**第一章 晶体的基本性质**

1. 晶体的类型，特点，举例说明

晶体是长程有序的，又可以细分为单晶和多晶

TNNQD0R89B83}YMQ7KF]W03

有规则的几何外形；有固定的熔沸点；导电各向异性；导热各向异性；且导热速度较快，所以摸起来一般晶体手感较凉

4TF_`RP{6DD(T}52VW1_@]Q

食盐，冰块，金刚石，红宝石，蓝宝石，玉石

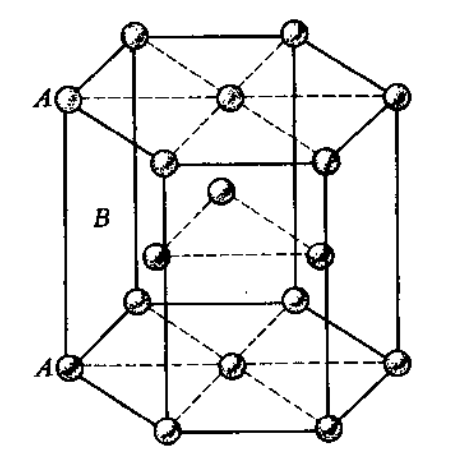
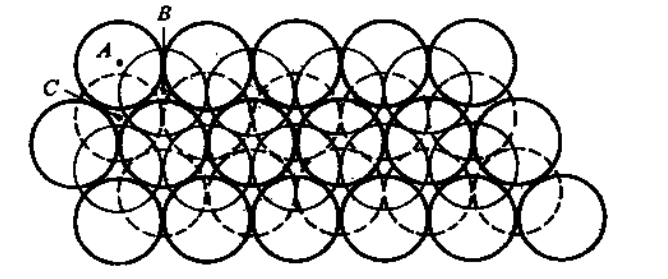
1. 几种常见的晶格（可能是概念和作图或者求维格纳赛茨晶胞，或者是倒格子或者是第一布里渊区等等等）
2. 简单立方晶格
3. 体心立方晶格

![VS)KHPUC](Q$2~BCMJR_$}Q](data:image/png;base64,)

前两个都不是密排的晶格

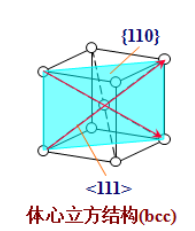
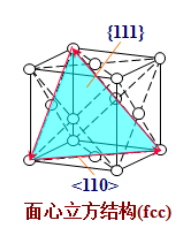
密排指的是在一个平面之内相切的，非密排是不相切的

1. 六方密排晶格（高的几何关系）

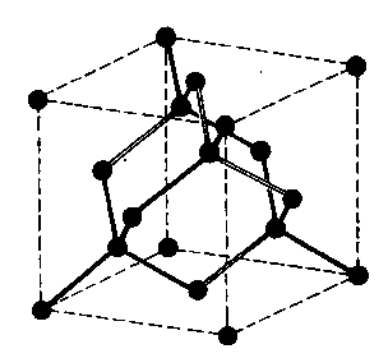
 

第二个图要特别注意，叫原子球的密排面（有可能考作图题）

密排面也就是指单位面积上的原子数最大的晶面，再通俗点讲就是这个面与其他面相比，这个面上的原子数密度是最大的。

1. 面心立方晶格
2. 金刚石类型的晶格

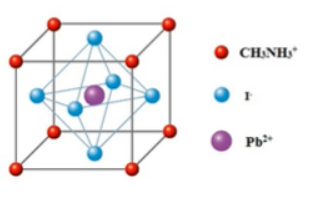


布拉伐格子的表示方法?有多少种对称操作?

化合物的晶格有三种，一种是氯化钠的晶格（面心立方），一种是氯化铯的晶格（体心立方），一种是硫化锌的晶格（金刚石），

6.其他类型的晶格

比如钙钛矿或者是石墨烯之类的



这个晶胞里面有五种不同的粒子，注意面心的碘离子是不一样的

布拉伐格子是什么?满足的几何关系是什么?所有的对称操作是什么?

（3）原胞，单胞，晶胞

原胞里面含的原子的个数问题（核心其实是看有几类不同的原子）如果只有一个的话，就是一个，如果有n类的话，一个原胞里面就是n个原子

（4）晶向，晶面（不是任意的，而是必须这个晶面经过平移可以覆盖所有的粒子）和等效的写法（四种括号）

（4）几种几何结构常见的对称操作，立方体是48个，正四面体和正六棱柱都是24个

【对称操作有需要注意的地方】如果是二维材料的话，不能出现第三个维度，比如一个二维正方形，不能说绕着一个轴线在空间中翻转，那样不符合维度要求

（5）倒格子的计算公式

注意是是系数，后面是两个向量叉乘

倒格子主要就是傅里叶变换的空间，倒格子一个点和晶格内一族晶面相对应

1. 求倒格子

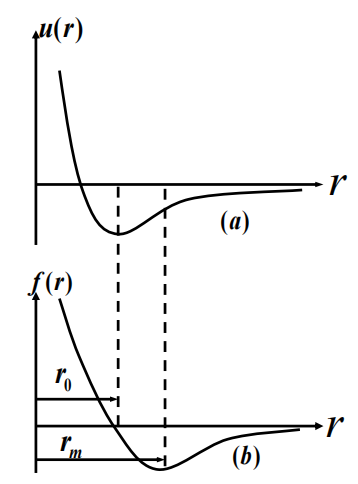
如果是二维的情况，需要在第三个维度上加一个，如果是三维就直接套公式就可以了

1. 求完倒格子之后可以求第一布里渊区

**第二章内容总结**

1.物理图像总结

1. 相互作用势能的图像
2. 相互作用力的图像



从左向右两个点，一个是一阶导数的零点，一个是二阶导数的零点，分别对应最大结合能和最大作用力。

1. 分析计算

对于离子晶体和范德瓦耳斯作用的晶体，可以出计算题，也可以直接给晶体的结合能（或者是两原子的结合能）然后计算总的结合能。

给出晶体结合能，首先计算

（1）平衡间距（晶格常数）

（2）计算完平衡间距之后可以计算原胞体积（综合第一章的内容）

要特别注意的是给出的N是原胞的数目还是原子的数目

（3）体积弹性模量

（4）总结合能，每个原子的结合能（总结合能除以N）

如果是给出两原子之间的结合能，算总的结合能应该是二分之一N，因为算了两遍。

（5）最大作用力——二阶导数为0

1. 共价键的形成过程和特点
2. 饱和性（2）方向性

分子轨道法的主要思路：忽略两个电子之间的相互作用；选取分子轨道波函数为原子轨道波函数的线性组合。

1. 金属性结合

（1）吸引力来源于库伦作用力，排斥力来自两个方面，电子云发生显著重叠，产生强烈排斥作用；电子云密度增大，电子动能增加

（2）为什么金属有较好的延展性

金属性结合对原子的排列没有特殊要求，容易造成原子排列的不规范性（内部可以产生缺陷），使其具有很大的范性。

1. 范德瓦尔斯作用主要是瞬时偶极矩造成的，吸引和6次方成正比，排斥势能和12次方成正比。
2. **晶格振动和热学性质**

晶格振动对什么性质有影响：

1. 晶格的散射运动影响了电子的输运，直接导致了电导率，磁阻等
2. 晶格振动直接影响晶体的比热和热导
3. 晶体的光吸收和光发射
4. 产生库伯对，产生超导性

简谐近似：体系的势能函数只保留到坐标的二次项

简正坐标：为了消去哈密顿量中的交叉项，引入线性变换后的坐标，一个简正坐标代表晶体中所有原子参与的振动，它们的振动频率相同，称为一个振动模

绝热近似：用一个均匀分布的负电荷产生的常量势场来描述电子对

格波：晶格振动的描述形式

声子：

（1）晶格振动的量子化描述，是一种元激发。

（2）为什么要引入声子：因为晶格振动引起的行波，不对应某一个具体的原子，而是晶格整体的性质，必须把晶格的集体激发当做一个整体来讨论格波

（3）如何引入声子：正则量子化

（4）声子和真实的谐振子的异同点

3.一维单原子链

原子的运动方程

解的形式

格波的意义

不同原子和相同原子的相位差

波矢的取值——借助于波恩卡门边界条件

极限情况：（1）长波极限——近似认为是连续介质波，波长可以很大

1. 短波极限——认为两个相近原子的相位差是π（一般情况不是π而是aq），不可能存在半波长比晶格常数a小的格波

声子的概念

声子是具有量子效应的粒子，在宏观体系中可以定义，但是不能具有量子效应

声子和光子的相同点是什么，不同点是什么

声子和电子的不同点是什么，相同点是什么

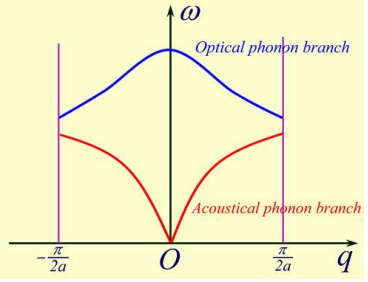
1. 一维双原子链

注意晶格常数指的是同种原子的最近距离，同样是试探取相应的解，根据线性代数有非零解的条件，得到色散关系

和一维单原子链存在的不同主要体现在：

（1）晶格常数是2a而不是a，因此在波矢取值上造成了一种“假象”，如果把晶格常数仍然认为是a的话，和一维单原子的情况是一样的，要看清楚晶格常数还是两个原子的间距

（2）波矢取值问题，同样利用波恩卡门边界条件，一个波矢对应两个格波，一个是声学波，另一个是光学波（色散关系的图）



（3）相邻相位差问题：不是相邻原子相位差了，而是相邻原胞相位差为2aq

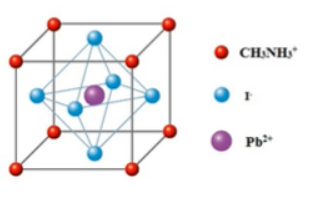
（4）振幅问题

（5）为什么叫“光学波”，声学波和光学波描述了什么振动

（6）长声学波和长光学波的意义

5.三维情况

在三维情况下，情况又变复杂了，晶体中一个原胞有n个原子组成，有3n只声学波和3n-3支光学波，有可能出一个钙钛矿问有几个波的问题



这个晶体里面有几个声学波，几个光学波

如果是二维材料（一维材料）的话，又有几个声学波，几个光学波

波矢取值就是三维条件下的第一布里渊区，状态密度（考不考虑自旋）

6.晶格热容的量子理论

（1）爱因斯坦模型的基本假设

爱因斯坦温度是什么

得到了什么定性的结论，实际是什么结论，为什么错了

（2）德拜的假设，德拜温度是什么，得到的结论是什么

德拜的假设在绝对零度条件是严格正确的（为什么呢）

对于绝缘体是这样的，但是对于金属的热容而言，不是完全正确的，在极低温下必须要考虑电子对热容的贡献

1. 如何计算模式密度，和后面自由电子的模式密度有什么相同点

（4）热膨胀的量子理论——简谐近似失效，必须引入更高的近似——如果近似不够会得出很荒谬的结论

（5）热传导的理论：实质是声子的输运问题

1. **能带理论**

1.能带理论是研究晶体中电子运动普遍性规律的

2.能带理论阐明的问题：

为什么会有导体和绝缘体以及半导体（对应的物理图像是什么）

为什么晶体中电子的平均自由程远远大于原子的间距等

1. 什么叫单电子近似：把每个电子的运动看成是独立的，在一个等效势场中的运动。
2. 什么叫共有化运动：固体中的电子不再束缚于个别的原子，而是在整个固体内运动
3. 三个假设：

（1）绝热近似：认为离子实不振动，因为温度低振动越小，所以叫绝热近似

（2）多电子简化成单电子

（3）认为电子在一个周期性势场中运动

6.布洛赫定理

证明过程分成两步，第一步是证明平移算符和哈密顿算符对易，第二步是寻找共同本征函数

布洛赫定理说明方程的解必须满足的性质

布洛赫函数的形式是两部分的相乘，一部分是平面波，另一部分是晶格周期性函数

问题：为什么要引入简约波矢这个概念

布洛赫函数说明了，电子确实不再属于某个原子

7.三种近似计算方法

（1）一维近自由电子近似：金属中电子受到原子周期性势场的作用，并且势场起伏较小

在一般情况下，可以利用简并微扰论去计算，但是在布里渊区边界附近，波函数和能量急剧发散，原因是有两个能量相似的能级，非简并微扰失效，这时需要简并微扰论进行计算，计算结果为高的能量更高，低的能量更低，表现为E-k曲线在布里渊区边界附近斜率为0，但是不连续，产生间断，左侧低于右侧。

这种计算方法一般适用于金属

结合波恩卡门边界条件，可以看出来，在能带内部，电子的波矢也不是连续取值，而是准连续的（可以阐述一下准连续的含义）

一个布里渊区对应一个能带，每个布里渊区（能带）包含N个量子态，如果计入自旋为2N，电子的波矢和简约波矢是什么关系（可以文字叙述，重点看一看前几个能带怎么对应顺序，也可以画图阐述），晶体中电子的波函数的形式是什么，在什么地方需要用简并微扰进行计算（简约波矢的取值）

三维情况下，情况更复杂一些，电子的波矢是三维矢量，被限制在第一布里渊区之内

但是情况类似的是在中间区仍然可以用非简并微扰进行计算，但是在倒格子垂直平分面附近不能用非简并微扰，并且三维情况下，可以出现不同的能带出现重叠的情况（不同方向上能量断开的取值是不同的）（二维也可以出现，可以画图阐述）

第一布里渊区的定义，几种常见的晶格的第一布里渊区

（2）赝势法：近自由电子近似不能适用于起伏较大的周期势场，引入这个方法，大概思路是在离子实内部用假想的是能代真实的势能，但是求解薛定谔方程时这个假想的势却不改变能量本征值和本征函数（在离子实之间）

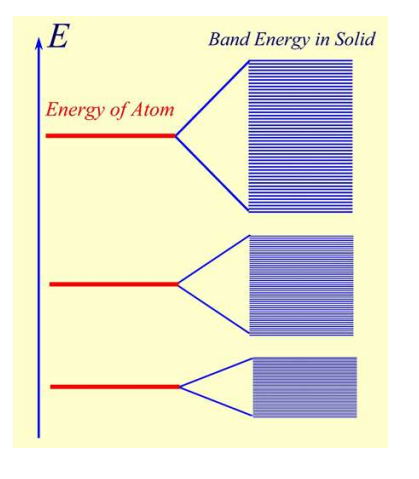
（3）紧束缚方法：也叫原子轨道线性组合法，一般用于半导体或者绝缘体

基本假设是电子在一个原子附近，主要受到原子势场的作用，将其它原子势场的作用看作是微扰，并且把晶体中电子的波函数看成原子轨道波函数的线性组合，得到原子能级和晶体中电子能带的关系。

具体步骤有三步

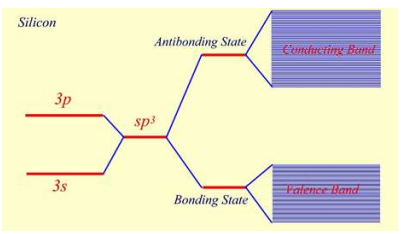
最终公式的结论

最后的结论和物理图像是什么



什么情况下对应的能带较宽，什么时候较窄

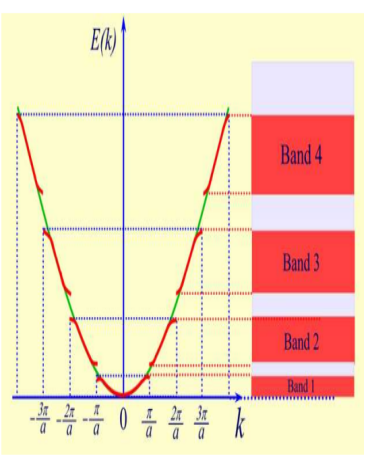
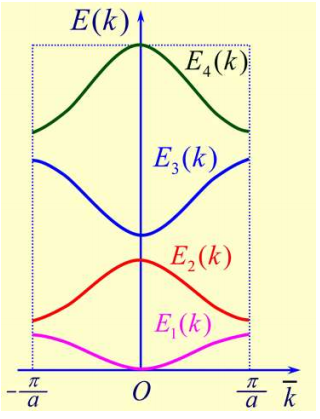
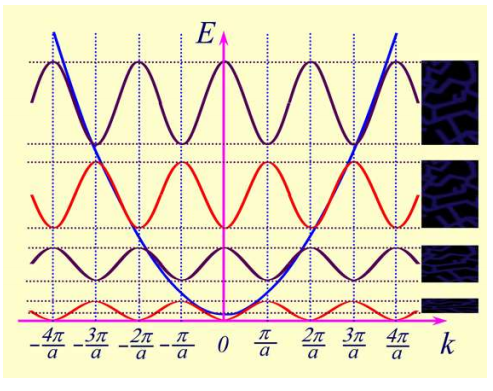
举个例子，金刚石（硅）的物理图像



1. 画出在紧束缚近似下，第四主族的前三个元素形成能带的示意图
2. 根据这个图，解释为什么碳硅锗导电性能远远弱于金属镁（碱土金属）

三种算法虽然不相同，但是得到了类似的图像：能带具有周期性和时间反演对称性

能带的三种表示方法为：扩展能区，简约能区，周期能区

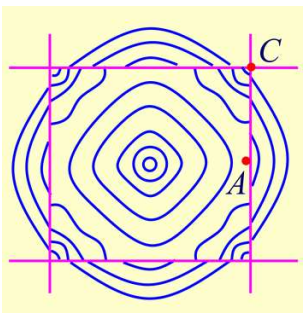
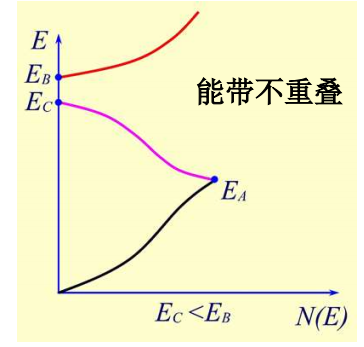
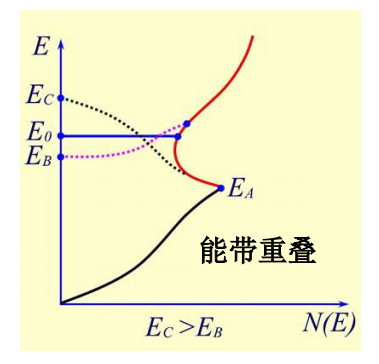
8研究完大体分布，再看能带内部的准连续

能态密度函数的定义和两种求法

1. 自由电子在三维，二维，一维三种情况下的能态密度
2. 近自由电子的能态密度，周期性势场的影响在布里渊区附近，

第一种情况是能带没有重叠，随着波矢接近布里渊区，等能免不断向边界凸显，两个等能面之间能态密度显著增大，但是超过某个临界点之后，能态密度急剧缩小直到为0，在第二布里渊区会类似周期性重复

第二种情况是能带重叠之后不会降为0而是下降之后重新上升

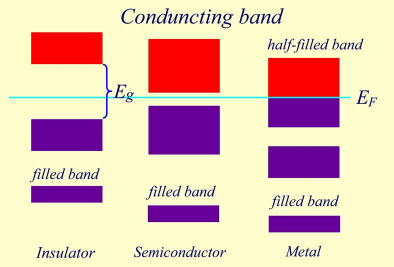
 

1. 费米面（类比为水面）

如何计算费米半径，费米动量，费米速度和费米温度（抽象的公式以及大概数量范围）

其中，费米速度是不是真实的运动速度，费米动量是不是真实的动量

10 有了上述知识之后，就可以解释第一个问题了



【图像要点】

1. 费米能级2.横轴是什么，是坐标还是波矢3.几种特殊材料的禁带宽度
2. 半导体和绝缘体的物理图像，相同点以及不同点
3. 金属的填充图像

碱金属和碱土金属的区别，为什么碱土金属不是绝缘体，两者填充的特征是什么

1. 满带，空带，导带，价带，禁带五大概念理解，其中为什么又引入了导带和价带的概念。
2. 如何验证结论的正确性——X射线谱

物理图像以及初步解释

碱金属，碱土金属，金刚石三者图像在低能区的特点和高能区的特点，各自反映了什么

