24 春固体物理期中答案

题 1 简答题

(a)

单条带的电导率

$$\boldsymbol{\sigma}_i = \boldsymbol{\rho}_i^{-1} = \frac{1}{\rho_i^2 + R_i^2 B^2} \begin{pmatrix} \rho_i & R_i B \\ -R_i B & \rho_i \end{pmatrix}, i = 1, 2 \tag{1}$$

总电导率

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{2}$$

总电阻率

$$\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\sigma}^{-1} \tag{3}$$

题目所求纵向电导率即为

$$\rho(B) = \rho_{xx} = \frac{\rho_1\rho_2(\rho_1+\rho_2) + (\rho_1 R_2^2 + \rho_2 R_1^2)B^2}{(\rho_1+\rho_2)^2 + (R_1+R_2)^2 B^2} \tag{4}$$

对于全补偿金属，分母的 B^2 项消去，因此高场下磁阻主要由分子的 B^2 项决定，使得磁阻正比于 B^2。

如果不能完全补偿，则在高场下磁阻趋于一常数，即趋于饱和。

- 注 1：计算过程如下。应当注意到分母可以因式分解。

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{yy}}{\det(\boldsymbol{\sigma})} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{\sigma}) &= \left(\frac{\rho_1}{\rho_1^2+R_1^2B^2} + \frac{\rho_2}{\rho_2^2+R_2^2B^2}\right)^2 + \left(\frac{R_1B}{\rho_1^2+R_1^2B^2} + \frac{R_2B}{\rho_2^2+R_2^2B^2}\right)^2 && (6) \\ &= \frac{(\rho_1(\rho_2^2+R_2^2B^2) + \rho_2(\rho_1^2+R_1^2B^2))^2 + (R_1B(\rho_2^2+R_2^2B^2) + R_2B(\rho_1^2+R_1^2B^2))^2}{(\rho_1^2+R_1^2B^2)^2(\rho_2^2+R_2^2B^2)^2} && (7) \end{aligned}$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\rho_1}{\rho_1^2+R_1^2B^2} + \frac{\rho_2}{\rho_2^2+R_2^2B^2} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \rho_{xx} &= \frac{\sigma_{yy}}{\det(\boldsymbol{\sigma})} && (9) \\ &= \frac{(\rho_1(\rho_2^2+R_2^2B^2) + \rho_2(\rho_1^2+R_1^2B^2))(\rho_1^2+R_1^2B^2)(\rho_2^2+R_2^2B^2)}{(\rho_1(\rho_2^2+R_2^2B^2) + \rho_2(\rho_1^2+R_1^2B^2))^2 + (R_1B(\rho_2^2+R_2^2B^2) + R_2B(\rho_1^2+R_1^2B^2))^2} && (10) \end{aligned}$$

而分母

$$\begin{aligned} &(\rho_1(\rho_2^2+R_2^2B^2) + \rho_2(\rho_1^2+R_1^2B^2))^2 + (R_1B(\rho_2^2+R_2^2B^2) + R_2B(\rho_1^2+R_1^2B^2))^2 \\ &= (\rho_1^2+R_1^2B^2)(\rho_2^2+R_2^2B^2)((\rho_1+\rho_2)^2 + (R_1+R_2)^2B^2) && (11) \end{aligned}$$

代入约去重复因子即可

- 注 2：
$$\left(\frac{\rho_1}{\rho_1^2+R_1^2B^2}+\frac{\rho_2}{\rho_2^2+R_2^2B^2}\right)^2+\left(\frac{R_1B}{\rho_1^2+R_1^2B^2}+\frac{R_2B}{\rho_2^2+R_2^2B^2}\right)^2 \tag{12}$$
直接打开有助于简化计算

- 注 3：注意到
$$\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2=\boldsymbol{\rho}_1^{-1}+\boldsymbol{\rho}_2^{-1} \tag{13}$$
故
$$\boldsymbol{\rho}_1\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\rho}_2=\boldsymbol{\rho}_1+\boldsymbol{\rho}_2 \tag{14}$$
$$\det(\boldsymbol{\sigma})=\frac{\det(\boldsymbol{\rho}_1+\boldsymbol{\rho}_2)}{\det(\boldsymbol{\rho}_1)\det(\boldsymbol{\rho}_2)} \tag{15}$$
(此做法来自考卷)

(b)

由几何结构因子表达式 (课程幻灯片：《晶体结构的测定》15 页)
$$F(\boldsymbol{G})=\sum_a e^{-\mathbb{i}\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{d}_a}f(\boldsymbol{G}) \tag{16}$$
1. 对于题设面心立方晶体，有
$$F(\boldsymbol{G})=f(\boldsymbol{G})[1+(-1)^{h+k}+(-1)^{k+l}+(-1)^{l+h}] \tag{17}$$
因此系统的消光条件为 h,k,l 既有奇数又有偶数，即两奇一偶或两偶一奇

2. 对于金刚石结构的晶体，由于其中两个面心立方具有复制与移动的关系，因此可以直接将复制的贡献与单个面心立方晶体的几何结构因子相乘，也即
$$F(\boldsymbol{G})=f(\boldsymbol{G})[1+(-1)^{h+k}+(-1)^{k+l}+(-1)^{l+h}][1+(-\mathbb{i})^{h+k+l}] \tag{18}$$
此时系统的消光条件为:
$\{h,k,l$ 既有奇数又有偶数，即两奇一偶或两偶一奇$\}$ 或 $\{(h+k+l) \mod 4=2\}$

(c)

1. 对于体心立方晶格，其倒格子为面心立方。设单胞的边长为 a，则倒空间最近邻两格点的间距为
$$b=\frac{2\sqrt{2}\pi}{a} \tag{19}$$
每个原子的电子数最大时，费米球与第一布里渊区边界相切。其半径为
$$k_c=\frac{b}{2}=\frac{\sqrt{2}\pi}{a} \tag{20}$$
对于自旋简并度为 2 的系统，其电子总数为
$$N_e=2\frac{Na^3}{(2\pi)^3}\frac{4}{3}\pi k_c^3 \tag{21}$$

其中 N 是单胞数量。系统中的原子总数为

$$N_{\text{atom}} = 2N \tag{22}$$

故每个原子的电子数

$$n_a = \frac{N_e}{N_{\text{atom}}} = \frac{\sqrt{2}\pi}{3} \tag{23}$$

2. 对于面心立方晶格，其倒格子为体心立方。其余情况是类似的。设单胞的边长为 a，则倒空间最近邻两格点的间距为

$$b = \frac{2\sqrt{3}\pi}{a} \tag{24}$$

每个原子的电子数最大时，费米球与第一布里渊区边界相切。其半径为

$$k_c = \frac{b}{2} = \frac{\sqrt{3}\pi}{a} \tag{25}$$

电子总数为

$$N_e = 2\frac{Na^3}{(2\pi)^3}\frac{4}{3}\pi k_c^3 \tag{26}$$

系统中的原子总数为

$$N_{\text{atom}} = 4N \tag{27}$$

故每个原子的电子数

$$n_a = \frac{N_e}{N_{\text{atom}}} = \frac{\sqrt{3}\pi}{4} \tag{28}$$

题 2 二维德拜模型

(a)

由

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \Pi} = \frac{\Pi}{\rho}, \tag{29}$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial \psi} + \nabla \cdot \frac{\partial H}{\partial(\nabla\psi)} = \sigma\nabla^2\psi, \tag{30}$$

可得 ψ 的运动方程

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{\sigma}{\rho}\nabla^2\psi = 0. \tag{31}$$

代入试探解 $\psi = \psi_0 \exp(\mathbb{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t))$，可得

$$\left(\frac{\sigma}{\rho}\boldsymbol{q}^2 - \omega^2\right)\psi_0 = 0, \tag{32}$$

于是可得德拜模型色散关系

$$\omega_{\boldsymbol{q}} = v_s|\boldsymbol{q}|,\ v_s = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho}}. \tag{33}$$

(b)

能量密度（单位面积能量）为

$$u = \int_{|\boldsymbol{q}|<q_D} \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{q}}{(2\pi)^2}\hbar\omega_{\boldsymbol{q}}\left[f_B(\hbar\omega_{\boldsymbol{q}}) + \frac{1}{2}\right] \tag{34}$$

$$= \int_0^{q_D} \frac{2\pi q\mathrm{d}q}{(2\pi)^2}\left[\frac{\hbar v_s q}{e^{\beta\hbar v_s q} - 1} + \frac{\hbar v_s q}{2}\right] = u_0 + u_1(T), \tag{35}$$

其中

$$u_0 = \int_0^{q_D} \frac{2\pi q\mathrm{d}q}{(2\pi)^2}\frac{\hbar v_s q}{2} = \frac{\hbar v_s q_D^3}{12\pi}. \tag{36}$$

引入 $x \equiv \beta\hbar v_s q$，则

$$u_1(T) = \frac{1}{2\pi\hbar^2 v_s^2\beta^3}\int_0^{\beta\hbar v_s q_D}\frac{x^2\mathrm{d}x}{e^x - 1}, \tag{37}$$

在低温极限 $\beta\hbar v_s q_D \gg 1$ 的情况下

$$u_1(T) \sim \frac{1}{2\pi\hbar^2 v_s^2\beta^3}\int_0^{\infty}\frac{x^2\mathrm{d}x}{e^x - 1} = \frac{\zeta(3)k_B^3T^3}{\pi\hbar^2 v_s^2}, \tag{38}$$

单位面积比热容

$$c_V = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{3\zeta(3)k_B^3}{\pi\hbar^2 v_s^2}T^2 \propto T^2. \tag{39}$$

(c)

高温极限 $\beta\hbar v_s q_D \ll 1$ 时，利用展开式

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x} - \frac{1}{2} + \frac{x}{12} + \mathcal{O}(x^3), \tag{40}$$

并记 $x_D = \beta\hbar v_s q_D \ll 1$，则有

$$u_1(T) = \frac{1}{2\pi\hbar^2 v_s^2 \beta^3} \int_0^{x_D} \mathrm{d}x \left(x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{12} + \mathcal{O}(x^5) \right) \tag{41}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar^2 v_s^2 \beta^3} \left(\frac{x_D^2}{2} - \frac{x_D^3}{6} + \mathcal{O}(x_D^4) \right) \tag{42}$$

$$= \frac{q_D^2}{4\pi} k_B T - \frac{\hbar v_s q_D^3}{12\pi} (1 - \mathcal{O}(x_D)), \tag{43}$$

故比热容对 q_D 的领头阶为

$$c_V = \frac{\partial u_1}{\partial T} \approx \frac{q_D^2}{4\pi} k_B. \tag{44}$$

计算 q_D 和数密度 n 关系:

$$N = \frac{V}{(2\pi)^2} \cdot \pi q_D^2 \Rightarrow n = \frac{q_D^2}{4\pi}. \tag{45}$$

每个谐振子贡献热容 k_B，因此这个结果符合经典统计的能均分定理

$$c_V = n k_B. \tag{46}$$

题 3 一维紧束缚模型

(a)

取晶格常数为 1，傅里叶变换

$$a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\in\mathrm{BZ}} a_k^\dagger e^{-\mathrm{i}kj},\ b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k\in\mathrm{BZ}} b_k^\dagger e^{-\mathrm{i}kj}. \tag{47}$$

则

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} a_j^\dagger b_{j+m} = \frac{1}{N} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sum_{k,k'\in\mathrm{BZ}} a_k^\dagger b_{k'} e^{-\mathrm{i}kj+\mathrm{i}k'(j+m)} \tag{48}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sum_{k,k'\in\mathrm{BZ}} a_k^\dagger b_{k'} e^{\mathrm{i}km} e^{\mathrm{i}(k'-k)(j+m)}, \tag{49}$$

利用

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{\mathrm{i}(k'-k)(j+m)} = N\delta_{k,k'}, \tag{50}$$

可以得到

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} a_j^\dagger b_{j+m} = \sum_{k\in\mathrm{BZ}} a_k^\dagger b_k e^{\mathrm{i}km}. \tag{51}$$

带入本题的哈密顿量，可以得到

$$H = -\sum_{k\in\mathrm{BZ}} (t_+ + t_- e^{-\mathrm{i}k}) a_k^\dagger b_k + \mathrm{H.c.}, \tag{52}$$

或

$$H = \sum_{k\in\mathrm{BZ}} [a_k^\dagger, b_k^\dagger] \begin{bmatrix} 0 & -t_+ - t_- e^{-\mathrm{i}k} \\ -t_+ - t_- e^{\mathrm{i}k} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_k \\ b_k \end{bmatrix}. \tag{53}$$

可利用泡利矩阵分解 $h(k) = -(t_+ + t_- \cos k)\sigma_x - t_- \sin k \sigma_y$（或直接计算），对角化得到色散关系

$$\varepsilon_\pm(k) = \pm\sqrt{(t_+ + t_- \cos k)^2 + t_-^2 \sin^2 k} \tag{54}$$

$$= \pm\sqrt{2(t^2+\alpha^2u^2) + 2(t^2-\alpha^2u^2)\cos k}, \tag{55}$$

能带示意图如图所示.$k=\pi$ 处的能隙 $\varepsilon_+(\pi) - \varepsilon_-(\pi) = 4|\alpha u|$. 根据定义，有效质量

$$\frac{1}{m_\pm^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_\pm}{\partial k^2}. \tag{56}$$

当 $\alpha u \neq 0$ 时,

$$\frac{\partial \varepsilon_\pm}{\partial k} = \frac{1}{2\varepsilon_\pm} \frac{\partial \varepsilon_\pm^2}{\partial k} = -\frac{t^2-\alpha^2u^2}{\varepsilon_\pm(k)} \sin k, \tag{57}$$

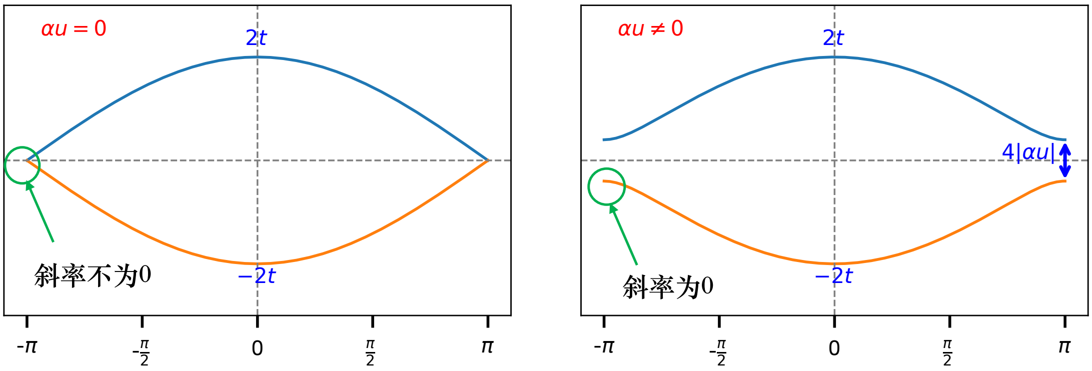
于是

$$\left.\frac{\partial^2 \varepsilon_\pm}{\partial k^2}\right|_{k=\pi} = \frac{t^2-\alpha^2u^2}{\varepsilon_\pm(\pi)} = \pm\frac{t^2-\alpha^2u^2}{2|\alpha u|}, \tag{58}$$

因此有效质量为

$$m_\pm^*(k=\pi) = \pm\frac{2\hbar^2|\alpha u|}{t^2-\alpha^2u^2} \left(= \pm\frac{\hbar^2|t_+ - t_-|}{t_+ t_-} \right). \tag{59}$$

当 $\alpha u = 0$ 时，$\varepsilon_\pm(k) = \pm 2t|\cos(k/2)|$，在 $k=\pi$ 处二阶导不存在. 但此时有效质量在 $\alpha u = 0$ 的左右极限均为 0，因此认为有效质量为 0.



(b)

低能带本征态为 $u_k = \frac{1}{\sqrt{2}}[-1, e^{-\mathrm{i}\phi}]^T$, 其贝利联络

$$A_k = \langle u_k | \mathrm{i}\partial_k | u_k \rangle = \frac{1}{2}\frac{\partial \phi(k, \alpha u)}{\partial k}, \tag{60}$$

因此

$$\gamma(\alpha u) = \int_{-\pi}^{\pi} A(k)\mathrm{d}k = \frac{1}{2}\oint_C \mathrm{d}\phi \tag{61}$$

其中环路 C 为 k 从 $-\pi$ 取到 π 时，$t(k) = -t_+ - t_- e^{-\mathrm{i}k}$ 在复平面上的闭合轨迹.

当 $\alpha u > 0$，即 $t_+ > t_-$ 时，C 不包含原点，因此 $\gamma(\alpha u > 0) = 0$. 当 $\alpha u < 0$，即 $t_+ < t_-$ 时，C 包含原点，$t(k)$ 会顺时针绕原点一周，因此 $\gamma(\alpha u < 0) = \frac{1}{2} \cdot (-2\pi) = -\pi$. 于是

$$\gamma(\alpha u > 0) - \gamma(\alpha u < 0) = \pi. \tag{62}$$

注：如果按试卷上给出的 $t(k) = -t_+ - t_- e^{+\mathrm{i}k}$，则 $\alpha u < 0$ 为逆时针一周，此时计算结果为 $\gamma(\alpha u > 0) - \gamma(\alpha u < 0) = -\pi$.