```
Part1不考虑微观结构的固体物理:早期固体物理Chap2固体热容:玻尔兹曼,爱因斯坦&德拜杜隆-珀蒂(Dulong-Petit)定律:许多固体热容C=3k_B每原于或3R,常温下符合较好,C ↓随T ↓ 玻尔兹曼(Boltzmann)的模型:视各原子处于与邻近原子相互作用而形成的简谐势阱中,由能量均分定理,T下各(能量为平方形式的)自由度平均能量为k_B T/2,单原子平均能量 \langle E \rangle = 3k_B T/2 + 3k_B T/2,热容C=d\langle E \rangle/dT=3k_B,无法解释某些固体热容的偏离和随了的变化 爱因斯坦(Einstein)模型:视原子为本征频率相等的谐振子,1维情况:单原子能级E_n=\hbar\omega(n+1/2),配分函数Z_1=\sum_n\exp(-\beta E_n)=\frac{\exp(-\beta \hbar\omega/2)}{1-\exp(-\beta \hbar\omega)},单原子平均能量\langle E_1 \rangle =\frac{\sum_n\hbar\omega(n+1/2)\exp[-\beta \hbar\omega(n+1/2)]}{\sum_n\exp[-\beta \hbar\omega(n+1/2)]}=\frac{1}{2}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        \mathbf{Chap91}维单原子链的振动: 3度系数为\kappa的键连接相邻的质量为m的原子,第n个原子的动力学方程m\delta\ddot{x}_n=\kappa(\delta x_{n+1})
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     \begin{array}{lll} \delta x_n) + \kappa (\delta x_{n-1} - \delta x_n) &= \kappa (\delta x_{n+1} + \delta x_{n-1} - 2\delta x_n), \forall \delta x_n &= A \exp[i(\omega t - kna)], \exists \\ \Re - m \omega^2 &= \kappa [\exp(-ika) + \exp(ika) - 2] &= 2\kappa (\cos ak - 1) &= -4\kappa \sin^2(ka/2) \implies \text{色散美} \end{array}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        系:\omega=2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}|\sin{\frac{ak}{2}}|;短波有欠采样,故色散关系呈周期性,第一布里渊区(first Brillouin zone):[-\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}],其
  -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial eta} = \hbar\omega[n_B(eta\hbar\omega) + \frac{1}{2}],其中玻色(Bose)填充因子n_B(x) = \frac{1}{\exp(x)-1}(相当于視晶格振动为一种
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      中状态数= \frac{2\pi}{a}/\frac{2\pi}{Na} = N;长波极限下,\omega \approx a\sqrt{\frac{\kappa}{m}}k,波速v = \frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{\kappa}{m}},短波极限下,k \rightarrow \frac{\pi}{a},群速
 准粒子-声子,因其可湮灭和产生,故为玻色子),热容C_1 = \frac{\partial \langle E_1 \rangle}{\partial T} = k_B (\beta \hbar \omega)^2 \frac{\exp(\beta \hbar \omega)}{[\exp(\beta \hbar \omega) - 1]^2};3维情况:能级E_{n_x,n_y,n_z} = \hbar \omega[(n_x + 1/2) + (n_y + 1/2) + (n_z + 1/2)],配分函数Z = Z_1^3,平均能量\langle E \rangle = 3 \langle E_1 \rangle,热
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        度v_g = rac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = 0;声子动量p = \hbar(k mod rac{2\pi}{a}),声子碰撞时动量或转化为晶格动量
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     3\,\frac{L^3}{(2\pi)^3}\,4\pi k^2\,dk \quad = \quad \frac{3L^3}{2\pi^2}\,\frac{\omega^2}{v^3}\,d\omega \quad \Rightarrow \\ \hat{\delta} \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{g}} g(\omega) \quad = \quad \frac{3L^3}{2\pi^2}\,\frac{\omega^2}{v^3} \quad = \quad 9N\,\frac{\omega^2}{\omega_D^3}, \\ \mathbf{j} + \hat{\mathbf{w}} \hat{\mathbf{f}} \hat{\mathbf{g}} \hat{\mathbf{g}} \omega_D \hat{\mathbf{j}} \hat{\mathbf{g}} \hat
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        \sqrt{(\kappa_1+\kappa_2)/m\pm 1/m\sqrt{(\kappa_1+\kappa_2)^2-4\kappa_1\kappa_2\sin^2(ka/2)}},其中\omega_--声学模,\omega_+-光学模
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      长波极限下\omega_{\pm} = \sqrt{\frac{\kappa_1 + \kappa_2}{m} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\kappa_1 \kappa_2 \sin^2(ka/2)}{(\kappa_1 + \kappa_2)^2}} \right]} \approx \sqrt{\frac{\kappa_1 + \kappa_2}{m}} \left[ 1 \pm \left( 1 - \frac{2\kappa_1 \kappa_2 \sin^2(ka/2)}{(\kappa_1 + \kappa_2)^2} \right) \right]
  足\int_0^{\omega_D}d\omega\;g(\omega)=3N(3维情况有3N个振动模式)\Rightarrow\;\;\omega_D^3=6\pi^2nv^3;低温下,n_B(\omega_D)\;pprox\;\;0,故积分上限
 可換为\infty, \diamondsuit{x} = \beta\hbar\omega, \langle E \rangle = \frac{9N\hbar}{\omega_D^3(\beta\hbar)^4} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x-1} + E_0 = 9N \frac{(k_BT)^4}{(\hbar\omega_D)^3} \frac{\pi^4}{15} + E_0, 热容: C = 0
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      \omega_- \approx \sqrt{\frac{2\kappa_1\kappa_2}{m(\kappa_1 + \kappa_2)}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \approx \sqrt{\frac{2\kappa_1\kappa_2}{m(\kappa_1 + \kappa_2)}} \left| \frac{ka}{2} \right| (\cong \emptyset !!), \omega_+ = \sqrt{\frac{2(\kappa_1 + \kappa_2)}{m} - \frac{2\kappa_1\kappa_2 \sin^2(ka/2)}{m(\kappa_1 + \kappa_2)}} \right|
  声速: 因声波波长长, v_s = \lim_{k \to 0} \frac{\mathrm{d}\omega_-}{\mathrm{d}k} = \sqrt{\frac{a^2\kappa_1\kappa_2}{2m(\kappa_1 + \kappa_2)}} 或v_s = \sqrt{\frac{1}{\beta\rho}} ,其中\beta = \frac{1}{\kappa a} ,\rho = \frac{2m}{a} ,\kappa = \frac{\kappa_1\kappa_2}{\kappa_1 + \kappa_2}
 3k_BTN+E_0,C=3k_BN;因线性色散关系假设过简单,中间温区有偏差;对低温下导体,C=\gamma T^3+\beta T,首项由电子贡献;1维情况:g(\omega) d\omega=\frac{\mathrm{d}k}{2\pi/L}=\frac{L}{2\pi}\frac{\mathrm{d}\omega}{v};2维情况:g(\omega) d\omega=\frac{\mathrm{d}k_x}{(2\pi/L)^2}=\frac{L^2}{(2\pi)^2}2\pi k dk=\frac{L^2}{2\pi}\frac{\omega}{v^2} d\omega
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     オ光学模、\omega_+, \max_{}=\omega_+(0) = \sqrt{2(\kappa_1+\kappa_2)/m}, 群速度 \frac{d\omega_+}{dk}(0) = 0 对光学模的理解: 治光与物质相互作用但传播方向不变(拉曼散射), 光子及其激发声子动/能量守恒,\hbar(\omega_1-\omega_2)=\hbar c(k_1-k_2)=\hbar\omega_p,\hbar(k_1-k_2)=\hbar k_p\Rightarrow\omega_p=ck_p, 因c(k_1,k_2)=\hbar\omega_p,\hbar(k_1-k_2)=\hbar k_p\Rightarrow\omega_p=ck_p, 因c(k_1,k_2)=\hbar\omega_p,\hbar(k_1-k_2)=\hbar\omega_p,\hbar(k_1-k_2)=\hbar k_p\Rightarrow\omega_p=ck_p, 因k_p大(汉学模中有这种长波高能的激发,即仅光学模可能与光子相互作用,故得名(非绝对,若相互作用时光子传播方向改变,声学模也可能与光子相互作用(布里渊散射))
  {f Chap3}金属中的电子:德鲁德{f (Drude)}理论:三假设:平均碰撞时间{f 	au},{f d}t内碰撞概率{f d}t/{f 	au},证:在t \sim t + {f d}t内碰撞概

\bar{x}P(t) = \lim_{n \to \infty} (1 - \frac{t/n}{\tau})^n \frac{dt}{\tau} = e^{-t/\tau} \frac{dt}{\tau}, 故\int_0^\infty tP(t) dt = \tau; 襚后平均速度= 0; 相邻两次碰撞间仅受外力
  驱动, \frac{\mathrm{d} \boldsymbol{p}}{\mathrm{d} t} = \boldsymbol{F} = q \boldsymbol{E} + q \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}; t时刻动量\boldsymbol{p}(t), t + \mathrm{d} t时刻动量\boldsymbol{p}(t + \mathrm{d} t) = [\boldsymbol{p}(t) + \boldsymbol{F} \, \mathrm{d} t](1 - \frac{\mathrm{d} t}{\tau}) + 0 \cdot \frac{\mathrm{d} t}{\tau} \Rightarrow
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     生活性の表現の(4 + 2cd)。 A 相互に用的光 「女猫が回収文、声子後に可能ラカ」和互に用(単生機配物)) 

长波板限下、\omega^2 \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \end{bmatrix} = \frac{\kappa_1 + \kappa_2}{m} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \end{bmatrix} 対声学模A_x = A_y、対光学模A_x = -A_y,相邻原子运动方向

相反(故能量也更高)。如相邻正负离子在电场中的运动。故更易与光子相互作用,故得名(此为对其第二种理解)

N 个基元。故N 个、本、每个基元2~原子,故身个人对应2个展,我有个基元2中M 个原子,则每个人对应2个声学模和M = 1个光学模。对3维原子链,每个人对应3个声学模和M = 1)个光学模。简约布里渊区图示(reduced zone scheme)中,声/光学模同在一布区内;拓展布里渊区图示(extended zone
  电导率:当在外加电场m{E}下达稳定电流,0=rac{\mathrm{d}m{p}}{\mathrm{d}t}=-rac{m{p}}{	au}-em{E}\Rightarrow \langlem{p}
angle=-em{E}	au,电流密度m{j}=-nem{v}=rac{ne^2	au}{m}m{E}=-em{E}
  \sigma E,其中电导率\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m};对金属,T \uparrow \Rightarrow \tau \downarrow \Rightarrow \sigma \downarrow;对半导体,T \uparrow \Rightarrow n \uparrow \Rightarrow \sigma \uparrow
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   \sum_{n} \phi_{m}^{*} H_{mn} \phi_{n} \phi_{m} \phi_{m
  导率
ho_{xy}=rac{B}{ne},霍尔系数R_{H}=rac{
ho_{xy}}{B}=rac{1}{ne};可用霍尔元件测m{B}或n
  形 ne^{\gamma} ne^{\gamma}
  \frac{1}{3}(\frac{3}{2}k_BT)\frac{2}{m}n\tau(3k_B/2)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x} = \frac{3}{2}\frac{k_B^2T}{m}n\tau\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x} = \kappa\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x},其中热导率\kappa = \frac{3}{2}\frac{k_B^2T}{m}n\tau,c-单粒子热容;洛伦
  \mathbf{X} = \mathbf{X} =
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      2t\cos ka,类似1D原于链阳色散天系能带:电子本征能量一半个一半\downarrow,类似\mathrm{H_2}^+;若能带未全占据,则总能量\downarrow随原子间距\downarrow(金属键);若每个原子1个价电子,因电子是费米子且自旋可取土,故仅填充下半能带,在电场下填充医偏移得电流,为导体;若2个价电子,则填满能带,无法载流,为能带绝缘体(半绝对,若电子间排斥能>t,则莫特(Mott)绝缘);若另考虑激发态或多原子链,则有多能带,如双原子链仅考虑基态,则有2条能带,其间或有带隙,若各原子约1个价电子,则仅填满较低一能带,仅强场下有电流,半导体长波极限下(带能),E \approx ta^2k^2 + \mathrm{const},平方项类比自由电子动能,ta^2k^2 = \hbar^2k^2/2m^*,有效质量m^* = \hbar^2/2ta^2
  {
m Dirac})统计;用类似方法推导塞贝克(Seeback)系数可见上述错误,塞贝克效应:温差导致电势差,塞贝克系数S=rac{{
m d} V}{{
m d} T}=
  \frac{E}{dT} = \frac{E}{dT/dx},热漂移J_h = \frac{1}{2}n(v_1 - v_2) = \frac{1}{2}n\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}(2v\tau) = n\tau v\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} = n\tau \frac{\mathrm{d}(mv^2/2)}{m\,\mathrm{d}x} = n\tau \frac{\mathrm{d}(mv^2/2)}{m\,\mathrm{d}x}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        Part4晶体的结构Chap12晶体结构 晶体运作 lattice vectors,不唯一)的所有整数倍线性组合构成的点集,\{R=la_1+ma_2+na_3=[lmn]|l,m,n\in\mathbb{Z}\},蜂窝状的牙墨烯非晶格,因其部分线性组合对应的点上无原子,但按现代定义是晶格但非Bravais格子,Bravais格子,各原子所处环境均相同
  n	au rac{\mathrm{d}(k_BT/2)}{m\,\mathrm{d}x} = rac{n	au k_B}{2m} rac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x},电漂移J_e = nv = n rac{eE}{m} 	au,两者平衡,J_h = J_e \Rightarrow S = rac{k_B}{2e} \sim 10^{-4} \mathrm{V/K},与实验值\sim 10^{-6} \mathrm{V/K}不符
  \mathbf{Chap4}金属中的更多电子:索末菲(\mathbf{Sommerfeld})自由电子理论:由费米-狄拉克分布,n_F(eta(\epsilon - \mu))
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      た人と画的に手切り組織的。

離朐(unit cell):晶体的重复单元(有面/体积);康初晶胞(primitive unit cell):最小重复单元(对应一格点);Wigner

Seitz原胞:一格点与其最近的各格点连线的中垂线/面所関原胞;基元(basis):每个格点的内容

空间利用率(packing fraction)=(假设原子为相互接触的小球)原子占用体积/晶体体积;简单立方(primitive cubi
  \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon-\mu)]+1},其中\mu-化学势:体系增/減1个粒子引起的能量变化,满足N=2\sum_{k}\frac{1}{\exp[\beta(\epsilon(k)-\mu)]+1},\lim_{T\to 0}^{n}n_{F}
跃函数, \lim_{T \to 0} \frac{\mathrm{d} n_F}{\mathrm{d} T} = \delta(\epsilon - \mu);低温下, N = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \iiint \mathrm{d} k_x \, \mathrm{d} k_y \, \mathrm{d} k_z = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_{\mathrm{max}}^3 \Rightarrow  奏
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    lattice):\pi/6(仅一种单质-铅Po);体心立方(body centered cubic):\sqrt{3}\pi/8(Fe);面心立方(face-centered) cubic:\sqrt{2}\pi/6,等价ABC型的六角密排(hexagonal close packing)(Al,Cu,Ag,Au)(ABA型六角密排等价六方)
 *波矢k_F = k_{\max} = (\frac{3\pi^2N}{V})^{1/3},费米速度v_F = \frac{\hbar k_F}{m} \sim 1\%c,费米能量\epsilon_F = \mu(T=0) = 1\%c
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      立方(cubic):a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=\pi/2(bcc,fcc);因方(tetragonal):a=b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=\pi/2(bc);正文(orthorhombic):\alpha\neq b\neq c, \alpha=\beta=\gamma=\pi/2(bc,fc,base-c);六方(hexagonal):a=b\neq c, \alpha=\beta=\pi/2,\gamma=2\pi/3(;三方(rhombohedral)):\alpha=b=c, \alpha=\beta=\gamma\neq\pi/2; 對(monoclinic):\alpha\neq b\neq c, \alpha=\gamma=\pi/2, \beta\neq\pi/2; 對(\alpha\neq b\neq c, \alpha\neq \beta\neq \gamma
  \hbar^2 k_F^2/2m = \hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}/2m(n \sim 10^{22+6} {
m m}^{-3}, m \sim 10^{-30} {
m kg}) \sim 7 {
m eV} \sim 80000 {
m K}(费米温
h^{-k}_{F}/2m=h^{-(3\pi^{-}n)^{-/6}/2m(n}\sim 10^{-1} \text{cm}^{-1}, m\sim 10^{-3} \text{kg})\sim 7\epsilon\text{V}\sim 80000\text{K}(数末温度)\gg 2\pi 300\text{K}\sim 0.025\text{eV},热激发仅在费米等的表面倾起微微的连海-升温很难明显改变化学势电子贡献热客:自由电子总能量(E) = V\int d\epsilon en_{F}(\epsilon)g(\epsilon),其中k=\sqrt{2m\epsilon/\hbar} \Rightarrow 单位体积[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]范围内状态数= g(\epsilon) d\epsilon=\frac{2}{(2\pi)^{3}}4\pi k^{2} dk=\frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^{2}\hbar^{3}}\epsilon^{1/2} d\epsilon \Rightarrow 态密度g(\epsilon)=\frac{3n}{2\epsilon_{F}}(\frac{\epsilon}{\epsilon_{F}})^{1/2};非高温\Gamma, \mu \approx \epsilon_{F}, \pi
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     Chap13倒格子, 布医,晶体中的波 倒格子, 布医,晶体中的波 倒格子(reciprocal lattice):所有满足对任一实空间格点有exp(iG\cdot R) = 1的点G组成的集合, \{G=hb_1+kb_2+lb_3\in\mathbb{R}^3 \mid \exp(ik\cdot R)=1, \forall R\in 实格子);倒格子的基矢:b_1=2\pi a_2\times a_3/[a_1\cdot (a_2\times a_3)], b_2=2\pi a_3\times a_1/[a_1\cdot (a_2\times a_3)], b_3=2\pi a_1\times a_2/[a_1\cdot (a_2\times a_3)],满足a_i\cdot b_j=2\pi \delta_{ij}对2维品 k,b_1=2\pi a_2\times \hat{z}/[\hat{z}\cdot (a_1\times a_2)], b_2=2\pi \hat{z}\times a_1/[\hat{z}\cdot (a_1\times a_2)],其中\hat{z}-品格的单位矢量;构建例基矢应用的实基矢, 法用传统基矢, 会有多余价格点
  米面附近可激发电子数~ Vg(\epsilon_F) · k_BT,单电子热激发能~ k_BT,总能量:E ~ Vg(\epsilon_F)(k_BT)^2,电子贡献热
   \stackrel{\text{d}E}{dT} \sim Vg(\epsilon)k_B^2T 
 倒格子是实格子的傅里叶变换,证:对1维原子链,密度函数\rho(r)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     = \sum_{n} \delta(r - na),傅变得\mathcal{F}[\rho]
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d} r \, e^{ikr} \rho(r) = \sum_n e^{ikna} = \frac{2\pi}{a} \sum_m \delta(k - \frac{2\pi}{a} m),对D维原子链,\mathcal{F}[\rho(r)] = \int \mathrm{d} r^3 \, e^{ik \cdot r} \rho(r) = \int \mathrm{d} r^3 \, e^{ik \cdot r} \rho(r)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     \sum_{m{R}} \int \mathrm{d}^D r \, e^{i m{k} \cdot m{r}} \delta(m{r} - m{R}) = \sum_{m{R}} e^{i m{k} \cdot m{R}} = \frac{(2\pi)^D}{v} \sum_{m{G}} \delta^D(m{k} - m{G}),其中v-晶胞体积,更一般
  子換成反向,每个造成磁矩变化2\mu_B,系统磁化强度M=\mu_B B \frac{g(\epsilon_F)}{2}\cdot 2\mu_B,磁化率\chi_P=rac{\partial M}{\partial H}=\mu_0 rac{\partial M}{\partial B}=0
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        \mathbb{H}, \rho(r) = \rho(r + R), \mathcal{F}[\rho(r)] = \int d^D r \, e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \rho(r) = \sum_{\mathbf{R}} \int_{\mathbb{H}\mathbb{R}} d^D r \, e^{i \mathbf{k} \cdot (r + R)} \rho(r + R) = \sum_{\mathbf{R}} \int_{\mathbb{H}} \mathbb{H} e^{i \mathbf{k} \cdot (r + R)} \rho(r + R) = \sum_{\mathbf{R}} \int_{\mathbb{H}} \mathbb{H} e^{i \mathbf{k} \cdot (r + R)} \rho(r + R)
   \mu_0\mu_B^2g(\epsilon_F);此处忽略费米-狄拉克分布,故结论与温度无关
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      \sum_{m{R}} e^{im{k}\cdotm{R}} \int_{m{d}m{b}} d^D r \, e^{im{k}\cdotm{r}} 
ho(m{r}) \; = \; rac{(2\pi)^D}{v} \sum_{m{G}} \delta^D(m{k}-m{G}) S(m{k})亦得,其中结构因子(structure fac-
  德鲁德输运模型的缺陷:漂移速度\sim 10^{-5}\,\mathrm{m/s} \ll v_F,平均自由程v_F 	au = 10^{-6}\,\mathrm{m} \gg晶格常数;因忽视晶体结构无法解释霍尔效应积累电荷方向;无法解释铁磁性
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        tor)S(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{H}\mathbb{H}}^{\mathbb{H}} d^D r \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \rho(\mathbf{r})
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     はいう。(**) = J品版 は r を吹り(な・ボリ(ボ) 相面(集合、面上包含所有原子(允许有些面上不含原子);因G \cdot r = 2m\pi,每个倒格点对应一组晶面;晶面间距= 2\pi/G;G垂直所对应的晶面;密勒(Miller)指数:(hkl);当密勒指数互质(最小倒格矢),对应的晶面上均有原子;对正交晶格、\frac{2\pi}{G} = 2\pi/\sqrt{h^2(2\pi/a_1)^2 + k^2(2\pi/a_1)^2 + l^2(2\pi/a_3)^2};找(hkl)晶面的方法:(不要求实基矢正交)实空间中(1/h, 0, 0), (0, 1/k, 0), (0, 0, 1/l)三点连成一平面,过实空间原点做另一平行面,即得
  下記は2句付出時の山内のルボ向内の
主量子数:n=1,2,\cdots,対应執道最多电子数2n^2,角量子数:l=0,\cdots,n-1,对应序号s,p,d,f,最多电子数2[(l+1)^2-l^2],磁量子数:l_2=-l,\cdots,l,自旋量子数:\pm 1/2构造原理(Aufbau principle):优先填充低能轨道;马德隆规则(Madelung's rule):按n+l增序填充,相同n+l按n增
  序填充,即1s,2s,2p,3s,3p,4s,3d,4p,5s,4d,5p,6s,4f,\cdots;少數元素如Cu([Ar]4s^13d^{10})及成键时或违反马德隆規则左→右,下→上,电离能(失一电子所需能量)↑,电子亲和能(得一电子放出能量)↑
  \mathbf{Chap6}化学键:离子键,共价键,金属键,范德华力,氢键
离子键:电子转移形成阴阳离子,相互吸引,一般由电负性差距较大的元素组成;键能\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2,其中\Delta E_1 = 四陷
子的电离能—用离子的电子亲和能,\Delta E_2。即阻离子的内聚能;电负性。对电子的吸引能力,密立根(\mathbf{Mulliken})电负性=(电子亲和
能—电离能)/2,鲍林(\mathbf{Pauling})电负性(通用)= 0.187 \times 2 \times密立根电负性+0.17;离子晶体特点:硬,脆,不导电,透明,溶于水
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        要米黄金定则: 在晶格势V散射 (微扰) 下单位时间内由分立本征态|m{k}) 跃迁至|m{k'})的極率\Gamma(m{k},m{k'})=rac{2\pi}{\hbar}|\langlem{k'}|V|m{k}
angle|^2\delta(E_{m{k'}})
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        (E_{m k}),对连续能级,单位时间跃迁概率\int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(m k, m k') g(E_{m k}) \, \mathrm{d}E_{m k} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m k'| V | m k \rangle|^2 g(E_{m k'}),其中E_{m k'}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |\mathbf{k}\rangle的本征能,散射密度矩阵M=\langle \mathbf{k'}|V|\mathbf{k}\rangle=\int\mathrm{d}^3r\,rac{\exp(-i\mathbf{k'}\cdot\mathbf{r})}{\sqrt{L^3}}V(\mathbf{r})\,rac{\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}{\sqrt{L^3}}
 共价键:共享电子,类比一维无限深势阱,基态k=\frac{\pi}{L},能量E=\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}=\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2},共享电子而成键后L ↑,波函数扩
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        \frac{1}{L^3} \int V(\boldsymbol{r}) e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \cdot \boldsymbol{r}} \, \mathrm{d}^3 r [ 散射势具周期性, V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = V(\boldsymbol{r}) ] = \frac{1}{L^3} \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\mathbb{H}} \mathbb{h} \, V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) \exp[i \Delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}] \, d\boldsymbol{r}
  展,E ↓;可用緊束缚模型,以H_2^+为例,电子哈密顿H=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0r_1}-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0r_2}=K+V_1+V_2,近似认
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        (r+R)] d^3r = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \int_{\text{Hilb}} V(\mathbf{x}) e^{i\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3r; 若\Delta \mathbf{k} \neq \mathbf{G}, \sum_{\mathbf{R}} = 0, 故\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}, 入射与出射波
  为状态为H原子基态的叠加,|\psi\rangle = \phi_1|1\rangle + \phi_2|2\rangle,其中|n\rangle-第n个H原子的1s轨道,平均能量\langle E\rangle = \frac{\langle \psi|H|\psi\rangle}{\langle \psi|\psi\rangle} =
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        矢必差一晶格动量,该动量差传递给晶体且大部分对称抵消;结构因子\int_{f aar b}V(m r)\exp(im G\cdotm r)\,{
m d}^{f 3}r影响衍射强度
  \frac{\sum_{ij}\phi_i\phi_j^*H_{ij}}{\sum_i\phi_i\phi_i^*},\sharp + H_{ij} = \langle i|H|j\rangle, \oplus \mathfrak{B} \oplus \mathfrak
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      劳厄(Laue)公式:k'-k=G(动量守恒),k=k'(能量守恒);对称应有k''-k=-G,但即使k'/k''两方向衔射强度不等,晶体获得动量仍很小
                                                      = \langle E \rangle \phi_j \Rightarrow H(\phi_1 \phi_2)^T = \langle E \rangle (\phi_1 \phi_2)^T, \sharp H_{11} = \langle 1 | (K + V_1 + V_2) | 1 \rangle =
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        市技格(\mathbf{Bragg})公式:2d\sin\theta=n\lambda,其中d-晶面间距,\theta-入/出射波矢与晶面夹角,n-衍射级数;两衍射公式等价,证:\Delta k=
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    + \langle 1 | V_2 | 1 \rangle = \epsilon_{1\mathrm{s}} + V_{\mathrm{cross}} = H_{22}, H_{12} = \langle 1 | (K + V_1 + V_2) | 2 \rangle = \langle 1 | V_1 | 2 \rangle = -t = H_{21}^*, \text{ for all } T \in \mathcal{T}_{21}
  能量\langle E \rangle = \epsilon_{1{
m S}} + V_{
m Cross} \pm t,本征\epsilon |\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 \rangle \pm |2 \rangle);共价化合物特点:不溶于水,或为半导体
  范德华(Van der Waals)力:本质:电偶极相互作用; 兰纳-琼斯(Lennard-Jones) 势: V=Ar^{-12}-Br^{-6}, 吸引项(末项)—原子偶极矩p_1垂直两原子连线,在另一原子处有沿连线的电场E=\frac{p_1}{4\pi\epsilon_0r^3}, 激发其偶极矩p_1=\chi E,两者相互
  作用势能U=rac{-p_1p_2}{4\pi\epsilon_0r^3}=rac{-\chi p_1^2}{(4\pi\epsilon_0r^3)^2} 金属键:类似胶水,使金属有延展性
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j \in \text{Hilb}} V_j(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{x}_j),其中\mathbf{r}_j = \mathbf{R} + \mathbf{x}_j,故S = \int_{\text{Hilb}} d^3 r \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \sum_j V_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \mathbf{r}_j
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     \textstyle \sum_{\boldsymbol{R}} \sum_{j \in \text{lim}} \int_{\text{lim}} \text{d}r^3 \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{r}) V_j(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R} - \boldsymbol{x}_j) = \sum_{j \in \text{lim}} \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \text{d}^3 r \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \frac{1}{r} \, \exp(i\boldsymbol{G} \cdot \boldsymbol{x}_j) \cdot \sum_{\boldsymbol{R}} \int_{\text{lim}} \frac{1}{r} \, \exp(i\boldsymbol
  Chap7物质类型:晶体:一般由原子构成,但也有分子晶体,如糖;液晶;非晶(多晶);准晶:不具平移对称性
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        (\mathbf{r})V_j(\mathbf{r}) = \sum_{j \in \mathbb{H}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}_j) \int \mathrm{d}^3 r \, \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})V_j(\mathbf{r}) = \sum_{j \in \mathbb{H}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}_j) f_j(\mathbf{G}),其中形状
 Part31维固体的玩具模型Chap8压缩系数,声音&热胀系数的1维模型
视晶体中原子为谐振子,势能u(x)=u(a)+u'(a)(x-a)+rac{1}{2}u''(a)(x-a)^2+\cdots,在平衡位置不受
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      因子(\mathbf{form}\ \mathbf{factor})f_j(\mathbf{G}) = \int \mathrm{d}^3r\ \exp(i\mathbf{G}\cdot \mathbf{r})V_j(\mathbf{r}), \exp(i\mathbf{G}\cdot \mathbf{x}_j)刻画光被同一原胞中不同原子散射的相位
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        差;因M取平方,衍射结果损失失S中部分相位信息;X射线衍射对电荷敏感,对自旋不太敏感,便宜,中子衍射对原子核,自旋和低能激发敏感,贵;此外还有非弹性散射,中子动能小,对能量损失敏感,适用于测色散关系
  力,故u'(a) = 0, u(x) \approx u(a) + \frac{1}{2}u''(a)(x-a)^2,受力F = -\frac{du}{dx} = -\kappa(x-a),其中劲度系数\kappa = u''(x)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        \forall \text{ScCl(sc)}, S_{\left(hkl\right)} = f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cl}} \exp[i2\pi(h, k, l) \cdot (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})] = f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cl}}(-1)^{h+k+l}
 压缩系数:增大单位压强导致体积收缩比例,\beta=-rac{1}{V}rac{\partial V}{\partial P};体弹模量:导致体积收缩单位比例所需压强,eta^{-1}=-Vrac{\partial P}{\partial V}(对
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        不消光;bcc单质,S_{\left(hkl\right)}=f\{1+\exp[i2\pi(h,k,l)\cdot(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})]\}=f[1+(-1)^{h+k+l}],当h+k+l
  固体)>10^9Pa;杨氏模量:导致长度伸长单位比例所需单位横截面上的拉力,E=-rac{F/A}{\Delta L/L_0}=-L_0rac{P}{\Delta L},若拉伸时横截
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     l奇[如(100)],S_{(hkl)}=0,系统消光(Systematic Absence),满足劳厄公式却无散射,因用传统基矢构造倒格矢[(100)晶
  面积不变,E = -V_0 \frac{P}{\Delta V} =体弹模量,对柱形气缸中的理想气体,(P_0 + \Delta P)(L_0 - \Delta L) = PL_0 \Rightarrow \Delta PL_0 - P_0 \Delta L \approx 0 \Rightarrow E \approx P_0 \sim 10^5 \, \mathrm{Pa};1维情况下,\beta^{-1} = -L \frac{\partial F}{\partial L} = -Na \frac{\partial F}{\partial (Na)} = -a \frac{\partial F}{\partial a} = -a\kappa,其
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        面未包含所有原子];对fcc单质,S_{ig(hklig)} = f\{1 + \exp[i2\pi(h,k,l)\cdot(rac{1}{2},rac{1}{2},0)] + \exp[i2\pi(h,k,l)\cdot(0,rac{1}{2},rac{1}{2})] + \exp[i2\pi(h,k,l)\cdot(n-r_0)] + \exp[i2
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     \exp[i2\pi(h,k,l)\cdot(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})]\} = f[1+(-1)^{h+k}+(-1)^{k+l}+(-1)^{l+h}], 当h,k,l奇偶混杂时消光, 当三个数
```

声速: $v = \sqrt{\frac{1}{\rho\beta}} = ($ 对气体 $)\sqrt{\frac{P}{\rho}}$ (对空气) $\approx \sqrt{\frac{10^5\,\mathrm{Pa}}{1\mathrm{kg/m}^3}} \approx 300\mathrm{m/s};$ 证:1维连续介质其中一小段的动力学方

程ρdx $\frac{d^2A}{dt^2}$ = F(x + dx) - F(x),其中 $F(x) = \kappa[A(x + \delta x) - A(x)] = \frac{A(x + \delta x) - A(x)}{\beta \delta x}$ =

 $\frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial A}{\partial x} \right|_{x} \Rightarrow$ 波动方程 $\frac{\partial^{2} A}{\partial t^{2}} = v^{2} \frac{\partial^{2} A}{\partial x^{2}}$,其中 $v = \sqrt{\frac{1}{\rho \beta}}$

奇偶性相同时不消光;对闪锌矿(ZnS,zinc blende,fcc类金刚石结构), $S_{\left(hkl\right)}=f_{\mathrm{Zn}}[1+(-1)^{h+k}+(-1)^{l+h}]+$ $f_{\mathbf{S}}[\cdots] \exp[i\frac{\pi}{2}(h+k+l)]$,类似金刚石, $S_{\{hkl\}} = f_{\mathbf{C}}[1+\exp[i\frac{\pi}{2}(h+k+l)]][1+(-1)^{h+k}+(-1)^{k+l}+(-1)^{k+l}]$ (一1)^{l+h}],两个中括号均可致消光,但前者所致消光并非因选错基矢[如(200)] 实验方法:对单晶:劳厄法(变波长)和旋转晶体法(变入射角);粉末衍射法:相当于同时扫描所有入射角,高效,制样难度小且探测器只

需1维ccd阵列;分析方法:2维衍射图谱对称性确定 Part5固体中的电子Chap15周期势中的电子

近自由电子近似:自由电子波函数 $|m{k}\rangle = \exp[i(m{k}\cdotm{x}-\omega t)]$,哈密顿 $H_0=rac{m{p}^2}{2m}$,本征能量 $E_0(m{k})=rac{\hbar k^2}{2m}$,受品格周期性势场 $V(m{r})=V(m{r}+m{R})$ 微扰,总哈密顿 $H=H_0+V(m{r})$,薛方 $H|\psi\rangle=E|\psi\rangle$,由微扰论, $E=E_0+E_1+E_2+\cdots$,能 量1阶修正 $E_1 = \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{L^3} \int \mathrm{d}^3 r \, V(\mathbf{r})$ 为一常数,无意义,2阶修正 $E_2 = \sum_{\mathbf{k'} \neq \mathbf{k}} \frac{|\langle \mathbf{k'} | V | \mathbf{k} \rangle|^2}{E_0(\mathbf{k}) - E_0(\mathbf{k'})}$,其 中| $\mathbf{k}' - \mathbf{k}$ | = G = (1维情況) $\frac{2\pi}{a}n$, 在非布区边界, $E_0(\mathbf{k}) \neq E_0(\mathbf{k}')$, 无问题, 在布区边界附近, $E_0(\mathbf{k}) \approx E_0(\mathbf{k})$, 無簡并微扰论, $\langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k}\rangle = E_0(\mathbf{k})(+\langle \mathbf{k}|V|\mathbf{k}\rangle)$, $\langle \mathbf{k}'|H|\mathbf{k}'\rangle = E_0(\mathbf{k}')(+\langle \mathbf{k}'|V|\mathbf{k}'\rangle)$, $\langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k}'\rangle = E_0(\mathbf{k}')(+\langle \mathbf{k}'|V|\mathbf{k}'\rangle)$, $\langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k}'\rangle = E_0(\mathbf{k}')(+\langle \mathbf{k}'|V|\mathbf{k}'\rangle)$, $\langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k}'\rangle = E_0(\mathbf{k}')$ L^3 も子波函数 $|\psi\rangle = \alpha |\mathbf{k}\rangle + \beta |\mathbf{k}'\rangle$,薛方銭代形式 $\begin{bmatrix} E_0(\mathbf{k}) & V_G \\ V_G^* & E_0(\mathbf{k}+G) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$,特征方程 $[E_0(\mathbf{k}) - V_G^*]$ $E][E_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}) - E] - |V_{\mathbf{G}}|^2 = 0;$ 布区边界处 $\mathbf{k}' = -\mathbf{k} = (1 \text{ } \pm \frac{\pi}{a}, E_0(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k}'),$ 本征 能 $E_{\pm} = E_0(\mathbf{k}) \pm |V_{\mathbf{G}}|$,本征态 $|\psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathbf{k}\rangle + |\mathbf{k'}\rangle)(1$ 维 $) = \sqrt{2}\cos\frac{\pi}{a}x[\exp(i\omega t)], |\psi_{+}\rangle = 1$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\boldsymbol{k}\rangle - |\boldsymbol{k'}\rangle) = (1 \pm)\sqrt{2} i \sin \frac{\pi}{a} x [\exp(i\omega t)]$ 为驻波; $(1 \pm)$ 偏离布区边界处, $k = \frac{\pi}{a} + \delta, k' = -\frac{\pi}{a} + \delta,$ 特征方

一般从上方开始填充,故对空穴上方能量低;速度:量子态对应的速度与填充的粒子种类无关, $v=rac{\partial E}{\hbar\partial k}$

数 $R_y^* = -\frac{m^*e^4}{8\epsilon_0^2\epsilon_r^2\hbar^2} pprox (m^* \sim 0.1 m_e, \epsilon_r \sim 11) \frac{13.6 \mathrm{eV}}{1000} pprox 13 \mathrm{meV} < k_B T pprox 25 \mathrm{meV}$, 波尔半

 $egin{align*} & \delta = 0^{-\epsilon} e^{-\mu} \\ & \& r_0^* = rac{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r \hbar^2}{m^* \epsilon^2} & \approx 100 \times 0.053 \mathrm{nm} = 5 \mathrm{nm},$ 不同掺杂原子的能帶相对半导体主体的位置不同, 降温, 则掺杂原子激发产生的载流子相对半导体主体的减少更多, 更趋向本征半导体本征半导体中载流子密度: 导带上电子数密度: $=\int_{\epsilon_C}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \ g_C(\epsilon) n_F(\beta(\epsilon-\mu))$,其中 ϵ_C -导带底,单位体积态密度 $g_C(\epsilon) = \int_{\epsilon_C}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon \ g_C(\epsilon) n_F(\beta(\epsilon-\mu))$,其中 ϵ_C -导带底,单位体积态密度 $g_C(\epsilon) = 0$

 $\frac{\epsilon_{c}}{\epsilon_{c}} = \frac{(2m_{e}^{*})^{3/2}}{2\pi^{2}\hbar^{3}} \sqrt{\epsilon - \epsilon_{c}} \stackrel{\text{\tiny the}}{=} k_{B}T \ll \text{\#} \text{\mathbb{R}} \text{\mathbb{R}} \text{\mathbb{R}} \text{\mathbb{R}} = \epsilon_{c} - \epsilon_{v}, \text{\mathbb{R}} \text$ $2\pi^{2}h^{3} = 2\pi^{2}h^{3} =$

 $\frac{1}{4}(\frac{2m_e^*k_BT}{\pi\hbar^2})^{3/2}e^{-\beta(\epsilon_C-\mu)},$ 价帶中空穴数密度: $p=\int_{-\infty}^{\epsilon_v}\mathrm{d}\epsilon\,g_v(\epsilon)[1-n_F(\beta(\epsilon-\mu))],$ 其中 ϵ_v -价带顶,单 単位 根本密度 $g(\epsilon \le \epsilon_v) = \frac{(2m_h^*)^{3/2}}{2\pi^2h^3} \sqrt{\epsilon_v - \epsilon}$, 当 $k_B T \ll \epsilon_g , 1 - n_F(\beta(\epsilon - \mu)) = e^{\beta(\epsilon - \mu)}, p = e^{\beta(\epsilon - \mu)}$

 $\frac{(2m_h^*)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} e^{-\beta(\mu-\epsilon_v)} \int_{-\infty}^{\epsilon_v} \mathrm{d}\epsilon \sqrt{\epsilon_v-\epsilon_e} e^{-\beta(\epsilon_v-\epsilon)} = \frac{1}{4} (\frac{2m_h^*k_BT}{\pi\hbar^2})^{3/2} e^{-\beta(\mu-\epsilon_v)};$ 对本征半

导体,n=p \Rightarrow $\mu=\frac{\epsilon_c+\epsilon_v}{2}+\frac{3}{4}k_BT\ln\frac{m_h^*}{m_e^*}$,低温下, $\mu\approx\frac{\epsilon_c+\epsilon_v}{2}$;两种载流子数密度之积: $np=\frac{1}{16}(\frac{2k_BT}{\pi\hbar^2})^3(m_e^*m_h^*)^{3/2}e^{-\beta(\epsilon_c-\epsilon_v)}=\frac{1}{2}(\frac{k_BT}{\pi\hbar^2})^3(m_e^*m_h^*)^{3/2}e^{-\beta\epsilon_g}$;注体材料决定 ϵ_g ,掺杂改变 μ 而 改变 n0,p1. 日 n2 文字 n3 大 n4 大 n5 大 n5

二极管(PN绪):P型和N型半导体接触,电子由N极扩散至P极,产生内建电场($\sim 10^8 \mathrm{V/m}$,但不会产生电流不可用万用表量出,因电流来自费米分布的不均匀),最终抑制扩散而达平衡;在偏压V(P高为正)下,电流 $I \propto \exp(eV/k_BT)-1$,详见半导体

Part5磁和平均场理论Chap19原子的磁性:顺磁和逆磁

 $A(r_2)B(r_1)$)交換反对称, ψ orbit $(r_1,r_2)=-\psi$ orbit $(r_2,r_1)\Rightarrow \lim_{r_1\to r_2}\psi$ orbit $(r_1,r_2)=0$,即 电子趋于远离,从而降低电势能,库仑相互作用能 $E_{ ext{singlet}}=(\langle AB|-\langle BA|)V(|AB\rangle-|AB\rangle)/2$,当自旋反

 ϕ_{i} $\chi_{spin}=\pm(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2},\psi_{orbit}=(|AB\rangle+|BA\rangle)/\sqrt{2}$,库仑相互作用能 $E_{triplet}=(\langle AB|+\langle BA|)V(|AB\rangle+|BA\rangle)/2$,交换相互作用能 $E_{exchange}=E_{singlet}-E_{triplet}=-2\mathrm{Re}\langle AB|V|BA\rangle$;2.執

 $_{
m crit}$ 玻尔兹曼常数: $k_B=1.38 imes10^{-23}
m J/K$ 理想气体常数: $R=8.31
m J\cdot mol^{-1}\cdot K$ 普朗克常数: $h=6.63 imes10^{-34}
m J\cdot s$

阿伏伽德罗常数: $N_A = 6.02 \times 10^{-23} \,\mathrm{mol}^{-1}$ $\Omega^{\circ}=273.15$ K 元电荷: $e=1.60\times 10^{-19}$ C 电子质量: $m_e=9.11\times 10^{-31}$ kg =0.511MeV 道角动量最大化:各电子在轨道上同向转可保持相对距离较远,电势能较小,否则每转1關就有1次靠近的机会而升高能量;3.当<半满,电子轨道角动量L反平行自旋角动量S能量低,总角动量量子数J=|L-S|,其中 $L=\sum_{\Re e} \eta_e + \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r^3} r$,核绕电子旋转产 生 極场 $B=\frac{\gamma E \times v}{c^2}=\gamma \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r^3} r \times p = \gamma \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r^3} L$,其中v-电子相对核速度,相对论效应带来洛伦兹(Lorentz)因子 $\gamma=[1-(\frac{v}{c})^2]^{-1/2}$,电子自旋磁矩 $m=-g\frac{\mu_B}{\hbar}S\approx -\frac{e}{m_e}B$,考虑托马斯进动(Thomas m_e $\sum_{j=1}^{n} m_e D_j$ ரணப் சாம்கம் m_e $\sum_{j=1}^{n} m_e D_j$ நடிப் m_e $\sum_{j=1}^{n} m_e D_j$ நடிப் m_e $\sum_{j=1}^{n} m_e D_j$ நடிப் m_e $\sum_{j=1}^{n} m_e D_j$ $\sum_{j=1}^{n} m_e D_j$

中第2项 速艇項,来自轨道运动,第三项-顺艇项,来自自旋轨道耦合 居里(Curie)順磁:对自由电子,平均磁矩 $m=\frac{(g\mu_B/2)\exp(\beta g\mu_B B/2)+(-g\mu_B/2)\exp(-\beta g\mu_B B/2)}{\exp(\beta g\mu_B B/2)+\exp(-\beta g\mu_B B/2)}=\frac{(g\mu_B/2)\tanh(\beta g\mu_B B/2),或配分函数}{2}=e^{\beta g\mu_B B/2}+e^{-\beta g\mu_B B/2}$,自由能 $F=-k_B T \ln Z,m=-2M$ $-\frac{\partial F}{\partial B}$ 得,磁化强度M=nm,其中n-电子数密度,磁化率 $\chi_{C}=\lim_{H\to 0}rac{\partial M}{\partial H}=\lim_{B\to 0}rac{\mu_{0}\partial M}{\partial B}=$ $n \frac{\mu_0(g\mu_B)^2}{4k_BT}$ (居里定律),用了玻尔兹曼分布,故与T有关;原子中电子朗德g因子: $\bar{g}=\frac{1}{2}(g+1)+\frac{1}{2}(g-1)$

1) $\frac{S(S+1)-L(L-1)}{J(J+1)}$,从而顺磁项= $-\tilde{g}\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{J}, \chi_C = n \frac{\mu_0(\tilde{g}\mu_B)^2}{3} \frac{J(J+1)}{k_B T}$ 拉莫尔(Larmor)逆磁:设 $B=B\hat{z}$,自由电子逆磁项 $E=\frac{e^2}{8m}B^2\langle x^2+y^2\rangle=\frac{e^2}{8m}B^2\frac{2}{3}\langle r^2\rangle$,平均磁 矩 $(m) = -\frac{\partial E}{\partial B} = -\frac{e^2}{6m} \langle r^2 \rangle B$,機化率 $\chi_l = \lim_{B \to 0} n\mu_0 \frac{\partial m}{\partial B} = -n \frac{e^2 \mu_0 \langle r^2 \rangle}{6m}$;固体中, $\chi_l = -n \frac{Ze^2 \mu_0 \langle r^2 \rangle}{6m}$;朗首 (\mathbf{Landau}) 遊鐵:源于磁场中巡游电子旋转, $\chi_{\mathbf{Landau}} = -\frac{1}{3} \chi_p$

 $\frac{\chi_{D}}{\chi_{C}} = \frac{g(\epsilon_{F})k_{B}T}{n}$,3维情况态密度 $g(\epsilon) = \alpha\sqrt{\epsilon}$,非高温下 $\int_{0}^{\epsilon_{F}} \alpha\sqrt{\epsilon} \, \mathrm{d}\epsilon \approx n \Rightarrow \frac{2}{3}\alpha\epsilon^{3/2} = n \Rightarrow g(\epsilon_{F}) = \frac{\kappa_{D}}{2}$ $rac{3n}{2\epsilon_F}$,故 $rac{\chi_D}{\chi_C}=rac{3k_BT}{2\epsilon_F}=rac{3k_BT}{2k_BT_F}\ll 1$,居里順磁远显著于泡利順磁

Chap20自发磁有序:铁磁,反铁磁和铁氧化物磁性

 $m{S}_i$,若仅考虑近邻自旋相互作用, $m{H} = -rac{1}{2}\sum_{\left\langle i,j
ight
angle }J_{ij}m{S}_i\cdotm{S}_j + \sum_{i}g\mu_{m{B}}m{B}\cdotm{S}_i$;伊辛(Ising)模型:假设自旋仅有 上下两种取向, $H=-\frac{1}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}J_{ij}S_{i}S_{j}+\sum_{i}g\mu_{B}B_{z}S_{i}$,其中 $S_{i}=\pm s$,对均匀介质, $J_{ij}=J$ ∀ $\langle i,j\rangle$;无外场 下,若J<0,趋向 $S_i\parallel S_j$,长程應有序,铁磁,若J<0,趋向 S_i 反 $\parallel S_j$,相邻自旋反平行,反铁磁,可通过中子(s=1/2)衍射判断反铁磁,相邻反平行使中子感受到的晶格常数是传统晶格常数的2倍;三角晶格中J<0导致阻错(frustrated);亚铁磁:相邻反平行,但朝两个方向的磁矩大小不同

对称性破缺:自旋因环境的不对称而呈各项异性,如当总哈密顿 $H=-rac{1}{2}\sum_{\langle i,j \rangle}JS_i\cdot S_j-\kappa\sum_i(S_i^z)^2$,自旋趋向平

Chap21磁畴和磁滞

 ${
m Chap 21}$ 極時和極滞 越轉,具同局職整的小区域,这些小区域由于大量磁矩的长程相互作用形成,轉犨,磁畴间的过渡区域 设時壁厚Na,转两个相邻自旋夹角 $\delta heta = \pi/N$,交換相互作用能 $E = -JS_i\cdot S_j = -JS^2\cos\delta heta =$

 $-JS^2[1-rac{(\delta heta)^2}{2}+\cdots]$,各向异性能= $\kappa \sum_{j=1}^{N-1}(S\cos j\delta heta)^2 pprox N\kappa S^2/2$,相较无畴壁总能量变化 $\delta E=$ $JS^2(\pi^2/2)/N+N\kappa S^2/2$ 、取 $N\approx\pi\sqrt{J/\kappa}$ 稳量 $\delta E_{\min}=\pi S^2\sqrt{J\kappa}/2$ 、故 J/κ 越大畴壁越宽磁滞。剩磁:撤去磁场H后仍有的磁感应强度,B(H=0);矫顽力:消除剩極所需的磁场强度,H(B=0);磁能积:BH;

 $F_0 \to \phi$ M || 各向异性轴,当B | 上各向异性轴, $E/V = E_0 - MB \cos \theta - \kappa' M^2 \sin^2 \theta = E_0 - MB \cos \theta + \kappa' M^2 \cos^2 \theta - \kappa' M^2$, $\forall B$] 唯一极小值,当 $\theta < B < B_{\rm crit} = 2\kappa' M$, 极小值点 $\cos \theta = \frac{B}{2\kappa' M}$, M - B 曲

 $-\beta Jz/4$,当y(0)'<1即T>居里温度 $T_c=\frac{Jz}{4k_B}$ 时,仅有 $\langle\sigma
angle=0$,各向同性,当y(0)'>1即 $T< T_c$ 时, $\langle\sigma
angle$ 有非零

解,自发磁有序,自发性对称性破缺;高温下,自洽方程近似为 $\langle \sigma \rangle \approx rac{1}{4}eta(Jz\langle \sigma \rangle + g\mu_B B) \Rightarrow \langle \sigma \rangle = rac{eta g\mu_B B/4}{1-eta Jz/4} =$

 $\frac{g\mu_BB/4}{k_B(T-T_C)}$,其中临界温度 $T_C=\frac{Jz}{4k_B}$,磁化率 $\chi=n\mu_0\frac{\mathrm{d}(g\mu_B\langle\sigma\rangle)}{\mathrm{d}B}=n\frac{\mu_0(g\mu_B)^2/4}{k_B(T-T_C)}=\frac{\chi_C}{1-T_C/T}$ (居里-韦斯(Weiss)竞律);铁磁情况、 $T_C>0$,反铁磁情况、 $T_C<0$,平均场理论的缺陷,无法解释维利林无 T_C Chap23来自相互作用的磁:哈伯德模型:在伊辛模型基础上额外考虑自由电子的动能,哈密顿 $H=H_0+H_I$,其中 H_0

似当两个电子在同一原子上才有相互作用,从中可推出巡游(itinerant) 磁性,且为使能量最小,自旋同向的电子不处于同一原子, $u_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{u}{4} [(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})^2 - (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2] \approx \frac{u}{4} [(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})^2 - (\frac{Mv}{g\mu_B/2})^2]$,其中首 项 \propto 总电子数,v-原胞体积;若翻转少量自旋,动能变化 $\Delta E_k = rac{V}{2} g(\epsilon_F) \cdot rac{1}{2} \delta E \cdot rac{1}{2} \delta E = rac{V}{8} g(\epsilon_F) (\delta E)^2$,磁化强度 变为 $M=\frac{1}{2}g(\epsilon_F)\cdot\frac{1}{2}\delta E\cdot 2g\mu_B/2=\frac{1}{4}g(\epsilon_F)g\mu_B\delta E$,交換相互作用能变化 $|\Delta E_I|=\frac{V}{v}\frac{u}{4}(\frac{Mv}{g\mu_B/2})^2=$ $|\Delta E_k| \Rightarrow u = \frac{2}{vg(\epsilon_F)},$ 当 $u > \frac{2}{vg(\epsilon_F)},$ 自发融有序,铁ᇓ当 $u > \frac{2}{vg(\epsilon_F)},$ 无磁性(斯托纳判据(Stoner crite-

rion)) 夏转绝缘:当*u继续增大,同一原子上自旋反向的能量很高,此时相邻自旋相同,导致电子无法运动;**莫特反铁磁**:相邻自旋相反时电子有可能跃迁,波函数分散,能量更低,反铁磁

玻尔磁子: $\mu_B = 9.27 \times 10^{-24} \text{J/T}$ 大气压:1.01 × 10⁵Pa 真空中磁导率: $\mu_0=4\pi\times 10^{-7}\,\mathrm{N/A^2}$ 真空中介电常数: $\epsilon_0=8.85\times 10^{-12}\mathrm{F/m}$