第十一周 作业

1. 用紧束缚近似的能带表达式

$$E\left(\vec{k}\right)=E\_{n}-J\left(0\right)-\sum\_{s\ne 0}^{最近邻}J\left(\vec{R}\_{s}\right)e^{i\vec{k}∙\vec{R}\_{s}}$$

求出面心立方晶格和体心立方晶格s态原子能级相应的能带函数

解：

1. 某晶体中电子的等能面是椭球面$E\left(\vec{k}\right)=\frac{ℏ^{2}}{2}(\frac{k\_{x}^{2}}{m\_{1}}+\frac{k\_{y}^{2}}{m\_{2}}+\frac{k\_{z}^{2}}{m\_{3}})$，求该能谱的电子态密度

提示：通过体积对E的微分来求

1. 已知某简立方晶体的晶格常数为a，其价电子的能带

$$E\left(\vec{k}\right)=A\cos(\left(k\_{x}a\right))\cos(\left(k\_{y}a\right))\cos(\left(k\_{z}a\right))+B$$

其中A>0，求

1. 测得带顶电子有效质量$m^{\*}=-\frac{ℏ^{2}}{2a^{2}}$，求参数A
2. 求能带宽度
3. 求布里渊区中心点附近电子的状态密度