

## 第一章 晶体结构

- 1、理解单晶、准晶和非晶材料原子排列在结构上的差别
- 2、掌握原胞、基矢的概念，清楚晶面和晶向的表示，了解对称性
- 3、了解简单的晶体结构以及二维和三维晶格的分类
- 4、掌握倒易点阵和布里渊区的概念，能够熟练地求出倒格子矢量和布里渊区
- 5、了解 X 射线衍射条件、基元的几何结构因子及原子形状因子

### 名词解释：

倒易点阵、配位数、致密度、密勒指数、维格纳-赛茨原胞、劳厄方程、布拉格方程、原子散射因子、几何结构因子、对称操作、对称轴、 $n$  重对称轴、晶体对称性定律、反演对称操作、旋转反演对称操作、点群、空间群

晶态：晶态固体材料中的原子有规律的周期性排列，或称为长程有序。

非晶态：非晶态固体材料中的原子不是长程有序地排列，但在几个原子的范围内保持着有序性，或称为短程有序。

准晶：准晶态是介于晶态和非晶态之间的固体材料，其特点是原子有序排列，但不具有平移周期性。

单晶：整块晶体内原子排列的规律完全一致的晶体称为单晶体。

多晶：由许多取向不同的单晶体颗粒无规则堆积而成的固体材料。

理想晶体（完整晶体）：内在结构完全规则的固体，由全同的结构单元在空间无限重复排列而构成。

节点（阵点）：空间点阵的点子代表着晶体结构中的相同位置，称为节点（阵点）。

空间点阵（布喇菲点阵）：晶体的内部结构可以概括为是由一些相同的点在空间有规则地做周期性无限重复排列，这些点子的总体称为空间点阵。

点阵常数（晶格常数）：惯用元胞棱边的长度。

配位数：晶体中和某一原子相邻的原子数。

致密度：晶胞内原子所占的体积和晶胞体积之比。

晶体的对称性：经过某种对称操作后晶体能自身重合的性质。

倒格矢：

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{\Omega} \\ b_2 &= 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{\Omega} \\ b_3 &= 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{\Omega} \end{aligned} \right\}$$

其中  $\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3)$  为正格子元胞体积。我们称  $b_1$ 、 $b_2$ 、 $b_3$  为倒格子基矢。

惯用元胞（晶胞）：既能反映晶格周期性，又能反映其对称性的结构单元。

晶面：由布拉菲格子中不共线的三个格点所决定的平面。

晶面指数：描写布拉菲点阵中晶面方位的一组互质整数。

空间群：晶格全部对称操作的集合。

基元：构成晶体的全同的基本结构单元。

倒格子：以正格子基矢决定的倒格矢平移所得到的一个周期性的空间格子。

### 简答/画图题：

常用的表征晶体结构的方法及其区别和联系。

常见晶体结构的特点：简单立方、体心立方、面心立方、金刚石结构、氯化钠结构

氯化铯结构、闪锌矿结构（某些相近结构的区别和联系）

晶列、晶向、晶面的标示与画法

正格子与倒格子的关系

维格纳-赛茨原胞与布里渊区的关系

在晶体衍射中,为什么不能用可见光?

点群、平移群与空间群的关系?

倒格矢与晶面关系

试述晶态、非晶态、准晶、多晶和单晶的结构特征。

答：晶态固体材料中的原子有规律的周期性排列，或称为长程有序。非晶态固体材料中的原子不是长程有序地排列，但在几个原子的范围内保持着有序性，或称为短程有序。准晶态是介于晶态和非晶态之间的固体材料，其特点是原子有序排列，但不具有平移周期性。

另外，晶体又分为单晶体和多晶体：整块晶体内部原子排列的规律完全一致的晶体称为单晶体；而多晶体则是由许多取向不同的单晶体颗粒无规则堆积而成的。

晶格点阵与实际晶体结构有何区别和联系？

答：晶体点阵是一种数学抽象，其中的格点代表基元中某个原子的位置或基元质心的位置，也可以是基元中任意一个等价的点。当晶格点阵中的格点被具体的基元代替后才形成实际的晶体结构。晶格点阵与实际晶体结构的关系可总结为：

$$\text{晶格点阵} + \text{基元} = \text{实际晶体结构}$$

晶体结构可分为Bravais格子和复式格子吗？

答：晶体结构可以分为Bravais格子和复式格子，当基元只含一个原子时，每个原子的周围情况完全相同，格点就代表该原子，这种晶体结构就称为简单格子或Bravais格子；当基元包含2个或2个以上的原子时，各基元中相应的原子组成与格点相同的网格，这些格子相互错开一定距离套构在一起，这类晶体结构叫做复式格子。

试述晶体结构，空间点阵，基元，B格子、单式格子和复式格子之间的关系和区别。

答：

（1）晶体结构=空间点阵+基元，空间点阵=B格子，晶体结构=带基元的B格子。

（2）基元内所含的原子数=晶体中原子的种类数。（元素相同，由于周围环境不同，可以认为是不同种类的原子，ex：金刚石。）

（3）B格子的基本特征：各格点情况完全相同。

（4）单式格子：晶体由一种原子组成。

复式格子：晶体由几种原子组成，每种原子组成一个子格子，晶体由几个子格子套构而成。所以，复式格子=晶体结构，复式格子 $\neq$ B格子。

倒格子的实际意义是什么？一种晶体的正格矢和相应的倒格矢是否有一一对应的关系？

答：倒格子的实际意义是由倒格子组成的空间实际上是状态空间（波矢K空间），在晶体的X射线衍射照片上的斑点实际上就是倒格子所对应的点子。

设一种晶体的正格基矢为 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ ，根据倒格子基矢的定义：

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{\Omega} \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi[\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1]}{\Omega} \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}{\Omega} \end{aligned} \right\}$$

式中 $\Omega$ 是晶格原胞的体积，即 $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]$ ，由此可以唯一地确定相应的倒格子空间。同样，反过来由倒格矢也可唯一地确定正格矢。所以一种晶体的正格矢和相应的倒格矢有一一对应的关系。

正、倒格子之间有哪些关系？

答：若 $h_1$ 、 $h_2$ 、 $h_3$ 为互质整数，则 $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 为该方向最短倒格矢；

(1)正、倒格子互为倒格子；

(2) $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 垂直于晶面族 $(h_1, h_2, h_3)$ ；

(3)某方向最短倒格矢 $\vec{G}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 之模和晶面族 $(h_1, h_2, h_3)$ 的面间距 $d_h$ 成反比

$$d_h = \frac{2\pi}{|\vec{G}_h|}$$

(4) $\vec{G}_h \cdot \vec{R}_n = 2\pi m$  ( $m$ 为整数)

(5) $\Omega \cdot \Omega^* = (2\pi)^3$

为什么要使用“倒空间”的概念？

答：波的最主要的指标是波矢 $K$ ，波矢 $K$ 的方向就是波传播的方向，波矢的模值与波长成反比，波矢的量纲是 $1/m$ 。讨论晶体与波的相互作用是固体物理的基本问题之一。一般情况下晶体的周期性、对称性等均在正空间描述，即在 $m$ 的量纲中描述。为了便于讨论晶体与波的相互作用，必须把二者放到同一个空间，同一坐标系中来。我们的选择是把晶体变换到量纲是 $1/m$ 的空间即倒空间来，即在倒空间找到正空间晶体的“映射”。

点对称操作的基本操作是哪几个？答：点对称操作的基本操作共有八个，分别是 $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_4$ 、 $C_6$ 、 $i$ 、 $m$ 、 $\overline{C_4}$ 。

一个物体或体系的对称性高低如何判断？有何物理意义？一个正八面体有哪些对称操作？

答：对于一个物体或体系，我们首先必须对其经过测角和投影以后，才可对它的对称规律，进行分析研究。如果一个物体或体系含有的对称操作元素越多，则其对称性越高；反之，含有的对称操作元素越少，则其对称性越低。晶体的许多宏观物理性质都与物体的对称性有关，例如六角对称的晶体有双折射现象。而立方晶体，从光学性质来讲，是各向同性的。正八面体中有3个4度轴，其中任意2个位于同一个面内，而另一个则垂直于这个面；6个2度轴；6个与2度轴垂直的对称面；3个与4度轴垂直的对称面及一个对称中心。

晶体中有哪几种密堆积，密堆积的配位数是多少？

答：密堆积是具有最大配位数(12)的排列方式，有 hcp: ABAB...结构和 fcc: ABCABC...结构，共两种。

解理面是面指数低的晶面还是指数高的晶面?为什么？

晶体容易沿解理面劈裂，说明平行于解理面的原子层之间的结合力弱，即平行解理面的原层的间距大。因为面间距大的晶面族的指数低。所以解理面是面指数低的晶面。

晶体结构、B 格子、所属群之间的关系如何？

答：晶体结构不同，B 格子可以相同，例如，金刚石结构和 NaCl 结构的 B 格子均为 FCC；B 格子可比晶体结构有更多的对称操作数，或说具有更高的对称性；

不同的晶体结构，不同的 B 格子，可以属于相同的群，例如，B 格子分别为 fcc 和 bcc 均属于  $O_h$  群。

对六角晶系的晶面指数和晶向指数使用四指标表示有什么利弊？

答：优点：使在晶体学和物理上等效的晶面、晶向具有相似的指数。

缺点：没有三指标简单；

四指标中加了“前三个指标和为零”的限制条件，否则指标可能出现不惟一性。

试问7种典型晶体结构的配位数（最近邻原子数）分别是多少？

答：7种典型的晶体结构的配位数如下表所示：

晶体结构	配位数	晶体结构	配位数
------	-----	------	-----

面心立方	12	氯化钠型结构	6
六角密积			
体心立方	8	氯化铯型结构	8
简单立方	6	金刚石型结构	4

七种晶系和十四种 B 格子是根据什么划分的？

答：七种晶系：B 格子的点对称性的种类数只有 7 种，称之为七种晶系。

十四种 B 格子：B 格子的空间对称性的种类数共有 14 种，称之为 14 种 B 格子。

	晶体结构	B 格子
点群数	32	7 七种晶系
空间群数	230	14 十四种 B 格子

**计算/证明题：**

致密度的计算

正格子、倒格子的基矢相互转换，原胞体积计算/关系证明。

面间距的计算（正格子、倒格子）

如何判断正格子/倒格子是何种基矢。（写出基矢与常用基矢作对比，或者计算原胞体积推断）

X 射线衍射加强与消光（本次考试不考计算）

课后习题不考的范围（1.10,1.11,1.12）

## 第二章 固体的结合

- 1、了解固体结合的几种基本形式
- 2、理解离子性结合、共价结合、金属性结合、范德瓦尔斯结合等概念

### 名词解释：

晶体的结合能、离子性结合/共价结合/金属性结合/范德瓦尔斯结合的含义及其特点、杂化轨道、林纳德-琼斯势、原子电离能/亲和能/负电性

原子的电负性—原子得失价电子能力的度量；电负性=常数（电离能+亲和能）

晶体结合能：原子在结合成晶体过程中所释放出来的能量。

离子晶体：质点间通过离子键相互作用结合而成的晶体。

### 简答/画图题：

为什么晶体的原子结合在一起而形成固体？

答：原子之所以能结合成固体是由于原子组成固体后整个固体系统具有更低的能量。

共价结合为什么有“饱和性”和“方向性”？

答：设  $N$  为一个原子的价电子数目，对于 IVA、VA、VIA、VIIA 族元素，价电子壳层一共有 8 个量子态，最多能接纳  $(8-N)$  个电子，形成  $(8-N)$  个共价键，这就是共价结合的“饱和性”。

共价键的形成只在特定的方向上，这些方向是配对电子波函数的对称轴方向，在这个方向上交迭的电子云密度最大，这就是共价结合的“方向性”。

如何理解库仑力是原子结合的动力？

答：晶体结合中，原子间的排斥力是短程力，在原子吸引靠近的过程中，把原本分离的原子拉近的动力只能是长程力，这个长程吸引力就是库仑力。所以，库仑力是原子结合的动力。

为什么许多金属为密积结构？

答：金属结合中，受到最小能量原理的约束，要求原子实与共有电子电子云间的库仑能要尽可能的低(绝对值尽可能的大)。原子实越紧凑，原子实与共有电子电子云靠得就越紧密，库仑能就越低。所以，许多金属的结构为密积结构。

何为杂化轨道？

答：为了解释金刚石中碳原子具有 4 个等价的共价键，1931 年泡林(Pauling)和斯莱特(Slater)提出了杂化轨道理论。碳原子有 4 个价电子，它们分别对应  $\varphi_{2s}$ 、 $\varphi_{2p_x}$ 、 $\varphi_{2p_y}$ 、 $\varphi_{2p_z}$  量子态，在构成共价键时，它们组成了 4 个新的量子态

$$\psi_1 = \frac{1}{2}(\varphi_{2s} + \varphi_{2p_x} + \varphi_{2p_y} + \varphi_{2p_z})$$

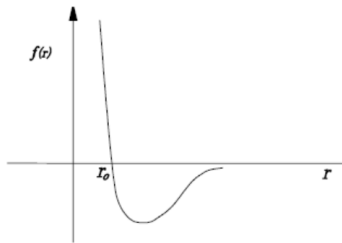
$$\psi_2 = \frac{1}{2}(\varphi_{2s} + \varphi_{2p_x} - \varphi_{2p_y} - \varphi_{2p_z})$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2}(\varphi_{2s} - \varphi_{2p_x} + \varphi_{2p_y} - \varphi_{2p_z})$$

$$\psi_4 = \frac{1}{2}(\varphi_{2s} - \varphi_{2p_x} - \varphi_{2p_y} + \varphi_{2p_z})$$

4 个电子分别占据新轨道  $\psi_1$ 、 $\psi_2$ 、 $\psi_3$ 、 $\psi_4$ ，在四面体顶角方向形成 4 个共价键，称为杂化轨道。这一现象称为杂化轨道现象。

你认为固体的弹性强弱主要由排斥作用决定呢，还是吸引作用决定？



答：如上图所示， $r_0$  附近的力曲线越陡，当施加一定外力，固体的形变就越小。 $r_0$  附近力曲线的斜率决定了固体的弹性性质。而  $r_0$  附近力曲线的斜率主要取决于排斥力。因此， $r_0$  固体的弹性强弱主要由排斥作用决定。

固体呈现宏观弹性的微观本质是什么？

答：固体受到外力作用时发生形变，外力撤消后形变消失的性质称为固体的弹性。设无外力时相邻原子间的距离为  $r_0$ ，当相邻原子间的距离  $r > r_0$  时，吸引力起主导作用；当相邻原子间的距离  $r < r_0$  时，排斥力起主导作用。当固体受挤压时， $r < r_0$ ，原子间的排斥力抗击着这一形变。当固体受拉伸时， $r > r_0$ ，原子间的吸引力抗击着这一形变。因此，固体呈现宏观弹性的微观本质是原子间存在着相互作用力，这种作用力既包含着吸引力，又包含着排斥力。



共价结合，两原子电子云交迭产生吸引，而原子靠近时，电子云交迭会产生巨大的排斥力，如何解释？

答：共价结合，形成共价键的配对电子，它们的自旋方向相反，这两个电子的电子云交迭使得体系的能量降低，结构稳定。但当原子靠得很近时，原子内部满壳层电子的电子云交迭，量子态相同的电子产生巨大的排斥力，使得系统的能量急剧增大。

如何理解电负性可用电离能加亲和能来表征？

答：使原子失去一个电子所需要的能量称为原子的电离能，电离能的大小可用来度量原子对价电子的束缚强弱。一个中性原子获得一个电子成为负离子所释放出来的能量称为电子亲和能。放出来的能量越多，这个负离子的能量越低，说明中性原子与这个电子的结合越稳定。也就是说，亲和能的大小也可用来度量原子对电子的束缚强弱。原子的电负性大小是原子吸引电子的能力大小的度量。用电离能加亲和能来表征原子的电负性是符合电负性的定义的。

晶体的结合能、晶体的内能、原子间的相互作用势能有何区别？

答：自由粒子结合成晶体过程中释放出的能量，或者把晶体拆散成一个个自由粒子所需要的能量，称为晶体的结合能。

原子的动能与原子间的相互作用势能之和为晶体的内能。

在 0K 时，原子还存在零点振动能。但零点振动能与原子间的相互作用势能的绝对值相比小得多。所以，在 0K 时原子间的相互作用势能的绝对值近似等于晶体的结合能。

为什么许多金属为密积结构？

答：金属结合中，受到最小能量原理的约束，要求原子实与共有电子电子云间的库仑能要尽可能的低(绝对值尽可能的大)。原子实越紧凑，原子实与共有电子电子云靠得就越紧密，库仑能就越低。所以，许多金属的结构为密积结构。

是否有与库仑力无关的晶体结合类型？

答：共价结合中，电子虽然不能脱离电负性大的原子，但靠近的两个电负性大的原子可以各出一个电子，形成电子共享的形式，即这一对电子的主要活动范围处于两个原子之间，通过库仑力，把两个原子连接起来。离子晶体中，正离子与负离子的吸引力就是库仑力。金属结

合中，原子实依靠原子实与电子云间的库仑力紧紧地吸引着。分子结合中，是电偶极矩把原本分离的原子结合成了晶体。电偶极矩的作用力实际就是库仑力。氢键结合中，氢先与电负性大的原子形成共价结合后，氢核与负电中心不在重合，迫使它通过库仑力再与另一个电负性大的原子结合。可见，所有晶体结合类型都与库仑力有关。

试述离子键、共价键、金属键、范德瓦尔斯和氢键的基本特征。

答：（1）离子键：无方向性，键能相当强；（2）共价键：饱和性和方向性，其键能也非常强；（3）金属键：有一定的方向性和饱和性，其价电子不定域于2个原子实之间，而是在整个晶体中巡游，处于非定域状态，为所有原子所“共有”；（4）范德瓦尔斯键：依靠瞬时偶极距或固有偶极距而形成，其结合力一般与 $r^7$ 成反比函数关系，该键结合能较弱；（5）氢键：依靠氢原子与2个电负性较大而原子半径较小的原子（如O，F，N等）相结合形成的。该键也既有方向性，也有饱和性，并且是一种较弱的键，其结合能约为50kJ/mol。

原子间的排斥作用和吸引作用有何关系？各自起主导的范围是什么？

在原子由分散无规则的中性原子结合成规则排列的晶体过程中，吸引力起了主要作用。在吸引力的作用下，原子间的距离缩小到一定程度，原子间才出现排斥力。当排斥力与吸引力相等时，晶体达到稳定结合状态。可见，晶体要达到稳定结合状态，吸引力与排斥力缺一不可。设此时相邻原子间的距离为 $r_0$ ，当相邻原子间的距离 $r > r_0$ 时，吸引力起主导作用；当相邻原子间的距离 $r < r_0$ 时，排斥力起主导作用。

是否有与库仑力无关的晶体结合类型？对照晶体的各种键合类型说明之。

共价结合中，电子虽然不能脱离电负性大的原子，但靠近的两个电负性大的原子可以各出一个电子，形成电子共享的形式，即这一对电子的主要活动范围处于两个原子之间，通过库仑力，把两个原子连接起来。离子晶体中，正离子与负离子的吸引力就是库仑力。金属结合中，原子实依靠原子实与电子云间的库仑力紧紧地吸引着。分子结合中，是电偶极矩把原本分离的原子结合成了晶体，电偶极矩的作用力实际就是库仑力。氢键结合中，氢先与电负性大的原子形成共价结合后，氢核与负电中心不再重合，迫使它通过库仑力再与另一个电负性大的原子结合。可见，所有晶体结合类型都与库仑力有关。

有人说“晶体的内能就是晶体的结合能”，对吗？

答：这句话不对，晶体的结合能是指当晶体处于稳定状态时的总能量（动能和势能）与组成这晶体的N个原子在自由时的总能量之差，即  $E_b = E_N - E_0$ 。（其中  $E_b$  为结合能， $E_N$  为组成这晶体的N个原子在自由时的总能量， $E_0$  为晶体的总能量）。而晶体的内能是指晶体处于某一状态时（不一定是稳定平衡状态）的，其所有组成粒子的动能和势能的总和。

**计算/证明题：**

知识点不超过课后习题与 ppt 中的例题

课后习题不考的范围（2.5,2.7）

## 第十二章 晶体中的缺陷和扩散（本次不考计算/证明）

- 1、掌握线缺陷、面缺陷、点缺陷的概念和基本的缺陷类型
- 2、了解扩散及微观机理
- 3、了解位错的物理特性
- 4、大致了解离子晶体中的点缺陷和离子性导电

### 名词解释：

肖脱基缺陷、空位形成能、夫伦克尔缺陷、刃位错、螺位错、色心、F 心、V 心、漂移运动

肖特基缺陷—晶体内格点原子扩散到表面，体内留下空位。

费伦克尔缺陷：晶体内格点原子扩散到间隙位置，形成空位—填隙原子对。

色心：晶体内能够吸收可见光的点缺陷。

F心：离子晶体中一个负离子空位，束缚一个电子形成的点缺陷。

V心：离子晶体中一个正离子空位，束缚一个空穴形成的点缺陷。

### 简答/画图题：

列举常见点缺陷，点缺陷与热缺陷的关系

列举常见面缺陷

刃位错与螺位错的形成机制有何相同和不同点。

肖脱基缺陷/夫伦克尔缺陷浓度与哪些因素有关？（列出公式，写出相关物理量含义）

晶体中原子扩散的本质。

答：在热缺陷的不断产生和复合过程中，晶体中的原子不断由一处向另一处作无规则布朗运动。

晶体结构对缺陷扩散有何影响？

答：扩散是自然界中普遍存在的现象，它的本质是离子作无规则的布朗运动。通过扩散可实现质量的输运。晶体中缺陷的扩散现象与气体分子的扩散相似，不同之处是缺陷在晶体中运动要受到晶格周期性的限制，要克服势垒的阻挡，对于简单晶格，缺陷每跳一步的间距等于跳跃方向上的周期。

自扩散系数的大小与哪些因素有关？

答：填隙原子机构的自扩散系数与空位机构自扩散系数可统一写成

$$D = \frac{1}{2} v_0 a^2 e^{-\varepsilon / k_B T} = \frac{1}{2} v_0 a^2 e^{-N_0 \varepsilon / RT}.$$

可以看出，自扩散系数与原子的振动频率  $v_0$ ，晶体结构(晶格常数  $a$ )，激活能 ( $N_0 \varepsilon$ ) 三个因素有关。

替位式杂质原子扩散系数比晶体缺陷自扩散系数大的原因是什么？

答：占据正常晶格位置的替位式杂质原子，它的原子半径和电荷量都或多或少与基质的原子半径和电荷量不同。这种不同就会引起杂质原子附近的晶格发生畸变，使得畸变区出现空位的几率大大增加，进而使得杂质原子跳向空位的等待时间大为减少，加大了杂质原子的扩散速度。

一个空位花费多长时间才被复合掉？

答：对于借助于空位进行扩散的正常晶格上的原子，只有它相邻的一个原子成为空位时，它才扩散一步，所需等待的时间是  $\tau_1$ 。但它相邻的一个原子成为空位的几率是  $n_1 / N$ ，所以它等待到这个相邻原子成为空位，并跳到此空位上所花费的时间

$$t = \frac{N}{n_1} \tau_1 = \frac{1}{v_{01}} e^{(u_1 + E_1) / k_B T}.$$

为什么形成一个肖特基缺陷所需能量比形成一个弗仑克尔缺陷所需能量低？

答：形成一个肖特基缺陷时，晶体内留下一个空位，晶体表面多一个原子。因此形成一个肖特基缺陷所需的能量，可以看成晶体表面一个原子与其它原子的相互作用能，和晶体内部一个原子与其它原子的相互作用能的差值。形成一个弗仑克尔缺陷时，晶体内留下一个空位，多一个填隙原子。因此形成一个弗仑克尔缺陷所需的能量，可以看成晶体内部一个填隙原子与其它原子的相互作用能，和晶体内部一个原子与其它原子相互作用能的差值。填隙原子与相邻原子的距离非常小，它与其它原子的排斥能比正常原子间的排斥能大得多。由于排斥能是正值，包括吸引能和排斥能的相互作用能是负值，所以填隙原子与其它原子相互作用能的

绝对值，比晶体表面一个原子与其它原子相互作用能的绝对值要小。也就是说，形成一个肖特基缺陷所需能量比形成一个弗仑克尔缺陷所需能量要低。

棱(刃)位错和 螺位错分别与位错线的关系如何？

答：棱(刃)位错：滑移方向垂直位错线。

螺位错：滑移方向平行位错线。

位错线的定义和特征如何？

答：位错线的定义：滑移区与未滑移的分界线；

位错线的特征：

- (1) 线附近原子排列失去周期性；
- (2) 位错线不是热运动的结果；
- (3) 位错线可在体内形成闭合线，可在表面露头，不可能在体内中断。

离子晶体导电的物理解释。

爱因斯坦关系及其意义。

**计算/证明题：**（本次不考）

热缺陷的统计平衡。

爱因斯坦关系的证明。

### 第三章 晶格振动与晶体的热学性质

- 1、熟练掌握并理解其物理过程，要求能灵活应用：一维链的振动(单原子链、双原子链)、声学支、光学支、色散关系
- 2、清楚掌握格波、简正坐标、声子、声子振动态密度、长波近似等概念
- 3、熟练掌握并理解其物理过程，要求能灵活应用：固体热容：爱因斯坦模型、德拜模型
- 4、了解非简谐效应：热膨胀、热传导
- 5、了解中子的非弹性散射测声子能谱

#### 名词解释：

绝热近似、简谐近似、杜隆-珀替定律、格波、声子、声学波、光学波、黄昆方程的表达式及相关物理量含义、黄昆方程意义、波恩-卡曼边界条件、爱因斯坦模型、德拜模型

近邻近似：在晶格振动中，只考虑最近邻的原子间的相互作用。

Einstein模型：在晶格振动中，假设所有原子独立地以相同频率 $\omega_E$ 振动。

Debye模型：在晶格振动中，假设晶体为各向同性连续弹性媒质,晶体中只有3支声学波，且 $\omega=vq$ 。

德拜频率  $\omega_D$ ： Debye 模型中  $g(\omega)$ 的最高频率。

爱因斯坦频率  $\omega_E$ ： Einstein 模型中  $g(\omega)$ 的最可几频率。

简谐近似：晶体中粒子相互作用势能泰勒展开式中只取到二阶项的近似。

杜隆-珀替定律：高温下固体比热为常数。

格波的态密度函数（振动模式密度）：在  $\omega$  附近单位频率间隔内的格波总数。

摩尔热容：每摩尔物质升高或降低单位温度吸收或释放出的热量。

声子：对于晶格振动， $\hbar\omega$ 为格波谐振子的能量量子，称其为声子。

色散关系：晶格振动中  $\omega$  和  $q$  之间的关系。

格波：晶格具有周期性，晶格的振动具有波的形式，因此把晶体中原子的集体振动模式称为格波。

德拜定律：低温下固体比热与  $T^3$  成正比。

#### 简答/画图题：

什么叫简正振动模式？简正振动数目、格波数目或格波振动模式数目是否是一回事？

答：为了使问题既简化又能抓住主要矛盾，在分析讨论晶格振动时，将原子间相互作用力的泰勒级数中的非线性项忽略掉的近似称为简谐近似。在简谐近似下，由  $N$  个原子构成的晶体的晶格振动，可等效成  $3N$  个独立的谐振子的振动。每个谐振子的振动模式称为简正振动模式，它对应着所有的原子都以该模式的频率做振动，它是晶格振动模式中最简单最基本的振动方式。原子的振动，或者说格波振动通常是这  $3N$  个简正振动模式的线性迭加。

简正振动数目、格波数目或格波振动模式数目是一回事，这个数目等于晶体中所有原子的自由度之和，即等于  $3N$ 。

波矢空间与倒格子空间有何关系？为什么说波矢空间内的状态点是准连续的？

波矢空间与倒格子空间处于统一空间，倒格子空间的基矢分别为  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ ，而波矢空间的基矢分别为  $\mathbf{b}_1/N_1, \mathbf{b}_2/N_2, \mathbf{b}_3/N_3$ ， $N_1, N_2, N_3$  分别是沿正格子基矢方向晶体的原胞数目。

倒格子空间中一个倒格点对应的体积为  $\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \Omega^*$

波矢空间中一个波矢点对应的体积为  $\frac{\mathbf{b}_1}{N_1} \cdot \left( \frac{\mathbf{b}_2}{N_2} \times \frac{\mathbf{b}_3}{N_3} \right) = \frac{\Omega^*}{N}$

即波矢空间中一个波矢点对应的体积，是倒格子空间中一个倒格点对应的体积的  $1/N$ 。由于  $N$  是晶体的原胞数目，数目巨大，所以一个波矢点对应的体积与一个倒格点对应的体积相比是极其微小的。也就是说，波矢点在倒格子空间看是极其稠密的。因此，在波矢空间内作求和处理时，可把波矢空间内的状态点看成是准连续的。

爱因斯坦模型在低温下与实验存在偏差的根源是什么？

答：按照爱因斯坦温度的定义，爱因斯坦模型的格波的频率大约为  $10^{13} \text{ Hz}$ ，属于光学支频率。但光学格波在低温时对热容的贡献非常小，低温下对热容贡献大的主要是长声学格波。也就是说爱因斯坦没考虑声学波对热容的贡献是爱因斯坦模型在低温下与实验存在偏差的根源。

在甚低温下，德拜模型为什么与实验相符？



答：在甚低温下，不仅光学波得不到激发，而且声子能量较大的短声学格波也未被激发，得到激发的只是声子能量较小的长声学格波。长声学格波即弹性波。德拜模型只考虑弹性波对热容的贡献。因此，在甚低温下，德拜模型与事实相符，自然与实验相符。

温度一定，一个光学波的声子数目多呢，还是声学波的声子数目多？

答：频率为  $\omega$  的格波的(平均) 声子数为

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} .$$

因为光学波的频率  $\omega_O$  比声学波的频率  $\omega_A$  高， $(e^{\hbar\omega_O/k_B T} - 1)$  大于  $(e^{\hbar\omega_A/k_B T} - 1)$ ，所以在温度一定情况下，一个光学波的声子数目少于一个声学波的声子数目。

高温时，频率为  $\omega$  的格波的声子数目与温度有何关系？

答：温度很高时， $e^{\hbar\omega/k_B T} \approx \hbar\omega - 1$ ，频率为  $\omega$  的格波的(平均) 声子数为

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \approx \frac{k_B T}{\hbar\omega} .$$

可见高温时，格波的声子数目与温度近似成正比。

对同一个振动模式，温度高时的声子数目多呢，还是温度低时的声子数目多？

长光学支格波与长声学支格波本质上有何差别？

答：长光学支格波的特征是每个原胞内的不同原子做相对振动，振动频率较高，它包含了晶格振动频率最高的振动模式。长声学支格波的特征是原胞内的不同原子没有相对位移，原胞做整体运动，振动频率较低，它包含了晶格振动频率最低的振动模式，波速是一常数。任何晶体都存在声学支格波，但简单晶格(非复式格子)晶体不存在光学支格波。

温度很低时，声子的自由程很大，当  $T \rightarrow 0$  时， $\bar{\lambda} \rightarrow \infty$ ，问  $T \rightarrow 0$  时，对于无限长的晶体，是否成为热超导材料？

答：对于电绝缘体，热传导的载流子是声子。当  $T \rightarrow 0$  时，声子数  $n \rightarrow 0$ 。因此， $T \rightarrow 0$  时，不论晶体是长还是短，都自动成为热绝缘材料。

金刚石中的长光学纵波频率与同波矢的长光学格横波频率是否相等？对 KCl 晶体，结论又是什么？

答：长光学纵波引起离子晶体中正负离子的相对位移，离子的相对位移产生出宏观极化电场，电场的方向是阻滞离子的位移，使得有效恢复力系数变大，对应的格波的频率变高。长光学格横波不引起离子的位移，不产生极化电场，格波的频率不变。金刚石不是离子晶体，其长光学纵波频率与同波矢的长光学格横波频率相等。而 KCl 晶体是离子晶体，它的长光学纵波频率与同波矢的长光学格横波频率不相等，长光学纵波频率大于同波矢的长光学格横波频率。

长声学格波能否导致离子晶体的宏观极化？

答：长光学格波所以能导致离子晶体的宏观极化，其根源是长光学格波使得原胞内不同的原子(正负离子)产生了相对位移。长声学格波的特点是，原胞内所有的原子没有相对位移。因此，长声学格波不能导致离子晶体的宏观极化。

何谓极化声子？何谓电磁声子？

答：长光学纵波引起离子晶体中正负离子的相对位移，离子的相对位移产生出宏观极化电场，称长光学纵波声子为极化声子。

长光学横波与电磁场相耦合，使得它具有电磁性质，人们称长光学横波声子为电磁声子。

周期性边界条件的物理含义是什么？引入这个条件后导致什么结果？如果晶体是无限大， $q$  的取值将会怎样？

答：由于实际晶体的大小总是有限的，总存在边界，而显然边界上原子所处的环境与体内原子的不同，从而造成边界处原子的振动状态应该和内部原子有所差别。考虑到边界对内部原子振动状态的影响，波恩和卡门引入了周期性边界条件。其具体含义是设想在一长为  $Na$  的有限晶体边界之外，仍然有无穷多个相同的晶体，并且各块晶体内相对应的原子的运动情况一样，即第  $j$  个原子和第  $tN + j$  个原子的运动情况一样，其中  $t = 1, 2, 3, \dots$ 。

引入这个条件后，导致描写晶格振动状态的波矢  $q$  只能取一些分立的不同值。如果晶体是无限大，波矢  $q$  的取值将趋于连续。

讨论晶格振动时的物理框架是牛顿力学还是量子力学？

答：牛顿力学+量子力学修正，所以又可称为半经典理论。

一维格波波矢  $q$  的取值范围是什么？ $q$  在第一 B.Z 内取值数是多少？ $q$  有哪些特点？

答： $q$  的取值范围：为保证唯一性， $q$  在第一 B.Z 内取值，即  $-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$

$q$  在第一 B.Z 内取值数为  $N$  (初基元胞数)。 $q$  不连续 (准连续)；均匀分布；密度  $\frac{Na}{2\pi} = \frac{L}{2\pi}$

在三维晶体中，格波独立的  $\vec{q}$  点数，格波个数，格波总支数，声学波支数，光学波支数分别等于多少？

答：独立的  $\vec{q}$  点数 = 晶体的初基元胞数  $N$ ；格波个数 = 晶体原子振动自由度数， $3NS$  个；

格波支数 =  $3S$  (初基元胞内原子振动的自由度数)；其中 3 支声学波， $3(S-1)$  支光学波。

定性地讲，声学波和光学波分别描述了晶体原子的什么振动状态？

答：定性地讲，声学波描述了元胞质心的运动，光学波描述了元胞内原子的相对运动。

描述元胞内原子不同的运动状态是二支格波最重要的区别。

晶格振动的色散曲线有哪些对称性？

答：(1)  $\omega_i(\vec{q}) = \omega_i(\vec{q} + \vec{G}_n)$   $\omega_i(\vec{q}) = \omega_i(-\vec{q})$

(2) 还具有与晶体结构相同的对称性。

讨论晶格振动的系统能量时为什么要引入简正坐标  $Q_q(t)$ ？

答：为了消去交叉项，便于数学处理和看出物理意义 (简谐格波间相互独立)。

什么叫声子？对于一给定的晶体，它是否拥有一定种类和一定数目的声子？

答：声子就是晶格振动中的简谐振子的能量量子，它是一种玻色子，服从玻色-爱因斯坦统计，即具有能量为  $\hbar\omega_j(q)$  的声子平均数为

$$n_j(q) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_j(q)/(k_B T)} - 1}$$

对于一给定的晶体，它所对应的声子种类和数目不是固定不变的，而是在一定的条件下发生变化。

讨论晶格振动时的量子力学修正体现在什么地方？

答：体现在把谐振子能量用量子谐振子能量表示，并不是体现在引入格波、格波用谐振子等效及  $\vec{q}$  不连续等方面。

声子有哪些性质？

答：(1) 声子是晶格振动量子谐振子的能量量子；

(2) 3NS 格波与 3NS 个量子谐振子一一对应；

(3) 声子为玻色子；

(4) 平衡态时声子是非定域的；

(5) 声子是准粒子 遵循能量守恒  $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_3$

准动量选择定则  $\hbar q_1 + \hbar q_2 = \hbar(q_3 + \vec{G}_h)$

(6) 非热平衡态，声子扩散伴随着热量传导；

(7) 平均声子数

晶体中声子数目是否守恒？

答：频率为  $\omega_i$  的格波的(平均)声子数为  $n(\omega_j) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_j/k_B T} - 1}$

即每一个格波的声子数都与温度有关，因此，晶体中声子数目不守恒，它是温度的函数。

绝对零度时，价电子与晶格是否交换能量？

答：晶格的振动形成格波，价电子与晶格交换能量实际是价电子与格波交换能量。格波的能量量子称为声子，价电子与格波交换能量可视为价电子与声子交换能量。频率为  $\omega_i$  的格波的

声子数  $n(\omega_j) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_j/k_B T} - 1}$ 。从上式可以看出，绝对零度时，任何频率的格波的声子全都消失。

因此，绝对零度时，价电子与晶格不再交换能量。

长光学支格波与长声学支格波本质上有何差别？

答：长光学支格波的特征是每个原胞内的不同原子做相对振动，振动频率较高，它包含了晶格振动频率最高的振动模式。长声学支格波的特征是原胞内的不同原子没有相对位移，原胞做整体运动，振动频率较低，它包含了晶格振动频率最低的振动模式，波速是一常数。任何晶体都存在声学支格波，但简单晶格(非复式格子)晶体不存在光学支格波。

晶格比热容的爱因斯坦模型和德拜模型采用了什么简化假设？各取得了什么成就？各有什么局限性？为什么德拜模型在极低温度下能给出精确结果？

答：我们知道晶体比热容的一般公式为  $c_V = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T}\right)_V = \int_0^{\omega_m} k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / (k_B T)} \rho(\omega) d\omega}{(e^{\hbar \omega / (k_B T)} - 1)^2}$

由上式可以看出，在用量子理论求晶体比热容时，问题的关键在于如何求角频率的分布函数  $\rho(\omega)$ 。但是对于具体的晶体来讲， $\rho(\omega)$  的计算非常复杂。为此，在爱因斯坦模型中，假设晶体中所有的原子都以相同的频率振动，而在德拜模型中，则以连续介质的弹性波来代表格波以求出  $\rho(\omega)$  的表达式。

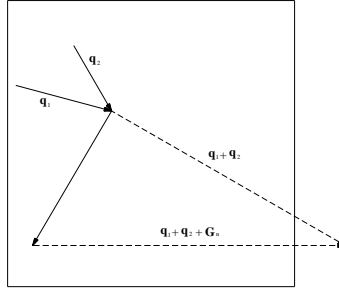
爱因斯坦模型取得的最大成就在于给出了当温度趋近于零时，比热容  $c_V$  亦趋近于零的结果，这是经典理论所不能得到的结果。其局限性在于模型给出的是比热容  $c_V$  以指数形式趋近于零，快于实验给出的以  $T^3$  趋近于零的结果。

德拜模型取得的最大成就在于它给出了在极低温度下，比热和温度  $T^3$  成比例，与实验结果相吻合。其局限性在于模型给出的德拜温度  $\Theta_D$  应视为恒定值，适用于全部温度区间，但实际上在不同温度下，德拜温度  $\Theta_D$  是不同的。

在极低温度下，并不是所有的格波都能被激发，而只有长声学波被激发，对比热容产生影响。而对于长声学波，晶格可以视为连续介质，长声学波具有弹性波的性质，因而德拜的模型的假设基本符合事实，所以能得出精确结果。

声子碰撞时的准动量守恒为什么不同于普通粒子碰撞时的动量守恒？U过程物理图像是什么？它违背了普遍的动量守恒定律吗？

答：声子碰撞时，其前后的总动量不一定守恒，而是满足以下的关系式  $\hbar \mathbf{q}_1 + \hbar \mathbf{q}_2 = \hbar \mathbf{q}_3 + \hbar \mathbf{G}_n$ ，其中上式中的  $\mathbf{G}_n$  表示一倒格子矢量。对于  $\mathbf{G}_n = 0$  的情况，即有  $\hbar \mathbf{q}_1 + \hbar \mathbf{q}_2 = \hbar \mathbf{q}_3$ ，在碰撞过程中声子的动量没有发生变化，这种情况称为正规过程，或N过程，N过程只是改变了动量的分布，而不影响热流的方向，它对热阻是没有贡献的。对于  $\mathbf{G}_n \neq 0$  的情况，称为翻转过程或U过程，其物理图像可由下图3.2来描述：

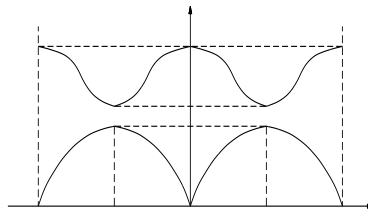


在上图3.2中， $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$  是向“右”的，碰撞后 $\mathbf{q}_3$ 是向“左”的，从而破坏了热流的方向，所以U过程对热阻是有贡献的。U过程没有违背普遍的动量守恒定律，因为声子不是实物量子，所以其满足的是准动量守恒关系。

从一维双原子晶格色散关系出发，当 $m$  逐渐接近 $M$  和 $m=M$ 时，在第一布里渊区中，晶格振动的色散关系如何变化？试与一维单原子链的色散关系比较，并对结果进行讨论。

答：一维双原子晶格的色散关系为 $\omega_{\pm}^2 = \left(\frac{\beta}{M} + \frac{\beta}{m}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{\beta}{M} + \frac{\beta}{m}\right)^2 - 4 \frac{\beta}{M} \cdot \frac{\beta}{m} \sin^2 qa}$

由此可做出如下图的一维双原子链振动的色散关系曲线图



一维双原子链振动的色散关系曲线

由上图可以看出，当 $m$  逐渐接近 $M$  时，在第一布里渊区边界，即 $q = \pm \frac{\pi}{2a}$  处，声学波的频率开始增大，而光学波的频率则开始减小，而当 $m=M$ 时，则声学波的频率和光学波的频率在 $q = \pm \frac{\pi}{2a}$  处相等，都等于 $\sqrt{\frac{2\beta}{M}}$ 。

而在一维单原子链中，其色散关系为 $\omega^2 = \frac{4\beta}{M} \sin^2 \frac{qa}{2}$ ，由此可见，在一维单原子链中只存在一支格波，其色散关系曲线与一维双原子链中的声学波的色散关系曲线基本相似，在其布里渊

区边界，即  $q = \pm \frac{\pi}{a}$  处，其格波频率为  $\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}$ ，是双原子链的格波在布里渊边界的频率值的2倍。

有人定性地认为，德拜温度  $\theta_D$  是经典概念与量子概念解释比热的分界线，你的看法如何？

答：德拜频率  $\omega_D$ ：  $g(\omega)$  的最高频率；

爱因斯坦频率  $\omega_E$ ：  $g(\omega)$  中最可几频率；

德拜温度  $\theta_D$  与德拜频率  $\omega_D$  相对应。 $\theta_D$  成为经典概念与量子概念解释比热的分界线，是因为经典理论认为：谐振子能量按自由度均分：即认为所有波格均激发，而当  $T < \theta_D$  时，出现格波冻结，按经典理论处理造成较大的误差，而当  $T > \theta_D$  时，不出现格波冻结，按经典理论处理造成的误差也就相对较小了。

热膨胀系数  $\alpha_v$  是如何表示的？

答：  $\alpha_v = \frac{\gamma}{KV} C_v$  式中  $\gamma$ ：格林爱森系数； $K$ ：体弹性模量； $V$ ：晶体体积； $C_v$ ：晶体的热容

热传导系数（热导率） $\lambda$  是如何表示的？

答：  $\lambda = \frac{1}{3} C_v \bar{v} L$  式中： $C_v$ ：单位体积热容； $\bar{v}$ ：声子平均速率； $L$ ：声子平均自由程。

什么叫 N 过程和 U 过程？

答：以三声子过程为例： $\hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_3$      $\hbar\vec{q}_1 + \hbar\vec{q}_2 = \hbar(\vec{q}_3 + \vec{G}_h)$

$\vec{G}_h = 0$ ：N 过程     $\vec{G}_h \neq 0$ ：U 过程

为什么说光学支一般对热导贡献小？

答：因为 (1) 温度不太高时 ( $T < \theta_D$ ) 光学支先冻结，对  $C_v$  贡献小

(2) 光学支  $\bar{v}$  小,  $\bar{v}$  的物理意义是声子运动的平均速率, 而声子的运动携带着能量的传播, 因此  $\bar{v}$  的意义应与能量传播的速度相对应, 能速  $v_g = \frac{d\omega}{dq}$ , 光学支色散曲线  $\omega \sim q$  平坦,  $v_g$  较小, 即  $\bar{v}$  较小。

(3) 光学支  $\omega$  小的  $|q|$  大, 易于发生 U 过程, 而 U 过程将造成热阻。

有人说, 热容  $C_v$  是声子密度的度量, 你的看法如何?

答: 由热膨胀系数  $\alpha_v$ , 热导率  $\lambda$  的表示式可知  $\alpha_v \propto c_v$ 。  $\lambda \propto c_v$ , 而由  $\alpha_v$ 、 $\lambda$  的物理意义可知,  $\alpha_v$ 、 $\lambda$  均应与声子密度相关, 考察  $\alpha_v$ 、 $\lambda$  的表示式, 只有认为  $C_v$  表示声子的密度, 所以在相同温度下, 认为热容  $C_v$  是晶体中声子密度的度量是可以的。

为什么说“晶格振动”理论是半经典理论?

答: 首先只能求解牛顿方程, 并引入了格波, 而且每个格波的能量可用谐振子能量来表示。之后进行了量子力学修正, 量子力学修正体现在谐振子能量不用经典谐振子能量表示式, 而用量子谐振子能量表示式。

简述晶格振动理论中简谐近似的成功之处和局限性。

答: 成功地得出格波 (声学格波、光学格波) 及其相应的色散曲线, 引入了声子, 并成功地解释了热容。其局限性主要表现为不能解释热膨胀、热传导等现象。

什么是声子的准动量? 为什么称它们是“准”动量, 而不直接称为动量?

答: 声子是准粒子,  $\hbar q_1$  是声子的准动量。准动量  $\hbar q_1$  具有动量的量纲, 但声子间相互作用满足准动量选择定则  $\hbar q_1 + \hbar q_2 = \hbar(q_3 + \vec{G}_h)$  其中  $\vec{G}_h$  是晶体的任意倒格矢。

**计算/证明题:**

计算色散关系表达式 (一维单原子+一维双原子)

计算模式密度表达式 (一维单原子+德拜模型一、二、三维)

晶格热容积分表达式 (德拜模型一、二、三维, 只写出积分表达式即可)



## 第四章 能带理论

- a) 深刻理解布洛赫定理
- b) 熟练掌握并理解其物理过程，要求能灵活应用：近自由电子模型
- c) 熟练掌握并理解其物理过程，要求能灵活应用：紧束缚近似
- d) 深刻理解费密面、能态密度和能带的特点
- e) 了解电子表面态与晶体内部电子态的区别

### 名词解释：

布洛赫定理、带隙、布里渊区、费米面

布洛赫定理：晶体中的电子波函数是由晶格周期性调制的调幅平面波，即： $\psi(\vec{K}, \vec{r}) = u(\vec{K}, \vec{r}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$

$$\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, u(\vec{K}, \vec{r}) = u(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n)$$

另一种表示： $\psi(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \psi(\vec{k}, \vec{r})$ 。

带隙（禁带）：晶体中电子运动状态不允许占据的能量范围。

能态密度：给定体积的晶体，单位能量间隔内所包含的电子状态数。

布里渊区：在倒格子中，以某一点为坐标原点，作所有倒格矢的垂直平分面，倒格子空间被这些平面分成许多区域，这些区域称为布里渊区。

第一布里渊区：离到格子原点最近的倒格矢中垂面围成的区域。

费米面：K 空间中，能量 E 为费米能级  $E_F$  的等能面称为费米面。

### 简答题：

试举一例说明固体物理中处理晶体内微观粒子（原子或电子）运动态问题的基本过程。

答：以求解金属晶体中自由电子的运动状态为例，基本的处理过程如下：

（1）建模（索末菲模型）。

结构模型：金属晶体由不动的离子实（包括原子核和核外封闭壳层内的电子）构成三维周期性骨架，封闭壳层外的电子（价电子）在骨架中自由运动，成为自由电子。

势场模型：自由电子在金属晶体中处于恒定的势场，晶体表面存在一无穷大的势垒。

$$V(r) = \begin{cases} 0 & 0 < x, y, z < L \\ \infty & x, y, z \leq 0, x, y, z \geq L \end{cases}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + E \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2) \text{ 建立运动方程 (简化的定态薛定谔方程)}$$

描述自由电子在金属晶体运动状态的态函数满足:

(3) 假定自由电子运动的边界条件 (周期性边界条件, 即玻恩—卡曼边界条件)

假设在有限晶体之外有无穷多个和这个有限晶体完全相同的假想晶体与之无缝隙地衔接在一起, 组成一个无限的晶体, 自由电子即处于这样的假想晶体中运动。

$$\left. \begin{aligned} \psi(0, y, z) &= \psi(L, y, z) \\ \psi(x, 0, z) &= \psi(x, L, z) \\ \psi(x, y, 0) &= \psi(x, y, L) \end{aligned} \right\}$$

(4) 求解

在上述边界条件下解薛定谔方程, 得:  $\psi(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}$

其中  $\mathbf{K}$  为电子的波矢量  $\mathbf{K} = K_x \mathbf{i} + K_y \mathbf{j} + K_z \mathbf{k}$

$A$  是归一化常数, 由波函数的归一化条件

$$\int_V \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1$$

$$A = L^{-3/2} = \frac{1}{\sqrt{V}}$$

(5) 对解的讨论 (金属晶体中自由电子的运动状态的特点)

由波函数模的平方

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 = \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = A^2 = \frac{1}{L^3}$$

上式说明, 电子在金属中各处出现的几率一样, 形象地讲即指电子是在金属中很自由的, 是自由电子。

固体能带论的两个基本假设是什么?

答: (1) 绝热近似, 原子实的影响用周期势场等效, 把多体问题化为多电子问题。

(2) 单电子近似, 把其余电子对某一电子作用也用等效的平均势场表示, 把多电子问题简化为单电子问题。

固体能带论的基本思路是怎样的？

答：用绝热近似和单电子近似，把原子实及其它电子的影响用等效的周期势场  $\vec{V}(\mathbf{r})$  来表示，进而求解 S—方程，并用量子力学的微扰论求出固体中电子的波函数和能量。关键是等效的周期势场  $\vec{V}(\mathbf{r})$  该如何表示。

固体中电子状态的主要特征有哪些？

答：用周期势场  $\vec{V}(\mathbf{r})$  等效相互作用之后

(1) 由孤立原子的能级变成固体的能带；

(2) 出现电子的共有化；

(3) 由周期边界条件波矢  $\vec{k}$  取值不连续  $\vec{k} = \frac{l_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3}\vec{b}_3$  其中  $l_1, l_2, l_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, N_1, N_2, N_3$  为  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  方向初基元胞数。

$\pm 1, \pm 2, \dots, N_1, N_2, N_3$  为  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  方向初基元胞数。

布洛赫电子论作了哪些基本近似？它与金属自由电子论相比有哪些改进？

答：布洛赫电子论作了3条基本假设，即①绝热近似，认为离子实固定在其瞬时位置上，可把电子的运动与离子实的运动分开来处理；②单电子近似，认为一个电子在离子实和其它电子所形成的势场中运动；③周期场近似，假设所有电子及离子实产生的场都具有晶格周期性。布洛赫电子论相比于金属自由电子论，考虑了电子和离子实之间的相互作用，也考虑了电子与电子的相互作用。

由 Bloch 定理有哪些结论和推论？

答：(1) a.  $|\psi(\vec{k}, \vec{r})|^2$  代表电子出现的几率，具有正晶格周期性。

b. 但  $\psi(\vec{k}, \vec{r})$  本身不具有正晶格周期性。

c.  $\psi(\vec{k}, \vec{r})$  本身具有倒格子周期性  $\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \psi(\vec{k} + \vec{G}_n, \vec{r})$   $\vec{G}_n$  : 任意倒格矢

(2) a. 能量具有倒格子周期性 即  $E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G}_n)$ .

b. 因电子能量为物理的实在，也具有正晶格周期性。

c. 同一能带对  $\vec{k} = 0$  的点具有反对称性， $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$

d.  $E(\vec{k})$  具有与正晶格相同的对称性。

周期场对能带形成是必要条件吗？

答：周期场对能带的形成是必要条件，这是由于在周期场中运动的电子的波函数是一个周期性调幅的平面波，即是一个布洛赫波。由此使能量本征值也称为波矢的周期函数，从而形成了一系列的能带。

在第一 B、Z 内波矢  $\vec{k}$  的取值， $\vec{k}$  点数， $\vec{k}$  点密度。

答： $\vec{k} = \frac{l_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \vec{b}_3$ ，第一 B、Z 内独立的  $\vec{k}$  点数为 N（初基元胞数），每个  $\vec{k}$  点在倒空间所占体积为  $(2\pi)^3/V$ ， $\vec{k}$  点密度为  $\frac{V}{(2\pi)^3}$

能态密度 D 是如何定义的？

答：对给体积的晶体，单位能量间隔的电子状态数。

(1) 若能带不交叠： $E \rightarrow E+dE$  二等能面间电子状态数  $dZ = 2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \int_E^{E+dE} d\tau_{\vec{k}}$

$$dZ = D(E_n) dE, \quad D = \frac{dz}{dE} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{\text{等}E\text{面}} \left| \frac{ds_E}{\nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})} \right|$$

(2) 若能带交叠  $D(E) = \sum_n D(E_n)$

试计算自由电子的能态密度 D。

答： $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  等能面为球面，得  $D = \frac{dz}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$  但不能说  $E \uparrow$  电子数  $\downarrow$

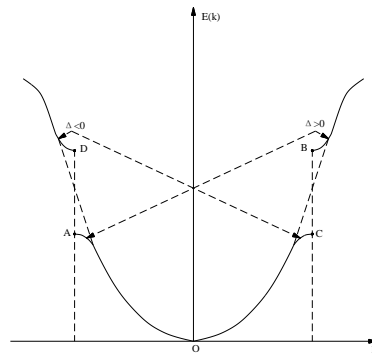
一个能带有 N 个准连续能级的物理原因是什么？

答：这是由于晶体中含有的总原胞数 N 通常都是很大的，所以 k 的取值是十分密集的，相应的能级也同样十分密集，因而便形成了准连续的能级。

禁带形成的原因如何？您能否用一物理图像来描述？

答：对于在倒格矢  $\mathbf{K}_h$  中垂面及其附近的波矢  $\mathbf{k}$ ，即布里渊区界面附近的波矢  $\mathbf{k}$ ，由于采用简并微扰计算，致使能级间产生排斥作用，从而使  $E(\mathbf{k})$  函数在布里渊区界面处“断开”，即发生突变，从而产生了禁带。

可以用下面的图来描述禁带形成的原因：



近自由电子模型与紧束缚模型各有何特点？它们有什么相同之处？

答：所谓近自由电子模型就是认为电子接近于自由电子状态的情况，而紧束缚模型则认为电子在一个原子附近时，将主要受到该原子场的作用，把其它原子场的作用看成微扰作用。这两种模型的相同之处是：选取一个适当的具有正交性和完备性的布洛赫波形式的函数集，然后将电子的波函数在所选取的函数集中展开，其展开式中有一组特定的展开系数，将展开后的电子的波函数代入薛定谔方程，利用函数集中各基函数间的正交性，可以得到一组各展开系数满足的久期方程。这个久期方程组是一组齐次方程组，由齐次方程组有解条件可求出电子能量的本征值，由此便揭示出了系统中电子的能带结构。

紧束缚近似下，内层电子与外层电子的能带哪个更宽？为什么？

解释近自由电子近似下晶体中电子能带带隙的形成？

答：当不考虑电子波的布拉格反射时，电子的能量同  $k$  的关系是一条抛物线。当考虑到电子的布拉衍射（反射）时，能级则发生了本质变化。当  $k$  落在布里渊区边界上时，函数由行波变成了两个驻波，且这两个驻波的能量分别低于和高于行波，也就是说在布里渊区边界上时，电子能级出现了能量间隙。

综上所述，周期性排列的原子对电子的布拉格衍射（有时也称布拉格反射）所形成的驻波改变了电子在晶体内部的密度分布，引起了能隙，产生了晶体的能带结构。

何谓布洛赫定理？何谓布洛赫电子？何谓布洛赫函数？

晶格具有平移对称性的单电子哈密顿

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

的本征函数  $\psi(\vec{r})$  可表示为  $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u(\vec{r})$

其中  $u(\vec{r})$  是一个具有晶格周期性的函数：

$u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R})$ ， $\vec{k}$  为简约波矢。

布洛赫电子是指晶体中的电子；

布洛赫函数是指晶体中电子波函数；

按近自由电子模型能求解哪些问题，近自由电子近似的零级近似如何取？它主要能计算哪些物理量？

答：零级近似为无限大真空中自由电子，故它适用于金属中的价电子，利用 N.F.E 模型主要可计算禁带宽度。

按紧束缚模型能求解哪些问题，紧束缚近似的零级近似如何取？它主要能计算哪些物理量？

答：答：为孤立原子中的电子状态的组合，故它主要适用于绝缘体，主要可计算 S 带的能带宽度。

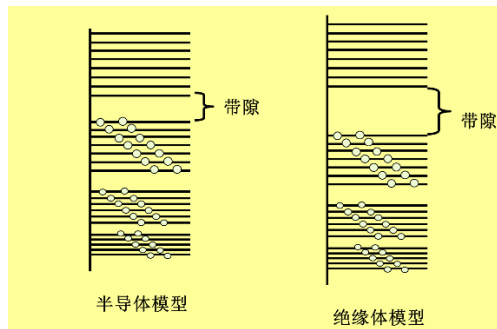
布洛赫电子的费米面与哪些因素有关？确定费米面有何重要性？

答：布洛赫电子的费米面与晶体的种类及其电子数目有关。由于晶体的很多物理过程主要是由费米面附近的电子行为决定的，如导电、导热等，所以确定费米面对研究晶体的物理性质及预测晶体的物理行为都有很重要的作用。

解释本征半导体的能带与绝缘体的能带的区别？

答：低温下，本征半导体的能带与绝缘体的能带结构相同。但是本征半导体的禁带较窄，禁带宽度通常在 2 个电子伏以下。由于禁带窄，本征半导体禁带下的电子可以借助热激发，跃

迁到禁带上面空带的底部，使得满带不满，空带不空，二者都对导电有贡献。而绝缘体的禁带较宽，电子不易实现跃迁，故导电性很弱。



画图说明导体、半导体和绝缘体能带结构的基本特征？

答：在导体中，除去完全充满的一系列能带外，还有只是部分地被电子填充的能带，后者可以起导电作用，称为导带。

在半导体中，由于能量最高的满带与上面的空带没有重叠,但禁带宽度  $E_g$  小,存在一定的杂质,或由于热激发使导带中存有少数电子,或满带中缺了少数电子,从而导致一定的导电性。

在绝缘体中，电子恰好填满了最低的一系列能带，再高的各带全部都是空的，所有被电子填充的能带都是满带，能量最高的满带与上面的空带没有重叠,禁带宽度  $E_g$  较宽.由于满带不产生电流，所以尽管存在很多电子，并不导电。

**计算题：**

已知势场求色散关系

求带隙宽度

求能态密度

本次课后习题 4.9,4.10 不考

## 第五章 晶体中电子在电场和磁场中的运动（本次只考简答题）

- a) 熟练掌握并理解其物理过程：恒定电场作用下电子的运动
- b) 能够用能带论解释金属、半导体和绝缘体，掌握空穴的概念
- c) 熟练掌握并理解其物理过程：恒定磁场中电子的运动
- d) 能够解释回旋共振、德·哈斯-范·阿尔芬效应

### 简答题：

存在外电场  $\vec{E}$  时，讨论晶体中电子的输运的基本思路是怎样的？为什么未采用解薛定格方程的方法？

答：目前量子力学擅长求解定态 S 方程，即能量 E 为确定值。在有外场存在时，晶体中电子受到外场作用，能量 E 是变化的，不是定态问题，而非定态 S 方程不易求解。所以只得回到牛顿力学框架中来，而牛顿方程  $\vec{F} = m\vec{a}$ ，特长就是求解有外力作用的问题，但  $\vec{F}$  应为物体受到的合外力，而晶体中电子受到的合外力  $\vec{F} = \vec{F}_{\text{外}} + \vec{F}_l$ ， $\vec{F}_l$  表示晶格场力，但  $\vec{F}_l$  不易测量，把  $\vec{F}_l$  的影响归入电子的有效质量张量  $\vec{m}^*$ ，引入  $\vec{m}^*$  后，BLoch 电子在外场作用下，运动规律形式上遵守牛顿方程，只是把 m 用  $\vec{m}^*$  代替。

$$\vec{v} = \vec{m}^{*-1} \cdot \vec{F}_{\text{外}} \quad \text{在此基础，求解晶体中的电流等问题。}$$

BLoch 电子的运动速度如何表示？

答：  $\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla E_n(\vec{k})$  式中下标 n 为能带指数，即 BLoch 电子的运动速度和  $\vec{k}$  空间能量梯度成正比，方向在等能面法线方向。当等能面为球形时电子的运动速度与波矢的方向相同，当等能面不是球形时电子的运动速度与波矢的方向一般不相同。

什么是 BLoch 电子的准动量，为什么称之为“准”动量？

答：  $\hbar\vec{k}$  称为 BLoch 电子的准动量，因为  $\vec{F}_{\text{外}} = \hbar\dot{\vec{k}}$ ，而  $\hbar\vec{k}$  为自由电子的动量，又与牛顿定律  $\vec{F} = \dot{\vec{p}}$  比较，形式类似， $\hbar\vec{k}$  具有动量的量纲，但牛顿定律  $\vec{F} = \dot{\vec{p}}$  中的  $\vec{F}$  为物体



受到的合外力。而 BLoch 电子还受到晶格场力  $\vec{F}_l$  的作用并未反映在  $\hbar\vec{k}$  中, 所以,  $\hbar\vec{k}$  并未完全表示 BLoch 电子的动量。所以称  $\hbar\vec{k}$  为 BLoch 电子的准动量。

另外, 可证明,  $\hbar\vec{k}$  不是 BLoch 电子动量算符的本征值, 故它不是真实动量, 且  $\left[\hat{H}, \hat{p}\right] \neq 0$  (二算符不对易), 故 Bloch 电子没有确定的动量。

试述晶体中的电子作准经典运动的条件和准经典运动的基本公式。

答: 在实际问题中, 只有当波包的尺寸远大于原胞的尺寸, 才能把晶体中的电子看做准经典粒子。

准经典运动的基本公式有:

晶体电子的准动量为  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ ;

晶体电子的速度为  $\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ ;

晶体电子受到的外力为  $\mathbf{F} = \frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt}$

晶体电子的倒有效质量张量为  $\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}}$ ;

在外加电磁场作用下, 晶体电子的状态变化满足:

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{e}{m^*} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

简述 BLoch 电子的有效质量的重要特征。

答:  $\vec{m}^*$  为二阶张量, 矩阵表示有九个分量, 其值与波矢  $\vec{k}$ 、能带结构有关。

当等能面为球面时  $\vec{m}^*$  才为标量  $m^*$ 。  $m^* = \hbar^2 / \frac{d^2 E}{dk^2}$  与能带结构  $K$  有关。

引入有效质量  $\vec{m}^*$  后  $\frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{m}^{\rightarrow \rightarrow^{-1}} \cdot \vec{F}_{\text{外}}$  与牛顿定律  $\vec{F} m^{-1} = \frac{d\vec{v}}{dt}$  形式上一致, 把不易测量的

$\vec{F}_l$  并入  $\vec{m}^*$  中, 而  $\vec{m}^*$  又可由能带结构求出。一般情况下  $\vec{m}^*$  中的其中三个分量  $m_{xx}^* \neq m_{yy}^* \neq m_{zz}^*$ ,

则使得 BLoch 电子的加速度与外力方向不一致。

什么是 BLoch 电子费米气?

答：把质量视为有效质量 $\vec{m}^*$ ，除碰撞外相互间无相互作用，遵守费米分布的 BLoch 电子的集合称为 BLoch 电子费米气。它与索末菲模型的自由电子费米气的区别在于把晶格场力的影响归入 $\vec{m}^*$ ，但又保留了碰撞模型。

试述有效质量、空穴的意义。引入它们有何用处？

答：有效质量实际上是包含了晶体周期势场作用的电子质量，它的引入使得晶体中电子准经典运动的加速度与外力直接联系起来了，就像经典力学中牛顿第二定律一样，这样便于我们处理外力作用下晶体电子的动力学问题。

当满带顶附近有真空态 $\mathbf{k}$ 时，整个能带中的电流，以及电流在外电磁场作用下的变化，完全如同存在一个带正电荷 $q$ 和具有正质量 $|m^*|$ 、速度 $\mathbf{v}(\mathbf{k})$ 的粒子的情况一样，这样一个假想的粒子称为空穴。空穴的引入使得满带顶附近缺少一些电子的问题和导带底有少数电子的问题十分相似，给我们研究半导体和某些金属的导电性能带来了很大的方便。

试述导体、半导体和绝缘体能带结构的基本特征。

答：在导体中，除去完全充满的一系列能带外，还有只是部分地被电子填充的能带，后者可以起导电作用，称为导带。

在半导体中，由于存在一定的杂质，或由于热激发使导带中存有少数电子，或满带中缺少少数电子，从而导致一定的导电性。

在绝缘体中，电子恰好填满了最低的一系列能带，再高的各带全部都是空的，由于满带不产生电流，所以尽管存在很多电子，并不导电。

半导体和半金属有何异同？

答：相同处： $T \neq 0$  时，从电导率上讲无差别，不同处：从能带结构上讲 半金属(ex: Bi)与金属类似， $T = 0$  时，导带几乎全空，价带几乎全满。半导体与绝缘体类似， $T = 0$  时，导带全空，价带全满，仅为禁带  $E_g$  小些而已。

晶体电阻的起因是什么？

答：广义缺陷与 BLoch 电子的相互作用，即声子、杂质、缺陷对载流子的散射。

## 第六章 金属电子论（本次仅考察名词解释和简答，不考计算与证明）

- a) 熟练掌握金属自由电子的模型和基态性质：金属电子气的能量状态，费米能与费米波矢，态密度；
- b) 了解金属自由电子的热性质，电子气的内能与热容；
- c) 熟练掌握并理解其物理过程：电子在外加电磁场中的运动、漂移速度方程、霍耳效应、欧姆定理与霍尔效应、电子气的热导率。

### 名词解释：

接触电势差：任意两种不同的物质 A、B 接触时产生电荷转移，并分别在 A 和 B 上产生电势  $V_A$ 、 $V_B$ ，这种电势称为接触电势，其差称为接触电势差。

功函数：晶体中电子逸出金属所需克服的势垒，数值上等于电子所处势阱深度  $E_0$  与费米能  $E_F$  之差。

### 简答题：

你是如何理解绝对零度时和常温下电子的平均动能十分相近这一点的？

答：自由电子论只考虑电子的动能。在绝对零度时，金属中的自由(价)电子，分布在费密能级及其以下的能级上，即分布在一个费密球内。在常温下，费密球内部离费密面远的状态全被电子占据，这些电子从格波获取的能量不足以使其跃迁到费密面附近或以外的空状态上，能够发生能态跃迁的仅是费密面附近的少数电子，而绝大多数电子的能态不会改变。也就是说，常温下电子的平均动能与绝对零度时的平均动能一定十分相近。

为什么价电子的浓度越高，电导率越高？

答：电导  $\sigma$  是金属通流能力的量度。通流能力取决于单位时间内通过截面积的电子数但并不是所有价电子对导电都有贡献，对导电有贡献的是费密面附近的电子。费密球越大，对导电有贡献的电子数目就越多。费密球的大小取决于费密半径  $k_F = (3n\pi^2)^{1/3}$ 。

可见电子浓度  $n$  越高，费密球越大，对导电有贡献的电子数目就越多，该金属的电导率就越高。

金属自由电子论作了哪些假设？得到了哪些结果？

答：金属自由电子论假设金属中的价电子在一个平均势场中彼此独立，如同理想气体中的粒子一样是“自由”的，每个电子的运动由薛定谔方程来描述；电子满足泡利不相容原理，因此，电子不服从经典统计而服从量子的费米-狄拉克统计。根据这个理论，不仅导出了魏德曼-弗兰兹定律，而且得出电子气对晶体比热容的贡献是很小的。

金属自由电子论在 $k$ 空间的等能面和费米面是何形状？费米能量与哪些因素有关？

答：金属自由电子论在 $k$ 空间的等能面和费米面都是球形。费米能量与电子密度和温度有关。

在低温度下电子比热容比经典理论给出的结果小得多，为什么？

答：因为在低温时，大多数电子的能量远低于费米能，由于受泡利原理的限制基本上不能参与热激发，而只有在费米面附近的电子才能被激发从而对比热容有贡献。

弛豫时间的物理意义是什么？它与哪些因素有关？

答：弛豫时间的物理意义是指电子在两次碰撞之间的平均自由时间，它的引入是用来描写晶格对电子漂移运动的阻碍能力的。弛豫时间的大小与温度、电子质量、电子浓度、电子所带电量及金属的电导率有关。

当2块金属接触时，为什么会产生接触电势差？

答：由于2块金属中的电子气系统的费米能级高低不同而使热电子发射的逸出功不同，所以这2块金属接触时，会产生接触电势差。

如何理解绝对零度时和常温下电子的平均动能十分相近？

答：自由电子论只考虑电子的动能。在绝对零度时，金属中的自由(价)电子，分布在费密能级及其以下的能级上，即分布在一个费密球内。在常温下，费密球内部离费密面远的状态全被电子占据，这些电子从格波获取的能量不足以使其跃迁到费密面附近或以外的空状态上，能够发生能态跃迁的仅是费密面附近的少数电子，而绝大多数电子的能态不会改变。也就是说，常温下电子的平均动能与绝对零度时的平均动能一定十分相近。

特鲁德模型及其成功与不足之处有哪些？

答：特鲁德模型假设：(1)价电子构成“自由电子气”，无规则热运动与原子实碰撞，满足经典的玻尔兹曼分布；

(2) 两次碰撞间，电子不受力的作用，电子能量只有动能；

(3) 电子与原子实的碰撞过程用平均自由程  $l$  和平均自由时间  $\tau$  等自由气体热运动的术语表征。

成功之处：较好地解释了金属的导电、热导现象。

不足：(1)忽略了原子实周期势场和电子间的相互作用。

(2) 不能正确解释金属的比热。

特鲁德模型的“自由电子气”与无限大真空中自由电子能量有何异同？

答：相同之处：均设势场  $V(\vec{r})=0$  则  $E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

不同之处：特鲁德模型中的自由电子气，除假设的与原子实碰撞外，还要受到边界的反射，由周期边界条件  $k$  不连续。

索末菲的“自由电子费米气”模型与特鲁德模型的异同。

答：相同之处：(1)  $V(\vec{r})=\text{const}$  (可假设为零)

(2) 碰撞图象

(3) 在晶体边界均碰撞(散射)

(4) 满足周期边界条件。

不同之处：索末菲模型 (1) 求解薛定谔方程，而不是牛顿方程；

(2) 电子满足费米-狄拉克分布，而不是经典的玻氏分布；

(3) 满足泡利不相容原理。

费米分布函数的表示式和物理意义是什么？

答：若能量为  $E$  的状态是电子可以占据的状态，则在热平衡条件下，电子占据该状态的几率：

$$f(E,T) = \frac{1}{e^{(E-E_f)/k_B T} + 1}$$

式中  $E_f$  称为费米能级， $E=E_f$  时， $f=\frac{1}{2}$  所以  $E_f$  是标志电子在能级

上填充水平的重要参量。

为什么温度升高，费密能反而降低？

答：当  $T \neq 0$  时，有一半量子态被电子所占据的能级即是费密能级。温度升高，费密面附近的电子从格波获取的能量就越大，跃迁到费密面以外的电子就越多，原来有一半量子态被电子所占据的能级上的电子就少于一半，有一半量子态被电子所占据的能级必定降低。也就是说，温度升高，费密能反而降低。

电子密度分布的意义是什么？

答：温度  $T$  时，能量  $E$  附近单位能量间隔的电子数。

$$\rho(E, T) = D(E)f(E, T) \quad \text{系统中电子总数} \quad N = \int_0^{\infty} D(E)f(E, T)dE$$

简述无限大真空自由电子，晶体中特鲁德模型，索末菲模型，近自由电子模型的关系。

答：无限大空间 (1)  $\xrightarrow{\text{周期性边界条件}}$  (2)  $\xrightarrow{\substack{S\text{-方程} \\ \text{泡利不相容} \\ \text{费米分布}}}$  (3)  $\xrightarrow{\text{周期势场微扰}}$  (4)

$K$  为连续  $\xrightarrow{\text{自由电子气}} K$  取分离值  $\xrightarrow{\text{自由电子费米气}} \xrightarrow{\text{近自由电子}}$