

1. 在势为  $V(x, y, z) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ 0, & x \geq 0 \end{cases}$  的条件下求解 schrodinger 方程，并计算电荷密度

$$\ell(x, y, z) = \frac{e}{V} \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} |\varphi_k|^2, \text{ 其中最大的 } K \text{ 值由费米能量 } E_f \text{ 决定。分析 } \ell(x) \text{ 的情况}$$

并讨论结果 (Friedel 震荡)。分两种情况考虑：经典金属 (电子密度  $10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ) 和弱掺杂的半导体 (电子密度  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ )。

2. (1) 考虑电子能带极小值区域的点，当  $k$  值足够小，使得  $E(k)$  可以写成抛物线近似的形式：

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right), \text{ } m_x, m_y, m_z \text{ 都是正的常数。请证明，在临界点}$$

$E_c (k=0)$  附近，态密度  $D(E)$  正比于  $(E - E_c)^{1/2}$

$$(2) \text{ 考虑一个 saddle point 附近，其色散关系为 } E(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} - \frac{k_z^2}{m_z} \right), m_x,$$

$m_y, m_z$  都是正的常数。证明：在  $E_c$  附近，态密度可以写成：

$$D(E) \propto \begin{cases} \text{const} & \text{for } E > E_c \\ D_0 - C(E_c - E)^{1/2} & \text{for } E < E_c \end{cases}$$

3. 请以电子的能带结构和对应态密度出发，解释铜为什么会体现不同于其他金属的色泽。比

如在可见光范围内，一些光学参数会表现谱结构的异常。(请查询相关资料解答)

4. 在角分辨紫外光电子谱 (ARUPS) 实验中，40.8eV 能量的光子束入射到一个立方结构的过渡

金属 (100) 面，其功函数为 4.5eV。费米能量以下 2.2eV 的 d 电子被光子激发出来，沿立方

体[100]方向，与正交面成45度角被探测。

(1) 计算被激发电子的波矢  $\mathbf{k}$ 。

(2) 当电子被激发，其电子态的波矢  $\mathbf{k}_i$  会发生什么情况。需要分别考虑  $k_{\perp}$  和  $k_{\parallel}$ （平行和垂直于表面）两个部分。