$，$k_B$ 为玻耳兹曼常数，a为原子间距。(*b*) 考虑由原子层组成的介电晶体，相邻层之间的相互作用非常弱，预期在非常低的温度下热容量具有什么形式？

〈解〉

(*a*) Debye近似下一维单原子晶格的平均热能为

$$U=\int_0^{\omega_m} D(\omega)\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}d\omega\ , \tag{1}$$

比热为

$$C_V=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

$$=\int_0^{\omega_m} D(\omega)\frac{(\hbar\omega)^2e^{\hbar\omega/k_BT}}{(e^{\hbar\omega/k_BT}-1)^2}\frac{1}{k_BT^2}d\omega\ .$$

根据原书第五章第一题知$D(\omega)=\frac{L}{\pi}\left/\left|\frac{d\omega}{dK}\right|\right.=\frac{2L}{\pi a}(\omega_m^2-\omega^2)^{-\frac{1}{2}}$，

所以有

$$C_V=\frac{2Lk_B}{\pi a}\int_0^{\theta/T}\frac{x^2dx}{(e^x-1)^2\left(\frac{\theta^2}{T^2}-x^2\right)^{1/2}}, \tag{2}$$

其中$\theta=\frac{\hbar\omega_m}{k_B}=\frac{\hbar\pi v_0}{k_Ba}$为有效Debye温度。在低温下，即$T\ll\theta$时，积分上限可用$\infty$代替，于是

$$C_V=\frac{2Lk_B}{\pi a}\int_0^{\infty}\frac{x^2dx}{(e^x-1)^2\left(\frac{\theta^2}{T^2}-x^2\right)^{\frac{1}{2}}}$$

$$\approx\frac{2Lk_B}{\pi a}\left(\frac{T}{\theta}\right)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2!\,n}{(n+1)^3}$$

$$=0.564Nk_B\left(\frac{T}{\theta}\right). \tag{3}$$

所以，一维晶格的热容在低温下与$\left(\frac{T}{\theta}\right)$的一次方成正比。

(*b*) 根据Debye模型，二维晶格的模密度$D(\omega)$与ω^{n-1}成正比（n为维数，现$n=2$），如果层状结构的晶体中层间相互作用很弱，则$D(\omega)$可近似地看成由各原子层的模密度的迭加。于

是，层状晶体的$D(\omega)$仍可认为是与ω成正比，

$$D(\omega) = A\omega \ , \tag{4}$$

不过$D(\omega)$应满足条件

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega)d\omega = 3N \ ,$$

由此求得

$$A = \frac{6N}{\omega_D^2} \ . \tag{5}$$

代到C_V公式中得到

$$C_V = k_B\int_0^{\omega_D} \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2 e^{\hbar\omega/k_BT}}{(e^{\hbar\omega/k_BT}-1)^2} \cdot \frac{6N\omega}{\omega_D^2}\, d\omega$$

$$= \frac{6Nk_B}{\omega_D^2}\left(\frac{k_BT}{\hbar}\right)^2\int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3e^x}{(e^x-1)^2}\, dx \ , \tag{6}$$

其中$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$。

当$T \ll \theta_D$时，

$$C_V = 6Nk_B\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^2\int_0^{\infty} \frac{x^3e^x}{(e^x-1)^2}\, dx$$

$$\approx 6Nk_B\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^2 \cdot 3!\zeta(3)$$

$$= 43.27Nk_B\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \ . \tag{7}$$

由此可见，对于层间相互作用很弱的三维介电晶体的低温热容与$\left(\frac{T}{\theta_D}\right)$的二次方成正比，而不是与$\left(\frac{T}{\theta_D}\right)$的三次方成正比。

5. Gruneisen常数。（a）证明频率为ω的声子模的自由能

为 $k_B T\ln[2\sinh(\hbar\omega/2k_BT)]$. (b) 如果$\Delta$是体积的相对变化，则晶体的自由能可以写为

$$F(\Delta,T)=\frac{1}{2}B\Delta^2+k_BT\Sigma\ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT}\right)\right],$$

其中 B 为体模量。假定ω_K与体积关系为$-\frac{\delta\omega}{\omega}=-\gamma\Delta$，$\gamma$为Gr neisen 常数. 如果认为$\gamma$与模$K$无关，证明当 $B\Delta=\gamma\sum\frac{1}{2}\hbar\omega\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)$ 时，F对于Δ为极小，并证明利用热能密度，可以将它写为 $\Delta=\gamma U(T)/B$。 (c) 根据Debye模型证明$\gamma=-\frac{\partial\ln\theta}{\partial\ln V}$。

〈解〉

(a) 考虑频率为ω的声子模，配分函数为

$$Z=\sum_{n=0}^{\infty}e^{-(\frac{1}{2}+n)\hbar\omega/k_BT}$$

$$=e^{-\hbar\omega/2k_BT}(1+e^{-\hbar\omega/k_BT}+e^{-2\hbar\omega/k_BT}+\cdots)$$

$$=\frac{e^{-\hbar\omega/k_BT}}{1-e^{-\hbar\omega/k_BT}}$$

$$=\frac{1}{e^{\hbar\omega/2k_BT}-e^{-\hbar\omega/2k_BT}}$$

$$=\left(2\sinh\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)^{-1}. \tag{1}$$

故自由能为

$$F=-k_BT\ln Z$$

$$=k_BT\ln\left[2\sinh\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right]. \tag{2}$$

(b) 晶体的自由能为

$$F(V,T)=E(V)+k_BT\sum_K \ln\left[2\sin h\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT}\right], \qquad (3)$$

$E(V)$ 为0K时晶体的内能，第二项为所有声子模的贡献。若晶体体积改变δV，则

$$F(V+\delta V,T)=E(V+\delta V)$$
$$+k_BT\sum_K \ln\left[2\sinh\frac{\hbar\omega_K(V+\delta V)}{2k_BT}\right],$$

而

$$E(V+\delta V)=E(V)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_0(\delta V)^2$$
$$=E(V)+\frac{1}{2}B\Delta^2,$$

其中$B=V^2\left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_0$为体弹性模量，$\Delta=\frac{\delta V}{V}$。于是与$\Delta$有关的自由能为

$$F(\Delta,T)=\frac{1}{2}B\Delta^2+k_BT\sum_K \ln\left[2\sinh\frac{\hbar\omega_K(V+\delta V)}{2k_BT}\right], \qquad (4)$$

其中$\omega_K(V+\delta V)=\omega_K(V)+\frac{\partial\omega_K}{\partial V}\delta V$

$$=\omega_K(V)+\frac{V}{\omega_K}\left(\frac{\partial\omega_K}{\partial V}\right)\omega_K\frac{\delta V}{V}$$

$$=\omega_K-\gamma_K\omega_K\Delta, \qquad (5)$$

$$\gamma_K=-\frac{V}{\omega_K}\left(\frac{\partial\omega_K}{\partial V}\right)=-\frac{\partial\ln\omega_k}{\partial\ln V}$$

为Grüneisen常数。假定γ_K与模式K无关，即$\gamma_K=\gamma$，则由$F(\Delta,T)$对Δ的极小条件

$$\frac{\partial F}{\partial\Delta}=B\Delta+k_BT\frac{\partial}{\partial\Delta}\sum_K \ln\left[2\sinh\frac{\hbar\omega_K(V+\delta V)}{2k_BT}\right]$$

$$= B\Delta + \frac{1}{2}\hbar\sum_K \coth(\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT})\ \frac{\partial\omega_K(V+\delta V)}{\partial\Delta} \approx 0$$

得到 $$\Delta B = -\frac{1}{2}\hbar\sum_K \cot h(\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT})\ \frac{\partial\omega_K(V+\delta V)}{\partial\Delta}, \tag{6}$$

利用（5）式， $$\frac{\partial\omega_K(V+\delta V)}{\partial\Delta} = -\gamma\omega_K,$$

由此有

$$B\Delta = \gamma\sum_K \frac{1}{2}\hbar\omega_K\coth(\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT}), \tag{7}$$

平均热能为

$$U(T) = F - T(\frac{\partial F}{\partial T})_V = -T^2\left[\frac{\partial(F/T)}{\partial T}\right]_V$$

$$= -T^2\frac{\partial}{\partial T}\left\{k_B\sum_K \ln\left[2\sinh\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT}\right]\right\}$$

$$= \sum_K \frac{1}{2}\hbar\omega_K\coth(\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT}), \tag{8}$$

这里假定ω_K与T无关．将（8）式代入（7）式得

$$\Delta = \gamma U(T)/B. \tag{9}$$

（c）由（3）式可得状态方程：

$$P = -(\frac{\partial F}{\partial V})_T = -(\frac{dE}{dV}) - \frac{\partial}{\partial V}\left\{k_BT\sum_K \ln[2\sin h(\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT})]\right\}$$

$$= -(\frac{dE}{dV}) - k_BT\sum_K \frac{\partial}{\partial\omega_K}\ln[2\sinh(\frac{\hbar\omega_K}{2k_BT})]\cdot\frac{\partial\omega_K}{\partial V}. \tag{10}$$

采用Debye近似，（10）式的第二项可以改写为积分形式：

$$-k_BT\int_0^{\omega_D} \frac{\partial}{\partial\omega}\ln[2\sinh\frac{\hbar\omega}{2k_BT}]\cdot\frac{\partial\omega}{\partial V}D(\omega)d\omega$$

$$= -k_BT\int_0^{\omega_D} \frac{\hbar}{2k_BT}\coth(\frac{\hbar\omega}{2k_BT})\cdot\frac{\partial\omega}{\partial V}\cdot\frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2 d\omega$$

$$= -\frac{9N\hbar}{2\omega_D^3 V}\int_0^{\omega_D} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \frac{\partial \ln\omega}{\partial \ln V}\,\omega^3 d\omega \ . \qquad (11)$$

令 $\gamma = -\frac{\partial \ln\omega}{\partial \ln V}$. 如果近似地认为在各种振动的$\omega$下，$\gamma$ 均具有相同的值，则γ可提出积分号外. 引入$\theta = \hbar\omega_D/k_B$，称为Debye特征温度，$x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$，于是（11）式变成：

$$\frac{9}{2}Nk_B T\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \frac{\gamma}{V}\int_0^{\theta/T} \coth\left(\frac{x}{2}\right) x^3 dx. \qquad (12)$$

和（10）式同样理由，平均热能（8）式 $U(T)$ 可以写成：

$$U(T) = \sum_K \frac{1}{2}\hbar\omega_K \coth\left(\frac{\hbar\omega_K}{2k_B T}\right)$$

$$= \frac{9}{2}Nk_B T\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{\theta/T} \coth\left(\frac{x}{2}\right) x^3 dx. \qquad (13)$$

把（12）、（13）式代入（10）式得到：

$$P = -\left(\frac{dE}{dV}\right) + \gamma\frac{U(T)}{V}$$

$$= P_0 + \gamma\frac{U(T)}{V}. \qquad (14)$$

压力可分为“冷”压P_0和热压 $\gamma\frac{U(T)}{V}$两部分之和，此方程称为Gruneisen近似状态方程，取ω为ω_D时，

$$\gamma = -\frac{\partial \ln\omega}{\partial \ln V} = -\frac{\partial \ln\theta}{\partial \ln V}, \qquad (15)$$

称为Gr neisen常数，为正值。

6. 正方形晶格的模密度. 在第四章第一问题中我们已求出具有最近邻相互作用的正方形晶格的色散关系为 $\omega^2 M = 2C\ (2-$

$\cos K_x a - \cos K_y a$）。注意到布里渊区可分为8个等价区域，将每个区域分为大约100多个小方块。计算在每个小方块中心（或角上）的ω值，并绘出每单位频率间隔内的小方块数的矩形图。绘出$D(\omega)$对ω的曲线。计算中取$2C=1$，$M=1$。

〈解〉

二维正方格子的第一布里渊区是正方形的。由色散关系

$$M\omega^2 = 2C\ (2 - \cos K_x a - \cos K_y a)$$

可知，第一布里渊区可分为8个等价区（参看图5—1）。把图中的小区域1的两个直边分成十五等分。使它分成120个小正方块并计算每个小正方块中心的ω值。计算中取$2C=1$，$M=1$。计算结果列在表5.1中。

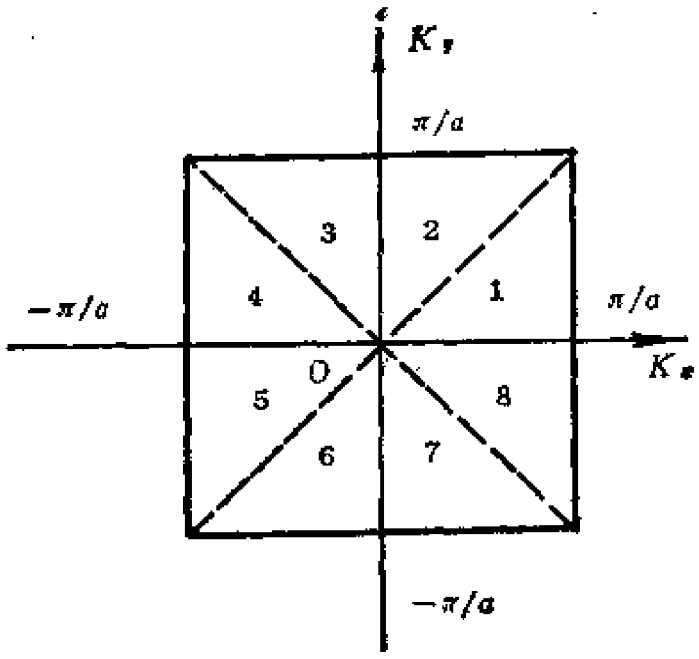


图5-1 正方格子的第一布里渊区

表5. 2　　每0.5频率间隔内的小方块数A

ω	0～0.5	0.5～1.0	1.0～1.5	1.5～2.0
A	5	17	51	47

由表5.2可画出A～ω的矩形图（见图5—2），而由矩形图大致可画出$D(\omega)$～ω关系的示意图（见图5—3）。

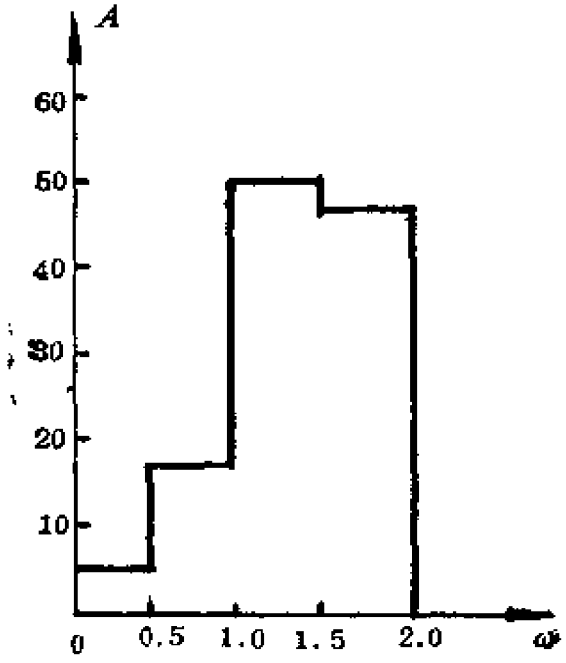


图5—2　A～ω矩形图

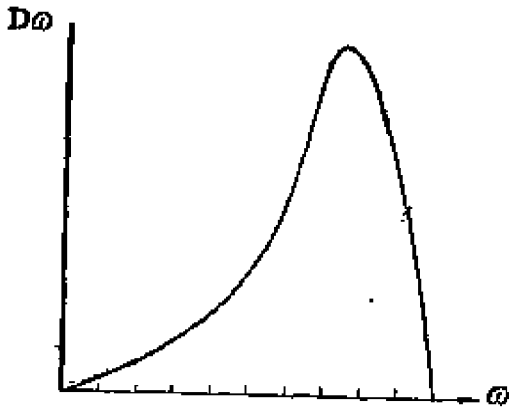


图5—3　D(ω)～ω示意图

第六章　自由电子费米气体

1．电子气体的动能。证明N个电子的三维自由电子气体在0 K时的动能为

$$U_0=\frac{3}{5}N\varepsilon_F\ .$$

〈解〉

$T=0$K时体积V中N个自由电子的总能量为

$$U_0=2\sum_{k<k_F}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\ , \tag{1}$$

因子2是由于每一k状态可容纳2个自旋相反的电子，k_F为费米波矢。因为k空间中每单位体积所允许的状态数为$\frac{V}{8\pi^3}$，所以每一允许的k值在波矢空间中所占的体积为$\Delta^3k=8\pi^3/V$，在$\Delta^3k\to 0$的极限下，对k的求和可改为对k积分，即

$$\frac{U_0}{V}=\frac{2}{8\pi^3}\int_{k<k_F}d^3k\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

$$=\frac{1}{\pi^2}\frac{\hbar^2k_F^5}{10m}\ . \tag{2}$$

另一方面，在费米球内所允许的电子总数为

$$N=2\ (\frac{4\pi}{3}k_F^3)(\frac{V}{8\pi^3})$$

$$= \frac{k_F^3}{3\pi^2}V, \qquad (3)$$

代入上式得到

$$U_0 = \frac{3}{5}N\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

$$= \frac{3}{5}N\varepsilon_F \quad . \qquad (4)$$

2. 电子气体的压强和体模量. (a) 推导0K时电子气体的压强与体积的关系式. 结果可以写为$P = \frac{2}{3}(U_0/V)$. (b) 证明0K时电子气体的体模量$B = -V\cdot(\partial P/\partial V)$为$B = 5P/3 = 10U_0/9V$. (c) 估计钾电子气体对B的贡献.

〈解〉

(a) 0K时电子气体的基态能量为

$$U_0 = \frac{3}{5}N\varepsilon_F \ , \qquad (1)$$

其中

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} \quad .$$

由此可计算压强

$$P = -\left(\frac{\partial U_0}{\partial V}\right)_N$$

$$= -\frac{3}{5}N\left(\frac{\partial \varepsilon_F}{\partial V}\right)_N$$

$$= \frac{2}{3}\frac{U_0}{V} \quad . \qquad (2)$$

(b) 0 K时的体模量为

$$B = -V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)$$

$$= -V\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{2}{3}\frac{U_0}{V}\right)$$

$$= -V\frac{\partial}{\partial V}\left[\frac{N\hbar^2}{5m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3}\cdot\frac{1}{V}\right]$$

$$= \frac{5}{3}P = \frac{10}{9}\frac{U_0}{V}\ . \qquad (3)$$

(c) 上面的结果也可以表示为

$$B = \frac{2}{3}n\varepsilon_F = \left(\frac{6.125}{r_s'}\right)^5 \times 10^{10}\,\mathrm{dyn/cm^2}, \qquad (4)$$

其中

$$r_s' = r_s/a_0,$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}\ , \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3}\ , \quad n = \frac{N}{V}\ .$$

对于金属钾，$r_s' \approx 4.86$，代入上式可估算出

$$B \approx 3.18 \times 10^{10}\,\mathrm{dyn/cm^2}\ . \qquad (5)$$

实验值为$2.81 \times 10^{10}\,\mathrm{dyn/cm^2}$，可见，自由电子理论对碱金属是比较好的.

3. 二维电子气体的化学势. 证明二维弗米气体的化学势由

$$\mu(T) = k_B T \ln[\exp(\pi n\hbar^2/mk_B T) - 1]$$

给出，每单位面积上有n个电子。

〈解〉

二维自由电子气体，在πk^2弗米圆内，k的允许状态数为

$\pi k^2(\frac{L}{2\pi})^2$，考虑到自旋，有

$$N = 2\pi k^2 \frac{A}{4\pi^2} = \frac{k^2}{2\pi} A, \tag{1}$$

其中 $A = L^2$ 为面积。电子气体的浓度 n 与能量 ε 的关系为

$$n = \frac{N}{A} = \frac{k^2}{2\pi} = \frac{m}{\pi\hbar^2}\varepsilon, \tag{2}$$

所以二维样品每单位面积上的状态密度为

$$D(\varepsilon) = \frac{dn}{d\varepsilon} = \frac{m}{\pi\hbar^2}, \tag{3}$$

与能量 ε 无关。化学势 $\mu(T)$ 可由下式决定：

$$\begin{aligned} n &= \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) \\ &= \frac{m}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1} \\ &= \frac{mk_BT}{\hbar\pi^2}\int_{-\mu/k_BT}^\infty \frac{dx}{e^x+1} \\ &= \frac{mk_BT}{\hbar\pi^2}\ln(1+e^{\mu/k_BT}) \quad . \end{aligned} \tag{4}$$

由此解出化学势

$$\mu = k_BT \ln\left[\exp\left(\frac{n\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)-1\right] . \tag{5}$$

4．天体物理中的费米气体. (*a*) 已知太阳的质量为 $M_\odot = 2\times10^{33}$ g，试估计太阳中的电子数. 在白矮星中如可以离化出同样多的电子，把它们限制在半径为 2×10^9 m 的球中，求电子的弗米能，以电子伏（eV）表示。(*b*) 在相对论极限下 $\varepsilon \gg mc^2$ 内，电子的能量与波矢的关系为 $\varepsilon \approx Pc = \hbar kc$：证明在此极限内弗米能近

似为 $\varepsilon_F \approx \hbar c(N/V)^{1/3}$. (c) 如果上述数目的电子限制在半径为10Km的脉冲星中,证明其费米能约为10^8eV.利用这个数值说明为什么可以认为脉冲星主要是由中子而不是由质子和电子组成的。

〈解〉

(a) 为估计太阳中的电子数N，令Na表示太阳的原子总数，Z为平均原子序数，则

$$N = NaZ \ , \tag{1}$$

而太阳的质量为

$$M\odot = Na\ (Zm_e + m) \ , \tag{2}$$

其中m_e为电子质量，而m为平均原子核的质量，它可以近似取为核中质子质量的2倍，即

$$m \approx 2Zm_p,$$

其中m_p为质子的质量。于是

$$M\odot \approx Na\ (Zm_e + 2Zm_p) \ . \tag{3}$$

由于$m_e \ll m_p$，故有

$$M\odot \approx 2NaZm_p = 2Nm_p \ . \tag{4}$$

由此可以估算出太阳中的电子数

$$N = \frac{M\odot}{2m_p} = \frac{2\times10^{33}}{2\times1.67\times10^{-24}} \approx 6\times10^{56}. \tag{5}$$

如果白矮星中有同样多的电子被离化并约束在半径为 $R = 2\times10^9$m的球中，则电子的费米能为

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{3\pi^2N}{V}\right)^{2/3}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{9\pi N}{4R^3}\right)^{2/3}$$

$$\approx 2.5\times10^4\text{eV} \ . \tag{6}$$

(*b*) 电子的能量随电子气体密度的增加而增加，当电子能量比mc^2大得多时，成为超相对论性电子气体。这时电子的能量和动量的关系为

$$\varepsilon = cp = c\hbar k \quad . \tag{7}$$

对于量子态数及弗米波矢k_F来说，仍旧和非相对论性电子气体的情形一样，即有

$$k_F = (3\pi^2)^{1/3} \ (N/V)^{1/3} \quad , \tag{8}$$

但弗米能现在等于

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= c\hbar k_F \\ &= (3\pi^2)^{1/3} \ c\hbar \ (N/V)^{1/3} \\ &\approx 3c\hbar (N/V)^{1/3} \quad . \end{aligned} \tag{9}$$

(*c*) 如果在半径$R = 10\text{Km}$的脉冲星中含有$N = 6\times 10^{56}$个电子，即设想太阳中的电子数约束在体积比较小的脉冲星中，这种高度压缩的电子气体的能量已远远超过mc^2，形成超相对论性电子气体，利用 (*b*) 的结果可以估算出弗米能的数量级为

$$\varepsilon_F \approx 3c\hbar \ (\frac{N}{V})^{1/3} \approx 3\times 10^8 \text{ev} \quad . \tag{10}$$

这样大的ε_F的值说明，脉冲星中主要是由中子组成，而不是由质子和电子组成的。因为中子衰变为质子和电子的反应$n \to p + e^-$，只能释放出0.8×10^6ev的能量，此能量不足以使很多电子形成ε_F高达10^8ev的弗米海。中子衰变过程只能产生达到 0.8×10^8ev 的弗米能级的电子浓度，此时中子、质子和电子的浓度是处于平衡的。

5. 液体He^3. 原子He^3的自旋为1/2，是弗米子. 液体He^3在绝对零度附近的密度为0.081gcm^{-3}. 计算弗米能ε_F和弗米温度T_F.

〈解〉

He^3的自旋为1/2，是费米子，其质量$m \approx 3m_p \approx 5\times10^{-24}$g. 在密度$\rho = 0.081 gcm^{-3}$的液体$He^3$中，单位体积中的$He^3$数目为

$$n = \frac{\rho}{m} \approx 1.62\times10^{22}cm^{-3},$$

其费米能为

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3}.$$

将上面得到的n，m值代入，就得到

$$\varepsilon_F \approx 6.8\times10^{-16}erg \approx 4.3\times10^{-4}ev.$$

费米温度为

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} \approx \frac{4.3\times10^{-4}}{8.617\times10^{-5}}(K) \approx 4.9K.$$

6. 电导率与频率的关系. 用电子漂移速度v的方程$m(dv/dt + v/\tau) = -eE$，证明频率为ω的电导率为

$$\sigma(\omega) = \sigma(0)\left(\frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}\right),$$

其中$\sigma(0) = ne^2\tau/m$.

〈解〉

在电场E作用下电子的运动方程为

$$m\left(\frac{dv}{dt} + \frac{v}{\tau}\right) = -eE.$$

设$E = E_0 e^{-i\omega t}$，$v = v_0 e^{-i\omega t}$，代入上式得

$$\left(-i\omega + \frac{1}{\tau}\right)v = -\frac{e}{m}E,$$

或 $$v=\frac{-(1+i\omega\tau)}{1+(\omega\tau)^2}\cdot\frac{e\tau}{m}E\ .$$

电导率

$$\sigma(\omega)=\frac{j}{E}=\frac{-env}{E}$$

$$=\frac{e^2\tau n}{m}\left(\frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}\right)$$

$$=\sigma(0)\left(\frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}\right)\ .$$

7. 自由电子动力学磁致电导率张量. 具有电荷为$-e$，自由电子浓度为n的金属，处在静磁场$B\hat{Z}$中。在xy平面上，电流密度与电场的关系为

$$j_x=\sigma_{xx}E_x+\sigma_{xy}E_y\ ;$$

$$j_y=\sigma_{yx}E_x+\sigma_{yy}E_y\ .$$

假设频率$\omega\gg\omega_c$且$\omega\gg1/\tau$，其中$\omega_c=eB/mc$，τ是碰撞时间。(a) 解漂移速度方程，求出磁致电导率张量的分量：

$$\sigma_{xx}=\sigma_{yy}=i\omega_p^2/4\pi\omega\ ;$$

$$\sigma_{xy}=-\sigma_{yx}=\omega_c\omega_p^2/4\pi\omega^2\ ,$$

其中$\omega_p^2=4\pi ne^2/m$. (b) 从麦克斯韦方程得知，介质的介电函数张量与电导率张量的关系为$\varepsilon=1+i(4\pi/\omega)\sigma$。设有波矢量$\mathbf{k}=k\hat{Z}$的电磁波，证明这个波在介质中的色散关系为

$$c^2k^2=\omega^2-\omega_p^2\pm\omega_c\omega_p^2/\omega\ .$$

〈解〉

(a) 电子的漂移速度方程为

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_x=-e\left(E_x+\frac{B}{c}v_y\right)\ , \qquad (1)$$

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_y=-e\left(E_y-\frac{B}{c}v_x\right),\qquad(2)$$

$$m\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau}\right)v_z=-eE_z,\qquad(3)$$

因为只要求xy平面内的电流密度与电场的关系，故只考虑头两个方程即可。设电场和速度v与时间的关系为 $E_x=E_x^0e^{-i\omega t}$，$E_y=E_y^0e^{-i\omega t}$，$v_x=v_x^0e^{-i\omega t}$，$v_y=v_y^0e^{-i\omega t}$，代入（1）、（2）两式得

$$v_x=\frac{1}{1-i\omega\tau}\left(-\frac{e\tau}{m}E_x-\omega_c\tau v_y\right),$$

$$v_y=\frac{1}{1-i\omega\tau}\left(-\frac{e\tau}{m}E_y+\omega_c\tau v_x\right),$$

其中$\omega_c=eB/mc$。若$\omega\gg\frac{1}{\tau}$，即$\omega\tau\gg1$，则

$$\frac{1}{1-i\omega\tau}=\frac{1+i\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}\approx i\frac{1}{\omega\tau},$$

于是

$$v_x=-i\frac{e}{\omega m}E_x-i\frac{\omega_c}{\omega}v_y,$$

$$v_y=-i\frac{e}{\omega m}E_y+i\frac{\omega_c}{\omega}v_x,$$

由此解出

$$v_x\left(1-\frac{\omega_c^2}{\omega^2}\right)=-i\frac{e}{m\omega}E_x-\frac{\omega_c e}{m\omega^2}E_y,$$

$$v_y\left(1-\frac{\omega_c^2}{\omega^2}\right)=-i\frac{e}{m\omega}E_y+\frac{\omega_c e}{m\omega^2}E_x.$$

假定$\omega\gg\omega_c$，略去ω_c^2/ω^2项，得

$$v_x = -i\frac{e}{m\omega}E_x - \frac{\omega_c e}{m\omega^2}E_y \ ,$$

$$v_y = -i\frac{e}{m\omega}E_y + \frac{\omega_c e}{m\omega^2}E_x \ .$$

因为xy平面上的电流密度j_x和j_y可以写为

$$j_x = -nev_x = \sigma_{xx}E_x + \sigma_{xy}E_y \ ,$$

$$j_y = -nev_y = \sigma_{yx}E_x + \sigma_{yy}E_y \ ,$$

与上面两式进行比较后得到：

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = i\omega_p^2/4\pi\omega \ , \tag{4}$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \omega_c\omega_p^2/4\pi\omega^2 \ . \tag{5}$$

这就是我们要求的磁致电导率张量的分量，其中$\omega_p^2 = 4\pi ne^2/m$。

（*b*）电磁波在介电函数为 ε 的介质中传播应满足以下的方程

$$\nabla^2\mathbf{E} = \frac{1}{c^2}\,\varepsilon\,\frac{d^2\mathbf{E}}{d^2t} \ . \tag{6}$$

现在 ε 为张量，与电导率张量σ的关系为

$$\varepsilon = \mathbf{1} + i\frac{4\pi}{\omega}\sigma \ ,$$

即

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{4\pi}{\omega}\sigma_{xx} & i\frac{4\pi}{\omega}\sigma_{xy} \\ i\frac{4\pi}{\omega}\sigma_{yx} & 1 + i\frac{4\pi}{\omega}\sigma_{yy} \end{pmatrix}, \tag{7}$$

其中σ各分量的关系由（4）、（5）式决定。

设有向Z方向传播的电磁波，波矢$\mathbf{k} = k\hat{Z}$，

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(kZ-\omega t)} \ ,$$

代入（6）式并利用（7）式得

$$k^2\mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2}(\mathbf{1} + i\frac{4\pi}{\omega}\sigma)\mathbf{E} \ ,$$

写成分量形式

$$c^2k^2E_x=(\omega^2+i4\pi\omega\sigma_{xx})E_x+i4\pi\omega\sigma_{xy}E_y\ ,$$

$$c^2k^2E_y=i4\pi\omega\sigma_{yx}E_x+(\omega^2+i4\pi\omega\sigma_{yy})E_y\ .$$

利用（4）、（5）式，上式可化简为

$$[c^2k^2-(\omega^2-\omega_p^2)]E_x-i\omega_p^2\frac{\omega_c}{\omega}E_y=0\ ,$$

$$i\omega_p^2\frac{\omega_c}{\omega}E_x+[c^2k^2-(\omega^2-\omega_p^2)]E_y=0\ .$$

E_x，E_y有非零解的条件是上式的系数行列式为零，即要求

$$\begin{vmatrix} [c^2k^2-(\omega^2-\omega_p^2)] & -i\dfrac{\omega_p^2\omega_c}{\omega} \\ i\dfrac{\omega_p^2\omega_c}{\omega} & [c^2k^2-(\omega^2-\omega_p^2)] \end{vmatrix}=0\ .$$

由此解出

$$c^2k^2=(\omega^2-\omega_p^2)\pm\frac{\omega_c\omega_p^2}{\omega}\ .$$

这样，在给定的频率下，有两个具有不同波矢和不同速度在传播的模。此两个模相应于圆偏振波。因为线偏振波可以分解为两个圆偏振波，所以磁场将导致线偏振波的偏振平面的转动。

8．自由电子费米气体的结合能．我们定义无量纲长度r_s为r_0/a_H，r_0为含有一个电子的球体的半径，a_H是玻尔半径$\hbar^2/me^2$．(a)证明0K时自由电子弗米气体中每个电子的平均动能为$2.21/r_s^2$，这里能量用黎德堡Ry表示，$1\text{Ry}=me^4/2\hbar^2$。（b）证明正点电荷e与均匀分布于半径为r_0的球体中的单电子的相互作用能为$-3e^2/2r_0$或$(-3/r_s)$ Ry．（c）证明分布在球中的电子的库仑自能为$3e^2/5r_0$或$(6/5r_s)$ Ry。（d）（b）与（c）以及交换能之

和给出 $-0.916/r_s$，就是每个电子的总库仑能．求r_s的平衡值．这种金属相对于分离的H原子来说是否稳定？

〈解〉

(a) 由本章第一题的结果，得0K时自由电子费米气体每个电子的平均动能为

$$E_0 = \frac{3}{5}\varepsilon_F = \frac{3\hbar^2}{10m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3}.$$

令$V/N = 4\pi r_0^3/3 = 4\pi(r_s a_H)^3/3$，其中 $a_H = \hbar^2/me^2$ 为玻尔半径，于是 E 可以表示为

$$E_0 = \frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\cdot\frac{1}{r_s^2}\left(\frac{me^4}{2\hbar^2}\right).$$

取$1\mathrm{Ry} = me^4/2\hbar^2$做为能量单位，得

$$E_0 = \frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\cdot\frac{1}{r_s^2}\ (\mathrm{Ry})$$

$$= \frac{2.21}{r_s^2}\ (\mathrm{Ry}).$$

(b) 平均每个自由电子所占的体积 v为半径等于r_0的球，如果电子的电荷在球内均匀分布，$\rho = n(-e) = -e/\frac{4}{3}\pi r_0^3$，则电子与处在球心的正点电荷的库仑作用能为

$$E_1 = (+e)\cdot\int_v n(-e)/r\ d\tau$$

$$= -e^2\int_0 \frac{1}{\frac{4\pi}{3}r_0^3}\cdot\frac{1}{r}d\tau$$

$$= -\frac{3e^2}{r_0^3}\int_0^{r_0} r\,dr = -\frac{3e^2}{2r_0},$$

或写为

$$E_1 = -\frac{3e^2}{2r_s a_H} = -\frac{3}{r_s}\ (\mathrm{Ry}).$$

(c) 为了计算均匀电荷球的自能，设想这个球是从球心开始保持电荷密度$\rho = -e/\frac{4\pi}{3}r_0^3$均匀地扩大而成。在半径为$r$的球内的总电荷为

$$Q(r) = \frac{4\pi}{3}r^3\rho = -\frac{er^3}{r_0^3},$$

在球面上的势为$Q(r)/r$。当半径从r增加至$r+dr$时，所作的功为$Q(r)\cdot dQ(r)/r$，所以总的势能为

$$E_2 = \int_0^{r_0}\frac{Q(r)dQ(r)}{r}$$

$$= \frac{3e^2}{r_0^6}\int_0^{r_0} r^4 dr$$

$$= \frac{3}{5}\frac{e^2}{r_0} = \frac{3}{5}\frac{e^2}{r_s a_H} = \frac{1.2}{r_s}\ (\mathrm{Ry}).$$

此即球内电子分布的库仑自能.

(d) 综合上面的计算结果，平均每个电子的总能量为

$$E = E_0 + E_1 + E_2 + E_{ex}$$

$$= \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{3}{r_s} + \frac{1.2}{r_s} - \frac{0.916}{r_s}$$

$$= \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{2.716}{r_s}\ (\mathrm{Ry}),$$

其中$E_{ex} = -0.916/r_s$为自由电子的交换能。r_s的平衡值由E的极小条件决定，从

$$\frac{\partial E}{\partial r_s} = \left(-\frac{4.42}{r_s^3} + \frac{2.716}{r_s^2}\right)r_s^0 = 0$$

解出

$$r_s^0 = \frac{4.42}{2.716} \approx 1.63 \quad .$$

将此r_s^0值代入E中，得到平衡时的E值：

$$E_m = \frac{2.21}{(r_s^0)^2} - \frac{2.716}{r_s^0}$$

$$\approx -0.83 \text{ (Ry)}.$$

因为这个数值小于H原子的离化能（1Ry），所以按照上述自由电子理论，这种金属是不稳定的.

9. 静态磁致电导率张量. 考虑到电子在电场和静磁场中运动的漂移速度理论，证明静态电流密度可以写为矩阵形式

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1+(\omega_c\tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 01+(\omega_c\tau)^2 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}.$$

对于图6—1所示的安排，固体的横向磁致电导率定义为E_x/j_x. 证明上式导致$j_x = \sigma_0 E_x$，因为对于这种安排$j_y = 0$. 所以根据这个模型，电阻与磁场无关，相反，实验表明电阻随磁场的增加而增加.

〈解〉

电子在电场和静磁场中的运动方程为

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_x = -e\left(E_x + \frac{B}{c}v_y\right),$$

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_y = -e\left(E_y - \frac{B}{c}v_x\right),$$

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_z = -eE_z \quad .$$

因为只研究静态电流密度 $\mathbf{j}=-ne\mathbf{v}$，v与t无关，故上式变为

$$\frac{m}{\tau}v_x = -e\left(E_x + \frac{B}{c}v_y\right),$$

$$\frac{m}{\tau}v_y = -e\left(E_y - \frac{B}{c}v_x\right),$$

$$\frac{m}{\tau}v_z = -eE_z .$$

由此解出

$$v_x = \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2}\left(-\frac{e\tau}{m}E_x + \frac{\omega_c\tau^2 e}{m}E_y\right),$$

$$v_y = \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2}\left(-\frac{\omega_c\tau^2 e}{m}E_x - \frac{e\tau}{m}E_x\right),$$

$$v_z = -\frac{e\tau}{m}E_z .$$

静态电流密度为

$$j_x = \frac{\sigma_0}{1+(\omega_c\tau)^2}(E_x - \omega_c\tau E_y),$$

$$j_y = \frac{\sigma_0}{1+(\omega_c\tau)^2}(\omega_c\tau E_x + E_y),$$

$$j_z = \sigma_0 E_z ,$$

其中$\sigma_0 = ne^2\tau/m$，$\omega_c = Be/mc$．上式也可以写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0}{1+(\omega_c\tau)^2}\begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau & 0 \\ \omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1+(\omega_c\tau)^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}.$$

按图6—1所示的情形，$j_y = 0$，即

$$j_y = \frac{\sigma_0}{1+(\omega_c\tau)^2}(\omega_c\tau E_x + E_y) = 0 ,$$

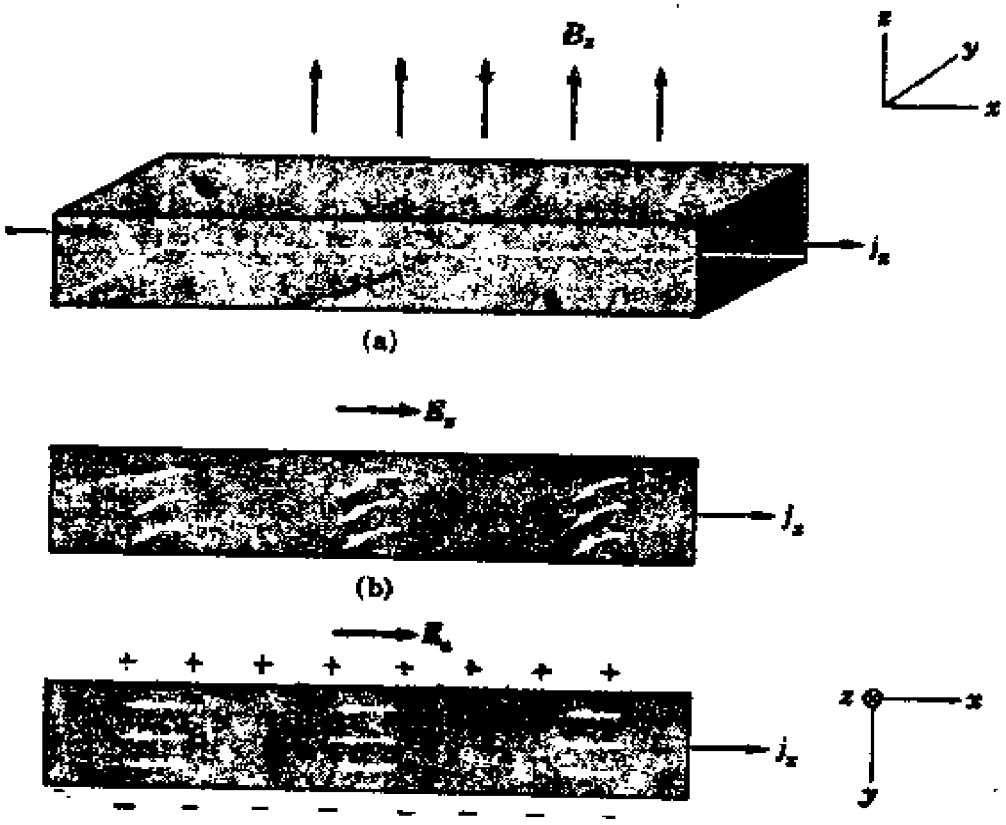


图6—1　样品在电场和静磁场中

所以

$$E_y = -\omega_c \tau E_x \ .$$

代入j_x就得到

$$j_x = \sigma_0 E_x \ .$$

横向电阻为$E_x/j_x = \frac{1}{\sigma_0}$，与磁场无关，但实验表明它随磁场的增大而增加。说明上述自由电子理论太简单了，不能解释这种现象。

第七章　能　　带

1．正方形晶格，自由电子能量。（a）对于简单正方晶格（二维），证明在第一布里渊区角上的自由电子动能为区边中点的二倍。（b）对于简单立方晶格（三维），相应的倍数是多少？（c）（b）的结果对于二价金属的电导率可能会产生什么影响？

〈解〉

（a）二维简单正方晶格的晶格常数为 a，倒格子基矢为

$$\mathbf{A}=\frac{2\pi}{a}\hat{i},\qquad \mathbf{B}=\frac{2\pi}{a}\hat{j},$$

第一布里渊区如图 7－1 所示。

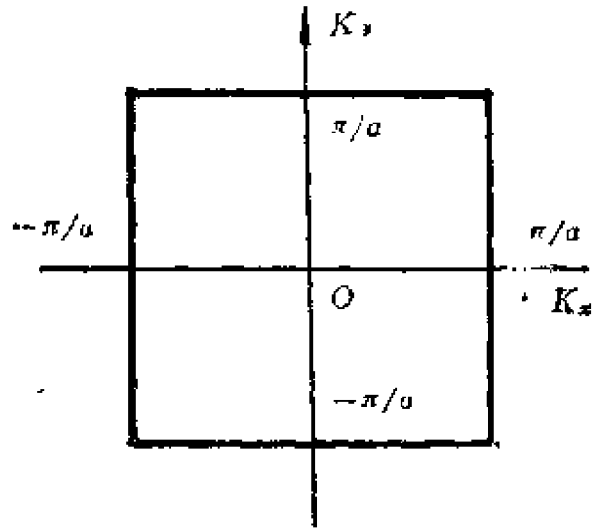


图 7－1　二维简单正方晶格的第一布里渊区

区边中点的波矢为$\mathbf{K}_A=\frac{\pi}{a}\hat{i}$，

角顶 B 点的波矢为$\mathbf{K}_B=\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{i}+\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{j}$。

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

由此得：A 点的能量为 $\varepsilon_A=\frac{\hbar^2}{2m}K_x^2=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$；

B 点的能量为 $\varepsilon_B=\frac{\hbar^2}{2m}(K_x^2+K_y^2)$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2+\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right]=\frac{\hbar^2}{2m}\left[2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right].$$

因此有$\varepsilon_B/\varepsilon_A=2$。

（b）简单立方晶格的晶格常数为a，倒格子基矢为

$$\mathbf{A}=\left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{i},\quad B=\left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{j},\quad C=\left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{k},$$

第一布里渊区如图 7 — 2 所示。

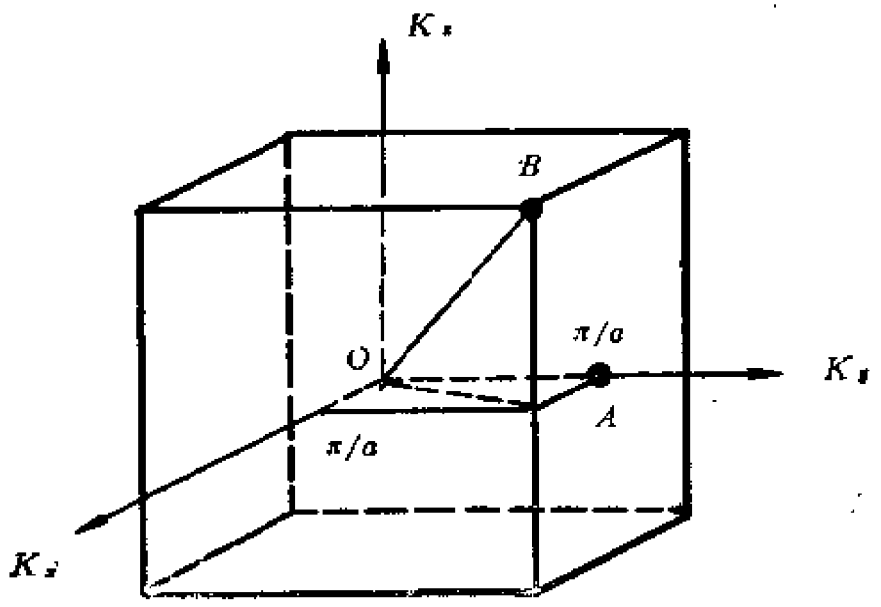


图 7 — 2　简单立方晶格的第一布里渊区

区边中点A的波矢为

$$\mathbf{K}_A=\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{i},$$

顶角B点的波矢为

$$\mathbf{K}_B=\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{i}+\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{j}+\left(\frac{\pi}{a}\right)\hat{k}.$$

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

A点的能量为 $\varepsilon_A=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$,

B点的能量为 $\varepsilon_B=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2+\left(\frac{\pi}{a}\right)^2+\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right]$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left[3\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right].$$

因此可得 $\varepsilon_B/\varepsilon_A=3$.

（c）如果二价金属具有简单立方晶格结构，布里渊区如图7—2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（b）可知，内切于$A$点的内切球的体积为$\frac{4\pi}{3}\left(\frac{\pi}{a}\right)^3$，于是在$K$空间中，内切球内能容纳的电子数为

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

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，晶体将具有绝缘体性质。然而由（b）可知，$\varepsilon_B = 3\varepsilon_A$，$B$点的能量比$A$点高得多，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。

2．简约区中的自由电子能量。在空格点近似下，考虑 fcc 晶格的自由电子能带，在简约区图中，所有的 K 都变换到第一布里渊区内。大略地绘出在〔1 1 1〕方向上能量达到区域边界上 $K = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right)$ 的最低带能量的六倍的所有能带（用最低能带能量作为能量单位）。

〈解〉

fcc晶格的倒格子是体心立方格子，倒易空间的倒格矢为

$$\mathbf{G} = G_x\hat{x} + G_y\hat{y} + G_z\hat{z} = \frac{2\pi}{a}(g_1\hat{x} + g_2\hat{y} + g_3\hat{z}), \quad (1)$$

其中 $\hat{x}$、$\hat{y}$、$\hat{z}$ 分别为K空间中的单位矢量，$g_1g_2g_3$ 为整数。

自由电子能量为：

$$\varepsilon(K_x, K_y, K_z) = \frac{\hbar^2}{2m}(K+\mathbf{G})^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(K_x + g_1\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(K_y + g_2\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(K_z + g_3\frac{2\pi}{a}\right)^2\right]. \quad (2)$$

为了方便起见，将 fcc 的第一布里渊区及某些倒格点的g_1、g_2、g_3示于图 7 — 3 中。

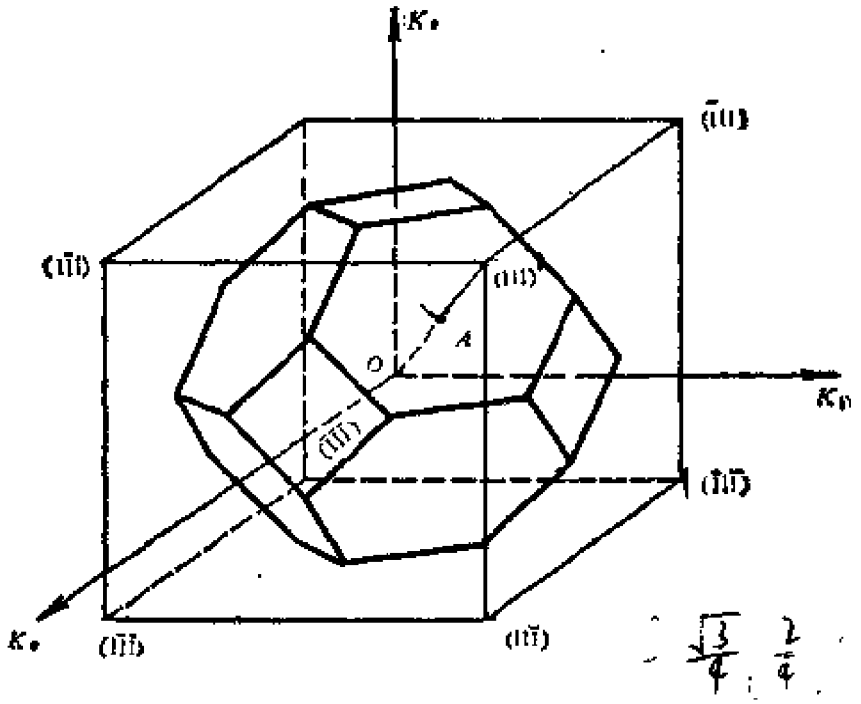


图 7 — 3　fcc晶格的第一布里渊区

为讨论布里渊区中的自由电子能带，在能量公式中标以下指标n，表示能带的编号。由公式（1）和（2）可得各能带。

第 1 带：当$G=0$（$g_1=g_2=g_3=0$）时，即 K 限在第一布里渊区内，为第一能带。

带底：$K_x=K_y=K_z=0$，$\varepsilon_1(000)=0$；

A点：$K_x=K_y=K_z=\frac{1}{2}\left(\frac{2\pi}{a}\right)$，

$$\varepsilon_A\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right)=\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 3\cdot\left(\frac{\pi}{a}\right)^2,$$

下面将以A点能量数值为能量单位。

〔111〕方向的能量：$K_x=K_y=K_z=k$，

$$\varepsilon_1(kkk)=\frac{\hbar^2}{2m}3\cdot k^2=\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 k^2\cdot(\varepsilon_A)$$

$$-\frac{\pi}{a}<k<\frac{\pi}{a}.$$

第 2 — 3 带：$G \neq 0$ 的，即为高于e_1的能带。

相应于 $G=\frac{2\pi}{a}(111)$，$\frac{2\pi}{a}(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1})$ 的，分别为第 2、3 带。

$K_x=K_y=K_z=0$ 时，$e_{2,3}(000)=\frac{\hbar^2}{2m}\cdot 3\cdot\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$

$=4\ (e_A)$；

〔111〕方向$K_x=K_y=K_z=k$时，

$$e_{2,3}(kkk)=\frac{\hbar^2}{2m}3\left(k\pm\frac{2\pi}{a}\right)^2=\left(\frac{a}{\pi}\right)^2\left(k\pm\frac{2\pi}{a}\right)^2(e_A)$$

第 4 ～ 6 带：相应于 $G=\frac{2\pi}{a}(\bar{1}\ 1\ 1)$，$\frac{2\pi}{a}(1\ \bar{1}\ 1)$，$\frac{2\pi}{a}(1\ 1\ \bar{1})$ 的为第 4、5、6 带。

$K_x=K_y=K_z=0$ 时，

$$e_{4,5,6}(000)=\frac{\hbar^2}{2m}3\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2=4\ (e_A)\ ;$$

〔1 1 1〕方向$K_x=K_y=K_z=k$时，

$$e_{4,5,6}(kkk)=\frac{\hbar^2}{2m}\left[2\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)^2+\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2\right]$$

$$=\frac{1}{3}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2\left[2\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)^2+\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2\right](e_A)\ .$$

同理可得第 7 ～15带，一并列于表7.1中。

表7.1 fcc晶格〔111〕方向的能带（能量以ε_A为单位）

能带 n	$G \cdot \frac{a}{2\pi}$	$\varepsilon_n(000)$	$\varepsilon_n(kkk)$
1	(0 0 0)	0	$\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 k^2$
2, 3	$(1\,1\,1),(\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1})$	4	$\left(\frac{a}{\pi}\right)^2\left(k \pm \frac{2\pi}{a}\right)^2$
4, 5, 6	$(\bar{1}\,1\,1),(1\,\bar{1}\,1),$ $(1\,1\,\bar{1})$	4	$\frac{1}{3}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2\left[2\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)^2 + \left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2\right]$
7, 8, 9	$(\bar{1}\,\bar{1}\,1),(1\,\bar{1}\,\bar{1}),$ $(\bar{1}\,1\,\bar{1})$	4	$\frac{1}{3}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2\left[\left(k+\frac{2\pi}{a}\right)^2 + 2\left(k-\frac{2\pi}{a}\right)^2\right]$
10, 11, 12	(200), (020), (002)	$\frac{16}{3}$	$\frac{1}{3}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2\left[\left(k+\frac{4\pi}{a}\right)^2 + 2k^2\right]$
13, 14, 15	$(\bar{2}00),(0\bar{2}0),$ $(00\bar{2})$	$\frac{16}{3}$	$\frac{1}{3}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2\left[\left(k-\frac{4\pi}{a}\right)^2 + 2k^2\right]$

把各能带绘成简约区图，如图 7 — 4 所示. 由图可见，能带边不一定都落在区中心. 自由电子理论得到的能量是连续的，不出现被禁带隔开的能带. 如果考虑了晶体势，则会出现禁带，能带的部分简并（能带交叉）将消除.

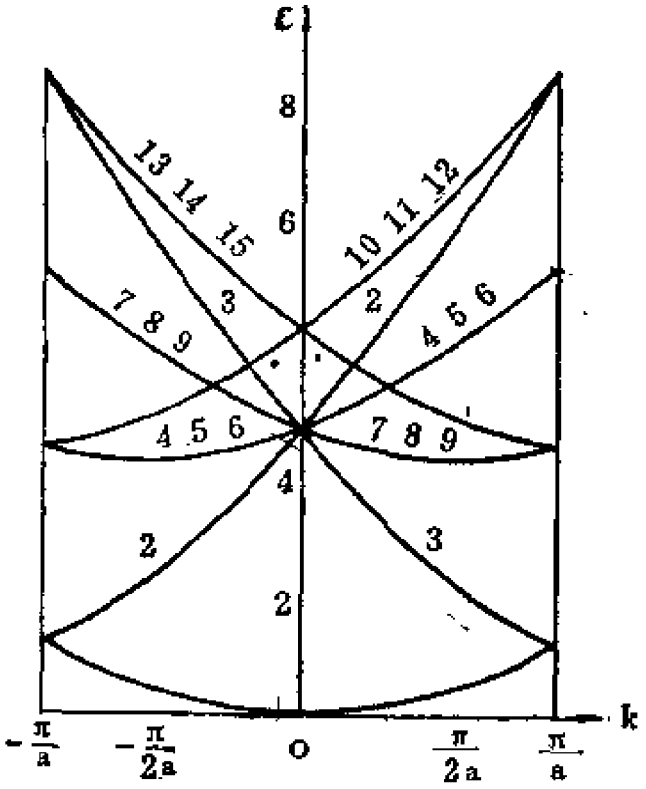


图 7 — 4　fcc晶格沿〔111〕方向的自由电子能带简约区图

3. Kronig—Penney模型.（a）对于δ函数势，且$P<<1$，求$K=0$时最低能带的能量。（b）对同一问题，求$K\approx\frac{\pi}{a}$处的带隙。

〈解〉

（a）利用周期的δ函数势，原文第192页中公式(20)可写成：

$$\frac{P}{ka}\sin Ka+\cos Ka=\cos Ka. \qquad (1)$$

进一步改写为

$$\sqrt{1+(P/Ka)^2}\left[\frac{P/Ka}{\sqrt{1+(P/Ka)^2}}\sin Ka\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sqrt{1+(P/Ka)^2}}\cos Ka\right]=\cos Ka. \qquad (2)$$

设 $\sin\theta = \frac{P/Ka}{\sqrt{1+(P/Ka)^2}}$，则有

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{1+(P/Ka)^2}},\quad \mathrm{tg}\theta = P/Ka。$$

当$K=0$时，$\cos Ka=1$，（2）式变为

$$\sec\theta[\sin\theta\cdot\sin Ka+\cos\theta\cdot\cos Ka]=1,$$

即

$$\cos(Ka-\theta)=\cos\theta。$$

由此解得：

$$Ka-\theta=\theta+2n\pi,\quad n=0、1、2\cdots\cdots; \qquad (3)$$

为求$K=0$时最低能带的数值，取$n=0$，

于是 $Ka=2\theta=2\mathrm{tg}^{-1}P/Ka$。

因为$P\ll1$，$\mathrm{tg}^{-1}P/Ka\approx P/Ka$，所以有 $K^2=2P/a^2$。（4）最后求得：

$$e=\frac{\hbar^2}{2m}K^2=\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{2P}{a^2}=\frac{\hbar^2P}{ma^2}。 \qquad (5)$$

（b）现在求$K=\frac{\pi}{a}$处的能隙宽度。

当 $K=\frac{\pi}{a}$时，$\cos Ka=-1$，因此（1）式变为

$$\frac{P}{Ka}\sin Ka+\cos Ka=-1。 \qquad (6)$$

与（a）的处理方法相同，可得：

$\cos(Ka-\theta)=-\cos\theta=\cos[(2n+1)\pi\pm\theta]$，$n=0、1、2\cdots$由此解得：

$$Ka-\theta=\pm\theta+(2n+1)\pi,$$

即 $$Ka=\begin{cases}2\theta+(2n+1)\pi,\\(2n+1)\pi。\end{cases}$$

因为$P \ll 1$，由（a）知 $\theta = \mathrm{tg}^{-1} P/a \approx P/Ka$，

所以有 $$Ka \approx \begin{cases} 2P/Ka + (2n+1)\pi, & (7) \\ (2n+1)\pi. & (8) \end{cases}$$

解（7）式，取正根后，由（7）、（8）式得：

$$Ka \approx \begin{cases} (2n+1)\pi + 2P/(2n+1)\pi, \\ (2n+1)\pi. \end{cases}$$

对于第一能带，取$n=0$，有

$$Ka = \begin{cases} \pi + 2P/\pi, \\ \pi. \end{cases} \quad (9)$$

因为 $K = \frac{\pi}{a}$时，$\cos Ka = -1$，相应于能量允许值的下边界，由原书192页，图5可见，对应于（9）式的两个能值之差即为能隙：

$$\Delta\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}\left[(\pi + 2P/\pi)^2 - \pi^2 \right]\frac{1}{a^2}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{a^2}\left(4P + \frac{4P^2}{\pi^2}\right)$$

$$\approx \frac{\hbar^2 \cdot 2P}{ma^2}. \quad (10)$$

4．金刚石结构中的势能。（a）对于金刚石结构，证明当$G = 2A$时，电子受到的晶体势的傅立叶分量U_G为零，A为惯用立方原胞的倒格子基矢。（b）证明用通常的一级近似求解周期性晶格的波动方程时，在垂直于矢量A的端点的区界面上的能隙为零，而在下一级近似中此能隙才不为零。

〈解〉

（a）金刚石晶体的原胞中含两个碳原子，其坐标分别为

(0 0 0)，$(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4})$。

电子在其中的势能可表为：

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{2} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)，\mathbf{R}_l 为原子的位置矢量.$$

由于晶体结构的周期性，$V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$ 可展成傅氏级数

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{2} \sum_{G} U_G e^{iG \cdot (r - R_l)}$$

$$= \sum_{G} U_G \left(\sum_{l=1}^{2} e^{-iG \cdot R_l} \right) e^{iG \cdot r}, \qquad (1)$$

其中 $\mathbf{R}_1 = 0\hat{x} + 0\hat{y} + 0\hat{z}$，

$$\mathbf{R}_2 = \frac{1}{4} a\hat{x} + \frac{1}{4} a\hat{y} + \frac{1}{4} a\hat{z}.$$

对 $\mathbf{G} = 2\mathbf{A} = \frac{4\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$一项（$\hat{x}$，$\hat{y}$，$\hat{z}$为直角坐标轴的单位矢量），有

$$\sum_{l=1}^{2} e^{-iG \cdot R_l} = \sum_{l=1}^{2} e^{-i2A \cdot R_l}$$

$$= 1 + e^{-i\left[\frac{4\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z}) \cdot \frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})\right]}$$

$$= 1 + e^{-i[\pi]} = 0.$$

所以对应于$\mathbf{G} = 2\mathbf{A}$项的傅氏系数为零。

（h）体系的哈密顿算符为：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_{G}{}' U_G e^{iG \cdot r}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_0 + \sum_{G}{}' U_G e^{i \cdot G \cdot r},$$

其中U_0为$\mathbf{G} = 0$的势能，$\sum'$表示对$\mathbf{G} \neq 0$的项求和.

适当选取势能零点，使$U_0 = 0$，则

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \sum_G{}' U_G e^{iG\cdot r} = \hat{H}_0 + \sum_G{}' U_G e^{iG\cdot r}, \quad (1)$$

$\hat{H}_0$对应于自由电子的情况，其本征函数及本征值为：

$$\varphi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iK\cdot r}, \quad (K_x, K_y, K_z = \frac{2n\pi}{L}, n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots);$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} K^2.$$

$\sum_G{}' U_G e^{iG\cdot r} = \hat{H}'$为微扰项。

如图 7 — 5 所示，K，K'在零级近似中，具有相同的能量本征值，因此，必须用双简并情况的微扰论。

设 $\varphi_{m1}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iK\cdot r}$,

$$\varphi_{m2}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iK'\cdot r},$$

则 $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}K^2 = \frac{\hbar^2}{2m}K'^2 = \varepsilon_m$。

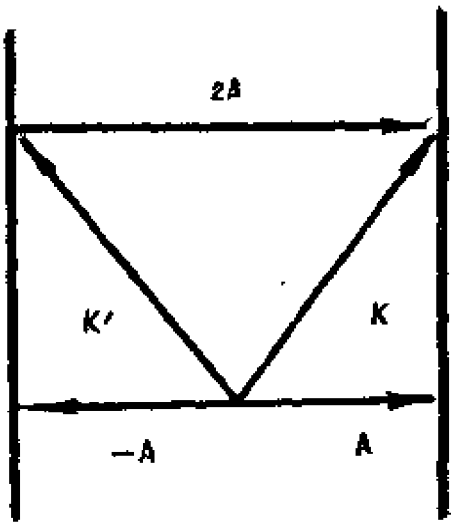


图 7 — 5　K和K′波矢量

取 $\Psi_0(r) = A\varphi_{m1} + B\varphi_{m2}$，作为$\hat{H}_0$的零级本征函数，以$E_1$表示一级能量修正值，则根据微扰理论，由零级本征函数通过

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}')\Psi_0 = (E_0 + E_1)\Psi_0 \quad (2)$$

可以求得一级能量修正。其中$E_0 = \varepsilon_m$。

将Ψ_0代入（2）式，并用φ^*_{m1}，φ^*_{m2}与（2）式取内积后，得：

$$\left.\begin{aligned} A[\langle m_1|\hat{H}'|m_1\rangle - E_1] + B\langle m_1|\hat{H}'|m_2\rangle = 0, \\ A\langle m_2|\hat{H}'|m_1\rangle + B[\langle m_2|\hat{H}|m_2\rangle - E_1] = 0, \end{aligned}\right\}$$

其中$\langle m_1|\hat{H}'|m_1\rangle = \int \varphi^*_{m1}|\hat{H}'|\varphi_{m1}d\tau$。 (3)

A、B欲有非零解，必须有：

$$\begin{vmatrix} \langle m_1|\hat{H}'|m_1\rangle - E_1, & \langle m_1|\hat{H}'|m_2\rangle \\ \langle m_2|\hat{H}'|m_1\rangle, & \langle m^2|\hat{H}'|m_2\rangle - E_1 \end{vmatrix} = 0. \quad (4)$$

矩阵元 $\langle m_1|\hat{H}'|m_1\rangle = \int \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-iK\cdot r} \sum_G{}' U_G e^{iG\cdot r} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iK\cdot r} d\tau$

$$= \frac{1}{V} \sum_G{}' U_G \int e^{iG\cdot r} d\tau$$

$$= 0, \quad (\text{因为} G \neq 0 \text{时,}) \int e^{iG\cdot r} d\tau = 0),$$

同理有$\langle m_2|\hat{H}'|m_2 = 0$. 而矩阵元

$$\langle m_2|\hat{H}'|m_1\rangle^* = \langle m_1|\hat{H}'|m_2\rangle$$

$$= \int \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-iK\cdot r} \sum_G{}' U_G e^{iG\cdot r} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{iK'\cdot r} d\tau$$

$$= \frac{1}{V} \sum_G{}' U_G \int e^{i[G+(K'-K)]\cdot r} d\tau$$

$$= \frac{1}{V} \sum_G{}' U_G \delta[\mathbf{G} - (\mathbf{K} - \mathbf{K}')]$$

$$= \frac{1}{V} U_{(K-K')} = \frac{1}{V} U_{2A}.$$

由（a）知 $U_{2A} = 0$，所以久期方程（4）变成：

$$\begin{vmatrix} -E_1 & 0 \\ 0 & -E_1 \end{vmatrix} = 0.$$

所以，$\pm E_1 = 0$，也就是在一级微扰下，金刚石结构中，垂直于A的端点的区界面上的能隙为零。

我们必须进一步计算二级微扰修正。

设本征函数的一级修正为：$\Psi_1 = \Sigma a_n^{(1)} \varphi_n$，

代入一级微扰方程式

$$(\hat{H}_0 - e_m)\ \Psi_1 = (E_1 - \hat{H}')\ \Psi_0 \quad (5)$$

中。然后用φ_e $(e\neq m_1, m_2)$左乘（5）式，作内积，可求得：

$$a_e^{(1)}=\frac{1}{\varepsilon_m-\varepsilon_e}[A<1|\hat{H}'|m>+B<1|\hat{H}'|m_2>]. \quad (6)$$

又令$\Psi_2=\sum_n a_n^{(2)}\varphi_n$，表示本征函数的二级修正，代入二级微扰方程式

$$(\hat{H}_0-\varepsilon_m)\Psi_2=(E_1-\hat{H}')\Psi_1+E_2\Psi_0, \quad (7)$$

然后分别用$\varphi_{m_1}^*$和$\varphi_{m_2}^*$左乘（7）式，作内积，可得

$$\left.\begin{aligned}\sum_n <m_1|\hat{H}'|n>a_n^{(1)}-E_2A=0,\\ \sum_n <m_2|\hat{H}'|n>a_n^{(1)}-E_2B=0.\end{aligned}\right\} \quad (8)$$

将$a_n^{(1)}$代入（8）式，得：

$$\left.\begin{aligned}&\left(\sum_n \frac{|<m_1|\hat{H}'|n>|^2}{\varepsilon_m-\varepsilon_n}-E_2\right)A+\\ &+\sum_n{}' \frac{<m_1|\hat{H}'|n><n|\hat{H}'|m_2>}{\varepsilon_m-\varepsilon_n}B=0,\\ &\sum_n{}' \frac{<m_2|\hat{H}'|n><n|\hat{H}'|m_1>}{\varepsilon_m-\varepsilon_n}A+\\ &\left(\sum_n{}' \frac{|<m_2|\hat{H}'|n>|^2}{\varepsilon_m-\varepsilon_n}-E_2\right)B=0.\end{aligned}\right\} \quad (9)$$

Σ'中的"$'$"表示求和时，$n\neq m$。若欲使A、B有异于零的解，则系数行列式必须为零。

设 $$D_1=\sum_n{}' \frac{|<m_1|\hat{H}'|n>|^2}{\varepsilon_m-\varepsilon_n},$$

$$D_2=\sum_n{}' \frac{|<m_2|\hat{H}'|n>|^2}{\varepsilon_m-\varepsilon_n},$$

$$C_1 = \sum_n{}' \frac{\langle m_1 | \hat{H}' | n \rangle \langle n | \hat{H}' | m_2 \rangle}{\varepsilon_m - \varepsilon_n},$$

$$C_2 = \sum_n{}' \frac{\langle m_2 | \hat{H}' | n \rangle \langle n | \hat{H}' | m_1 \rangle}{\varepsilon_m - \varepsilon_n},$$

则系数行列式为

$$\begin{vmatrix} D_1 - E_2, & C_1 \\ C_2, & D_2 - E_2 \end{vmatrix} = 0,$$

由此解得：

$$E_2 = \frac{D_1 + D_2}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}(D_1 + D_2)^2 - (D_1 D_2 - C_1 C_2)}, \quad (10)$$

若 $\left.\begin{matrix} D_1 = D_2 \\ C_1 = C_2 = 0 \end{matrix}\right\}$ 时， (11)

E_2为重根，不出现能隙．只要（11）式中两个条件不同时满足，E_2就不是重根，也就存在能隙．现在我们以 C_1 为例，进行分析。

$$C_1 = \sum_n{}' \frac{\langle m_1 | \hat{H}' | n \rangle \langle n | \hat{H}' | m_2 \rangle}{\varepsilon_m - \varepsilon_n}$$

$$= \sum_n{}' \frac{1}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \left\{ \left[\int e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \cdot \sum_G{}' U_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \cdot e^{i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}} d\tau \right] \right.$$

$$\left. \left[\int e^{-i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}} \sum_G{}' U_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{r}} d\tau \right] \right\}$$

$$= \sum_n{}' \sum_G{}' \left[\frac{1}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \delta(\mathbf{K}_n + \mathbf{G} - \mathbf{K}) \cdot \delta(\mathbf{G} + \mathbf{K}' - \mathbf{K}_n) \right]. \quad (12)$$

由此可见，只有当

$$\begin{cases} \mathbf{K}_n + \mathbf{G} - \mathbf{K} = 0, \\ \mathbf{K}' + \mathbf{G} - \mathbf{K}_n = 0, \end{cases} \quad (13)$$

同时满足时，C_1才不为零．从（13）式可以解得

$$G=\frac{1}{2}(K-K')=\frac{1}{2}\cdot 2A=A.$$

也就是说，当$G=A$时，$C_1\neq 0$。

同理，对于C_2，可以求得，当$G=-A$时，$C_2\neq 0$。

于是，当$G=\pm A$时，C_1，$C_2\neq 0$，由(10)和（11）知，E_2不出现重根，从而有能隙产生.

由上述的证明中可以看出，对于金刚石结构，在一级近似下，在垂直于A端点处的区界面上的能隙为零，但是考虑二级近似后，能隙就不为零。

5. 能隙中的复数波矢. 用导出第七章方程（36）的双项平面波近似，求第一布里渊区边界上的能隙中波矢虚部的表达式。给出在能隙中心处$Im(k)$的结果。对于小的$Im(k)$，结果为

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[Im(k)\right]^2\approx 2mU^2/\hbar^2G^2.$$

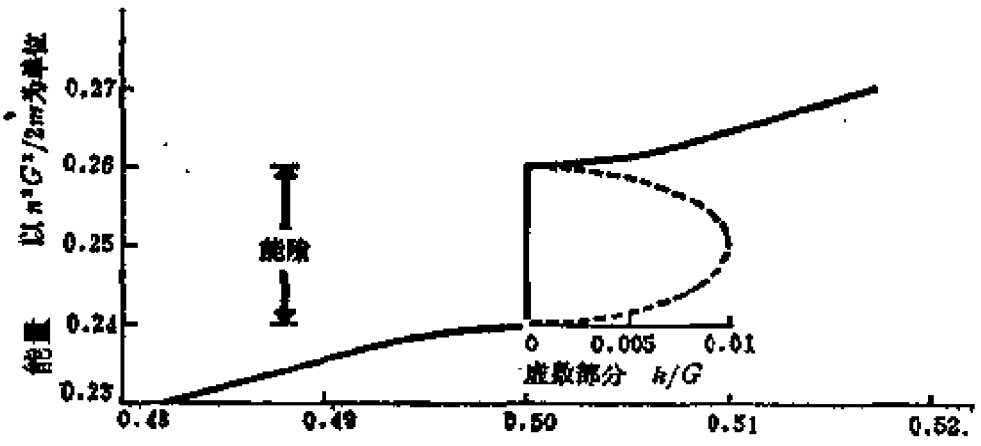


图 7—6　能隙中复数波矢的波动方程解（图中的虚部曲线是在 $V=0.01\hbar^2G^2/2m$的双项平面波近似下作出的）

〈解〉

根据近自由电子的双项平面波近似，波函数可近似写为

$$\Psi(x)=C(k)e^{ikx}+C(k-G)e^{i(k-G)x},$$

C满足以下久期方程：

$$\left.\begin{aligned}&[E_0(k)-E]C(k)+UC(k-G)=0,\\&[E_0(k-G)-E]C(k-G)+UC(k)=0,\end{aligned}\right\}\qquad(1)$$

其中

$$\left.\begin{aligned}E_0(k)&=\frac{\hbar^2k^2}{2m},\\E_0(k-G)&=\frac{\hbar^2}{2m}(k-G)^2,\end{aligned}\right\}\qquad(2)$$

要求$C(k)$的非零解，必须（1）的系数行列式为零：

$$\begin{vmatrix}E_0(k)-E & U\\ U & E_0(k-G)-E\end{vmatrix}=0,\qquad(3)$$

即 $$E^2-E[E_0(k-G)+E_0(k)]+E_0(k-G)E_0(k)-U^2=0.\qquad(4)$$

在布里渊区边界上，$k=\frac{1}{2}G$，解得E有两个根：

$$E_\pm=\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{2}G)^2\pm U.\qquad(5)$$

在E_+和E_-之间出现能隙，

$$\Delta E=E_+-E_-=2U.\qquad(6)$$

能量落在能隙中时，相应的波矢k为复数，这种波受阻尼不能在晶体中传播。为了求出复数波矢的表达式，我们考虑能量处在能隙中央的情形，即

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{2}G)^2,\qquad(7)$$

并令 $$k=\frac{1}{2}G+\delta,\quad \delta\ll\frac{1}{2}G.\qquad(8)$$

将（7）和（8）代入（4），得

$$\left(\frac{2m}{\hbar^2}U\right)^2=\delta^4-4\delta^2\left(\frac{1}{2}G\right)^2\approx-4\delta^2\left(\frac{1}{2}G\right)^2,$$

所以 $$\delta = \pm i\left(\frac{2mU}{\hbar^2 G}\cdot\right), \tag{9}$$

$$k = \frac{1}{2}G \pm i\left(\frac{2mU}{\hbar^2 G}\right), \tag{10}$$

k的虚数部分为

$$Im(k) \approx \left(\frac{2mU}{\hbar^2 G}\right), \tag{11}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}[Im(k)]^2 \approx \frac{2m}{\hbar^2}\ \frac{U^2}{G^2}. \tag{12}$$

虚部的变化曲线，如图 7 — 6 所示。

在无限大的无边界的晶体中，波矢必须是实的，否则振幅将无限制地增加。但是在表面上或在结区中，可以存在复数波矢量的解。

从量子理论知道，能量禁区中，波动方程不存在 Bloch 函数形式的解；在禁区中波函数在空间上是阻尼的，波矢量取复数形式。由于电子不易进入禁区的状态，使得我们不能很好理解禁区的本质。以后发现，在极薄（$<100A$）的结构中，可以有足够的电子以隧道效应穿过禁区。这样可以通过测量隧道电流和样品的厚度以及外加电压的关系来确定在绝缘体、半导体的禁带中，电子波矢量的虚部和能量的依赖关系，以便深入认识固体中的电子性质。图 7 -- 6 所绘出的曲线形式，对在强电场作用下，由一个带到另一个带的*Zener*隧道理论是重要的。

6．正方晶格．设有二维正方晶格，晶体势为

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

用基本方程，近似求出布里渊区角 $\left(\frac{\pi}{a}\ \frac{\pi}{a}\right)$ 处的能隙。

〈解〉

以 $\hat{i}$、$\hat{j}$ 表示位置矢量的单位矢量，以 $\hat{b}_1$、$\hat{b}_2$ 表示倒易矢量的单位矢量，则有，

$$r = x\hat{i} + y\hat{j},$$

$$G = G_1\hat{b}_1 + G_2\hat{b}_2$$

$$= \frac{2\pi}{a}(g_1\hat{b}_1 + g_2\hat{b}_2),\ g_1 g_2 \text{为整数}.$$

晶体势能

$$U(x,y) = -4U\cos\frac{2\pi}{a}x\cdot\cos\frac{2\pi}{a}y \qquad (1)$$

可改写成

$$U(r) = -U(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x})(e^{i\frac{2\pi}{a}y} + e^{-i\frac{2\pi}{a}y})$$

$$= -U[e^{i\frac{2\pi}{a}(x+y)} + e^{i\frac{2\pi}{a}(x-y)} + e^{-i\frac{2\pi}{a}(x-y)} + e^{-i\frac{2\pi}{a}(x+y)}]$$

$$= U_{G(11)}e^{iG(11)\cdot r} + U_{G(1\bar{1})}e^{iG(1\bar{1})\cdot r} + U_{G(\bar{1}1)}e^{iG(\bar{1}1)\cdot r} + U_{G(\bar{1}\bar{1})}e^{iG(\bar{1}\bar{1})\cdot r}$$

$$= \sum_{G(11)} U_{G(11)}e^{iG(11)\cdot r} \qquad (2)$$

其中 $U_{G(11)} = -U$，而其它的势能傅氏系数

$U_{G(10)} = U_{G(20)} = \cdots = 0$。

这样，基本方程

$$(\lambda_K - \varepsilon)C(K) + \sum_G U_G C(K-G) = 0 \qquad (3)$$

变成

$$(\lambda_K - \varepsilon)C(K) + U_G(11)C(K-G(11)) + U_{G(\bar{1}\bar{1})}C(K-G_{(\bar{1}1)}) + U_{G(1\bar{1})}C(K-G_{(1\bar{1})}) + U_{G(\bar{1}1)}C(K-G_{(\bar{1}1)}) = 0. \qquad (4)$$

求布里渊区角顶 $\left(\frac{\pi}{a}\ \ \frac{\pi}{a}\right)$，即$\mathbf{K}=\mathbf{G}\left(\frac{1}{2}\ \ \frac{1}{2}\right)=\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)$

处的能隙，可利用双项平面波近似

$$\Psi=C(\mathbf{K})e^{i\mathbf{K}\cdot r}+C(\mathbf{K}-\mathbf{G})e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{G})\cdot r} \qquad (5)$$

来处理。

当 $\mathbf{K}=\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)$，$-\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)$时，依次有

$$\mathbf{K}-\mathbf{G}(11)=-\frac{1}{2}\mathbf{G}(11),$$

$$\mathbf{K}-\mathbf{G}(\bar{1}\bar{1})=+\frac{1}{2}\mathbf{G}(11),$$

而其它的$|\mathbf{K}-\mathbf{G}(1\bar{1})|$，$|\mathbf{K}-\mathbf{G}(1\bar{1})|>|\mathbf{G}(11)|$，所以在双项平面波近似下，（4）式中只有

$$C\left(\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)\right),\ C(\mathbf{K}-\mathbf{G}(11))=C\left(-\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)\right);$$

$$C\left(-\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)\right),C(\mathbf{K}-\mathbf{G}(\bar{1}\bar{1}))=C\left(+\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)\right)$$

项才有重要贡献，$C(\mathbf{K}-\mathbf{G}(\bar{1}\bar{1}))$，$C(\mathbf{K}-\mathbf{G}(\bar{1}1))$等项可以忽略。于是（4）式变成

$$\left.\begin{aligned}(\lambda_{1/2G(11)}-e)C\left(+\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)\right)-UC\left(-\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)\right)=0,\\(\lambda_{-1/2G(11)}-e)C\left(-\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)\right)-UC\left(+\frac{1}{2}\mathbf{G}(11)\right)=0.\end{aligned}\right\} \qquad (6)$$

欲使C有非零解，要求系数行列式为零，即

$$\begin{vmatrix}\lambda_{1/2G(11)}-e & -U\\ -U & \lambda_{-1/2G(11)}-e\end{vmatrix}=0 \qquad (7)$$

因为 $\lambda_{1/2G(11)}=\lambda_{-1/2G(11)}=\lambda=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{2}G(11)\right]^2$

$$=\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2},$$

所以，由（7）式有

$$(\lambda-\varepsilon)^2-U^2=0.$$

解得 $\varepsilon=\lambda\pm U$

$$=\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\pm U.$$

在 $\left(\frac{\pi}{a}\ \frac{\pi}{a}\right)$ 处的能隙为

$$\Delta\varepsilon=\varepsilon_+-\varepsilon_-=2U. \qquad (8)$$

第八章　半导体晶体

1．杂质轨道． 锑化铟具有$E_g=0.23$ev；介电常数$\in=18$；电子有效质量$m_e=0.015m$．试计算：（a）施主的电离能；（b）基态轨道的半径；（c）施主浓度达到何极小值时，相邻杂质原子的轨道之间将产生可以觉察得到的重叠效应？这种重叠形成杂质能带，含有许多允许导电的能级．可设想，导电是由电子从一个杂质位置跳到邻近电离了的杂质位置上的跳跃机构实现的．

〈解〉

（a）利用类氢原子模型，锑化铟中施主杂质的电离能为

$$E_d=\frac{e^4m_e}{2\varepsilon^2\hbar^2}\ (\mathrm{CGS})\ .\qquad(1)$$

$m_e=0.015m=0.137\times10^{-28}$g，　$\varepsilon=18$，　$e=4.80\times10^{-10}$esu，$\hbar=1.055\times10^{-27}$ergs，代入（1）式得：

$$E_d=1.01\times10^{-15}\mathrm{erg}=6.28\times10^{-4}\mathrm{ev}.$$

（b）相应地，施主杂质的玻尔半径为

$$a_d=\frac{\varepsilon\hbar^2}{mne^2}(\mathrm{CGs})=636\times10^{-8}\mathrm{cm}.\qquad(2)$$

（c）InSb的结构为fcc，晶格常数$a=6.479$A，晶体样品的总体积为$V=Na^3=2.72\times10^{-22}N\mathrm{cm}^3$．由（2）式知，一个施主杂质所波及的体积为

$$\frac{4\pi}{3}a_d^3=10.77\times10^{-16}\mathrm{cm}^3.$$

因此，欲使杂质之间不发生重叠的临界杂质数为 $V/\frac{4\pi}{3}a_d^3=2.526\times10^{-7}N$。每个原胞含有 4 个原子，所以使杂质间不发生重叠的最小成分为

$$C_{min}=2.526\times10^{-7}N/4N=6.32\times10^{-6}at.\%.$$

2．施主的电离。在特定的半导体中含有$10^{13}cm^{-3}$个施主，具有1mev的电离能，有效质量为$0.01m$。（a）估计 4 K时传导电子的浓度。（b）霍尔系数的值等于多少？假定没有受主原子存在，并且$E_g\gg k_BT$。

〈解〉

（a）如果半导体中没有受主原子存在，在$k_BT<<E_g$的情况下，施主原子的热离化平衡电子浓度为：

$$n\approx(n_cN_d)^{1/2}e^{-E_d/k_BT},\qquad(1)$$

其中

$$n_c=2(m_ek_BT/2\pi\hbar^2)^{3/2}.\qquad(2)$$

把$E_d=1mev=10^{-3}ev$，$T=4K$，$k_B=8.617\times10^{-5}ev\cdot K^{-1}=1.381\times10^{-16}erg\cdot K^{-1}$，$m_e=0.01m=9.11\times10^{-30}g$，$\hbar=1.055\times10^{-27}erg\cdot s$代入（2）和（1）式，可得：

$$n_c=3.859\times10^{13}cm^{-3},$$

$$n=0.108\times10^{13}cm^{-3}.\qquad(3)$$

由此可见，在 4 K下，平均每十个施主原子可以提供一个传导电子。

（b）相应的霍尔系数为

$$R_H=-\frac{1}{nec}(CGS)=-6.43\times10^{14}\ (CGS单位).$$

3．含有两类载流子的霍尔效应。设电子与空穴的浓度为n、

p；弛豫时间为τ_e、τ_h，质量为m_e，m_h，证明在漂移速度近似下霍尔系数为

$$\text{(CGS)} \qquad R_H = \frac{1}{ec} \frac{p - nb^2}{(p + nb)^2},$$

其中$b = \mu_e/\mu_h$是迁移率之比。在推导过程中略去B^2量级的项．去掉c就变为SI单位制。

〈解〉

设空穴和电子的迁移率分别为μ_h、μ_e，且

$$\mu_h = \frac{e\tau_h}{m_h c}, \qquad \mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e c}.$$

若在样品的x方向施加纵向电场E_x，在Z方向施加磁场B_z，则由原书 174 页（42）式，两种载流子在y方向引起的电场为

$$\text{(CGS)} \qquad (E_y)_h = \frac{e\tau_h B_z}{m_h c} E_x = \mu_h B_z E_x / c, \qquad (1)$$

$$(E_y)_h = -\frac{e\tau_e B_z}{m_e c} E_x = -\mu_e B_z E_x / c. \qquad (2)$$

因此，在稳定的霍尔电场尚未建立起来的时刻，在样品y方向引起的电流分别为：

$$(j_y)_h = \sigma_h (E_y)_h = -(pe\mu_h)(\mu_h B_z E_x / c) = -\frac{e}{c} p\mu_h^2 B_z E_x, \qquad (3)$$

$$(j_y)_e = \sigma_e (E_y)_e = (ne\mu_e)(\mu_e B_z E_x / c) = \frac{e}{c} n\mu_e^2 B_z E_x. \qquad (4)$$

于是y方向总的电流为：

$$j_y = (j_y)_h + (j_y)e = \frac{e}{c}(n\mu_e^2 - p\mu_h^2) B_z E_x, \qquad (5)$$

在稳定平衡的情况下，横向霍尔电场E_y将阻止载流子沿y方向的偏转，载流子不受y方向的力的作用，从而使y方向的电流为零，

所以E_y应满足：

$$\sigma E_y + j_y = (pe\mu_h + ne\mu_e)E_y + \frac{e}{c}(n\mu_e^2 - p\mu_h^2)B_zE_x = 0. \quad (6)$$

由此解得霍尔电场

$$E_y = \frac{1}{c}\frac{p\mu_h^2 - n\mu_e^2}{p\mu_h + n\mu_e}B_zE_x. \quad (7)$$

又x方向的电流为

$$j_x = (pe\mu_h + ne\mu_e)E_x. \quad (8)$$

将（8）式的E_x代入（7）式得：

$$E_y = \frac{1}{ec}\left[\frac{p\mu_h^2 - n\mu_e^2}{(p\mu_h + n\mu_e)^2}\right]B_zj_x$$

$$= \frac{1}{ec}\left[\frac{p - nb^2}{(p + nb)^2}\right]B_zj_x, \quad (9)$$

其中$b = \mu_e/\mu_h$.

由（9）式可得霍尔系数：

$$R_H = \frac{E_y}{j_xB_z} = \frac{1}{ec}\frac{p - nb^2}{(p + nb)^2}. \quad (10)$$

4．球体等能面的回旋共振。设有等能面

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2\left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \frac{k_z^2}{2m_l}\right),$$

其中m_t是横向质量参数，m_l为纵向质量参数。ε（k）为常数的表面将是旋转球体。利用运动方程$\hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{c}\mathbf{V}\times\mathbf{B}$，其中$\mathbf{V} = \hbar^{-1}\Delta_k\varepsilon$。证明当静磁场B在$xy$平面上时，$\omega_c = eB/(m_lm_t)^{1/2}c$。当$\theta = \pi/2$时，此结果与原书（24）式一致.（去掉c就得到SI单位制的公式。）

〈解〉

具有

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 \left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_t} + \frac{k_z^2}{2m_l} \right) \qquad (1)$$

形式的等能面，是一长轴位于k_z方向的旋转椭球体．电子在磁场中的运动方程为：

$$\hbar \frac{dK}{dt} = -\frac{e}{c} \mathbf{V} \times \mathbf{B}, \qquad (2)$$

其中$\mathbf{V} = \hbar^{-1} \nabla_k \varepsilon(K) \simeq \hbar^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial k_x} \hat{i}_0 + \frac{\partial}{\partial k_y} \hat{j}_0 + \frac{\partial}{\partial k_z} \hat{k}_0 \right) \varepsilon(\mathbf{K})$.

$\hat{i}_0$、$\hat{j}_0$、$\hat{k}_0$为k空间中的单位矢量．电子的速度可改写成

$$U = \hbar \left(\frac{k_x}{m_t} \hat{i}_0 + \frac{k_y}{m_t} \hat{j}_0 + \frac{k_z}{m_l} \hat{k}_0 \right. \qquad (3)$$

的形式．如图 8 — 1 所示，外加磁场B位于与k_z成α角的x—y平面内，则磁场为

$$\mathbf{B} = B\cos\alpha \, \hat{i}_0 + B\sin\alpha \, \hat{j}_0, \qquad (4)$$

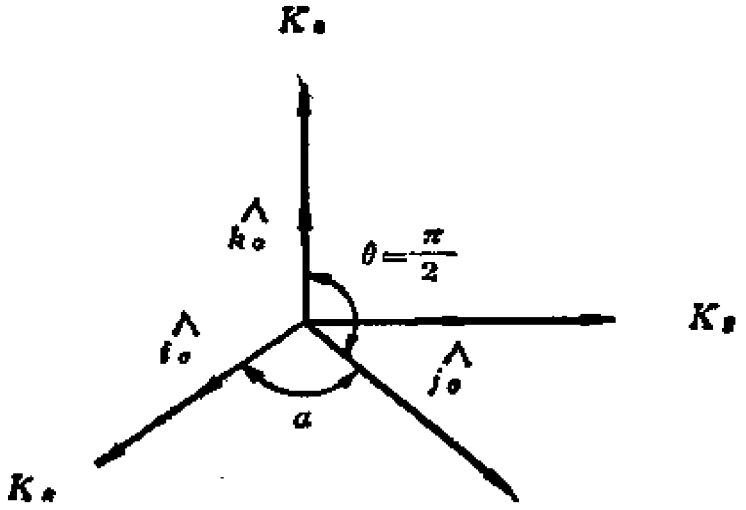


图 8 — 1　静磁场在 k 空间中的方位

于是（2）式变成

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{c}\begin{vmatrix} \hat{i}_0 & \hat{j}_0 & \hat{k}_0 \\ \frac{k_x}{m_t} & \frac{k_y}{m_t} & \frac{k_z}{m_t} \\ B\cos\alpha & B\sin\alpha & 0 \end{vmatrix},$$

即

$$\left.\begin{aligned} \frac{dk_x}{dt} &= \omega_t k_z \sin\alpha, \\ \frac{dk_y}{dt} &= -\omega_t k_z \cos\alpha, \\ \frac{dk_z}{dt} &= \omega_t (k_y\cos\alpha - k_x\sin\alpha \end{aligned}\right\} \qquad (5)$$

其中 $\omega_t = eB/m_t c$，$\omega_t = eB/m_t c$。

若（5）式有如下的形式解，

$$\left.\begin{aligned} k_x &= Ae^{i\omega t}, \\ k_y &= Ee^{i\omega t}, \\ k_z &= Fe^{i\omega t}, \end{aligned}\right\} \qquad (6)$$

代入（5）式中可得：

$$\left.\begin{aligned} i\omega A - F\omega_t\sin\alpha &= 0, \\ i\omega E + F\omega_t\cos\alpha &= 0, \\ i\omega F + \omega_t A\sin\alpha - E\omega_t\cos\alpha &= 0. \end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

欲使A、E、F有异于零的解，必

$$\begin{vmatrix} i\omega & 0 & -\omega_t\sin\alpha \\ 0 & i\omega & \omega_t\cos\alpha \\ \omega_t\sin\alpha & -\omega_t\cos\alpha & i\omega \end{vmatrix} = 0,$$

即

$$i\omega[(i\omega)^2 + \omega_t\omega_t\cos^2\alpha] - \omega_t\sin\alpha(-i\omega\omega_t\sin\alpha) = 0 \qquad (8)$$

由此解得：

$$\omega^2 = \omega_t\omega_l = \frac{eB}{m_t c} \cdot \frac{eB}{m_l c},$$

$$\omega = \frac{eB}{c(m_t m_l)^{\frac{1}{2}}}. \tag{9}$$

于是回旋共振的有效质量为

$$\frac{1}{m_c} = (m_t m_l)^{-\frac{1}{2}}. \tag{10}$$

同理，如果外磁场方向和旋转椭球长轴成 θ 角，则可求得：

$$\left(\frac{1}{m_c}\right) = \left(\frac{\cos^2\theta}{m_t^2} + \frac{\sin^2\theta}{m_t m_l}\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{11}$$

即得原书225页的（24）式，当$\theta = \frac{\pi}{2}$时，（11）式变成（10）式，结果相同。

5．施主电离。设有施主浓度为N_D的半导体，令$k_BT \ll E_D$，E_D为施主离化能。（a）导出(43)式。（b）求费米能级的位置。

〈解〉

设N_D为施主原子浓度，N_D^0为未热电离的施主浓度，N_D^+为电离了的施主浓度；E_2为施主原子的基态能量(以价带顶为原点)。施主原子的离化能量$E_D = E_g - E_2$（E_g为导带底能量），由费米—狄喇克分布知：

$$N_D^0 = \frac{N_D}{1 + e^{(E_2 - E_F)/k_BT}},$$

由样品的电中性条件$N_D = N_D^0 + N_D^+$，有

$$N_D^+ = N_D - N_D^0 = \frac{N_D}{1 + e^{-(E_2 - E_F)/k_BT}}. \tag{1}$$

由于$k_BT \ll E_D$，所以是属子弱电离的情况，即$N_D^+ \ll N_D$，因此，应有$(E_2 - E_F)/k_BT \gg 1$。于是（1）式可近似写成

$$N_D^+ \approx N_D e^{(E_2-E_F)/k_BT}. \qquad (2)$$

一个电离了的施主原子可以提供一个传导电子。因此，N_D^+ 可以提供浓度为 n 的传导电子。在弱电离情况下，传导电子在半导体导带中服从经典分布，n又可写成：

$$n = n_0 e^{(E_F-E_g)/k_BT}, \qquad (3)$$

其中 $n_0 = 2(m_e k_B T/2\pi\hbar^2)^{3/2}$。因此，（2）式和（3）式应相等，即

$$n = N_D e^{(E_2-E_F)/k_BT} = n_0 e^{(E_F-E_g)/k_BT}. \qquad (4)$$

两边取对数，得到

$$\ln N_D + \frac{(E_2-E_F)}{k_BT} = \ln n_0 + \frac{(E_F-E_g)}{k_BT},$$

由此可求得费米能

$$E_F = \frac{1}{2}k_BT\ln n\,\frac{N_D}{n_0} + \frac{E_2+E_g}{2}. \qquad (5)$$

把（5）式代入（4）式，可得弱电离时的电子浓度

$$\begin{aligned} n &\approx N_D e^{E_2/k_BT} e^{-E_F/k_BT} \\ &\approx (n_0 N_D)^{1/2} e^{(E_2-E_g)/2k_BT} \\ &\approx (n_0 N_D)^{1/2} e^{-E_D/2k_BT}. \end{aligned} \qquad (6)$$

此即原书235页（43）式。

6．含有两类载流子的磁阻。在第六章第九题中证明了将漂移速度近似用于载流子在电场与磁场中的运动时没有引起横向磁阻。当有两类载流子时结果就不同了。设有一块半导体，有效质量为m_e、弛豫时间为 τ_e的电子浓度为n，有效质量为 m_h、弛豫时间为τ_h的空穴浓度为p。在非常强的磁场下，$\omega_c\tau \gg 1$。（a）证明在此范围内，$\sigma_{yx} = (n-p)ec/B$。（b）证明霍尔电场为

$$E_y = -(n-p)\left(\frac{n}{Q_e}+\frac{p}{Q_h}\right)^{-1}E_x,$$

其中$Q=\omega_c\tau$.（c）证明x方向的有效电导率为

$$\sigma_{eff}=\frac{ec}{B}\left[\left(\frac{n}{Q_e}+\frac{p}{Q_h}\right)+(n-p)^2\left(\frac{n}{Q_e}+\frac{p}{Q_h}\right)^{-1}\right].$$

〈解〉

（a）由原书第六章(39)式，电子和空穴的运动方程分别为

$$m_e\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau_e}\right)v_e=-e\left(\mathbf{E}+\frac{1}{c}v_e\times\mathbf{B}\right),\qquad(1)$$

$$m_h\left(\frac{d}{dt}+\frac{1}{\tau_l}\right)v_h=e\left(\mathbf{E}+\frac{1}{c}v_h\times\mathbf{B}\right),\qquad(2)$$

令B沿Z方向。在稳定情况下，$\frac{dv_e}{dt}=\frac{dv_h}{dt}=0$，则上两式分别变为

$$\left.\begin{aligned}v_{ex}&=-\frac{e\tau_e}{m_e}E_x-\frac{1}{c}\frac{e\tau_e}{m_e}Bv_{ey}=-\frac{e\tau_e}{m_e}E_x-\omega_e\tau_e v_{ey},\\v_{ey}&=-\frac{e\tau_e}{m_e}E_y+\omega_e\tau_e v_{ex},\\v_{ez}&=-\frac{e\tau_e}{m_e}E_z,\end{aligned}\right\}\qquad(3)$$

式中$\omega_e=\frac{eB}{m_ec}$。

由此解得：

$$\left.\begin{aligned}v_{ex}&=-\frac{e\tau_e}{m_e[1+(\omega_e\tau_e)^2]}(E_x-\omega_e\tau_e E_y),\\v_{ey}&=-\frac{e\tau_e}{m_e[1+(\omega_e\tau_e)^2]}(E_y+\omega_e\tau_e E_x),\\v_{ez}&=-\frac{e\tau_e}{m_e}E_z.\end{aligned}\right\}\qquad(4)$$

同理解（2）式得：

$$\left.\begin{aligned} v_{hx} &= \frac{e\tau_h}{m_h[1+(\omega_h\tau_h)^2]}(E_x+\omega_h\tau_h E_y), \\ v_{hy} &= \frac{e\tau_h}{m_h[1+(\omega_h\tau_h)^2]}(E_y-\omega_h\tau_h E_x), \\ v_{hz} &= \frac{e\tau_h}{m_h}E_z, \end{aligned}\right\} \qquad (5)$$

式中 $\omega_h=\dfrac{eB}{m_hc}$。

设 $a=\dfrac{e\tau_e}{m_e[1+(\omega_e\tau_e)^2]}$，$b=\dfrac{e\tau_h}{m_h[1+(\omega_h\tau_h)^2]}$。

由 $$\mathbf{j}=n(-e)v_e+pev_h=e(pv_h-nv_e) \qquad (6)$$

可得：

$$\begin{aligned} j_x &= e(pv_{hx}-nv_{ex}) \\ &= e[pb(E_x+\omega_h\tau_h E_y)+na(E_x-\omega_e\tau_e E_y)] \\ &= e[(pb+na)E_x+(pb\omega_h\tau_h-na\omega_e\tau_e)E_y], \end{aligned} \qquad (7)$$

$$\begin{aligned} j_y &= e(pv_{hy}-nv_{ey}) \\ &= e[pb(E_y-\omega_h\tau_h E_x)+na(E_y+\omega_e\tau_e E_x)] \\ &= e[(na\omega_e\tau_e-pb\omega_h\tau_h)E_x+(pb+na)E_y], \end{aligned} \qquad (8)$$

$$\begin{aligned} j_z &= e[pv_{hz}-nv_{ez}] \\ &= e^2\left[\frac{\tau_h p}{m_h}+\frac{\tau_e n}{m_e}\right]E_z. \end{aligned} \qquad (9)$$

由 $\mathbf{j}=\sigma\mathbf{E}$求得$j_y$为

$$j_y=\sigma_{yx}E_x+\sigma_{yy}E_y+\sigma_{yz}E_z, \qquad (10)$$

与（8）式比较之，可得

$$\begin{aligned} \sigma_{yx} &= e(na\omega_e\tau_e-pb\omega_h\tau_h) \\ &= e\left[n\frac{e\tau_e}{m_e[1+(\omega_e\tau_e)^2]}\cdot\omega_e\tau_e-p\frac{e\tau_h}{m_h[1+(\omega_h\tau_h)^2]}\omega_h\tau_h\right] \end{aligned} \qquad (11)$$

在$\omega_h\tau_h \gg 1$和$\omega_e\tau_e \gg 1$条件下，（11）式中的

$$[1+(\omega_e\tau_e)^2] \approx (\omega_e\tau_e)^2, \quad [1+(\omega_h\tau_h)^2] \approx (\omega_h\tau_h)^2,$$

$$\therefore \quad \sigma_{yx} = e\left[n\frac{e}{m_e\omega_e} - p\frac{e}{m_h\omega_h}\right]. \tag{12}$$

将 $\omega_e = \frac{eB}{m_e c}$，$\omega_h = \frac{eB}{m_h c}$ 代入（12）式得

$$\sigma_{yx} \approx ec(n-p)/B. \tag{13}$$

（b）令（8）式的$j_y \approx 0$，可得：

$$E_y = \frac{1}{pb+na}[pb\omega_h\tau_h - na\omega_e\tau_e]E_x, \tag{14}$$

设 $Q_e = \omega_e\tau_e$，$Q_h = \omega_h\tau_h$，将a、b值代入（14），然后利用$Q_e \gg 1$，$Q_h \gg 1$的条件，可得：

$$E_y \approx \frac{1}{p\cdot\frac{e\tau_h}{m_hQ_h^2} + n\frac{e\tau_e}{m_eQ_e^2}}\left[p\frac{e\tau_h}{m_hQ_h} - n\frac{e\tau_e}{m_eQ_e}\right]\cdot E_x$$

$$= \frac{1}{\frac{p}{Q_h}+\frac{n}{Q_e}}(p-n)E_x$$

$$\approx -(n-p)\left(\frac{p}{Q_h}+\frac{n}{Q_e}\right)^{-1}E_x. \tag{15}$$

由此可见，若$n=p$，霍尔电场为零。

（c）由$j_x = \sigma_{eff}E_x$可以求得σ_{eff}。由（a）题中（7）式知

$$j_x = e[(pb+na)E_x + (pbQ_h - naQ_e)E_y].$$

将a、b值代入（7）式并利用$\omega\tau \gg 1$的条件，j_x可改写为

$$j_x \approx e\left[\left(p\frac{e\tau_h}{m_hQ_h^2} + n\frac{e\tau_e}{m_eQ_e^2}\right)E_x + \left(p\frac{e\tau_h}{m_hQ_h} - n\frac{e\tau_e}{m_eQ_e}\right)E_y\right],$$

将 $Q = \omega\tau = \frac{eB}{mc}\tau$代入得

$$j_x \approx e\left[\left(\frac{p}{Q_h}\frac{c}{B}+\frac{n}{Q_e}\frac{c}{B}\right)E_x+\left(p\frac{c}{B}-n\frac{c}{B}\right)E_y\right]$$

$$=\frac{ec}{B}\left[\left(\frac{p}{Q_h}+\frac{n}{Q_e}\right)E_x+(p-n)E_y\right]. \tag{16}$$

将（15）式的E_y代入（16），

$$j_x=\frac{ec}{B}\left[\left(\frac{p}{Q_h}+\frac{n}{Q_e}\right)E_x+(p-n)(p-n)\left(\frac{p}{Q_h}+\frac{n}{Q_e}\right)^{-1}\right.$$

$$\left.E_x\right]=\sigma_{eff}E_x.$$

所以有

$$\sigma_{eff}=\frac{ec}{B}\left[\left(\frac{p}{Q_h}+\frac{n}{Q_e}\right)+(p-n)^2\left(\frac{p}{Q_h}+\frac{n}{Q_e}\right)^{-1}\right]. \tag{17}$$

由此可见，当$n=p$时，（17）式中的第二项为零，因此，$\sigma_{eff}\sim B^{-2}$。如果$n\neq p$，则当$B\to\infty$时，（17）式中第一项趋于零，而第二项趋于一与B无关的极限值，即在强磁场下，σ_{eff}趋于饱和。

第九章　费米面与金属

1．矩形晶格的布里渊区。作出初基二维矩形晶格的头两个布里渊区的图形，其轴为a和$b=3a$。

〈解〉

矩形晶格的平移基矢为

$$\mathbf{a}=a\hat{x},\quad \mathbf{b}=3a\hat{y}.$$

设$\mathbf{n}^0$为垂直于$x-y$平面的单位矢量，则倒易格子的平移基矢为

$$\mathbf{A}=2\pi\frac{\mathbf{b}\times\mathbf{n}^0}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{n}^0)}=\frac{2\pi}{a}\hat{x},$$

$$\mathbf{B}=2\pi\frac{\mathbf{n}^0\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{n}^0)}=\frac{2\pi}{3a}\hat{y}.$$

于是，倒格子的平移矢量为

$$\mathbf{G}=(g_1\mathbf{A}+g_2\mathbf{B})$$

$$=\frac{2\pi}{3a}(3g_1\hat{x}+g_2\hat{y}).$$

矩形晶格的倒格子仍为矩形格子。倒格点$(g_1,\ g_2)=(0,\ \pm1)$和$(\pm1,\ 0)$的垂直平分线围成第一布里渊区。而由倒格点$(g_1,\ g_2)=(\pm1,\ \pm1),\ (0,\ \pm2)$的垂直平分线与第一布里渊区的边界之间所围成的多边形就是第二布里渊区，如图9—1所示。

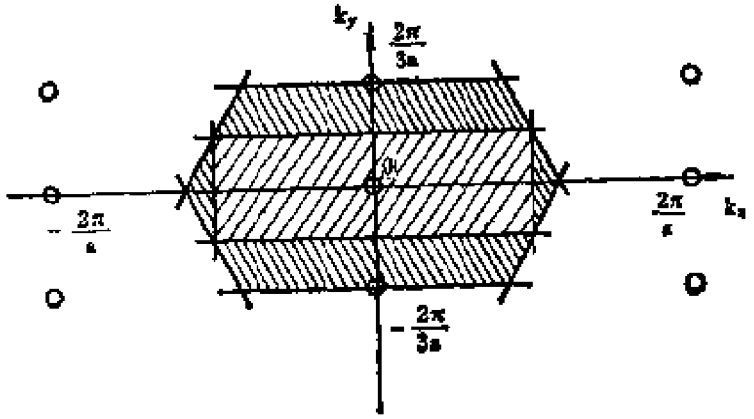


图 9 — 1　矩形晶格的布里渊区左斜线区为第一区；右斜线区为第二区。

2．布里渊区，矩形晶格。一块二维金属，在简单矩形原胞（$a=2A$，$b=4A$）中有一个单价原子．（a）绘出第一布里渊区图形，以Cm^{-1}为单位标出其大小。（b）计算自由电子弗米圆的半径（以Cm为单位）．（c）按同样比例将弗米圆画在第一布里渊区中．作另一张图，在周期区图中表示出自由电子第一、二能带的前几个周期．假定在区边界上有小的能隙。

〈解〉

（a）矩形原胞基矢为 $\mathbf{a}=2A\hat{x}$，$\mathbf{b}=4A\hat{y}$，相应的倒格基矢为 $A=\frac{\pi}{a}\hat{x}$，$\mathbf{B}=\frac{\pi}{2A}\hat{y}$，而倒格矢为

$$\mathbf{G}=(g_1\mathbf{A}+g_2\mathbf{B})$$
$$=\frac{2\pi}{4A}(2g_1\hat{x}+g_2\hat{y}。 \qquad (1)$$

第一布里渊区由 $(g_1, g_2)=(0, \pm 1)$，$(\pm 1, 0)$ 四个倒格矢的垂直平分线围成，如图 9 —2a所示。

（b）二维自由电子气体弗米半径由下式决定：

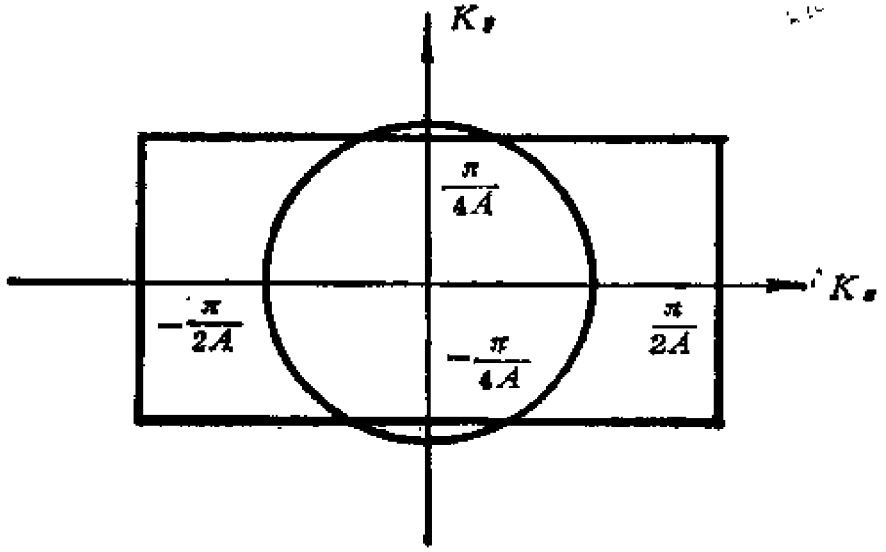
$$2\cdot\frac{\pi k_F^2}{(2\pi)^2/ab}=Z,$$

其中Z为原子价数，ab为每个原子占据的面积。由此可得

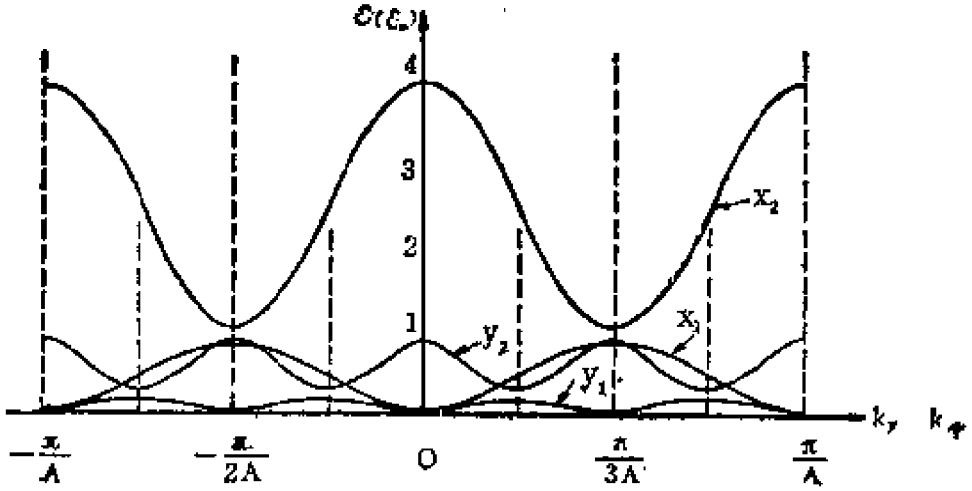
$$k_F=(2\pi\cdot\frac{1}{ab})^{1/2}=\left(\frac{2\pi}{8A}\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{2\pi}{8A^2}\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{\pi}{4}\right)^{\frac{1}{2}}A^{-1}$$

$$\approx 0.886A^{-1}.$$

$$=0.886\times10^{8}\text{cm}^{-1}. \qquad (2)$$



(a)



(b)

图 9 — 2 (a) 矩形晶格的布里渊区 (b)能带图

（c）倒格矢（1）式可改写为

$$\mathbf{G}=\left(\frac{\pi}{\mathrm{A}}g_1\hat{x}+\frac{\pi}{2\mathrm{A}}g_2\hat{y}\right)。\qquad(3)$$

二维自由电子气体的能量为

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

$$=\frac{4\mathrm{A}^2}{\pi^2}(k_x^2+k_y^2)(\varepsilon_0),\qquad(4)$$

其中以$\varepsilon_0=\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\cdot\frac{\pi^2}{4\mathrm{A}^2}$为能量单位。现以$k_x$，$k_y$两方向为例作能带图。

k_x方向：

$$k_y=0,$$

$$\therefore\varepsilon(k_x)=\frac{4\mathrm{A}^2}{\pi^2}(k_x)^2(\varepsilon_0)。$$

k_x从0至$\frac{\pi}{2\mathrm{A}}$为第一带，从$\frac{\pi}{2\mathrm{A}}\longrightarrow\frac{\pi}{\mathrm{A}}$为第二带。假设边界处有小的能隙，绘出第一、二能带，周期延伸，可得图9—2*b*的x_1，x_2能带。

k_y方向：

$$k_x=0$$

$$\therefore\varepsilon(k_y)=\frac{4\mathrm{A}^2}{\pi^2}(k_y)^2(\varepsilon_0),$$

$0\leqslant k_y<\frac{\pi}{4\mathrm{V}}$为第一带，$\frac{\pi}{4\mathrm{A}}\leqslant k_y<\frac{\pi}{2\mathrm{A}}$为第二带。假设边界处有小的能隙，绘出第一、第二带后周期延伸之，得y_1，y_2带。

由图9—2*b*可见，二维的能带有重迭现象发生。

3．六角密堆结构。考虑晶格常数为*a*和*c*的三维简单六角晶

格的第一布里渊区。令$\mathbf{G}_c$表示平行于正格子c轴的最短倒格矢。（a）证明对于六角密堆结构，晶体势$U(\mathbf{r})$的傅里叶分量$U(\mathbf{G}_c)$为零。（b）$U(2\mathbf{G}_c)$是否也等于零？（c）为什么双价原子构成的简单六角晶格在原则上有可能是绝缘体？（d）为什么单价原子所构成的六角密堆结构不可能得到绝缘体？

〈解〉

（a）设原胞中含有m个原子，它们在原胞中的位置由$\mathbf{R}_n$表示，则晶格势能为

$$U(\mathbf{r})=\sum_{n=1}^{m}U(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n), \tag{1}$$

其傅里叶展开为

$$\begin{aligned}U(\mathbf{r})&=\sum_{n=1}^{m}\sum_{G}U(\mathbf{G})e^{i\mathbf{G}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)}\\&=\sum_{G}U(\mathbf{G})S(\mathbf{G})e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}},\end{aligned} \tag{2}$$

其中

$$S(\mathbf{G})=\sum_{n=1}^{m}e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}_n} \tag{3}$$

为结构因子，$\mathbf{G}$为倒格矢，

$$\mathbf{G}=m_1\mathbf{b}_1+m_2\mathbf{b}_2+m_3\mathbf{b}_3. \tag{4}$$

对于简单六角晶格，正、倒格子基矢分别为

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

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

$$\boldsymbol{b}_3=\frac{2\pi}{c}\ (0,\ 0,\ 1).$$

把$\mathbf{b}_1$，$\mathbf{b}_2$，$\mathbf{b}_3$代入（4）式得：

$$\mathbf{G}=2\pi\left(\frac{m_1}{a}\hat{x}+\left(-\frac{m_1}{a}\cdot\frac{1}{\sqrt{3}}+\frac{m_2}{a}\cdot\frac{2}{\sqrt{3}}\right)\hat{y}\right.$$

$$\left.+\frac{m_3}{c}\hat{z}\right)。\qquad(5)$$

（5）式中有八个最短的非零倒格矢，其中垂面围成以$\pm\frac{1}{2}\mathbf{G}_c$为顶面和底面的六角棱柱体。因为简单六角原胞中只包含一个以（0，0，0）为代表的原子，所以结构因子$S(\mathbf{G})\neq 0$，从而势能傅氏系数$U(\mathbf{G}_c)\neq 0$。因此，顶面和底面为能量不连续面。此六角棱柱体为简单六方晶格的第一布里渊区。

对于六角密堆结构，可以看成是以（0，0，0）及$\frac{1}{3}(2\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)+\frac{1}{2}\alpha_3$为基点的两个简单六角次格互相穿插而成的。原胞中包含有两个原子，所以结构因子为

$$S(\mathbf{G})=1+e^{-i2\pi\left(\frac{2m_1}{3}+\frac{m_2}{3}+\frac{m_3}{2}\right)}。\qquad(6)$$

对于平行于c轴的最短的倒格矢$\pm\mathbf{G}_c$，有$m_1=m_2=0$，$m_3=\pm 1$，所以

$$S(\mathbf{G})=S(\pm\mathbf{G}_c)$$
$$=1+e^{\mp i\pi}=0，$$

因此得

$$U(\pm\mathbf{G}_c)=0。\qquad(7)$$

这说明$\pm\mathbf{G}_c$的中垂面，对于六角密堆结构而言，并不是能量不连续面，所以不是布里渊区介面。

（b）同理，对于六角密堆结构，当$\mathbf{G}=\pm 2\mathbf{G}_c$，即$m_1=m_2=0$，$m_3=\pm 2$时，

$$S(\pm 2G_c) = 1 + e^{\mp i2\pi} = 2,$$

$$\therefore \quad U(\pm 2G_c) \neq 0. \qquad (8)$$

因此，在$G = \pm 2G_c$的中垂面上发生能量的跳跃。它和其他中垂面一起围成的布里渊区，它是一种复合区，有时称为 Jones 区。

（c）简单六角原胞中含有一个原子。第一个能带可容纳$2N$个电子。若晶体是由双价原子组成的，则N个原子的体系可提供$2N$个价电子，这样能带可能全被填满。所以双价原子组成的简单六角晶格的晶体，在原则上可以构成绝缘体。

（d）在六角密堆结构中，每个原胞含有两个原子。但由於六角密堆结构的$U(\pm G_c)$等于零，所以第一布里渊区是一种扩大了的复合能区，它可容纳$2N \times 2 = 4N$个价电子。若晶体是由单价原子组成的，每个原胞中有二个原子，N个原胞可提供$2N$个价电子，扩大的能区是半满的。所以由单价原子构成的六角密堆结构，是不可能成为绝缘体的。

4．二维二价金属的布里渊区。有一块正方晶格结构的二维金属，每个原子具有两个传导电子。在近自由电子近似下，仔细地绘出电子与空穴的等能面。对于电子，选择使弗米面表示为闭合的区域图。

〈解〉

二维弗米圆的半径为

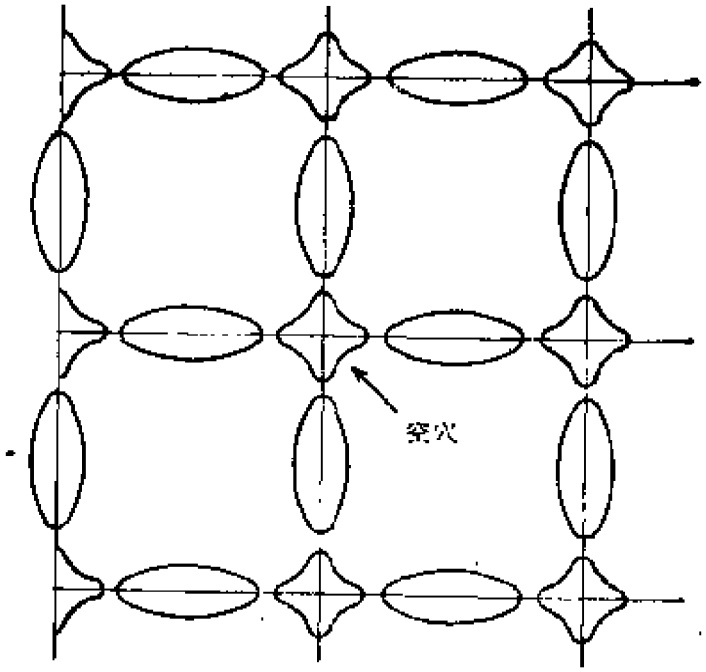
$$k_F = \left(2\pi \frac{Z}{a^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$

Z为原子价数，这里$Z = 2$，a^2为二维布里渊区的面积，所以

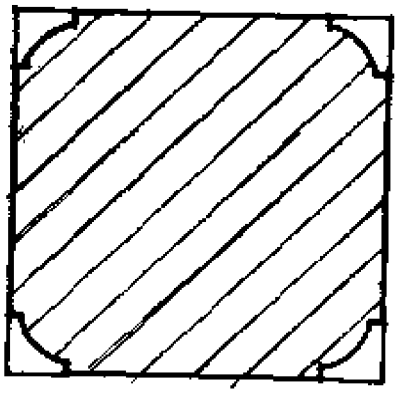
$$k_F = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\pi}{a} \approx 1.13 \cdot \frac{\pi}{a},$$

晶格常数为a的二维正方格子的布里渊区如图 9 — 3a所示。近

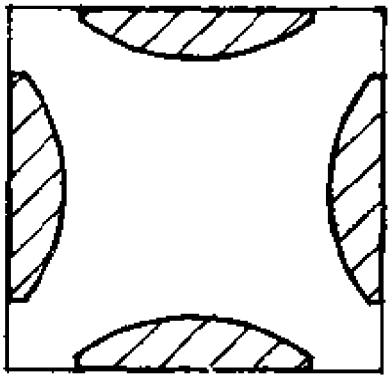
自由电子的弗米圆也表示在图中，以每一倒格点为圆心，以k_F为半径做圆，采用简约区图形，考虑到近自由电子近似的影响后，绘出第一区、第二区的弗米面，如图 9 — 3 b、c 所示．第一区未填满．在重复区图形中，空穴的弗米面如图 9 — 3 a所示。



（a）



（b）第一区



（c）第二区

图 9 — 3　二维二价正方晶格金属的电子和空穴的近自由电子等能面。

5．开轨道． 单价四角结构金属中的开轨道连结布里渊区边界的相对着的界面．这对面的距离为$G=2\times10^{8}\mathrm{cm}^{-1}$．磁场$B=10^{3}\mathrm{gauss}=10^{-1}\mathrm{tesla}$，垂直于开轨道平面．（a）k空间中运动周期的数量级是多大？取$v\approx10^{8}\mathrm{cm/sec}$．（b）在真实空间中描述有磁场存在时电于在此轨道上的运动．

〈解〉

（a）电子在磁场中的运动方程为

$$\hbar\frac{d\mathbf{k}}{dt}=-\frac{e}{c}v\times\mathbf{B}. \qquad \text{(CGS)} \qquad (1)$$

在四角结构金属的布里渊区中，联结其矩形布里渊区截面的长边之间的轨道，即是一种开轨道．外加磁场垂直于开轨道平面．如果沿开轨道的方向来研究电子的运动情况，我们可用下式

$$\hbar\frac{dk}{dt}=-\frac{evB}{c} \qquad (2)$$

来计算运动时间．由（2）式可有

$$dt=\frac{c\hbar}{evB}dk.$$

电子沿开轨道由区的长边到另一长边运动所需的时间，即运动周期T为

$$T=\int dt=\int_{0}^{G}\frac{c\hbar}{evB}dk$$

$$=\frac{c\hbar}{evB}\cdot G$$

$$=\frac{3\times10^{10}\times1.05\times10^{-27}}{10^{3}\times10^{8}\times4.8\times10^{-10}}\times2\times10^{8}$$

$$=1.31\times10^{-10}\ (\text{秒}). \qquad (3)$$

（b）若外加磁场B沿Z方向，电子所受的劳伦兹力为

$$\mathbf{F}m = \frac{d\mathbf{U}}{dt} = -\frac{e}{c}\,\upsilon \times \mathbf{B}. \qquad (4)$$

写成分量形式，（4）式变成：

$$\left.\begin{aligned} \frac{dU_x}{dt} &= -\frac{e}{mc}v_y B, \\ \frac{dU_y}{dt} &= \frac{e}{mc}v_x B, \\ \frac{dU_Z}{dt} &= 0. \end{aligned}\right\} \qquad (5)$$

由（5）式可见，因为 v_z = 常数，电子或在垂直于磁场的平面上作圆周运动，或作螺旋运动．但是对于开轨道，情况则不同．电子在开轨道上的运动，只能是在垂直于磁场的平面内一个单一方向上的运动．如果开轨道是沿 x 方向，那么因为轨道不闭合，在 y 方向的平均的速度分量将不等于零，因此在真实空间中，开轨道所载荷的电子不受磁场所偏转，且电流平行于 y 轴．在强磁场下的磁致电阻实验中将会看到开轨道与闭合轨道的差别．

6．对方势阱求结合能．（a）求电子在一维单个方势阱中的结合能的表示式，势阱深度为 U_0，宽度为 a．假定解对势阱中点是对称的．（b）在 U_0 取 $|U_0| = 2\hbar^2/ma^2$ 的特殊情况下，求结合能的数值结果，并与原书 267 页图20的适当的极限相比较．

〈解〉

（a）在一维方势阱中，

$$V(x) = 0, \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2};$$

$$V(x) = U_0, \quad |x| > \frac{a}{2}.$$

当 $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ 时，电子的薛定格方程为

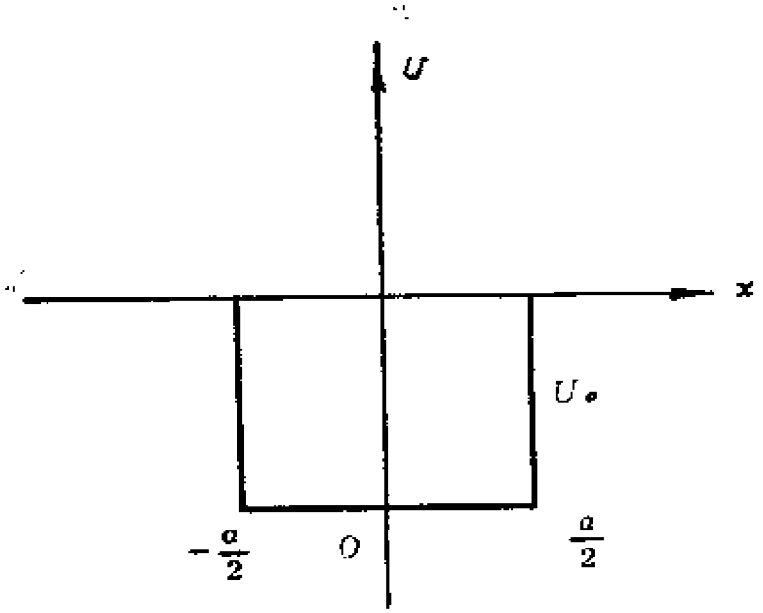


图 9—4　一维方势阱

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\right)\Psi=0\ ; \tag{1}$$

当 $|x|>\frac{a}{2}$ 时，为

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\right]\Psi=0\ . \tag{2}$$

令　　$$\alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}E,\quad \beta^2=\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E), \tag{3}$$

则（1）、（2）式的解分别为

$$\Psi(x)=A\sin\alpha x+B\cos\alpha x,\quad |x|<\frac{a}{2}; \tag{4}$$

$$\Psi(x)=Ce^{-\beta x},\qquad x>\frac{a}{2}; \tag{5}$$

$$\Psi(x)=De^{\beta x},\quad x<-\frac{a}{2}; \tag{6}$$

在边界 $X=\pm\frac{a}{2}$ 处，要求波函数及其一级导数连续，由此有

$$A\sin\frac{1}{2}\alpha a+B\cos\frac{1}{2}\alpha a=Ce^{-\frac{1}{2}\beta a},$$

$$-A\sin\frac{1}{2}\alpha a+B\cos\frac{1}{2}\alpha a=De^{-\frac{1}{2}\beta a},$$

$$\alpha A\cos\frac{1}{2}\alpha a-\alpha B\sin\frac{1}{2}\alpha a=-\beta Ce^{-\frac{1}{2}\beta a},$$

$$\alpha A\cos\frac{1}{2}\alpha a+\alpha B\sin\frac{1}{2}\alpha a=\beta De^{-\frac{1}{2}\beta a}.$$

欲使A、B、C、D有非零解，要求系数行列式为零，即

$$\begin{vmatrix} \sin\frac{1}{2}\alpha a & \cos\frac{1}{2}\alpha a & -e^{-\frac{1}{2}\beta a} & 0 \\ -\sin\frac{1}{2}\alpha a & \cos\frac{1}{2}\alpha a & 0 & -e^{-\frac{1}{2}\beta a} \\ \alpha\cos\frac{1}{2}\alpha a & -\alpha\sin\frac{1}{2}\alpha a & \beta e^{-\frac{1}{2}\beta a} & 0 \\ \alpha\cos\frac{1}{2}\alpha a & \alpha\sin\frac{1}{2}\alpha a & 0 & -\beta e^{-\frac{1}{2}\beta a} \end{vmatrix}=0.$$

由此得出两个解：

$$\alpha\cot\frac{1}{2}\alpha a=-\beta, \tag{7}$$

和

$$\alpha\tan\frac{1}{2}\alpha a=\beta. \tag{8}$$

将（3）与（7）或（3）与（8）结合，可决定势阱的本征值E。令$u=\frac{1}{2}\alpha a$，$v=\frac{1}{2}\beta a$，则由（3）和（8）得

$$u\tan u=v, \tag{9}$$

$$u^2+v^2=\frac{ma^2U_0}{2\hbar^2}. \tag{10}$$

可用图解法．由半径为$\left(\frac{ma^2U_0}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$的圆与曲线$u\tan v=u$的交点即可求出给定的$U_0$和$a$时的$E$值．

（b）若$U_0=\frac{2\hbar^2}{ma^2}$，则（10）式变为$u^2+v^2=1$，与（9）

式一起，用图解法求得$u\approx 0.7$，相应的能量为

$$E=\frac{2\hbar^2u^2}{ma^2}\approx 0.5\frac{2\hbar^2}{ma^2}. \qquad (11)$$

原书中267页图20，是电子在一维周期方势阱（深度为$U_0=\frac{2\hbar^2}{2a^2}$，宽度为$a$；周期为$b$）中的基态能量随周期$b$变化的情况．由图可见．当$b\longrightarrow\infty$，即方势阱之间分得很开的极限情况下，$E\longrightarrow 0$与$\left(\frac{2\hbar^2}{ma^2}\right)$，与单个方势阱的(11)式能量值相一致．因此，在$b\to\infty$的极限条件下，一维周期方势阱变成由很多孤立的方势阱构成的系统，电子在每个方势阱中的基态能($k=0$)都是相同的，即电子在一维周期方势阱作用下形成的能带的宽度趋于零。所以最低能带退化成为$k=0$的基态能阶．反过来，由此也可以看出，电子在周期方势阱中的其他能带，是由很多单个方势阱的激发态($k\neq 0$)的能阶形成的。

在一维周期方势阱情况，当求出电子的弗米能量后，利用求出的基态能量值，以及其它数值，可以求出电子的结合能。

7．钾的 De Haas-Van Alphen 周期．（a）根据自由电子模型计算钾的周期$\Delta(1/B)$，（b）对于$B=10KG=1T$，在真实空间中极值轨道的面积有多大？

〈解〉

（a）磁场的振荡周期为：

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right)=\frac{2\pi e}{\hbar cS}, \qquad (1)$$

其中S为垂直于磁场方向的Fermi面的极值轨道面积，在自由电子模型下，Fermi面为球面，所以

$$S=\pi k_F^2, \qquad (2)$$

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \qquad (3)$$

钾为单价的体心立方金属，$n = N/V = 2/a^3$，$a = 5.2 \times 10^{-8}$cm，代入（3）式得：

$$k_F = 0.746 \times 10^8 \text{cm}^{-1}.$$

从而 $S = \pi k_F^2 = 1.748 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$。

因此，

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi \times 4.8 \times 10^{-10}}{\hbar c \pi \times 0.55 \times 10^{16}} = 5.46 \times 10^{-9} \text{Gauss}^{-1}.$$

（b）在真实空间中，极值轨道围成的面积为

$$A_n = (\hbar c/eB)^2 S_n, \qquad (4)$$

其中S_n是K空间的曲线极值面积．将$B = 10^4$Gauss，$S_n \approx S = 1.748 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$代入（4）式得：

$$A = 0.757 \times 10^{-5} \text{cm}^2.$$

De Haas—Van Alphen 振荡在金属的电阻实验中也可以观察到，此称为Schubnikow—de Hass效应，其振荡周期与 De Hass 振荡相同。

8．基于$K \cdot P$微扰理论的带边结构．在立方晶体的能带n中，考虑在$K = 0$处的非简并轨道Ψ_{nk}．用二级微扰理论求证，

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j{}' \frac{|\langle n0|\, \mathbf{k}\cdot\mathbf{p}\,|j0\rangle|^2}{\varepsilon_n(0) - \varepsilon_j(0)},$$

式中的求和遍及$\mathbf{k} = 0$的所有其他轨道Ψ_{jk}．在这点上的有效质量为

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{2}{m} \sum_j{}' \frac{|\langle n0\,|\mathbf{p}|\,j0\rangle|^2}{\varepsilon_n(0) - \varepsilon_j(0)}.$$

在窄带半导体中导带边上的有效质量由价带边的影响所支配，从而

$$\frac{m}{m^*} \approx \frac{2}{mE_g} \sum_{v} |\langle c|\mathrm{p}|u\rangle|^2,$$

其中对所有价带求和，E_g是能隙。对给定的矩阵元，小的能隙导至小的质量。

〈解〉

第n个能带的Bloch函数$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{nk}(\mathbf{r})$满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right]\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k})\Psi_{nk}(\mathbf{r}), \qquad (1)$$

把$\Psi_{nk}(\mathbf{r})$代入（1），则有

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}\cdot p\right]u_{nk} = \left[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}^2\right]u_{nk},$$

或

$$\left[-\frac{1}{2m}(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k})^2 + U(\mathbf{r})\right]u_{nk} = \varepsilon_n(\mathbf{k})u_{nk}, \qquad (2)$$

其中$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$。若已知$\mathbf{k}=0$的解为$u_{no}$，$\varepsilon_n(0)$，则有

$$\left[\frac{1}{2m}p^2 + U(\mathbf{r})\right]u_{no} = \varepsilon_n(0)u_{on}. \qquad (3)$$

于是（2）式可改写为

$$(H_o + H')\ u_{nk} = \varepsilon_n(\mathbf{k})u_{nk},$$

其中

$$H_o = \frac{1}{2m}p^2 + U(\mathbf{r}), \qquad (4)$$

$$H' = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m}\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}. \qquad (5)$$

如果$\mathbf{k}$很小，H'可看做微扰。若u_{no}是非简并的，以u_{no}，$\varepsilon_n(0)$为零级近似值，用非简并微扰理论，计及$\mathbf{k}$的平方项，得到：

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(0) + \langle no|H'|no\rangle + \sum_{j(\neq n)} \frac{\langle no|H'|jo\rangle\langle j0|H'|no\rangle}{\varepsilon_n(0) - \varepsilon_j(0)}$$

$$= \varepsilon_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j{}' \frac{|\langle no|\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}|jo\rangle|^2}{\varepsilon_n(0) - \varepsilon_j(0)}. \qquad (6)$$

相应的有效质量为

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 \varepsilon_n(\mathbf{K})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}\right)_{k=0} \quad \alpha, \beta = x, y, z$$

$$= \frac{1}{m}\delta_{\alpha\beta} + \frac{\alpha}{m^2} \sum_j{}' \frac{\langle no|p_\alpha|jo\rangle\langle jo|p_\beta|no\rangle}{\varepsilon_n(0) - \varepsilon_j(0)}. \qquad (7)$$

或写为矩阵形式

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{2}{m} \sum_j{}' \frac{\langle no|\mathrm{p}|^{i}o\rangle\langle jo|\mathrm{p}|no\rangle}{\varepsilon_n(0) - \varepsilon j(0)}$$

$$= 1 + \frac{2}{m} \sum_j{}' \frac{|\langle no|\mathrm{p}|jo\rangle|^2}{\varepsilon_n(0) - \varepsilon_j(0)} \qquad (8)$$

对于窄带半导体，导带边（$n=c$）的有效质量受所有其它价带边（$j=v$）状态的影响：

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{2}{m} \sum_v{}' \frac{|\langle co|\mathrm{p}|vo\rangle|^2}{\varepsilon_c(0) - \varepsilon_v(0)}. \qquad (9)$$

由（9）式可见，$\varepsilon_v(0) > \varepsilon_c(0)$ 和 $\varepsilon_v(0) < \varepsilon_c(0)$ 的价带对导带边的 m^* 影响情况不同．其中以最接近导带的价带，即 $\varepsilon_c(0) -$

$\varepsilon_v(0)=E_g$ 者的影响为最大。在窄带的情况下，$\frac{2}{mE_g}\sum_v{}' |<c|\mathbf{p}|v>|^2 \gg 1$，所以有：

$$\frac{m}{m^*}\approx -\frac{2}{mE_g}\sum_v |<c|\mathbf{p}|v>|^2 . \qquad (10)$$

如果使用双带模型，(10) 式还可进一步简化. 由 (10) 式可见，具有小能隙E_g的半导体，就具有小的有效质量。

9. Wannier函数. 一个能带的Wannier函数是用同一能带的Bloch函数来定义的。

$$w(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)=N^{-\frac{1}{2}}\sum_k e^{-ik\cdot r_n}\Psi_k(\mathbf{r}),$$

式中$\mathbf{r}_n$为格点位矢。（a）证明对不同格点m，n的Wannier函数是正交的：

$$\int dV w^*(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)w(\mathbf{r}-\mathbf{r}_m)=0, \quad n\neq m.$$

这种正交性质使得这种函数比中心在不同格点位置上的原子函数更有用，因为后者一般是不正交的。（b）在格点位置周围，Wannier函数最大。对于晶格常数为a的具有N个原子的线晶格，$\Psi_k=N^{-\frac{1}{2}}e^{ikx}u_0(x)$，证明Wannier函数为

$$w(x-x_n)=u_0(x)\frac{\sin\pi(x-x_n)/a}{\pi(x-x_n)/a}.$$

〈解〉

（a）因为Bloch函数

$$\Psi_k=N^{-\frac{1}{2}}e^{ik\cdot r}u_k(\mathbf{r})$$

是正交归一的，所以

$$\int d\tau w^*(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)w(\mathbf{r}-\mathbf{r}_m)$$

$$=N^{-1}\sum_{k,k'}e^{ik\cdot r_n}\cdot e^{-ik'\cdot r_m}\int\Psi_k^*(\mathbf{r})\Psi_{k'}(\mathbf{r})d\tau$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{k\,k'} e^{ik\cdot r_n} e^{-ik'\cdot r_m}\delta_{kk'}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{k} e^{ik\cdot(r_n - r_m)} = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & \text{当} n = m\text{时;} \\ 0, & \text{当} n \neq m\text{时。} \end{cases}$$

（b）对于一维线性晶格，$L = Na$，

$$\Psi_k = N^{-\frac{1}{2}} e^{ikx} u_0(x),$$

$$w(x - x_n) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_k e^{-ikx_n}\Psi_k(x)。$$

把Ψ_k代入，有

$$w(x - x_n) = N^{-1} u_0(x)\sum_k e^{ik(x - x_n)}$$

$$\approx u_0(x)\frac{1}{N}\cdot\frac{L}{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{ik(x-x_n)}dk$$

$$\approx u_0(x)\frac{a}{2\pi}\cdot\frac{1}{i(x - x_n)}\left(e^{i\frac{\pi}{a}(x-x_n)} - e^{-i\frac{\pi}{a}(x-x_n)}\right)$$

$$\approx u_0(x)\frac{\sin\frac{\pi}{a}(x - x_n)}{\frac{\pi}{a}(x - x_n)},$$

其中k限定在第一布里渊区内。

10．开轨道与磁致电阻．我们考虑第六章第9题中的自由电子以及第八章第6题中的电子与空穴的横向磁致电阻。在某些晶体中，除特殊的晶体取向外，磁阻趋于饱和，开轨道只能在垂直于磁场的平面内的一个单一方向上载荷电流，这种载流子不会被磁场偏转。在图6—1的安排中，令开轨道平行于k_x；在真实空间中这些轨道载荷的电流平行于y轴．令$\sigma_{yy} = S\sigma_0$，是开轨道的电导率；这个关系定义了常数S。在强磁场极限$\omega_c\tau \gg 1$下，磁致电导率张量为

$$\sigma_0\begin{pmatrix} Q^{-2} & -Q^{-1} & 0 \\ Q^{-1} & S & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

其中$Q=\omega_c\tau$。（a）证明霍耳电场为$E_y=-E_x/SQ$。（b）证明x方向的有效电阻为$\rho=(Q^2/\sigma_0)(S/S+1)$，所以电阻不饱和，且随$B^2$而增加。

〈解〉

（a）在霍耳电场作用下

$$j_y=\sigma_{yx}E_x+\sigma_{yy}E_y=0\,. \tag{1}$$

现在

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}=\sigma_0\begin{pmatrix} Q^{-2} & -Q^{-1} & 0 \\ Q^{-1} & S & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

故

$$\sigma_{yx}=\sigma_0Q^{-1},\quad \sigma_{yy}=\sigma_0S. \tag{3}$$

于是

$$E_y=-\frac{\sigma_{yx}E_x}{\sigma_{yy}}=-\frac{\sigma_0Q^{-1}E_x}{\sigma_0S}=-\frac{E_x}{SQ}. \tag{4}$$

（b）$j_x=\delta_{xx}E_x+\delta_{xy}E_y$. (5)

同样，由（2）式可得：

$$j_x=\sigma_0Q^{-2}E_x+(-\sigma_0Q^{-1})E_y$$

$$=\sigma_0Q^{-2}E_x+\sigma_0Q^{-1}\cdot\frac{E_x}{SQ}=\frac{\sigma_0(S+1)}{SQ^2}E_x. \tag{6}$$

所以，x方向的有效电阻率

$$\rho=\frac{E_x}{j_x}$$

$$=\frac{SQ^2}{\sigma_0(S+1)}=(\sigma_0Q^2/)(S/S+1). \tag{7}$$

第十章　等离子体振荡量子、电磁声子和极化子

1．表面等离子体振荡量子．设在平面$Z=0$的上方有一半无限等离子体．在等离子体内Laplace方程$\nabla^2\varphi=0$的解为$\varphi_i(x,z)=A\cos kx\cdot e^{-kz}$，从而，$Ez_i=kA\cos kxe^{-kz}$，$E_{xi}=kA\sin kxe^{-kz}$．(a) 证明对$z<0$真空中的$\varphi_0(x,z)=A\cos kxe^{kz}$，满足**E**的切向分量在边界上连续的边界条件，亦即求E_{x0}．(b) 注意到$D_i=\varepsilon(\omega)E_i$，$D_0=E_0$．证明**D**的法向分量在边界上连续的边界条件要求$\in(\omega)=-1$，从而由公式(10)得到Stern－Ferrell的结果，

$$\omega_s^2=\frac{1}{2}\omega_p^2,$$

其中ω_s为表面等离子体振荡频率．

〈解〉

(a) 因为半无限的等离子体在$z=0$的平面上方，所以对应$z>0$的情况，等离子体内电场为

$$Ez_i(x,z)=kA\cos kxe^{-kz}, \qquad (1)$$

$$E_{xi}(x,z)=kA\sin kxe^{-kz}, \qquad (2)$$

对于$z<0$的真空情况，取$\varphi_0(x,z)=A\cos kxe^{kz}$，则电场为

$$E_{z0}(x,z)=-\frac{\partial\varphi_0}{\partial z}-=kA\cos kxe^{kz}, \qquad (3)$$

$$E_{x0}(x,z)=-\frac{\partial\varphi_0}{\partial x}=kA\sin kxe^{kz},$$

由（2）和（4）式可见，在边界上，即$z=0$时，有

$$E_{xi}(x,0)=E_{x0}(x,o)=kA\sin kx. \tag{5}$$

这表明（5）式是边界上电场的切向分量连续的条件。

(b) 利用(1)、(2)、(3)、(4)式可以写出

$$D_{xi}(x,z)=\varepsilon(\omega)E_{xi}=\varepsilon(\omega)\ kA\sin kxe^{-kz}, \tag{6}$$

$$D_{zi}(x,z)=\varepsilon(\omega)E_{zi}=\varepsilon(\omega)kA\cos kxe^{-kz}; \tag{7}$$

$$D_{x0}(x,z)=E_{x0}(x,z)=kA\sin kxe^{kz}, \tag{8}$$

$$D_{z0}(x,z)=E_{z0}(x,z)=-kA\cos kxe^{kz}. \tag{9}$$

如果在边界上要求D的法向分量连续，则必

$$D_{zi}(x,0)=D_{z0}(x,0). \tag{10}$$

于是由（7）、（9）式得出

$$\varepsilon(\omega)kA\cos kx=-kA\cos kx,$$

由此解得

$$\varepsilon(\omega)=-1. \tag{11}$$

利用（11）式和原书289页的关系式（10）

$$\varepsilon(\omega)=1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2},$$

可解出表面等离子体振荡频率ω_s：

$$1-\frac{\omega_p^2}{\omega_s^2}=\varepsilon(\omega_s)=-1,$$

$$\omega_s^2=\frac{1}{2}\omega_p^2. \tag{12}$$

此即Stern－Ferrell的结果。

2．介面等离子体振荡量子。考虑金属1（在$z>0$方面）与金属2（在$z<0$方面）之间的平面介面（在$z=0$处）。金属1具有体等离子体振荡频率ω_{p1}，金属2为ω_{p2}。两种金属都具有自由电子气体的介电常数。证明与界面相联系的表面等离子体振荡量子

具有频率

$$\omega = \left[\frac{1}{2}(\omega_{p1}^2 + \omega_{p2}^2)\right]^{\frac{1}{2}}.$$

〈解〉

在金属 1 、 2 内均满足泊松方程

$$\nabla^2\psi = 0, \tag{1}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\psi. \tag{2}$$

（1）式的解可写为

$$\psi_1 = A_1 e^{ikx-kz}, \quad Z>0; \tag{3}$$

$$\psi_2 = A_2 e^{ikx+kz}, \quad Z<0. \tag{4}$$

代入（2）式，求出两种金属内的电场分别为

$$\mathbf{E}_1 = E_{1x}(x,z)\hat{x} + E_{1z}(x,z)\hat{z}$$

$$= -ikA_1 e^{ikx-kz}\hat{x} + kA_1 e^{ikx-kz}\hat{z}, \tag{5}$$

$$\mathbf{E}_2 = E_{2x}(x,z)\hat{x} + E_{2z}(x,z)\hat{z}$$

$$= -ikA_2 e^{ikx+kz}\hat{x} - kA_2 e^{ikx+kz}\hat{z}. \tag{6}$$

在界面 $z=0$处，$\mathbf{E}$ 的切向分量连续，即要求

$$E_{1x}(x,0) = E_{2x}(x,0), \tag{7}$$

于是，导至 $A_1 = A_2$。再由 $\mathbf{D}$ 的法向分量连续条件

$$\varepsilon_1 E_{1z}(x,0) = \varepsilon_2 E_{2z}(x,z) \tag{8}$$

得出：

$$\varepsilon_1 = -\varepsilon_2. \tag{9}$$

如果 ε_1， ε_2均取自由电子气体的表达式

$$\varepsilon_1 = 1 - \frac{\omega_{p1}^2}{\omega^2},$$

$$\varepsilon_2 = 1 - \frac{\omega_{p2}^2}{\omega^2}.$$

代入(9)式便求出两种金属界面上的等离子体振荡量子的频率为

$$\omega=\left[\frac{1}{2}\ (\omega_{p1}^2+\omega_{p2}^2)\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{10}$$

3. Alfvèn**波.** 设有一固体，有相等的电子与空穴浓度 n，质量分别为m_e与m_h. 这种情形可以在半金属或补偿半导体中出现. 把固体置于均匀磁场 $\mathbf{B}=B\hat{z}$ 中. 引入适合于圆偏振运动的坐标 $\xi=x+iy$, ξ 与时间$e^{-i\omega t}$ 有关。令$\omega_e\equiv eB/m_ec$和$\omega_h\equiv eB/m_hc$.

(*a*) 在 CGS 单位制中，证明 $\xi_e=eE^+/m_e\omega(\omega+\omega_e)$, $\xi_h=-eE^+/m_h\omega(\omega-\omega_h)$是电子与空穴在电场$E^+e^{-i\omega t}=(E_x+iE_y)\ e^{-i\omega t}$中的位移. (*b*) 证明在$\omega\ll\omega_e$, ω_h的频率范围内，介电极化强度 $P^+=ne(\xi_h-\xi_e)$可以写为 $P^+=nc^2(m_h+m_e)\ E^+/B^2$，介电函数 $\varepsilon(\omega)\equiv\varepsilon_l+4\pi P^+/E^+=\varepsilon_l+4\pi c^2\rho/B^2$，这里 ε_l 是基质晶格的介电常数，$\rho\equiv n(m_e+m_h)$ 是载流子质量密度. 如果 ε_l 可以忽略，则色散关系 $\omega^2\varepsilon(\omega)=c^2k^2$ 对于沿 E方向传播的电磁波来说就变成$\omega^2=(B^2/4\pi\rho)k^2$. 这种波称为 Alfvén 波，它以恒定的速度 $B/(4\pi\rho)^{\frac{1}{2}}$传播. 如果 $B=10\mathrm{KG}$, $n=10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$, $m=10^{-27}\mathrm{g}$, 则速度为$\sim10^8\ \mathrm{cms}^{-1}$. Alfvén波已在半金属中以及Ge的电子—空穴液滴中观察到.

〈**解**〉

(*a*) 在 **E** 和 **B** 的作用下，电子和空穴的运动方程为

$$m_e\ddot{\mathbf{r}}_e=-e(\mathbf{E}+\frac{1}{c}\dot{\mathbf{r}}_e\times\mathbf{B}) \tag{1}$$

$$m_h\ddot{\mathbf{r}}_h=e(\mathbf{E}+\frac{1}{c}\dot{\mathbf{r}}_h\times\mathbf{B}) \tag{2}$$

设$\mathbf{B}=B\hat{Z}$, $\mathbf{E}=E_x\hat{x}+E_y\hat{y}$, 上式可写为如下分量形式

$$\left.\begin{aligned}\ddot{x}_e &= -\frac{e}{m_e}E_x - \omega_e \dot{y}_e,\\ \ddot{y}_e &= -\frac{e}{m_e}E_y + \omega_e \dot{x}_e,\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

$$\ddot{z} = 0;$$

$$\left.\begin{aligned}\ddot{x}_h &= \frac{e}{m_h}E_x + \omega_h \dot{y}_h,\\ \ddot{y}_h &= -\omega_h \dot{x}_h + \frac{e}{m_h}E_y,\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

$$\ddot{z} = 0,$$

其中，$\omega_e = eB/m_e c$。$\omega_h = eB/m_h c$.

如果$E^+ = E_0{}^+ e^{-i\omega t} = (E_x{}^0 + iE_y{}^0)e^{-i\omega t}$，则（3）、（4）式中的电场分量也出现$e^{-i\omega t}$。若再引入与$e^{-i\omega t}$有关的$\xi_e = x_e + iy_e$，$\xi_h = x_h + iy_h$，则把含$e^{-i\omega t}$的电场分量的（3）、（4）式代入

$$\ddot{\xi}_e = \ddot{x}_e + i\ddot{y}_e, \tag{5}$$

和

$$\ddot{\xi}_h = \ddot{x}_h + i\ddot{y}_h . \tag{6}$$

中，即得：

$$-\omega^2 \xi_e = -\frac{e}{m_e}E^+ + \omega\omega_e \xi_e, \tag{7}$$

$$-\omega^2 \xi_h = \frac{e}{m_h}E^+ - \omega\omega_h \xi_h. \tag{8}$$

由此解得

$$\xi_e = -\frac{eE^+}{m_e\omega(\omega+\omega_e)}, \tag{9}$$

$$\xi_h = -\frac{-eE^+}{m_h\omega(\omega-\omega_h)}. \tag{10}$$

(b) $P^+ = ne(\xi_h - \xi_e)$

$$= ne^2 E^+ \left[\frac{1}{m_h\omega(\omega_h - \omega)} - \frac{1}{m_e\omega(\omega_e + \omega)} \right].$$

当$\omega \ll \omega_e$, ω_h 时，可近似展为

$$P^+ \approx ne^2 E^+ \left[\frac{1}{m_h\omega_h\omega}\left(1 + \frac{\omega}{\omega_h}\right) - \frac{1}{m_e\omega_e\omega}\left(1 - \frac{\omega}{\omega_e}\right) \right]$$

$$= ne^2 E^+ \left[\frac{1}{\omega}\left(\frac{1}{m_h\omega_h} - \frac{1}{m_e\omega_e}\right) + \frac{1}{m_h\omega_h^2} + \frac{1}{m_e\omega_e^2} \right].$$

因为 $m_h\omega_h = m_e\omega_e = eB/c$，所以

$$P^+ = \frac{nc^2(m_h + m_e)E^+}{B^2}. \tag{11}$$

利用（11）式可把介电函数写为

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_l + 4\pi\frac{P^+}{E^+}$$

$$= \varepsilon_l + 4\pi\frac{nc^2(m_h + m_e)}{B^2}$$

$$= \varepsilon_l + \frac{4\pi c^2\rho}{B^2}, \tag{12}$$

其中 $\rho = n(m_h + m_e)$。

若 ε_l 可以略去，即

$$\varepsilon(\omega) \approx \frac{4\pi c^2\rho}{B^2}$$

时，色散关系为

$$\omega^2 = \frac{c^2}{\varepsilon(\omega)}k^2 \approx \frac{B^2}{4\pi\rho}k^2. \tag{13}$$

由（13）式可见，传播速度为

$$v = \left(\frac{B^2}{4\pi\rho}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{B}{(4\pi\rho)^{1/2}}.$$

速度 v 为常数。这种波称为Alfven 波。

4. 螺旋波 (Helicon Waves)。(*a*)应用问题 3 的方法来处理只含一种载流子的样品，比如只含浓度为 p 的空穴，并且在$\omega \ll \omega_h = eB/mc$的范围内。证明$\varepsilon(\omega) \approx 4\pi pe^2/m_h\omega\omega_h$，这里 $D^+(\omega) = \varepsilon(\omega)E^+(\omega)$。在 ε中 ε_l 的项已经略去。(*b*) 进而证明色散关系变为 $\omega = (Bc/4\pi pe)k^2$，这是在 CGS 单位制中的螺旋波的色散关系。对于$k = 1\text{cm}^{-1}$和 $B = 1000\text{G}$，计算金属钠中螺旋波的频率（此频率是负的；圆偏振模频率的符号是相对转动方向而言的）.

〈**解**〉

(*a*)　利用本章第 3 题的结果

$$\xi_h = \frac{eE^+}{m_h\omega(\omega_h - \omega)}, \tag{1}$$

其中

$$\omega_h = \frac{eB}{m_h c}, \tag{2}$$

则极化强度为

$$P^+ = pe\xi_h = \frac{pe^2E^+}{m_h\omega(\omega_h - \omega)};$$

在 $\omega \ll \omega_h$ 的条件下上式可近似写为

$$P^+ \approx \frac{pe^2E^+}{m_h\omega\omega_h}.$$

若 ε_l 可以略去，介电函数就可写为

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_l + \frac{4\pi P^+}{E^+}$$

$$\approx \frac{4\pi P^+}{E^+} = \frac{4\pi pe^2}{m_h\omega\omega_h}. \tag{3}$$

(b) 利用（2）、（3）两式可将色散关系表示为

$$\omega^2 = \frac{c^2}{\varepsilon(\omega)}k^2 \approx \frac{c^2 m_A \omega_H \omega}{4\pi p e^2}k^2$$

$$= -\frac{Bc\omega}{4\pi p e}k^2,$$

$$\therefore \quad \omega = -\frac{Bc}{4\pi p e}k^2. \qquad (4)$$

与 Alfvén 波不同，现在这种 Helicon 波的速度与 ω 有关，但与 m_A 无关.

若 $k = 1\text{cm}^{-1}$，$B = 100\text{G}$，对于金属 Na，若每一个 Na 原子贡献一个电子，则电子密度为 $p = 2.65 \times 10^{22}\text{cm}^{-3}$，代入（4）式可算出

$$\omega = \frac{-10^3 \times 3 \times 10^{10}}{4 \times 3.14 \times 2.65 \times 10^{22} \times 4.8 \times 10^{-10}}$$

$$\approx -0.18\text{cycles/sec}.$$

5. 球体的等离子体振荡量子模. 一个球体的均匀等离子体振荡量子模的频率是由球的退极化电场 $\mathbf{E} = -4\pi\mathbf{P}/3$ 来决定的，极化强度 $\mathbf{P} = -ne\mathbf{r}$，$\mathbf{r}$ 是浓度为 n 的电子的平均位移. 从 $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ 出发，证明电子气体的共振频率为 $\omega_0^2 = 4\pi ne^2/3m$. 因为所有电子都参与振荡，所以这种激发称为电子气体的集体激发或集体模.

〈解〉

浓度为 n 的电子气体的运动方程（不考虑碰撞）为

$$nm\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -ne\mathbf{E} = \frac{4\pi}{3}ne\mathbf{P}. \qquad (1)$$

因 $\mathbf{P} = -ne\mathbf{r}$，上式可改写为

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{4\pi}{3}ne^2\mathbf{r}$$

或
$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} + \omega_0^2\mathbf{r} = 0, \tag{2}$$

其中
$$\omega_0^2 = \frac{4\pi ne^2}{3m}. \tag{3}$$

这是频率为 ω_0 的谐振子的运动方程。因而由退极化场所决定的等离子振荡频率由（3）式给出。

6. 磁等离子体振荡频率。 用本章问题 5 的方法，求在均匀静磁场 **B** 中一个球体的均匀等离子体振荡量子模的频率。令 **B** 沿 Z 轴。在某一极限下其解导至回旋频率 $-\omega_c = -eB/mc$，在另一极限下变为 $\omega_0 = (4\pi ne^2/3m)^{1/2}$。设运动是在 $x-y$ 平面上进行的。

〈解〉

仿照第 5 题的方法，电子气体的运动方程为

$$mn\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \frac{4\pi ne}{3}\mathbf{P} - \frac{ne}{c}\frac{d\mathbf{r}}{dt}\times\mathbf{B}. \tag{1}$$

设 $\mathbf{B} = B\hat{Z}$，同时 $\mathbf{P} = -ne\mathbf{r}$，则（1）式可写成

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -\omega_0^2\mathbf{r} - \omega_c\frac{d\mathbf{r}}{dt}\times\hat{Z}, \tag{2}$$

其中
$$\omega_0^2 = \frac{4\pi ne^2}{3m}, \qquad \omega_c = \frac{eB}{mc}.$$

将（2）式写为分量形式并假定 **r** 按 $e^{-i\omega t}$ 的规律随时间变化，若只考虑 x—y 平面上的运动，则得到

$$(\omega^2 - \omega_0^2)x + i\omega\omega_c y = 0, \tag{3}$$

$$-i\omega\omega_c x + (\omega^2 - \omega_0^2)y = 0. \tag{4}$$

由 x，y 的系数行列式为零的条件

$$\begin{vmatrix} \omega^2-\omega_0{}^2 & i\omega\omega_c \\ -i\omega\omega_c & \omega^2-\omega_0{}^2 \end{vmatrix}=0$$

解出：

$$\omega=\frac{1}{2}\omega_c\pm\frac{1}{2}\left[\omega_c{}^2+4\omega_0{}^2\right]^{\frac{1}{2}}. \qquad (5)$$

当磁场 B 很强，$\omega_c\gg\omega_0$时，由上式可近似得到 $\omega\approx\omega_c$，这是回旋共振频率。

相反，若磁场很弱，$\omega_0\gg\omega_c$ 时，由（5）式可得

$$\omega=\omega_0=\left(\frac{4\pi ne^2}{3m}\right)^{\frac{1}{2}}. \qquad (6)$$

7．小波矢处的光学支 (*a*) 当计及 $\varepsilon(\infty)$ 时，原书302页(52)变成什么形式？(*b*) 证明(51)式在小波矢时的解为 $\omega=cK/\sqrt{\varepsilon(0)}$，这是在折射率 $n^2=\varepsilon$ 的晶体中所预期的光子的色散关系。

〈解〉

(*a*) 若考虑到 $\varepsilon(\infty)$，$D=\varepsilon(\infty)E+4\pi P$，于是(49)、(50)两式应改为

$$c^2K^2E=\omega^2[\varepsilon(\infty)E+4\pi P], \qquad (1)$$

$$-\omega^2P+\omega_T{}^2P=\frac{Nq^2}{M}E. \qquad (2)$$

欲使 E，P 有非零解的条件是其系数行列式为零，即

$$\begin{vmatrix} \varepsilon(\infty)\omega^2-c^2K^2 & 4\pi\omega^2 \\ \frac{Nq^2}{M} & \omega^2-\omega_T{}^2 \end{vmatrix}=0, \qquad (3)$$

由此解出：

$$\omega^2=\frac{1}{2}\left[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}+\omega_T{}^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\right]\pm\frac{1}{2}\left\{\left[\frac{c^2k^2}{\varepsilon(\infty)}+\omega_T{}^2\right.\right.$$

$$+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big]^2-\frac{4c^2K^2\omega_T^2}{\varepsilon(\infty)}\Big\}^{\frac{1}{2}}, \qquad (4)$$

式中$\Omega^2=4\pi Np^2/M$。将（2）式代入（1）式可解出

$$\frac{c^2K^2}{\omega^2}=\varepsilon(\omega)=\varepsilon(\infty)+\frac{\Omega^2}{\omega_T^2-\omega^2}. \qquad (5)$$

$$\therefore\quad \varepsilon(0)=\varepsilon(\infty)+\frac{\Omega^2}{\omega_T^2}. \qquad (6)$$

(b)　当$K\ll 1$时，（4）式可近似写为

$$\omega^2\approx\frac{1}{2}\Big[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}+\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big]$$
$$\pm\frac{1}{2}\Big\{\Big(\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big)^2-\frac{2c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}\Big(\omega_T^2-\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big)\Big\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx\frac{1}{2}\Big[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}+\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big]$$
$$\pm\Big\{\Big(\frac{1}{2}\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big)-\frac{c^2K^2}{2\varepsilon(\infty)}\Big(\frac{\omega_T^2-\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}}{\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}}\Big)\Big\}$$

$$=\frac{1}{2}\Big[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}+\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big]\pm\Big\{\frac{1}{2}\Big(\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}$$
$$+\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big)$$
$$-\frac{c^2K^2}{2\varepsilon(\infty)}\Big[1+\frac{\omega_T^2-\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}}{\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}}\Big]\Big\}$$

$$=\frac{1}{2}\Big[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}+\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big]\pm\Big\{\frac{1}{2}\Big[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}$$
$$+\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}\Big]-\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)}\cdot\frac{\omega_T^2}{\omega_T^2+\frac{\Omega^2}{\varepsilon(\infty)}}\Big\}$$

利用（6）式，上式可写为

$$\omega^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)} + \frac{\varepsilon(0)\omega_T^2}{\varepsilon(\infty)}\right] \pm \left\{\frac{1}{2}\left[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)} + \frac{\varepsilon(0)\omega_T^2}{\varepsilon(\infty)}\right] - \frac{C^2K^2}{\varepsilon(0)}\right\} \tag{7}$$

$$= \begin{cases} \left[\frac{c^2K^2}{\varepsilon(\infty)} + \frac{\varepsilon(0)\omega_T^2}{\varepsilon(\infty)} - \frac{c^2K^2}{\varepsilon(0)}\right], & \text{取+号;} \\ \frac{C^2K^2}{\varepsilon(0)}, & \text{取-号.} \end{cases} \tag{8}$$

因为晶体的折射率$n(\omega) = \frac{cK}{\omega}$，所以 $n^2(\omega) = \frac{c^2K^2}{\omega^2}$。由（5）式可见，$n^2(\omega) = \frac{c^2K^2}{\omega^2} = \varepsilon(\omega) = \varepsilon(\infty) + \frac{\Omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2}$。当 $\omega = 0$ 时，$n^2(0) = \varepsilon(0) = \varepsilon(\infty) + \frac{\Omega^2}{\omega_T^2}$。因此，（8）式的负解 $\omega^2 = \frac{c^2K^2}{\varepsilon(0)} = c^2K^2/n^2$。这说明 $\omega = cK\sqrt{\varepsilon(0)}$ 是折射率为 $n^2 = \varepsilon$ 的晶体的光子色散关系。

8．等离子体频率与电导率。最近由光学研究发现，有机导体具有的等离子体频率为 $\omega_p = 1.30 \times 10^{15}S^{-1}$，而室温下的电子弛豫时间为 $\tau = 2.83 \times 10^{-15}S$。（a）利用这些数据计算电导率。载流子质量是不知道的，这里不需要它。取 $\varepsilon(\infty) = 1$。将结果变为$(\Omega cm)^{-1}$单位。(b)由晶体结构与化学结构的分析，得到传导电子的浓度为$4.7 \times 10^{21}cm^{-3}$。计算电子的有效质量 m*。

〈解〉

(a)　取 $\varepsilon(\infty) = 1$，则 $\omega^2{}_p = 4\pi ne^2/m^*$，电导率为

$$\sigma(\infty)=\frac{ne^2\tau}{m^*}=\frac{\omega_p^2\tau}{4\pi}$$

$$=\frac{(1.30)^2\times10^{30}\times2.83\times10^{-16}}{4\pi}$$

$$\approx3.8\times10^{14}\mathrm{S}^{-1},$$

在静电单位中 σ 的单位为S^{-1}，换为实用单位时应除以因子 9×10^{11}，即

$$\sigma=\frac{3.8\times10^{14}}{9\times10^{11}}\approx4\times10^2(\Omega\mathrm{cm})^{-1}.$$

(*b*)　若 $n=4.7\times10^{21}\mathrm{cm}^{-3}$，则

$$m^*=\frac{4\pi ne^2}{\omega_p^2}$$

$$=\frac{4\pi\times4.7\times10^{21}\times(4.8\times10^{-10})^2}{(1.30\times10^{15})^2}$$

$$\approx8.05\times10^{-27}\mathrm{g}.$$

电子质量 $m=9.1\times10^{-28}\mathrm{g}$，所以 $m^*/m\approx8.8$。

9．费米气体的体模量。证明在绝对零度下动能对电子气体体模量的贡献为 $B=\frac{1}{3}nmv_F^2$。

〈解〉

已知 $T=0\mathrm{K}$时弗米气体的平均能量及弗米能为

$$E=\frac{3}{5}N\varepsilon_F,\quad \varepsilon_F=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}.$$

所以体模量为

$$B=V\frac{d^2E}{dV^2}=\frac{3}{5}NV\frac{d^2\varepsilon_F}{dV^2}$$

$$= \frac{2}{3} NV \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 N)^{\frac{2}{3}} V^{-(\frac{2}{3}+2)}$$

$$= \frac{2}{3} \frac{N}{V} \varepsilon_F = \frac{1}{3} nmv_F^2, \qquad (1)$$

在可压缩流体中，如果我们略去吸引相互作用，其声速可以写成$v = (B/\rho)^{1/2}$，将（1）代入得：

$$v = \left(\frac{1}{3} nmv_F^2/\rho\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{m}{3M}\right)^{1/2} v_F, \qquad (2)$$

其中M为金属的离子质量。这个结果与原书301页由介电函数求得的金属中纵声子的传播速度（46）式相一致。

10. 电子气体的响应。 在某些电磁学的书中有时有如下的错误论述："静态电导率σ，它在高斯单位制中具有频率的量纲，是度量金属对于突然作用的电场的响应频率。"试论证这种说法对于室温下的铜是不正确的。铜的电阻率$\sim 1\mu\Omega\cdot cm$；电子浓度$8\times10^{22}cm^{-3}$；平均自由程$\sim 400A$；弗米速度为$1.6\times10^{8}cm\cdot s^{-1}$。这里不需用到这些数据的全部。试给出与本问题有关的三个频率σ、ω_p和$1/\tau$的数量级。建立并求解体系对于电场$E(t<0)=0$，$E(t>0)=1$的响应$x(t)$所满足的方程式。体系为一铜片，电场垂直于铜片平面。计入阻尼项，用初等方法求解微分方程。

〈解〉

金属中的电子气体在电场作用下达到新的稳定态，这一过程的快慢是用弛豫时间τ来度量的，$1/\tau$可以看成是金属对于外电场的响应频率。就室温下的铜来说，$1/\tau$、σ和ω_p这三个频率的数量级为：

$$\frac{1}{\tau} \approx \frac{v_F}{L} = \frac{1.6\times10^{8}}{4\times10^{2}\times10^{-8}} = 4\times10^{13}s^{-1},$$

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = 10^6\ (\Omega - \mathrm{cm})^{-1}$$

$$= 10^6 \times 9 \times 10^{11} = 9 \times 10^{17}\mathrm{s}^{-1},$$

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi\sigma}{\tau}\right)^{\frac{1}{2}} = (4\pi \times 4 \times 10^{13} \times 9 \times 10^{17})^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx 2 \times 10^{16}\mathrm{s}^{-1}.$$

它们的数量级均不相同，σ 比 $1/\tau$ 大 4 个数量级，所以不能把 σ 看作是铜对于电场的响应频率。

考虑一薄铜片，在垂直于铜片的方向加电场 E，则电子气体相对于均匀正电荷背景发生位移 x，在铜片表面产生面电荷密度 nex，因而产生与 E 的方向相反的电场 $4\pi nex$，x 满足以下微分方程：

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{m}{\tau}\frac{dx}{dt} = e(E - 4\pi nex)$$

或写为

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{1}{\tau}\frac{dx}{dt} + \omega_p^2 x = \frac{eE}{m}, \qquad (1)$$

其中

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi ne^2}{m}, \qquad (2)$$

$$E = \begin{cases} 1, & \text{当 } t > 0; \\ 0, & \text{当 } t < 0. \end{cases} \qquad (3)$$

（1）式为非齐次线性方程，其齐次方程为

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{1}{\tau}\frac{dx}{dt} + \omega_p^2 x = 0, \qquad (4)$$

由于 $\omega_p \gg \frac{1}{\tau}$，所以（4）式的通解为

$$x(t)=e^{-t/2\tau}\left[Ae^{i(\omega_p^2-1/4\tau^2)^{1/2}t}+Be^{-i(\omega_p^2-1/4\tau^2)^{1/2}t}\right]$$

$$\approx e^{-t/2\tau}(Ae^{i\omega_p t}+Be^{-i\omega_p t}). \qquad (5)$$

（1）式有特解

$$x=\frac{eE}{m\omega_p^2}=\frac{e}{m\omega_p^2} \quad (t>0\text{ 时}),$$

故（1）式的通解为

$$x(t)=\frac{e}{m\omega_p^2}+e^{-t/2\tau}\left[Ae^{i(\omega_p^2-1/4\tau^2)^{1/2}t}+Be^{-i(\omega_p^2-1/4\tau^2)^{1/2}t}\right]$$

$$\approx\frac{e}{m\omega_p^2}+e^{-t/2\tau}(Ae^{i\omega_p t}+Be^{-i\omega_p t}). \qquad (6)$$

系数 A 和 B 由起始条件决定，但从（6）式可以看出，只要 τ 很小，$x(t)$ 将很快趋向于稳定值 $e/m\omega^2_p$，这一过程的快慢取决于 τ 的大小。

11．间隙等离子体振荡量子与范德瓦耳斯相互作用。 设有两个表面在 $Z=0$，d 处的半无限介质。介电函数都为 $\varepsilon(\omega)$。证明相对于间隙对称的表面等离子体振荡量子频率必定满足 $\varepsilon(\omega)=-\tanh(Kd/2)$，其中 $K^2=k_x^2+k_y^2$。电势将具有

$$\varphi=f(z)\exp(ik_x x+ik_y y-i\omega t)$$

的形式。求非推迟解——也就是 Laplace 方程而不是波动方程的解。全部能隙模的零点能之和就是两个样品之间的范德瓦耳斯吸引能的非推迟部分。

〈解〉

两个介质中满足静电方程：

$$\nabla\cdot\mathbf{D}=0,\quad \nabla\times\mathbf{E}=0. \tag{1}$$

为了求间隙内的表面等离子体模，只需考虑

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=0,\quad \nabla\times\mathbf{E}=0 \tag{2}$$

的情形。引入静电势 φ，则 $\mathbf{E}=-\nabla\varphi$，$\varphi$ 满足 Laplace 方程

$$\nabla^2\varphi=0. \tag{3}$$

设 φ 有如下的形式

$$\varphi=f(z)e^{i(k_xx+k_yy-\omega t)}, \tag{4}$$

代入（3）式得到 $f(z)$所满足的方程

$$\frac{d^2f}{dz^2}-K^2f=0, \tag{5}$$

其中 $K^2=k_x^2+k_y^2$。（5）式的解为

$$\left.\begin{aligned} f_1(z)&=Ae^{Kz},\quad (z\leqslant 0)\\ f_2(z)&=Be^{-Kz},\quad (z\geqslant d)\\ f(z)&=Ce^{-Kz}+De^{Kz},\quad (0\leqslant z\leqslant d). \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

代入（4）式得1，2两介质内及间隙中的 φ 为

$$\left.\begin{aligned} \varphi_1&=Ae^{Kz}e^{i(k_xx+k_yy-\omega t)},\\ \varphi_2&=Be^{-Kz}e^{i(k_xx+k_yy-\omega t)},\\ \varphi&=(Ce^{-Kz}+De^{Kz})e^{i(k_xx+k_yy-\omega t)}. \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

它们应满足边界条件：φ 和 $\varepsilon(\omega)\frac{\partial\varphi}{\partial z}$ 在 $z=0$，d 处连续。于是得到

$$\left.\begin{aligned} A&=C+D,\quad \varepsilon(\omega)A=-C+D;\\ B&=C+De^{2Kd},\quad \varepsilon(\omega)B=C-De^{2Kd}. \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

或写为

$$\left.\begin{aligned}&[\varepsilon(\omega)+1]C+[\varepsilon(\omega)-1]D=0,\\&[\varepsilon(\omega)-1]e^{-2Kd}C+[\varepsilon(\omega)+1]D=0.\end{aligned}\right\}\tag{9}$$

C，D 有非零解的条件是其系数行列式为零，即

$$\begin{aligned}\Delta(K,d)&=\begin{vmatrix}\varepsilon(\omega)+1, & \varepsilon(\omega)-1\\ [\varepsilon(\omega)-1]e^{-2Kd}, & \varepsilon(\omega)+1\end{vmatrix}\\&=[\varepsilon(\omega)+1]^2\left\{1-\left[\frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+1}\right]^2e^{-2Kd}\right\}\\&=0.\end{aligned}\tag{10}$$

由此解出

$$\left[\frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+1}\right]^2=e^{2Kd},\tag{11}$$

或

$$\begin{aligned}\varepsilon(\omega)&=\frac{1\pm e^{Kd}}{1\mp e^{Kd}}\\&=\frac{e^{-Kd/2}\pm e^{Kd/2}}{e^{-Kd/2}\mp e^{Kd/2}}\\&=\begin{cases}-\coth(Kd/2),\\-\tanh(Kd/2),\end{cases}\end{aligned}\tag{12}$$

即间隙中表面等离子体模的频率$\omega(K)$必须满足（11）或（12）式。

由（10）、（11）或（12）式解出所有的模频率，就可以计算零点能

$$E(d)=\sum_K\frac{1}{2}\hbar\omega(K)\tag{13}$$

再减去当$d\to\infty$时的零点能，就是$T=0K$时两介质的单位面积范德瓦耳斯相互作用能$U(d)$，即

$$U(d)=E(d)-E(d\to\infty)$$

$$= \sum_K \left[\frac{1}{2}\hbar\omega(K)\right]_\infty^d. \tag{14}$$

为了计算 $U(d)$，可以利用复变函数理论中一个熟知的公式

$$\sum_m \omega_m - \sum_n \omega_n = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \omega \frac{d}{d\omega}\ln G(\omega)d\omega, \tag{15}$$

其中 ω_m, ω_n 分别为函数 $G(\omega)$ 在围线 c 以内区域中的零点与极点，对 m，n 求和分别取遍全部零点与极点．如果选择 $G(\omega)$ 为

$$G(\omega) = \frac{\Delta(K, d)}{\Delta(K, \infty)}$$

$$= 1 - \left[\frac{\varepsilon(\omega)-1}{\varepsilon(\omega)+1}\right]^2 e^{-2Kd}, \tag{16}$$

则 $G(\omega)$ 的零点和极点就分别给出满足（10）式的介质相距为 d 及 $d\to\infty$ 时间隙中等离子体模频率．于是（14）式就可以表示为

$$U(d) = \sum_K \frac{1}{2}\hbar\left[\sum_m \omega_m(K) - \sum_n \omega_n(K)\right]$$

$$= \sum_K \frac{\hbar}{4\pi i}\oint_C d\omega\omega\frac{d}{d\omega}\ln G(\omega), \tag{17}$$

围线 C 沿虚轴及复平面的右边半圆．因为 $\omega\to\infty$ 时，$\varepsilon(\omega)\to 1$，$G(\omega)\to 1$，所以当圆半径 $R\to\infty$ 时，沿无限大半圆积分为零，只需计算沿虚轴的积分即可，于是

$$U(d) = \sum_K \frac{\hbar}{4\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty}\omega\frac{d}{d\omega}\ln G(\omega)d\omega$$

$$= -\sum_K \frac{\hbar}{4\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty}\ln G(\omega)d\omega$$

$$= -\sum_K \frac{\hbar}{2\pi}\int_0^\infty \ln G(i\omega)d\omega.$$

将对 K 的求和换为积分

$$\sum_{K} = \sum_{k_x, k_y} \to \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty K dK,$$

就得到：

$$U(d) = -\frac{\hbar}{4\pi^2}\int_0^\infty K dK \int_0^\infty d\omega \ln G(i\omega)$$

$$= -\frac{\hbar}{4\pi^2}\int_0^\infty K dK \int_0^\infty d\omega \ln\left\{1 - \left(\frac{\varepsilon(i\omega) - 1}{\varepsilon(i\omega) + 1}\right)^2 e^{-2Kd}\right\}. \quad (18)$$

这就是两介质间的范德瓦耳斯相互作用能的非推迟部分。

第十一章　光学过程与激子

1．因果关系与响应函数． Kramers—Kronig 关系是与结果不能先于其原因这一原理一致的．设在 $t=0$ 时有 δ 函数力的作用

$$F(t)=\delta(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega t}d\omega,$$

从而 $F_\omega=\frac{1}{2\pi}$．(a)由直接积分或用 KK 关系证明振子响应函数

$$\alpha(\omega)=(\omega_0{}^2-\omega^2-i\omega\rho)^{-1},$$

在这种力的作用下 $t<0$ 时给出零位移，$x(t)=0$．对于 $t<0$，回路积分可在上半平面的半圆进行．(b) 计算 $t>0$ 时的 $x(t)$．注意 $\alpha(\omega)$ 在 $\pm(\omega_0{}^2-\frac{1}{4}\rho^2)^{\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}i\rho$ 处有极点，都在下半平面．

〈解〉

(a) 在力 $F(t)$ 的作用下位移 $x(t)$ 只依赖于 F 在 t 之前的值，即

$$x(t)=\int K(\tau)F(t-\tau)d\tau,\qquad(1)$$

式中 K 是一个与介质性质有关的时间函数，其 Fourier 分量 $\alpha(\omega)$ 就是响应函数

$$\alpha(\omega)=\int K(\tau)e^{i\omega\tau}d\tau.\qquad(2)$$

若 $F(t)=\delta(t)$，则

$$x(t)=\int_0^\infty K(\tau)\delta(t-\tau)d\tau=K(t)$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega t}\alpha(\omega)d\omega.\qquad(3)$$

对于

$$a(\omega)=(\omega_0{}^2-\omega^2-i\omega\rho)^{-1}, \qquad (4)$$

代入（3）式得：

$$x(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-i\omega t}}{\omega_0{}^2-\omega^2-i\omega\rho}d\omega. \qquad (5)$$

当 $t<0$ 时，上式被积函数在上半平面内无极点，故积分为零，即 $x(t)=0$。

(*b*) 当 $t>0$ 时，（5）式被积函数在下半平面 $\omega=\pm(\omega_0{}^2-\frac{1}{4}\rho^2)^{\frac{1}{2}}-\frac{1}{2}i\rho$ 处有二个极点。积分路线可取下半平面无限大半圆，积分值等于这二个极点的残数之和的 $2\pi i$ 倍，于是由（5）式得

$$x(t)=-i\left\{\frac{e^{-i[(\omega_0^2-\rho^2/4)^{1/2}-i\rho/2]t}}{2(\omega_0^2-\rho^2/4)^{1/2}}\right.$$

$$\left.+\frac{e^{i[(\omega_0^2-\rho^2/4)^{1/2}+i\rho/2]t}}{2(\omega_0^2-\rho^2/4)^{1/2}}\right\}$$

$$=-\frac{e^{-\rho t/2}\sin(\omega_0^2-\rho^2/4)t}{(\omega_0^2-\rho^2/4)^{1/2}};$$

2．耗散求和规则. 在 $\omega\to\infty$ 的极限下比较（9）与（11*a*）式的 $a'(\omega)$，证明振子强度必定满足以下求和规则：

$$\sum f_i=\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}s\alpha''(s)ds.$$

〈解〉

振子体系的响应函数为

$$\alpha(\omega)=\sum_j f_j\frac{\omega_j^2-\omega^2+i\omega\rho_j}{(\omega_j^2-\omega^2)^2+\omega^2\rho_j^2}$$

$$=\alpha'(\omega)+i\alpha''(\omega), \qquad (1)$$

$$\therefore\alpha'(\omega)=\sum_j f_j\frac{\omega_j^2-\omega^2}{(\omega_j^2-\omega^2)^2+\omega^2\rho_j^2}, \qquad (2)$$

与Kramers—Kronig 关系

$$\alpha'(\omega)=\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty\frac{s\alpha''(s)ds}{s^2-\omega^2}$$

比较，得到等式：

$$\sum_j f_j\frac{\omega_j^2-\omega^2}{(\omega_j^2-\omega^2)^2+\omega^2P_j^2}=\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty\frac{s\alpha''(s)ds}{s^2-\omega^2}. \qquad (3)$$

（3）式改写成

$$\sum_j f_j\frac{(\frac{\omega_j^2}{\omega^2}-1)}{(\frac{\omega_j^2}{\omega^2}-1)^2+\frac{P_j^2}{\omega^2}}=\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty\frac{s\alpha''(s)ds}{(\frac{s^2}{\omega^2}-1)},$$

两边对 $\omega\to\infty$取极限，即得振子强度所满足的求和规则

$$\sum_j f_j=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty s\alpha''(s)ds. \qquad (4)$$

3．垂直入射时的反射。设真空中一电磁波具有

$$E_y(inc)=B_Z(inc)=Ae^{i(kx-\omega t)}$$

形式的场分量。这个波入射到填满半空间 $x>0$的介电常数为 e、导磁率 $\mu=1$ 的介质上。证明由 $E(refl)=r(\omega)E(inc)$所定义的反射系数 $r(\omega)$为

$$r(\omega)=\frac{1-(n+iK)}{1+(n+iK)},$$

式中 $n+iK=\varepsilon^{1/2}$，n 与 K 为实数。进而证明反射率为

$$R(\omega)=\frac{(n-1)^2+K^2}{(n+1)^2+K^2}.$$

〈解〉

由 Maxwell 方程

$$\nabla\times\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t},\qquad \nabla\cdot\mathbf{D}=0,$$

$$\nabla\times\mathbf{H}=\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t}+\frac{4\pi}{c}\tau,\qquad \nabla\cdot\mathbf{B}=0. \tag{1}$$

得 $$\nabla\mathbf{E}-\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2}=\frac{4\pi\sigma}{c^2}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}.$$

设电磁波沿 x 方向传播，则

$$E_y=E_y^0e^{i(kx-\omega t)}. \tag{2}$$

代入（1）式解出。

$$\frac{c^2k^2}{\omega^2}=\varepsilon+i\frac{4\pi\sigma}{\omega}. \tag{3}$$

令 $$\frac{ck}{\omega}=n+iK, \tag{4}$$

n 为折射率，K 为消光系数，将（4）代入（3）式，得 n, K 与 ε，σ 的关系：

$$\left.\begin{aligned}n^2-K^2&=\varepsilon,\\2nK&=\frac{4\pi\sigma}{\omega}.\end{aligned}\right\} \tag{5}$$

在 $x\geqslant0$ 的区域内全部填满介电常数为 ε 的介质，介质内电场分量由（4）代入（2）式给出

$$E_y=E_y^0e^{i\omega\left(\frac{n}{c}x-t\right)}e^{-\frac{k\omega}{c}x}; \tag{6}$$

相应的磁场分量为

$$B_z = (n+iK)E_y^0 e^{i\omega\left(\frac{n}{c}x-t\right)}e^{-\frac{K}{c}\omega x}. \tag{7}$$

在 $x<0$ 的空间中电磁波为入射波与反射波的迭加：

$$E_y^v = E_i e^{i\omega\left(\frac{x}{c}-t\right)} + E_r e^{-i\omega\left(\frac{x}{c}+t\right)}, \tag{8}$$

$$B_z^v = E_i e^{i\omega\left(\frac{x}{c}-t\right)} - E_r e^{-i\omega\left(\frac{x}{c}+t\right)}. \tag{9}$$

在表面 $x=0$ 处，应满足连续条件

$$E_y = E_y^v, \quad B_z = B_z^v. \tag{10}$$

将（6）、（7）、（8）、（9）代入（10）式，令 $x=0$，即得

$$E_y^0 = E_i + E_r,$$

$$(n+iK)E_y^0 = E_i - E_r.$$

$$\therefore \quad r(\omega) \simeq \frac{E_r}{E_i} = \frac{1-(n+iK)}{1+(n+iK)},$$

$$R = \left|\frac{E_r}{E_i}\right|^2 = \frac{(n-1)^2+K^2}{(n+1)^2+K^2}.$$

4．电导率求和规则与超导电性。我们将电导率写为 $\sigma(\omega)=\sigma'(\omega)+i\sigma''(\omega)$，$\sigma'$，$\sigma''$ 为实数。(a) 用 Kramers—Kronig 关系证明

$$\lim_{\omega\to\infty}\omega\sigma''(\omega) \simeq \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \sigma'(s)ds.$$

这结果在超导理论中是有用的。如果在非常高的频率（例如 x 射线频率）下，$\sigma''(\omega)$对于超导态与正常态是相同的，则必有

$$\int_0^\infty \sigma_s'(\omega)d\omega = \int_0^\infty \sigma_n'(\omega)d\omega.$$

但当频率在超导能隙范围内$0<\omega<\omega_g$时，超导体电导率的实部为零，所以在此频率范围内左边积分降低了$\approx\sigma_n'\omega_g$，这必须对 σ_s'

有一附加的贡献，以补偿这一损失。（b）证明如果 $\sigma_s'(\omega>\omega_g)<\sigma_n'(\omega>\omega_g)$，正如实验所观察到的，则 $\sigma_s'(\omega)$ 在 $\omega=0$ 处的贡献为 $-\sigma$ 函数，同时这 σ 函数对 σ_s'' 的贡献为 $\sigma_s''(\omega)\approx\sigma_n'\omega_g/\omega$。在零频率处，$\sigma$ 函数对应于无穷大电导率。（c）在非常高频率下，从对传导电子经典运动的初步考虑，证明

$$\int_0^\infty \sigma'(\omega)d\omega = \pi ne^2/2m.$$

这是Ferrell与Glover 所发现的结果。

〈解〉

（a） 若导电率写为

$$\sigma(\omega)=\sigma'(\omega)+i\sigma''(\omega),$$

则根据Kramers—Kronig关系有

$$\sigma''(\omega) = -\frac{2}{\pi}\omega P\int_0^\infty \frac{\sigma'(\omega')d\omega'}{\omega'^2-\omega^2}$$

$$P=\frac{2}{\pi}\frac{1}{\omega}\int_0^\infty \frac{\sigma'(\omega')d\omega'}{\left[1-\left(\frac{\omega'}{\omega}\right)^2\right]}.$$

$$\therefore \lim_{\omega\to\infty}\omega\sigma''(\omega)=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \sigma'(\omega')d\omega'. \qquad (1)$$

（b）在非常高的频率下超导态与正常态的 $\sigma''(\omega)$ 相等，则由（1）式得

$$\int_0^\infty \sigma_s'(\omega)d\omega=\int_0^\infty \sigma_n'(\omega)d\omega, \qquad (2)$$

这里指标 s 和 n 分别表示超导态和正常态。上式表示 $\sigma'(\omega)$ 曲线下的面积是不变的。但实验表明，当频率低于能隙频率 $\omega<\omega_g$ 时，$\sigma_s'=0$；当 $\omega>\omega_g$ 时，$\sigma_s'<\sigma_n'$，如图11—1 所示，$\sigma_s'(\omega)$ 与 $\sigma_n'(\omega)$ 曲线下的面积不再相等，$\sigma_s'(\omega)$ 曲线失去的面积 A 可以近似表示为

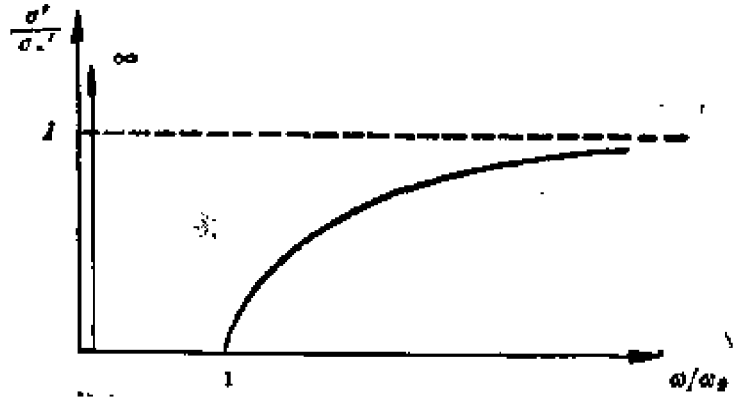


图11—1 $\frac{\sigma_s'}{\sigma_n'} \sim \frac{\omega}{\omega_g}$ 的关系曲线

$$A = \int_0^\infty [\sigma_n'(\omega) - \sigma_s'(\omega)]d\omega$$

$$\approx \sigma_n' \int_0^{\omega_g} [1 - \frac{\sigma_s'}{\sigma_n'}]d\omega$$

$$\approx \sigma_n' \omega_g. \qquad (3)$$

但要满足求和规则（2），$\sigma_s'(\omega)$中需要加上一个修正项以补偿所损失的面积 A，即

$$\int_0^\infty [\sigma_s'(\omega) + \Delta\sigma_s'(\omega)]d\omega = \int_0^\infty \sigma_n'(\omega)d\omega,$$

其中 $\int_0^\infty \Delta\sigma_s'(\omega)d\omega = A,$

因此 $\Delta\sigma_s'$ 可以表示为 $\Delta\sigma_s'(\omega) = A\sigma(\omega)$。这就说明，尽管 σ_s' 在 $\omega < \omega_g$ 时为零，但在 $\omega = 0$ 时的贡献为一 δ 函数。根据 Kramers—Kronig 关系可求出它对 σ_s'' 的贡献为

$$\sigma_s''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}\int_0^\infty \frac{A\sigma(\omega')d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}$$

$$= \frac{2A}{\pi\omega} = \frac{2\sigma_n'\omega_g}{\pi\omega} \approx \frac{\sigma_n'\omega_g}{\omega}.$$

(c) 在电场 E 作用下电子的经典运动方程为

$$m\frac{d^2x}{dt^2}+\frac{m}{\tau}\frac{dx}{dt}=-eE. \tag{4}$$

设 x 和 E 均含时间因子 $e^{-i\omega t}$，则

$$m\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)\dot{x}=-eE. \tag{5}$$

电流密度为

$$J=-ne\dot{x}=\frac{ne^2}{m}\frac{E}{\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)}$$

$$=\sigma(\omega)E, \tag{6}$$

其中

$$\sigma(\omega)=\frac{ne^2}{m}\frac{1}{\left(-i\omega+\frac{1}{\tau}\right)}=\sigma'(\omega)+i\sigma''(\omega). \tag{7}$$

而

$$\sigma'(\omega)=\frac{ne^2\tau}{m(1+\omega^2\tau)},\quad \sigma''(\omega)=\frac{ne^2\omega\tau^2}{m(1+\omega^2\tau^2)}. \tag{8}$$

在频率非常高时，利用（1）式得

$$\int_0^\infty\sigma'(\omega)d\omega=\frac{\pi}{2}\lim_{\omega\to\infty}\omega\sigma''(\omega)$$

$$=\lim_{\omega\to\infty}\frac{\pi}{2}\cdot\frac{ne^2}{m}\cdot\frac{\omega^2\tau^2}{1+\omega^2\tau^2}$$

$$=\frac{\pi ne^2}{2m}. \tag{9}$$

5．介电常数与半导体能隙。 半导体中能隙 ω_g 对 $\varepsilon''(\omega)$ 的影响可以非常粗略地用 $\frac{1}{2}\delta(\omega-\omega_g)$ 代替响应函数（15）中的 $\delta(\omega)$ 来表示，也就是说，我们取 $\varepsilon''(\omega)=(2\pi ne^2/m\omega)\pi\delta(\omega-\omega_g)$。之所以不准确是由于认为全部吸收都发生在能隙频率处。把 δ 函

数移离原点，就会引入$\frac{1}{2}$的因子，因在问题2的求和规则中的积分是从原点开始的。证明基于此模型的介电常数的实部为

$$\varepsilon'(\omega)=1+\omega_p^2/(\omega_g^2-\omega^2),\quad \omega_p^2=4\pi ne^2/m.$$

由此得到静态介电常数为$\varepsilon'(0)=1+\omega_p^2/\omega_g^2$，它作为经验规律被广泛应用。

〈解〉

已知$\varepsilon''(\omega)$与$\alpha''(\omega)$的关系为

$$\varepsilon''(\omega)=4\pi ne^2\alpha''(\omega)。$$

如果用$\frac{1}{2}\delta(\omega-\omega_g)$代替

$$\alpha(\omega)=-\frac{1}{m\omega}\left[\frac{1}{\omega}-i\pi\delta(\omega)\right]$$

中的$\delta(\omega)$，则

$$\varepsilon''(\omega)=\frac{2\pi^2ne^2}{m\omega}\delta(\omega-\omega_g)。$$

利用 Kramers—Kronig 关系得

$$\begin{aligned}\varepsilon'(\omega)&=1+\frac{2}{\pi}P\int_0^\infty\frac{s\varepsilon''(s)ds}{s^2-\omega^2}\\&=1+\frac{4\pi ne^2}{m}P\int_0^\infty\frac{\delta(s-\omega_g)ds}{s^2-\omega^2}\\&=1+\frac{4\pi ne^2}{m}\frac{1}{\omega_g^2-\omega^2}\\&=1+\frac{\omega_p^2}{\omega_g^2-\omega^2},\end{aligned}$$

其中 $\omega_p^2=4\pi ne^2/m$。

6. 金属红外反射的 Hagen—Rubens 关系。对于$\omega\tau\ll1$，金

属的复数折射率 $n+iK$ 为

(CGS) $\quad \varepsilon(\omega)=(n+iK)^2=1+4\pi i\sigma_0/\omega,$

其中 σ_0 是静电场电导率. 这里我们假定带内电流是主要的，而忽略了带间的跃迁. 利用问题 3 对于垂直入射的反射系数的结果证明，如果 $\sigma_0 \gg \omega_0$，则

(CGS) $\quad R\approx 1-(2\omega/\pi\sigma_0)^{1/2}.$

这就是 Hagen—Rubens 关系. 对于室温下的 Na，在 CGS 单位制中，$\sigma_0\approx 2.1\times 10^{17}s^{-1}$，而由 $\tau=\sigma_0 m/ne^2$ 可得出 $\tau\approx 3.1\times 10^{-14}s$. 波长为 $10\mu m$ 的辐射，$\omega=1.88\times 10^{14}s^{-1}$，所以 Hagen—Rubens 关系可以应用，由此得 $R=0.976$. 而由 n 和 K 的实验值计算得到的结果为 0.987.

〈解〉

由 $\varepsilon(\omega)=(n+iK)^2=1+4\pi i\sigma_0/\omega$ 得

$$n^2-K^2=1,\quad nK=\frac{2\pi\sigma_0}{\omega}.$$

若 $\sigma_0\gg\omega$，则 $nK\gg n^2-K^2$，于是上式可近似写为

$$n^2\approx K^2\approx\frac{2\pi\sigma_0}{\omega}.$$

利用本章第 3 题的公式

$$R(\omega)=\frac{(n-1)^2+K^2}{(n+1)^2+K^2},$$

则有

$$1-R(\omega)=\frac{4n}{(n+1)^2+K^2}\approx\frac{4n}{n^2+K^2+2n}$$

$$\approx\frac{2}{n+1}\approx\frac{2}{\left(\frac{2\pi\sigma_0}{\omega}\right)^{\frac{1}{2}}+1}. \qquad (1)$$

注意到 $\sigma_0\gg\omega$，由（1）式可得

$$R \approx 1 - \left(\frac{2\omega}{\pi\sigma_0}\right)^{\frac{1}{2}}. \qquad (2)$$

7．激子谱线的达维多夫劈裂。当原胞中含有A、B两个原子时，原书338页图15中的Frenkel激子带是双重的．将方程(25)到(29)的理论推广到线性晶格$AB \cdot AB \cdot AB \cdot AB$，其中$AB$间的传递积分为$T_1$，$B \cdot A$间为$T_2$．求两个带作为波矢函数的方程。两带在$k=0$处的劈裂称为达维多夫劈裂。

〈解〉

令u_l^a，u_l^b表示第l原胞内A原子和B原子的基态波函数，而v_l^a，v_l^b表示第l原胞内A原子和B原子的激发态波函数．晶体含N个原胞有$2N$个原子，用φ_l^a，φ_l^b分别描述晶体中只有第l原胞内的A或B原子被激发而其余$2N-1$个原子均处于基态的波函数，

$$\varphi_l^a = u_1^a u_1^b \cdots u_{l-1}^a u_{l-1}^b v_l^a u_l^b u_{l+1}^a u_{l+1}^b \cdots u_N^a u_N^b, \qquad (1)$$

$$\varphi_l^b = u_1^a u_1^b \cdots u_{l-1}^a u_{l-1}^b u_l^a v_l^b u_{l+1}^a u_{l+1}^b \cdots u_N^a u_N^b. \qquad (2)$$

显然φ_l^a，φ_l^b不是体系的稳定态，由于原子的相互作用，这种激发要向其近邻原子转移，体系哈密顿对φ_l^a，φ_l^b的作用可以表示为

$$H\varphi_l^a = \varepsilon_a \varphi_l^a + T_1 \varphi_l^b + T_2 \varphi_{l-1}^b, \qquad (3)$$

$$H\varphi_l^b = \varepsilon_b \varphi_l^b + T_1 \varphi_l^a + T_2 \varphi_{l+1}^a, \qquad (4)$$

ε_a，ε_b分别为A、B原子的激发能．设

$$H\psi_k = E_k \psi_k, \qquad (5)$$

其中ψ_k可表示为φ_l^a，φ_l^b的线性组合并要求它具有Bloch波的形式。ψ_k可写为

$$\psi_k = \sum_l e^{ilka}(C_1 \varphi_l^a + C_2 \varphi_l^b), \qquad (6)$$

a为AB原子间距离。将（6）代入（5）并利用（3）和（4）就得到

$$\sum_l e^{ilka}\{C_1[\varepsilon_a\varphi_l^a + T_1\varphi_l^b + T_2\varphi_{l-1}^b]$$
$$+C_2[\varepsilon_b\varphi_l^b + T_1\varphi_l^a + T_2\varphi_{l+1}^a]\}$$
$$= E_k\sum_l e^{ilka}(C_1\varphi_l^a + C_2\varphi_l^b). \qquad (7)$$

分别用 φ_n^{a*} 和 φ_n^{b*} 乘上式两边并对晶体体积积分，利用 φ_l^a, φ_l^b 的正交性

$$\int\varphi_l^a\varphi_{l'}^b d\tau = \delta_{ab}\delta_{ll'},$$

得到

$$C_1\varepsilon_a e^{inka} + C_2[T_1 e^{inka} + T_2 e^{i(n-1)ka}] = C_1 E_k e^{inka},$$
$$C_1[T_1 e^{inka} + T_2 e^{i(n+1)ka}] + C_2\varepsilon_b e^{inka} = C_2 E_k e^{inka},$$

或写为

$$(E_k - \varepsilon_a)C_1 - (T_1 + T_2 e^{-ika})C_2 = 0,$$
$$-(T_1 + T_2 e^{ika})C_1 + (E_k - \varepsilon_b)C_2 = 0, \qquad (8)$$

欲使 C_1，C_2 有非零解，其系数行列式必为零，即

$$\begin{vmatrix} E_k - \varepsilon_a & -(T_1 + T_2 e^{-ika}) \\ -(T_1 + T_2 e^{ika}) & E_k - \varepsilon_b \end{vmatrix} = 0. \qquad (9)$$

由此解得

$$E_k = \frac{1}{2}(\varepsilon_a + \varepsilon_b) \pm \frac{1}{2}\Big\{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2$$
$$+ 4(T_1^2 + T_2^2 + 2T_1T_2\cos ka)\Big\}^{\frac{1}{2}}. \qquad (10)$$

现在激子的能量分为两个能带，在 $k = 0$ 时两带间的劈裂为

$$\Delta E = \Big\{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4(T_1 + T_2)^2\Big\}^{\frac{1}{2}}. \qquad (11)$$

若 $\varepsilon_a \approx \varepsilon_b$，则

$$\Delta E \approx 2(T_1 + T_2). \qquad (12)$$

第十二章　超 导 电 性

1．平板超导体中的磁场穿透． 穿透方程可以写为 $\lambda^2\nabla^2 B = B$，其中 λ 为穿透深度．（a）证明在厚度为 δ 并垂直于 x 轴的平板超导体内，$B(x)$为

$$B(x) = B_0\frac{\cosh(x/\lambda)}{\cosh(\delta/2\lambda)}.$$

B_0 为在平板外并平行于它的磁场．这里 $x=0$ 取在平板中心处．（b）平板中的有效磁化强度 $M(x)$由 $B(x)-B_0=4\pi M(x)$确定．证明，在CGS单位制中，对于 $\delta \ll \lambda$，$4\pi M(x) = -B_0(1/8\lambda^2)(\delta^2-4x^2)$．在SI单位制中用 μ_0 取代 4π．

〈解〉

（a）考虑一厚度为 δ 的无限平面超导平板，如图12—1所示，外加的均匀磁场沿Z轴方向．在超导体外，磁场强度为 $\mathbf{B}=B_0\mathbf{k}$；在体内 $\mathbf{B}=B(x)\,\mathbf{k}$；在表面处B连续，$B(\pm\frac{\delta}{2})=B_0$．在一维的情况下，穿透方程 $\lambda^2\nabla^2 B = B$ 变成

$$\lambda^2\frac{2^2B(x)}{2x^2} = B(x).$$

它的通解为：

$$B(x) = ae^{-x/\lambda} + be^{x/\lambda},$$

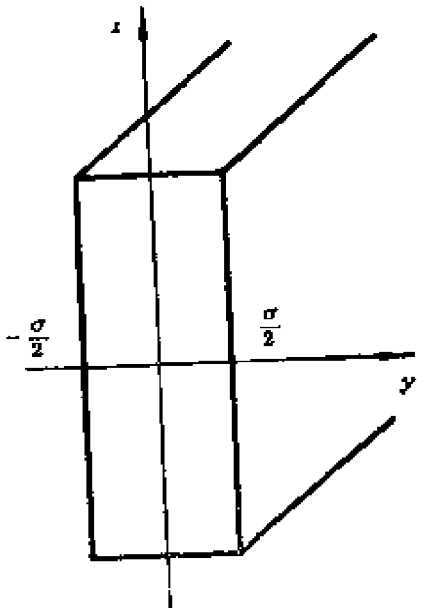


图12—1 超导体平板示意图

应用边界条件 $B(\pm\frac{\delta}{2})=B_a$，可解得

$$a=b=B_a(e^{\delta/2\lambda}+e^{-\delta/2\lambda})^{-1}.$$

于是有

$$B(x)=B_a\left(\frac{e^{x/\lambda}+e^{-x/\lambda}}{e^{\delta/2\lambda}+e^{-\delta/2\lambda}}\right)$$

$$=B_a\frac{\cosh(x/\lambda)}{\cosh(\delta/2\lambda)}.$$

(*b*) 平面内的有效磁化强度为

$$4\pi M(x)=B(x)-B_a$$

$$=B_a\left(\frac{\cosh(x/\lambda)}{\cosh(\delta/2\lambda)}\right)-1.$$

若 $\delta\ll\lambda$，即穿透深度比厚度大得多时，

$$\cosh(x/\lambda)\approx 1+\frac{x^2}{2\lambda^2},$$

$$\cosh(\delta/2\lambda)\approx 1+\frac{\delta^2}{8\lambda^2},$$

所以

$$4\pi M(x)\approx B_a\left(\frac{1+x^2/2\lambda^2}{1+\delta^2/8\lambda^2}-1\right)$$

$$=-\frac{B_a}{8\lambda^2}(\delta^2-4x^2).$$

2. 超导薄膜的临界场. (*a*) 利用问题1(*b*) 的结果，证明在 $T=0$K时厚度为 δ 的超导薄膜在外磁场 B_a 中的能量密度，当 $\delta\ll\lambda$ 时为：

(CGS) $\quad U_s(x,B_a)=U_s(0)+(\delta^2-4x^2)B_a^2/64\pi\lambda^2.$

在 SI 单位制中用$\frac{1}{4\pi}\mu_0$代替因子 π. 这里忽略了动能的贡献。(*b*) 证明磁能对 U_s 的贡献在薄膜厚度内取平均的值为 $B_a^2(\delta/\lambda)^2/96\pi$.

(*c*) 如果我们只考虑磁能对 U_s 的贡献，试证薄膜的临界磁场正比于 $(\lambda/\delta)H_c$，其中 H_c 为体临界场.

〈解〉

(*a*) 在 $T=0$K 时，略去动能的贡献，磁能密度为

$$U_S(x,B_a)=U_s(0)+\Delta U(x),$$

其中

$$\Delta U(x)=-\int_0^{B_a}M(x)dB.$$

将第一题 (*b*) 的结果代入，得到

$$\Delta U(x)=\int_0^{B_a}\frac{1}{4\pi}\frac{B}{8\lambda^2}(\delta^2-4x^2)dB$$

$$=\frac{1}{64\pi\lambda^2}B_a(\delta^2-4x^2),$$

所以 $$U_s(x,B_a)=U_s(0)+\frac{\delta^2-4x^2}{64\pi\lambda^2}B_a^2.$$

(*b*) 贡献于 U_s 的磁能在薄膜厚度范围内的平均值为

$$\overline{\Delta U}=\frac{1}{\delta}\int_{-\delta/2}^{\delta/2}\Delta U(x)dx$$

$$=\frac{1}{\delta}\int_{-\delta/2}^{\delta/2}\frac{1}{64\pi\lambda^2}B_a^2(\delta^2-4x^2)dx$$

$$=\frac{2B_a}{64\pi\delta\lambda^2}\int_0^{\delta/2}(\delta^2-4x^2)dx$$

$$=\frac{1}{96\pi}\left(\frac{\delta}{\lambda}\right)^2B_a^2.$$

(*c*) 在能量密度中若只考虑磁的贡献，则由 (*b*) 的结

果，在超导薄膜内的能量密度为

$$U_{薄} = \frac{1}{96\pi}\left(\frac{\delta}{\lambda}\right)^2 B_c^2.$$

对于大块的超导体，能量密度为

$$U_{块} = H^2/8\pi.$$

当 $H \to H_c$，$B_a \to B_{ac}$（薄膜的临界场）时，薄膜和块状超导体都变为正常态，两者的能量密度应相等，即

$$\frac{H_c^2}{8\pi} = \frac{1}{96\pi}\left(\frac{\delta}{\lambda}\right)^2 B_{ac}^2,$$

所以

$$B_{ac} = \sqrt{12}\left(\frac{\lambda}{\delta}\right)H_c.$$

因为 $\lambda \gg \delta$，故同一成份的超导体，其薄膜的临界场要比块状的高很多。

3. 超导体的二流体模型. 在超导体的二流体模型中我们假定，在 $0<T<T_c$ 的温度范围内，电流密度可以写为正常电子与超导电子的贡献之和：$\mathbf{j} = \mathbf{j}_N + \mathbf{j}_s$，其中 $\mathbf{j}_N = \sigma_0 \mathbf{E}$，而 $\mathbf{j}_s$ 由London方程给出。这里 σ_0 是普通的正常电导率，由于在温度T时的正常电子数目比正常态时的数目减少，因而 σ_0 降低。略去 j_N，j_S 中的惯性效应. (a) 从麦克斯韦方程出发，证明联系超导体中的电磁波频率 ω 与波矢k的色散关系方程为

(CGS) $k^2c^2 = 4\pi\sigma_0\omega i - c^2\lambda_L^{-2} + \omega^2$；或

(SI) $k^2 = \mu_0\sigma_0\omega i - \lambda_L^{-2} + \omega^2\mu_0\varepsilon_0$.

这里的 λ_L^2 由原书（14a）式中用 n_s 代替 n 给出。(b) 如果 τ 是正常电子的弛豫时间，n_N 是它的浓度，利用公式 $\sigma_0 = n_N e^2\tau/m$，证明当频率 $\omega \ll \frac{1}{\tau}$ 时，色散关系与正常电子没有重要的联系，所

以电子的运动可单独由 London 方程来描述。超流短路了正常电子。London 方程本身只是当$\hbar\omega$比起能隙小时才是正确的。注意，重要的频率为$\omega \ll \omega_p$，ω_p为等离子体频率。

〈解〉

(a) 因为 $\mathbf{j} = \mathbf{j}_N + \mathbf{j}_s$，$\mathbf{j}_N = \sigma_0 \mathbf{E}$ 所以由 Maxwell 方程有

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{C}\mathbf{j} + \frac{1}{C}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

$$= \frac{4\pi}{C}(\sigma_0 \mathbf{E} + \mathbf{j}_s) + \frac{1}{C}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

以 Δx 作用两边，利用关系式

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B}$$

以及 $\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$，得到

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{4\pi\sigma_0}{c^2}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \frac{4\pi}{c}\nabla \times \mathbf{j}_s + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2}. \qquad (1)$$

$\mathbf{j}_s$ 满足 London 方程

$$\nabla \times \mathbf{j}_s = -\frac{c}{4\pi\lambda^2_L}\mathbf{B}, \qquad (2)$$

代入（1）式即得

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{4\pi\sigma_0}{c^2}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \frac{1}{\lambda_L^2}\mathbf{B} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t^2}. \qquad (3)$$

令 $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 e^{-i(\omega t - kr)}$， (4)

代入（3）得色散关系：

$$c^2 k^2 = 4\pi i\omega\sigma_0 - \frac{c^2}{\lambda_L^2} + \omega^2, \qquad (5)$$

其中 $\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi n_s e^2}$. (6)

(b) （5）式右边第一、三项分别反应涡流与位移电流的效应，第二项表示磁场穿透深度的效应。$\sigma_0 = n_N e^2 \tau/m$，则（5）式可写为

$$c^2k^2 = i\frac{4\pi n_N e^2}{m}\omega\tau - \frac{c^2}{\lambda_L^2} + \omega^2. \qquad (7)$$

在低频范围内，$\omega\tau \ll 1$，所以（7）式中的第一项

$$\frac{4\pi n_N e^2}{m}\omega\tau \ll \frac{4\pi n_N e^2}{m}. \qquad (8)$$

注意到（6）式后，（8）式可写成

$$\frac{4\pi n_N e^2}{m}\omega\tau \ll \frac{4\pi n_N e^2}{m} = \left(\frac{n_N}{n_s}\right)\frac{c^2}{\lambda_L^2}. \qquad (9)$$

在 $0 < T < T_C$ 的温度下，n_N 迅速减小，所以，（7）式中的第一项比起第二项 $\frac{c^2}{\lambda_L^2}$ 来是可以忽略的。因此（7）式变成

$$c^2k^2 \approx -\frac{c^2}{\lambda_L^2} + \omega^2. \qquad (10)$$

这表明，在 $0 < T < T_C$ 和 $\omega\tau \ll 1$ 的情况下，正常电子对色散关系没有重要的贡献。这时超导体中的电子的运动可单独用 London 方程来描述。

4. 磁通线的涡旋结构. (a) 求出具有圆柱对称并适用于磁通线芯以外的 London 方程的解。在圆柱极坐标中，要求

$$B - \lambda^2\nabla^2 B = 0$$

的解。它在原点处有极点，而总通量的磁通量子为：

$$2\pi\int_0^\infty d\rho\rho B(\rho) = \Phi_0.$$

实际上此方程只在半径为 ξ 的正常芯之外是正确的。(b) 证明其解具有极限

$$B(\rho)\approx(\Phi_0/2\pi\lambda^2)\ln(\lambda/\rho), \qquad (\xi\ll\rho\ll\lambda);$$

$$B(\rho)\approx(\Phi_0/2\pi\lambda^2)(\pi\lambda/2\rho)^{1/2}exp(-\rho/\lambda), \qquad (\rho\gg\lambda).$$

〈解〉

(a) 设在理想无限大的第二类超导体中存在一根磁通线（半径为 ξ）。线芯之外满足 London 方程

$$\frac{4\pi\lambda}{c}\nabla\times\mathbf{j}+\mathbf{B}=0, \qquad (1)$$

与 Maxwell 方程

$$\nabla\times\mathbf{B}=\frac{4\pi}{c}\mathbf{j}, \qquad (2)$$

$$\nabla\cdot\mathbf{B}=0$$

结合，可得到

$$\nabla^2\mathbf{B}-\frac{1}{\lambda^2}\mathbf{B}=0. \qquad (3)$$

取 $\mathbf{B}=B\hat{Z}$，采用柱坐标，（3）式可写为

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial B}{\partial\rho}\right)-\frac{1}{\lambda^2}B=0. \qquad (4)$$

因为只有一根磁通线，总磁通量恰好等于一个磁通量子，即

$$2\pi\int_0^\infty B(\rho)\rho d\rho=\Phi_0. \qquad (5)$$

为求解（4）式，令

$$x=\rho/\lambda,$$

则（4）式化为

$$\frac{\partial^2 B}{\partial x^2}+\frac{1}{x}\frac{\partial B}{\partial x}-B=0; \qquad (6)$$

这是零阶虚宗量 Bessel 方程，它的解为

$$B=aI_0(x)+bK_0(x)$$

$$= aI_0(\rho/\lambda) + bK_0(\rho/\lambda), \qquad (7)$$

其中$I_0(\rho/\lambda)$，$K_0(\rho/\lambda)$分别为零阶第一类和第二类虚宗量Bessel函数。由于$\rho\to\infty$时$I_0(\rho/\lambda)\to\infty$没有物理意义，因此，取$a=0$，于是（4）式的解为

$$B(\rho) = bK_0(\rho/\lambda), \qquad (8)$$

它有如下的渐近表达式：

$$K_0(\rho/\lambda) \approx -\ln\frac{\rho}{\lambda}, \qquad (\rho \ll \lambda); \quad (9)$$

$$K_0(\rho/\lambda) \approx \sqrt{\frac{\pi\lambda}{2\rho}}e^{-\rho/\lambda}, \qquad (\rho \gg \lambda). \quad (10)$$

为确定（8）式中的常数b，将（4）代入（5）并利用（8）式，得到

$$\frac{\Phi_0}{2\pi} = \int_0^\infty \lambda^2 \frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial B}{\partial\rho}\right)d\rho$$

$$= \lambda^2 b\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial K_0(\rho/\lambda)}{\partial\rho}\right)d\rho$$

$$= \lambda^2 b\left\{\lim_{\rho\to\infty}\rho\frac{\partial K_0(\rho/\lambda)}{\partial\rho} - \lim_{\rho\to 0}\frac{\partial K_0(\rho/\lambda)}{\partial\rho}\right\}$$

$$= \lambda^2 b\left\{\lim_{\rho\to\infty}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\sqrt{\frac{\pi\lambda}{2\rho}}e^{-\rho/\lambda} + \lim_{\rho\to 0}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\ln\frac{\rho}{\lambda}\right\}$$

$$= \lambda^2 b.$$

所以 $$b = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2}. \qquad (11)$$

把（11）式代入（8）式，最后求得：

$$B(\rho) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2}K_0(\rho/\lambda). \qquad (12)$$

(b) 将（9）、(10）式代入(12)式得方程（4）的渐近解：

$$B(\rho)\approx\frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2}\ln\frac{\lambda}{\rho},\qquad(\xi\ll\rho\ll\lambda)\ ;$$

$$B(\rho)\approx\frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2}\sqrt{\frac{\pi\lambda}{2\rho}}e^{-\rho/\lambda},\qquad(\rho\gg\lambda)\ .$$

5. London 穿透深度. (*a*) 取 London 方程的时间导数，证明 $\partial\mathbf{j}/\partial t=(c^2/4\pi\lambda_L^2)\mathbf{E}$. (*b*) 对电荷为 q 质量为 m 的自由载流子，如果 $m\mathrm{d}\mathbf{v}/\mathrm{d}t=q\mathbf{E}$，试证 $\lambda_L^2=mc^2/4\pi nq^2$.

〈解〉

(*a*) 将 London 方程

$$\mathbf{j}=-\frac{c}{4\pi\lambda_L^2}\mathbf{A}\qquad(1)$$

两边对 t 求导数得

$$\frac{\partial\mathbf{j}}{\partial t}=-\frac{c}{4\pi\lambda_L^2}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}.\qquad(2)$$

再由 Maxwell 方程

$$\nabla\times\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t},$$

$$\nabla\times\mathbf{A}=\mathbf{B}$$

得到 $\nabla\times\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\nabla\times\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}$.

所以有 $\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\qquad(3)$

代入（2）得到

$$\frac{\partial\mathbf{j}}{\partial t}=\frac{c^2}{4\pi\lambda_L^2}\mathbf{E}.\qquad(4)$$

(b) 若 $m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{E}$，由于 $\mathbf{j} = nq\mathbf{v}$，$n$ 为载流子密度，则

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = nq\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \frac{q^2}{m}\mathbf{E}.$$

与（4）式比较，得

$$\frac{c^2}{4\pi\lambda_L^2} = \frac{nq^2}{m},$$

所以 $$\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi nq^2}.$$

6. Josephson **结的衍射效应**. 考虑一个矩形截面的结，磁场 B 沿结的平面垂直子宽度为 w 的一个边。令结的厚度为 T。为方便起见，假定当 $B = 0$ 时两超导体的位相差为 $\pi/2$。在有磁场的情况下，证明直流电流为

$$J = J_0\frac{\sin(wTBe/\hbar c)}{(wTBe/\hbar c)}.$$

〈解〉

在有磁场作用时，Josephson 电流的位相与矢势 A 有关，即

$$j = j_0\sin\left(\Delta\varphi - \frac{2e}{\hbar c}\int_1^2 \mathbf{A}\cdot d\mathbf{l}\right), \qquad (1)$$

$\Delta\varphi$为结两边超导体的位相差，因为$\mathbf{B} = B\hat{Z}$，可选$\mathbf{A} = Ay(x)\,\hat{y}$，由于$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$，故得$\partial A_y(x)/\partial x$，若磁场是均匀的，则$A_y(x) = Bx$，于是（1）式中的积分为

$$\int_1^2 \mathbf{A}\cdot d\mathbf{l} = BxT. \qquad (2)$$

如考虑到结两边的超导体中磁场的穿透深度为 λ，则上式中的 T 应改为 $(T + 2\lambda)$。现在（1）式写为

$$j = j_0\sin\left(\Delta\varphi - \frac{2e}{\hbar c}BTx\right). \qquad (3)$$

因 $B=0$ 时，$\Delta\varphi=\pi/2$，则

$$j=j_0\cos\frac{2e}{\hbar c}\mathrm{BT}x. \tag{4}$$

通过结的总电流为

$$I=j_0z\int_{-w/2}^{w/2}\cos\frac{2e}{\hbar c}BTxdx$$

$$=zwj_0\frac{\sin\left(\dfrac{wTBe}{\hbar c}\right)}{\left(\dfrac{wTBe}{\hbar c}\right)},$$

故得电流密度

$$j=\frac{I}{zw}=j_0\frac{\sin\left(\dfrac{wTBe}{\hbar c}\right)}{\left(\dfrac{wTBe}{\hbar c}\right)} \tag{5}$$

7．超导球的 Meissner 效应．设有一个第 1 类超导球，临界场为 H_C．（*a*）证明在 Meissner 区域内，球内有效磁化强度 M 由 $-\frac{8\pi M}{3}=B_a$ 给出，其中 B_a 为均匀外加磁场．(*b*)证明在赤道平面上的球面处磁场为 $3B_a/2$（由此得出 Meissner 效应开始破坏的外磁场为 $2H_C/3$）．

〈解〉

球内的磁场强度为

$$B_i=B_a-\frac{4\pi}{3}M, \tag{1}$$

其中 B_a 为外加均匀磁场，第二项为均匀磁化球的退磁场．在 Meissner 区，有效磁矩为

$$M=-\frac{1}{4\pi}B_i$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\left(B_0 - \frac{4\pi}{3}M\right).$$

所以 $$B_0 = -\frac{8\pi}{3}M. \qquad (2)$$

(b) 在外磁场 B_0 中的一个超导体球的赤道平面的边上，磁场的切向分量是连续的，于是

$$B_{赤} = B_i = B_0 - \frac{4\pi}{3}M.$$

以（2）式代入，得到

$$B_{赤} = \frac{3}{2}B_0.$$

可见，在赤道平面上的球面处的磁场大于外加磁场，故当$B_0 \geqslant \frac{2}{3}H_c$时，$B_{赤} \geqslant H_c$，此处的材料要转变为正常态。在正常态与超导态区域的交界处还是处在磁场 H_c 中，但边界之外如球表面上的区域，磁场将小于 H_c，仍处于超导态，于是可以出现正常态和超导态彼此相间的区域——磁畴。

第十三章　电介质与铁电体

1．氢原子的极化率．考虑一个处在垂直于轨道平面（图13—1）的电场中的氢原子基态的半经典模型，并证明对于这个模型 $\alpha = a_H^3$，a_H 为未受微扰轨道的半径．注：若外场沿 x 方向，则在电子轨道位移后的位置上，核场的 x 分量必须等于外加电场．准确的量子力学结果比现在大一因子9/2（我们所指的 α_0 是展开式 $\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 E + \cdots\cdots$ 中的 α_0）．

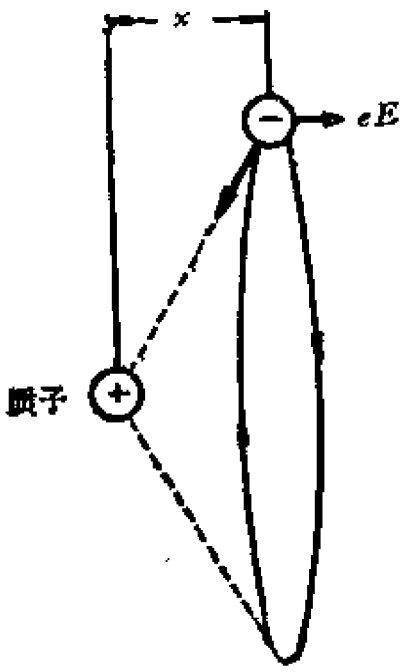


图　13—1

一个电子在半径为 a_H 的圆形轨道上，在 $-x$ 方向的电场作用下位移 x，核对电子的作用力 e^2/a_H^2(CGS)或 $e^2/4\pi\varepsilon_0 a_H^2$ (SI)

〈解〉

如图13—1所示，外电场 E（沿 $-x$ 方向）作用下，氢原子的电子轨道平面将与核分开，同时核对电子产生恢复力，两者达到平衡后，核与电子轨道平面的距离为 x（不考虑轨道的形变）．设核产生的电场为 E_l，则平衡时有

$$E = E_l\cos\theta$$

$$= \frac{e}{a_H^2 + x^2}\cos\theta = \frac{ex}{(a_H^2 + x^2)^{3/2}}$$

$$= \frac{ex}{a_H^3}\left(1+\frac{x^2}{a_H^2}\right)^{-\frac{3}{2}}$$

$$\approx \frac{ex}{a_H^3} \qquad (x \ll a_H)$$

$$= \frac{p}{a_H^3}.$$

$p = ex$ 为原子的感应电矩。于是极化率为 $\alpha = a_H^3$，比量子力学计算结果 $\alpha = \frac{9}{2}a_H^3$ 小，但与 a_H^3 成正比这一点是一致的。

2. 导体球的极化率。 证明半径为 a 的导体金属球的极化率为 $\alpha = a^3$。注意到球内 $E = 0$ 以及球的退极化因子为 $4\pi/3$（图

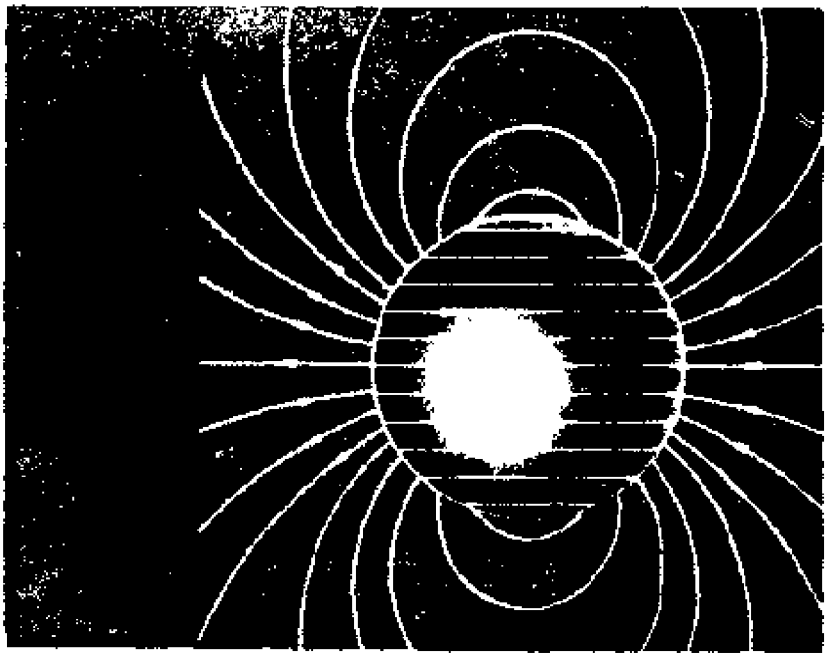


图13—2

导体球内总电场为零。若 $\mathbf{E}_0$ 为外加电场，则由于球表面电荷产生的场 $\mathbf{E}_1$ 必定正好和 $\mathbf{E}_0$ 相抵消，所以在球内 $\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 = 0$。但 $\mathbf{E}_1$ 可以用极化强度为 $\mathbf{P}$ 的均匀极化球的退极化因子 $-4\pi\mathbf{P}/3$ 来模拟。可把 $\mathbf{P}$ 与 $\mathbf{E}_0$ 联系起来，并算出球的偶极矩 μ。用 SI 单位制退极化场为 $-\mathbf{P}/3\varepsilon_0$。

13—2），很容易得出这个结果。它得出的 α 值为观察到的原子极化率的数量级。一个每单位体积有 N 个导体球的晶格，当 $Na^3 \ll 1$ 时具有介电常数 $\varepsilon = 1 + 4\pi Na^3$。$\alpha$ 正比于离子半径的立方的假定，对于碱离子和卤离子是很合适的。若用 SI 单位制来解此问题，用 1/3 作为退极化因子，则结果是相同的。

〈解〉

在外电场 $\mathbf{E}_0$ 的作用下，表面电荷在球内产生的退极化场为 $\mathbf{E} = -4\pi\mathbf{P}/3$，由于导体内总的电场为零，故得

$$\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_i = \mathbf{E}_0 - \frac{4\pi}{3}\mathbf{P} = 0,$$

$$\therefore \quad \mathbf{E}_0 = \frac{4\pi}{3}\mathbf{b} = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{\boldsymbol{\mu}}{\frac{4\pi}{3}a^3} = \frac{\boldsymbol{\mu}}{a^3}.$$

这里，$\boldsymbol{\mu}$ 为球的偶极矩，由上式得到导体球的极化率为 $\alpha = a^3$。

对于单位体积中含有 N 个导体球的晶格，如果晶格具有立方对称性，则晶格极化强度为

$$P = Na^3 E_{loc} = Na^3\left(E + \frac{4\pi}{3}P\right).$$

由此公式求出 P/E，可有

$$\frac{\varepsilon - 1}{4\pi} = \frac{P}{E} = \frac{Na^3}{1 - \frac{4\pi}{3}Na^3}.$$

$$\therefore \quad \varepsilon = 1 + 4\pi Na^3\left(1 - \frac{4\pi}{3}Na^3\right)^{-1}$$

$$\approx 1 + 4\pi Na^3, \qquad (Na^3 \ll 1).$$

3．空气间隙的影响。讨论电容器极板与电介质之间的空气间隙（图13—3）对高介电常数测量的影响。如果空气间隙的厚

度为总厚度的 10^{-3}，则可能测到的最大的表观介电常数是多少？空气间隙的存在可能使高介电常数的测量值受严重失真。

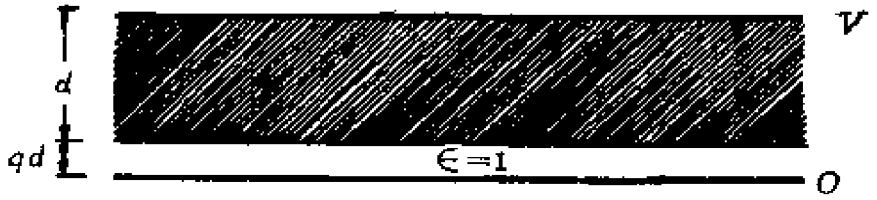


图 13—3

厚度为 qd 的空气隙在电容器中与厚度为 d 的电介质平板相串联

〈解〉

如图 13—3 所示，在填充有介电常数为 ε 及 $\varepsilon=1$ 的两种介质的电容器中，电容为

$$C=\frac{Q}{V}=\frac{E_0S}{4\pi V}, \tag{1}$$

E_0为外电场，S 为极板面积，在两种介质中电场分别为

$$E_1=\frac{E_0}{\varepsilon_1}=E_0, \quad E_2=\frac{E_0}{\varepsilon}. \tag{2}$$

设两种介质相接处的电位为 V'，则有

$$E_2=\frac{V-V'}{d}, \quad E_1=\frac{V'}{qd}. \tag{3}$$

$$V=V'+E_2d=qdE_0+\frac{E_0}{\varepsilon}d$$

$$=(q+\frac{1}{\varepsilon})dE_0. \tag{4}$$

所以 $$C=\frac{S\varepsilon}{4\pi(1+\varepsilon q)d}. \tag{5}$$

若电容器内只有 $\varepsilon=1$ 的介质充满，则电容为

$$C_0=\frac{S}{4\pi(1+q)d}.$$

于是 $$C = \frac{\varepsilon(1+q)}{(1+\varepsilon q)} C_0$$

$$= \varepsilon_{eff} C_0, \qquad (6)$$

其中 $$\varepsilon_{eff} = \left(\frac{1+q}{1+\varepsilon q}\right)\varepsilon \qquad (7)$$

为有效介电常数。可见空气间隙的厚度对测量到的介电常数是有影响的，若 q 很小，例如 $q = 10^{-3}$，则

$$\varepsilon_{eff} \approx \frac{\varepsilon}{1+\varepsilon q}. \qquad (8)$$

（1）如果 $\varepsilon q \ll 1$，即 $\varepsilon \ll 10^3$，则 $\varepsilon_{eff} \approx \varepsilon$。在这种情况下，空隙的影响可以忽略不计。

（2）如果 $\varepsilon q \gg 1$. 即 $\varepsilon \gg 10^3$，则

$$\varepsilon_{eff} \approx \frac{\varepsilon}{q\varepsilon} = \frac{1}{q} = 10^3,$$

即在 $q = 10^{-3}$ 的情况下，测量到的 ε_{eff} 最大值为 10^3。

（3）如果 $\varepsilon q = 1$，即 $\varepsilon = 10^3$，则

$$\varepsilon_{eff} = \frac{1}{2}\varepsilon.$$

总之，$\varepsilon q \geqslant 1$ 时空隙的影响最大，故空气间隙的存在将严重影响高介电常数的测量。

4．介面极化。有一个由两个平行的材料组成的平板电容器，其中一种材料的介电常数为 ε，电导率为零，厚度为 d；另一种材料 $\varepsilon = 0$，电导率 σ 为有限，厚度为 qd。证明这种电容器的性质如同在电容器极板间填满具有介电常数为

(CGS) $$\varepsilon_{eff} = \frac{\varepsilon(1+q)}{1-(i\varepsilon\omega q/4\pi\sigma)}$$

的均匀电介质一样，其中 ω 为角频率。有时发现 ε_{eff} 的值高至 10^4

或10^5，这主要是由 Maxwell—Wagner 机构引起的，但这样高的 ε 值总是伴随着很大的损耗。

〈解〉

如图13—4 所示，电容器的阻抗 Z 为

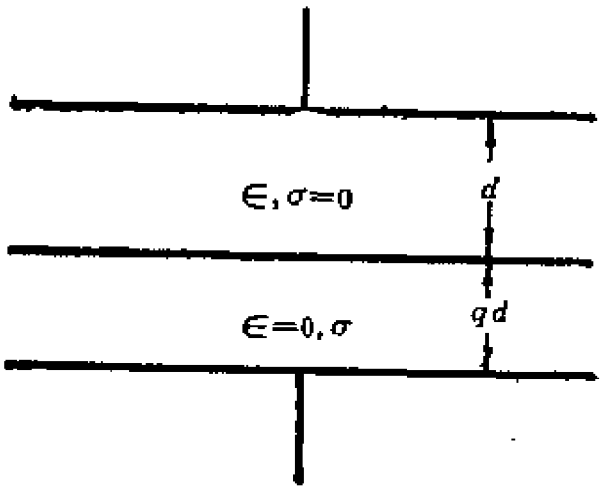


图 13—4 平行的平板电容器

$$Z = R + \frac{1}{j\omega C},$$

其中 $R = \frac{qd}{\sigma s}$， $C = \frac{s\varepsilon}{4\pi d}$.

所以 $$Z = \frac{1}{s}\left(\frac{qd}{\sigma} + \frac{4\pi d}{j\omega\varepsilon}\right)$$

$$= \frac{4\pi d}{j\omega s\varepsilon}\left(1 + \frac{j\omega\varepsilon q}{4\pi\sigma}\right)$$

$$= \frac{4\pi d(1+q)}{j\omega s}\,\frac{1}{\varepsilon_{eff}}$$

$$= \frac{1}{j\omega\dfrac{s\varepsilon_{eff}}{4\pi d(1+q)}} = \frac{1}{j\omega C_{eff}},$$

其中 $$\varepsilon_{eff} = \frac{\varepsilon(1+q)}{1 + j\dfrac{\varepsilon q\omega}{4\pi\sigma}},$$

$$\varepsilon_{eff} = \frac{s\varepsilon_{eff}}{4\pi d(1+q)}.$$

5. 球形介质的极化强度. 一个介电常数为 ε 的球放在均匀的外电场 E_0 中. (a) 球中的体积平均电场 E 等于什么？ (b) 证明球内的极化强度为 $P = \chi E_0/[1 + (4\pi\chi/3)]$，

其中 $\chi = (\varepsilon - 1)/4\pi$.

〈解〉

(a) 若球形电介质的存在不改变外电场 E_0，则球内的电场为

$$E = E_0 - \frac{4\pi}{3}P, \qquad (1)$$

P 为电介质的极化强度。由于

$$P = \chi E = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi}E, \qquad (2)$$

代入（1）式解出

$$E = \frac{E_0}{1 + \frac{4\pi}{3}\chi} = \frac{3}{\varepsilon + 2}E. \qquad (3)$$

所以均匀电介质球内的场是均匀的。

(b) 由 (2)、(3) 两式，可得出

$$P = \chi E = \chi E_0 / \left(1 + \frac{4\pi}{3}\chi\right).$$

6. 原子的铁电性判据。 设有两个中性原子的体系，原子相距一确定的距离 a，每原子的极化系数为 α。求这个体系变成铁电性时 a 与 α 之间的关系。

〈解〉

两个偶极矩为 P 的中性原子，偶矩间的相互作用能为

$$\frac{3(\mathbf{P}\cdot\mathbf{r})(\mathbf{r}\cdot\mathbf{P}) - r^2P^2}{r^5}.$$

当相距为 a 的两原子的偶极矩平行取向时，相互作用能为极小，其值为 $-2P^2/a^3$。另一方面，极化率为 α 的中性原子，如果由于极化而产生偶极矩 P，要消耗能量 $P^2/2\alpha$，于是总的能量为

$$E = \frac{P^2}{2\alpha} - \frac{2P^2}{a^3}.$$

只有当 $E\leqslant 0$ 时，才能产生铁电性，就是说要求 P 平行取向产生铁电性所降低的能量，能够克服由于极化产生所需要的偶极矩的能量。于是从条件

$$\frac{P^2}{2\alpha}-\frac{2P^2}{a^3}\leqslant 0$$

可以求得产生铁电性时的 α 与 a 的关系：

$$\alpha\geqslant\frac{1}{4}a^3.$$

7．居里点处的饱和极化强度。在一级相变中，在平衡条件(42)式（原书公式）中令 T 等于 T_C 就得出一个极化强度 $P_s(T_C)$ 的方程。在居里点处的另一条件为 $\hat{F}(P_S,T_C)=\hat{F}(0,T_C)$. (a) 结合这两个条件，证明 $P_S^2(T_C)=3|g_4|/4g_6$。(b) 利用此结果，证明 $T_C=T_0+3g_4^2/16\gamma g_6$.

〈解〉

(a) 当 $T=T_C$，$P=P_S$ 时，自由能密度为

$$\hat{F}(T_S,P_S)=\hat{F}_0(T_C,0)+\frac{1}{2}\gamma(T_C-T_0)P_S^2+\frac{1}{4}g_4P_S^4+\frac{1}{6}g_6P_S^6. \qquad (1)$$

对于一级相变，$g_4<0$，因没有相变潜热，两相可以并存，故有条件：

$$\hat{F}(T_C,P_S)=\hat{F}_0(T_C,0), \qquad (2)$$

于是（1）式就变成

$$\frac{1}{2}\gamma(T_C-T_0)P_S^2-\frac{1}{4}|g_4|P_S^4+\frac{1}{6}g_6P_S^6$$

$$=\left[\frac{1}{2}\gamma(T_C-T_0)-\frac{1}{4}|g_4|P_S^2+\frac{1}{6}g_6P_S^4\right]P_S^2=0.$$

由此得出铁电相自发极化 P_s^2 应满足的条件：

$$\gamma(T_C - T_0) - \frac{1}{2}|g_4|P_s^2 + \frac{1}{3}g_6P_s^4 = 0. \qquad (3)$$

此外，从自由能极小条件可以得到：

$$\gamma(T_C - T_0) - |g_4|P_s^2 + g_6P_s^4 = 0. \qquad (4)$$

从（3）、（4）两式可以解出

$$P_s^2 = 3|g_4|/4g_6. \qquad (5)$$

(b) 将（5）代入（4）即得

$$T_C = T_0 + \frac{3g_4^2}{16g_6\gamma}. \qquad (6)$$

8. 低于转变温度的介电常数. 通过兰道自由能展开式中的参量，证明二级相变转变温度以下介电常数为

$$\varepsilon = 1 + 4\pi\Delta P/E = 1 + 2\pi/\gamma(T_C - T).$$

此结果可与转变点以上的（43）式（原书421页）比较。

〈解〉

利用 Landau 自由能展开式，

$$\hat{F}(T, P) = \hat{F}_0(T,0) + \frac{1}{2}\gamma(T - T_0)P^2 + \frac{1}{4}g_4P^4 + \cdots (1)$$

对于二级相变，$g_4 > 0$，$T_0 = T_C$，只保留 P^4 的项，上式变为

$$\hat{F}(T,P) = \hat{F}_0(T,0) + \frac{1}{2}\gamma(T - T_C)P^2 + \frac{1}{4}g_4P^4. \qquad (2)$$

由极小条件

$$\left(\frac{\partial \hat{F}}{\partial P}\right)_{P_S} = 0, \quad \chi^{-1} = \frac{\partial^2 \hat{F}}{\partial P^2} > 0 \qquad (3)$$

得到，$[\gamma(T - T_C) + g_4P_s^2]P_s = 0$ （4）

和 $\chi^{-1} = \gamma(T - T_C) + 3g_4P_s^2$. （5）

满足（4）式的解为

$$P_S = 0 \qquad (6)$$

$$P_S = \pm\left[\frac{-\gamma}{g_4}(T - T_C)\right]^{\frac{1}{2}}. \qquad (7)$$

及 $P_S = 0$ 的解只有当 $\chi^{-1} = \gamma(T - T_C) > 0$，即 $T > T_C$ 时才能使 $\hat{F}$ 为极小。当 $T < T_C$ 时，只有 $P_S \neq 0$ 的解能使 $\hat{F}$ 为极小，将(7)式代入（5）式得到：

$$\chi^{-1} = \gamma(T - T_C) - 3\gamma(T - T_C)$$
$$= 2\gamma(T_C - T).$$

所以 $\varepsilon = 1 + 4\pi\chi$

$$1 + \frac{2\pi}{\gamma(T_C - T)}. \qquad (8)$$

9. 软模与晶格转变。 画一个晶格常数为 a 的单原子线晶格的简图，（a）将其中六个原子的每一个加一矢量，表示在一给定时间由波矢在布里渊区边界上的纵声子所引起的位移的方向，（b）画出由于晶体冷却通过 T_C 时区域边界声子变为不稳定（$\omega \to 0$）的晶体结构略图。（c）画图表示出单原子晶格在 T 比 T_C 高很多以及在 T 等于 T_C 时纵声子色散关系的主要特点。将 T 大大低于 T_C 时的新结构中声子色散关系的特点也表示在同一图中。

〈解〉

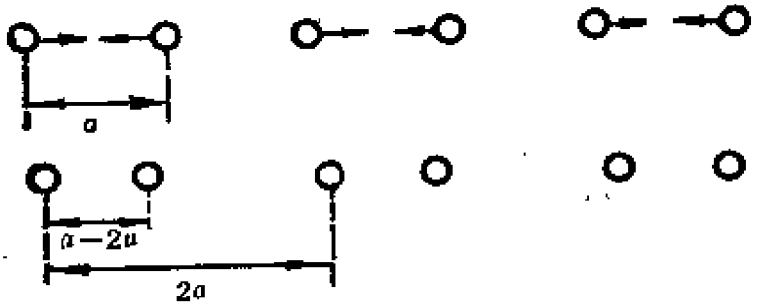


图13—5 晶格常数为 a 的单原子线晶格的转变

(a) 对于纵波，第 S 原子的位移为

$$u_s = ue^{isk a}e^{-i\omega t}.$$

当 $k=\frac{\pi}{a}$（第一布里渊区边界）时，

$$u_s=\begin{cases}-ue^{-i\omega t}, & s\text{ 为奇;}\\ ue^{-i\omega t}, & s\text{ 为偶.}\end{cases}$$

这表明相邻原子的位移方向相反.

(b) 当 $T<T_C$ 时，$k=\frac{\pi}{a}$ 的纵波声子变为不稳定，即 $\omega\to 0$，晶格中各原子的位移为

$$u_s=ue^{is\pi}=\begin{cases}-u, & s\text{ 为奇;}\\ u, & s\text{ 为偶.}\end{cases}$$

由此可见，相邻的原子各自向相反方向位移了 u，产生新的结构：每原胞含 2 个原子，原胞的大小为 $2a$.

(c) 当 $T>T_C$ 时，纵声子模不能引起结构转变. 对于单原子晶格每原胞含一个原子，正常的色散关系如图 13—6 实线所示. 当 $T\approx T_C$ 时，$k=\frac{\pi}{a}$ 的 $\omega\to 0$；当 $T<T_C$ 时，转变为每原胞含 2 个原子的新结构，频谱分为声学支和光学支，第一布里渊区边界为 $\pi/2a$.

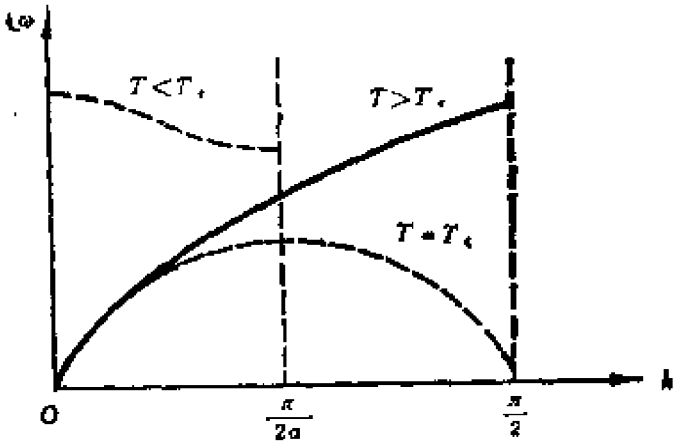


图 13—6 $T<T_C$，$T>T_C$，$T\approx T_C$ 情况下晶格的 $\omega\sim k$ 关系

10. 铁电性的线性晶格. 设有极化率为 α，距离为 a 的原子线晶格. 证明如果 $a\geqslant a^3/4\Sigma n^{-3}$，（这里求和遍及所有的正整

数，查表得1.202……）此种晶格排列可以自发极化。

〈解〉

将本章第六题中所考虑的双原子的结果推广到线性晶格。设有 N 个具有相同偶极矩 P 的原子排成线性晶格，原子间距离为 a，总的偶极矩相互作用能为

$$-\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}\frac{2P^2}{R_{ij}^3}\approx -N\sum_{n}\frac{2P^2}{R_{1n}^3}=-\frac{2NP^2}{a^3}\sum_{n}\frac{1}{n^3},$$

由原子极化产生 P 需要消耗能量

$$\frac{N}{2}\frac{P^2}{2},$$

于是总能量为

$$E=N\left(\frac{P^2}{2\alpha}-\frac{2P^2}{a^3}\sum_{n}\frac{1}{n^3}\right). \qquad (1)$$

只有当 $E\leqslant 0$ 时，才能出现铁电性，由

$$\frac{P^2}{2\alpha}-\frac{2P^2}{a^3}\sum_{n}\frac{1}{n^3}\leqslant 0 \qquad (2)$$

可解出 $$\alpha\geqslant\frac{a^3}{4}\frac{1}{\sum_{n}n^{-3}}. \qquad (3)$$

反过来说，当极化率满足（3）式的晶格排列，可以产生自发极化。

第十四章 抗磁性与顺磁性

1. 氢原子的抗磁磁化率. 氢原子在基态（1s）的波函数为 $\psi = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$，其中 $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529\times10^{-8}$cm. 根据波函数的统计解释，电荷密度为 $\rho(x,y,z) = -e|\psi|^2$. 证明对于这个状态，$\langle r^2\rangle = 3a_0^2$，并计算氢原子的克分子抗磁磁化率.

〈解〉

氢原子的基态（1s）波函数为

$$\psi = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$$

且 $\int \psi^* \psi d\tau = 1$,

所以 $$\langle r^2\rangle = \int \psi^* r^2 \psi d\tau = \int_0^\infty (\pi a_0^3)^{-1} r^2 e^{-2r/a_0} (4\pi r^2 dr)$$

$$= \frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty r^4 e^{-2r/a_0} dr = 3a_0^2$$

克分子抗磁磁化率为

$$\chi = -\frac{Nze^2}{6mc^2}\cdot\langle r^2\rangle$$

$$= -\frac{Ne^2}{2mc^2}a_0^2, \qquad (\because Z=1)$$

将 N，e，m，c，a_0 的数值代入，算出

$$\chi = -2.36\times10^{-6}\text{cm/mole}$$

2. Hund规则. 用Hund规则求以下离子的基态：(a) E_i^{2+}，

在组态$4f^7 5s^2 5p^6$；（b） Yb^{3+}；Tb^{3+}。

〈解〉

（a）求E_u^{2+}的基态。E_u^{2+}的基态电子组态为$4f^7 5s^2 5p^6$，4f 壳层不满，根据Hund规则：（1）共有 7 个 4f 电子，刚好半满，其自旋可以互相平行而不违反泡利原理，故$S=7/2$；（2）m_l的可能值为3，2，1，0，-1，-2，-3，每一个轨道都有一个电子，所以$L=0$；（3）因$4f^7$刚好半满，得

$$J=L+S=\frac{7}{2}.$$

所以E_u^{2+}的基态是$^8S_{7/2}$。这里光谱项的符号是用$^{(2S+1)}X_J$来表示的，而X是根据L的不同取值，用相应的英文字母表示：

$L=0$，1，2，3，4，5，6；

$X=S$，P，D，F，G，H，I。

（b）求Yb^{3+}的基态。

电子组态为$4f^{13}5s^2 5p^6$，13个4f 电子，4f壳层可容纳14个电子，只差一个，其自旋可令 7 个平行、6 个反平行而不违反泡利原理，故 $S=\frac{1}{2}$。m_l 的可能值是3，2，1，0，-1，-2，-3，有 6 个轨道含一对自旋相反的电子，只有一个轨道含单个电子，故L的最大值为$L=3$。$4f^{13}$已超过半满，所以 $J=L+S=7/2$，于是$Y_B{}^{3+}$的基态为$^2F_{7/2}$。

（c）求Tb^{3+}的基态。

电子组态为$4f^8 5s^2 5p^6$。4f不满，有8个电子，其自旋在不违反泡利原理的情况下，可令 7 个平行、一个反平行。所以$S=3$。m_l的可能值为3，2，1，0，-1，-2，-3。7 个自旋平行的电子的m_l值必须不同，另一自旋反平行的电子可取 7 个m_l值中的任一个，故最大的L为$L=3$。由于 $4f^8$ 已超过半满，$J=L+S=6$，

因此Tb^{3+}的基态为$^7F_6$。

3. 三重激发态。某些有机分子在单重（$S=0$）基态之上的能量$k_B\Delta$处有三重（$S=1$）激发态。（a） 导出在磁场B中磁矩$\langle\mu\rangle$的表达式。（b） 证明$T\gg\Delta$时磁化率近似与Δ无关。（c） 借助于能级随磁场的变化图简略画出熵随磁场的变化曲线，说明怎样由绝热磁化（不是退磁）使体系冷却。

〈解〉

（a） 对于含有单重态（$S=0$）基态和三重态（$S=1$）激发态的二能级体系（如图14—1所示），在磁场B中其能量分别为

$$E_0=0,$$

$$E_1=k_B\Delta-2\mu_BB,$$

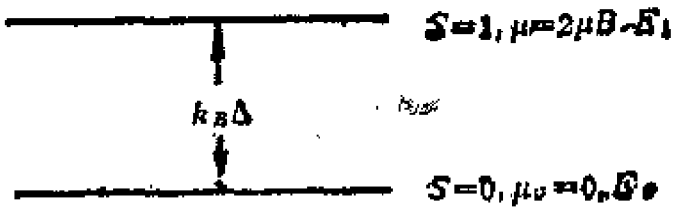


图14—1 二能级图

其中μ_B为玻尔磁子。平均磁矩为

$$\langle\mu\rangle=\frac{\sum_{i=0}^{1}\mu_i e^{-E_i/k_BT}}{\sum_{i=0}^{1}e^{-E_i/k_BT}}$$

$$=\frac{2\mu_B e^{-(k_B\Delta-2\mu_BB)/k_BT}}{1+e^{-(k_B\Delta-2\mu_BB)/k_BT}}$$

$$=\frac{2\mu_B}{1+e^{\left(\frac{\Delta}{T}-\frac{2\mu_BB}{k_BT}\right)}}.$$

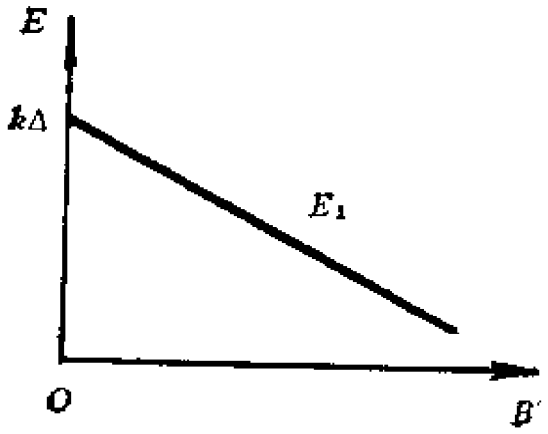


图14—2 E~B 关系

（b）若$T \gg \Delta$ 即$\Delta/T \ll 1$，

则 $e^{\Delta/T} \approx 1$。

于是 $$\langle \mu \rangle \approx \frac{2\mu_B}{1+e^{-2\mu_B B/k_B T}}.$$

故$\langle \mu \rangle$及磁化率均近似与Δ无关。

（c）由于$E_0 = 0$，$E_1 = k_B\Delta - 2\mu_B B$，$E_1$随磁场$B$的增加而降低，如图14—2所示。当$T \gg \Delta$时，很容易热激发到三重态，相应有磁矩$2\mu_B$，在磁场作用下能量可得到补偿。一般说来，温度增加，跃迁到高能态的几率增加，体系的熵S也随之增加。但对现在所讨论的体系，$T \gg \Delta$时，在一定强度的磁场作用下，磁矩不为零的三重态更为有序，可以出现$T_1 > T_2$，$S(T_1, B) < S(T_2, B)$的情形。对不同的温度，熵S随磁场B的变化大体上如图14—3所示，可以设想以下过程使体系冷却：从a状态出发加磁场使体系等温磁化，到达状态b，然后绝热磁化（S不变）至c，再经等温去掉磁场回到状态d，经这一过程后，体系从温度T_1降至T_2。

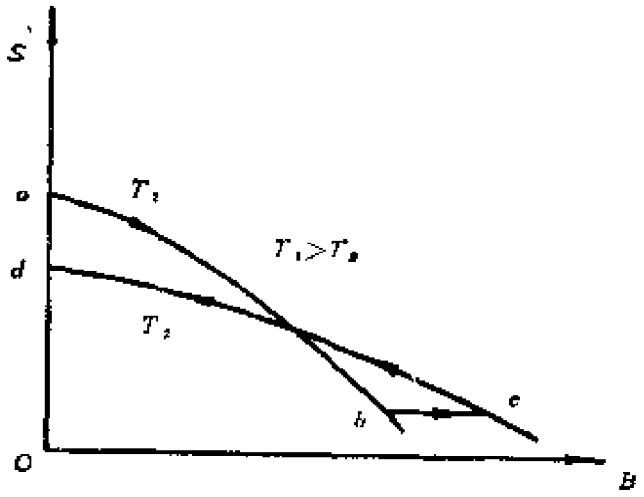


图14—3　S～B关系

4．来自内部自由度的热容量。（a）　设有一二能级体系，上下状态间的能量裂距为 $k_B\Delta$；由磁场或其他方法可以产生这种劈裂，证明，每个体系的热容量为

$$C=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{\Delta}=k_B\frac{(\Delta/T)^2e^{\Delta/T}}{(1+e^{\Delta/T})^2},$$

此函数表示在图14—4中．热容量中这种类型的峰通常称为肖特基反常．热容量的极大值是非常高的，但当 $T\ll\Delta$ 和 $T\gg\Delta$ 时，热容量却是很低的。（b）　证明对于 $T\gg\Delta$，有 $C\approx k_B(\Delta/2T)^2+\cdots\cdots$．在顺磁盐类(以及在具有电子自旋有序的体系)中，核与电子磁矩间的超精细相互作用引起 $\Delta\approx1$至100mk的裂距．通常利用热容量中在 $T\gg\Delta$ 的范围内存在的 $1/T^2$ 项，可以由实验检验这些裂距．核电四极矩与晶场的相互作用也会引起裂距，如图14—5所示。

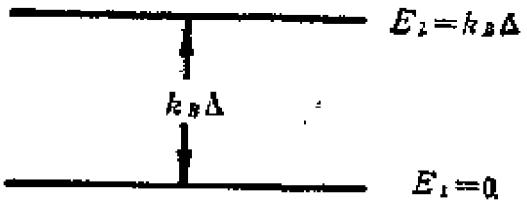


图14—4

二能级体系的热容量与T/Δ的函数关系，这里 Δ为 能级裂距． 为了 决定稀土与过渡族金属，化合物以及合金中的离子能级裂距，肖特基反常 是 非常有用的工具

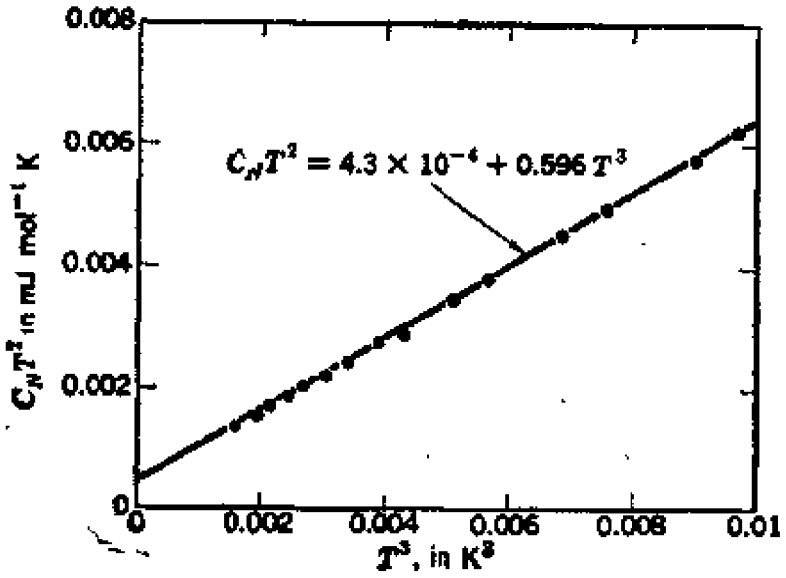


图14—5

在T＜0.21k时，Ga的正常态热容量．在非常低的温度下，核四极矩（C～T^{-2}）和传导电子（C～T）对热容量的贡献是重要的

〈解〉

（a）设二能级各为$E_1=0$和$E_2=k_B\Delta$，则体系的平均热能为

$$U=\frac{\sum_{i=1}^{2}E_i e^{-E_i/k_BT}}{\sum_{i=1}^{2}e^{-E_i/k_BT}}=\frac{k_B\Delta e^{-\Delta/T}}{1+e^{-\Delta/T}}=\frac{k_B\Delta}{1+e^{\Delta/T}},$$

k_B为波尔兹曼常数。热容量C为

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_\Delta \approx k_B\left(\frac{\Delta}{T}\right)^2 \frac{e^{\Delta/T}}{(1+e^{\Delta/T})^2}$$

C 随T/Δ 变化如图 14—4 所示，出现一个很高的峰，而当 $T \ll \Delta$ 和 $\Delta \ll T$ 时，C 下降至很小的数值，这种现象称为 Schottky 反常。利用这种反常效应可以测定稀土和过渡金属的化合物和合金中离子的能级裂距。

（b）当$T \gg \Delta$时，$e^{\Delta/T}$可以展为

$$e^{\Delta/T} \approx 1 + \frac{\Delta}{T} + \cdots\cdots,$$

$$\frac{e^{\Delta/T}}{(1+e^{\Delta/T})^2} \approx \frac{1}{4} + \cdots\cdots.$$

子是 $$C \approx k_B\left(\frac{\Delta}{2T}\right)^2 + \cdots\cdots.$$

C 与 T^{-2} 成正比．在一些顺磁盐类中，由于某种超精细相互作用引起离子的能级裂距Δ很小，容易满足$T \gg \Delta$的条件，我们就可以利用C中T^{-2}项的存在测定Δ。

5．泡利自旋磁化率。绝对零度下传导电子气体的自旋磁化率可用另外的方法来讨论。令$N^+ = \frac{1}{2}N(1+\zeta)$；$N^- = \frac{1}{2}N(1-\zeta)$为上自旋与下自旋电子的浓度。（a） 证明在磁场$B$中自由电子气体的上自旋带的总能量为

$$E^+ = E_0\,(1+\zeta)^{5/3} - \frac{1}{2}N\mu B(1+\zeta),$$

其中$E_0 = \frac{3}{10}N\varepsilon_F$，是用磁场为零时的费米能$\varepsilon_F$表示的。导出$E^-$

的类似表达式．（b） 将$E=E^{+}+E^{-}$对ζ求极小，并在$\zeta \ll 1$的近似下解出ζ的平衡值．接着证明磁化强度为 $M=3N\mu^{2}B/2\varepsilon_{F}$，与原书450页（21）相符．

〈解〉

（a） 上自旋与下自旋电子的浓度分别为$N^{+}=\frac{1}{2}N(1+\zeta)$ $N^{-}=\frac{1}{2}N(1-\zeta)$，$N$为总自由电子数．无磁场作用时，每一种自旋的电子平均动能与电子浓度n的关系为

$$\varepsilon(n)=\frac{\hbar^{2}}{2m}(6\pi^{2}n)^{2/3}.$$

于是上自旋电子的总能量为

$$\begin{aligned}E(+)&=\int_{0}^{N+}\varepsilon(n)dn\\&=\int_{0}^{\frac{1}{2}N(1+\zeta)}\frac{\hbar^{2}}{2m}(6\pi^{2}n)^{2/3}dn\\&=\frac{3}{10}\varepsilon_{F}N(1+\zeta)^{5/3}=E_{0}(1+\zeta)^{5/3}\end{aligned}$$

其中 $E_{0}=\frac{3}{10}\varepsilon_{F}N$ $\varepsilon_{F}=\frac{\hbar^{2}}{2m}(3\pi^{2}N)^{2/3}$ 为没有磁场时的费米能．

同样可以求出下自旋电子的总能量为

$$E(-)=\int_{0}^{N-}\varepsilon(n)dn=E_{0}(1-\zeta)^{5/3}.$$

在磁场B的作用下，上、下自旋电子在磁场中的位能分别为$-N^{+}\mu B$和$N^{-1}\mu B$，μ为电子的磁矩．因此，上、下自旋电子在磁场中的总能量分别为

$$\begin{aligned}E^{+}&=E(+)-N^{+}\mu B\\&=E_{0}(1+\zeta)^{5/3}-\frac{1}{2}N\mu B(1+\zeta).\end{aligned}$$

$$E^- = E(-) + N^-\mu B$$

$$= E_0(1-\zeta)^{5/3} + \frac{1}{2}N\mu B(1-\zeta).$$

（b） 电子的总能量为

$$E_{total} = E^+ + E^-$$

$$= E_0[(1+\zeta)^{5/3} + (1-\zeta)^{5/3}] - N\mu B\zeta.$$

ζ由E_{total}的极小条件

$$\left|\frac{E_{total}}{\partial\zeta}\right| = \frac{5}{3}E_0[(1+\zeta)^{2/3} - (1-\zeta)^{2/3}] - N\mu B = 0$$

来决定，当$\zeta \ll 1$时，$(1\pm\zeta)^{2/3} \approx 1 \pm \frac{2}{3}\zeta$，代入上式解出，

$$\zeta = \frac{9N\mu B}{20E_0}$$

磁化强度M为

$$M = (N^+ - N^-)\mu = N\mu\zeta$$

$$= \frac{9N^2\mu^2 B}{20E_0} = \frac{3N\mu^2 B}{2\varepsilon_F}.$$

由此得出泡利顺磁磁化率为

$$\chi = \frac{M}{B} = \frac{3N\mu^2}{2\varepsilon_F}.$$

6. 传导电子的铁磁性. 我们近似处理传导电子间的交换作用效应，假定平行自旋的电子间相互作用能为$-V$（V为正），而反平行自旋电子之间没有相互作用.（a）借助于问题5，证明上自旋带的总能量为

$$E^+ = E_0(1+\zeta)^{5/3} - \frac{1}{8}VN^2(1+\zeta)^2 - \frac{1}{2}N\mu B(1+\zeta),$$

对E^-求出类似的公式.（b） 对总能量求极小并在$\zeta \ll 1$的极

限条件内解出ζ. 证明磁化强度为

$$M = \frac{3N\mu^2}{2\varepsilon_F - \frac{3}{2}VN} B,$$

所以交换作用增大了磁化率. （c） 当$V > 4\varepsilon_F/3N$时，证明$B = 0$的总能量在$\zeta = 0$时是不稳定的. 如果满足这个条件，铁磁状态（$\zeta \neq 0$）将比顺磁状态具有更低的能量. 由于假定$\zeta \ll 1$，这只是产生铁磁性的充分条件，但不一定是必要条件.

〈解〉

（a） 若在传导电子中只考虑自旋平行的电子间的交换作用，每一对自旋平行的电子的交换作用能为$-V$，$V > 0$，则上自旋和下自旋电子的总能量应包括动能、交换作用能以及在外磁场中的位能. 利用本章第5题的结果，现在上、下自旋电子的总能量分别为

$$E^+ = E_0(1+\zeta)^{5/3} - \frac{1}{2}N\mu B(1+\zeta) + E^+_{ex},$$

$$E^- = E_0(1-\zeta)^{5/3} + \frac{1}{2}N\mu B(1-\zeta) + E^-_{ex},$$

其中E^+_{ex}，E^-_{ex}分别为上、下自旋电子的交换作用能，分别可以表示为

$$E^+_{ex} = -\frac{1}{2}N^+(N^+ - 1)V \approx -\frac{1}{2}V(N^+)^2$$

$$= -\frac{1}{8}VN^2(1+\zeta)^2,$$

$$E^-_{ex} = -\frac{1}{2}N^-(N^- - V)V \approx -\frac{1}{2}V(N^-)^2$$

$$= -\frac{1}{8}VN^2(1-\zeta)^2,$$

所以有

$$E^{+}=E_0(1+\zeta)^{5/3}-\frac{1}{8}VN^2(1+\zeta)^2-\frac{1}{2}N\mu B(1+\zeta),$$

$$E^{-}=E_0(1-\zeta)^{5/3}-\frac{1}{8}VN^2(1-\zeta)^2+\frac{1}{2}N\mu B(1-\zeta).$$

（b） 由总能量$E=E^{+}+E^{-}$的极小条件

$$\frac{\partial E}{\partial\zeta}=\frac{5}{3}E_0[(1+\zeta)^{2/3}-(1-\zeta)^{2/3}]-\frac{1}{2}VN^2\zeta-N\mu B=0$$

可以决定ζ。当$\zeta\ll1$时，$(1\pm\zeta)^{2/3}\approx1\pm\frac{2}{3}\zeta$，由上式解得

$$\zeta=\frac{3\mu B}{2\varepsilon_F-\frac{3}{2}NV}.$$

磁化强度为

$$M=(N^{+}-N^{-})\mu=N\mu\zeta$$

$$=\frac{3N\mu^2B}{2\varepsilon_F-\frac{3}{2}VN}.$$

因$V>0$，所以交换作用的效果是使顺磁磁化率增加。

（c） 当外磁场$B=0$时，体系的总能量为

$$E=E_0[(1+\zeta)^{5/3}+(1-\zeta)^{5/3}]-\frac{1}{8}VN^2$$

$$[(1+\zeta)^2+(1-\zeta)^2].$$

ζ还是由E的极小条件决定。由

$$\frac{\partial E}{\partial\zeta}=\frac{5}{3}E_0[(1+\zeta)^{2/3}-(1-\zeta)^{2/3}]-\frac{1}{2}VN^2\zeta=0$$

可解出$\zeta=0$，$\zeta\neq0$的两种解，$\zeta=0$对应于顺磁态，$\zeta\neq0$为铁磁态。为判断哪一种状态更稳定，要计算E的二级导数：

$$\frac{\partial^2E}{\partial\zeta^2}=\frac{10}{9}E_0[(1+\zeta)^{-1/3}+(1-\zeta)^{-1/3}]-\frac{1}{2}VN^2.$$

（1） 当 $\zeta=0$时，

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \zeta^2}=\frac{20}{9}E_0-\frac{1}{2}VN^2=\frac{2}{3}N\varepsilon_F-\frac{1}{2}VN^2.$$

如果满足条件 $V>\frac{4\varepsilon_F}{3N}$，则

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \zeta^2}<0,$$

E为极大，即在这种条件下顺磁态是不稳定的，其相应的能量为

$$E_{顺}=2E_0-\frac{1}{4}VN^2.$$

（2）当$\zeta\neq 0$且$\zeta\ll 1$时，铁磁态的总能量为

$$E_{铁}=E_0\left[(1+\zeta)^{5/3}+(1-\zeta)^{5/3}\right]-\frac{1}{4}VN^2(1+\zeta^2)$$

$$\approx 2E_0\left(1+\frac{5}{9}\zeta^2\right)-\frac{1}{4}VN^2\left(1+\zeta^2\right)$$

$$=E_{顺}+\left(\frac{10}{9}E_0-\frac{1}{4}VN^2\right)\zeta^2$$

$$=E_{顺}+\left(\frac{1}{3}N\varepsilon_F-\frac{1}{4}VN^2\right)\zeta^2.$$

故当满足条件 $V>\frac{4\varepsilon_F}{3N}$时，

$$E_{铁}<E_{顺}.$$

这就是考虑了电子间的交换作用后，传导电子体系中产生铁磁性的条件。这是在$\zeta\ll 1$的情况下得到的，只是产生铁磁性的充分条件而不一定是必要条件。

7．二能级体系。问题4的结果通常可表达成另外的形式。

（a） 若两个能级是在Δ和$-\Delta$上，证明能量与热容量为

$$U = -\Delta tanh\ (\Delta/k_BT)\ ;\quad C = k_B\ (\Delta/k_BT)^2 Sech^2\ (\Delta/k_BT).$$

（b） 如果体系具有无规成份，使所有的Δ值均有可能趋于某一极限Δ_0，证明倘若$k_BT \ll \Delta_0$，热容量与温度成正比。这一结果曾被Marshall〔Phys. Rev, **118**, 1519(1960)〕用来解释稀磁性合金的热容量。它也可在玻璃体理论中应用。

〈**解**〉

（a） 若二能级为$E_1 = -\Delta$，$E_2 = \Delta$，其平均热能为

$$U = \frac{\sum_{i=1}^{2} E_i e^{-E_i/k_BT}}{\sum_{i=1}^{2} e^{-E_i/k_BT}}$$

$$= \frac{\Delta(e^{-\Delta/k_BT} - e^{\Delta/k_BT})}{e^{-\Delta/k_BT} + e^{\Delta/k_BT}}$$

$$= -\Delta tanh\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right).$$

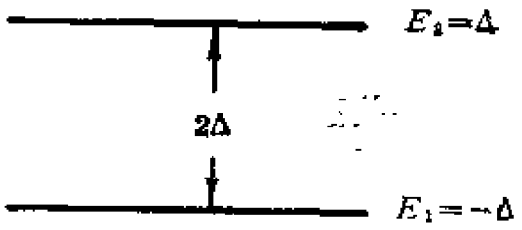


图14—6 二能级图

热容量为

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{\Delta} = k_B\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right)^2 Sech^2\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right).$$

（b） 若体系中含有无规分布的杂质，每一杂质中心的Δ都落在极限Δ_0之内，则所有杂质中心的总热能（不考虑杂质间的相互作用）为

$$E = -\int_{-\Delta_0}^{\Delta_0} d\Delta\rho(\Delta, T)\ \Delta tanh\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right),$$

其中$\rho(\Delta, T)$是在温度T时Δ的几率分布。于是热容量为

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{\Delta_0} = -\int_{-\Delta_0}^{\Delta_0} d\Delta \frac{\partial \rho}{\partial T}\Delta tanh\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right)$$

$$+k_B\int_{-\Delta_0}^{\Delta_0} d\Delta\rho(\Delta,T)\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right)^2 Sech^2\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right).$$

在很低的温度下，$k_BT \ll \Delta_0$，所有的杂质中心大部分处于基态，被热激发的几率很小，所以几率分布ρ与温度的关系是不明显的，上式第一项可以略去，而$\rho(\Delta,T)$可以近似地用$\rho(0,0) = \rho_0$代替。于是：

$$C \approx k_B\int_{-\Delta_0}^{\Delta_0} d\Delta\rho_0\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right)^2 Sech^2\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right)$$

$$= k_B^2T\rho_0\int_{-\Delta_0/k_BT}^{\Delta_0/k_BT} dx x^2 Sech^2 x.$$

因为$k_BT \ll \Delta_0$积分的上下限可以改为$\pm\infty$，即

$$C = \rho_0 k_B^2 T\int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2\ Sech^2 x.$$

所以热容量C与T成线性关系，这一结果可用来说明稀磁性合金的低温热容量与温度的关系。

8. $S=1$ 体系的顺磁性。（a） 对于$S=1$，磁矩为μ而浓度为n的自旋系，求磁化强度与磁场及温度的函数关系。

（b） 证明在$\mu B \ll k_BT$的范围内结果为$M \approx (2n\mu^2/3k_BT)B$。

〈解〉

（a） 自旋$S=1$的体系，其磁矩为$\mu_S = gS_z\mu_B$，在磁场B的作用下，分裂为三个能级：$E_1 = 2\mu_BB = \mu B, E_2 = 0$，$E_3 = -2\mu_BB = -\mu B$，则平均磁矩为

$$\langle\mu\rangle = \frac{\sum_{S_z=-1}^{1} \mu_{S_z} e^{-\mu S_z B/k_B T}}{\sum_{S_z=-1}^{1} e^{-\mu S_z B/k_B T}}$$

$$= \frac{\mu(e^{\mu B/k_B T} - e^{-\mu B/k_B T})}{1 + e^{-\mu k/R_B T} + e^{\mu B/k_B T}}.$$

用n表示自旋浓度，则磁化强度为

$$M = n\langle\mu\rangle = n\mu\left(\frac{e^{\mu B/k_B T} - e^{-\mu B/k_B T}}{1 + e^{\mu B/k_B T} + e^{-\mu B/k_B T}}\right).$$

（b） 当$\mu B \ll k_B T$时，将上式展开，只保留$\mu B/k_B T$的一次项，得

$$M \approx \frac{2n\mu^2 B}{3k_B T}.$$

第十五章　铁磁性与反铁磁性

1．磁振子的色散关系．对于在简立方晶格（$z=6$）上的自旋S，导出磁振子的色散关系。

〈解〉

对于简单立方晶格，中心原子p的自旋S_P与六个最近邻自旋的交换作用能为

$$U=-2J\sum_{\delta}S_P\cdot S_{P+\delta}, \tag{1}$$

则S_P的运动方程为

$$\frac{d\mathbf{S}_p}{dt}=-\frac{i}{\hbar}\left[\mathbf{S}_p,U\right]=\frac{2J}{\hbar}\sum_{\delta}\mathbf{S}_p\times\mathbf{S}_{p+\delta}. \tag{2}$$

设　$S_p^z\approx S$，S_p^x，$S_p^y\ll S$，则上式近似写为

$$\left.\begin{aligned}\dot{S}_p^x&\approx\frac{2JS}{\hbar}\left(6S_p^y-\sum_{\delta}S_{p+\delta}^y\right),\\ \dot{S}_p^y&\approx\frac{2JS}{\hbar}\left(\sum_{\delta}S_{p+\delta}^x-6S_p^x\right),\\ \dot{S}_p^z&\approx 0.\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

令所求的解为

$$\left.\begin{aligned}S_p^x&=ue^{i\,k\,\cdot\,p\,-i\omega t},\\ S_p^y&=ve^{ik\cdot p-i\omega t}.\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

代入（3）式得：

$$\left.\begin{aligned} -i\omega u &= \frac{2JS}{\hbar}\left(6-\sum_{\delta}e^{ik\cdot\delta}\right)v, \\ -i\omega v &= \frac{2JS}{\hbar}\left(\sum_{\delta}e^{ik\cdot\delta}-6\right)u. \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

由u，v的系数行列式为零，即

$$\begin{vmatrix} i\omega & \frac{2JS}{\hbar}\left(6-\sum_{\delta}e^{ik\cdot\delta}\right) \\ \frac{2JS}{\hbar}\left(\sum_{\delta}e^{ik\cdot\delta}-6\right) & i\omega \end{vmatrix} = 0 \tag{6}$$

可解出色散关系：

$$\hbar\omega \approx 2JS\left(6-\sum_{\delta}e^{ik\cdot\delta}\right). \tag{7}$$

取其实部，有

$$\hbar\omega \approx 2JS\left(6-\sum_{\delta}\cos k\cdot\delta\right). \tag{8}$$

这就是磁振子的色散关系，与原书470页公式(24)一致.

2．磁振子的热容量. 利用近似的磁振子色散关系$\omega = Ak^2$，求出低温下（$k_BT \ll J$）三维铁磁体热容量的首项.

〈解〉

利用近似的色散关系$\omega = Ak^2$，可求出状态密度为

$$\frac{1}{(2\pi)^3}4\pi k^2\left(\frac{dk}{d\omega}\right) = \frac{2\pi\omega^{1/2}}{(2\pi)^3A^{3/2}}.$$

于是磁振子的内能为

$$E = \sum_{k}\frac{\hbar\omega_k}{e^{\hbar\omega_k/k_BT}-1} = \frac{\hbar}{4\pi^2A^{3/2}}\int_0^{\omega_{max}}\frac{\omega^{3/2}d\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}(\hbar A)^{-3/2}(k_BT)^{5/2}\int_0^{\frac{\hbar\omega_{max}}{k_BT}}\frac{x^{3/2}dx}{e^x-1}.$$

在低温下$k_BT \ll \hbar\omega_{max}$，积分上限可以取为$\infty$，

$$E=\frac{(k_BT)^{5/2}}{4\pi^2(\hbar A)^{3/2}}\int_0^\infty\frac{x^{3/2}dx}{e^x-1}$$

$$=\frac{(k_BT)^{5/2}}{4\pi^2(\hbar A)^{3/2}}\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^{5/2}}\right)$$

所以

$$C_V=\frac{\partial E}{\partial T}$$

$$\approx 0.113k_B\left(k_BT/\hbar A\right)^{3/2}.$$

3. 奈耳（Néel）温度。 在反铁磁体的双子晶格模型中取有效场为

$$B_A=B_a-\mu M_B-\varepsilon M_A;\qquad B_B=B_a-\mu M_A-\varepsilon M_B,$$

证明

$$\frac{\theta}{T_N}=\frac{\mu+\varepsilon}{\mu-\varepsilon}.$$

〈解〉

若两个子晶格的有效场分别可写为

$$B_A=B_a-\mu M_B-\varepsilon M_A,$$

$$B_B=B_a-\mu M_A-\varepsilon M_B,$$

则A，B两个子晶格的磁化强度可表示为

$$M_A=N_Ag\mu_BJB_J(g\mu_BJB_A/k_BT),\qquad(1)$$

$$M_B=N_Bg\mu_BJB_J(g\mu_BJB_B/k_BT),\qquad(2)$$

其中N_A、N_B为两子晶格的原子数，$B_J(x)$为布里渊函数。

(1)当$T>T_N$时，可将M_A，M_B展开并近似表示为

$$M_A\approx\frac{N_Ag^2\mu_B^2J(J+1)}{3k_BT}(B_a-\varepsilon M_A-\mu M_B),\qquad(3)$$

$$M_B\approx\frac{N_Bg^2\mu_B^2J(J+1)}{3k_BT}(B_a-\mu M_A-\varepsilon M_B).\qquad(4)$$

设，$N_A = N_B = N$，则

$$M = M_A + M_B = \frac{Ng^2\mu_B^2 J(J+1)}{3k_B}\left[\ 2B_a - (\mu + \varepsilon)M\ \right]. \quad (5)$$

由此解得：

$$\chi = \frac{M}{B_a} = \frac{C}{T+\theta}, \quad (6)$$

其中

$$C = \frac{2Ng^2\mu_B^2 J(J+1)}{3k_B}, \quad (7)$$

$$\theta = \frac{N(\mu+\varepsilon)g^2\mu_B{}^2 J(J+1)}{3k_B}. \quad (8)$$

(2)当$T = T_N$时，取$B_a = 0$，(3)、(4)两式变为

$$M_A \approx \frac{-N\mu_{eff}^2}{3k_BTN}(\varepsilon M_A + \mu M_B), \quad (9)$$

$$M_B \approx \frac{-N\mu_{eff}^2}{3k_BT_N}(\mu M_A + \varepsilon M_B), \quad (10)$$

或写为

$$\left(1 + \frac{N\mu_{eff}^2}{3k_BT_N}\varepsilon\right)M_A + \frac{N\mu_{eff}^2}{3k_BT_N}\mu M_B = 0, \quad (11)$$

$$\frac{N\mu_{eff}^2}{3k_BT_N}\mu M_A + \left(1 + \frac{N\mu_{eff}^2}{3k_BT_N}\varepsilon\right)M_B = 0, \quad (12)$$

其中 $\mu_{eff}^2 = g^2\mu_B^2 J(J+1)$。要$M_A$、$M_B$有非零解，要求上式的系数行列式为零，即

$$\begin{vmatrix} \left(1 + \frac{N\mu_{eff}^2}{3k_BT_N}\varepsilon\right), & \frac{N\mu_{eff}^2}{3k_BT_N}\mu \\ \frac{N\mu_{eff}^2}{3R_BT_N}\mu & \left(1 + \frac{N\mu_{eff}^2}{3k_BT_N}\varepsilon\right) \end{vmatrix} = 0$$

解出

$$T_N = \frac{N\mu_{eff}^2}{3R_B}(\mu - e). \tag{13}$$

再利用(8)式，得

$$\frac{\theta}{T_N} = \frac{\mu + e}{\mu - e}.$$

4．磁弹耦合。立方晶体中弹性能密度通过通常的应变分量e_{ij}表示为

$$U_{el} = \frac{1}{2}C_{11}(e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2}C_{44}(e_{xy}^2 + e_{yz}^2 + e_{zx}^2) + C_{12}(e_{yy}e_{zz} + e_{xx}e_{zz} + e_{xx}e_{yy}),$$

根据原书（54）式，磁各向异性能密度的首项为

$$U_K = K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2).$$

弹性应变与磁化方向之间耦合可以形式上引入一项

$$U_C = B_1(\alpha_1^2 e_{xx} + \alpha_2^2 e_{yy} + \alpha_1^2 e_{zz}) + B_2(\alpha_1\alpha_2 e_{xy} + \alpha_2\alpha_3 e_{yz} + \alpha_3\alpha_1 e_{zx})$$

使它包括在总能量密度中，它来自U_K与应变的关系，B_1与B_2称为磁弹耦合常数。证明当

$$e_{ij} = \frac{B_1[C_{12} - \alpha_i^2(C_{11} + 2C_{12})]}{[(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})]},$$

$$e_{ij} = -\frac{B_2\alpha_i\alpha_j}{C_{44}} \qquad (i \neq j)$$

时，总能量为极小。这可以说明长度随磁化而改变的磁致伸缩现象的来源。

〈解〉

总的各向异性能为

$$U = U_{el} + U_K + U_C$$

$$= K_1(a_1^2a_2^2 + a_2^2a_3^2 + a_3^2a_1^2) + B_1(a_1^2e_{xx} + a_2^2e_{yy} + a_3^2e_{zz})$$
$$+ B_2(a_1a_2e_{xy} + a_2a_3e_{yz} + a_3a_1e_{zx})$$
$$+ \frac{1}{2}C_{11}\left(e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2\right) + \frac{1}{2}C_{44}\left(e_{xy}^2 + e_{yz}^2 + e_{zx}^2\right)$$
$$+ C_{12}(e_{yy}e_{zz} + e_{xx}e_{zz} + e_{xx}e_{yy}). \qquad (1)$$

由U的极小条件

$$\frac{\partial U}{\partial e_{xx}} = B_1a_1^2 + C_{11}e_{xx} + C_{12}(e_{yy} + e_{zz}) = 0,$$

$$\frac{\partial U}{\partial e_{yy}} = B_1a_2^2 + C_{11}e_{yy} + C_{12}(e_{xx} + e_{zz}) = 0,$$

$$\frac{\partial U}{\partial e_{zz}} = B_1a_3^2 + C_{11}e_{zz} + C_{12}(e_{xx} + e_{yy}) = 0;$$

$$\frac{\partial U}{\partial e_{xy}} = B_2a_1a_2 + C_{44}e_{xy} = 0,$$

$$\frac{\partial U}{\partial e_{xz}} = B_2a_1a_3 + C_{44}e_{xz} = 0,$$

$$\frac{\partial U}{\partial e_{yz}} = B_2a_2a_3 + C_{44}e_{yz} = 0$$

解得：

$$e_{ij} = \frac{B_1[C_{12} - a_i^2(C_{11} + 2C_{12})]}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}; \qquad (2)$$

$$e_{ij} = -B_2a_ia_j/C_{44},\ i \neq j,\ j, i = 1、2、3. \qquad (3)$$

上述结果可用于磁致伸缩，利用应变张量分量e_{ij}的定义

$$\left.\begin{aligned} x' &= (1 + e_{xx})x + \frac{1}{2}e_{xy}y + \frac{1}{2}e_{xz}z, \\ y' &= \frac{1}{2}e_{xy}x + (1 + e_{yy})y + \frac{1}{2}e_{yz}z, \\ z' &= \frac{1}{2}e_{zx}x + \frac{1}{2}e_{yz}y + (1 + e_{zz})z, \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

在l方向上（方向余弦为β_i，$i=1$，2，3）晶体长度的相对变化可表示为

$$\frac{\delta l}{l}=\sum_{i\geqslant r}e_{ij}\beta_i\beta_j. \tag{5}$$

将（2）、（3）式代入可得

$$\begin{aligned}\frac{\delta l}{l}=&-\frac{B_1}{C_{11}-C_{12}}\left(\alpha_1^2\beta_1^2+\alpha_2^2\beta_2^2+\alpha_3^2\beta_3^2\right)\\&-\frac{B_2}{C_{44}}\left(\alpha_1\alpha_2\beta_1\beta_2+\alpha_1\alpha_3\beta_1\beta_3+\alpha_2\alpha_3\beta_2\beta_3\right)\\&+\frac{C_{12}B_1}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})}.\end{aligned} \tag{6}$$

上式最后一项可以分解为两项：

$$\begin{aligned}&\frac{C_{12}B_1}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})}\\&=\frac{B_1}{3}\left(\frac{1}{C_{11}-C_{12}}-\frac{1}{C_{11}+2C_{12}}\right);\end{aligned}$$

第二项比第一项小，略去它后，（6）式可写为

$$\begin{aligned}\frac{\delta l}{l}=&-\frac{B_1}{C_{11}-C_{12}}\left(\alpha_1^2\beta_1^2+\alpha_2^2\beta_2^2+\alpha_3^2\beta_3^2-\frac{1}{3}\right)\\&-\frac{B_2}{C_{44}}\left(\alpha_1\alpha_2\beta_1\beta_2+\alpha_1\alpha_3\beta_1\beta_3+\alpha_2\alpha_3\beta_2\beta_3\right)\\=&\frac{3}{2}\lambda_{100}\left(\alpha_1^2\beta_1^2+\alpha_2^2\beta_2^2+\alpha_3^2\beta_3^2-\frac{1}{3}\right)\\&+3\lambda_{111}(\alpha_1\alpha_2\beta_1\beta_2+\alpha_1\alpha_3\beta_1\beta_3+\alpha_2\alpha_3\beta_2\beta_3),\end{aligned} \tag{7}$$

其中 $\lambda_{100}=-\frac{2}{3}\frac{B_1}{(C_{11}-C_{12})}$，

$$\lambda_{111}=-\frac{1}{3}\frac{B_2}{C_{44}}$$

分别为〔100〕，〔111〕方向的纵向磁致伸缩的饱和值。

5．微粒的矫顽力。（a） 设有球形的单轴铁磁单畴微粒。证明沿轴向使磁化强度反转所需要的反向磁场为 $B_a = 2K/M_S$ (CGS)．此为单畴粒子矫顽力的观测值的数量级．取 $U_K = K\sin^2\theta$ 为各向异性能密度，$U_M = -B_aM\cos\theta$ 为外场 H 的相互作用能密度，θ 为 $\mathbf{B}_a$ 与 $\mathbf{M}$ 之间的夹角。（b）证明直径为 d 的小球的饱和磁能约为 $M_S^2d^3$，在赤道平面上形成一个简单畴壁是可以明显地降低磁能的一种排列。而畴壁能为 $\pi\sigma_Wd^2/4$，这里 σ_W 为单位面积的畴壁能。对于Co，计算形成稳定单畴的临界半径，计算时 JS^2/a 取Fe的值。

〈解〉

（a）考虑一球形单畴单轴铁磁微粒，沿轴向有外磁场 B_a 作用，设 $\mathbf{M}_S$ 与 $\mathbf{B}_a$ 的夹角为 θ，则微粒的总能量为

$$U = U_K + U_M + U_d = K\sin^2\theta - B_aM_S\cos\theta + \frac{1}{2}\frac{4\pi}{3}M_S^2。\quad (1)$$

M_S 的平衡位置应由 U 的极小值条件决定，即由

$$\frac{\partial}{\partial\theta}U = \frac{\partial}{\partial\theta}\left(K\sin^2\theta - B_aM_S\cos\theta\right)$$

$$= 2K\sin\theta\cos\theta + B_aM_S\sin\theta = 0$$

解出 $\sin\theta = 0$， (2)

或 $\cos\theta = -\dfrac{M_SB_a}{2K}$。 (3)

$\sin\theta = 0$ 的解，当 $\theta = 0$，或 $\theta = \pi$ 而 $B_a < 2K/M_S$ 时均对应于 U 的最小值；而(3)式中当 $\theta = \pi$ 而 $B_a > 2K/M_S$ 时相应于 U 的最大值——势垒峰，越过这一势垒峰作不可逆转动所需的最大磁场即 $|\cos\theta| = 1$ 的磁场，就是矫顽力，所以

$$H_C = \frac{2K}{M_S}。\quad (4)$$

(b) 直径为d的饱和单轴铁磁小球，磁能为退磁能，即

$$E_d = \frac{1}{2}NM_S^2V$$

$$= \frac{1}{2}\frac{4\pi}{3}\cdot\frac{4\pi}{3}\left(\frac{d}{2}\right)^3 M_S^2$$

$$= \frac{\pi^2}{9}M_S^2d^3 \approx M_S^2d^3. \qquad (5)$$

沿赤道面形成一个畴壁，对应的畴壁能为

$$E_W = \sigma_W \cdot S = \pi\sigma_W d^2/4,$$

其中σ_W为畴壁能密度.

若此小球变成两个磁畴，则磁能应包括退磁能(现为单畴时的$\frac{1}{2}$)和畴壁能E_W，即

$$E_W = \frac{1}{2}\cdot\frac{\pi^2}{9}M_S^2d^3 + \frac{1}{4}\pi d^2\sigma_W, \qquad (6)$$

在临界情况下，单畴与双畴的磁能应相等. 因此临界条件为：

$$\frac{\pi^2}{9}M_S^2d^3 \approx \frac{1}{2}\frac{\pi^2}{9}M_S^2d^3 + \frac{1}{4}\pi d^2\sigma_W. \qquad (7)$$

由此决定临界直径：

$$d_0 = \frac{9}{2\pi}\frac{\sigma_W}{M_S^2}. \qquad (8)$$

对铁来说，可估算出

$$\sigma_W = 2\pi\left(\frac{JKS^2}{a}\right)^{1/2} = \left(\frac{k_BT_CK}{a}\right)^{1/2} \approx 1\text{erg/cm}^2.$$

用同一公式估算钴，把相应的数值代入上式，得：

$$\sigma_W = \left(\frac{1.38\times10^{-16}\times1.4\times10^3\times4\times10^6}{2.5\times10^{-8}}\right)^{1/2}$$

$$\approx 5.5\text{erg/cm}^2$$

$$d_0 \approx \frac{1.5\times 5.5}{(1.4)^2\times 10^6} \approx 4\times 10^{-6}\text{cm}.$$

6. T_C附近的饱和磁化强度. 证明在平均场近似下在稍稍低于居里温度时，饱和磁化强度的温度关系主要由$(T_C-T)^{1/2}$决定. 设自旋为$\frac{1}{2}$. 此结果与铁电晶体中的二级转变相同. 对于铁磁体，实验数据（表1）表明，上面的指数更接近于0.33.

〈解〉

设$J=S=\frac{1}{2}$，自发磁化强度与温度关系可写为

$$M_S(T)=M_S(0)\tanh x, \qquad (1)$$

其中
$$x=\frac{\frac{1}{2}g\mu_B\lambda M_S(T)}{k_BT}=\frac{M_S(T)T_C}{M_S(0)T}, \qquad (2)$$

$$M_S(0)=\frac{1}{2}Ng\mu_B \qquad (3)$$

$$T_C=\frac{Ng^2\mu_B^2\lambda}{4k_B}. \qquad (4)$$

当$T\to T_C$时，$M_S(T)\to 0$，可将（1）式展开，得到

$$\frac{M_S(T)}{M_S(0)}\approx\frac{M_S(T)T_C}{M_S(0)T}-\frac{1}{3}\left[\frac{M_S(T)T_C}{M_S(0)T}\right]^3.$$

$$\left(\frac{M_S(T)}{M_S(0)}\right)^2=3\left(\frac{T}{T_C}\right)^3\left(\frac{T_C}{T}-1\right)$$

所以，在$T\to T_C$时，

$$\left(\frac{M_S(T)}{M_S(0)}\right)^2\approx 3\frac{1}{T_C}\left(T_C-T\right).$$

$$M_S(T)\propto(T_C-T)^{1/2}.$$

此时，在饱和磁化强度的温度关系中，占主要优势的是$(T_C-T)^{1/2}$因子.

第十六章　磁共振与微波激射器

1．等效电路。设有一空心线圈，电感为L_0与电阻R_0串联；若线圈中填满磁化率分量为 $\chi'(\omega)$ 与 $\chi''(\omega)$ 的自旋系，证明频率为ω时电感变为$L=[1+4\pi\chi'(\omega)]L_0$，串联的有效电阻为$R=4\pi\omega\chi''(\omega)L_0+R_0$。本问题中对于线偏振射频（$Rf$）场定义了$\chi=\chi'-i\chi''$。

〈解〉

空心的电感线圈的阻抗为

$$Z=R_0+i\omega L_0,\quad i=\sqrt{-1}\ .$$

若在线圈中填满$\mu=1+4\pi\chi=1+4\pi(\chi'-i\chi'')$的介质，则阻抗变为

$$\begin{aligned}Z&=R_0+i\omega\mu L_0\\&=R_0+i\omega L_0[1+4\pi(\chi'-i\chi'')]\\&=R+i\omega L\ ,\end{aligned}$$

其中　$R=R_0+4\pi\omega\chi''L_0$ ，

$L=(1+4\pi\chi')L_0$ 。

2．转动坐标系。定义矢量$\mathbf{F}(t)=F_x(t)\hat{x}+F_y(t)\hat{y}+F_z(t)\hat{z}$。令单位矢量为 $\hat{x}$，$\hat{y}$，$\hat{z}$的坐标系以瞬时角速度$\boldsymbol{\Omega}$转动，所以有$d\hat{x}/dt=\Omega_y\hat{z}-\Omega_z\hat{y}$，等等。（$a$）　证明$d\mathbf{F}/dt=(d\mathbf{F}/dt)_R+\boldsymbol{\Omega}\times\mathbf{F}$，其中$(d\mathbf{F}/dt)_R$是在转动坐标$R$中看到的$\mathbf{F}$的时间

导数。（b） 证明$dM/dt = \gamma M \times B_0$可以写为 $(d\mathbf{M}/dt)_R = \gamma \mathbf{M} \times (\mathbf{B}_0 \times \boldsymbol{\Omega}/\gamma)$。这是M在转动坐标系中的运动方程。变换到转动坐标系的办法是特别有用的，在文献中已广为采用。（c） 令$\boldsymbol{\Omega} = -\gamma B_0 \hat{z}$，这样在转动坐标系中没有静磁场。仍然在转动坐标系中，时间t内加上直流脉冲磁场$B_1 \hat{x}$。若开始时磁化强度沿$\hat{z}$方向，而在脉冲结束时沿$-\hat{z}$方向，试求出脉冲长度 t 的表示式（略去弛豫效应）。（d） 从实验室参考系观察，描述此脉冲。

〈解〉

(a)
$$\frac{d\mathbf{F}(t)}{dt} = \frac{dF_x}{dt}\hat{x} + \frac{dF_y}{dt}\hat{y} + \frac{dF_z}{dt}\hat{z} + F_x\frac{d\hat{x}}{dt} + F_y\frac{d\hat{y}}{dt} + F_z\frac{d\hat{z}}{dt}$$

$$= \left(\frac{d\mathbf{F}(t)}{dt}\right)_R + F_x\frac{d\hat{x}}{dt} + F_y\frac{d\hat{y}}{dt} + F_z\frac{d\hat{z}}{dt}, \quad (1)$$

其中

$$\left(\frac{d\mathbf{F}(t)}{dt}\right)_R = \frac{dF_x}{dt}\hat{x} + \frac{dF_y}{dt}\hat{y} + \frac{dF_z}{dt}\hat{z} \quad (2)$$

表示从转动坐标系所看到的F随t的变化率，

而
$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \Omega_y\hat{z} - \Omega_z\hat{y} = \boldsymbol{\Omega} \times \hat{x},$$

$$\frac{d\hat{y}}{dt} = \Omega_z\hat{x} - \Omega_x\hat{z} = \boldsymbol{\Omega} \times \hat{y},$$

$$\frac{d\hat{z}}{dt} = \Omega_x\hat{y} - \Omega_y\hat{x} = \boldsymbol{\Omega} \times \hat{z}.$$

代入（1）式即得

$$\frac{d\mathbf{F}}{dt} = \left(\frac{d\mathbf{F}}{dt}\right)_R + F_x\boldsymbol{\Omega} \times \hat{x} + F_y\boldsymbol{\Omega} \times \hat{y} + F_z\boldsymbol{\Omega} \times \hat{z}$$

$$= \left(\frac{d\mathbf{F}}{dt}\right)_R + \boldsymbol{\Omega} \times (F_x \hat{x} + F_y \hat{y} + F_z \hat{z})$$

$$= \left(\frac{d\mathbf{F}}{dt}\right)_R + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{F} \ . \qquad (3)$$

(b) $$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B}_a$$

利用前面的结果可将上式变换到转动坐标系中，

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \left(\frac{d\mathbf{M}}{dt}\right)_R + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M}$$

$$= \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B}_a \ .$$

$$\therefore \quad \left(\frac{d\mathbf{M}}{dt}\right)_R = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B}_a - \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M}$$

$$= \gamma \mathbf{M} \times \left(\mathbf{B}_a + \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\gamma}\right), \qquad (4)$$

式中 $(\mathbf{B}_a + \boldsymbol{\Omega}/\gamma)$ 为在转动坐标系中看到的有效场.

(c) 若令$\boldsymbol{\Omega} = -\gamma B_0 \hat{z}$，静磁场$\mathbf{B}_0 = B_0 \hat{z}$，则在转动坐标系中将看不到静磁场，因为

$$\mathbf{B}_{eff} = \mathbf{B}_a + \boldsymbol{\Omega}/\gamma$$

$$= B_0 \hat{z} + \mathbf{B} - B_0 \hat{z} = \mathbf{B}, \qquad (5)$$

这里$\mathbf{B}$为$\mathbf{B}_0$以外的磁场。若$\mathbf{B} = B_1 \hat{x}$，即在 $\hat{x}$方向加一 静 磁 场，这时在转动坐标系中的运动方程为

$$\left(\frac{d\mathbf{M}}{dt}\right)_R = \gamma \mathbf{M} \times B_1 \hat{x} = \omega_p \mathbf{M} \times \hat{x}, \qquad (6)$$

其中$\omega_p = \gamma B_1$是在转动坐标系中看到的$\mathbf{M}$绕x轴的进动频率。因为在转动坐标系中看到的有效场现在只是B_1。M在yz平面内绕B_1旋

转，如B_1的作用刚好使M从z方向反转到$-z$方向，即绕B_1转了半圈，则脉冲的长度t为

$$t=\frac{\pi}{\omega_p}=\frac{\pi}{\gamma B_1}$$

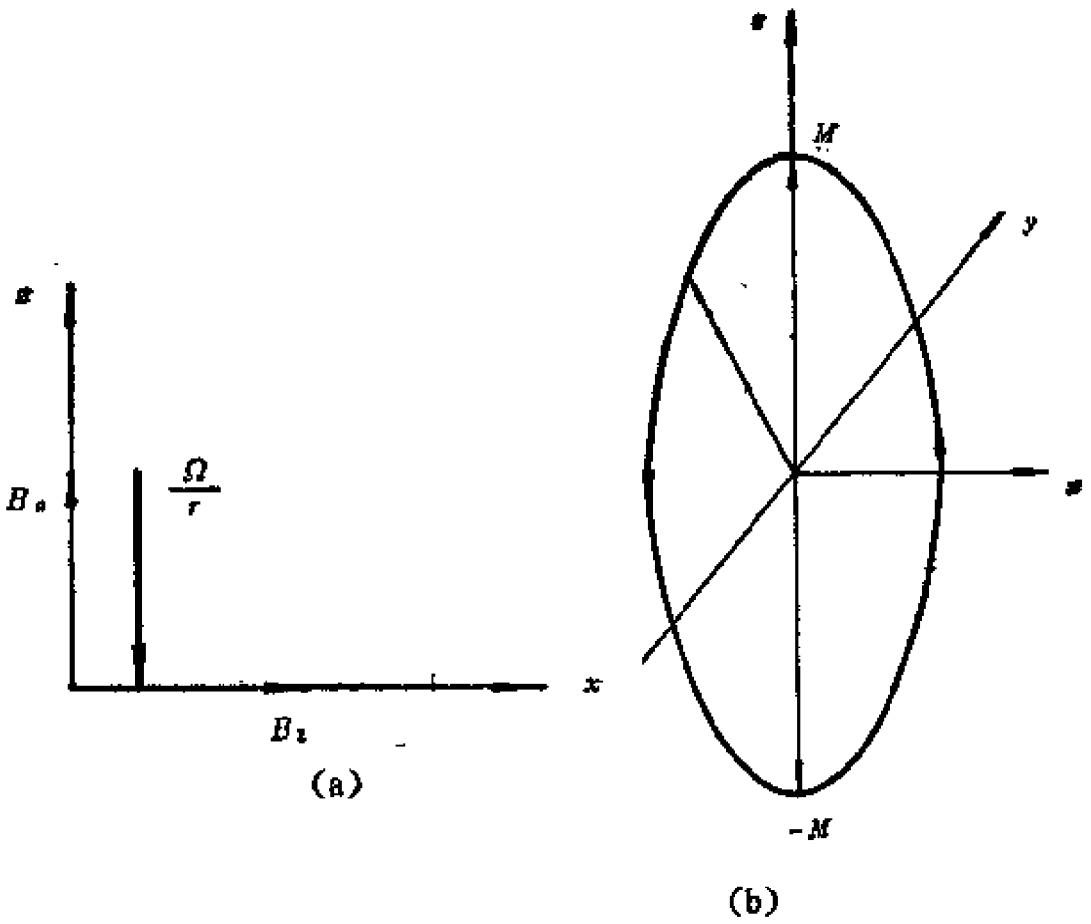


图16—1　有效场和M的进动

(*d*)　如果在实验室坐标系来观察这个脉冲磁场，则所看到的将是一个频率为ω的圆偏振磁场，其旋转方向与磁矩M绕静磁场$\mathbf{B}_0$的旋进方向一致。它的作用是使M与$\mathbf{B}_0$之间的夹角增大，当$\omega=\Omega=\gamma B_0$时，便产生共振吸收，经过时间$t=\pi/\gamma B_1$，使M从$\hat{z}$方向反转到$-\hat{z}$方向。

3．超精细结构对金属中电子自旋共振的影响。假定金属中

的传导电子的自旋受到来自电子自旋与核自旋的超精细相互作用，可以看成一种有效磁场。设传导电子所受到的有效场的 z 分量为

$$B_i = \left(\frac{a}{N}\right) \sum_{j=1}^{N} I_j^z ,$$

其中I_i^z以均等机会取$\pm\frac{1}{2}$。 (a) 证明$\langle B_i^2\rangle = (a/2N)^2 N$。

(b) 证明当$N \gg 1$时，$\langle B_i^4\rangle = 3\,(a/2N)^4 N^2$。

〈解〉

(a) 因为 $B_i = \frac{a}{N}\sum_{j=1}^{N} I_j^z$，

$$B_i^2 = \left(\frac{a}{N}\right)^2 \left(\sum_{i=1}^{N} I_i^z\right)\left(\sum_{j=1}^{N} I_j^z\right)$$

$$= \left(\frac{a}{N}\right)^2 \left[\sum_{i=1}^{N} (I_i^z)^2 + \sum_{i\neq j=1}^{N}\sum I_i^z I_j^z\right],$$

$$\langle B_i^2\rangle = \left(\frac{a}{N}\right)^2 \left[\left\langle \sum_{i=1}^{N} (I_i^z)^2 \right\rangle + \left\langle \sum_{i\neq j=1}^{N}\sum I_i^z I_j^z \right\rangle\right].$$

因为$I_i = \pm\frac{1}{2}$，且取$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$值的机会均等，所以上式右边第二项为零，而第一项中每一$(I_i^z)^2$都等於1/4，于是

$$\langle B_i^2\rangle = \left(\frac{a}{N}\right)^2 \left\langle \sum_{i=1}^{N} (I_i^z)^2 \right\rangle$$

$$= \frac{N}{4}\left(\frac{a}{N}\right)^2 = N\left(\frac{a}{2N}\right)^2.$$

(b) $$B_i^4 = \left(\frac{a}{N}\right)^4 \left(\sum_{i=1}^{N} I_i^z\right)^4$$

$$= \left(\frac{a}{N}\right)^4 \left\{ \sum_i \sum_l (I_i^z)^2 (I_l^z)^2 + 2 \sum_i \sum_{l \neq k} \sum (I_i^z)^2 I_l^z I_k^z \right.$$

$$\left. + \left(\sum_{i \neq j} \sum I_i^z I_j^z \right) \left(\sum_{l \neq k} \sum I_l^z I_k^z \right) \right\}$$

$$= \left(\frac{a}{N}\right)^4 \left\{ \sum_i \sum_l (I_i^z)^2 (I_l^z)^2 + 2 \sum_i \sum_{l \neq k} \sum (I_i^z)^2 I_l^z I_k^z \right.$$

$$\left. + 2 \sum_{i \neq j} \sum (I_i^z)^2 (I_j^z)^2 + \sum \sum_{i \neq j} \sum_{l \neq k} \sum I_i^z I_j^z I_l^z I_k^z \right\}.$$

上式第二、四两项的平均值为零，于是

$$\langle B_i^4 \rangle = \left(\frac{a}{N}\right)^4 \left\langle \sum_i \sum_l (I_i^z)^2 (I_j^z)^2 \right.$$

$$\left. + 2 \sum_{i \neq j} \sum (I_i^z)^2 (I_j^z)^2 \right\rangle$$

$$= \left(\frac{a}{N}\right)^4 \left[\left(\frac{1}{4}\right)^2 N^2 + 2N(N-1) \left(\frac{1}{4}\right)^2 \right]$$

$$\approx 3 \left(\frac{a}{2N}\right)^4 N^2 \qquad (\because N \gg 1.)$$

4．各向异性场中的铁磁共振（FMR）。设有球形单轴铁磁晶体，各向异性能密度为 $U_K = K\sin^2\theta$，其中 θ 是磁化强度与 Z 轴的交角。假定 K 是正的，证明在外磁场 $B_0\hat{Z}$ 中，铁磁共振频率为 $\omega_0 = \gamma(B_0 + B_A)$，其中 $B_A = 2K/M_s$。

〈解〉

磁各向异性的作用可以通过有效场 B_K 来表达. 设想当 $\mathbf{M}_s$ 偏离平衡位置时，就受到转矩 $M_s B_K \sin\theta$ 的作用，另一方面这个转矩又等於 $\frac{\partial U_K}{\partial \theta}$，于是

$$B_K = \frac{1}{M_s \sin\theta} \frac{\partial U_K}{\partial \theta},$$

其中 $U_K = K\sin^2\theta$ 。

所以在易磁化方向有效场为

$$B_K = \left(\frac{1}{M_S \sin\theta} \frac{\partial U_K}{\partial \theta}\right)\theta = 0$$

$$= \frac{2K}{M_S}.$$

再加上静磁场$B_0 \hat{z}$，总的有效场为

$$\mathbf{B}_{eff} = (B_0 + \frac{2K}{M_S}) \hat{z}.$$

在B_{eff}作用下的铁磁共振频率为

$$\omega_0^2 = \gamma^2[B_{eff} + (N_y - N_z)M_S][B_{eff} + (N_x - N_z)M_S].$$

若样品为球形，则$N_x = N_y = N_z$，所以

$$\omega_0 = \gamma B_{eff} = \gamma(B_0 + \frac{2K}{M_S}) .$$

5．交换共振频率。设含有磁化强度为M_A与M_B的A、B两子晶格的亚铁磁体，当自旋体系处于静态时$\mathbf{M}_A$与$\mathbf{M}_B$方向相反。其旋磁比为γ_A，γ_B，分子场为$\mathbf{B}_A = -\lambda\mathbf{M}_B$；$\mathbf{B}_B = -\lambda\mathbf{M}_A$。证明在频率

$$\omega_0^2 = \lambda^2(\gamma_A|M_B| - \gamma_B|M_A|)^2$$

时发生共振。ω_0称为交换共振频率。

〈解〉

M_A，M_B满足运动方程

$$\left.\begin{aligned} \frac{d\mathbf{M}_A}{dt} &= \gamma_A \mathbf{M}_A \times (\mathbf{B}_0 - \lambda\mathbf{M}_B), \\ \frac{d\mathbf{M}_B}{dt} &= \gamma_B \mathbf{M}_B \times (\mathbf{B}_0 - \lambda\mathbf{M}_A), \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

式中$\mathbf{B}_0$为外加磁场，由于亚铁磁体内子晶格间的交换作用很强，交换场要比实验室通常所能达到的场高得多，在考虑交换场引起的共振时可略去$\mathbf{B}_0$。上式变为：

$$\left.\begin{aligned}\frac{d\mathbf{M}_A}{dt} &= -\lambda\gamma_A\mathbf{M}_A\times\mathbf{M}_B\ ,\\ \frac{d\mathbf{M}_B}{dt} &= -\lambda\gamma_B\mathbf{M}_B\times\mathbf{M}_A\ .\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

现在M_A、M_B以相同的频率ω_{ex}进动，可表示为

$$\left.\begin{aligned}\frac{d\mathbf{M}_A}{dt} &= \omega_{ex}\times\mathbf{M}_A,\\ \frac{d\mathbf{M}_B}{dt} &= \omega_{ex}\times\mathbf{M}_B.\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

代入（2）式，得

$$\omega_{ex}\times\mathbf{M}_A = -\lambda\gamma_A\mathbf{M}_A\times\mathbf{M}_B\ , \tag{4}$$

$$\omega_{ex}\times\mathbf{M}_B = -\lambda\gamma_B\mathbf{M}_B\times\mathbf{M}_A\ . \tag{5}$$

合并（4）、（5）两式可得到下面二个方程：

$$\omega_{ex}\times(\mathbf{M}_A+\mathbf{M}_B) = \lambda(\gamma_B-\gamma_A)\mathbf{M}_A\times\mathbf{M}_B\ , \tag{6}$$

$$\omega_{ex}\times\left(\frac{\mathbf{M}_A}{\gamma_A}+\frac{\mathbf{M}_B}{\gamma_B}\right) = 0. \tag{7}$$

（7）式表明ω_{ex}平行于$(\mathbf{M}_A/\gamma_A+\mathbf{M}_B/\gamma_B)$，故可设

$$\begin{aligned}\omega_{ex} &= a\ (\mathbf{M}_A/\gamma_A+\mathbf{M}_B/\gamma_B)\ ,\\ &= \frac{a}{\gamma_A\gamma_B}\ (\gamma_B\mathbf{M}_A+\gamma_A\mathbf{M}_B)\ .\end{aligned} \tag{8}$$

代入（6）式，可求出a为

$$a = \lambda\gamma_A\gamma_B\ . \tag{9}$$

于是（8）式变为

$$\omega_{ex}=\lambda\ (\gamma_B\mathbf{M}_A+\gamma_A\mathbf{M}_B)\ . \tag{10}$$

$$\therefore\quad \omega^2{}_{ex}=\lambda^2\ (\gamma_B\mathbf{M}_A+\gamma_A\mathbf{M}_B)\cdot(\gamma_B\mathbf{M}_A+\gamma_A\mathbf{M}_B)$$

$$=\lambda^2\ (\gamma_B{}^2M_A{}^2+\gamma_A{}^2M_B{}^2+2\gamma_A\gamma_B\mathbf{M}_A\cdot\mathbf{M}_B)\ .$$

因为$\mathbf{M}_A$，$\mathbf{M}_B$反平行，故$\mathbf{M}_A\cdot\mathbf{M}_B=-M_AM_B$，所以

$$\omega_{ex}{}^2=\lambda^2[\gamma_A|M_B|-\gamma_B|M_A|]^2\ . \tag{11}$$

6．射频（Rf）饱和。已知在磁场$H_0\hat{z}$中温度为T处于平衡的二能级自旋系统，粒子数各为N_1和N_2，跃迁几率为W_{12}，W_{21}。加上射频信号，产生的跃迁几率为W_{Rf}。(*a*)导出dM_z/dt的方程，并证明在稳定态，

$$M=M_0/\ (1+2W_{rf}T_1)\ ,$$

其中$1/T_1=W_{12}+W_{21}$。写成$N=N_1+N_2$，$n=N_1-N_2$。和$n_0=N\ (W_{21}-W_{12})\ /\ (W_{21}+W_{12})$是有用的。我们看到，只要$2W_{rf}T_1\ll1$，从$rf$场吸收的能量不明显偏离粒子数分布的热平衡值。（*b*）利用n的表达式，写出从rf场吸收能量的速率。当W_{rf}接近$1/2T_1$时会出现什么现象？这种效应称为饱和，其起始值可用来测量T_1。

〈**解**〉

(*a*)　设在dt时间内由$E_2\to E_1$的跃迁几率为$(W_{21}+W_{rf})\ dt$，由$E_1\to E_2$的跃迁几率为$(W_{12}+W_{rf})\ dt$，其中W_{rf}为加入射频场后所引起的$E_1\rightleftharpoons E_2$的跃迁几率，所以

$$\frac{dN_1}{dt}=-(W_{12}+W_{rf})N_1+(W_{21}+W_{rf})N_2, \tag{1}$$

$$\frac{dN_2}{dt}=\ (W_{12}+W_{rf})N_1-(W_{21}+W_{rf})N_2. \tag{2}$$

磁化强度$M_z=(N_1-N_2)\mu_B$，随t的变化率为

$$\frac{dM_z}{dt}=\mu_B\left(\frac{dN_1}{dt}-\frac{dN_2}{dt}\right)$$

$$=2\mu_B[W_{21}N_2-W_{12}N_1-W_{rf}(N_1-N_2)]. \quad (3)$$

达到稳定状态后M_z应不变，即

$$\frac{dM_z}{dt}=0\ ,$$

$$\therefore \quad W_{21}N_2-W_{12}N_1=W_{rf}(N_1-N_2)\ .$$

令 $\frac{1}{T_1}=W_{12}+W_{21}$，$N=N_1+N_2$，$n=N_1-N_2$代入(4)式得

$$N(W_{21}-W_{12})=n(2W_{rf}+\frac{1}{T_1}). \quad (5)$$

未加射频场时，$W_{rf}=0$，$n=n_0$，由上式得

$$n_0=\frac{N(W_{21}-W_{12})}{W_{12}+W_{21}}\ .$$

所以(5)式可改写为

$$n(2W_{rf}+\frac{1}{T_1})=n_0(W_{12}+W_{21})=\frac{n_0}{T_1},$$

$$\therefore \quad n=\frac{n_0}{1+2W_{rf}T_1} \quad (6)$$

因此在射频场作用下体系的磁化强度为

$$M_z=n\mu_B=\frac{M_0}{1+2W_{rf}T_1}, \qquad M_0=n_0\mu_B\ . \quad (7)$$

可见当$2W_{rf}T_1\ll1$时，射频场基本上不改变体系原来的平衡分布，$n\approx n_0$，$M_z\approx M_0$.

(b) 从射频场吸收能量的速率p，等于能态2和1之间自旋数之差n、两能级之间的能量差$\Delta E=2\mu_BH$以及由射频场引起$E_1\to E_2$

W_{rf}三者的乘积，即

$$p = n\Delta E W_{rf}$$

$$= \frac{2n_0\mu_B H W_{rf}}{1 + 2W_{rf}T_1}. \tag{8}$$

若W_{rf}很大，则

$$p \approx \frac{2n_0\mu_B H}{2T_1} \tag{9}$$

与W_{rf}无关，表示达到饱和，称为射频饱和效应。

当 $W_{rf} \approx \frac{1}{2T_1}$时，由（6）式得

$$n \approx \frac{n_0}{2}.$$

此时吸收线的强度（与n成正比）降低到原来的$\frac{1}{2}$。降低的原因是随着W_{rf}的增大，高能级上的粒子数与低能级上的粒子数逐渐变成相等。可以利用这种饱和效应来测量T_1。

第十七章　点缺陷与合金

1．夫伦克耳缺陷．在含有N个格点及N'个可能的间隙位置的晶体中，试证与n个晶格空位相平衡的间隙原子数 n 可由方程

$$E_I = k_B T \ln[(N-n)(N'-n)/n^2]$$

给出；当$n \ll N$，N'时，由此可有

$$n \approx (NN')^{1/2} \exp(-E_I/2k_BT)\ .$$

这里E_I是把一个原子从晶格位置上移走并放到间隙位置上所需要的能量。

〈解〉

从晶体的N个原子中取出n个原子而形成n个空位的可能方式数为

$$W' = \frac{N!}{(N-n)!n!}\ . \tag{1}$$

把取出的n个原子排列在N'个间隙位置中而形成间隙原子的可能方式数为

$$W'' = \frac{N'!}{(N'-n)!n!}\ . \tag{2}$$

因此，形成n个夫伦克耳缺陷，即同时形成n个空位和n个间隙原子的可能方式数为

$$W = W'W'' = \frac{N!N'!}{(N-n)!(N'-n)!(n!)^2}\ . \tag{3}$$

由于晶体中产生缺陷引起熵的改变为

$$S = k_B \ln W \ ,$$

相应的自由能改变为

$$F = nE_I - k_B T \ln W \ , \tag{4}$$

其中E_I为形成一个夫伦克耳缺陷所需要的能量．平衡时，缺陷数n可由$\partial F/\partial n = 0$来决定．把（4）式代入平衡条件，考虑到$N$很大，利用司特林公式$\ln N! = N\ln N - N$，可得：

$$\begin{aligned} E_I &= k_B T[\ln(N-n) + \ln(N'-n) - 2\ln n] \\ &= k_B T \ln[(N-n)(N'-n)/n^2] \ . \end{aligned} \tag{5}$$

温度不太高时，$n \ll N$，N'，因此（5）式变成

$$n \approx (NN')^{1/2} \exp(-E_I/2k_B T) \ . \tag{6}$$

2．肖脱基空位．假定从钠晶体内拔走一个钠原子放到晶体表面上所需要的能量为1ev．试计算300K时肖脱基空位的浓度．

〈**解**〉

肖脱基空位浓度为

$$n/N = \exp(-E_V/k_B T) \ .$$

把$E_V = 1\text{ev} = 1.60 \times 10^{-12}\text{erg}$，$k_B = 1.38 \times 10^{-16}\text{erg} \cdot \text{K}^{-1}$，$T = 300\text{K}$代入得

$$n/N = 1.6 \times 10^{-17} \ .$$

和在$T = 1000\text{K}$时$n/N \approx 10^{-5}$比较可见，常温附近，空位的浓度非常小．

3．F心．（*a*）　把F心当作质量为m的自由电子，在介电常数为$\varepsilon = n^2$的介质内的点电荷e场中运动来处理，NaCl中F心的1s—2p能级差等于什么？（*b*）　根据表3，将NaCl中F心的激发能与自由钠原子的3s—3p能差进行比较．

〈解〉

(a) 点电荷e，在真空中所产生的库仑场为$-e^2/r$，而在介电常数为ε的介质内所产生的库仑场应为

$$-e^2/\varepsilon r=-e^{*2}/r\ .$$

由此可见，在介质中，点电荷e相当于减少了$1/\sqrt{\varepsilon}$倍。如果以有效电荷$e^*=e/\sqrt{\varepsilon}$来代替e，则本问题变成质量为m的自由电子在真空中点电荷e^*库仑场中运动的问题。这是量子力学中的典型的类氢问题。于是，F心的电子在点电荷e^*库仑场中运动的定态能量为

$$\varepsilon_{n'}=-\frac{1}{n'^2}\frac{me^{*4}}{2\hbar^2},\qquad n'=1,\ 2,\ 3,\ \cdots\cdots.$$

这里n'为主量子数。

NaCl中F心的1s—2p能级差为

$$\Delta\varepsilon=-\frac{me^{*4}}{2\hbar^2}\cdot\left(\frac{1}{2^2}-1\right)$$

$$=\frac{3}{8}\frac{me^{*4}}{\hbar^2}=\frac{3}{8}\frac{me^4}{\hbar^2\varepsilon^2}.$$

(b) 由表3的数据知，对于NaCl中F心的激发能应为 2.7 ev。另外我们知道自由钠原子的3s—3p能级差为2.1ev。比较两个数值可见，二者大小相近，都落在可见光波段；但是二者数值不同，F心的激发并不是NaCl中的钠原子的电子激发而是由于束缚在Cl^-空位中的电子的激发。

4. Cu_3Au的超格子谱线. Cu_3Au合金（75%Cu，25%Au）在400 C以下具有一种有序态，其中Au原子占据面心立方晶格的000位置，而Cu原子占据$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$，$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$以及$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$位置。给出合金从无序态变为有序态时新出现的x射线反射的指标。列出指

标≤2的所有的新反射。

〈解〉

设Cu的原子结构因子为f_{Cu}，Au的原子结构因子为f_{Au}。Cu_3Au面心立方晶格原子基团的几何结构因子应为

$$S_G = \sum_j f_j \exp\ (-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j)$$

$$= \sum_j f_j \exp[-i2\pi\ (x_j h + y_j k + z_j l)]\ .$$

当合金处于无序态时，Au和Cu原子占据面心立方晶胞两类格点中的任一格点的机会均等，所以原子结构因子 $f_j = \langle f_j \rangle = \frac{1}{4}$ $(f_{Au} + 3f_{Cu}) = f$ 。于是有

$$S_G = f[1 + e^{-i\pi\ (k+l)} + e^{-i\pi\ (l+l)} + e^{-i\pi\ (h+k)}]\ .$$

由此可见，当hkl全为奇数或全为偶数时，

$$S_G = 4f\ ,$$

而当hkl不全为奇或不全为偶时，

$$S_G = 0\ ,$$

因此，Cu_3Au处于无序态时，只出现hkl全为奇或全为偶的反射面不出现不全为奇不全为偶的反射.

当合金处于完全有序态时，Au原子只占据000位置，Cu原子只占据$\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$等的三个位置，因此

$$S_G = f_{Au} + f_{Cu}[e^{-i\pi\ (k+l)} + e^{-i\pi\ (h+l)} + e^{-i\pi\ (h+k)}]\ .$$

由于$f_{Au} \neq f_{Cu}$，现在不仅hkl全为奇或全为偶时 $S_G \neq 0$，而且hkl不全为奇或不全为偶时 S_G也不等于零。因此，Cu_3Au处于完全有序态时，出现了一系列hkl不全为奇和不全为偶的新反射。指数≤2的所有新反射为：

(012)，(021)，(102)，(201)，(120)，(210)；

(011), (101), (110), (211), (121), (112).

5. 位形热容量. 导出通过$P(T)$来表示的、与AB合金中有序-无序效应相联系的热容量公式（原书560页公式(23)的熵，称为位形熵）.

〈解〉

若AB合金具有体心立方晶格结构，它可由两个简单立方子格子a和b穿插套构而成. 定义$P(T)$为长程有序参量. 若合金中含有N个A原子和N个B原子，则有$\frac{1}{2}(1+P)N$个A原子和$\frac{1}{2}(1-P)N$个B原子占据子格子a，而有$\frac{1}{2}(1-P)N$个A原子和$\frac{1}{2}(1+P)N$个B原子占据子格子b. 这些原子的可能的排列方式数为

$$G=\left\{\frac{N!}{\left[\frac{1}{2}(1+P)N\right]!\left[\frac{1}{2}(1-P)N\right]!}\right\}^2.$$

根据玻耳兹曼的熵定义$S=k_B\ln G$，并利用司特林公式，可得：

$$S=2Nk_B\ln 2-Nk_B[(1+P)\ln(1+P)+(1-P)\ln(1-P)].$$

这就是AB合金的位形熵.

位形熵对热容量的贡献，即位形热容量，结果如下式：

$$C=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)$$

$$=-Nk_BT\frac{\partial P}{\partial T}\ln\frac{(1+P)}{(1-P)}$$

$$=Nk_BT\frac{\partial P}{\partial T}\ln\frac{1-P}{1+P}.$$

第十八章　位　错

1．原子最密集堆积线。证明fcc结构中的原子最密集堆积线为〈110〉，而在bcc结构中为〈111〉。

〈解〉

设fcc原胞的晶格常数为a，则沿〈110〉方向上的原子平均线密度为$\frac{2}{\sqrt{2}}\frac{1}{a}$，沿〈100〉方向上的原子平均线密度为$\frac{1}{a}$，沿〈111〉方向为$\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{a}$，而其它方向的线密度更小。因此，在fcc结构中，〈110〉为原子最密集堆积线。

同理，若bcc结构的晶格常数为a，则沿〈111〉方向的原子平均线密度为$\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{1}{a}$，沿〈100〉方向为$\frac{1}{a}$，沿〈110〉方向为$\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{a}$，其它方向更小。因此，在bcc结构中，〈111〉为原子最密集堆积线。

2．位错对。（a）　找出等价于一行晶格空位的位错对；（b）　找出等价于一列间隙原子的位错对。

〈解〉

（a）　如图18—1所示，如果两个正、负刃型位错的滑移面之间正好相距两个原子间距，在外力作用下，正、负刃型位错相遇时，就会形成一行空位。

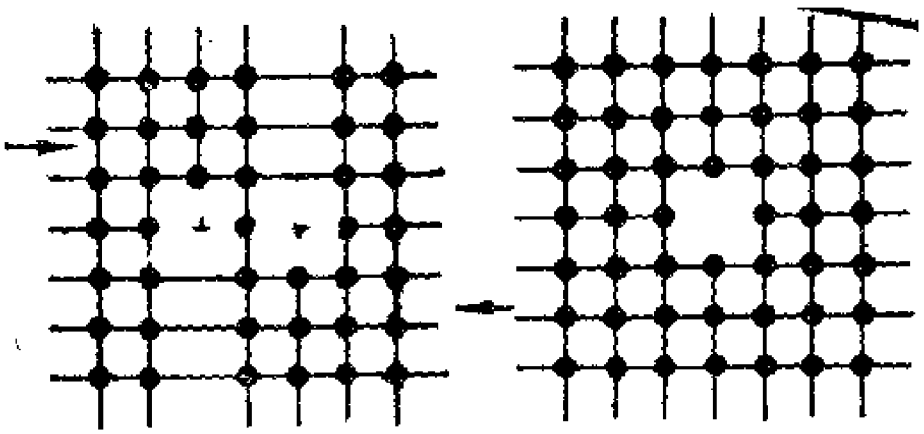


图18—1　与一行空位等价的位错对

(*b*)　如图18—2所示，如果两个正、负刃型位错的滑移面正好重迭，在外力作用下，正、负刃型位错相遇时，就出现多余的一列原子，形成一列间隙原子。

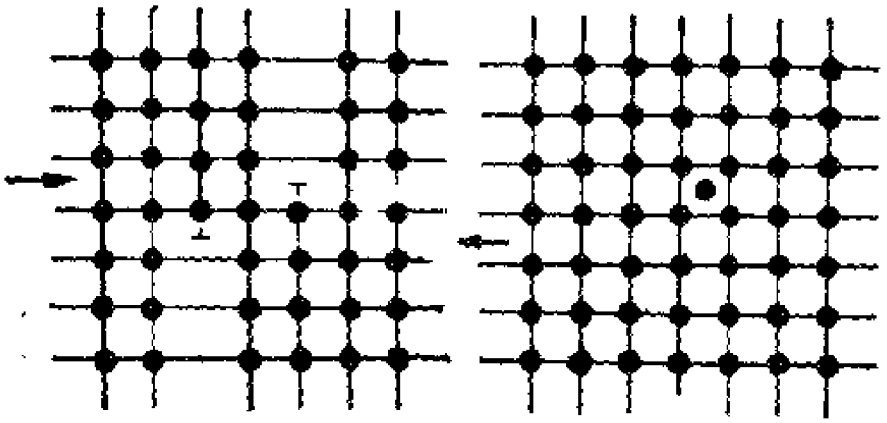


图18—2　与一列间隙原子等价的位错对

3．作用于位错上的力．设在边长为L的立方形晶体中，含有一个伯格斯矢量为b的刃型位错．如果晶体在滑移方向上的上、下平面受到切应力σ的作用，从能量平衡考虑，证明作用在每单位长度位错上的力为$F=b\sigma$。

〈解〉

如果有一切应力σ作用于晶体，并沿伯格斯矢量方向（滑移方向），则沿位错线的法向就有一个力作用着。位错环线元ds在力F的作用下，沿其法线方向向外位移dl，ds所扫过的面积为$dsdl$。如果整个滑移面面积为A，则当ds扫过面积$dsdl$时引起晶体部的平均滑移应等于$(\frac{dsdl}{A})b$，而作用在晶体上的总切向力为σA。因此，当上下两部份的相对位移为$(\frac{dsdl}{A})b$时，系统增加的能量为

$$dE=\sigma A(\frac{dsdl}{A})b=\sigma(dsdl)b\ .$$

于是，作用在位错环线元ds上的法向力为

$$\frac{dE}{dl}=\sigma bds\ ,$$

而作用在单位长度位错线上的力应为

$$F=\sigma b\ .$$

力F同位错环线处处相互垂直。若σ足够大，位错环线在力F的作用下，将不断沿其法线方向扩展，于是滑移面积不断增大，最后导致晶体上、下两部份的相对滑移。