1. 倒格子和布里渊区
2. 回旋共振和德哈斯—范阿尔芬效应
3. 解释声学支和光学支格波的物理本质
4. 密堆积和配位数（知道各种配位数）

［答］在点阵中，和一个粒子最近邻的粒子数目，称为配位数；它反映晶体中粒子排列的紧密程度。

如果晶体由全同的一种粒子组成，并把粒子视为小圆球，则这些小圆球的最紧密的堆积称为密堆积。

1. 晶体结合基本方式
2. 热传导、热膨胀和非谐效应相关
3. sc,fcc,bcc 倒格子（写结果）
4. 爱因斯坦模型、德拜模型
5. 各种不同情况的第一布里渊区情况
6. 共价结合为什么有“饱和性”和“方向性”？

[答] “饱和性”是指共价结合时一个原子只能形成一定数目的共价键，因此依靠共价键只能和一定数目的其它原子相结合。共价键的数目取决于原子未配对的电子数。

共价结合时，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。这就是共价键的“方向性”。

1. 证明两种一价离子组成的一维晶格的马德龙常数为 *α=2ln2*。

[证明] 相距为rij的两个离子的互作用势能可表示成



设最近邻原子间的距离为R，则有rij=ajR,

则总的离子间的互作用势能为



其中



为离子晶体的马德龙常数， 式中的正、负号分别对应于与参考离子相异和相同的离子。

任选一离子作为参考离子，在求和中对负离子取正号，对正离子取负号，考虑到对一维离子链，参考离子两边的离子是正负对称分布的，则有



利用下面的展开式

并令x=1,得



于是，一维离子链的马德龙常数为α＝2ln2 .

1. 晶格比热、电子比热
2. 非简谐效应

当考虑到原子的相互作用势中的δ3以上的高次项时出现的种种效应叫非简谐效应。这时格波之间可以有相互作用，声子之间也可以交换能量。非简谐项的存在是晶格振动达到热平衡的最主要的原因，只有考虑到非简谐项的存在也才能解释晶体的热膨胀和热传导等现象。

1. 能态密度函数是如何定义的？

［答］能态密度函数是指单位能量间隔的状态数。考虑能量在 E—E＋ΔE 间的能态数目，假定ΔZ表示能态数目，则能态密度函数定义为



在波矢空间，根据 E(k)＝常数 作出等能面，则在等能面E和E＋ΔE之间的状态的数目就是ΔZ。所以

ΔZ＝［V／（2π）3］（两等能面E—E+ΔE之间的体积）

得到能态密度的一般表达式为



1. 能带顶、能带底有效质量算法
2. 



1. 肖特基缺陷和弗仑克尔缺陷

弗仑克尔缺陷――若晶体中的空位与填隙原子的数目相等，这样的热缺陷称为弗仑克尔缺陷（Frenkel defect）。

肖特基缺陷――仅由空位构成的缺陷称之为肖特基缺陷（Schottky defect）。